

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ADAPTAÇÃO VIA MOVIMENTO DE MALHAS EM
ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS

por

Gustavo Bono

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Março de 2004

ADAPTAÇÃO VIA MOVIMENTO DE MALHAS EM
ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS

por

Gustavo Bono

Engenheiro Mecânico Aeronáutico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

Aprovada por:

Prof. Dr. Paulo R. F. Teixeira

Profa. Dra. Adriane P. Petry

Prof. Dr. Horácio A. Vielmo

Prof. Dr. Jun S. O. Fonseca
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 23 de Março de 2004.

Dedico este trabalho às minhas irmãs,
Andrea, Cecília e Alejandra,
à minha namorada Giuliana,
e em especial à minha mãe Mirta.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Armando Miguel Awruch, pela dedicação, apoio e, sobretudo, pelos valiosos conhecimentos transmitidos.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFRGS, pela atenção recebida e pelos ensinamentos transmitidos.

Aos colegas de Pós-Graduação e em especial a todos que fazem parte do laboratório CEMACOM, pela agradável convivência proporcionada.

À minha mãe e minhas três irmãs, pela dedicação em todos os momentos de minha vida, sempre me apoiando, dando segurança e incentivo para conquistar meus sonhos.

De forma especial, a minha namorada pelo apoio, companheirismo e amor na etapa final deste trabalho.

Ao Centro Nacional de Supercomputação da UFRGS, que possibilitou a realização de parte deste trabalho.

À CAPES, pela concessão da bolsa de estudos, possibilitando a minha total dedicação a este trabalho.

Ao Brasil, pelo caloroso acolhimento do seu povo e possibilidade de aprofundar meus estudos.

RESUMO

Apresenta-se, neste trabalho, uma técnica adaptativa de elementos finitos baseada somente no movimento de nós, preservando a conectividade original dos elementos. São apresentadas aplicações para simular escoamentos compressíveis com ondas de choque.

Este método é caracterizado por uma estimativa de erro medida nas arestas dos elementos, e a métrica de Riemann é definida usando o tensor Hessiano, que contém derivadas segunda das variáveis relevantes.

Os nós são movimentados mantendo, tanto quanto é possível, a suavidade da malha e ortogonalidade local. O controle da malha realiza-se usando um método de otimização não linear, onde a função objetivo a ser minimizada contém termos da medidas suavidade da malha, ortogonalidade local e controle de volume da célula.

O sistema de equações diferenciais parciais é resolvido usando o método de elementos finitos, empregando uma série de Taylor e o clássico método de Bubnov-Galerkin para a discretização do tempo e do espaço, respectivamente.

Emprega-se um elemento isoparamétrico hexaédrico de oito nós e as correspondentes matrizes do elemento são obtidas analiticamente empregando a integração numérica reduzida.

Um algoritmo de movimento de malha é incluído no contexto da descrição Arbitrária Lagrangeana-Euleriana (ALE).

Finalmente, exemplos em duas e três dimensões para escoamentos transônicos e supersônicos são analisados e os resultados são comparados com os obtidos por outros autores.

ABSTRACT

An adaptative finite element mesh technique based only in nodes motion, preserving the original element connectivity, is described in this work. Applications to simulate high compressible flows with strong shocks are also presented.

This method is characterized by an edge-based error estimate, and the Riemannian metric is defined using the Hessian tensor, which contains second derivatives of a relevant variable.

The nodes are moved keeping, as much as possible, mesh smoothness and local orthogonality. The mesh control is performed using a non-linear optimization method, where the objective function to be minimized contains terms to measure grid smoothness, local orthogonality and cell volume control.

The system of partial differential equations is solved using the finite element method, employing a Taylor series and the classical Bubnov-Galerkin methods for time and space discretization, respectively.

An isoparametric eight node hexahedral element is used and the corresponding element matrices are obtained analytically employing reduced numerical integration.

A mesh movement algorithm is included in the context of the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) description.

Examples for two and three-dimensional transonic and supersonic flows are investigated and results are compared with those obtained by other authors.

RESUMEN

Se presenta en este trabajo, una técnica adaptativa de elementos finitos basada solamente en el movimiento de nodos, preservando la conectividad original de los elementos. Son presentadas aplicaciones para simular fluidos compresibles con ondas de choque.

Este método es caracterizado por una estimativa de error medida en las aristas de los elementos y la métrica de Riemann es definida usando el tensor Hessiano, que contiene derivadas segunda de las variables relevantes.

Los nodos son movidos manteniendo, tanto como es posible, la suavidad de la malla y la ortogonalidad local. El control de la malla se realiza usando un método de optimización no lineal, donde la función objetivo a ser minimizada contiene términos de las medidas de suavidad de la malla, ortogonalidad local y control de volumen de la célula.

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales es resuelto usando el método de elementos finitos, empleando una serie de Taylor y el clásico método de Bubnov-Galerkin para la discretización del tiempo y del espacio, respectivamente.

Se emplea un elemento isoparamétrico hexaédrico de ocho nodos y las correspondientes matrices del elemento son obtenidas analíticamente empleando integración numérica reducida.

Un algoritmo de movimiento de malla es incluido en el contexto de la descripción Arbitraria Lagrangeana-Euleriana (ALE).

Finalmente, ejemplos en dos y tres dimensiones para fluidos transónicos e supersónicos son analizados y los resultados son comparados con los obtenidos por otros autores.

ÍNDICE

1. Introdução	1
1.1. Os Métodos Adaptativos	1
1.2. Estratégias dos Métodos Adaptativos	2
1.2.1. Método h	2
1.2.2. Método r	3
1.2.3. Método p	4
1.2.4. Métodos híbridos	4
1.3. A Dinâmica dos Fluidos Computacional em Escoamentos Compressíveis	4
1.4. Objetivos e Conteúdo do Trabalho	7
2. Adaptação de Malhas Via Movimento de Nós	8
2.1. Vantagens do Método Adaptativo Via Movimento de Nós	8
2.2. Revisão dos Métodos Adaptativos	9
2.2.1. Método Baseado na Minimização ou Equidistribuição da Integral da Medida de Erro	10
2.2.2. Método Baseado na Atração e Repulsão de Pseudoforças entre Nós	12
3. Equações que Governam o Escoamento de Fluidos	14
3.1. Introdução	14
3.2. Equações Governantes	14
3.2.1. Equações de Conservação	14
3.2.2. Equações Constitutivas	15
3.3. Equações de Navier-Stokes e de Conservação de Massa e de Energia	15
3.4. Equações de Euler e de Conservação de Massa e de Energia	16
3.5. Equações Complementares	16
3.5.1. Equação de Estado	16
3.5.2. Lei de Viscosidade de Sutherland	17
3.6. Adimensionalização das Equações	18
3.7. Forma Vetorial Compacta das Equações de Conservação	20
4. O Modelo Numérico de Taylor-Galerkin	23
4.1. Introdução	23
4.2. Discretização Temporal das Equações: Série de Taylor	23

4.3. Discretização Espacial das Equações: Aplicação do Método de Galerkin	28
4.3.1. Modelo numérico para escoamentos não difusivos	30
4.3.2. Modelo numérico para escoamentos difusivos	33
4.4. Viscosidade Artificial e Estabilidade Numérica	36
4.4.1. Esquema de difusividade artificial	36
4.4.2. Condição de estabilidade	38
5. Integração Explícita das Matrizes de Elemento	39
5.1. Elemento Isoparamétrico Hexaédrico de Oito Nós	39
5.2. Transformação do Domínio de Integração	41
5.3. Integração Analítica das Matrizes de Elemento	43
5.4. Tratamento das Integrais de Contorno	49
6. A Formulação Lagrangeana-Euleriana Arbitraria	52
6.1. Introdução	52
6.2. Equações Modificadas	54
6.3. Modelo Numérico	55
7. Método de Adaptação de Malha Via Movimentos de Nós	56
7.1. Introdução	56
7.2. Análise	57
7.3. Método de Gradiente Conjugado	63
7.4. Determinação da Função de Peso ou de Monitoração	67
7.4.1. Estimativa do erro	69
8. Características Gerais do Código	75
8.1. Introdução	75
8.2. Convergência do Processo Iterativo	75
8.3. Resíduo e Estado Estacionário	76
8.4. Condições de Contorno Sólido para Fluidos Não Viscosos	76
8.5. Condições de Contorno Sólido para Fluidos Viscosos	77
8.6. Aplicação do Método Adaptativo	78
9. Exemplos de Aplicação	80
9.1. Análise de um domínio quadrado com uma função de monitoração analítica	80
9.2. Escoamento em um canal com um obstáculo em forma de rampa	82
9.3. Escoamento em um canal com um obstáculo em forma de degrau	89
9.4. Escoamento sobre um aerofólio	94
9.5. Escoamento ao redor de uma esfera	100

9.6. Escoamento ao redor de um cone	106
10. Conclusões e Sugestões	112
10.1. Conclusões	112
10.2. Sugestões para Trabalhos Futuros.....	113
Referências Bibliográficas	114
Anexo A	123

Lista de Símbolos

Letras Romanas Maiúsculas

$[B]_i$	Matrizes de condução
$[C]_i$	Matrizes de condução de segunda ordem
C_{AF}	Coefficiente de amortecimento fictício
C_e	Número de Courant-Friedrichs-Lewy
$[D]_{ij}$	Matrizes de difusão – Equação de Quantidade de Movimento
$[E]_i$	Matrizes de difusão – Equação de Energia
$[E^*]_i$	Matrizes de difusão adicionais – Termos iterativos
F	Função objetivo global
F_i	Vetor de variáveis de fluxo
G_i	Vetor de termos difusivos e de condutibilidade térmica
H	Matriz Hessiana
\bar{H}	Matriz Hessiana modificada
I	Funcional da função custo total
I_S	Integral da medida de suavidade da malha
I_O	Integral da medida de ortogonalidade da malha
I_V	Integral da medida do volume de controle da malha
J	Matriz jacobiana
J^{-1}	Matriz inversa da matriz jacobiana
\bar{J}	Matriz adjunta da matriz jacobiana
K	Traço da matriz de coeficientes de condutibilidade térmica
K_{ij}	Componentes da matriz de coeficientes de condutibilidade térmica
$[K]$	Matriz de condutibilidade térmica
L_{ref}	Comprimento de referência
M	Número de Mach
$[M]$	Matriz de massa
$[M_D]$	Matriz de massa discreta

<i>ORT</i>	Medida de ortogonalidade local da malha
\mathbf{P}_i	Vetor de termos de pressão
<i>Pr</i>	Número de Prandtl
<i>Q</i>	Fonte ou sumidouro – Equação de energia
\mathbf{R}	Resíduo no método de Galerkin
<i>Re</i>	Número de Reynolds
<i>SM</i>	Medida de suavidade local da malha
<i>T</i>	Temperatura
\mathbf{U}	Vetor de variáveis de campo
V_{ref}	Velocidade de referência
<i>VOC</i>	Medida de volume de controle local da malha

Letras Romanas Minúsculas

<i>a</i>	Velocidade do som
a_{ref}	Velocidade do som na corrente-livre não perturbada
a_i	Coordenadas materiais
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
<i>e</i>	Energia total específica
b_j	Componentes da resultante das forças de volume
$\{\mathbf{f}_j\}$	Vetor equivalente às ações superficiais devidas à difusão
$\{\mathbf{g}\}$	Vetor equivalente às ações superficiais devidas à condução
<i>n</i>	Componente da direção normal
<i>p</i>	Pressão
\hat{q}	Fluxo de calor
$\{\mathbf{q}\}$	Vetor equivalente às ações superficiais devidas à difusão
<i>t</i>	Tempo
<i>u</i>	Energia interna específica
v_i	Componentes de velocidade
w_i	Componentes de velocidade de malha
x_i	Coordenadas espaciais

Letras Gregas Maiúsculas

Φ_N	Funções de interpolação
$[\Phi]$	Matriz linha de funções de interpolação
$[\Phi^*]$	Matriz linha de funções de interpolação avaliadas no contorno
Γ	Domínio superficial – contorno
Ω	Domínio volumétrico

Letras Gregas Minúsculas

α	Parâmetro de ponderação da suavidade e ortogonalidade da malha
β	Parâmetro de ponderação do volume de controle da malha
δ	Coefficiente de segurança do incremento de tempo crítico
δ_{ij}	Delta de Kronecker - Componentes do tensor de Kronecker
γ	Relação entre os calores específicos - Constante do gás
λ	Coefficiente de viscosidade volumétrica
μ	Coefficiente de viscosidade absoluta
θ	Coefficiente de ponderação
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
ζ_i	Componentes do vetor posição na descrição ALE ou coordenadas mistas

Índice de Figuras

Figura	TÍTULO	Pág.
5.1	Espaço computacional e físico do elemento isoparamétrico de 8 nós	39
6.1	Relações cinemáticas na descrição ALE	52
7.1	Mapeamento entre o espaço físico e o espaço computacional	58
7.2	Célula <i>tipo</i> definida para o caso bidimensional	60
7.3	Célula <i>tipo</i> definida para o caso tridimensional	63
7.4	Direções conjugadas para uma equação quadrática de 2 variáveis	65
7.5	Aproximação do erro no caso unidimensional	71
7.6	Transformação $\mathcal{S}(\alpha)$ no caso bidimensional	73
8.1	Componentes de velocidade nos contornos sólidos	77
9.1	Campo de variação da função $f(x,y)$	80
9.2	Variação da malha em função do parâmetro α com $\beta = 1,0$. Caso (A): $\alpha = 0,0$ e caso (B): $\alpha = 0,50$	81
9.3	Esquema do escoamento supersônico sobre uma rampa	82
9.4	Evolução da malha para alguns ciclos. Malha (A) ou malha inicial, malha (C) depois de duas adaptações, malha (E) depois de quatro adaptações e malha (I) ou malha final, depois de oito adaptações	84
9.5	Distribuição do número de Mach para a malha inicial (Malha A) e a malha final (Malha I)	84
9.6	Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0,60$ e $0,0 \leq x \leq 1,20$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha I)	85
9.7	Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0,60$ e $0,0 \leq x \leq 1,20$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha I)	85
9.8	Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0,50$, depois de 5 adaptações, segundo Ait-Ali-Yahia <i>et al.</i> [1996]	86
9.9	Malha obtida sem controle de ortogonalidade e suavização	87
9.10	Malha final e distribuição da massa específica, segundo Oden <i>et al.</i> , [1986] para o caso da rampa com inclinação de 20°	87
9.11	Ampliação de uma zona da malha final (Malha I)	88
9.12	Resíduo para o problema da rampa	88
9.13	Esquema do escoamento supersônico sobre um degrau	89

9.14	Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)	90
9.15	Malha final de elementos finitos, Malha (L)	90
9.16	Distribuição do número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (L)	91
9.17	Distribuição da massa específica para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (L)	91
9.18	Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0.40$ e $-0.50 \leq x \leq 0.50$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha L)	92
9.19	Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0.40$ e $-0.50 \leq x \leq 0.50$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha L)	92
9.20	Distribuição de massa específica em $t = 4.0$, segundo Löhner <i>et al.</i> [1985]	93
9.21	Distribuição de massa específica e malha final em $t = 4.0$, segundo Hansbo <i>et al.</i> [1991]	93
9.22	Ampliações de zonas na malha final (Malha L)	94
9.23	Esquema do escoamento transônico sobre o aerofólio	95
9.24	Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)	96
9.25	Detalhe da malha final (Malha E)	96
9.26	Distribuição do número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (E)	97
9.27	Distribuição da massa específica para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (E)	97
9.28	Distribuição do número de Mach, segundo Baumann <i>et al.</i> [1992]	98
9.29	Malha sem adaptação e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]	98
9.30	Malha com refinamento e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]	99
9.31	Malha com redistribuição de nós e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]	99
9.32	Esquema do escoamento supersônico sobre meia esfera	100
9.33	Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)	101
9.34	Malha final sobre a esfera, Malha (E)	102
9.35	Distribuição de número de Mach para a malha final, Malha (E)	102

9.36	Distribuição de número de Mach, segundo Molina e Huot [1992]	103
9.37	Distribuição de erro e malha final (Malha E) em um dos planos de simetria	104
9.38	Distribuição de número de Mach para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha E)	104
9.39	Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0.30$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha E)	105
9.40	Resíduo para o problema da esfera	105
9.41	Esquema do escoamento supersônico sobre um cone	106
9.42	Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)	107
9.43	Malha final de elementos finitos, Malha (D)	108
9.44	Detalhe da malha final (Malha D)	108
9.45	Distribuição da pressão para a malha final, Malha (D)	109
9.46	Distribuição da pressão, segundo Cebral e Löhner	109
9.47	Distribuição de número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (D), no plano yz	110
9.48	Distribuição de número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (D), no plano xy	110
9.49	Resíduo para o problema do cone	111

Índice de Tabelas

Tabela	TÍTULO	Pág.
7.1	Fluxograma do método de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves	67
8.1	Fluxograma do método de adaptação incorporado no MEF	79

Introdução

1.1 Os Métodos Adaptativos

Os métodos de *adaptação de malha* têm importante aplicabilidade em vários problemas físicos nas diversas áreas da engenharia, tais como na mecânica dos sólidos, a dinâmica dos fluidos, combustão, transferência de calor e massa, ciência dos materiais, etc.. Os fenômenos físicos nestas áreas desenvolvem algumas singularidades em determinadas regiões localizadas, podendo-se citar como exemplos: ondas de choques, camada limite, ondas de detonação, etc.. Entre os casos típicos de aplicação em algumas áreas de engenharia tem-se: o escoamento reativo em um cilindro de motor, escoamento ao redor de um aerofólio ou corpo em movimento na dinâmica dos fluidos, e crescimento de cristais ou mudança de fases na fabricação de semicondutores, entre outros.

A investigação numérica destes problemas físicos pode levar à necessidade de utilização de malhas extremamente refinadas para solucionar problemas de grandes variações de algumas variáveis localizadas em pequenas regiões do domínio físico. A complexidade da solução deste tipo de problema está no fato de que, inicialmente, se desconhece onde estas regiões estão situadas.

Os métodos *adaptativos* na mecânica computacional são geralmente baseados em uma idéia simples: quando o erro na solução é muito grande, o tipo de aproximação (tamanho de malha, localização dos nós, ordem de aproximação, etc.) deve ser mudado com a finalidade de diminuir o erro.

Apesar da implementação da *adaptação* se basear, principalmente, em métodos convencionais, esta ainda tem muitas coisas a definir, como por exemplo: a idéia de tentar reduzir o erro implica que este é conhecido ou pode estimar-se de alguma maneira. Portanto, o primeiro passo em adaptação é gerar uma medida da *qualidade* da solução, e esta medida pode

variar desde examinar *ad hoc* o gradiente da solução, até uma estimativa rigorosa do erro *a posteriori*.

A partir do momento que tem-se a estimativa do erro, necessita-se determinar como fazer para reduzir sistematicamente este erro até o nível desejado. Em geral se pode adotar diferentes estratégias [Oden *et al.*, 1990b], das quais as principais são:

- refinar o tamanho da malha (método de adaptação h);
- incrementar a densidade de nós na malha por realocação dos mesmos (método de adaptação r);
- incrementar localmente a ordem da aproximação (método de adaptação p);
- ou uma combinação destas técnicas (ex.: método de adaptação $h-p$).

Cada uma destas técnicas requer demandas específicas no problema computacional.

Podemos ressaltar que uma boa implementação da estratégia de adaptação pode levar a um considerável aumento na exatidão da aproximação numérica e também a uma diminuição no custo computacional [Li *et al.*, 2002].

1.2 Estratégias dos Métodos Adaptativos

Neste item, detalha-se as diferentes estratégias usadas nos vários métodos adaptativos e as principais vantagens e desvantagens de cada um deles.

1.2.1 Método h

Este método envolve *refinamento* do tamanho da malha, adicionando nós localmente em regiões onde certos indicadores de erro são maiores. O processo de refinamento pode basear-se [George, 1991] em:

- um refinamento local ao redor de alguns pontos;
- ou um refinamento por partição de um elemento (biseção, triseção, etc.).

Este método se implementa facilmente no caso bidimensional, porém, surgem dificuldades para a concepção e implementação nos casos tridimensionais. São métodos robustos que

permitem, por exemplo, atacar várias frentes de ondas ao mesmo tempo em problemas de Mecânica dos Fluidos Computacional. Além da necessidade de interpolação entre a malha antiga e a nova malha, estes métodos possuem a desvantagem de aparecem dispersões numéricas quando equações diferenciais parciais hiperbólicas (como as equações de Euler) são aproximadas numericamente [Zegeling, 1999].

A geração de novos nós faz com que toda a estrutura de dados (número de nós, conectividade, etc.) seja modificada e o tratamento das condições internas entre as regiões refinadas e as não refinadas seja feita com cuidado. [Eiseman, 1987]. Sua utilização em problemas não estacionários torna-se custosa, apesar do desrefinamento (remoção de um ou vários nós) solucionar isto. Para mais detalhes do método ver os trabalhos de Oden [Oden *et al.*, 1986, 1987] e Zegeling [1999], entre outros autores.

1.2.2 Método *r*

Neste método se *realoca* continua e automaticamente os vértices (ou nós) dos elementos no domínio espaço-tempo de maneira a ter uma densidade da malha maior nas regiões de grandes gradientes, enquanto a malha retém a estrutura regular, tornando o processo computacional mais simples.

Em décadas passadas, este método foi um dos menos populares na comunidade de elementos finitos [Cao *et al.*, 1999], devido principalmente ao fato de não existir um procedimento seguro, eficaz e geral para a obtenção do movimento da malha. Não obstante, o método *r* tem características diferentes dos outros métodos de adaptação, por exemplo, a malha pode mudar continuamente (problemas não estacionários) e, principalmente, possui uma estrutura de dados simples, sendo facilmente implementado.

O método usa uma quantidade fixa de números de elementos e nós, portanto a exatidão aumenta nas regiões onde existem as concentrações de nós, diminuindo nas outras regiões. Entretanto, a diminuição desta exatidão em algumas regiões é insignificante devido aos maiores erros estarem concentrados nas regiões onde foram feitos os refinamentos [Eiseman, 1987]. Também, o número fixo de nós pode originar problemas quando se tem várias frentes com descontinuidades em diferentes regiões do domínio espacial.

Esta classe de métodos é geralmente projetada para reduzir alguma medida de erro (L^2 , etc.) no resíduo, ou equidistribuindo o mesmo [Diaz *et al.*, 1983], mantendo a ortogonalidade e *suavidade* da malha.

1.2.3 Método p

Este método leva em consideração o grau do polinômio usado na aproximação de elementos finitos de cada elemento. A idéia é incrementar a ordem de aproximação nos elementos com maior erro mantendo o tamanho da malha.

Este método foi extensamente desenvolvido em mecânica dos sólidos por alguns pesquisadores [Szabó *et al.*, 1976; Kikuchi, 1986]. No caso de mecânica dos fluidos foi aplicado pela primeira vez nas equações de Navier-Stokes por Demkowicz *et al.* [1985].

1.2.4 Método híbridos

Geralmente, técnicas mais eficientes envolvem uma combinação de estratégias h e r ou h e p . Entretanto, a manipulação da estrutura de dados é bastante complexa em alguns métodos adaptativos híbridos [Demkowicz *et al.*, 1989].

A estratégia adaptativa $h-r$ [Arney *et al.*, 1990; Jens *et al.*, 2003] é considerada primariamente como uma técnica de pré-processamento, onde os nós são posicionados numa malha inicial, de maneira a ficar alinhados com as características específicas do escoamento, tais como: onda de choque, camada limite, singularidades, etc.. Portanto, superpondo a um esquema r o esquema h , aproveita-se a vantagem de reduzir a dispersão de erro do método r com a vantagem de resolver estruturas de pequenas escala pelo método h . Além disso, evita-se um refinamento excessivo. E acontece o mesmo com o método $h-p$ [Oden *et al.*, 1989, 1990a e 1994; Patra *et al.*, 1997; Rachowicz *et al.*, 1997] que é o mais utilizado dos esquemas híbridos.

1.3 A Dinâmica dos Fluidos Computacional em Escoamentos Compressíveis

Nas últimas décadas, muitos esforços foram dedicados a desenvolver técnicas eficientes e precisas de solução numérica das equações governantes de várias áreas de engenharia, entre as quais destacam-se a Dinâmica dos Fluidos Computacional, DFC.

Apesar dos Métodos das Diferenças Finitas, MDF, e dos Volumes Finitos, MVF serem muito usados na dinâmica dos fluidos, destaca-se o Método dos Elementos Finitos, MEF, como um dos mais usados. Inicialmente, foi criado na década de 50 para o cálculo de problemas estruturais [Turner *et al.*, 1956; Clough, 1960]. Na década de 70, a partir dos resultados teóricos de problemas mistos [Babuška, 1973; Brezzi, 1974], passou a ter uma ampla utilização na mecânica dos fluidos.

Apenas a alguns anos atrás, utilizou-se o MEF para a solução de problemas de escoamentos de fluidos compressíveis a alta velocidade (advectivos-dominantes). Isto se deve, à extensão do método de alta ordem do tipo Lax-Wendroff [Lax e Wendroff, 1960] aplicado em diferenças finitas. A partir desta expansão, surgiram os métodos de *Taylor-Galerkin* [Donea, 1984; Zienkiewicz *et al.*, 1984; Löhner *et al.*, 1984] e de *Galerkin* com linhas características [Löhner *et al.*, 1985; Zienkiewicz e Taylor, 1991]. Finalizando, deve destacar-se também o método SUPG (do inglês, *Streamline Upwind Petrov-Galerkin Method*), introduzido por Hughes [1986a].

Geralmente, o MEF é obtido após a aplicação do método dos resíduos ponderados de *Galerkin* ou da forma variacional fraca das equações governantes. Esta formulação é equivalente ao Princípio dos Trabalhos Virtuais na Mecânica dos Sólidos e sua solução equivale à da forma forte [Hughes, 1987a]. A aplicação da técnica de *Galerkin* standard, ou também chamada de *Bubnov-Galerkin* gera aproximações centrais para os operadores diferenciais (equivalente às diferenças centrais em diferenças finitas). Quando os termos advectivos são dominantes em relação aos termos difusivos ou viscosos, os esquemas do tipo diferenças centrais são afetados por oscilações espúrias, as quais, por serem esquemas não dissipativos [Maliska, 1995], invalidam a solução de elementos finitos.

Para eliminar as oscilações espúrias das componentes de velocidade, começou-se a empregar os esquemas de tipo *upwind* (a montante) aplicados aos termos advectivos, onde a informação que está a montante é tratada de forma preferencial em relação à informação que está a jusante do ponto considerado, ou seja, basicamente um elemento a montante de outro elemento é ponderado mais fortemente do que um elemento a jusante desse elemento [Brooks e Hughes, 1982a].

Inicialmente, dentro destes esquemas foi introduzido o esquema conhecido como formulação de *Petrov-Galerkin* [Christie e Griffiths, 1976], o qual mostrou-se adequado à resolução de problemas unidimensionais, através da introdução das funções de interpolação

modificadas. Mas sua extensão a problemas multidimensionais não foi satisfatória. São chamados de *Petrov-Galerkin* [Hughes, 1987b] os métodos que usam uma ponderação diferente do método de *Galerkin* standard.

Finalmente, o método estabilizado de elementos finitos mais conhecido, é o método *SUPG*, introduzido por Brooks e Hughes [1982a; 1982b], onde um termo de difusão artificial que atua apenas na direção da linha de corrente é adicionado para aumentar o controle sobre o termo advectivo-difusivo das equações de Euler e Navier-Stokes [Hughes *et al.*, 1986a e Hughes e Mallet, 1986b].

O método de *Taylor-Galerkin* é uma alternativa aos esquemas *upwind* e basicamente consiste em uma expansão em séries de Taylor no tempo e posteriormente é aplicada uma discretização através do método de *Galerkin* standard sobre o domínio espacial [Youn and Park, 1995]. Esta formulação tem-se mostrado satisfatória na simulação de escoamentos altamente compressíveis, mas os resultados decaem na sua qualidade a medida que o grau de compressibilidade diminui.

O presente trabalho usa o método de *Taylor-Galerkin* para a solução das equações que governam os escoamentos compressíveis.

Uma descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitrária, ALE (do inglês, *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*) é utilizada para permitir a solução de problemas que envolvem movimentos relativos de malha. Originalmente, o método foi empregado em problemas que envolvem grandes movimentos relativos entre corpos e superfícies, ou seja, problemas de interação fluido-estrutura [Hughes *et al.*, 1981]. Esta descrição, que é mais geral, possui as propriedades das descrições Lagrangeana e Euleriana [Donea *et al.*, 1982]. A descrição Euleriana permite que o meio tenha grandes distorções, no entanto, não consegue identificar os contornos móveis. Enquanto que na descrição Lagrangeana, os contornos e interfaces são precisamente identificados, porém, não são adequados para meios com grandes distorções como acontece no caso de escoamento de fluidos. Portanto, para contornar as dificuldades do movimento relativo de malha em regiões de grandes variações das variáveis, utiliza-se a formulação ALE.

Algumas aplicações do MEF na solução de escoamentos de fluidos compressíveis foram realizadas, tais como as de Kessler [2002], Petry [2002] e Teixeira [2001] no âmbito do Programa de Pós-Graduação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). O elemento isoparmétrico tridimensional de oito nós e a sua integração através de expressões

analíticas, foram utilizados por Rossa [2000], no contexto da solução de problemas de escoamentos incompressíveis e por Kessler [2002] para problemas hipersônicos.

1.4 Objetivos e Conteúdo do Trabalho

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um algoritmo de adaptação via movimento de malhas em escoamentos de fluidos compressíveis bidimensionais e tridimensionais, com ênfase na solução de problemas com ondas de choque.

O texto está desenvolvido em 10 capítulos que se tratam: O Capítulo 1 é constituído pela presente introdução. No Capítulo 2, apresenta-se a informação sobre o método r (realocação de nós). No Capítulo 3, são apresentadas as equações que governam os escoamentos compressíveis de fluidos. No Capítulo 4, descreve-se o modelo numérico de *Taylor-Galerkin*. O Capítulo 5, aborda a integração explícita das matrizes de elementos hexaédricos trilinear de oito nós. O Capítulo 6 apresenta a descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitraria, enquanto no Capítulo 7, apresenta-se a implementação da estratégia de realocação de nós. No Capítulo 8, faz-se uma breve apresentação dos aspectos computacionais. O Capítulo 9 mostra alguns exemplos e aplicações. Por último, no Capítulo 10 apresentam-se as conclusões, além de sugestões para trabalhos futuros.

Adaptação de Malhas Via Movimento de Nós

2.1 Vantagens do Método Adaptativo Via Movimento de Nós

Os métodos mais populares usados para a discretização de equações diferenciais parciais são: elementos finitos, volume finitos e diferenças finitas. Quando utilizam-se malhas com nós uniformemente espaçados, desperdiça-se freqüentemente esforço computacional para obter um erro de truncamento aceitável nas regiões de grande variação da solução ou de seu gradiente. Nestas zonas deveriam se ter uma menor separação entre os nós em comparação com as outras regiões que tem uma variação insignificante da solução. No caso de escoamento de fluidos contendo ondas de choque em movimento, superfícies de contato e camadas limites, somente uma pequena porção do domínio requer uma menor separação entre os nós. Portanto, poderia-se conseguir uma importante economia movendo os nós de maneira a concentrar os mesmos nas áreas de grande variação da solução.

Para determinar apropriadamente uma onda de choque, a separação dos nós ao redor desta tem que ser algumas vezes menor que a espessura da onda. A espessura da onda de choque está associada com os valores dos coeficientes dos termos difusivos, que são termos com a segunda derivada espacial da velocidade na equação da conservação da quantidade de movimento, sendo freqüentemente da mesma ordem que a magnitude dos coeficientes (representados pela viscosidade do fluido). Portanto, se os coeficientes dos termos difusivos são reduzidos, a espessura da onda de choque também é reduzida. Obviamente, coeficientes nulos dariam lugar a resultados fisicamente incorretos. Fisicamente, os coeficientes verdadeiros são muito pequenos, e na prática são substituídos por coeficientes maiores para permitir separações maiores entre os nós. O uso de métodos adaptativos permite uma menor separação entre os nós e, portanto, coeficientes menores e mais realistas fisicamente do que pode-se obter com os métodos sem adaptação.

Além disso, pode-se redistribuir os nós às regiões de grande variação da solução com mínimo custo computacional, maximizando assim a precisão da solução.

2.2 Revisão dos Métodos Adaptativos

Quando se consideram os algoritmos de movimento de malhas para a solução de equações em derivadas parciais (EDP) funções do tempo, as técnicas nas quais estão baseados os movimentos da malha são frequentemente extraídas da literatura de geração de malhas adaptativas para problemas estacionários. Uma destas técnicas é a *equidistribuição*, a qual envolve a localização dos nós da malha de maneira que alguma medida da solução ou o erro é igualada sobre cada subintervalo. Outra técnica é *minimização* a que gera a malha a partir de um princípio variacional, através de um funcional [Brackbill *et al.*, 1982].

Estas técnicas podem ser utilizadas nos métodos de adaptação de malha, devido a que a única diferença existente é a malha, onde neste caso ela é movida juntamente com a aproximação numérica desenvolvida no tempo, de tal maneira que as motivações fundamentais da estratégia usadas na gerações de malha são preservadas.

Alguns dos principais métodos adaptativos transformam as EDP das variáveis representadas pelo vetor A de coordenadas físicas (x_i, t) para um espaço físico n -dimensional com coordenadas computacionais n -dimensionais (ξ_i, t) no qual os nós estão igualmente espaçados.

Os métodos adaptativos podem ser classificados de acordo com a maneira em que é feita a distribuição dos nós, segundo Hawken *et al.* [1991]:

- redistribuição para minimizar ou equidistribuir a integral de uma medida de erro;
- redistribuição por uso de pseudoforças derivadas da medida de erro.

A classificação é artificial, já que as fórmulas que se obtêm no final de cada um dos processos tem muito em comum.

2.2.1 Método Baseado na Minimização ou Equidistribuição da Integral da Medida de Erro

Pierson e Kutler [1980] resolveu um problema unidimensional no qual as EDP foram transformadas das coordenadas físicas x_i para as coordenadas computacionais ξ_i com os nós equidistribuídos. A medida de erro foi o quadrado da derivada terceira da solução com relação a ξ_i . As EDP foram reduzidas para equações diferenciais ordinárias (EDO) para cada nó, usando diferenças centrais. Os nós foram movimentados para alguns passos de tempo, minimizando a integral da medida do erro.

A fim de resolver as EDP dependentes do tempo, Dwyer *et al.* [1980] e Dwyer [1984] usaram uma transformação do sistema de coordenadas espaciais (x_1, x_2, t) para o sistema de coordenadas (ξ_1, ξ_2, t) , fazendo uma equidistribuição integral da medida do erro. Os dois trabalhos foram baseados na solução adaptativa de valores de contorno de dois pontos. Para a medida do erro, usou-se derivadas com relação ao comprimento do arco entre as duas curvas de constantes ξ_1 ou ξ_2 no espaço físico. Para manter a transformação suave, usou-se a relação de separação entre nós de elemento para elemento. Os dados foram transferidos da malha antiga à malha nova por interpolação.

Com a versão unidimensional do método se obtiveram bons resultados, resultando em um erro de truncamento equivalente ao obtido por uma malha não adaptada com dez vezes mais nós. Porém, nos problemas bidimensionais [Dwyer *et al.*, 1980], obtiveram-se soluções oscilatórias em algumas regiões da malha que originaram distorções. Também, Dwyer *et al.* [1980] relatou problemas quando a adaptação foi permitida próximo ao contorno.

Brackbill *et al.* [1982] estendeu o método de geração automática de malha adaptativa usado por Winslow [1967], transformando as EDP bidimensionais das variáveis físicas A de coordenadas (x_1, x_2, t) para as coordenadas numéricas (ξ_1, ξ_2, t) . Uma soma ponderada de três medidas de erro (suavidade da malha, ortogonalidade e truncamento do erro) foi usada para determinar a transformação de coordenadas. O sistema de EDO para as coordenadas espaciais foi obtido usando o cálculo variacional para minimizar a integral do volume do erro transformado para coordenadas numéricas. O sistema de EDO para as coordenadas espaciais foi resolvido usando o método iterativo de Jacobi. Os dados da malha antiga para a malha nova foram transferidos por meio de

uma função de interpolação. Um excelente controle das características da malha, como também, a redução no erro da solução foram obtidos com este método. Kreis *et al.* [1986] mostraram que alterando a medida do truncamento do erro do método anterior pode-se melhorar os resultados no caso de alguns problemas com variação espacial grande (muita separação entre os nós).

Carcaillet *et al.* [1986a] desenvolveram um método que soma, para todos os nós, as medidas da *suavidade* e ortogonalidade da malha, assim como também a da suavidade da solução. O procedimento foi aplicado numa malha retangular e o método é uma extensão do trabalho de Hayes *et al.* [1986] e Kennon *et al.* [1986], os quais usam somente as primeiras duas medidas inspiradas no método de Brackbill *et al.* [1982].

Os valores das três medidas são calculados para cada nó e estão explicadas sucintamente a seguir para o caso bidimensional.

A suavidade da malha é monitorada pela soma dos quadrados das diferenças das áreas dos elementos com contornos em comum e esta soma é zero quando as áreas são iguais.

Os quatro vetores posição relativa com origem num dado ponto (que é o nó em questão) são usados para quatro produtos escalares, os quais são elevados ao quadrado e somados para monitorar a ortogonalidade dos nós. O produto escalar é escolhido de forma que a soma seja zero quando a malha é localmente ortogonal.

Finalmente, para monitorar a suavidade da solução escolheram a seguinte medida de erro: o produto da área dos quatro elementos conectados ao nó pelo gradiente das componentes da solução, apropriadamente acondicionado.

A soma de todos os nós é feita para formar uma medida global da *qualidade* da malha, a qual é análoga à integral de volume de Brackbill *et al.* [1982]. O método simplex não-linear é utilizado para achar a nova posição dos nós até que o funcional seja minimizado. O método demonstrou ser robusto já que funciona corretamente com elementos que tem jacobiano negativo.

O método de Carcaillet *et al.* [1986a] foi usado para a solução de EDP simples, reduzindo o erro na ordem de seis vezes em comparação com uma malha sem adaptação e igual número de nós.

Kennon *et al.* [1986] e Carcaillet *et al.* [1986b] ampliaram as medidas de *qualidade* da malha para o caso tridimensional. O último trabalho utiliza uma medida de suavidade da malha modificada para conseguir agrupar nós em linhas, superfícies ou regiões tridimensionais específicas.

O método de movimento de elementos finitos é uma técnica de solução de EDP desenvolvida por Miller e Miller [1981]. A medida do erro pode ser interpretada como sendo o quadrado do resíduo das EDP escritas na forma de elementos finitos. As EDO para os valores nodais das variáveis físicas e as coordenadas nodais são obtidas minimizando a integral da medida do erro sobre as coordenadas espaciais. Herbst *et al.* [1982] baseado no trabalho anterior, substituiu as funções de forma por aproximações cúbicas de Hermite, mas concluiu-se que ambos os métodos tendem a equidistribuir a segunda derivada espacial da solução sobre a malha com insignificante redução do erro. Este método foi facilmente aplicado em problemas unidimensionais, mas tem associadas muitas dificuldades para sua aplicação em problemas bidimensionais ou tridimensionais.

2.2.2 Método Baseado na Atração e Repulsão de Pseudoforças entre Nós

Em muitos métodos, um nó atrai outros quando a medida de erro de truncamento do nó é maior que uma medida média. Ao contrário, se a medida é menor que a média, os nós são repelidos.

Gnoffo [1983] baseou-se no trabalho de Dwyer *et al.* [1980] e usou como medida do erro a força das molas que une os nós de uma malha bidimensional. Os nós são movimentados de maneira a equidistribuir as forças das molas ao longo de linhas de coordenadas computacionais constantes. Este método foi aplicado com êxito no MVF para a solução das equações de Navier-Stokes em corpos rombudos.

A constante de rigidez da mola está associada à medida do erro, a qual é uma soma ponderada das derivadas espaciais de cada componente da solução das variáveis físicas A . O procedimento de adaptação foi somente aplicado ao longo das linhas de coordenadas computacionais. Os nós foram movidos periodicamente durante alguns

passos de tempo mediante um procedimento iterativo. Os dados da malha antiga à nova malha foram transferidos por meio de uma função de interpolação.

O método anterior foi estendido por Nakahaski e Deiwert [1987], já que adicionou-se efeitos de torção aos efeitos axiais da mola. Isto ajusta à distribuição dos nós no domínio bidimensional, forçando a ortogonalidade na malha. O método foi aplicado para a solução das equações de Navier-Stokes e de Euler para escoamentos sobre aerofólios em regimes subsônicos e supersônicos.

A constante de rigidez da mola aos efeitos axiais é proporcional ao gradiente da solução entre os ditos nós, enquanto que a constante de rigidez da mola à torção é uma pequena fração da primeira, de forma que a ortogonalidade da malha esteja reforçada nas regiões de gradientes pequenos. Uma interpolação é usada para transferir a informação desde a malha antiga à nova malha depois que todas as linhas forem adaptadas.

O método também foi empregado em problemas tridimensionais por Nakahaski e Deiwert [1986]. Eles sugeriram que o método pode ser aplicado a problemas de escoamentos não estacionários, avaliando a velocidade na malha depois de cada adaptação.

Todos os métodos requerem constantes de ponderação específicas. Portanto, a solução do problema freqüentemente envolve um ciclo para escolher as constantes de ponderação, e em função do comportamento da solução determina-se se as constantes devem ser alteradas. A redução do número de constantes de ponderação ou sua escolha automática é uma área a ser aprimorada em futuras técnicas de adaptação.

Equações que Governam o Escoamento de Fluidos

3.1 Introdução

As equações fundamentais que governam o escoamento de um fluido viscoso, transiente são dadas pelas equações da continuidade, da quantidade de movimento e da energia. Estas equações são apresentadas em forma conservativa, pois são obtidas a partir de um volume infinitesimal fixo no espaço [Anderson, 1991]. Todas elas estão em coordenadas cartesianas tridimensionais e são aplicadas a todo o domínio considerado.

3.2 Equações Governantes

3.2.1 Equações de Conservação

As equações são dadas nas seguintes expressões, segundo Schlichting [1979]:

- Equação de Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

- Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial (\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_j v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} - b_j = 0 \quad (3.2)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \sigma_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] - Q = 0 \quad (3.3)$$

todas elas válidas no domínio Ω , e sendo em todos os casos $i, j = 1, 2, 3$. As equações são apresentadas em notação indicial de Einstein, ou seja, ocorre somatório nos termos com índices repetidos (exceto quando indica-se o contrário).

Nestas expressões, v_i são as componentes do vetor velocidade segundo o eixo x_i , ρ é a massa específica do fluido, 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, σ_{ij} são as componentes do tensor de tensões e t é o tempo.

3.2.2 Equações Constitutivas

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

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (3.4)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right] + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.5)$$

nas quais, p é a pressão termodinâmica, δ_{ij} é o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$, para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$, para $i \neq j$), 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 ($\lambda = -2\mu/3$ para a hipótese de Stokes).

3.3 Equações de Navier-Stokes e de Conservação de Massa e de Energia

Substituindo as Equações Constitutivas nas Equações de Conservação da Quantidade de Movimento, obtêm-se as Equações de Navier-Stokes, que governam o comportamento dos escoamentos de fluidos viscosos. As Equações de Conservação ficam:

- Equação de Conservação de Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.6)$$

- Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} - b_j = 0 \quad (3.7)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \tau_{ij}) + \frac{\partial(p v_j)}{\partial x_i} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] - Q = 0 \quad (3.8)$$

3.4 Equações de Euler e de Conservação de Massa e de Energia

Desprezando nas equações (3.4) e (3.5) os efeitos viscosos, tem-se que:

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} \quad (3.9)$$

Com esta consideração podem ser obtidas algumas características de escoamentos com elevado número de Reynolds. Finalmente, as equações que governam o escoamento de fluidos não viscosos, ficam:

- Equação de Conservação de Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.10)$$

- Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j v_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} - b_j = 0 \quad (3.11)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial(p v_j)}{\partial x_i} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] - Q = 0 \quad (3.12)$$

3.5 Equações Complementares

3.5.1 Equação de Estado

No caso de escoamentos de gases compressíveis, em especial naqueles denominados gases

perfeitos, é utilizada a Equação de Estado dos gases perfeitos que relaciona a pressão, a energia interna específica e a massa específica da seguinte forma:

$$p = (\gamma - 1) \rho u \quad (3.13)$$

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:

$$u = c_v T \quad (3.14)$$

$$u = e - \frac{1}{2} v_i v_i \quad (3.15)$$

Onde, $v_i v_i / 2$ é a energia cinética específica.

3.5.2 Lei de Viscosidade de Sutherland

Em escoamentos com altos gradientes de temperatura, como é o caso dos escoamentos compressíveis, a viscosidade não pode ser considerada constante, porém uma função da temperatura. Existem algumas leis empíricas para representar a dependência da viscosidade com a temperatura T , entre as quais a Lei de Sutherland, que estabelece que:

$$\mu = \mu_{ref} \frac{S + T_{ref}}{S + T} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.16)$$

onde o subíndice *ref* indica *estado de referência*, e S é uma propriedade do gás em unidades de temperatura. Por exemplo, para o ar tem-se [White, 2002]:

$$S = 110,4^\circ K \quad (3.17)$$

3.6 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 existentes na área.

Multiplicando as Equações de Conservação (3.6) e (3.10) por $\left(\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} a_{ref}}\right)$, (3.7) e (3.11) por $\left(\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} a_{ref}^2}\right)$ e (3.8) e (3.12) por $\left(\frac{L_{ref}}{\rho_{ref} a_{ref}^3}\right)$ pode-se definir as seguintes grandezas adimensionais:

$$\underline{t} = t \frac{a_{ref}}{L_{ref}} \quad \text{tempo adimensional;}$$

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

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

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

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

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

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

Onde, L_{ref} é um comprimento de referência, a_{ref} e ρ_{ref} são a velocidade do som e a massa específica da corrente não perturbada, respectivamente. As equações adimensionalizadas de conservação, desprezando os efeitos de condutibilidade térmica, as forças de volume, e as fontes ou sumidouros, resultam, para os fluidos viscosos:

- Equação de Conservação de Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.18)$$

- Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial(\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\underline{\mu} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \underline{\lambda} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial p}{\partial x_j} = 0 \quad (3.19)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e v_i)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ v_j \left[\underline{\mu} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \underline{\lambda} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \right\} + \frac{\partial p v_j}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\underline{K} \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] = 0 \quad (3.20)$$

Considerando que M_{ref} e Re_{ref} são o Número de Mach e o Número de Reynolds da corrente não perturbada respectivamente, e Pr é o Número de Prandtl definido a partir do traço do tensor K_{ij} , as quantidades $\underline{\mu}$, $\underline{\lambda}$ e \underline{k} ficam definidas através das seguintes expressões:

- a) Lei de Viscosidade de Sutherland adimensionalizada:

$$\underline{\mu} = \frac{M_{ref}}{Re_{ref}} \left(\frac{\underline{S} + \underline{u}_{ref}}{\underline{S} + \underline{u}} \right) \left(\frac{\underline{u}}{\underline{u}_{ref}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.21)$$

$$\underline{\lambda} = -\frac{2}{3} \underline{\mu} \quad (3.22)$$

$$\underline{S} = \frac{c_v \underline{S}}{c_{ref}^2} \quad (3.23)$$

onde,

$$Re_{ref} = \frac{\rho_{ref} V_{ref} L_{ref}}{\mu_{ref}} \quad (3.24)$$

$$M_{ref} = \frac{V_{ref}}{a_{ref}} \quad (3.25)$$

b) Lei de Sutherland adimensionalizada para o coeficiente de condutibilidade:

$$\underline{K} = \frac{M_{ref}}{Re_{ref}} \frac{\gamma}{Pr} \left(\frac{S_k + u_{ref}}{S_k + u} \right) \left(\frac{u}{u_{ref}} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.26)$$

$$Pr = \frac{c_p \mu_{ref}}{K} ; \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v} ; \quad K = \frac{K_{11} + K_{22} + K_{33}}{3} ; \quad S_K = \frac{c_v S_K}{c_{ref}^2} \quad (3.27)$$

Mais informações referida à Lei de Sutherland para a viscosidade ou para a condutibilidade térmica, assim como os valores das constantes S e S_K , encontram-se em White [2002].

As equações adimensionalizadas para fluidos não viscosos, obtêm-se simplesmente eliminando os termos viscosos nas equações de conservação de quantidade de movimento e de energia, e os termos de condutibilidade térmica na equação de conservação de energia.

3.7 Forma Vetorial Compacta das Equações de Conservação

A partir deste ponto, utilizam-se sempre as equações adimensionalizadas, independente que seja para o caso dos fluidos viscosos, ou para o caso de escoamentos de fluidos não viscosos. Assim, todas as variáveis são adimensionais, embora o traço utilizado na seção anterior não apareça para facilitar a notação.

Empregando os seguintes arranjos:

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ \rho v_3 \\ \rho e \end{Bmatrix} ; \quad \mathbf{F}_i = \begin{Bmatrix} \rho v_i \\ \rho v_1 v_i + p \delta_{i1} \\ \rho v_2 v_i + p \delta_{i2} \\ \rho v_3 v_i + p \delta_{i3} \\ v_i (\rho e + p) \end{Bmatrix} ; \quad \mathbf{G}_i = \begin{Bmatrix} 0 \\ -\tau_{i1} \\ -\tau_{i2} \\ -\tau_{i3} \\ -\tau_{ij} v_j - K \frac{\partial u}{\partial x_i} \end{Bmatrix} \quad (3.28)$$

onde, $i = 1,2,3$, \mathbf{U} é o vetor de variáveis de campo, \mathbf{F}_i é o vetor de variáveis de fluxo e \mathbf{G}_i é o

vetor de termos viscosos e de condutibilidade térmica. Então, as equações de conservação para fluidos viscosos ficam resumidas na seguinte equação vetorial:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{G}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (3.29)$$

Entretanto, estas equações para o caso de fluidos não viscosos ficam expressas por:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (3.30)$$

Para definir totalmente o problema, deve-se adicionar ao sistema de equações, dado pelas expressões (3.29) e (3.30), as condições iniciais e de contorno para as variáveis. As condições iniciais, $t = 0$, vêm dadas por:

$$v_i = v_0 \quad (3.31)$$

$$\rho_i = \rho_0 \quad (3.32)$$

$$u_i = u_0 \quad (3.33)$$

As condições de contorno essenciais ou forçadas (também chamadas condições de contorno de Dirichlet) são as seguintes:

$$v_i = \bar{v}_i \quad \text{em } \Gamma_v \quad (3.34)$$

$$\rho = \bar{\rho} \quad \text{em } \Gamma_\rho \quad (3.35)$$

$$u = \bar{u} \quad \text{em } \Gamma_u \quad (3.36)$$

onde, \bar{v}_i , $\bar{\rho}$ e \bar{u} são os valores prescritos das variáveis v_i , ρ e u nas partes Γ_v , Γ_ρ e Γ_u do contorno.

As condições de contorno naturais (ou condições de contorno de Neumann) vêm dadas por:

$$\left(-p \delta_{ij} + \tau_{ij}\right) n_j = \hat{t}_i \quad \text{em } \Gamma_\sigma \quad (3.37)$$

$$K \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = \hat{q} \quad \text{em } \Gamma_q \quad (3.38)$$

onde, n_j são os cosenos diretores da normal num ponto de Γ_σ com o eixo x_j , \hat{t}_i é a componente

de uma força de superfície na direção do eixo x_i atuando na parte Γ_σ do contorno, n_i é a componente da direção normal do contorno Γ_q , segundo a direção do eixo x_i , e \hat{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 perdas não serão incluídas no presente trabalho.

O Modelo Numérico de Taylor–Galerkin

4.1 Introdução

O método de *Taylor-Galerkin* de um passo, introduzido por Donea [1984], é aplicado sobre as equações governantes. Em um primeiro momento, as variáveis de campo são expandidas no tempo segundo uma série discreta de *Taylor*. Isto permite obter os valores daquelas em um determinado passo de tempo $(n+1)\Delta t$, a partir do passo de tempo anterior $n\Delta t$. Posteriormente, o método de *Galerkin* standard (ou *Bubnov-Galerkin*) é aplicado para obter-se a aproximação espacial.

4.2 Discretização Temporal das Equações: Série de Taylor

Desenvolvendo as variáveis de campo das equações por uma expansão no tempo, segundo uma série de Taylor [Yoon e Moon, 1998], obtém-se:

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)^{n+s_1} + \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right)^{n+s_2} + \dots \quad (4.1)$$

onde, o superíndice n indica o passo de tempo. Além disso, define-se:

$$\frac{\partial \mathbf{U}^{n+s_1}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} + s_1 \frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} \quad 0 \leq s_1 \leq 1 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^{n+s_2}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} + s_2 \frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} \quad 0 \leq s_2 \leq 1 \quad (4.3)$$

onde, s_1 e s_2 são parâmetros que definem se o esquema é explícito ($s_1 = s_2 = 0$), semi-implícito ou implícito ($s_1 = s_2 = 1$), como indica [Yoon e Moon, 1998]. Adotando $s_1 = 1/2$ e $s_2 = 1/2$, e substituindo na equação (4.1), resulta:

$$\Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} \right) \quad (4.4)$$

A equação (4.4) é a expressão que define o esquema de avanço no tempo, mas ainda é preciso substituir nela as derivadas primeira e segunda de \mathbf{U}^n e $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$ com relação ao tempo, por expressões obtidas a partir das equações de conservação.

A equação vetorial (3.29), representando as Equações de Conservação, é expressa por:

$$\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} = - \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} \quad \text{com } i = 1,2,3 \quad (4.5)$$

Analogamente, para o incremento $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$, tem-se:

$$\frac{\partial \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t} = - \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_i^{n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_i^{n+1}}{\partial x_i} \quad (4.6)$$

Antes de substituir as expressões (4.5) e (4.6) na equação (4.4), é preciso obter as derivadas segunda de \mathbf{U}^n e $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$ com relação ao tempo.

Expandindo o vetor \mathbf{F}_i , como se mostra nas seguintes expressões:

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{C}_i + \mathbf{P}_i \quad (4.7)$$

$$\mathbf{C}_i = \begin{Bmatrix} \rho v_i \\ \rho v_1 v_i \\ \rho v_2 v_i \\ \rho v_3 v_i \\ \rho e v_i \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{P}_i = \begin{Bmatrix} 0 \\ p \delta_{i1} \\ p \delta_{i2} \\ p \delta_{i3} \\ p v_i \end{Bmatrix} \quad (4.8)$$

a equação (4.5) pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{C}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} \quad (4.9)$$

Derivando em relação ao tempo a expressão (4.9), obtém-se:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \mathbf{C}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} \right) \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\partial \mathbf{C}_i^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial t} \right) \quad (4.11)$$

Utilizando a regra da cadeia, tem-se:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\frac{\partial \mathbf{C}_i^n}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial t} \right) \quad (4.12)$$

observando que:

$$\frac{\partial \mathbf{C}_i^n}{\partial \mathbf{U}} = v_i^n \mathbf{1} \quad (4.13)$$

onde,

$$\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e denominando:

$$\mathbf{b}_i^n = \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial \mathbf{U}} \quad (4.14)$$

tem-se:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(-v_i^n \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \mathbf{b}_i^n \frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial t} \right) \quad (4.15)$$

Substituindo a expressão (4.9) em (4.15), obtém-se:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\left(v_i^n \mathbf{1} + \mathbf{b}_i^n \right) \left(-\frac{\partial \mathbf{C}_k^n}{\partial x_k} - \frac{\partial \mathbf{P}_k^n}{\partial x_k} - \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial t} \right] \quad (4.16)$$

com $i, k = 1, 2, 3$

Mas, considerando a expressão (4.7), e adotando a seguinte linearização:

$$\frac{\partial \mathbf{P}_i^n}{\partial t} = \frac{\Delta \mathbf{P}_i^{n+1}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{P}_i^{n+1} - \mathbf{P}_i^n}{\Delta t} \quad (4.17)$$

a equação (4.16) transforma-se em:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^n}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\left(v_i^n \mathbf{1} + \mathbf{b}_i^n \right) \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_k^n}{\partial x_k} - \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k} \right) - \frac{\Delta \mathbf{P}_i^{n+1}}{\Delta t} \right] \quad (4.18)$$

Analogamente, obtém-se a seguinte expressão para o incremento $\Delta \mathbf{U}^{n+1}$:

$$\frac{\partial^2 \Delta \mathbf{U}^{n+1}}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\left(v_i^n \mathbf{1} + \mathbf{b}_i^n \right) \left(-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_k^{n+1}}{\partial x_k} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_k^{n+1}}{\partial x_k} \right) - \frac{\Delta(\Delta \mathbf{P}_i^{n+1})}{\Delta t} \right] \quad (4.19)$$

Agora, as expressões (4.5), (4.6), (4.18) e (4.19) podem ser substituídas na equação (4.4). Se isto for feito considerando que as componentes da matriz \mathbf{b}_i^n são desprezíveis quando comparadas com v_i^n , a matriz $(v_i^n \mathbf{1} + \mathbf{b}_i^n)$ pode ser substituída pelo fator v_i^n .

Desprezando os termos:

$$\frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathbf{G}_k^n}{\partial x_k}; \quad \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_k^{n+1}}{\partial x_k} \quad \text{e} \quad \frac{\Delta t}{4} \frac{\partial}{\partial x_k} \Delta(\Delta \mathbf{P}_k^{n+1})$$

pelo fato do primeiro e segundo serem termos de ordem superior, dado que estes envolvem derivadas terceiras da posição. Já, o terceiro pode ser desprezado por conter a derivada do incremento de um incremento, multiplicada por outro incremento. Obtém-se a seguinte equação para os incrementos das variáveis:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}^{n+1} = \Delta t & \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) \right] + \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_i^{n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta \mathbf{P}_i^{n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_i^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_i^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

Na equação (4.20), os incrementos das variáveis de campo $\Delta \mathbf{U}$ devem ser obtidos através de um processo iterativo, um vez que estão definidos para o mesmo tempo que os termos incrementais do segundo termo do lado direito da equação. Finalmente, adotando a seguinte nomenclatura:

$$\mathbf{F}_i^p = \mathbf{F}_i + \mathbf{P}_i = \begin{cases} \rho v_i \\ \rho v_1 v_i + 2p \delta_{i1} \\ \rho v_2 v_i + 2p \delta_{i2} \\ \rho v_3 v_i + 2p \delta_{i3} \\ v_i (\rho e + 2p) \end{cases} \quad (4.21)$$

e adicionando um contador de número de iterações I , o esquema de avanço no tempo para o caso de escoamentos de fluidos viscosos fica representado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} = \Delta t & \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) \right] + \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{iI}^{p\ n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_{iI}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{iI}^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.22)$$

Para modelar escoamentos de fluidos não viscosos, simplesmente se eliminam os termos que contêm o vetor \mathbf{G}_i , resultando na seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} = \Delta t & \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) \right] + \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{iI}^{p\ n+1}}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{iI}^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.23)$$

Deve-se observar que o esquema de avanço no tempo das equações (4.22) e (4.23) é, em princípio, um esquema semi-implícito, dado que o vetor de incógnitas no tempo $n+1$ é obtido a partir dos vetores \mathbf{F}_i e \mathbf{G}_i , avaliados no tempo n , e dos vetores dos incrementos de

F_i e G_i , avaliados no tempo $n+1$. No entanto, este esquema será resolvido em forma explícita, segundo será oportunamente mostrado na seção 4.3.1, conservando todas as características de um sistema explícito.

4.3 Discretização Espacial das Equações: Aplicação do Método de Galerkin

Nas expressões (4.22) e (4.23), todas as funções envolvidas já foram discretizadas no tempo, mas não no espaço. Os vetores (U, F_i, F_i^p e G_i) e os incrementos temporais são ainda funções contínuas da posição, significando que:

$$U_i^n = U_i^n(x_i) \quad \text{com} \quad i = 1,2,3 \quad (4.24)$$

Entretanto, os incrementos temporais que apareceram também são funções da posição, significando ter:

$$\Delta U_i^{n+1} = \Delta U_i^{n+1}(x_i) = U_i^{n+1}(x_i) - U_i^n(x_i) \quad (4.25)$$

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

Neste trabalho, utilizam-se elementos tri-lineares hexaédricos de oito nós. Portanto, têm-se oito funções de interpolação, ou funções de forma, constituindo na seguinte matriz:

$$[\Phi] = [\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \Phi_3 \quad \Phi_4 \quad \Phi_5 \quad \Phi_6 \quad \Phi_7 \quad \Phi_8] \quad (4.26)$$

Após a discretização do domínio, as variáveis aproximadas, obtidas por interpolação, ficam representadas pelas seguintes expressões:

$$U^n = [\Phi] \{U\}^n \quad (4.27)$$

Nestas expressões, $\{U\}^n$ é o vetor de valores nodais da variável. Por exemplo, para o vetor de variáveis de campo tem-se:

$$\{\mathbf{U}\}^n = \begin{Bmatrix} \{\rho\} \\ \{\rho v_1\} \\ \{\rho v_2\} \\ \{\rho v_3\} \\ \{\rho e\} \end{Bmatrix}^n \quad (4.28)$$

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

$$\{\rho v_1\}^n = \begin{Bmatrix} (\rho v_1)_1 \\ (\rho v_1)_2 \\ \vdots \\ (\rho v_1)_8 \end{Bmatrix}^n \quad (4.29)$$

Aqui está sendo representado apenas o vetor $\{\mathbf{U}\}^n$, mas este procedimento é estendido a todas as variáveis.

Deve-se salientar o fato de que os vetores \mathbf{U}^n , \mathbf{F}_i^n e $\mathbf{F}_i^{p^n}$ contêm as *variáveis aproximadas*, formadas pelos produtos das funções de interpolação constituídas por polinômios conhecidos e os valores nodais das variáveis que são as incógnitas do problema a serem determinadas. Entretanto, o vetor \mathbf{G}_i^n não aparece aqui, dado que estes termos precisam de um tratamento especial.

Uma vez aplicado o MEF, é necessário adotar um método que permita estabelecer equações para determinar os valores nodais das variáveis, de forma que a diferença entre os valores das variáveis aproximadas por interpolação e os valores reais das variáveis que eram as incógnitas originais no modelo matemático contínuo, seja minimizada.

No contexto do MEF, o método dos resíduos ponderados consiste em tomar as funções aproximadas num elemento, as quais introduzidas nas equações (4.22) e (4.23) não são satisfeitas, ficando um resíduo para cada equação devido ao fato de não serem as funções aproximadas as soluções exatas daquelas equações. Este resíduo é definido para um escoamento de fluidos viscosos como:

$$\mathbf{R} = \Delta \mathbf{U}_{l+1}^{n+1} - \Delta t \left[-\frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\Delta t}{2} \left[-\frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{il}^{p\ n+1}}{\partial x_i} - \frac{\partial \Delta \mathbf{G}_{il}^{n+1}}{\partial x_i} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{il}^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right] \quad (4.30)$$

Este resíduo é ponderado de alguma forma e obrigado a satisfazer uma condição para minimizá-lo. 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. Assim, definindo o produto interno como a integral de volume no elemento finito do produto entre o resíduo e a variação do vetor das variáveis, tem-se:

$$\int_{\Omega_e} \delta \mathbf{U} \mathbf{R} \, d\Omega = 0 \Rightarrow \{\delta \mathbf{U}\}^T \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{R} \, d\Omega = \{0\} \quad (4.31-a)$$

portanto,

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \mathbf{R} \, d\Omega = \{0\} \quad (4.31-b)$$

onde, \mathbf{R} é o resíduo da equação e Ω_e é o domínio do elemento.

Desta forma, resolvendo a equação (4.31-b) para os valores nodais das variáveis de campo, obtém-se a solução do problema discretizado, um vez que estes valores são, precisamente aqueles que minimizam o resíduo. O resíduo, no caso de escoamento de fluidos não viscoso obtém-se da equação (4.23).

4.3.1 Modelo numérico para escoamentos não difusivos

Dado que os termos viscosos e de condutibilidade térmica, que estão presentes na equação (4.22), requerem um tratamento especial [Burbridge, 1999], inicialmente, desenvolve-se o método para o caso de fluidos não viscosos, adicionando depois os termos correspondentes ao caso viscoso.

Introduzindo as variáveis aproximadas na equação (4.23), e aplicando o método de Galerkin, tem-se, para cada elemento do domínio, a seguinte igualdade:

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} d\Omega = \Delta t \left[-\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) d\Omega \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[-\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{i-1}^{Pn+1}}{\partial x_i} d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial}{\partial x_k} \left(v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{i-1}^{n+1}}{\partial x_i} \right) d\Omega \right] \quad (4.32)$$

Aplicando o Teorema de Gauss-Green nas integrais contendo derivadas segundas, e desprezando os termos de contorno resultantes da integral contendo o vetor $\Delta \mathbf{F}_i^{n+1}$, a expressão (4.32) transforma-se em:

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \Delta \mathbf{U}_{I+1}^{n+1} d\Omega = \Delta t \left[-\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} d\Omega + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(v_k^n \frac{\partial \mathbf{F}_i^n}{\partial x_i} \right) n_k d\Gamma \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[-\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{i-1}^{Pn+1}}{\partial x_i} d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} v_k^n \frac{\partial \Delta \mathbf{F}_{i-1}^{n+1}}{\partial x_i} d\Omega \right] \quad (4.33)$$

onde, a matriz $[\Phi^*]$ contém as funções de interpolação avaliadas no contorno do elemento e n_k são as componentes do vetor normal ao contorno, e por convenção apontando para fora do domínio.

Agora, substituindo a expressão (4.27) e suas equivalentes na equação (4.33), obtém-se:

$$\left(\int_{\Omega_e} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \right) \{ \Delta \mathbf{U} \}_{I+1}^{n+1} = \Delta t \left[- \left(\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \mathbf{F}_i \}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Omega_e} ([\Phi] \{v_k\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \mathbf{F}_i \}^n + \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T ([\Phi] \{v_k\}^n) n_k \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{ \mathbf{F}_i \}^n \right) d\Gamma \right) \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[- \left(\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \Delta \mathbf{F}_i \}_1^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \left(\int_{\Omega_e} ([\Phi] \{v_k\}^n) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{ \Delta \mathbf{F}_i \}_1^{n+1} \right] \quad (4.34)$$

Então, definindo as seguintes matrizes e vetores:

$$[\mathbf{M}] = \int_{\Omega_e} [\Phi]^T [\Phi] d\Omega \quad (4.35)$$

$$[B]_i = \int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.36)$$

$$[C]_i = \int_{\Omega_e} \left([\Phi] \{v_k\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.37)$$

$$\{g\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left([\Phi] \{v_k\}^n \right) n_k \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{F_i\}^n \right) d\Gamma \quad (4.38)$$

com $i, k = 1, 2, 3$

a equação (4.34) pode ser escrita em forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} [M] \{\Delta U\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t \left(- [B]_i \{F_i\}^n - \frac{\Delta t}{2} [C]_i \{F_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \left(- [B]_i \{\Delta F_i^p\}_1^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} [C]_i \{\Delta F_i\}_1^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.39)$$

Fazendo,

$$[B^c]_i = [B]_i + \frac{\Delta t}{2} [C]_i \quad (4.40)$$

obtém-se:

$$\begin{aligned} [M] \{\Delta U\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t \left(- [B^c]_i \{F_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \left(- [B]_i \{\Delta P_i\}_1^{n+1} - [B^c]_i \{\Delta F_i\}_1^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.41)$$

A equação (4.41) foi definida para um elemento genérico, portanto, para resolver as equações é preciso primeiramente efetuar a montagem das equações de elemento para obter o sistema completo. Se isto fosse feito utilizando a matriz [M], como foi definido, o resultado seria um sistema de equações acopladas que não poderiam ser resolvidas explicitamente. No entanto, definindo a seguinte matriz diagonal:

$$[M_D] = [m_{MN}] \quad (4.42)$$

onde,

$$m_{MN} = \begin{cases} \alpha M_{MN} & \text{se } M = N \\ 0 & \text{se } M \neq N \end{cases} \quad (4.43)$$

$$\alpha = \frac{\sum_{N=1}^8 M_{MN}}{\sum_{N=1}^8 \sum_{M=1}^8 M_{MN}} \quad (4.44)$$

e M_{MN} são os elementos da matriz $[M]$, então, obtém-se o seguinte esquema explícito:

$$\begin{aligned} \{\Delta \mathbf{U}\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}^C]_i \{\mathbf{F}_i\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{\mathbf{g}\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{M}_D]^{-1} \left(- [\mathbf{B}]_i \{\Delta \mathbf{P}_{ij}\}_I^{n+1} - [\mathbf{B}^C]_i \{\Delta \mathbf{F}_i\}_I^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

com $i = 1, 2, 3$

Assim, a equação (4.45) representa o modelo numérico de Taylor-Galerkin para escoamentos compressíveis de fluidos não viscosos.

4.3.2 Modelo numérico para escoamentos difusivos

Os termos difusivos contidos no vetor \mathbf{G}_i^n não podem ser interpolados de forma direta, como se mostra adiante:

$$\mathbf{G}_i^n = [\Phi] \{\mathbf{G}_i\}^n \quad \text{com } i = 1, 2, 3 \quad (4.46)$$

A expressão (4.46) não pode ser utilizada em forma direta porque isto implicaria dispor dos valores nodais do vetor \mathbf{G}_i^n e, dado que os termos difusivos e de condutibilidade térmica contém derivadas das variáveis de campo, esses valores nodais não podem ser obtidos quando o elemento utilizado é linear. Assim, torna-se necessário integrar por partes utilizando o Teorema de Gauss-Green. Além disso, estes termos têm características especiais para cada equação de conservação e, por isso, a expansão dos termos difusivos pode ser encontrada no Anexo A.

Para simplificar a notação, considera-se:

$$F_i^\rho = \rho v_i \quad (4.47)$$

$$F_{ij}^{\rho v} = \rho v_i v_j + p \delta_{ij} \quad \text{com } i, j = 1, 2, 3 \quad (4.48)$$

$$F_i^{\rho e} = \rho e v_i + p v_i \quad (4.49)$$

onde as equações ficam expressas da seguinte maneira:

- Equação de Conservação de Massa:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t [M_D]^{-1} \left(- [B^C]_i \{F_i^\rho\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g^\rho\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left(- [B^C]_i \{\Delta F_i^\rho\}_I^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.50)$$

- Equação de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho v_j\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t [M_D]^{-1} \left(- [B^C]_i \{F_{ij}^{\rho v}\}^n - [D]_{ij} \{v_i\}^n + \{f_j\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g_j^{\rho v}\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left(- [B]_i \{\Delta p \delta_{ij}\}_I^{n+1} - [B^C]_i \{\Delta F_{ij}^{\rho v}\}_I^{n+1} - [D]_{ij} \{\Delta v_i\}_I^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.51)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\begin{aligned} \{\Delta \rho e\}_{I+1}^{n+1} &= \Delta t [M_D]^{-1} \left(- [B^C]_i \{F_i^{\rho e}\}^n - [E]_i \{v_i\}^n - [K] \{u\}^n + \{q\}^n + \frac{\Delta t}{2} \{g^{\rho e}\}^n \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} [M_D]^{-1} \left(- [B]_i \{\Delta p v_i\}_I^{n+1} - [B^C]_i \{\Delta F_i^{\rho e}\}_I^{n+1} - [E^*]_i \{\Delta v_i\}_I^{n+1} - [K] \{\Delta u\}_I^{n+1} \right) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Nestas equações, as matrizes $[M_D]$, $[B^C]_i$ e $[B]_i$, e o vetor $\{g\}$ já foram definidos nas expressões (4.42), (4.40), (4.36) e (4.38), respectivamente, com o auxílio das expressões complementares (4.35), (4.37), (4.43) e (4.44). Entretanto, tem aparecido novas matrizes e vetores de elemento que se definem a seguir:

$$\left[\mathbf{D} \right]_{ij} = \begin{cases} \int_{\Omega_e} \mu \left(2 + \frac{\lambda}{\mu} \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_{(i)}} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_{(i)}} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega ; \\ \text{se } i = j, \text{ e } \begin{cases} i = 1 \rightarrow k = 2, 3 \\ i = 2 \rightarrow k = 1, 3 \\ i = 3 \rightarrow k = 1, 2 \end{cases} \\ \\ \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega ; \\ \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (4.53)$$

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

$$\{f_j\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma \quad (4.54)$$

com $i, j, k = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}]_i = \int_{\Omega_e} & \left[\mu \left([\Phi] \{v_i\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} + \mu \left([\Phi] \{v_k\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} + \right. \\ & \left. + \lambda \left([\Phi] \{v_k\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \right] d\Omega \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}^*]_i = & [\mathbf{E}]_i + \int_{\Omega_e} \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} [\Phi] + \right. \\ & \left. + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} [\Phi] \right] d\Omega \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$[\mathbf{K}] = \int_{\Omega_e} K \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \quad (4.57)$$

$$\begin{aligned} \{q\}^n = & \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left([\Phi] \{v_j\}^n \right) \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T K \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u\}^n \right) n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (4.58)$$

4.4 Viscosidade Artificial e Estabilidade Numérica

4.4.1 Esquema de difusividade artificial

Em problemas envolvendo escoamentos compressíveis podem aparecer fortes discontinuidades em forma de ondas de choque. A solução direta através do esquema de Taylor-Galerkin para este tipo de problemas conduz à aparição de oscilações de alta frequência nas proximidades dos choques, motivo pelo qual é necessária a adoção de algum método que permita capturar as discontinuidades. No presente trabalho, emprega-se o método de difusividade artificial, descrito por Burbridge [1999].

Uma vez obtidos os incrementos $\{\Delta \mathbf{U}\}^{n+1}$, o valor das variáveis de campo para o tempo $(n+1) \Delta t$, torna-se:

$$\{\mathbf{U}\}^{n+1} = \{\mathbf{U}\}^n + \{\Delta \mathbf{U}\}^{n+1} \quad (4.59)$$

O Método de Viscosidade Artificial consiste em adicionar termos dissipativos que simulem a ação da viscosidade nas proximidades das discontinuidades, significando ter:

$$\{\mathbf{U}_S\}^{n+1} = \{\mathbf{U}\}^{n+1} + [\mathbf{M}_D]^{-1} \{\mathbf{D}\}^n \quad (4.60)$$

sendo $\{\mathbf{U}_S\}^{n+1}$ o vetor de variáveis de campo suavizadas e $\{\mathbf{D}\}^n$ o vetor de amortecimento numérico que fica definido da seguinte forma:

$$\{\mathbf{D}\}^n = \sum_e \left\{ C_e C_{AF} S_e \left([\mathbf{M}] - [\mathbf{M}_D] \right)_e \{\mathbf{U}\}_e^n \right\} \quad (4.61)$$

Deve-se observar que os vetores e matrizes das expressões (4.59) e (4.60) que não levam o subíndice e são vetores globais, ou seja, que foi efetuada a montagem das equações de elemento.

Pelo contrário, na expressão (4.61), todas as magnitudes são de elemento e levam o subíndice e . Nesta última equação, o símbolo de somatório indica o processo de montagem do produto no interior da chave, C_{AF} é um coeficiente de amortecimento fictício definido pelo usuário, e C_e é o Número de CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) local que vem dado pela seguinte expressão:

$$C_e = \frac{\Delta t}{\Delta t_e} \quad (4.62)$$

onde, Δt é o intervalo de tempo adaptado e Δt_e é o intervalo de tempo do elemento e .

Finalmente, S_e é a média dos valores nodais do sensor de pressões calculada da seguinte forma:

$$S_e = \frac{1}{n_{em}} \sum_{N=1}^{n_{em}} s_N \quad (4.63)$$

onde, os s_N são os valores do sensor de pressões em cada um dos nós do elemento, extraídos a partir do vetor global $\{s\}^n$:

$$\{s\}^n = \frac{\sum_e \left| \left([\mathbf{M}] - [\mathbf{M}_D] \right)_e \{p\}_e^n \right|}{\sum_e \left[\left| [\mathbf{M}] - [\mathbf{M}_D] \right|_e \{p\}_e^n \right]} \quad (4.64)$$

Nesta expressão, as barras indicam que deve ser calculado o valor absoluto dos elementos dos vetores ou matrizes contidos entre elas. Na equação (4.63), n_{em} é o número de elementos que compartilham um determinado nó.

4.4.2 Condição de estabilidade

Uma vez montadas as equações de elemento, o sistema resultante é um sistema explícito, já que aquelas equações não ficam acopladas.

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.

No caso do esquema explícito de *Taylor-Galerkin* para escoamentos compressíveis, a condição de estabilidade é a Condição de CFL, que pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Delta t_e = \delta \frac{L_e}{a + (v_i v_i)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.65)$$

onde, Δt_e é o incremento de tempo crítico do elemento, δ é um coeficiente de segurança, L_e é um comprimento característico do elemento e a é a velocidade do som. Em forma adimensionalizada, a expressão (4.65) resulta:

$$\Delta t_e = \delta \frac{\frac{L_e}{L_{ref}}}{\frac{a}{a_{ref}} + M} \quad (4.66)$$

onde, M é o número de Mach local.

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

Integração Explícita das Matrizes de Elemento

5.1 Elemento Isoparamétrico Hexaédrico de Oito Nós

Para a análise do escoamento através do algoritmo desenvolvido no Capítulo 4, torna-se necessário formar as matrizes e vetores a nível de elemento. Neste trabalho é utilizado o elemento hexaédrico trilinear de oito nós, empregando-se as funções de interpolação clássicas para expandir as componentes de Quantidade de Movimento, a Energia e a Massa Específica.

Na Figura 5.1, mostra-se o elemento adotado no espaço computacional segundo as direções dos eixos locais, e um elemento genérico usado no espaço físico, segundo as direções dos eixos globais.

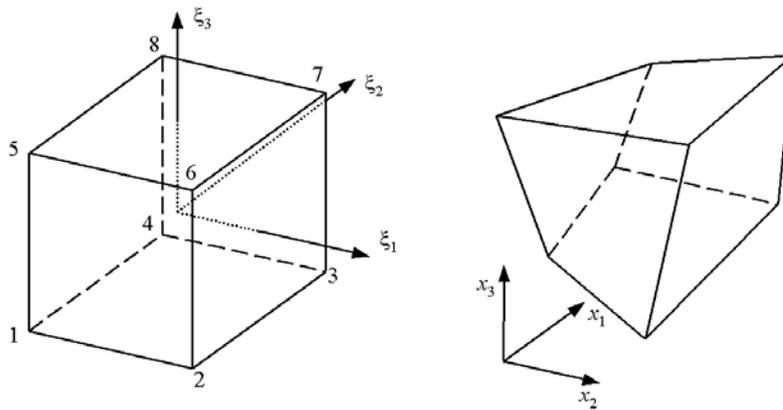


Figura 5.1- Espaço computacional e físico do elemento isoparamétrico de 8 nós

As funções de interpolação são dadas através da seguinte expressão:

$$\Phi_N = \frac{1}{8} [1 + \xi_{1N} \xi_1] [1 + \xi_{2N} \xi_2] [1 + \xi_{3N} \xi_3] \quad (5.1)$$

onde, o índice N indica o número do nó local, que varia de 1 até 8. Portanto, ξ_{1N} , ξ_{2N} e ξ_{3N}

são as coordenadas naturais do nó N e são valores conhecidos e fixos que podem ser agrupados nos seguintes arranjos:

$$\begin{aligned}\{\xi_1\}^T &= \{-1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1\} \\ \{\xi_2\}^T &= \{-1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1\} \\ \{\xi_3\}^T &= \{-1 \quad -1 \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1\}\end{aligned}\tag{5.2}$$

Vale salientar que a expressão (5.1) vem dada em forma indicial e não matricial. Assim, as funções assim obtidas são as oito funções que compõem a matriz linha descrita pela seguinte expressão:

$$[\Phi] = [\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \Phi_3 \quad \Phi_4 \quad \Phi_5 \quad \Phi_6 \quad \Phi_7 \quad \Phi_8]\tag{5.3}$$

Como já foi mencionado anteriormente, todas as variáveis de campo são interpoladas da seguinte forma:

$$f = [\Phi]\{f\}\tag{5.4}$$

ou também:

$$f = \sum_{N=1}^8 \Phi_N f_N\tag{5.5}$$

significando, o produto escalar da matriz de funções de interpolação e o vetor que contém os valores nodais de uma determinada variável de campo ou de um produto de variáveis de campo. As expressões (5.4) e (5.5) são equivalentes, sendo que a primeira foi escrita em forma matricial e a segunda em forma indicial. Como pode ser observado, para os subíndices nodais a forma indicial aqui adotada não segue a convenção de Einstein, a qual continua sendo utilizada para os subíndices que indicam componentes espaciais.

Pelo fato de tratar-se de um elemento isoparamétrico, a geometria do elemento pode ser interpolada da mesma forma a partir dos valores nodais das coordenadas espaciais, da seguinte maneira:

$$x_i = [\Phi] \{x_i\} \quad (5.6)$$

$$x_i = \sum_{N=1}^8 \Phi_N x_{iN} \quad (5.7)$$

5.2 Transformação do Domínio de Integração

As matrizes a nível de elemento, já definidas anteriormente, vêm dadas em termos das funções de interpolação e suas derivadas. Genericamente tem-se:

$$\int_{\Omega_e} F \left([\Phi], \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (5.8)$$

Entretanto, o domínio de integração será transformado do espaço físico para o espaço computacional, transformando a expressão genérica (5.8) na seguinte expressão, também genérica:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 I(\xi_1, \xi_2, \xi_3) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.9)$$

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

Sabe-se, da expressão (5.1), que:

$$\Phi_N = \Phi_N(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (5.10)$$

e da expressão (5.7), que:

$$x_i = x_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (5.11)$$

Então, pela regra da cadeia, para as funções de interpolação, tem-se:

$$\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_j} = \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad \text{com} \quad \begin{array}{l} i, j = 1, 2, 3 \\ N = 1, 2, \dots, 8 \end{array} \quad (5.12)$$

ou, em forma matricial, fica a seguinte expressão:

$$\frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_j} = \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (5.13)$$

Desenvolvendo para os subíndices espaciais i e j , segundo a convenção da soma de Einstein, pode-se expressar:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_3} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_1} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_2} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_3} \end{Bmatrix} \quad (5.14)$$

onde a matriz que contém as derivadas $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$ é a matriz jacobiana de transformação:

$$\mathbf{J} = [J_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Deve-se observar que $J_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, e considerando as expressões (5.6),

obtem-se:

$$\mathbf{J}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \begin{bmatrix} \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_1} \{x_1\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_1} \{x_2\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_1} \{x_3\} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_2} \{x_1\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_2} \{x_2\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_2} \{x_3\} \\ \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_3} \{x_1\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_3} \{x_2\} & \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_3} \{x_3\} \end{bmatrix} \quad (5.16)$$

ou também:

$$\mathbf{J}_{ij} = \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_i} \{x_j\} \quad (5.17)$$

Todavia, precisa-se expressar as derivadas $\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i}$ em função das derivadas $\frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_j}$, portanto é necessário inverter o sistema das expressões (5.12), (5.13) e (5.14), ficando então:

$$\frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} = \mathbf{J}^{-1}_{ij} \frac{\partial[\Phi]}{\partial \xi_i} \quad (5.18)$$

onde, a inversa da matriz jacobiana pode-se obter através da seguinte expressão:

$$\mathbf{J}^{-1} = \frac{\overline{\mathbf{J}}}{|\mathbf{J}|} \quad (5.19)$$

sendo, $\overline{\mathbf{J}}$ a transposta da matriz adjunta da matriz \mathbf{J} , e $|\mathbf{J}|$ é o determinante da matriz jacobiana.

Desta forma só falta expressar apenas o diferencial de volume em termos das coordenadas naturais para poder transformar as integrais da forma (5.8) em integrais da forma (5.9). Sabendo-se que o diferencial de volume em termos das coordenadas naturais fica:

$$d\Omega = |\mathbf{J}| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.20)$$

então, as expressões (5.18) e (5.20) devem ser substituídas em (5.8) para obter as integrais da forma (5.9), as quais devem ser integradas analiticamente ou numericamente.

5.3 Integração Analítica das Matrizes de Elemento

As integrais do tipo (5.9) podem ser resolvidas numericamente, utilizando o método de quadratura de Gauss–Legendre. Mas, para diminuir o tempo computacional e a área de memória necessária para a simulação, serão integradas analiticamente. Além do mais, para facilitar o trabalho com as expressões envolvidas, estas serão simplificadas utilizando um ponto de integração no centro do elemento ($\xi_1 = 0, \xi_2 = 0, \xi_3 = 0$), onde serão calculados a matriz

jacobiana e o seu determinante.

As fórmulas assim calculadas serão exatas no caso de ter uma malha de hexaedros de faces paralelas e resultarão uma boa aproximação quando os hexaedros estejam pouco distorcidos.

Segundo a expressão (5.17), calculando as derivadas $\frac{\partial[\Phi]}{\partial\xi_i}$ no centro do elemento, obtém-se a seguinte matriz Jacobiana:

$$\mathbf{J}(\mathbf{0}) = \begin{bmatrix} J_{11}(\mathbf{0}) & J_{12}(\mathbf{0}) & J_{13}(\mathbf{0}) \\ J_{21}(\mathbf{0}) & J_{22}(\mathbf{0}) & J_{23}(\mathbf{0}) \\ J_{31}(\mathbf{0}) & J_{32}(\mathbf{0}) & J_{33}(\mathbf{0}) \end{bmatrix} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} \{\xi_1\}^T \{x_1\} & \{\xi_1\}^T \{x_2\} & \{\xi_1\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_2\}^T \{x_1\} & \{\xi_2\}^T \{x_2\} & \{\xi_2\}^T \{x_3\} \\ \{\xi_3\}^T \{x_1\} & \{\xi_3\}^T \{x_2\} & \{\xi_3\}^T \{x_3\} \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

e a sua inversa:

$$\mathbf{J}^{-1}(\mathbf{0}) = \frac{\overline{\overline{\mathbf{J}(\mathbf{0})}}}{|\mathbf{J}(\mathbf{0})|} \quad (5.22)$$

onde a transposta da matriz adjunta é:

$$\overline{\overline{\mathbf{J}(\mathbf{0})}} = \begin{bmatrix} [J_{22}J_{33} - J_{23}J_{32}]_{(0)} & [J_{13}J_{32} - J_{12}J_{33}]_{(0)} & [J_{12}J_{23} - J_{13}J_{22}]_{(0)} \\ [J_{23}J_{31} - J_{21}J_{33}]_{(0)} & [J_{11}J_{33} - J_{13}J_{31}]_{(0)} & [J_{31}J_{21} - J_{11}J_{23}]_{(0)} \\ [J_{21}J_{32} - J_{22}J_{31}]_{(0)} & [J_{12}J_{31} - J_{11}J_{32}]_{(0)} & [J_{11}J_{22} - J_{12}J_{21}]_{(0)} \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

Desta maneira, tem-se tudo para integrar analiticamente as matrizes de elemento expressas no capítulo anterior. Desta forma obtém-se:

- Matriz [M]:

$$M_{MN} = \int_{\Omega_e} \Phi_M \Phi_N d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \Phi_N |\mathbf{J}(\mathbf{0})| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.24)$$

com $M, N = 1, 2, \dots, 8$

e integrando:

$$\mathbf{M}_{MN} = \frac{\Omega_e}{64} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} & \xi_{1N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} & \xi_{2N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} & \xi_{3N} \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

$$\mathbf{M}_{D,MN} = \frac{\Omega_e}{8} \delta_{MN} \quad (5.26)$$

sendo, δ_{MN} o delta de Kronecker.

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

$$\mathbf{B}_{iMN} = \int_{\Omega_e} \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \Phi_M \frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_j} \mathbf{J}_{ij}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.27)$$

e, integrando:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{iMN} = \frac{1}{8} \left\{ \overline{\mathbf{J}_{i1}(0)} \xi_{1N} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} & \xi_{2N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} & \xi_{3N} \end{bmatrix} + \right. \\ \left. + \overline{\mathbf{J}_{i2}(0)} \xi_{2N} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} & \xi_{1N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{3M} & \xi_{3N} \end{bmatrix} + \right. \\ \left. + \overline{\mathbf{J}_{i3}(0)} \xi_{3N} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{1M} & \xi_{1N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{3} \xi_{2M} & \xi_{2N} \end{bmatrix} \right\} \quad (5.28) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{iMN} = \int_{\Omega_e} \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{kM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{kM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} \mathbf{J}_{kj}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (5.29) \end{aligned}$$

com $i, j, k, h = 1, 2, 3$; $M, N = 1, 2, \dots, 8$

Nesta última expressão o fator escalar entre parêntesis $\left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{kM}^n \right)$ foi simplificado tomando as funções de interpolação no centro do elemento. Isto equivale a tomar a média dos valores nodais da variável, que por ser um valor definido para o elemento todo, pode sair da integral, simplificando a integração. A perda de exatidão será menor quanto menor for o tamanho do elemento. Integrando (5.29), fica:

$$C_{iMN} = \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{kM}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{kiMN} \quad (5.30)$$

onde,

$$a_{kiMN} = \overline{\overline{J_{kj}(0)}} \overline{\overline{J_{ih}(0)}} A_{jhMN} \quad (5.31)$$

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

$$A_{ijMN} = \left\{ \begin{array}{l} = \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(k)M} \xi_{kN} \right] \\ \dots \text{se } i \neq j, \text{ sendo: } \left\{ \begin{array}{l} \text{se } i=1 \text{ e } j=2 \rightarrow k=3 \\ \text{se } i=2 \text{ e } j=3 \rightarrow k=1 \\ \text{se } i=3 \text{ e } j=1 \rightarrow k=2 \end{array} \right. \\ \\ = \xi_{iM} \xi_{jN} \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(k)M} \xi_{kN} \right] \left[1 + \frac{1}{3} \xi_{(h)M} \xi_{hN} \right] \\ \dots \text{se } i = j, \text{ sendo: } \left\{ \begin{array}{l} \text{se } i=j=1 \rightarrow k=2 \text{ e } h=3 \\ \text{se } i=j=2 \rightarrow k=1 \text{ e } h=3 \\ \text{se } i=j=3 \rightarrow k=1 \text{ e } h=2 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (5.32)$$

onde o parêntese nos subíndices k e h indicam que não é aplicada a convenção da soma, mesmo que os índices estejam repetidos.

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

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

$$\begin{aligned} D_{ijMN} &= \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{J}_{ik}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\ &+ \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{J}_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \end{aligned} \quad (5.33)$$

Deve-se notar que $D_{ijMN} = D_{jiNM}$, ou, em forma matricial $[D]_{ij} = [D]_{ji}^T$. Então, integrando a expressão (5.33) obtém-se:

$$D_{ijMN} = \mu \frac{1}{\Omega_e} a_{ijMN} + \lambda \frac{1}{\Omega_e} a_{jiMN} \quad (5.34)$$

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:

$$\begin{aligned} D_{i(i)MN} &= \int_{\Omega_e} (2\mu + \lambda) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_{(i)}} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_k} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_k} d\Omega = \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (2\mu + \lambda) \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} \mathbf{J}_{il}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{(i)h}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\ &+ \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_l} \mathbf{J}_{kl}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{kh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \end{aligned} \quad (5.35)$$

onde, novamente, os subíndices entre parênteses não seguem a convenção da soma. Então, integrando a expressão (5.35), obtém-se:

$$D_{(i)(i)MN} = (2\mu + \lambda) \frac{1}{\Omega_e} a_{i(i)MN} + \mu \frac{1}{\Omega_e} a_{kkMN} \quad (5.36)$$

- Matriz $[K]$:

$$\begin{aligned} K_{MN} &= \int_{\Omega_e} K \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 K \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_j} \mathbf{J}_{ij}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \end{aligned} \quad (5.37)$$

que integrada resulta:

$$K_{MN} = K \frac{1}{\Omega_e} a_{iiMN} \quad (5.38)$$

- Matrizes $[E]_i$:

$$\begin{aligned}
E_{iMN} &= \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{iM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{jM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} d\Omega + \\
&+ \int_{\Omega_e} \lambda \left(\sum_{M=1}^8 \Phi_M v_{jM}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} d\Omega = \\
&= \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{iM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{J}_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mu \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{J}_{ik}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{jh}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \lambda \left(\frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_k} \mathbf{J}_{jk}^{-1} \right) \left(\frac{\partial \Phi_N}{\partial \xi_h} \mathbf{J}_{ih}^{-1} \right) |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3
\end{aligned} \tag{5.39}$$

Uma vez integrado, a matriz fica:

$$E_{iMN} = \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{iM}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{iiMN} + \mu \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{ijMN} + \lambda \left(\frac{1}{8} \sum_{M=1}^8 v_{jM}^n \right) \frac{1}{\Omega_e} a_{jiMN} \tag{5.40}$$

- Matrizes $[E^*]_i$:

$$\begin{aligned}
E_{iMN}^* &= E_{iMN} + \int_{\Omega_e} \mu \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_j} v_{iN}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega + \\
&+ \int_{\Omega_e} \lambda \left(\sum_{N=1}^8 \frac{\partial \Phi_N}{\partial x_i} v_{kN}^n \right) \frac{\partial \Phi_M}{\partial x_j} \Phi_N d\Omega = \\
&= \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{ik}^{-1} v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{jk}^{-1} v_{iN}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N \mathbf{J}_{jh}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + \\
&+ \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{lk}^{-1} v_{lN}^n \right) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{\partial \Phi_M}{\partial \xi_h} \Phi_N \mathbf{J}_{ih}^{-1} |\mathbf{J}(0)| d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 + E_{iMN}
\end{aligned} \tag{5.41}$$

Integrando, fica:

$$\begin{aligned}
E_{iMN}^* &= E_{iMN} + \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{ik}^{-1} v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{jk}^{-1} v_{iN}^n \right) \mathbf{B}_{jNM} + \\
&+ \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{lk}^{-1} v_{lN}^n \right) \mathbf{B}_{iNM}
\end{aligned} \tag{5.42}$$

Nesta última expressão, a matriz $[B]_j$ aparece com os seus subíndices nodais invertidos, indicando a transposição da matriz.

5.4 Tratamento das Integrais de Contorno

As integrais de contorno, apresentadas no capítulo anterior para fluidos não viscosos, equação (4.33), são dadas por:

$$\{\mathbf{g}\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(v_i^n \frac{\partial \mathbf{F}_j^n}{\partial x_j} \right) n_i d\Gamma \quad \text{com } i,j = 1,2,3 \quad (5.43)$$

e para fluidos viscosos, expandindo os termos viscosos e de condutibilidade térmica, obtêm-se:

$$\{\mathbf{f}_j\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \tau_{ij}^n n_i d\Gamma \quad (5.44)$$

$$\{\mathbf{q}\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T (\tau_{ij}^n v_j^n) n_i d\Gamma + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left(K \frac{\partial u^n}{\partial x_i} \right) n_i d\Gamma \quad (5.45)$$

onde, n_i são as componentes do vetor normal ao contorno, apontando para fora, e $[\Phi^*]$ é a matriz de funções de interpolação da face de contorno no elemento que pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Phi_N^* = \begin{cases} 0 & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \\ \frac{1}{4} [1 + \eta_1 \eta_{1N}] [1 + \eta_2 \eta_{2N}] & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \end{cases} \quad (5.46)$$

onde, η_1 e η_2 são as coordenadas na face de contorno do elemento, e $N = 1,2,3,\dots,8$.

Nas expressões (5.44) e (5.45), 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 um fluxo térmico através da superfície do contorno.

No capítulo anterior 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:

$$\{\mathbf{g}\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left([\Phi] \{v_k\}^n \right) n_k \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{F_i\}^n \right) d\Gamma \quad (5.47)$$

$$\{f_j\}^n = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} \{q\}^n = & \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \left([\Phi] \{v_j\}^n \right) \left[\mu \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{v_j\}^n + \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} \{v_i\}^n \right) + \lambda \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} \{v_k\}^n \right) \delta_{ij} \right] n_i d\Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T K \left(\frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} \{u\}^n \right) n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (5.49)$$

com $i, j, k = 1, 2, 3$

Entretanto, 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:

$$\{\mathbf{g}\}^n = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 v_{kN}^n \right) n_k \right] \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{ik}^{-1} \mathbf{F}_{iN}^n \right) \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.50)$$

$$\{f_j\}^n = \frac{1}{4} \tau_{ij}^n |_0 n_i \{U\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.51)$$

$$\{\mathbf{q}\}^n = \frac{1}{4} \left(v_j^n \Big|_0 \tau_{ij}^n \Big|_0 n_i \right) \{\mathcal{U}\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma + \frac{1}{4} K \left(\frac{1}{8} \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{ik}^{-1} u_N^n \right) n_i \{\mathcal{U}\} \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad (5.52)$$

onde:

$$\tau_{ij}^n \Big|_0 = \mu \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{ik}^{-1} v_{jN}^n + \sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{jk}^{-1} v_{iN}^n \right) + \lambda \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 \xi_{kN} \mathbf{J}_{lk}^{-1} v_{lN}^n \right) \quad (5.53)$$

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

$$v_j^n \Big|_0 = \frac{1}{8} \left(\sum_{N=1}^8 v_{jN}^n \right) \quad (5.54)$$

Por último:

$$\Gamma_e = \int_{\Gamma_e} d\Gamma \quad \text{com} \quad \mathcal{U}_N = \begin{cases} 1 & \text{se } N \text{ é nó de contorno} \\ 0 & \text{se } N \text{ não é nó de contorno} \end{cases} \quad (5.55)$$

sendo, Γ_e a área da face de contorno do elemento.

A Formulação Lagrangeana-Euleriana Arbitrária

6.1 Introdução

Devido ao fato de que existe uma movimentação da malha com relação ao fluido no processo de adaptação a ser implementado neste trabalho, utiliza-se uma descrição ALE, evitando com isto a interpolação dos valores das variáveis da malha antiga à malha nova.

Existem dois pontos de vista clássicos com relação a esta movimentação. O primeiro deles é a descrição Lagrangeana, na qual a malha utilizada para discretizar o domínio é solidária com o fluido e movimenta-se com ele. O segundo ponto de vista é a descrição Euleriana, na qual o fluido se movimenta enquanto a malha permanece fixa em relação ao sistema de referência.

Considera-se uma partícula representativa no ponto P_0 de um meio contínuo C , conforme Figura 6.1, numa configuração inicial, $t = 0$, definida pelas coordenadas a_i :

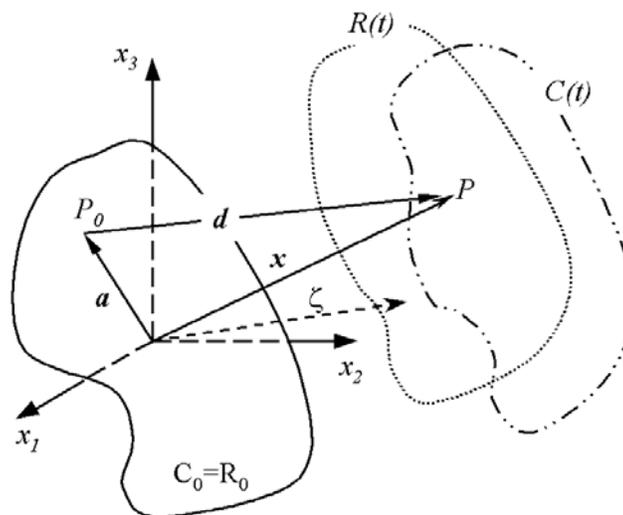


Figura 6.1- Relações cinemáticas na descrição ALE

$$a_i = (a_1, a_2, a_3) \quad (6.1)$$

As coordenadas a_i são chamadas de coordenadas materiais. A configuração deformada da partícula, originalmente em P_0 , está localizada agora no ponto P definido pelo vetor posição \mathbf{x} :

$$x_i = (x_1, x_2, x_3) \quad (6.2)$$

As coordenadas x_i , as quais definem a posição atualizada da partícula, são chamadas de coordenadas espaciais. O vetor \mathbf{d} , unindo os pontos P_0 e P , é o vetor deslocamento e pode ser expresso por:

$$d_i = x_i - a_i \quad (6.3)$$

Numa descrição Lagrangeana, o movimento do meio contínuo é representado em termo das coordenadas materiais por equações do tipo:

$$x_i = g_i(a_i, t) \quad (6.4)$$

Estas equações podem ser interpretadas como o mapeamento da configuração inicial na configuração atualizada.

Por outro lado, na descrição Euleriana, o movimento do meio contínuo é definido através das relações inversas às equações (6.4) em termo das coordenadas espaciais, como segue:

$$a_i = \hat{g}_i(x_i, t) \quad (6.5)$$

Em problemas com movimento de malha, nenhuma destas descrições tornam-se satisfatória. Utiliza-se, então, a descrição ALE, a qual representa uma generalização das duas anteriores. Nesta descrição, a malha movimenta-se segundo uma velocidade arbitrária de componentes w_i e, dependendo dos valores destas velocidades de malha, pode-se indicar o seguinte:

- Se $w_i = 0$ para todo i , a malha está fixa, correspondendo ao caso da descrição Euleriana.

- Se $w_i = v_i$ para todo i , a malha se movimenta junto com o fluido, correspondendo ao caso da descrição Lagrangeana.
- Se $w_i \neq v_i$ e $w_i \neq 0$ para todo i , então a malha se movimenta segundo uma velocidade arbitrária \mathbf{w} , correspondendo ao caso da descrição ALE

Como observa-se na Figura 6.1, na descrição ALE qualquer ponto da malha R é identificado pelo vetor posição ζ , que é expresso por equações do tipo:

$$\zeta_i = g_i^*(a_1, a_2, a_3, t) \quad (6.6)$$

A descrição ALE pode ser vista como o mapeamento da configuração inicial do meio contínuo na configuração atualizada da malha.

6.2 Equações Modificadas

Utilizando a descrição ALE, as equações de Conservação de Massa, da Quantidade de Movimento e de Energia, indicadas nas expressões (3.18) (3.19) e (3.20), resultam modificadas da seguinte maneira:

- Equação de Conservação de Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho (v_i - w_i)] + \rho \frac{\partial w_i}{\partial x_i} = 0 \quad (6.7)$$

- Equações de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial (\rho v_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho v_j (v_i - w_i)] - \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} + \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_i} = 0 \quad (6.8)$$

- Equação de Conservação de Energia:

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho e (v_i - w_i)] - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_j \tau_{ij}) + \frac{\partial (\rho v_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \frac{\partial u}{\partial x_j} \right] + \rho e \frac{\partial w_i}{\partial x_i} = 0 \quad (6.9)$$

com $i, j = 1, 2, 3$

Expandindo as derivadas onde aparecem os fatores $(v_i - w_i)$, reagrupando termos e adotando a notação vetorial, obtém-se:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{G}_i}{\partial x_i} - w_i \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i} = 0 \quad (6.10)$$

A expressão (6.10) representa em forma vetorial as Equações de Conservação utilizando uma descrição ALE para fluidos viscosos.

Para fluidos não viscosos, os termos difusivos e de condutibilidade térmica são desconsiderados, resultando na seguinte equação vetorial:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} - w_i \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i} = 0 \quad \text{com } i,j = 1,2,3 \quad (6.11)$$

6.3 Modelo Numérico

Emprega-se para o esquema de avanço no tempo e discretização no espaço o método descrito por Burbridge [1999]. Portanto, nas equações (4.22), (4.23), (4.46), (4.50), (4.51) e (4.52) adicionam-se novos termos decorrentes da movimentação da malha.

Método de Adaptação de Malhas Via Movimentos de Nós

7.1 Introdução

A precisão de um esquema numérico pode aumentar notavelmente quando um número fixo de nós da malha é dinamicamente redistribuído apenas para melhorar a região onde acontecem grandes variações na solução. Também, outra vantagem que pode ocorrer é o aumento da eficiência computacional quando se compara a solução da malha adaptada com uma malha refinada.

A estabilidade na maioria dos esquemas numéricos depende da qualidade da malha, em particular da sua *suavidade*, portanto, o processo de adaptação da malha não teria que resultar numa excessiva e descontrolada distorção da malha inicial. Com o termo *suavidade* se pretende indicar que a regularidade da malha, ou seja, o tamanho de um elemento com relação a seus vizinhos não tem que variar bruscamente.

Existem duas maneiras de fazer adaptação, como foi visto no Capítulo 2. A primeira é equidistribuindo alguma medida de erro sobre o domínio e a outra possibilidade é fazendo uso dos princípios variacionais.

Os primeiros métodos de adaptação de malha começaram com a primeira categoria, geralmente baseados em algoritmos de movimentos de nós em uma dimensão [Dwyer, 1984; Eiseman, 1985]. Os métodos de aproximação variacional não estão condicionados e, portanto, são mais promissores para a adaptação multidimensional de malhas. São baseados na minimização de uma medida de ponderação da variação de alguma quantidade da solução ou de um erro numérico sobre o domínio computacional [Brackbill *et al.*, 1982].

O método desenvolvido neste trabalho utiliza a ultima aproximação com o objetivo de alcançar o controle efetivo sobre os conflitantes requerimentos de malha regular, ortogonalidade local e adaptação.

Neste sentido, procura-se uma boa qualidade da malha para evitar algumas dificuldades, tais como:

- excessiva distorção da malha adaptada;
- falta de convergência do algoritmo que resulta freqüentemente no comportamento oscilatório durante o processo de adaptação da malha;
- excessivo agrupamento dos nós o que conduz ao colapso na malha localizada nas regiões de grandes variações da solução.

Tais inconvenientes foram relatados por Thompson [1984] para determinados métodos de adaptação de malha aplicados a problemas bidimensionais, levantando assim sérias perguntas sobre a confiabilidade dos métodos.

O presente método foi desenvolvido a partir do método variacional apresentado por Brackbill *et al.* [1982], que abrange a parte de otimização baseada nos trabalhos de Carcaillet *et al.* [1986a] e Kennon *et al.* [1986]. A análise de erro está baseada no trabalho de Ait-Ali-Yahia *et al.* [1996].

A formulação do método será mostrada para um escoamento bidimensional devido ao fato de poder enxergar mais facilmente o problema, mas o algoritmo foi desenvolvido para problemas tridimensionais. Uma vez mostrado o desenvolvimento em escoamentos bidimensionais, apresenta-se a mesma formulação, porém empregada em casos tridimensionais.

7.2 Análise

Devido às similaridades conceituais, discutiram-se primeiro o método variacional de geração da malha de Brackbill *et al.* [1982]. Neste trabalho, conseguiu-se o controle da qualidade e adaptação da malha fazendo um mapeamento, Figura 7.1, entre o espaço físico (x, y) e o espaço computacional uniformemente discretizado (ξ, η) . As propriedades diferenciais do mapeamento determinam as propriedades da malha computacional. A matriz jacobiana, J , da transformação do espaço físico para o espaço computacional determina o volume da célula computacional e a ortogonalidade da malha é dada por o escalar, $\nabla \xi \cdot \nabla \eta$, que se anula quando as linhas conjugadas da malha são ortogonais.

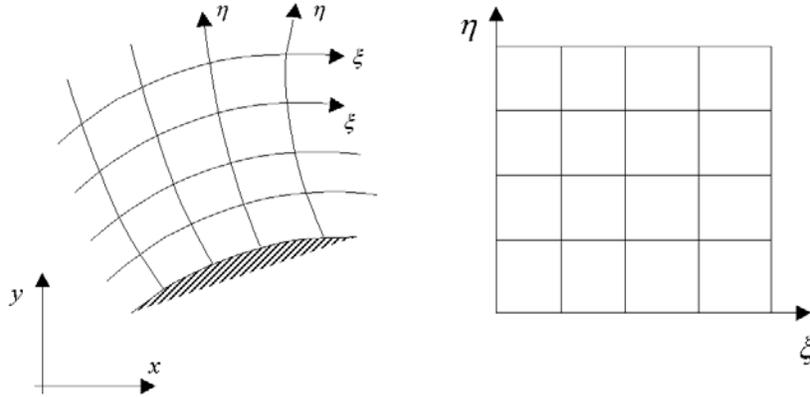


Figura 7.1 – Mapeamento entre o espaço físico e o espaço computacional

Pode-se escrever integrais que resultam em uma medida das propriedades do mapeamento sobre a malha computacional. A *suavidade* global do mapeamento que é a variação no espaço da malha ao longo das curvas de ξ e η é dada por uma integral:

$$I_S = \iint \left(\left| \nabla_{xy} \xi \right|^2 + \left| \nabla_{xy} \eta \right|^2 \right) dx dy \quad (7.1)$$

a ortogonalidade do mapeamento é medido por:

$$I_O = \iint \left(\nabla_{xy} \xi \right) \cdot \left(\nabla_{xy} \eta \right) J^3 dx dy \quad (7.2)$$

e o controle de volume por:

$$I_V = \iint w(\xi, \eta) J dx dy \quad (7.3)$$

onde w é uma função de monitoração. O operador gradiente e a matriz jacobiana são definidos por:

$$\nabla_{xy} = \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j}$$

$$J = \xi_x \eta_y - \eta_x \xi_y = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial y}$$

Sendo x e y as coordenadas no espaço físico, ξ e η as coordenadas no espaço computacional e \hat{i} e \hat{j} são os versores nas direções dos eixos x e y , respetivamente.

As coordenadas dependentes (ξ, η) e independentes (x, y) são transformadas através das seguintes equações:

$$I_S = \iint [x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2] J d\xi d\eta \quad (7.4)$$

$$I_O = \iint [x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta]^2 d\xi d\eta \quad (7.5)$$

$$I_V = \iint w(x, y) d\xi d\eta \quad (7.6)$$

onde, agora $J = (x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi)^{-1} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^{-1}$

Este problema variacional se resolve empregando a equação de Euler-Lagrange do cálculo variacional, onde a função custo total a ser minimizada fica:

$$I = I(\xi, \eta) = I_S + \lambda_o I_O + \lambda_v I_V \quad (7.7)$$

$$\lambda_o, \lambda_v \geq 0$$

onde, λ_o e λ_v são os multiplicadores de Lagrange.

O resultado da aplicação das equações de Euler-Lagrange é a obtenção de um sistema não-linear de equações diferenciais acopladas de segunda ordem em um espaço de coordenadas físicas (x, y) que foram resolvidas por Brackbill *et al.* [1982] usando iterações e discretizando em diferenças finitas.

A fim de melhorar a eficiência computacional e a confiabilidade, Carcaillet *et al.* [1986] e Kennon *et al.* [1986] adotaram uma formulação mais heurística para o problema de adaptação local. O método desenvolvido difere do método variacional já que em vez de usar diferenças finitas diretas para a representação das derivadas parciais em (7.1) e (7.2), utilizam-se outras aproximações para avaliar a *suavidade* local, ortogonalidade e controle de volume da malha.

Considera-se o problema local para otimização de uma malha computacional a qual está descrita por quatro elementos vizinhos no caso bidimensional (ou oito elementos no caso tridimensional). Utiliza-se uma célula *tipo* que é definida por todos os elementos que concorrem ao nó $P_{ij} = P(x_{ij}, y_{ij})$ que é o centro da célula, conforme Figura 7.2.

Considera-se que os pontos da malha unem-se por segmentos de linha reta, os quais ficam definidos por vetores posição que unem o ponto P_{ij} com os vizinhos imediatos:

$$r_{i+1,j} = (x_{i+1,j} - x_{i,j})\hat{i} + (y_{i+1,j} - y_{i,j})\hat{j} \quad (7.8)$$

$$r_{i,j+1} = (x_{i,j+1} - x_{i,j})\hat{i} + (y_{i,j+1} - y_{i,j})\hat{j} \quad (7.9)$$

$$r_{i-1,j} = (x_{i-1,j} - x_{i,j})\hat{i} + (y_{i-1,j} - y_{i,j})\hat{j} \quad (7.10)$$

$$r_{i,j-1} = (x_{i,j} - x_{i,j-1})\hat{i} + (y_{i,j} - y_{i,j-1})\hat{j} \quad (7.11)$$

onde \hat{i} e \hat{j} são os vetores unitários no sistema de coordenadas cartesianas nas direções x e y . A célula *tipo* é *suave* se existem mudanças mínimas de área (ou volume no caso tridimensional) de uma célula elementar à outra vizinha. A medida que quantifica a *suavidade* local da malha, $SM_{i,j}$, é formada pela soma dos quadrados das diferenças de áreas de um elemento para o próximo:

$$SM_{i,j} = (A_1 - A_2)^2 + (A_2 - A_3)^2 + (A_3 - A_4)^2 + (A_4 - A_1)^2 \quad (7.12)$$

onde A_k é uma medida da área dos k elementos, que pode aproximar-se pelo módulo do produto vetorial do vetores posição local, ou seja:

$$A_1 = \left| \left(r_{i+1,j} \times r_{i,j+1} \right) \right| = \left| x_{i+1,j} y_{i,j+1} - y_{i+1,j} x_{i,j+1} \right| \quad (7.13)$$

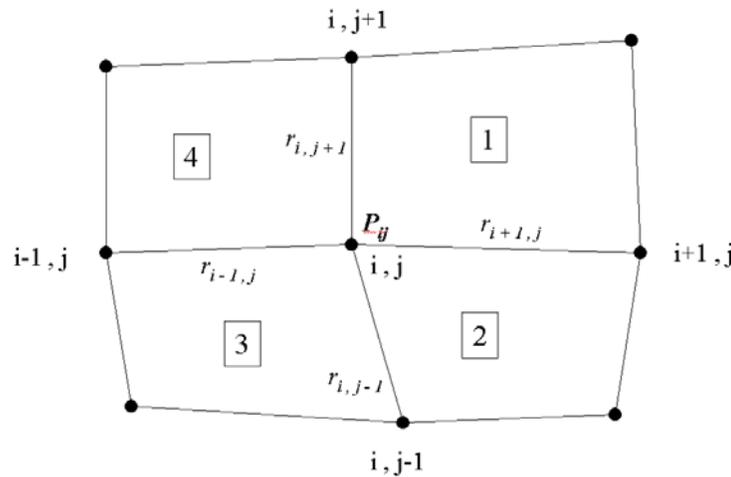


Figura 7.2 – Célula *tipo* definida para o caso bidimensional

A célula *tipo* é ortogonal se as linhas de coordenadas curvilíneas $\xi = i = \text{constante}$ e $\eta = j = \text{constante}$ interceptam P_{ij} num ângulo reto, conforme Figura 7.2. Portanto, a quantidade que resulta em uma medida da ortogonalidade local da célula *tipo* é determinada pelo produto escalar dos vetores posição que estão associados ao nó central:

$$ORT_{i,j} = (r_{i+1,j} \cdot r_{i,j+1})^2 + (r_{i,j-1} \cdot r_{i+1,j})^2 + (r_{i-1,j} \cdot r_{i,j-1})^2 + (r_{i,j+1} \cdot r_{i-1,j})^2 \quad (7.14)$$

O funcional de controle do volume para a célula *tipo* é escrito pela formula geral:

$$VOC_{i,j} = A_{ij} \cdot W_{i,j} \quad (7.15)$$

Nesta equação A_{ij} é a área da célula *tipo* (ou volume para o caso tridimensional) e $W_{i,j}$ é um valor positivo de uma função de ponderação (ou função de monitoração) apropriadamente escolhida e avaliada em P_{ij} . Esta função de peso será discutida adiante com mais detalhes. Facilmente pode-se observar na equação (7.15) que minimizar a soma de todas as células *tipo* do funcional do volume de controle farão que a célula *tipo* diminua sua área (ou volume no caso tridimensional) quando W é grande e aumente quando W é pequeno.

Uma formulação simples, que não é exata, porém mais eficiente computacionalmente foi proposta por Carcaillet *et al.*[1986], para obter $VOC_{i,j}$ considerando a célula *tipo* como um sistema de molas conectadas entre os nós. A adaptação se produz minimizando a energia de este sistema, ou seja:

$$VOC_{i,j} \approx w_1 |r_{i+1,j}|^2 + w_2 |r_{i,j+1}|^2 + w_3 |r_{i-1,j}|^2 + w_4 |r_{i,j-1}|^2 \quad (7.16)$$

Onde, as constantes das molas seriam:

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{1}{2}(W_{i,j} + W_{i+1,j}) & w_2 &= \frac{1}{2}(W_{i,j} + W_{i,j+1}) \\ w_3 &= \frac{1}{2}(W_{i,j} + W_{i-1,j}) & w_4 &= \frac{1}{2}(W_{i,j} + W_{i,j-1}) \end{aligned}$$

A função objetivo global, F , obtém-se por uma combinação linear ponderada das medidas da qualidade local da malha e do funcional de controle de volume local para cada célula *tipo*, de maneira que sobre todas as células *tipo* ficará:

$$F = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \left[\alpha \cdot \frac{ORT_{i,j}}{ORT_{\max}} + (1-\alpha) \frac{SM_{i,j}}{SM_{\max}} + \beta \cdot VOC_{i,j} \right] \quad (7.17)$$

onde, α e β são parâmetros de ponderação que permitem controlar a *suavidade* da malha e ortogonalidade local no caso de otimização estática, $\beta = 0$, ou de adaptação, $\beta \neq 0$. Este parâmetros variam entre:

$$0 \leq \alpha \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq \beta \leq 1$$

sendo: $ORT_{\max} = \max_{i,j} [ORT_{i,j}]$ e $SM_{\max} = \max_{i,j} [SM_{i,j}]$

na expressão (7.17).

No caso do parâmetro β as melhores adaptações da malha sempre são conseguidas com $\beta = 1.0$. Normaliza-se $SM_{i,j}$ e $ORT_{i,j}$ por seu valor máximo para assegurar que cada medida seja do mesmo ordem de magnitude na expressão de F em (7.17).

A função objetivo global pode-se reescrever como função do vetor \mathbf{T} contendo as coordenadas físicas de todos os nós da malha e ordenados naturalmente:

$$\mathbf{T} = \left\{ (x_{ij}, y_{ij}) : 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n \right\} \quad (7.18)$$

onde, m e n são a quantidade de nós na direção i e j , respectivamente. Desta forma, pode-se escrever que na expressão (7.17), $F = F(\mathbf{T})$.

A minimização sem restrições da função $F(\mathbf{T})$, de $2 \times m \times n$ variáveis, realiza-se usando o método de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves [Press *et al.*, 1992].

Empregou-se para caso tridimensional a medida de *suavidade* e ortogonalidade proposta por Kennon *et al.* [1986]. A medida de suavidade local está dada pela distância relativa entre o nó da malha e seus vizinhos e apresentada pela seguinte expressão:

$$SM_{i,j,k} = (r_{i+1,j,k} \cdot r_{i+1,j,k}) + (r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j-1,k}) + (r_{i-1,j,k} \cdot r_{i-1,j,k}) + (r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j+1,k}) + (r_{i,j,k+1} \cdot r_{i,j,k+1}) + (r_{i,j,k-1} \cdot r_{i,j,k-1}) \quad (7.19)$$

Enquanto que a medida de ortogonalidade local fica:

$$\begin{aligned}
ORT_{i,j,k} = & \left(r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j+1,k} \right)^2 + \left(r_{i,j-1,k} \cdot r_{i+1,j,k} \right)^2 + \left(r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j-1,k} \right)^2 + \left(r_{i,j+1,k} \cdot r_{i-1,j,k} \right)^2 + \\
& + \left(r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j,k-1} \right)^2 + \left(r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j,k-1} \right)^2 + \left(r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j,k-1} \right)^2 + \left(r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j,k-1} \right)^2 + \\
& + \left(r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j,k+1} \right)^2 + \left(r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j,k+1} \right)^2 + \left(r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j,k+1} \right)^2 + \left(r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j,k+1} \right)^2
\end{aligned} \tag{7.20}$$

Na Figura 7.3 mostra-se a célula *tipo* para o caso tridimensional.

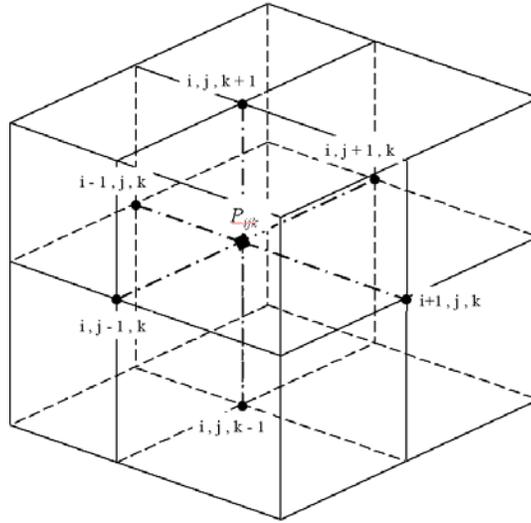


Figura 7.3 – Célula *tipo* definida para o caso tridimensional

7.3 Método de Gradiente Conjugado

Geralmente o método de gradiente conjugado é usado para encontrar o mínimo de funções quadráticas de n variáveis em n iterações, porém pode ser usado também para funções gerais.

A função objetivo, F , para o caso tridimensional é uma função polinomial de ordem maior que dois e, portanto, com a finalidade de otimizar o uso do método de minimização, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
F(x_p, y_p, z_p) = & a_1 x_p^2 + a_2 y_p^2 + a_3 z_p^2 + a_4 x_p y_p + a_5 x_p z_p + a_6 y_p z_p + \\
& + a_7 x_p + a_8 y_p + a_9 z_p + a_{10}
\end{aligned}$$

onde, os coeficientes de F são funções do tipo:

$$\begin{aligned}
a_1 &= f(x_p^2, y_p^2, z_p^2, x_p, y_p, z_p, x_i, y_i, z_i); & a_6 &= f(x_i, y_i, z_i); \\
a_2 &= f(x_p^2, y_p^2, z_p^2, x_p, y_p, z_p, x_i, y_i, z_i); & a_7 &= f(y_p^2, z_p^2, x_i, y_i, z_i); \\
a_3 &= f(x_p^2, y_p^2, z_p^2, x_p, y_p, z_p, x_i, y_i, z_i); & a_8 &= f(x_p^2, z_p^2, x_i, y_i, z_i); \\
a_4 &= f(x_i, y_i, z_i); & a_9 &= f(x_p^2, y_p^2, x_i, y_i, z_i); \\
a_5 &= f(x_i, y_i, z_i); & a_{10} &= f(x_i, y_i, z_i);
\end{aligned}$$

sendo x_p, y_p, z_p as coordenadas do nó P_{ijk} , e x_i, y_i, z_i as coordenadas do nó i , que varia de 1 até o número total de nós da malha.

Agora pode-se considerar o problema de minimização de uma função quadrática, ou seja:

$$\text{Minimizar } q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad (7.21)$$

onde, \mathbf{A} é uma matriz simétrica e positiva definida. Define-se as direções conjugadas, ou direções que são mutuamente conjugadas com relação à matriz \mathbf{A} , como vetores \mathbf{d} que satisfazem as condições seguintes:

$$\mathbf{d}_i^T \mathbf{A} \mathbf{d}_j = 0, \quad i \neq j, \quad 0 \leq i \text{ e } j \leq n \quad (7.22)$$

O método das direções conjugadas funciona da seguinte maneira: inicia-se com o ponto inicial \mathbf{x}_0 e um conjunto de direções principais $\mathbf{d}_0, \mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_{n-1}$. Minimiza-se $q(\mathbf{x})$ ao longo de \mathbf{d}_0 para obter \mathbf{x}_1 . Então com \mathbf{x}_1 , minimiza-se $q(\mathbf{x})$ ao longo de \mathbf{d}_1 para obter \mathbf{x}_2 . Finalmente, minimiza-se $q(\mathbf{x})$ ao longo de \mathbf{d}_{n-1} para obter \mathbf{x}_n . O ponto \mathbf{x}_n é a solução mínima. A convergência obtém-se para n iterações quando se tem uma função quadrática. No algoritmo, o gradiente de $q(\mathbf{x})$ é empregado para gerar as direções conjugadas.

Denota-se com \mathbf{g} o gradiente de $q(\mathbf{x})$, com $\mathbf{g}_k = \nabla q(\mathbf{x}_k) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_k + \mathbf{c}$, sendo \mathbf{x}_k o ponto corrente, com o sub-índice k indicando o número da iteração. A primeira direção \mathbf{d}_0 determina-se através da direção de descida mais pronunciada (*steepest descent direction*) - \mathbf{g}_0 . Sendo assim, para achar o novo ponto \mathbf{x}_{k+1} minimiza-se $q(\mathbf{x})$ ao longo de \mathbf{d}_k . Deste modo, tem-se:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \quad (7.23)$$

onde α_k é obtido através da busca em linha, minimizando $f(\alpha) = q(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$. Fazendo $dq(\alpha)/d\alpha = 0$, tem-se:

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k} \quad (7.24)$$

Também a condição exata de busca em linha $dq(\alpha)/d\alpha = 0$ é dada por:

$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_{k+1} = 0 \quad (7.25)$$

Uma etapa importante é escolher \mathbf{d}_{k+1} da seguinte maneira:

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k \quad (7.26)$$

Isto representa um desvio na direção de descida mais pronunciada (*steepest descent direction*) $-\mathbf{g}_{k+1}$ como é mostrado na Figura 7.4. Exigindo que \mathbf{d}_{k+1} seja conjugado de \mathbf{d}_k , ou $\mathbf{d}_{k+1}^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k = 0$, tem-se que satisfazer:

$$\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k + \beta_k \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k = 0 \quad (7.27)$$

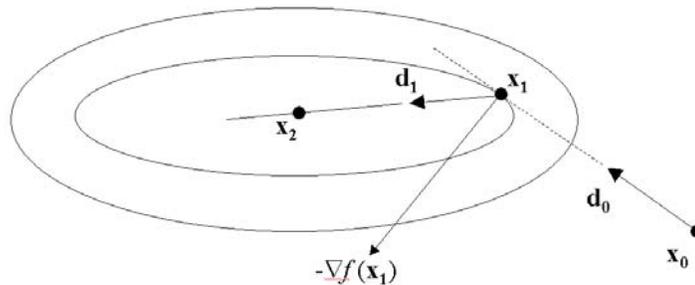


Figura 7.4 – Direções conjugas para uma equação quadrática de 2 variáveis.

A partir da equação (7.23), $\mathbf{d}_k = (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)/\alpha_k$, e portanto, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{d}_k = (\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)/\alpha_k$. A equação (7.27) agora fica:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^T (\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)}{\alpha_k \mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k} \quad (7.28)$$

Usando a equação (7.25) e (7.26) com k substituído por $(k-1)$ tem-se:

$$\mathbf{d}_k^T \mathbf{g}_k = -\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k \quad (7.29)$$

Portanto, a equação (7.24) fica:

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{A} \mathbf{d}_k} \quad (7.30)$$

Substituindo α_k na condição prévia dada pela equação (7.28) tem-se:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^T (\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k} \quad (7.31)$$

Considerando, que:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_k &= \mathbf{g}_{k+1}^T (-\mathbf{d}_k + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}) = \beta_{k-1} \mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{d}_{k-1} \\ &= \beta_{k-1} (\mathbf{g}_k^T + \alpha_{k-1} \mathbf{d}_k^T \mathbf{A}) \mathbf{d}_{k-1} = 0 \end{aligned}$$

obtém-se a versão de Fletcher-Reeves, onde:

$$\beta_k = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k} \quad (7.32)$$

Como se trata de um processo iterativo tem-se dois critérios de convergência, os quais são:

- antes de começar a busca em linha, verifica-se a condição necessária para o ótimo:

$$\|\nabla q(\mathbf{x}_k)\| \leq \varepsilon_G \quad (7.33)$$

onde ε_G é a tolerância do gradiente e é dado pelo usuário. Este critério satisfaz-se quando o processo finaliza porque o gradiente desaparecerá em um ponto de extremo local.

- também verificam-se as reduções sucessivas em q com o seguinte critério de convergência:

$$\left| q(\mathbf{x}_{k+1}) - q(\mathbf{x}_k) \right| = \varepsilon_A + \varepsilon_R \left| q(\mathbf{x}_k) \right| \quad (7.34)$$

onde ε_A é a tolerância absoluta na mudança do valor da função, e ε_R é a tolerância relativa. Para ε_A adota-se 10^{-4} , enquanto que para ε_R considera-se, 10^{-2} . Somente quando a equação (7.34) é satisfeita para duas iterações consecutivas se considera a finalização do processo.

Nota-se que para ter-se um critério de finalização robusto, verifica-se o gradiente e a função. Também impõe-se um o limite no número de iterações.

Os passos do processo computacional do gradiente conjugado de Fletcher-Reeves pode-se resumir no fluxograma da Tabela 7.1

Tabela 7.1 – Fluxograma do método de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves

<p>Início</p> <p>com $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ e ponto inicial \mathbf{x}_0</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 1. SE $\ \nabla q(\mathbf{x}_k)\ \leq \varepsilon_G$ FAÇA: 2. compute-se $\mathbf{d}_k = \nabla q(\mathbf{x}_k)$ 3. determina-se α_k da equação (7.30) e com este \mathbf{x}_{k+1} da equação (7.23) 4. determina-se β_k da equação (7.32) e a nova direção \mathbf{d}_{k+1} com equação (7.26) 5. SE a condição (7.34) não se satisfaz: retorna-se ao passo 1 <p>Fim</p> <hr/>

7.4 Determinação da Função de Peso ou de Monitoração

O objetivo final do processo de adaptação é predizer as características da malha *ótima*. Esta pode ser definida como a malha na qual o número de graus de liberdade requeridos para atingir um nível específico de exatidão é mínimo. Portanto, a escolha da função de peso, W , do funcional de controle de volume é muito importante já que este tem que indicar as regiões onde deve-se fazer a adaptação da malha. Ou seja, desta escolha dependerá a maior ou menor eficiência do método.

Sabe-se do trabalho de Babuška e Rheinboldt [1978], que quando nós são adicionados na malha original, o caminho para melhorar a exatidão numérica é adicionar os mesmos somente

nas regiões de fortes gradientes. Finalmente, foi provado no caso unidimensional por Brackbill *et al.* [1982], que aumentar a resolução dos gradientes reduz o erro numérico.

Portanto, intuitivamente se pensaria que a função de monitoração teria que responder ao gradiente de alguma variável que controle o fenômeno, podendo ser para um escoamento de fluidos compressíveis o gradiente da massa específica, e para um problema de camada limite, o gradiente da velocidade; mas isto não garante que se aumente a exatidão na solução.

Outro critério é definir um tipo de erro e tomar este como função de peso, como é apresentado no trabalho de Demkowicz e Oden [1986], o qual fez uma apropriada escolha de W em termos da norma do erro, e o processo de adaptação variacional minimiza uma aproximação do erro local interpolado.

Porém, em situações práticas, existem alguns fatores que fazem com que atingir a malha *ótima* seja extremamente difícil. Alguns destes fatores são:

- o conceito de ótimo está intimamente ligado com a exatidão, não tendo uma única definição. Por isso, para definir o ótimo de uma malha necessita-se estabelecer uma norma ou a uma medida de erro.
- Finalmente, as estimativas de erro produzidas são baseadas na solução computacional e portanto dependerão da mesma.

Em vista destas observações e limitações, desenvolveu-se uma estratégia heurística de adaptação, empregando o critério de erro. Estima-se o erro direcional para o esquema de movimento de malha baseado nos trabalhos de Ait-Ali-Yahia *et al.* [1996, 1997], mas este não preserva a restrição na ortogonalidade, e portanto as malhas obtidas têm uma importante anisotropia.

Esta estratégia usa uma estimativa de erro, a qual está baseada em conceitos da teoria da interpolação. As vantagens de usar indicadores de erro direcionais torna-se evidente quando se considera a natureza da solução em escoamentos com ondas de choques, de modo que estas características podem mais facilmente representar uma malha na qual existem *alongamentos* em direções específicas. Embora que esta estimativa do erro não tenha uma dedução matemática rigorosa, atingiu-se sucessos consideráveis, fazendo uso da mesma em situações práticas [Taghaddosi *et al.*, 1999; Ait-Ali-Yahia *et al.*, 2002; Dompierre *et al.*, 2002].

7.4.1 Estimativa do erro

As estimativas exatas do erro são freqüentemente difíceis de obter para problemas complexos e/ou custosas de avaliar. Portanto, aceita-se uma estimativa menos precisa, mas computacionalmente simples a fim de melhorar a adaptação. Devido a que a estimativa de erro somente serve como um indicativo do erro relativo entre malhas sucessivas, não deve levar mais que uma porcentagem pequena do tempo total da solução.

Neste ponto, mostra-se um simples e eficiente método que estima o erro, o mesmo é derivado da teoria de interpolação de elementos finitos. Para elementos lineares, se conhece através da fórmula de erro de Lagrange que o termo do erro é proporcional à segunda derivada. Por causa da simplicidade, a derivação da estimativa do erro se faz para o problema unidimensional de uma variável escalar (*variável chave*) e a partir destes resultados se generaliza para os casos bidimensionais e tridimensionais.

Quando se resolve a equação de Euler, a *variável chave* é identificada e então a adaptação da malha é baseada na análise de erro desta única variável. A escolha da melhor variável para usar como *variável chave* é uma pergunta que tem resposta de acordo com o tipo de problema que se estuda, podendo ser o número de Mach, M , a pressão, p , ou a massa específica, ρ , para um problema de escoamento de fluidos compressíveis, enquanto que para a camada limite a melhor escolha seria a velocidade, v . Como o foco de estudo neste trabalho são os problemas de escoamentos compressíveis, escolhe-se a massa específica devido ao fato de que é uma variável primitiva. Além do mais, com a mesma pode-se determinar p , utilizando a equação de estado dos gases perfeitos. Finalmente, não se escolhe o número de Mach, M , devido ao fato de resultar do campo de velocidades. Além disso, a equação de conservação de massa não tem termos difusivos, portanto, para escoamentos compressíveis a massa específica é a variável mais adequada para o tratamento de ondas de choque.

Considera-se um problema unidimensional no qual a solução da variável ρ é aproximada por ρ_h , usando uma função de interpolação lineal. O erro local E_e define-se sobre um elemento e , como:

$$E_e(\xi) = \rho(\xi) - \rho_h(\xi) \quad (7.35)$$

Se a solução exata é uma função linear, então o erro seria nulo devido ao tipo de função de interpolação empregada. Além disso, se a solução exata é não linear, mas é suave, então esta pode representar-se para alguns ordem de precisão usando funções de interpolação polinomiais.

Para uma aproximação de primeira ordem, o erro E_e sobre um elemento pode-se obter através da diferença entre a solução com um elemento finito usando funções de interpolação quadráticas e a solução computada usando funções de interpolação lineares. Para obter uma aproximação quadrática teria obviamente que se resolver um novo problema com funções de interpolação quadráticas. Este procedimento, embora possível, não é aconselhável devido a que se tem um maior custo computacional em comparação com o problema original. Uma alternativa para estimar uma aproximação quadrática a partir de elementos finitos lineares é empregada. Assume-se que os valores nodais das aproximações lineares e quadráticas coincidem, ou seja, o valor nodal do erro é nulo. Portanto, uma solução quadrática pode-se construir em cada elemento, uma vez que o valor da segunda derivada é conhecido. Expandindo a solução ρ desde a extremidade do elemento e e considerando que o erro nodal é zero, o erro E_e sobre um elemento com interpolação linear pode-se escrever como:

$$E_e = \frac{1}{2} \xi (h_e - \xi) \left. \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e \quad (7.36)$$

onde, h_e representa o comprimento do elemento e ξ é a coordenada local do elemento, conforme Figura 7.5. Esta solução aproximada é exata para os nós. O erro total sobre o elemento no intervalo $[0, h_e]$ determina-se através da raiz media quadrática (*rms*) e é definido por Peraire *et al.* [1987], com sendo:

$$E_e^{rms} = \left\{ \int_0^{h_e} \frac{E_e^2}{h_e} d\xi \right\}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{120}} h_e^2 \left. \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e \quad (7.37)$$

Portanto, o erro de interpolação deste problema unidimensional é proporcional ao produto da derivada segunda e ao quadrado do comprimento característico do elemento h_e .

Portanto, a malha ótima é definida como a malha na qual a *rms* é equidistribuída sobre todo o elemento, isto é,

$$h_e^2 \left| \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e = C \quad (7.38)$$

onde, C denota uma tolerância especificada pelo usuário (constante e positiva).

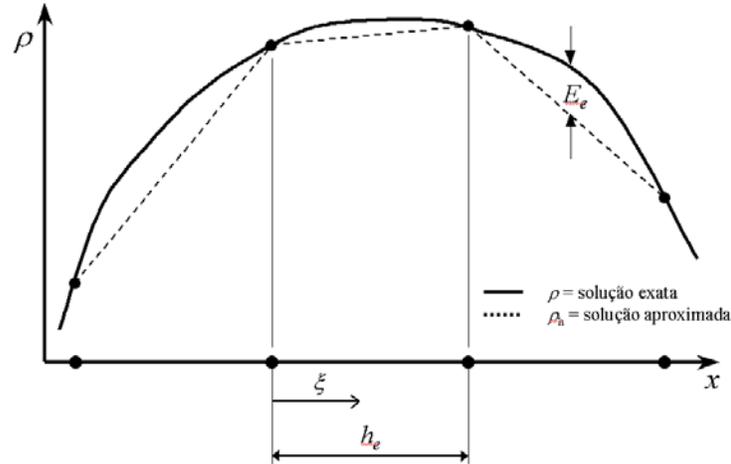


Figura 7.5 – Aproximação do erro com caso unidimensional

A metodologia mostrada acima é estendida para o caso de elementos multidimensionais, devido a que o contorno de cada elemento bidimensional pode ser considerado como um elemento unidimensional. A segunda derivada de ρ_h é agora considerada com relação a uma direção definida pelo vetor unitário \mathbf{V} , como segue:

$$\frac{\partial^2 \rho_h}{\partial \mathbf{V}^2} = \mathbf{V}^T \mathbf{H} \mathbf{V} \quad (7.39)$$

onde, \mathbf{H} representa a matriz Hessiana de ρ_h que tem a seguinte forma:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial y^2} \end{bmatrix} \quad (7.40)$$

Devido a que ρ_h é linear, a derivada segunda não pode representar-se. Portanto, para restaurar uma estimativa contínua da derivada segunda emprega-se uma formulação fraca [Ait-Ali-Yahia *et al.*, 1996], porém combinada com uma massa discreta ou diagonalizada, obtendo-se os valores nodais, seguintes:

$$\left. \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x_j^2} \right|_I = \frac{\left[-\int_{\Omega_I} \left(\frac{\partial \phi^T}{\partial x_j} \phi \right) d\Omega \right] \left(\frac{\partial \rho_h}{\partial x_i} \right) + \left[\int_{\Gamma_I} \phi^T \phi n_j d\Gamma \right] \left(\frac{\partial \rho_h}{\partial x_i} \right)}{\left[\int_{\Omega_I} \phi^T \phi d\Omega \right]} \quad (7.41)$$

com $I = 1, \dots, Nnos$ e $i, j = 1, 2, 3$

onde, $Nnos$ é o número total de nós da malha, ϕ é um vetor contendo as funções de forma, Ω_I é a área (ou volume no caso tridimensional) dos elementos que compartilham o nó I , sendo Γ_I os contornos desses elementos. As derivadas $\partial \rho_h / \partial x_i$ são os valores nodais da derivada primeira nos elementos considerados, e obtidos através de um processo de suavização baseado no método dos mínimos quadrados.

A matriz \mathbf{H} pode-se diagonalizar da seguinte maneira:

$$\mathbf{H} = \mathbf{R}(\alpha) \mathbf{A} \mathbf{R}^T(\alpha) \quad (7.42)$$

onde, \mathbf{A} é a matriz diagonal dos valores próprios de \mathbf{H} , e \mathbf{R} é a matriz dos vetores próprios. A transformação $|\mathbf{A}|$ é o valor absoluto das derivadas segundas na direções dos eixos obtidos por uma rotação de um ângulo α com respeito aos eixos originais x_1 e x_2 , fazendo corresponder o menor autovalor λ_1 com o eixo x_I . Esta rotação se operacionaliza através da matriz de rotação $\mathbf{R}(\alpha)$, e elimina as derivadas segundas cruzadas.

Devido a que o erro deve ser positivo, a segunda derivada de ρ_h em qualquer direção é limitada por:

$$\left| \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x^2} \right| = |\mathbf{V}^T \mathbf{H} \mathbf{V}| \leq \mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V} \quad (7.43)$$

onde, a matriz Hessiana modificada $\bar{\mathbf{H}}$ é uma matriz simétrica e positiva definida, que foi obtida considerando os valores absolutos dos autovalores da matriz Hessiana \mathbf{H} , ou seja, que $\bar{\mathbf{H}}$ vem dada por:

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{R}(\alpha) |\mathbf{A}| \mathbf{R}^T(\alpha) = \mathbf{S}(\alpha) \mathbf{S}^T(\alpha) \quad (7.44)$$

onde, $\mathbf{S}(\alpha) = \mathbf{R}/\sqrt{|\mathbf{A}|}$, conforme Strange [1988]. A transformação \mathbf{S} de um círculo de raio unitário seria uma elipse, girada em um ângulo α e cujos eixo maior e eixo menor são os recíprocos da raiz quadrada dos autovalores $|\lambda_1|$ e $|\lambda_2|$, respectivamente, conforme indicado pela Figura 7.6. Então, pode-se obter um movimento direcional da malha mapeando uma malha uniforme através da transformação $\mathbf{S}(\alpha)$. No caso tridimensional, a esfera de raio unitário transforma-se em um elipsoide.

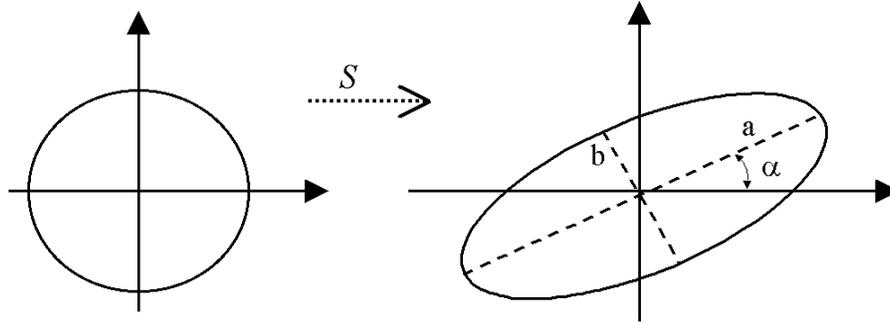


Figura 7.6 – Transformação $\mathbf{S}(\alpha)$ no caso bidimensional

O critério de adaptação unidimensional dado em (7.38) pode ser reescrito para um problema bidimensional ou tridimensional como:

$$h_e^2 \mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V} = C \quad (7.45)$$

No método desenvolvido, o erro é equidistribuído sobre o contorno do elemento, onde $h_e = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|$ representa a medida Euclédiana do comprimento de um elemento de extremidades $[x_i, x_j]$ e $\mathbf{V} = (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)/h_e$ é o vetor de base unitário. O termo $\mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V}$ na equação (7.45) é definido como a métrica de Riemann.

Levando em conta as equações (7.44) e (7.45) tem-se:

$$(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \bar{\mathbf{H}} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = [(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \mathbf{R}(\alpha) \sqrt{|\mathbf{A}|}] \cdot [\sqrt{|\mathbf{A}|} \mathbf{R}^T(\alpha) (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T] = C \quad (7.46)$$

Portanto, uma malha ótima é definida como aquela na qual o comprimento de todos os contornos na métrica definida é igual a \sqrt{C} . O princípio de equidistribuição é aplicado para um comprimento d na métrica de Riemann, lembrando que $\bar{\mathbf{H}}$ é função das coordenadas espaciais, e que então é necessário integrar ao longo do comprimento do lado.

Portanto, a estimativa baseada no erro é computada avaliando numericamente a seguinte fórmula para cada contorno da malha:

$$d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \bar{\mathbf{H}}_m (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (7.48)$$

sendo $\bar{\mathbf{H}}_m$ o valor médio, obtido através dos valores de $\bar{\mathbf{H}}$ nos extremos do contorno considerado.

Esta estimativa do erro baseado no contorno do elemento é calculada em cada nó somando os valores de d^2 que concorrem a esse nó e é válido para toda a célula *tipo*; como as mesmas tem diferentes tamanhos, toma-se o valor de d^2 por unidade de volume. Isto faz com que a ênfase da medição do erro seja maior nos elementos menores durante o processo de adaptação, já que isto é consistente com o fato de que a distorção da malha devido ao termo correspondente ao volume de controle (*VOC*) é mais provável de aparecer na região de grandes variações da solução, ou seja, em zonas onde os elementos serão menores. Portanto, um controle de qualidade mais cuidadoso é requerido nestas regiões. Além disso, isto impede que as regiões com pouca variação da solução fiquem sem nós. Tem que se notar que o escalar $d(x_i, x_j)$ representa o erro na direção do contorno em que é determinado.

Finalmente, neste trabalho, o funcional *VOC* a ser minimizado na função F , equação (7.17), é definido como d^2 por unidade de volume em lugar da equação (7.16) proposta por Carcaillet *et al.*[1986].

Características Gerais do Código

8.1 Introdução

Neste capítulo serão apresentadas algumas das principais características do código computacional desenvolvido neste trabalho. Inicialmente, utilizou-se um código desenvolvido por Burbridge [1999] para escoamentos compressíveis tridimensionais. O programa está codificado na linguagem FORTRAN e vetorizado para aproveitar as características dos supercomputadores vetoriais Cray.

No código original, acrescentou-se a formulação necessária para produzir a adaptação da malha para problemas de escoamentos com ondas de choque.

8.2 Convergência do Processo Iterativo

A análise de convergência do processo iterativo é realizada considerando-se a convergência na média das variáveis de campo U através das seguintes expressões:

$$r_{i+1}^{\rho} = \frac{\sqrt{\sum_{Nnos} |\rho_{i+1} - \rho_i|^2}}{\sqrt{\sum_{Nnos} \rho_i^2}} \quad (8.1)$$

$$r_{i+1}^{\rho v} = \frac{\sqrt{\sum_{Nnos} |\rho v_{i1+1} - \rho v_{i1}| |\rho v_{i1+1} - \rho v_{i1}|}}{\sqrt{\sum_{Nnos} \rho v_{i1} \rho v_{i1}}} \quad (8.2)$$

$$r_{i+1}^{\rho e} = \frac{\sqrt{\sum_{Nnos} |\rho e_{i+1} - \rho e_i|^2}}{\sqrt{\sum_{Nnos} \rho e_i^2}} \quad (8.3)$$

onde, $Nnos$ é o número total de nós da malha.

O processo iterativo atinge a convergência quando satisfaz-se as condições $r_{1+1}^p \leq TOL$, $r_{1+1}^{pv} \leq TOL$ e $r_{1+1}^{pe} \leq TOL$, sendo TOL uma certa tolerância definida pelo usuário.

8.3 Resíduo e Estado Estacionário

O encerramento do processo de solução ocorre quando o tempo atinge um limite máximo previamente estabelecido pelo usuário, ou quando o escoamento atinge o estado estacionário antes de ser alcançado aquele tempo máximo. Considera-se que o estado estacionário é atingido quando o resíduo temporal médio, definido segundo a expressão:

$$R^{n+1} = \sqrt{\sum_{N_{nos}} |\rho^{n+1} - \rho^n|^2} \quad (8.3)$$

permanece abaixo de uma certa tolerância definida pelo usuário, ou atinge um número de passos de tempo também definida pelo usuário.

8.4 Condições de Contorno Sólido para Fluidos Não Viscosos

Em escoamentos de fluidos não viscosos, a condição de não deslizamento nos contornos sólidos é desconsiderada, o que significa que nestes contornos a velocidade não é necessariamente nula. Somente a componente normal ao contorno é forçosamente nula. Portanto, nos nós de contorno sólido a velocidade é calculada da mesma forma que no resto do domínio. Posteriormente, decompõe-se o vetor velocidade numa componente tangente ao contorno, e outra componente normal ao mesmo. Finalmente, impõe-se que esta última seja nula.

Supondo conhecidos os vetores normais aos contornos sólidos, em cada um dos nós destes contornos tem-se conforme à Figura 8.1, o vetor V que é o vetor velocidade antes de aplicar as condições de contorno no nó de contorno sólido N , sendo π o plano tangente ao contorno no nó N ; V_n é a componente normal da velocidade, V_τ é a componente tangencial localizada no plano π e n é o vetor normal ao contorno no nó N .

Então, uma vez calculada a velocidade V , deve-se forçar a seguinte condição nos nós de contorno sólido:

$$V_n = \mathbf{0} \Rightarrow V = V_\tau \quad (8.4)$$

A componente V_τ pode ser calculada definindo os vetores τ_1 e τ_2 através do seguinte produto vetorial:

$$\tau_1 = \mathbf{V} \times \mathbf{n} \quad (8.5)$$

$$\tau_2 = \mathbf{n} \times \tau_1 \quad (8.6)$$

sendo estes vetores mostrados na Figura 8.1.

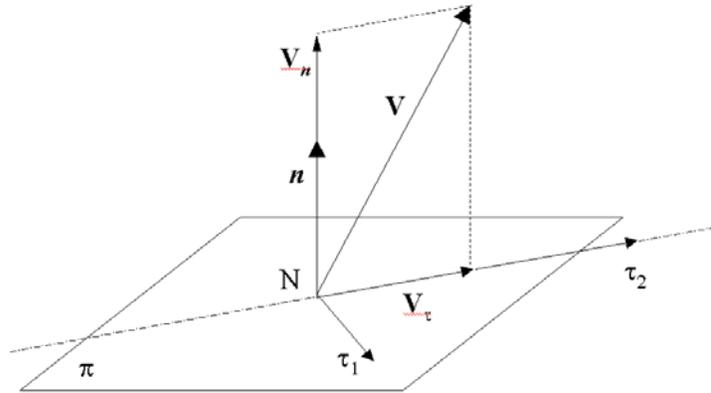


Figura 8.1: Componentes de velocidade nos contornos sólidos

Assim, sendo V_τ a projeção tangencial do vetor V sobre τ_2 , resulta:

$$\mathbf{V}_\tau = \frac{\mathbf{n} \cdot \tau_2}{\tau_2 \cdot \tau_2} \tau_2 \quad (8.7)$$

onde, o símbolo (\cdot) indica um produto escalar. Então, as condições de contorno (8.4) são aplicadas substituindo o vetor V por sua componente tangencial.

8.5 Condições de Contorno Sólido para Fluidos Viscosos

Em escoamentos envolvendo fluidos viscosos, considera-se que as partículas de fluido em contato com os contornos sólidos são solidárias aos mesmos, sendo esta condição conhecida na terminologia em inglês pelo nome de *non slip condition*. Em problemas nos quais os contornos sólidos não se movimentam, esta condição resume-se na seguinte expressão:

$$\mathbf{V} = \mathbf{0} \quad (8.8)$$

usada nos nós de contorno sólido.

8.6 Aplicação do Método Adaptativo

No código de escoamentos compressíveis tridimensionais foi acoplado o método de adaptação, apresentado no Capítulo 7.

No código desenvolvido, o usuário determina em que tempo (I_{adap}) o método adaptativo tem que ser empregado. Como se deduz, este critério é prático, mas adiciona outro parâmetro no processo. Uma boa alternativa para evitar o uso de I_{adap} seria usar o coeficiente de amortecimento fictício, ou seja, se adaptaria a malha sucessivamente até atingir o coeficiente de amortecimento fictício prescrito pelo usuário.

A adaptação sempre inicia-se quando o resíduo tem pouca variação, e uma vez concluído o processo de adaptação, continua-se aplicando o MEF até atingir a convergência final.

As novas coordenadas da malha obtêm-se depois de aplicar um coeficiente de relaxação (θ_x , θ_y e θ_z) nos incrementos Δx , Δy e Δz , para cada uma das direções. Os coeficientes de relaxação variam em um intervalo de 0 a 1 de maneira de evitar excessivos deslocamento dos nós. Os incrementos são determinados pela diferença das coordenadas novas e antigas, nas três direções. Portanto, a nova posição das coordenadas é determinada pela seguinte expressão:

$$x_i^{m+1} = x_i^m + \theta_x \Delta x_i \quad (8.9)$$

$$y_i^{m+1} = y_i^m + \theta_y \Delta y_i \quad (8.10)$$

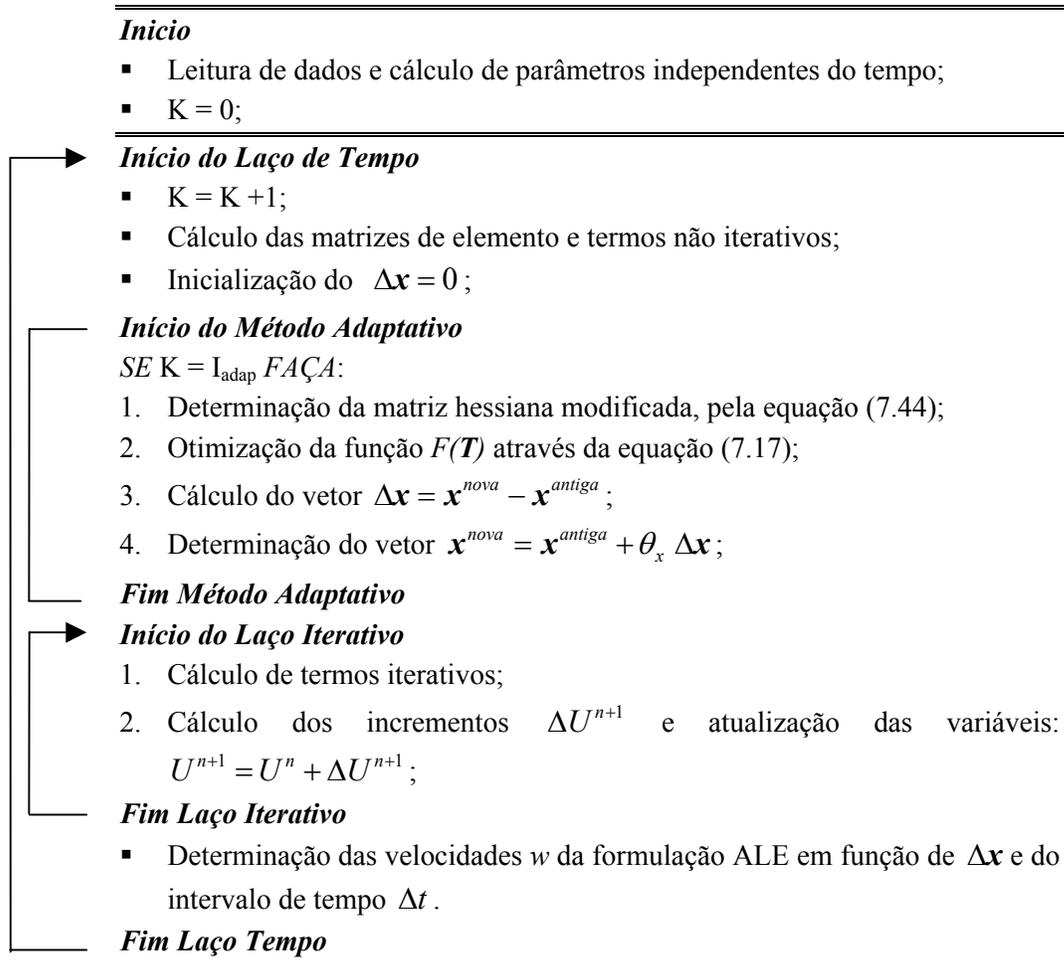
$$z_i^{m+1} = z_i^m + \theta_z \Delta z_i \quad (8.11)$$

onde, m indica o número de adaptação e $i = 1, \dots, N_{\text{nos}}$.

A velocidade de atualização da malha, w , para a formulação Lagrangeana-Euleriana Arbitrária é calculada a partir dos incrementos entre as posições novas e antigas das coordenadas da malha e do incremento de tempo. Devido à utilização desta formulação, não precisa-se interpolação entre ambas as malhas.

Basicamente, o funcionamento do método de adaptação incluído dentro do método de elementos finitos se pode resumir no fluxograma mostrado na Tabela 8.1.

Tabela 8.1 – Fluxograma do método de adaptação incorporado ao modelo



Exemplos de Aplicação

9.1 Análise de um domínio quadrado com uma função de monitoração analítica

Neste exemplo, analisa-se como influenciam os parâmetros de controle da função objetivo global, sobre um quadrado cujos lados tem dimensões iguais a 1. A malha de elementos finitos é formada por 882 nós e 400 elementos hexaédricos de 8 nós, com só uma camada de elementos de dimensão igual a 0.20 na direção z (20 x 20 x 1), por tratar-se de um problema bidimensional.

A função analítica que se impõe é dada por:

$$f(x,y) = 1000 \exp\left\{-20\left[(x^2 - 0.2) + (y^2 - 0.2)\right]\right\} + \\ + 800 \exp\left\{-50\left[(x^2 - 0.6) + (y^2 - 0.7)\right]\right\} + \\ + 800 \exp\left\{-50\left[(x^2 - 0.8) + (y^2 - 0.2)\right]\right\}$$

onde, x e y são as coordenadas espaciais. Na Figura 9.1, mostra-se como o campo de variação da função é suave.

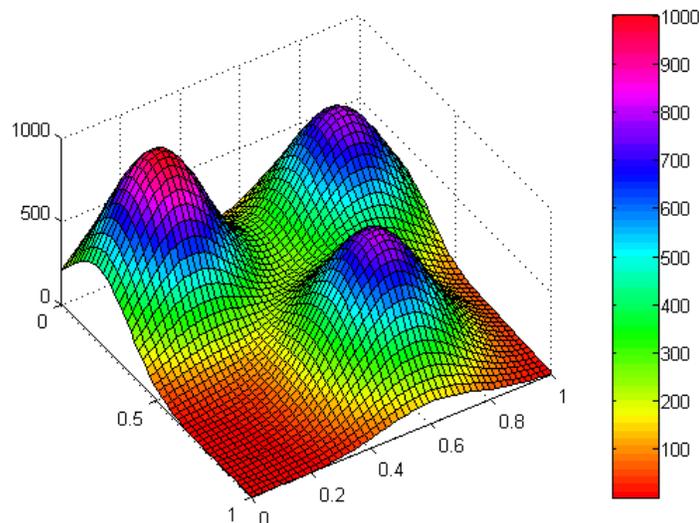


Figura 9.1 – Campo de variação da função $f(x,y)$

Deve-se lembrar que os parâmetros de controle da função objetivo global, definidos na equação (7.17), são os seguintes:

- α é o controle de ortogonalidade local e o controle de *suavização* local;
- β é o controle da função de monitoração.

Na Figura 9.2 mostram-se as malhas para diferentes valores do parâmetro α ($\alpha = 0.0$ e $\alpha = 0.5$) com β fixo ($\beta = 1.0$). Pode-se concluir que considerando o coeficiente α diferente de zero, o termo de controle de volume passa a ter uma maior importância em comparação com os termos de controle de qualidade da malha, onde a maior concentração da malha surge para o caso em que $\alpha = 0.5$, Figura 9.2, caso (B).

Deve-se notar que para este exemplo o efeito da ortogonalidade e suavização não podem ser corretamente analisados devido ao fato de que a malha inicial é igualmente espaçada e ortogonal.

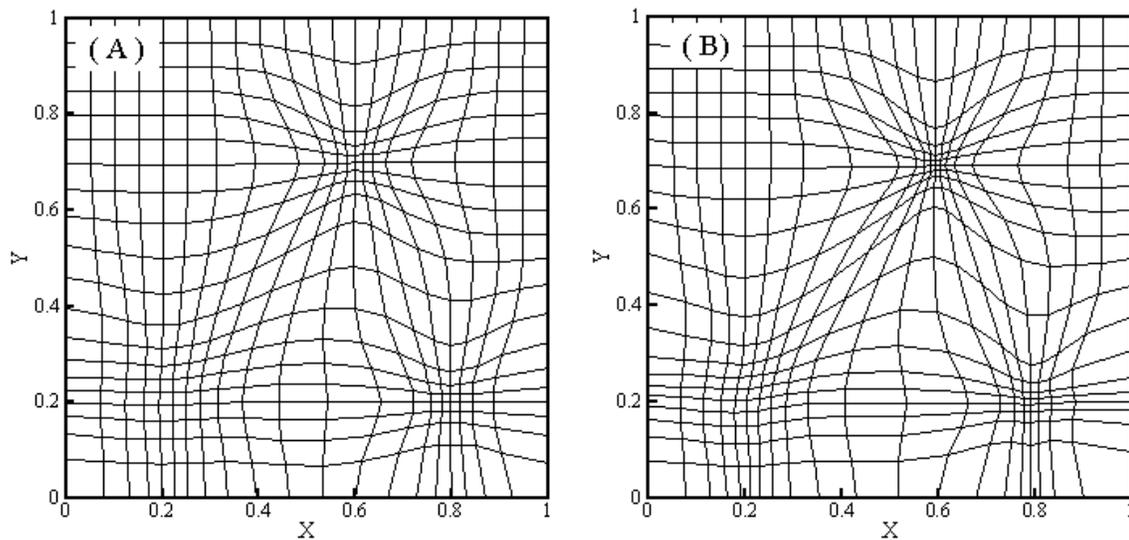


Figura 9.2 – Variação da malha em função do parâmetro α com $\beta=1,0$. Caso

(A): $\alpha=0.0$, caso (B): $\alpha=0.50$

O efeito do parâmetro β é pouco significativo quando se tem valores maiores que 1,0. Enquanto que valores do parâmetro α diferentes de 0,5 também afetam pouco o resultado final da malha uma vez que partiu-se de uma malha uniforme e com ortogonalidade.

Conclui-se que os melhores valores dos parâmetros que controlam a função objetivo global são:

- controle de ortogonalidade local: $\alpha = 0.50$
- controle de suavização local: $\alpha = 0.50$
- controle da função monitor: $\beta = 1.0$

Portanto, esses valores serão tomados para todos os exemplos do capítulo.

9.2 Escoamento em um canal com um obstáculo em forma de rampa

Analisa-se o escoamento supersônico ($M_\infty = 3$), estacionário e não difusivo, através de uma rampa de 16° cuja geometria é mostrada esquematicamente na Figura 9.3.

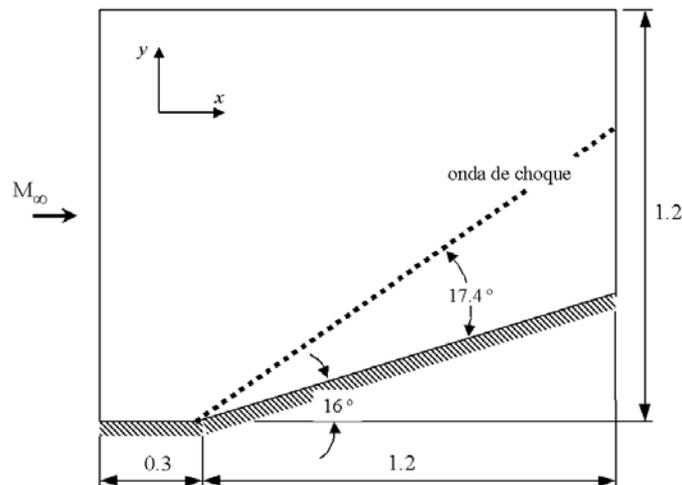


Figura 9.3 – Esquema do escoamento supersônico sobre uma rampa

As condições adimensionais da corrente-livre não perturbada no contorno de entrada são as seguintes:

$$v_{1\infty} = 3.0, \quad v_{2\infty} = 0.0 \quad \text{e} \quad v_{3\infty} = 0.0;$$

$$e_\infty = 6.2857; \quad \rho_\infty = 1.0$$

Como condições de contorno, empregou-se para o contorno sólido as condições de contorno sólido descritas na seção 8.4. Nos contornos laterais é imposta a condição de

velocidade transversal nula ($v_3 = 0.0$). No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade.

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

$$v_1^0 = 3.0, \quad v_2^0 = 0.0 \quad \text{e} \quad v_3^0 = 0.0;$$

$$e^0 = 6.2857; \quad u^0 = 1.7857; \quad p^0 = 0.71428 \quad \text{e} \quad \rho^0 = 1.0$$

Por se tratar de um problema bidimensional, a malha é formada por apenas um elemento na direção z e considera-se que a dimensão nesta direção é igual a 0,50. A malha é formada por 2322 nós e 1092 elementos, conforme Figura 9.4 (A).

O processo de adaptação foi constituído de 8 adaptações, as quais se fazem a cada 900 iterações. Define-se a malha inicial como malha (A) e a malha final como malha (I), sendo cada adaptação intermediária definida pela seqüência das letras, como por exemplo: a malha (B) obtém-se depois de uma adaptação e 900 iterações, a malha (C) obtém-se depois de duas adaptações e 1800 iterações, e assim sucessivamente. Este procedimento será utilizado em todos os exemplos. Para os coeficientes de relaxação empregou-se $\theta_x = 0.12$, $\theta_y = 1.0$ e $\theta_z = 0.0$. Na Figura 9.4 mostra-se a evolução da malha para alguns ciclos.

Nas Figuras 9.5, são apresentados os campos de distribuição do número de Mach para a malha inicial (malha A) e para a malha final (malha I). Comparando-se ambas as figuras comprova-se a importância que tem a adaptação da malha no processo de capturar a onda de choque de compressão com o ângulo correto. A distribuição de massa específica é similar à de número de Mach, portanto, não é mostrado.

Os gráficos de distribuição do número de Mach e massa específica ao longo da linha $y = 0.60$ e $0.0 \leq x \leq 1.20$ são apresentados nas Figuras 9.6 e 9.7, respectivamente. A origem do sistema de eixos coordenados, localiza-se no início da rampa.

Estes resultados mostram um bom grau de semelhança com os resultados obtidos por Ait-Ali-Yahia *et al.* [1996], como pode ser visto nas Figuras 9.6 e 9.8, embora o método utilizado por Ait-Ali-Yahia *et al.* não preserva a ortogonalidade.

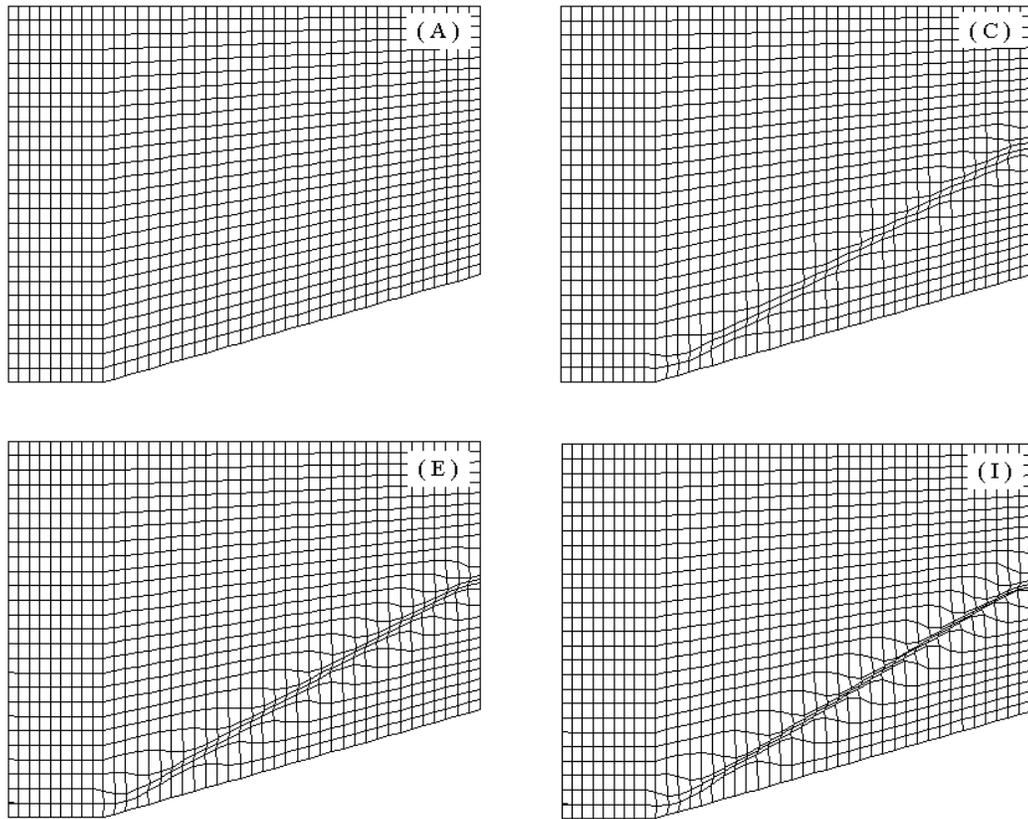


Figura 9.4 – Evolução da malha para alguns ciclos. Malha (A) ou malha inicial, malha (C) depois de duas adaptações, malha (E) depois de quatro adaptações e malha (I) ou malha final, depois de oito adaptações

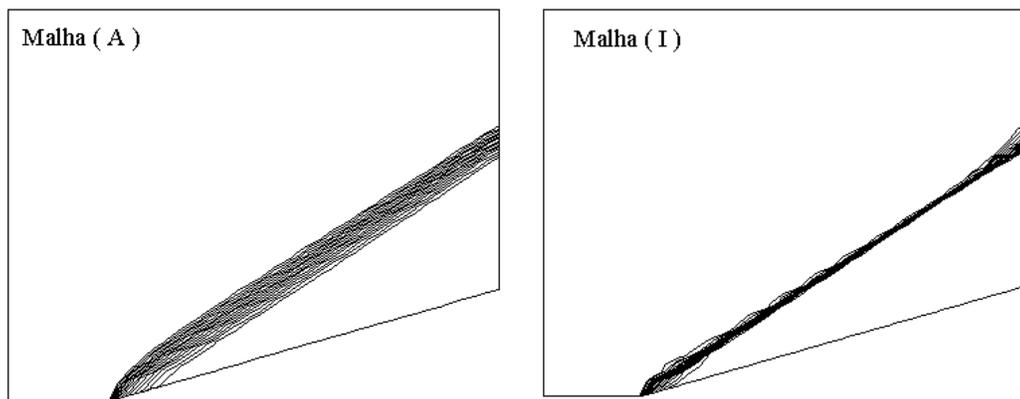


Figura 9.5 – Distribuição do número de Mach para a malha inicial (Malha A) e a malha final (Malha I)

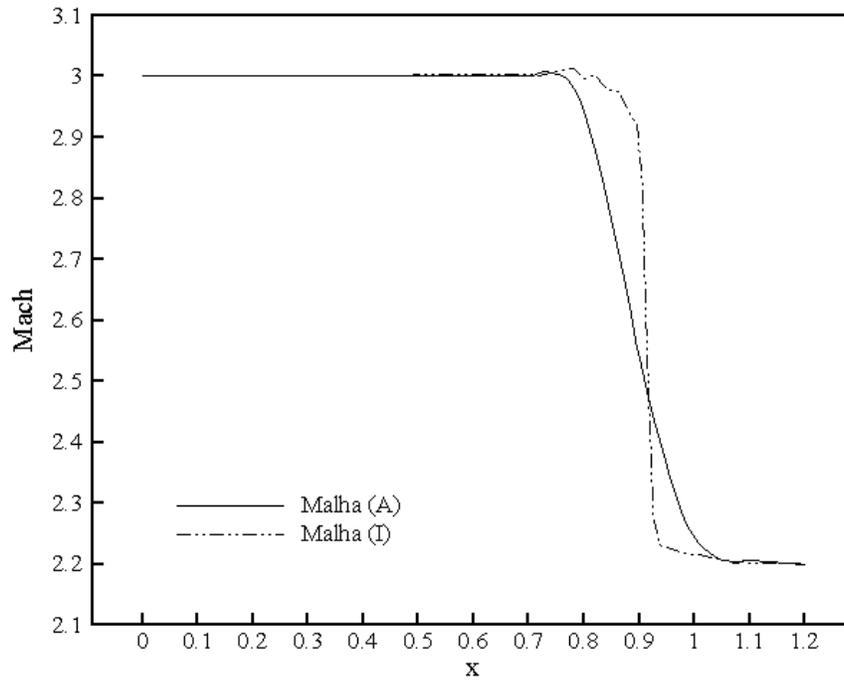


Figura 9.6 – Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0.60$ e $0.0 \leq x \leq 1.20$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha I)

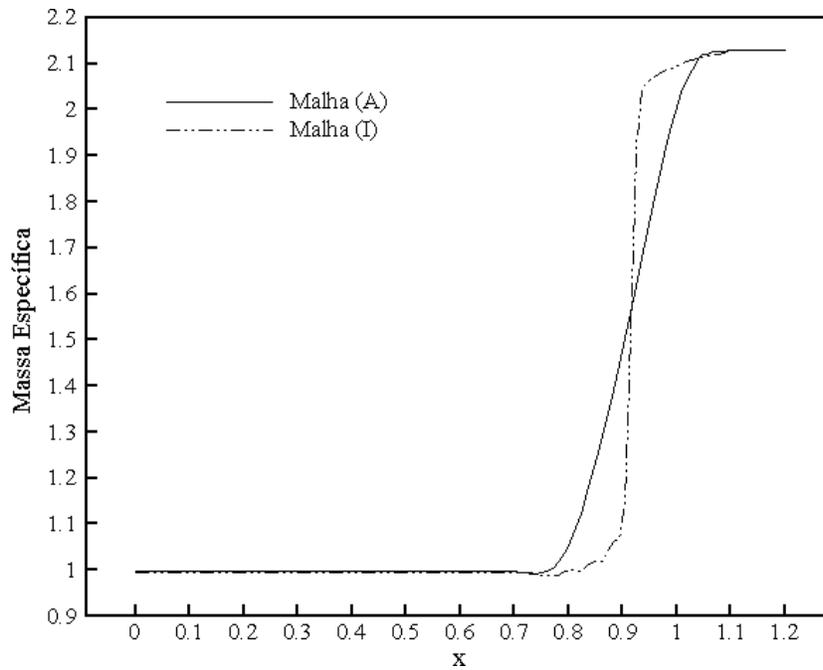


Figura 9.7 – Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0.60$ e $0.0 \leq x \leq 1.20$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha I)

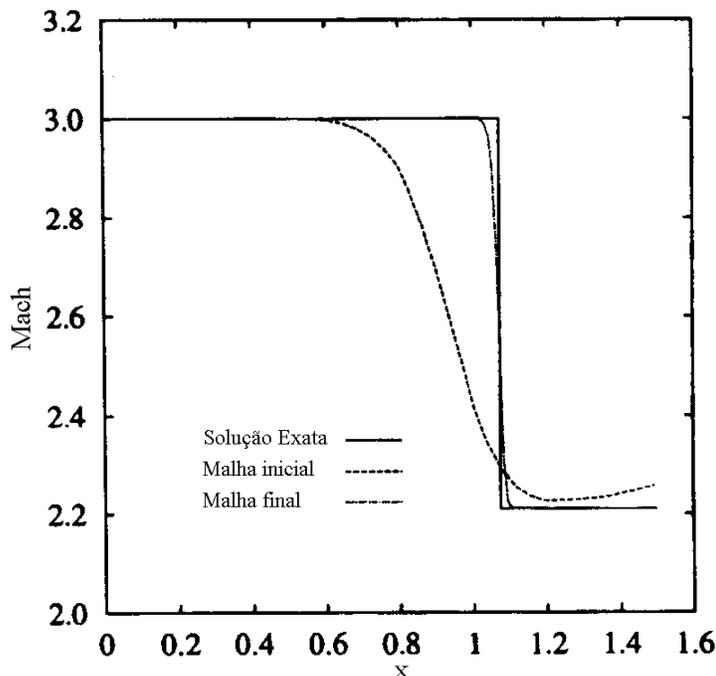


Figura 9.8 – Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0.50$, depois de 5 adaptações, segundo Ait-Ali-Yahia *et al.* [1996]

Fica demonstrado, conforme a Figura 9.9, a vantagem de haver considerado na função objetivo global a ortogonalidade e *suavização*, ou seja, manter o controle de qualidade da malha durante todo o processo de adaptação. Nesta figura a distorção mostrada na malha obteve-se depois das primeiras adaptações, notando a ausência total de ortogonalidade e suavização em determinadas regiões.

No trabalho de Oden *et al.* [1986] também se analisou uma rampa, com as mesmas condições de escoamento simulado neste trabalho, com a diferença de que a rampa tem uma inclinação de 20° e o domínio computacional é menor, porém pode ser feita uma comparação com os resultados finais apenas para fins de uma análise qualitativa das malhas, conforme as Figuras 9.10 e 9.11. O método empregado por Oden *et al.* faz uma equidistribuição do erro, embora não controle ortogonalidade nem a *suavização*, obtém uma malha final com boa qualidade.

Na Figura 9.11 mostra-se uma ampliação em uma zona da malha final com o objetivo de verificar a boa qualidade da malha obtida com o método.

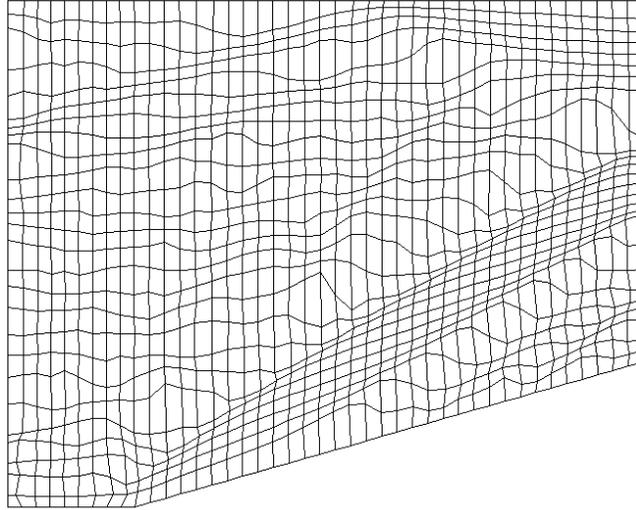


Figura 9.9 – Malha obtida sem controle de ortogonalidade e suavização

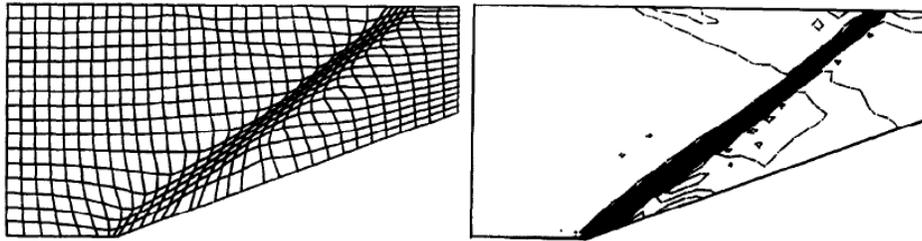


Figura 9.10 – Malha final e distribuição da massa específica, segundo Oden *et al.*, [1986] para o caso da rampa com inclinação de 20°

Finalmente, mostra-se a variação de resíduo, na Figura 9.12. O processo de adaptação iniciou-se quando o resíduo começa a ter pouca variação, ou seja, para o passo de tempo igual a 8000. Os picos no resíduo são devido à nova malha obtida depois de cada adaptação. Uma vez concluída a última adaptação, adaptação (I), deixa-se finalmente convergir.

Adotou-se para os parâmetros do código os seguintes valores: coeficiente de segurança para o intervalo de tempo, $\delta = 0.3$, coeficiente de amortecimento fictício, $C_{AF} = 0.2$, limite de resíduo do processo iterativo igual a 10^{-3} e finalmente, o limite de resíduo do processo temporal igual a 10^{-3} .

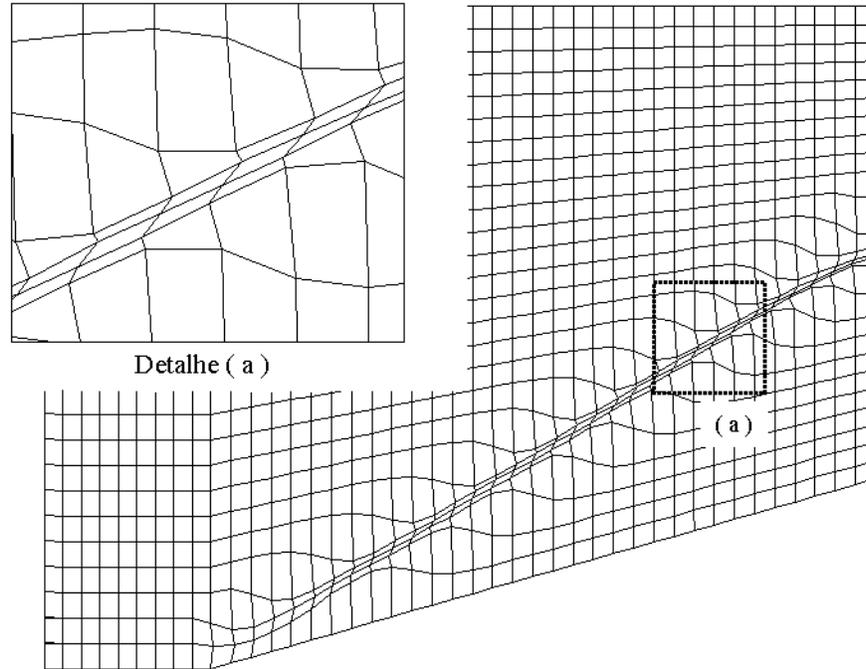


Figura 9.11 – Ampliação de uma zona da malha final (Malha I)

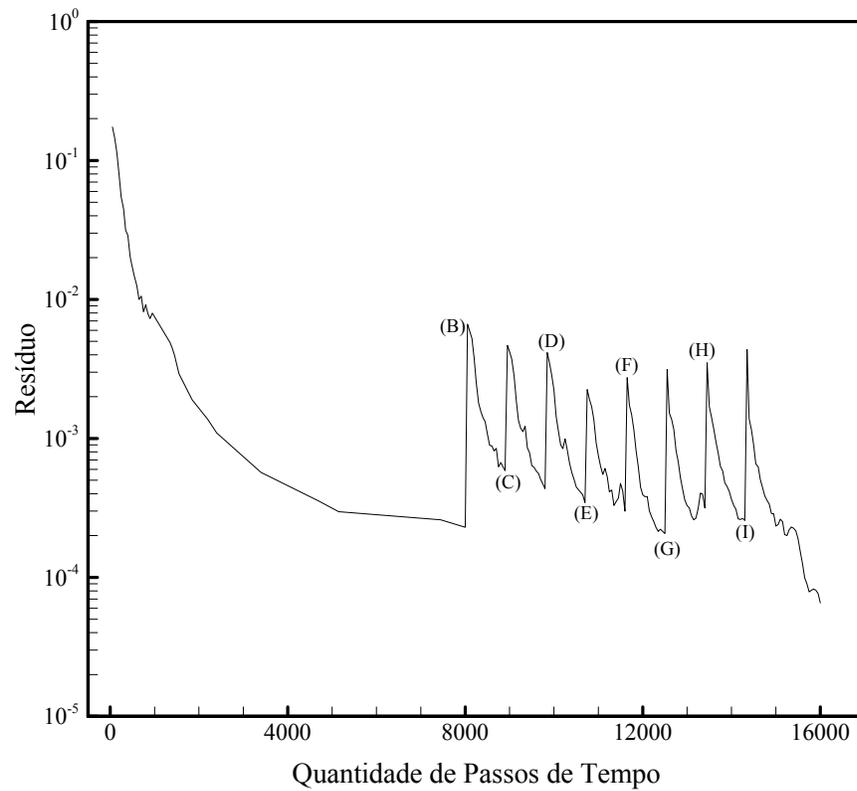


Figura 9.12 – Resíduo para o problema da rampa

9.3 Escoamento em um canal com um obstáculo em forma de degrau

Este exemplo consiste na passagem de um escoamento supersônico ($M_\infty = 3$), não difusivo, por um canal que tem sua seção transversal abruptamente reduzida por um degrau, como mostra-se esquematicamente na Figura 9.13.

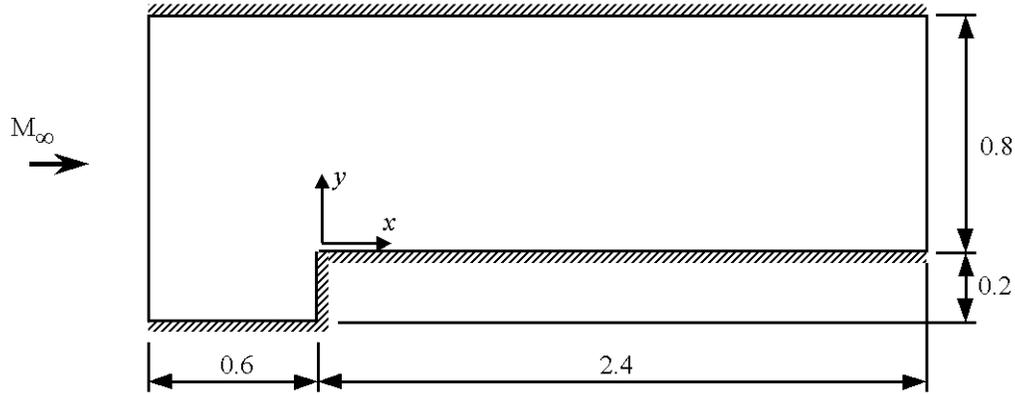


Figura 9.13 – Esquema do escoamento supersônico sobre um degrau

As condições adimensionais da corrente-livre não perturbada são as seguintes:

$$v_{1\infty} = 3.0, \quad v_{2\infty} = 0.0 \quad \text{e} \quad v_{3\infty} = 0.0;$$

$$e_\infty = 6.2857, \quad \rho_\infty = 1.0$$

Como condições de contorno, empregou-se para o contorno sólido as condições de contorno sólido descritas na seção 8.4. Nos contornos laterais é imposta a condição de velocidade transversal nula ($v_3 = 0.0$). No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade.

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

$$v_1^0 = 3.0, \quad v_2^0 = 0.0 \quad \text{e} \quad v_3^0 = 0.0;$$

$$e^0 = 6.2857; \quad u^0 = 1.7857; \quad p^0 = 0.71428 \quad \text{e} \quad \rho^0 = 1.0$$

Por ser um problema bidimensional, apenas um elemento na direção z é empregado, com uma dimensão igual a 0,50. A malha utiliza 8386 nós e 4032 elementos. Os elementos são uniformemente distribuídos na direção x e y , conforme Figura 9.14.

O processo de adaptação foi constituído de 10 adaptações, as quais se fazem a cada 10 iterações, empregando-se $\theta_x = 0.80$, $\theta_y = 0.80$ e $\theta_z = 0.0$ como coeficientes de relaxação. Utilizaram-se poucas iterações entre cada adaptação devido ao fato que o problema é transiente, adotando-se um tempo final adimensional igual a $t = 4.0$. O processo de adaptação iniciou-se em $t = 3.94$.

Na Figura 9.15, apresenta-se a malha final (Malha L) e nas Figuras 9.16 e 9.17 mostram-se os campos de distribuição do número de Mach e massa específica na malha inicial, Malha (A), e na malha final. Novamente, comprova-se que, com a técnica de adaptação de malha, os resultados melhoram consideravelmente.

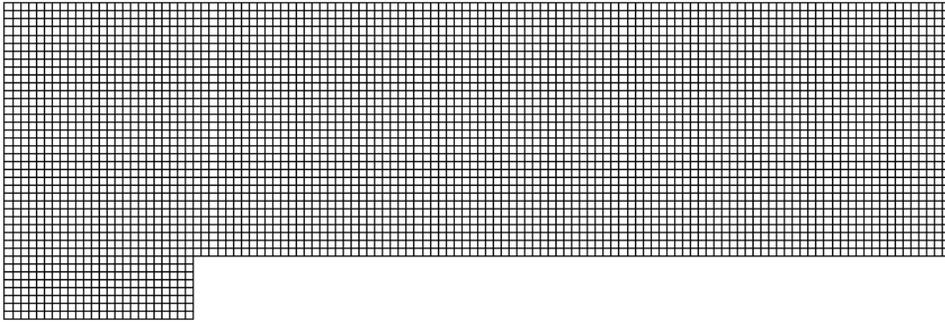


Figura 9.14 – Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)

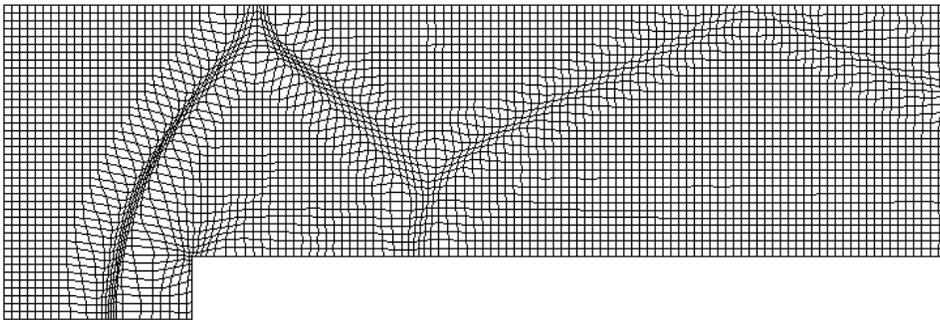


Figura 9.15 – Malha final de elementos finitos, Malha (L)

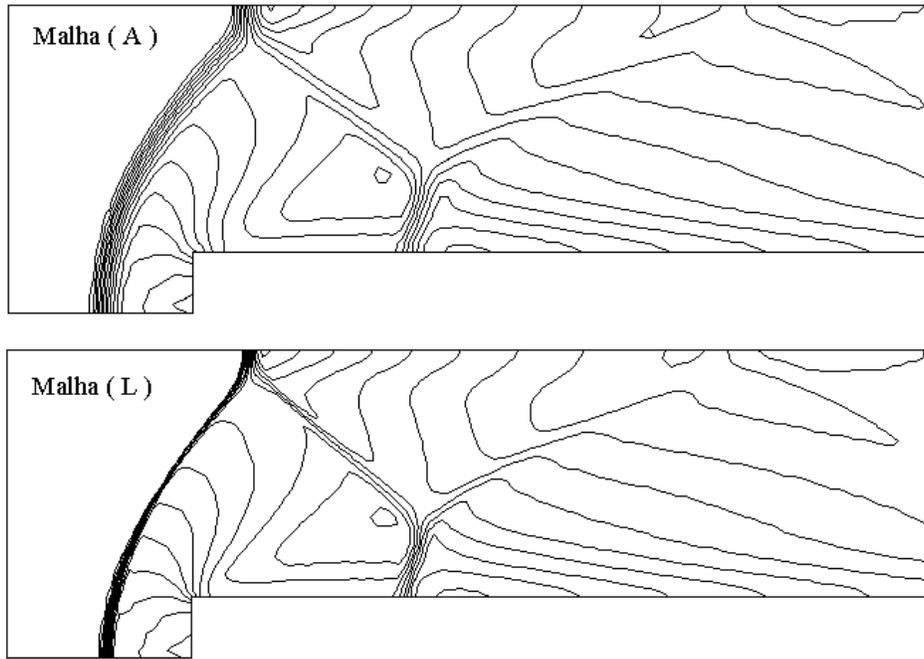


Figura 9.16 – Distribuição do número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (L)

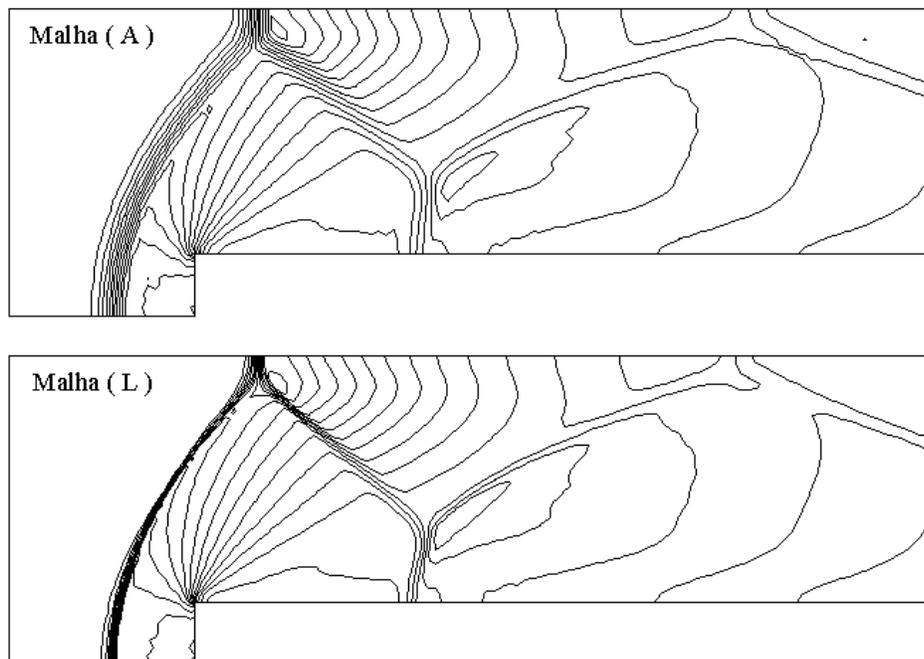


Figura 9.17 – Distribuição da massa específica para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (L)

Também, mostra-se uma comparação da distribuição do número de Mach e massa específica ao longo da linha $y = 0.40$ e $-0.40 \leq x \leq 0.40$ para a malha inicial e a malha final, nas Figuras 9.18 e 9.19.

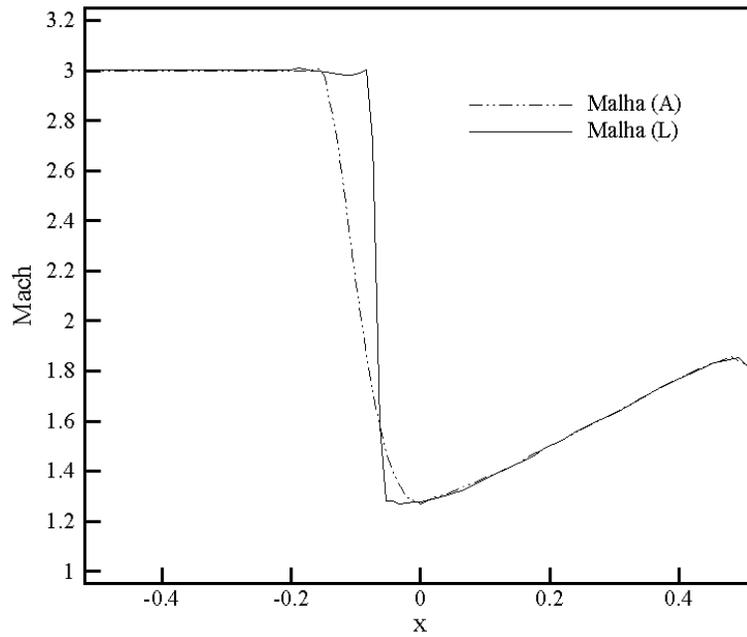


Figura 9.18 – Distribuição do número de Mach ao longo da linha $y = 0.40$ e $-0.50 \leq x \leq 0.50$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha L)

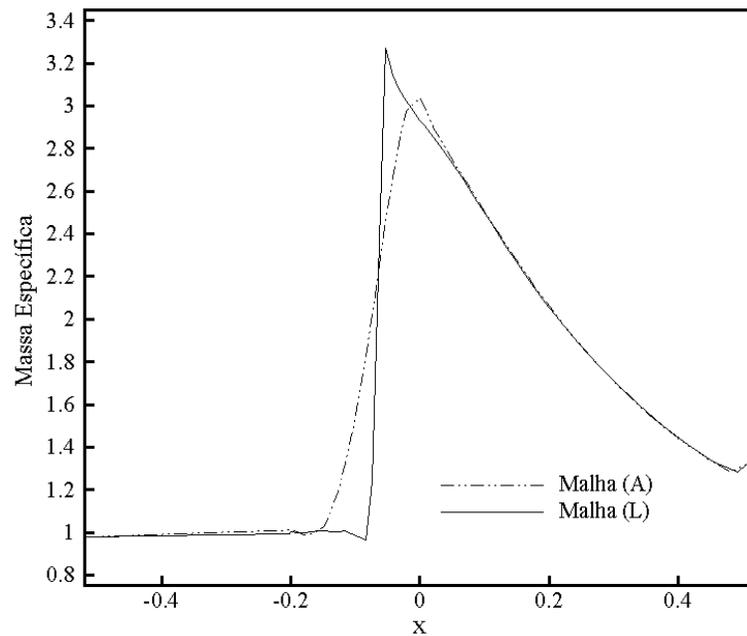


Figura 9.19 – Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0.40$ e $-0.50 \leq x \leq 0.50$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha L)

Estes resultados apresentam um bom grau de semelhança com os resultados obtidos por Löhner *et al.* [1985], como pode ser visto comparando as Figuras 9.17 (Malha A) e 9.20, embora

a malha utilizada por Löhner seja menos refinada que a utilizada neste trabalho. Os resultados apresentados por Hansbo *et al.* [1991] na Figura 9.21, obtidos utilizando um método de adaptação de malha, refinam muito bem a onda de choque, porém concentram nessa região um maior número de elementos. Deve-se notar que existe uma importante diferença na região de interação com a parede superior, quando é comparado com os resultados obtidos no presente trabalho e em Löhner *et al.* [1985].

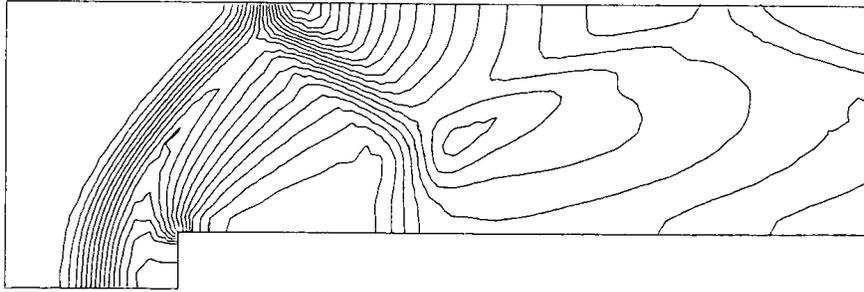


Figura 9.20 – Distribuição da massa específica em $t = 4.0$, segundo Löhner *et al.* [1985]

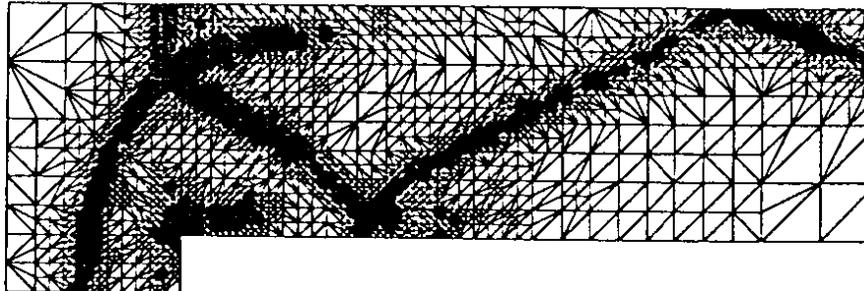
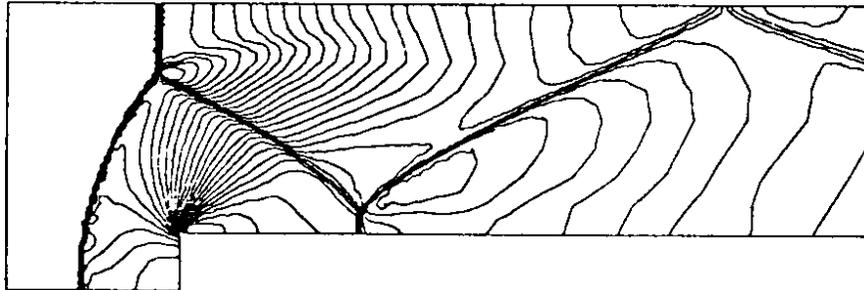


Figura 9.21 – Distribuição da massa específica e malha final em $t = 4.0$, segundo Hansbo *et al.* [1991]

Finalmente, na Figura 9.22, apresenta-se duas ampliações na malha final, a fim de verificar a boa qualidade de malha obtida.

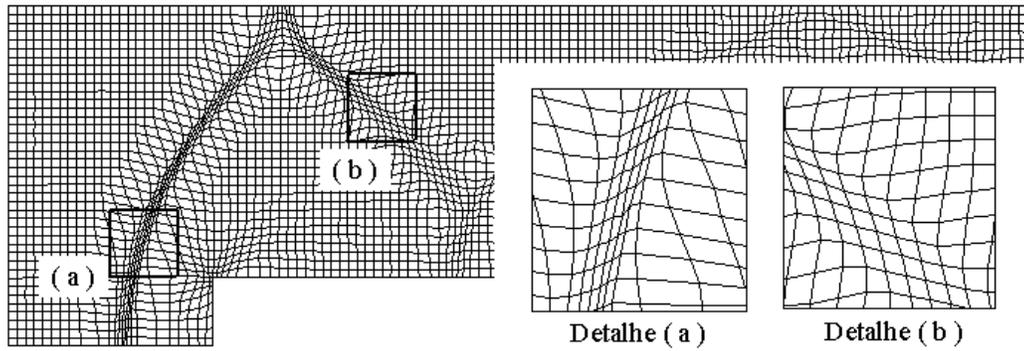


Figura 9.22 – Ampliações de zonas na malha final (Malha L)

Adota-se para os parâmetros do código os seguintes valores: coeficiente de segurança para o intervalo de tempo, $\delta = 0.3$, coeficiente de amortecimento fictício, $C_{AF} = 0.2$, limite de resíduo do processo iterativo igual a 10^{-3} , e finalmente o limite de resíduo do processo temporal igual a 10^{-5} .

9.4 Escoamento sobre um aerofólio

Este exemplo consiste na passagem de um escoamento transônico ($M_\infty = 0.8$) compressível, não difusivo, sobre um aerofólio NACA 0012 com o ângulo de ataque da corrente-livre igual a $\alpha = 1,25^\circ$, como é mostrado esquematicamente na Figura 9.23.

O problema do escoamento que passa sobre um aerofólio NACA 0012 foi tratado por vários pesquisadores. Entre eles, podem ser mencionados os trabalhos de Dannenhoffer [1991] e Baumann *et al.* [1992].

As condições adimensionais da corrente-livre não perturbada são as seguintes:

$$v_{1\infty} = 0.79980, \quad v_{2\infty} = 0.01745 \quad \text{e} \quad v_{3\infty} = 0.0;$$

$$e_\infty = 6.2857; \quad \rho_\infty = 1.0$$

Como condições de contorno, empregou-se para o contorno sólido as condições de contorno sólido descritas na seção 8.4. Nos contornos laterais é imposta a condição de velocidade transversal nula ($v_3 = 0.0$). No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade.

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

$$v_1^0 = 0.7998, \quad v_2^0 = 0.01745 \quad \text{e} \quad v_3^0 = 0.0;$$

$$e^0 = 6.2857; \quad u^0 = 1.7857; \quad p^0 = 1.11607 \quad \text{e} \quad \rho^0 = 1.0$$

A malha é de tipo C e formada por apenas um elemento na direção z com elementos que tem um comprimento nessa direção igual a 0.50, por se tratar de um problema bidimensional. A malha utilizada neste exemplo possui 9940 nós e 4800 elementos, conforme a Figura 9.24.

O processo de adaptação foi constituído de 4 adaptações, as quais se fazem a cada 300 iterações, empregando-se $\theta_x = 0.20$, $\theta_y = 0.01$ e $\theta_z = 0.0$ para os coeficiente de relaxação.

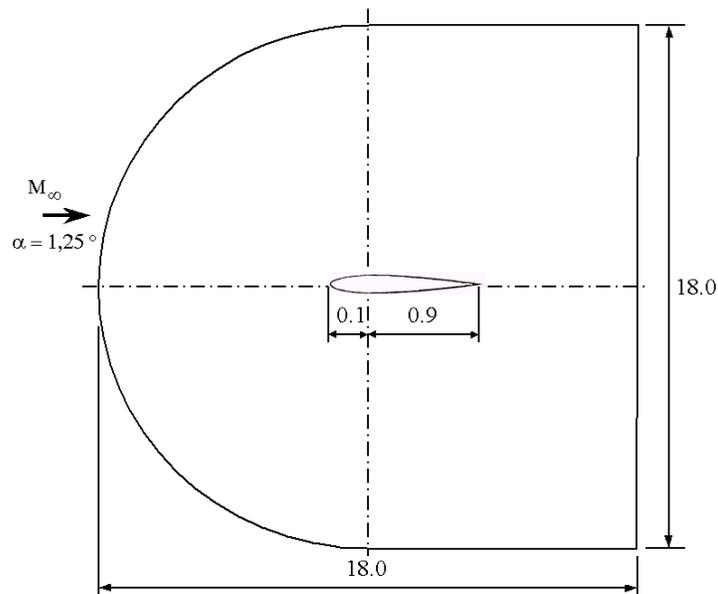


Figura 9.23 – Esquema do escoamento transônico sobre o aerofólio

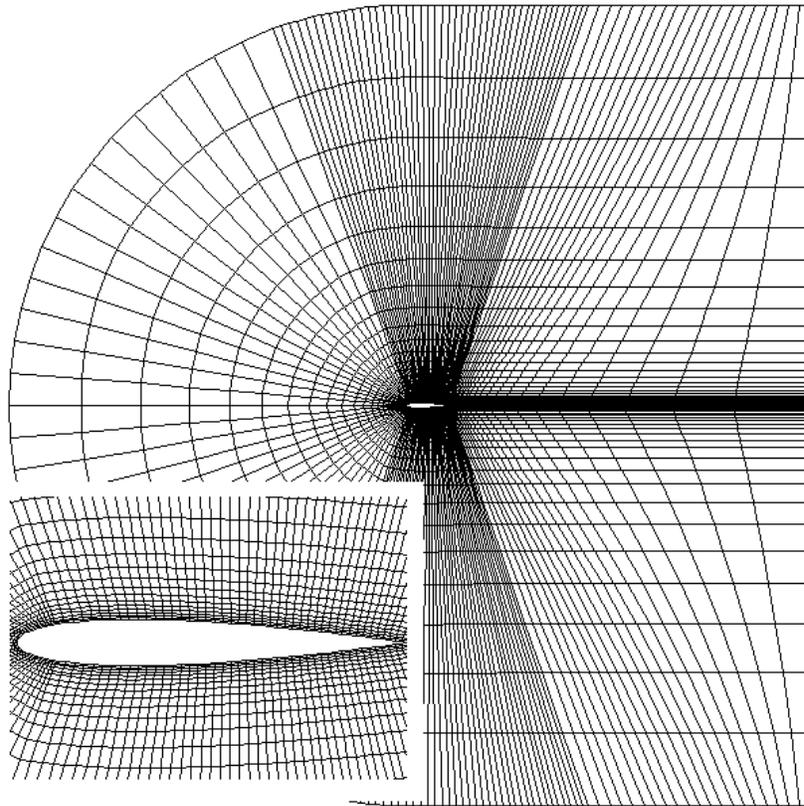


Figura 9.24 – Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)

Na Figura 9.25, mostra-se a malha obtida depois de 4 adaptações, Malha (E). A distribuição do número de Mach e massa específica para as malha inicial (Malha A) e malha final (Malha E) são apresentados nas Figuras 9.26 e 9.27.

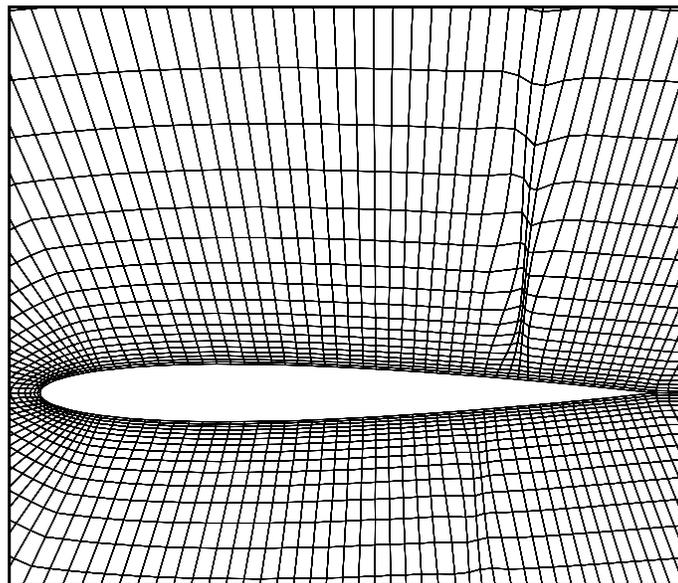


Figura 9.25 – Detalhe da malha final (Malha E)

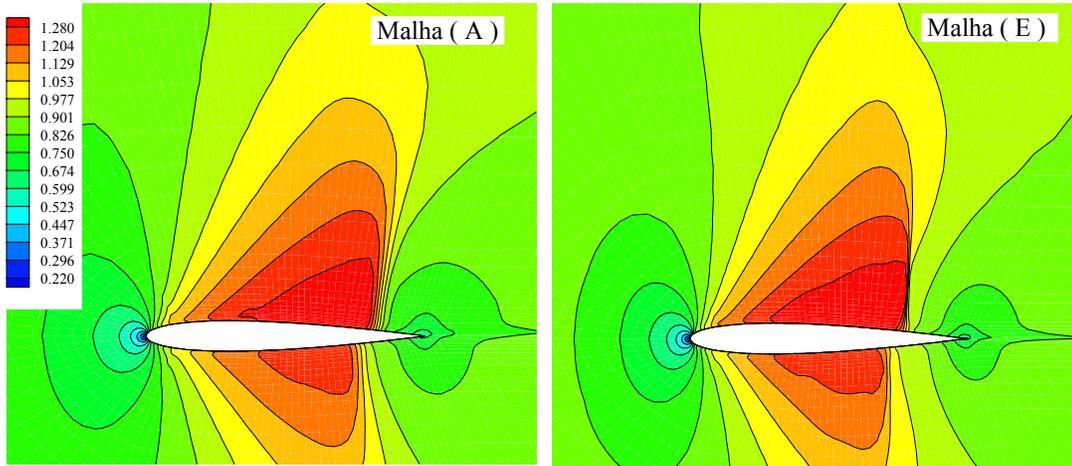


Figura 9.26 – Distribuição do número de Mach na malha inicial, Malha (A) e na malha final, Malha (E)

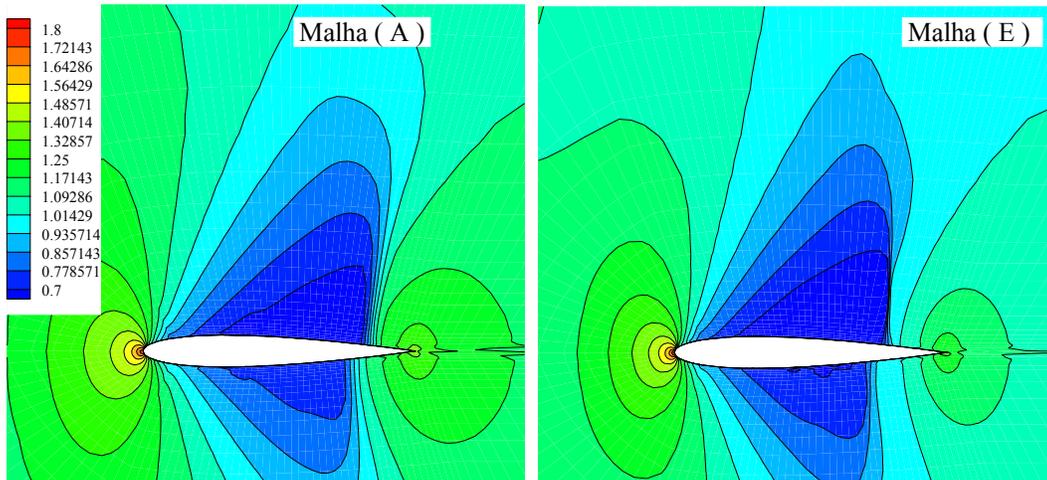


Figura 9.27 – Distribuição da massa específica para a malha inicial, Malha (A) e para a malha final, Malha (E)

A distribuição do número de Mach obtida por Baumann *et al.* [1992] é mostrada na Figura 9.28. Deve salientar que neste trabalho se fez um refinamento na região onde está localizada a onda de choque. Comparando a Figura 9.26 com 9.28 verifica-se o bom grau de concordância nos resultados.

Finalmente, mostram-se para um análise qualitativo os resultados apresentados por Dannenhoffer [1991], o qual fez um estudo comparativo dos métodos adaptativos (método r e h) com o MVF. No trabalho se faz um análise em um aerofólio NACA 0012 com $M_\infty = 0.80$ e

$\alpha = 1^\circ$. Existe uma leve diferença de $\Delta\alpha = 0.25^\circ$ porém podem ser válidos para comparar os resultados das malhas finais. Apresenta-se a malha e distribuição do número de Mach para o caso da malha sem adaptação, conforme a Figura 9.29, para o caso de refinamento, conforme a Figura 9.30 e para o caso de movimento de nós, conforme a Figura 9.31.

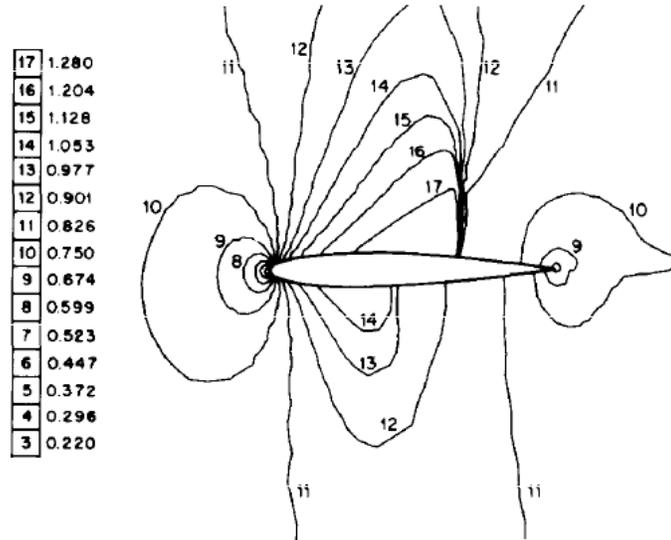


Figura 9.28 – Distribuição do número de Mach, segundo Baumann *et al.* [1992]

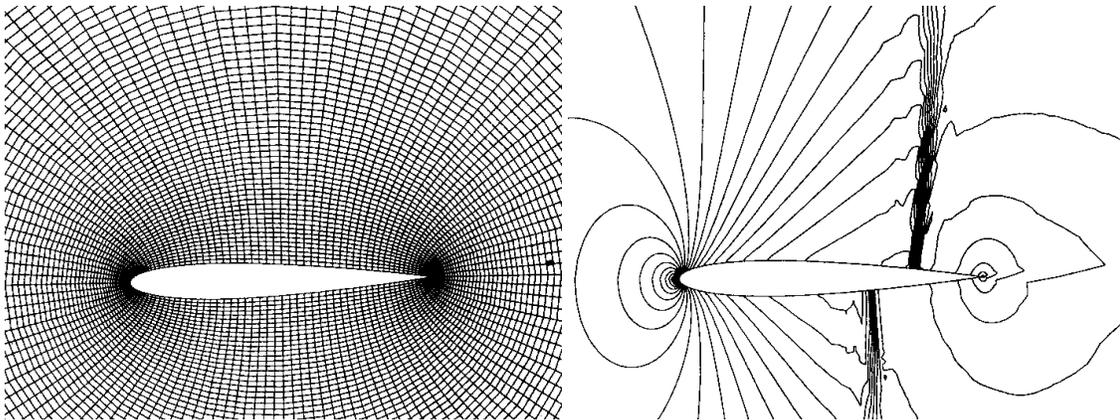


Figura 9.29 – Malha sem adaptação e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]

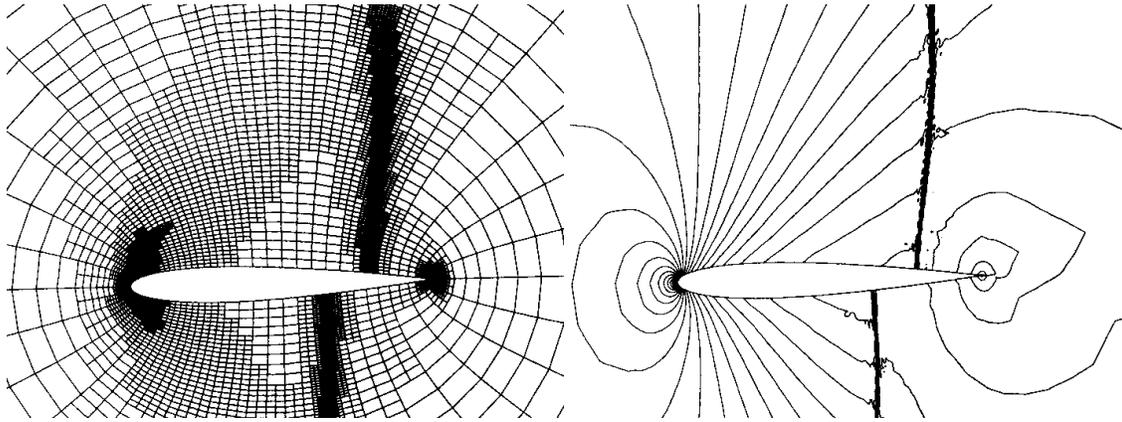


Figura 9.30 – Malha com refinamento e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]

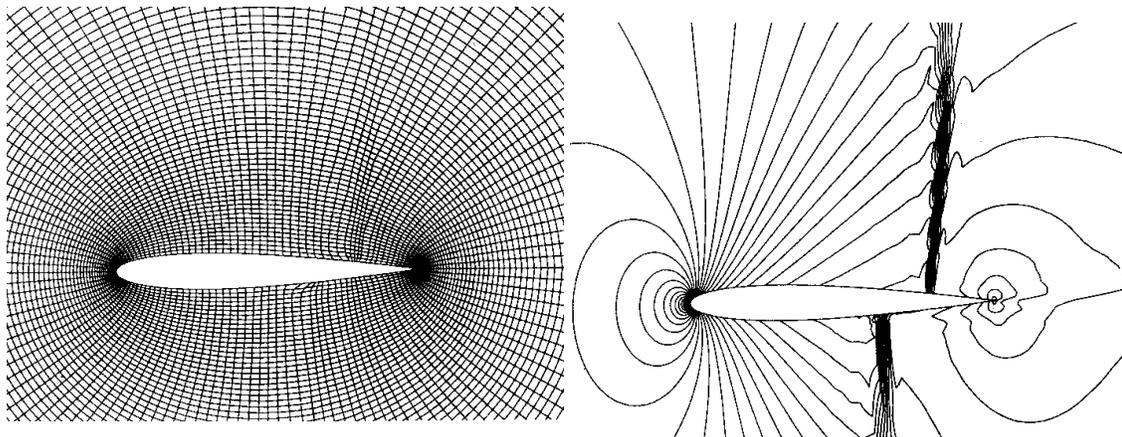


Figura 9.31 – Malha com redistribuição de nós e distribuição do número de Mach para $M_\infty = 0.80$ e $\alpha = 1^\circ$, segundo Dannenhoffer [1991]

Convém mencionar que no processo de adaptação os nós sobre o contorno do aerofólio foram deixados livres.

Adota-se para os parâmetros do código os seguintes valores: coeficiente de segurança para o intervalo de tempo, $\delta = 0.3$, coeficiente de amortecimento fictício, $C_{AF} = 0.2$, limite de resíduo do processo iterativo igual a 10^{-3} e finalmente, o limite de resíduo do processo temporal igual a 10^{-3} .

9.5 Escoamento ao redor de uma esfera

Neste item inicia-se a apresentação dos exemplos tridimensionais. Começa-se analisando o escoamento supersônico ($M_\infty = 3$), estacionário e não difusivo, ao redor de meia esfera de raio unitário ($R = 1.0$), como pode ser visto esquematicamente na Figura 9.32. Devido à simetria do problema, estuda-se apenas um quarto do domínio. A malha empregada tem 9625 nós e 8424 elementos hexaédricos de oito nós, conforme a Figura 9.33.

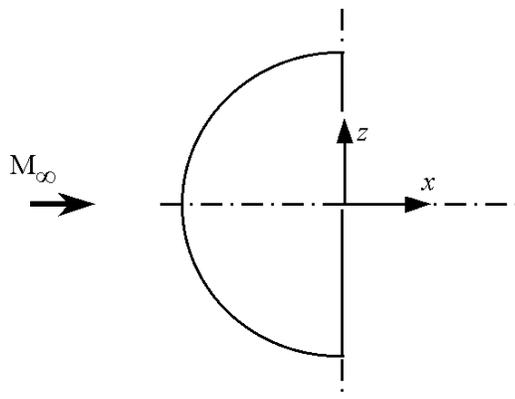


Figura 9.32 – Esquema do escoamento supersônico sobre meia esfera

As condições adimensionais da corrente-livre não perturbada na superfície de entrada são as seguintes:

$$v_{1\infty} = 3.0, \quad v_{2\infty} = 0.0 \quad \text{e} \quad v_{3\infty} = 0.0;$$

$$e_\infty = 6.2857; \quad \rho_\infty = 1.0$$

Como condições de contorno, empregou-se para o contorno sólido as condições de contorno sólido descritas na seção 8.4. Nos contornos de simetria é imposta a condição de velocidade transversal nula. No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade.

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

$$v_1^0 = 0.7998, \quad v_2^0 = 0.01745 \quad \text{e} \quad v_3^0 = 0.0;$$

$$e^0 = 6.2857; \quad u^0 = 1.7857; \quad p^0 = 0.71428 \quad \text{e} \quad \rho^0 = 1.0$$

O processo de adaptação foi constituído de quatro adaptações, as quais são feitas a cada 500 iterações, iniciando-se no passo de tempo 5500 e empregando-se para os coeficientes de relaxação $\theta_x = 0.80$, $\theta_y = 0.80$ e $\theta_z = 0.80$.

Mostra-se na Figura 9.34, a malha obtida depois do processo de adaptação sobre a esfera. Enquanto na Figura 9.35, apresenta-se o resultado para o número de Mach obtido na presente simulação, uma vez que tem-se atingido o estado estacionário. Observa-se que este resultado está próximo à distribuição do número de Mach obtida por Molina e Huot [1992], apresentado na Figura 9.36.

A distribuição de erro sobre um dos planos de simetria e a malha final são apresentados na Figura 9.37. Note-se que os deslocamentos da malha são proporcionais à magnitude do erro, ou seja, os máximos deslocamentos da malha se originam onde o erro é máximo.

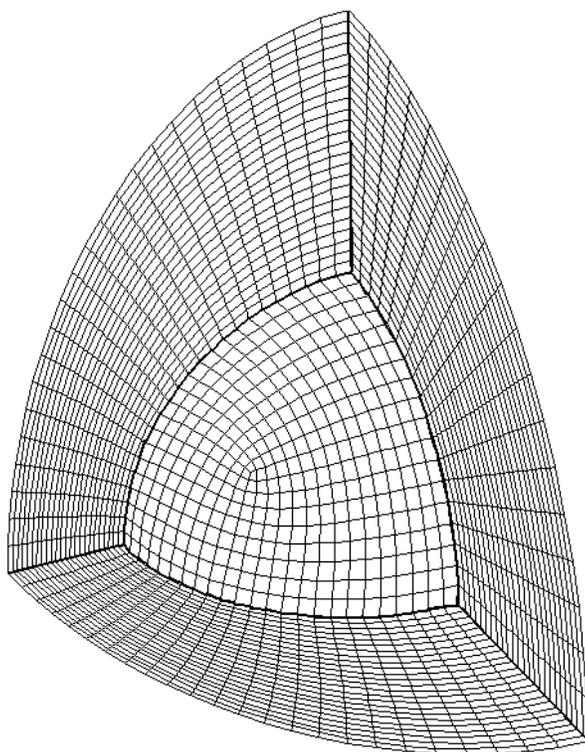


Figura 9.33 – Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)

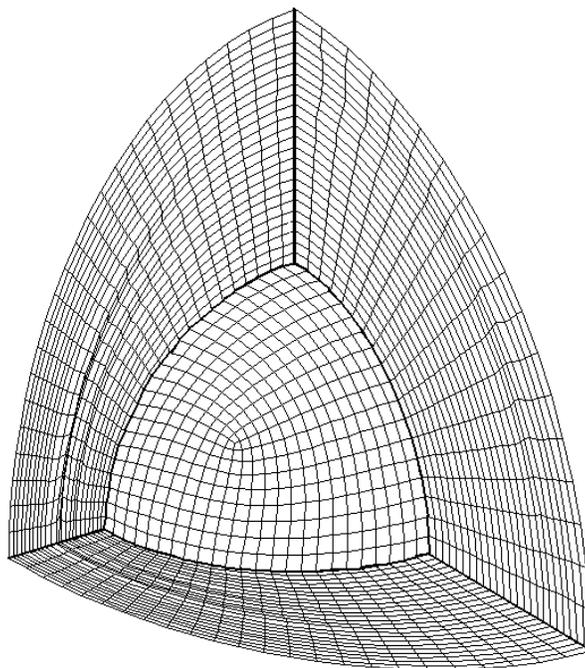


Figura 9.34 – Malha final sobre a esfera, Malha (E)

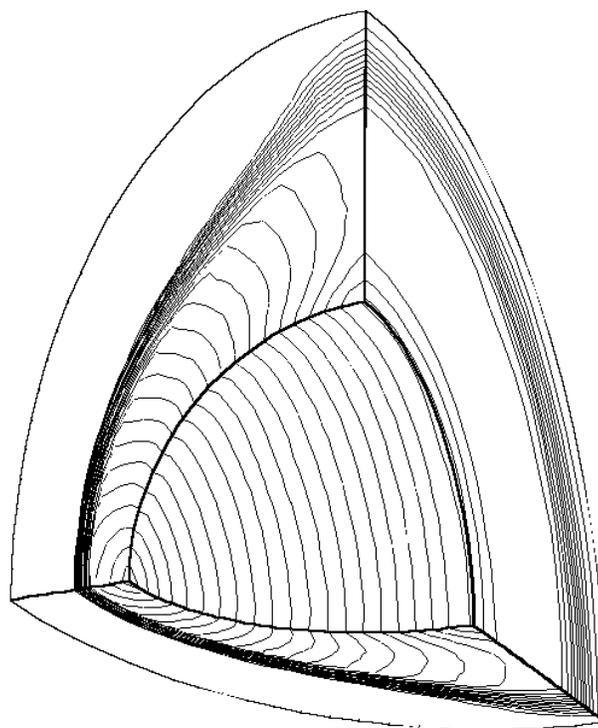


Figura 9.35 – Distribuição de número de Mach para a malha final, Malha (E)

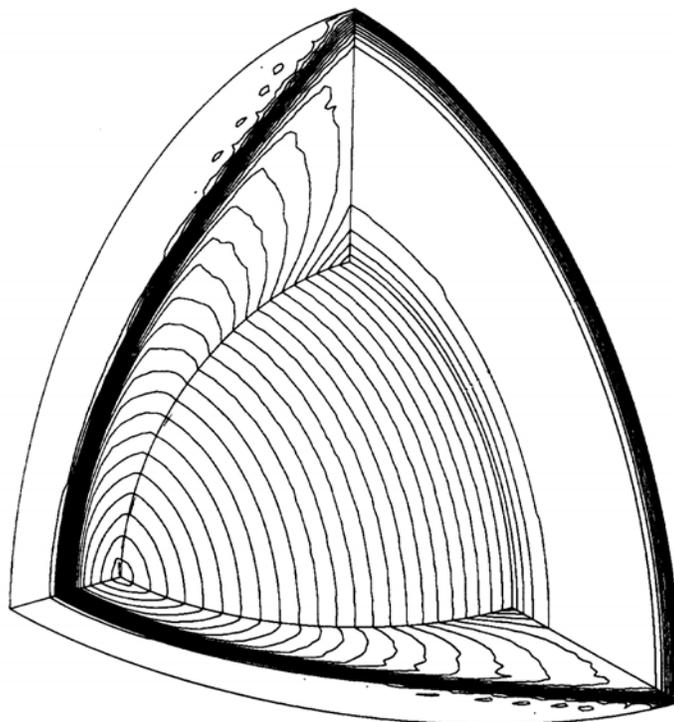


Figura 9.36 – Distribuição de número de Mach, segundo Molina e Huot [1992]

As distribuições do número de Mach para a malha inicial e a malha final são apresentadas na Figura 9.38. Observa-se uma concentração das linhas de Mach para o caso da malha adaptada, sendo esta concentração menos importante na região de estagnação. A distribuição de massa específica ao longo da linha de $y = 0.30$ é apresentada na Figura 9.39. Note-se que existe uma melhora principalmente na região frontal da onda de choque. Vale lembrar que a origem do sistema de eixos coordenados acha-se no centro da esfera.

Finalmente, na Figura 9.40 apresenta-se a variação do resíduo. Neste exemplo, o processo de adaptação iniciou-se quando o resíduo atingiu um valor de 10^{-5} , correspondendo isto a, aproximadamente, 5500 passos de tempo.

Adota-se para os parâmetros do código os seguintes valores: coeficiente de segurança para o intervalo de tempo, $\delta = 0.3$, coeficiente de amortecimento fictício, $C_{AF} = 0.2$, limite de resíduo do processo iterativo igual a 10^{-4} e, finalmente, o limite de resíduo do processo temporal igual a 10^{-5} .

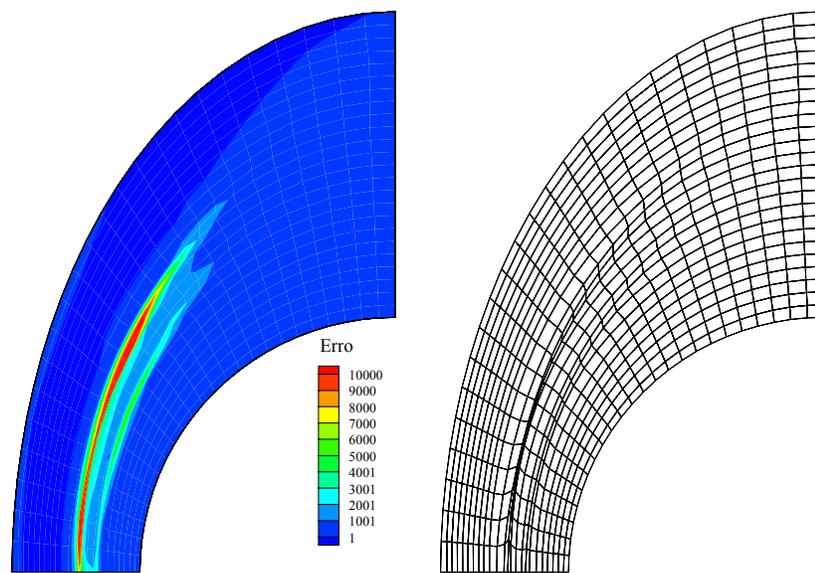


Figura 9.37 – Distribuição de erro e malha final (Malha E) em um dos planos de simetria

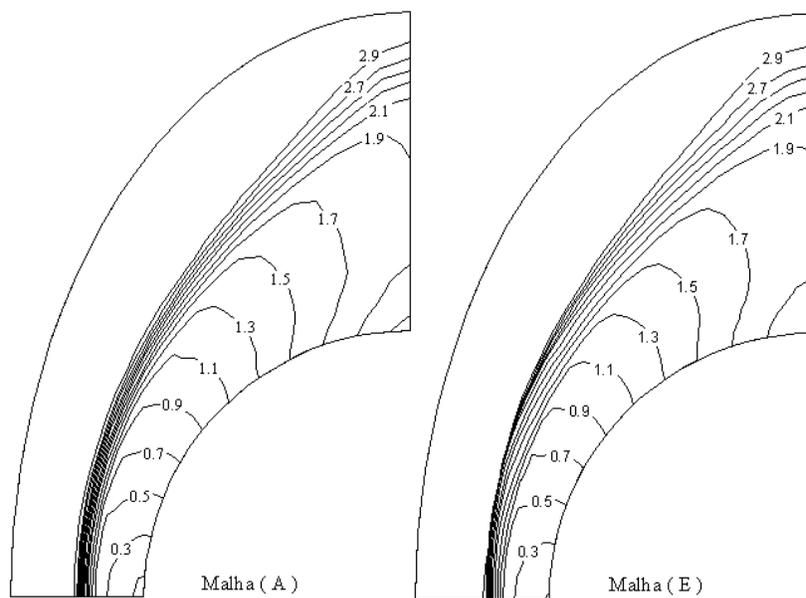


Figura 9.38 – Distribuição de número de Mach para a malha inicial Malha (A) e para a malha final Malha (E)

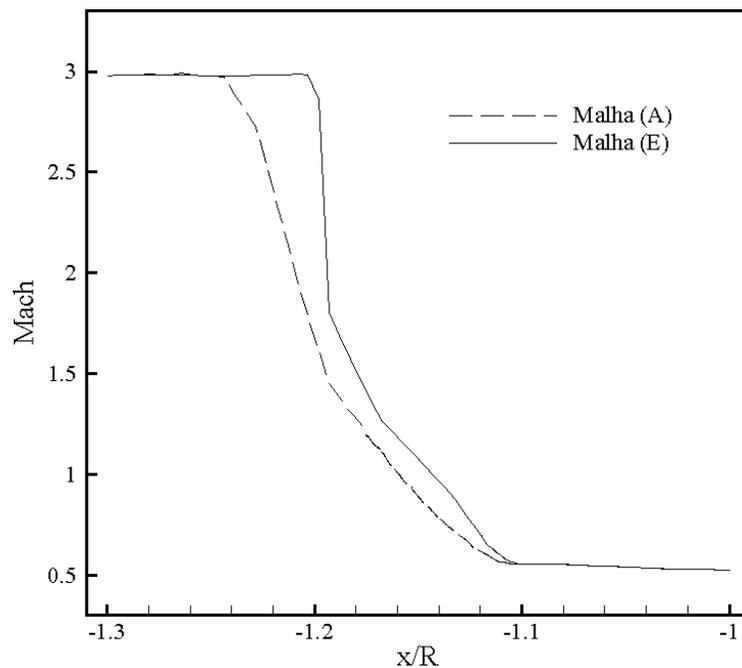


Figura 9.39 – Distribuição de número de Mach ao longo da linha $y = 0.3$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha E)

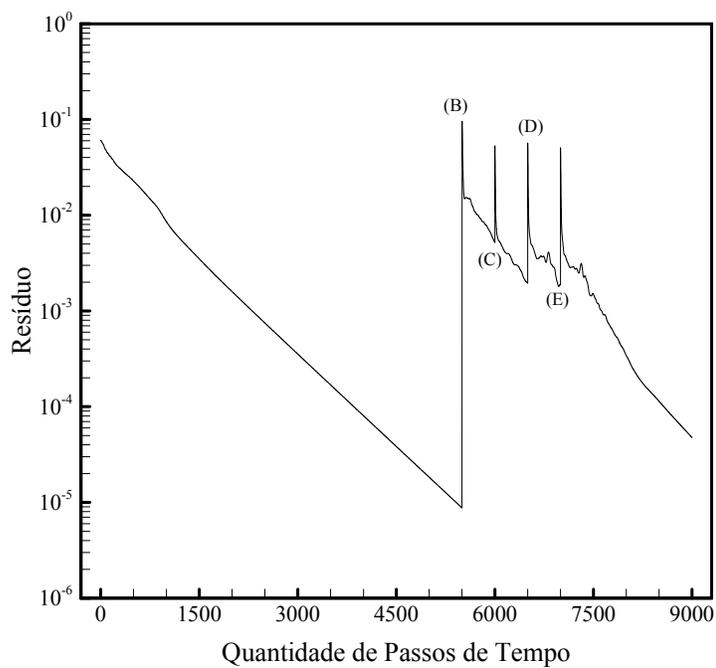


Figura 9.40 – Resíduo para o problema da esfera

9.6 Escoamento ao redor de um cone

Analisa-se o escoamento supersônico ($M_\infty = 3$), estacionário e não difusivo, ao redor de um cone com o ângulo de ataque da corrente-livre igual a $\alpha = 10^\circ$, como pode ser visto esquematicamente na Figura 9.41. Devido à simetria do problema com relação ao plano xy , estuda-se apenas a metade do domínio. A malha empregada tem 14268 nós e 12528 elementos hexaédricos de oito nós, conforme a Figura 9.42.

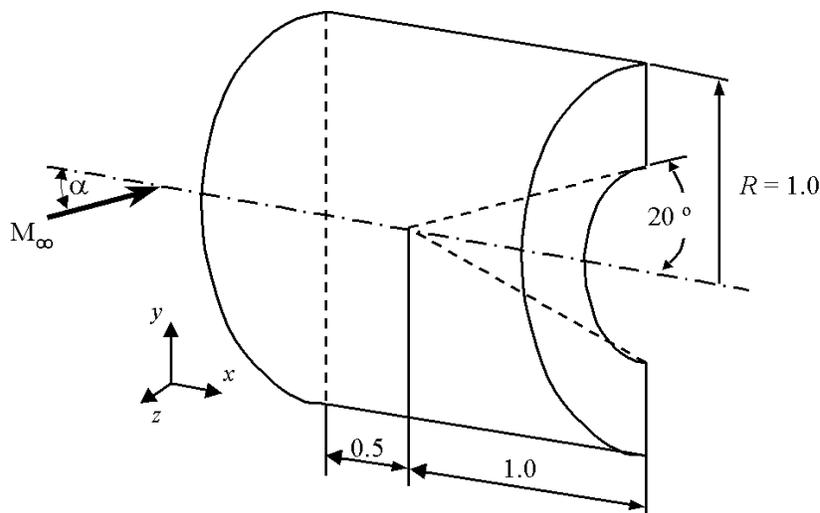


Figura 9.41 – Esquema do escoamento supersônico sobre um cone

As condições adimensionais da corrente-livre não perturbada são as seguintes:

$$v_{1\infty} = 2.9544, \quad v_{2\infty} = 0.5209 \quad \text{e} \quad v_{3\infty} = 0.0;$$

$$e_\infty = 6.2857; \quad \rho_\infty = 1.0$$

Como condições de contorno, empregou-se para o contorno sólido as condições de contorno sólido descritas na seção 8.4. No contorno de simetria é imposta a condição de velocidade transversal nula. No contorno de saída, não é necessário aplicar nenhuma restrição às componentes da velocidade.

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

$$v_1^0 = 2.9544, \quad v_2^0 = 0.5209 \quad \text{e} \quad v_3^0 = 0.0;$$

$$e^0 = 6.2857; \quad u^0 = 1.7857; \quad p^0 = 0.71428 \quad \text{e} \quad \rho^0 = 1.0$$

O processo de adaptação foi constituído de três adaptações, as quais são feitas a cada 700 iterações, iniciando-se a 20700 passos de tempo e empregando-se para os coeficientes de relaxação $\theta_x = 0.20$, $\theta_y = 0.30$ e $\theta_z = 0.20$.

A malha final (Malha D) e detalhe da mesma são apresentados nas Figuras 9.43 e 9.44. Na Figura 9.45, mostra-se a distribuição de pressão obtida na presente simulação. Observe-se que este resultado está próximo à distribuição de pressão obtida por Cebral e Löhner [1998], apresentado na Figura 9.46.

Nas Figuras 9.47 e 9.48, compara-se o campo de distribuição do número de Mach para a malha inicial (Malha A) e a malha final (Malha D) nos planos yz e xy , respectivamente. Nota-se que, devido ao ângulo de ataque, existe uma assimetria no campo de distribuição do número de Mach e por conseqüência também no erro.

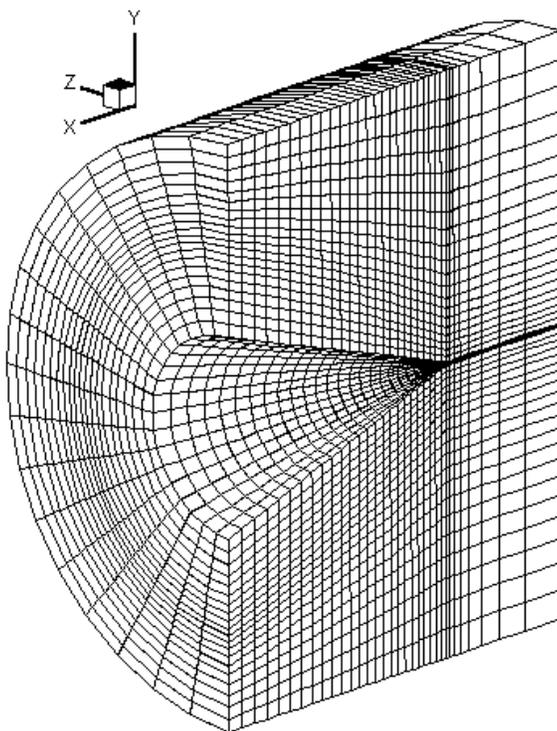


Figura 9.42 – Malha inicial de elementos finitos, Malha (A)

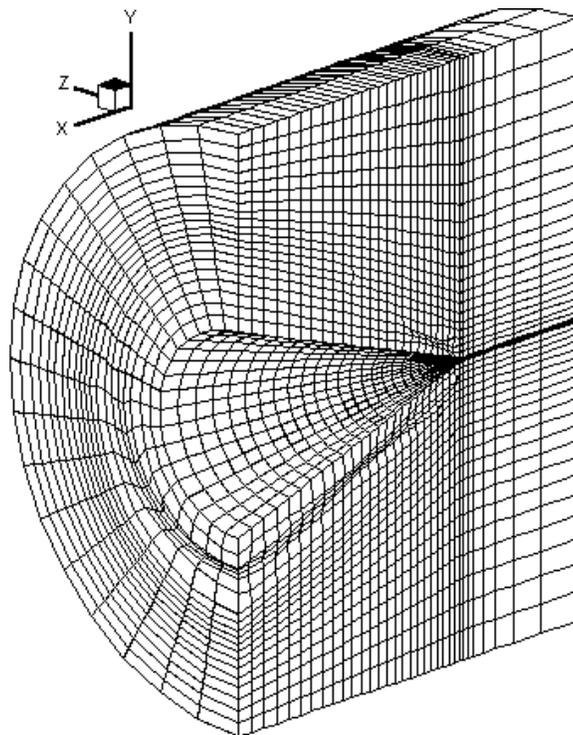


Figura 9.43 – Malha final de elementos finitos, Malha (D)

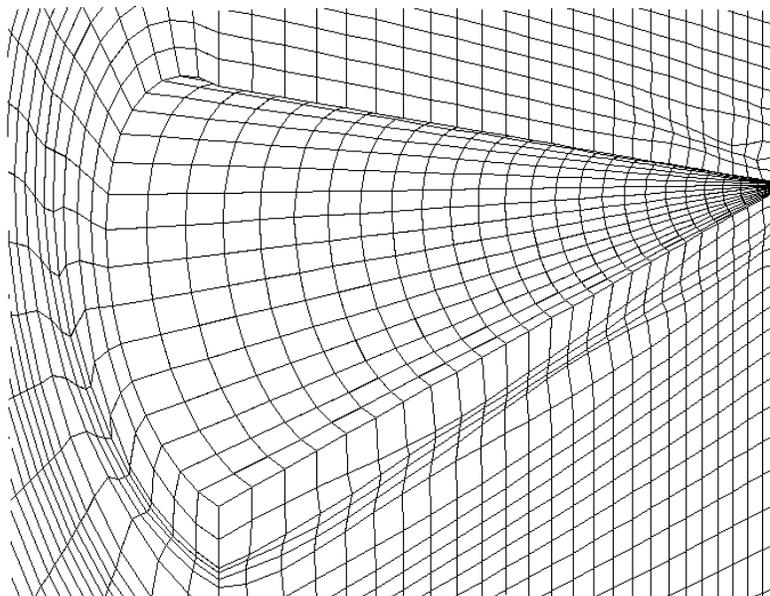


Figura 9.44 – Detalhe da malha final (Malha D)

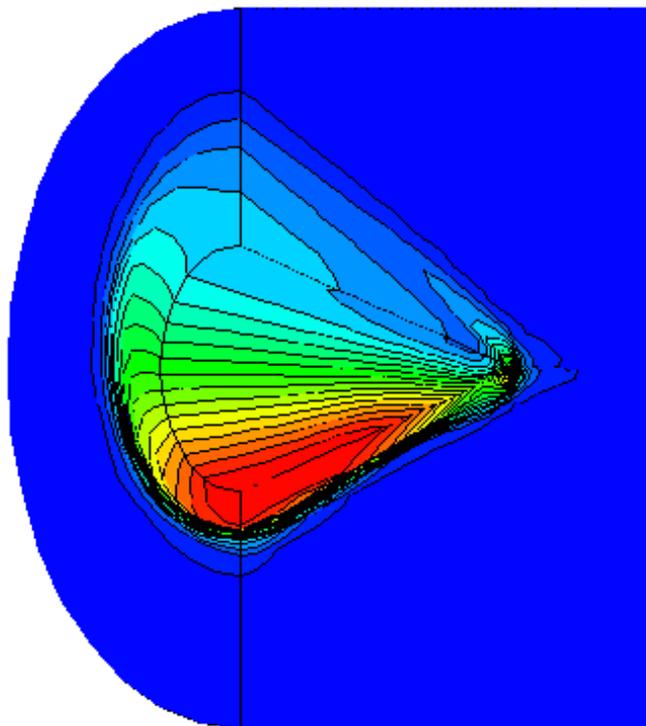


Figura 9.45 – Distribuição da pressão para a malha final, Malha (D)

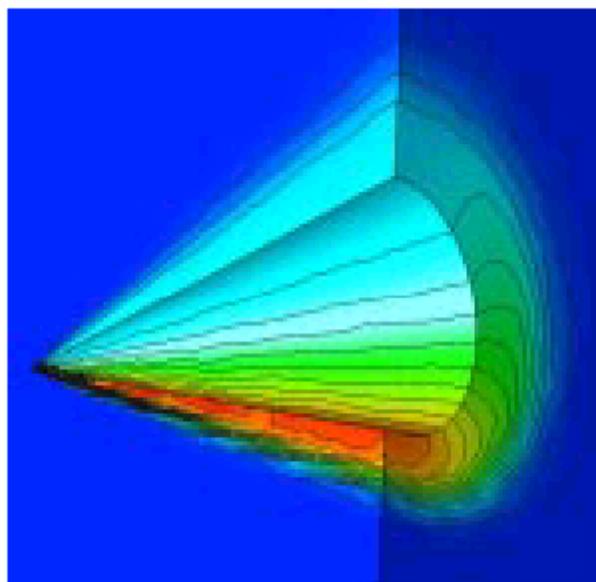


Figura 9.46 – Distribuição de pressão, segundo Cebral e Löhner [1998]

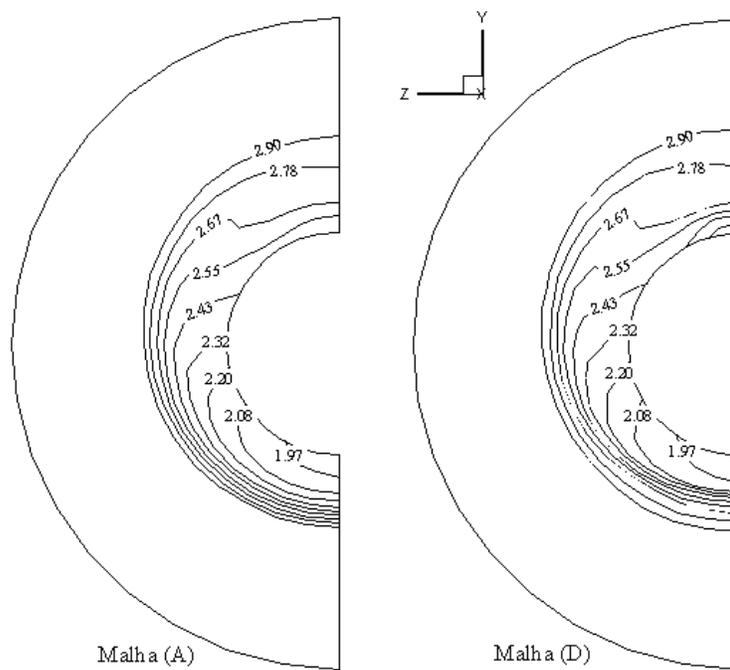


Figura 9.47 – Distribuição de número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (D), no plano yz

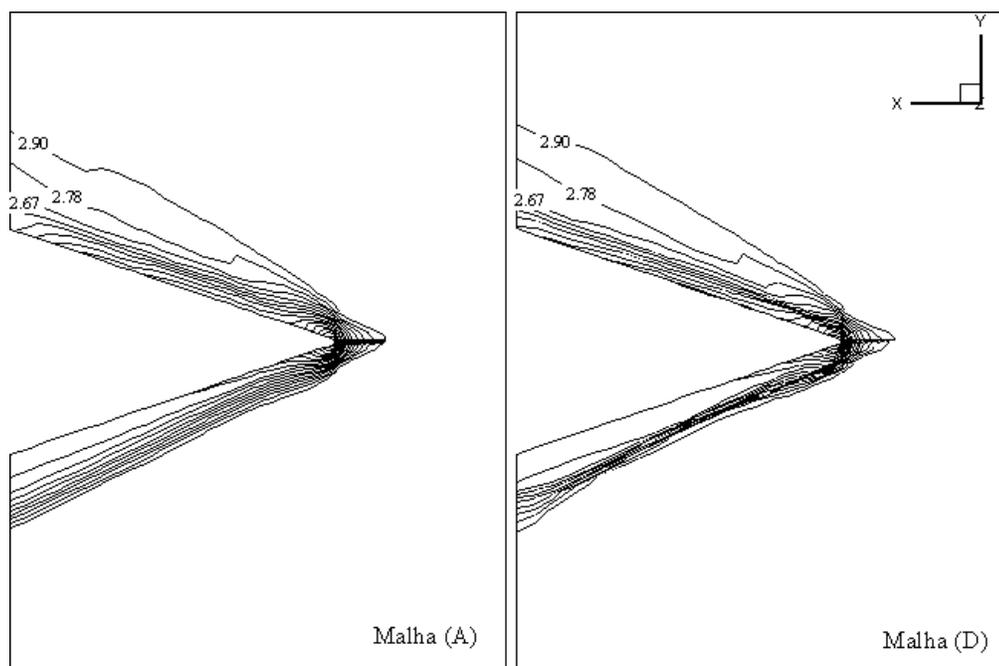


Figura 9.48 – Distribuição de número de Mach para a malha inicial, Malha (A), e a malha final, Malha (D), no plano xy

Finalmente, mostra-se a variação de resíduo na Figura 9.49. O processo de adaptação iniciou-se quando o resíduo começa a ter pouca variação, considerando neste caso para o número de passos de tempo igual a 20700.

Adota-se para os parâmetros do código os seguintes valores: coeficiente de segurança para o intervalo de tempo, $\delta = 0.3$, coeficiente de amortecimento fictício, $C_{AF} = 0.2$, limite de resíduo do processo iterativo igual a 10^{-4} e, finalmente, o limite de resíduo do processo temporal igual a 10^{-5} .

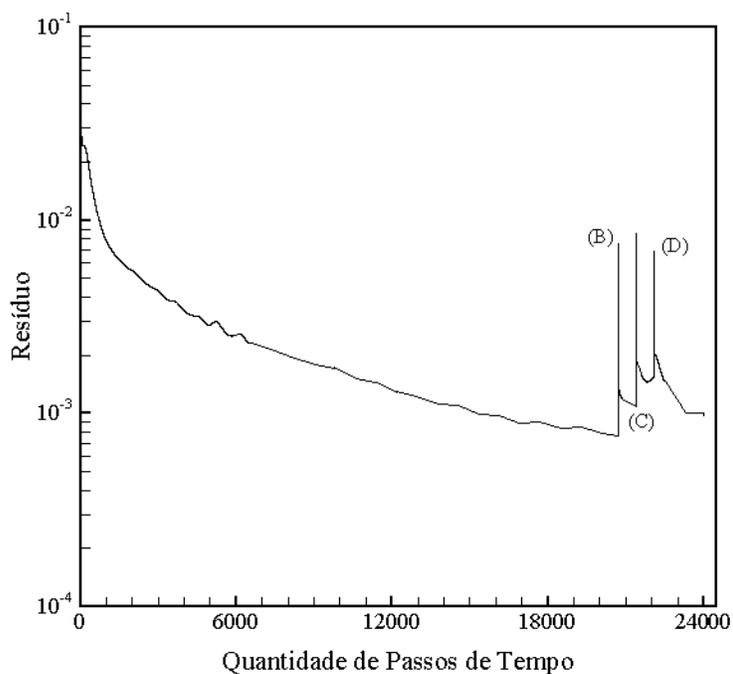


Figura 9.49 – Resíduo para o problema do cone

Conclusões e Sugestões

10.1 Conclusões

O presente trabalho descreve a adaptação via movimento de malhas (método r) em escoamentos de fluidos compressíveis não difusivos, fazendo uso da estimativa de erro *a posteriori* e da métrica de Riemann definida por meio do tensor Hessiano. O movimento da malha foi feito mantendo no máximo possível a suavidade e ortogonalidade local.

Esta dissertação inicia-se com o Capítulo 1, sendo apresentadas as diferentes estratégias usadas nos vários métodos adaptativos. No Capítulo 2, apresentaram-se as principais vantagens do método adaptativo via movimento de nós e as técnicas nas quais estão baseadas. No Capítulo 3, foram apresentadas as equações que governam os escoamentos compressíveis de fluidos. Já no Capítulo 4, descreveu-se como o sistema de equações diferenciais parciais é resolvido com o método de elementos finitos, empregando uma série de Taylor e o método de Bubnov-Galerkin para a discretização do tempo e do espaço, respectivamente. A integração numérica reduzida das matrizes de elemento isoparamétrico hexaédrico de oito nós foi abordada no Capítulo 5. O Capítulo 6 apresentou a descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitrária empregada no movimento da malha. No Capítulo 7, apresentou-se a teoria e formulação empregada no método de adaptação de malhas via movimentos de nós. No Capítulo 8, dedicou-se a apresentar os principais aspectos computacionais do código desenvolvido neste trabalho.

E finalmente, no Capítulo 9, apresentam-se vários exemplos que foram utilizados para testar o código numérico. Observa-se que foram obtidos bons resultados com a técnica de adaptação empregada.

Inicialmente, apresenta-se um problema teórico, onde é prescrita uma função de monitoração, a fim de estudar o efeito dos parâmetros de controle da função objetivo global. Neste exemplo, conclui-se que os parâmetro de controle de ortogonalidade e de suavização, α , potencializam o termo de controle de volume, quando os mesmos são diferentes de zero devido ao fato que mais elementos são concentrados em regiões de grande erro.

Assim, os problemas do canal com um obstáculo em rampa e do canal com um obstáculo em degrau têm mostrado que a implementação do método de adaptação melhora notavelmente os resultados nas regiões com fortes gradientes em comparação com os resultados obtidos no caso da malha fixa.

Para escoamentos em regime transônico, a utilização de adaptação da malha também é vantajosa, porém poderia concentrar mais elementos na onda de choque que está no intradós do aerofólio. Isto pode acontecer devido ao fato de que a intensidade de ambas ondas de choque serem bem diferentes e, portanto, os erros associados a estas também são bem diferentes.

Finalmente, nos exemplos da esfera e do cone mostra-se a aplicação do método para três dimensões. Nestes casos, obtiveram-se melhores resultados com relação à malha sem adaptação, porém a melhora é substancialmente menor em comparação com os casos bidimensionais.

Concluindo, pode-se dizer que o objetivo principal deste trabalho foi atingido, a saber: desenvolver um código computacional de adaptação de malha via o método r para problemas em duas e três dimensões. E os resultados dos exemplos apresentados são muito bons quando são comparados aos da malha original da qual iniciou o processo, principalmente para os casos bidimensionais.

10.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

No presente trabalho desenvolveu-se um código completo para adaptação de malha via movimento dos nós. Algumas sugestões que poderiam ser adicionadas futuramente são citadas a seguir:

- Deve-se testar o algoritmo em problemas de escoamentos de fluidos difusivos.
- Reduzir o número de parâmetros que são especificados para o processo de adaptação.
- Analisar se é possível a adaptação de malhas com diferentes critérios de adaptação, simultaneamente, como por exemplo para o caso de camada limite e ondas de choques.
- Implementar no código o método de refinamento de malha, método h , para conseguir aumentar a precisão na solução. Inicialmente, se utilizaria o método r de adaptação de malha e depois o método de refinamento, uma vez que as regiões de maior gradiente já foram detectadas.

Referências Bibliográficas

Ait-Ali-Yahia D.; Habashi W. G. e Tam A., 1996. “A Directionally Adaptive Methodology Using an Edge-Based Error Estimate on Quadrilateral Grids ”, **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 23, pp. 673-690.

Ait-Ali-Yahia D. e Habashi W. G., 1997. “Finite Element Adaptive Method for Hypersonic Thermochemical Nonequilibrium Flows”, **AIAA J.**, vol.35, nº 8, pp. 1294-1302.

Ait-Ali-Yahia D.; Baruzzi, G.; Habashi W. G.; Fortin, M.; Dompierre, J. e Vallet, M.-G., 2002. “Anisotropic mesh adaptation: towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part II. Structured grids”, **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 39, nº 8, pp. 657-673.

Anderson, J. D. Jrs., H., 1991. **Fundamentals of Aerodynamics**, Ed. 2, McGraw Hill, Singapore.

Arney, D. C. e Flaherty, J. E., 1990. “An adaptive mesh-moving and local refinement method for time-dependent partial differential equations”, **ACM Transactions on Math. Software**, vol. 16, nº 1, pp. 48-71.

Babuška, I., 1973. “The finite element method with lagrangian multipliers”, **Numer. Math.**, vol. 20, pp. 179-192.

Babuška I. e Rheinboldt W., 1978. “Error estimates for adaptive finite element computations”, **SIAM J. Numer. Anal.**, vol. 15, pp. 736-754.

Baumann, C. E.; Storti, M. A. e Idelsohn, C., 1992. “A Petrov-Galerkin technique for the solution of transonic and supersonic flows”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 95, pp. 49-70.

Burbridge, H. P., 1999. **O Esquema Explícito de Taylor-Galerkin na Simulação Numérica de escoamentos Compressíveis Tridimensionais Utilizando Elementos Finitos Hexaédrico de Oito Nós**, Dissertação de Mestrado, PPGEC, UFRGS, Brasil.

Brackbill J. U. e Saltzman J. S., 1982. “Adaptive zoning for singular problems in two dimensions”, **Journal of Comput. Phys.**, vol. 46, pp. 342-368.

Brezzi, F., 1974. “On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers”, **RAIRO Anal. Numer.**, vol. 8, pp. 129-151.

Brooks, A. N. e Hughes, T. J. R., 1982a. “Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 32, nº 1-3, pp. 199-259.

Brooks, A. N. e Hughes, T. J. R., 1982b. “A theoretical framework for Petrov-Galerkin methods with discontinuous weighting functions: application to the streamline upwind procedure”, **Finite Elements in Fluids IV**, pp. 46-65, John Wiley, Chichester.

Cao, W.; Huang, W. e Rusell, R. D., 1999. “A r -Adaptive Finite Element Method Based upon Moving Mesh PDEs”, **Journal of Comput. Phys.**, vol. 149, pp. 221-244.

Carcaillet R., Dulikravich G. S. e Kennon S. R., 1986a. “Generation of solution-adaptive computational grids using optimization”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 57, pp. 279-295.

Carcaillet, R.; Kennon, S. R. e Dulikravich, G. S., 1986b. “Optimization of Three-dimensional Computational Grids”, **Journal of Aircraft**, vol. 23, nº 5, pp. 415-421.

Cebral, J. R. e Löhner, R., 1998. “Load transfer for viscous fluid-structure interaction”, **Proc. IV World Congress in Computational Mechanics**, Buenos Aires, Argentina, June 29 - July 2, 1998.

Christie T. J. e Griffiths D. F., 1976. “Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives”, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 10, pp. 1389-1396.

Clough, R. W., 1960. “The finite element in plane stress analysis”, **Anais da 2º American Society of Civil Engineers (ASCE)**, Conf. On Eletronic Computation.

Dannenhoffer, J. F., 1991. "A Comparison of Adaptive-Grid Redistribution and Embedding for Steady Transonic Flows", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 32, n° 4, pp. 653-663.

Demkowicz, L.; Oden, J. T.; Strouboulis, T. e Devloo, P., 1985. "An adaptive p -version finite element method for transient flow problem with moving boundaries", **Finite Elements in Fluids VI**, ed. Gallagher, R. H.; Carey, G. F.; Oden, J. T. e Zienkiewicz, O. C., pp. 291-305, John Wiley, Chichester.

Demkowicz L. e Oden J. T., 1986. "On a Mesh Optimization Based on a Minimization of Interpolation Error", **International Journal of Engineering Science**, vol. 24, n° 1, pp. 55-68.

Demkowicz, L.; Oden, J. T.; Rachowicz, W. e Hardy, O., 1989. "Toward a universal h - p finite element strategy, Part 1. Data structure and constrained approximation", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 77, pp. 79-112.

Diaz, A. R.; Kikuchi, N. e Taylor, J., 1983. "A method of grid optimization for finite element methods", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.41, pp. 29-45.

Donea, J.; Giuliani, S. e Halleux, J. P., 1982. "An arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element method for transient dynamic fluid-structure interactions", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.33, pp. 689-723.

Donea, J., 1984. "A Taylor-Galerkin method for convective transport problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 20, n° 1, pp. 101-119.

Dompierre, J.; Vallet, M.-G., Bourgault, Y.; Fortin, M. e Habashi W. G., 2002. "Anisotropic mesh adaptation: towards user-independent, mesh-independent and solver-independent CFD. Part III. Unstructured meshes", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 39, n° 8, pp. 675-702.

Dukowicz J. K., 1984. "Conservative rezoning (remapping) for general quadrilateral meshes", **J. Comput. Phys.**, vol. 54, pp. 411-424.

Dwyer H. A.; Kee, R. J. e Sanders, B. R., 1980. "Adaptive Grid Method for Problems in Fluid Mechanics and Heat Transfer", **AIAA J.**, vol. 18, n° 10, pp. 1205-1216.

Dwyer H. A., 1984. "Grid adaptation for problems in fluid dynamics", **AIAA J.**, vol. 22, pp. 1705-1712.

Eiseman P. R., 1985. "Alternating direction adaptive grid generation", **AIAA J.**, vol. 23, pp. 551-560.

Eiseman, P. R., 1987. "Adaptive Grid Generation", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.64, pp. 321-376.

George, P. L., 1991. **Automatic Mesh Generation – Application to Finite Element Methods**, John Wiley & Sons Ltd., New York.

Gnoffo, P. A., 1983. "A Finite-Volume, Adaptive Grid Algorithm Applied to Planetary Entry Flow Fields", **AIAA J.**, vol. 21, n° 9, pp. 1249-1254.

Hansbo, P. e Johnson, C., 1991. "Adaptive streamline diffusive methods for compressible flow using conservation variables", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 87, n° 2-3, pp. 267-280.

Hawken, D. F.; Gottlieb, J. J. e Hansen, J. S., 1991. "Review of Some Adaptive Node-Movement Techniques in Finite-Element and Finite-Difference Solutions of Partial Differential Equations", **J. Comput. Phys.**, vol. 95, pp. 254-302.

Hayes L. J., Kennon S. R. e Dulikravich G. S., 1986. "Grid Orthogonalization for Curvilinear Alternating-Direction Techniques", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 59, pp. 141-154.

Herbst, B. M.; Schoombie, S. W. e Mitchell, A. R., 1982. "A Moving Petrov-Galerkin Method for Transport Equations", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 18, n° 9, pp. 1321-1336.

Hughes, T. J. R.; Liu, W. K. e Zimmerman, T., 1981. "Lagrangian-Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flow", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.33, pp. 689-723.

Hughes, T. J. R.; Mallet, M. e Mizukami, A, 1986a. "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: II. Beyond SUPG", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 54, n° 3, pp. 341-355.

Hughes, T. J. R. e Mallet, M., 1986b. "A discontinuity-capturing operator for multidimensional advective-diffusive systems", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 58, pp. 329-336.

Hughes, T. J. R., 1987a. "**The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis**", Prentice Hall, New York.

Hughes, T. J. R., 1987b. "Recent Progress in the Development and Understanding of SUPG Methods with Special Reference to the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 7, nº 11, pp. 1261-1275.

Jens, L.; Cao, W.; Huang, W. e Rusell, R. D., 2003. "A two-dimensional moving finite element method with local refinement based on a posteriori error estimates", **Applied Numerical Mathematics**, vol. 46, pp. 75-94.

Kennon S. R. e Dulikravich G. S., 1986. "Generation of Computational Grids Using Optimization", **AIAA J.**, vol. 24, pp. 1069-1073.

Kessler, M. P, 2002. **Simulação Numérica de escoamentos Hipersônicos em Não-Equilíbrio Termo-Químico através do Método de Elementos Finitos**, Tese de Doutorado, PROMEC, UFRGS, Brasil.

Kikuchi, N., 1986. "Adaptive Grid-Design Methods for Finite Element Analysis", **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.55, pp. 129-160.

Kreis, R. I.; Thames, F. C. e Hassan, H. A., 1986. "Application of a Variational Method for Generating Adaptive Grids", **AIAA J.**, vol. 24, nº 3, pp. 404-410.

Lax, P. D. e Wendroff, B., 1960. "Systems of conservation laws", **Comm. Pure Appl. Math.**, vol.13, pp. 217-237.

Li, R.; Tang, T. e Zhang, P., 2002. "A Moving Mesh Finite Element Algorithm for Singular Problems in Two and Three Space Dimensions", **Journal of Comput. Phys.**, vol. 177, pp. 365-393.

Löhner, R.; Morgan, K. e Zienkiewicz, O. C., 1984. "The solution of non-linear hyperbolic equation systems by the finite elements method", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 4, nº 11, pp. 1043-1063.

Löhner, R.; Morgan, K. e Zienkiewicz, O. C., 1985. “An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 51, pp. 441-465.

Maliska, C. R., 1995. **Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos Computacional**, LTC, Rio de Janeiro.

Miller, K. e Miller, R. N., 1981. “Moving finite elements I”, **SIAM J. Numer. Anal.**, vol. 18, pp. 1019-1032.

Molina, R. C. e Huot, J. P., 1992. “A one-point integration finite element solver for the fast solution of the compressible Euler equations”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.95, pp. 37-48.

Nakahashi, K. e Deiwert, G. S., 1986. “Three-Dimensional Adaptive Grid Method”, **AIAA J.**, vol. 24, nº 6, pp. 948-954.

Nakahashi K. e Deiwert G. S., 1987. “Self-Adaptive Grip Method with Application to Airfoil Flow”, **AIAA J.**, vol. 25, nº 4, pp. 513-520.

Oden, J. T.; Strouboulis, T. e Devloo, P., 1986. “Adaptive finite element methods for the analysis of inviscid compressible flow: I. Fast refinement/unrefinement and moving mesh methods for unstructured meshes”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.59, pp. 327-362.

Oden, J. T.; Strouboulis, T. e Devloo, P., 1987. “Adaptive finite element methods for high compressible flow”, **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 7, pp. 1211-1228.

Oden, J. T.; Demkowicz, L.; Westermann, T. e Rachowicz, W., 1989. “Toward a universal h - p finite element strategy, Part 2. *A posteriori* error estimates”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 77, pp. 113-180.

Oden J. T., Demkowicz L., Liszka T. e Rachowicz W., 1990a. “ h - p Adaptive Finite Element Methods for Compressible and Incompressible Flows”, **Computing Systems in Engineering**, vol.1,nº 2-4, pp. 523-534.

Oden, J. T.; Bass, J. M.; Huang, C. Y. e Berry, C. W., 1990b. “Recent Results on Smart Algorithms and Adaptive Methods for Two- and Three-Dimensional Problems in Computational Fluid Mechanics”, **Computer & Structures**, vol. 35, nº 4, pp. 381-396.

Oden J. T., 1994. “Optimal h - p finite element methods”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol.112, pp. 309-331.

Patra A. e Oden J. T., 1997. “Computational techniques for adaptive hp finite element methods”, **Finite Elements in Analysis and Design**, vol.24, pp. 27-39.

Peraire J., Vahdati M., Morgan K. e Zienkiewicz O. C., 1987. “Adaptive remeshing for compressible flow computations”, **Journal of Comput. Phys.**, vol.72, pp. 449-466.

Petry, A. P., 2002. **Análise Numérica de escoamentos Turbulentos Tridimensionais Empregando o Método de Elementos Finitos e Simulação de Grandes Escalas**, Tese de Doutorado, PROMEC, UFRGS, Brasil.

Pierson, B. L. e Kutler, P., 1980. “Optimal Nodal Point Distribution for Improved Accuracy in Computatioal Fluid Dynamics”, **AIAA J.**, vol.18, nº 1, pp. 49-54.

Press, W. H.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T. e Flannery, B. P., 1992. **Numerical Recipes in Fortran 77 – The Art of Scientific Computing**, Second Edition, Cambridge University Press, New York, USA.

Rachowicz, W.; Oden, J. T. e Demkowicz, L., 1989. “Toward a universal h - p finite element strategy, Part 3. A study of the design of h - p meshes”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 77, pp. 181-212.

Rossa, A. L., 2000. **Um esquema semi-implícito para a simulação numérica de escoamentos incompressíveis não isotérmicos via M.E.F. usando a técnica de Taylor-Galerkin e Estruturas Deformáveis usando o Método de Elementos Finitos**, Dissertação de Mestrado, PPGEC, UFRGS, Brasil.

Schlichting, H., 1979. **Boundary-layer theory**, Ed. 7, McGraw Hill, New York, NY.

Strang G., 1988. “**Linear Algebra and Its Applications**”, Harcout Brace & Company, New York.

Szabó, B. A e Mehta, A. K., 1976. “ p -convergent finite element approximations in fracture mechanics”, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 12, pp. 551-560.

Taghaddosi, F.; Habashi, W. G.; Guèvremont, G. e Ait-Ali-Yahia, D., 1999. “An Adaptive Least-Squares Method for the Compressible Euler Equations”, **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 31, n° 7, pp. 1121-1139.

Teixeira, P. R. F., 2001. **Simulação Numérica da Interação de Escoamentos Tridimensionais de Fluidos Compressíveis e Incompressíveis e Estruturas Deformáveis usando o Método de Elementos Finitos**, Tese de Doutorado, PPGEC, UFRGS, Brasil.

Thompson J. F., 1984. “Grid generation techniques in computational fluid dynamics”, **AIAA J.**, vol. 22, pp. 1505-1523.

Turner, M. J.; Clough, R. W.; Martin, H. C. e Topp, L. J., 1956. “Stiffness and deflection analysis of complex structures”, **Aero Science**, vol. 23, pp. 805-823.

White, F. M., 2002. **Mecânica dos Fluidos**, Edição 4º, McGraw Hill, Rio de Janeiro, Brasil.

Winslow, A. M., 1967. “Numerical solution of the quasi-linear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh”, **Journal of Comput. Phys.**, vol. 1, pp. 149-172.

Yoon, K. T. e Moon, S. Y., 1998. “Flowfield-dependent mixed explicit-implicit (FDMEI) methods for high and low speed and compressible and incompressible flows”, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 151, pp. 75-104.

Youn, S. K. e Park, S. H., 1995. “A New Direct Higher-Order Taylor-Galerkin Finite Element Method”, **Computer & Structures**, vol. 56, n° 4, pp. 651-656.

Zegeling, P. A., 1999. “Moving grid techniques”, **Handbook of Grid Generation**, Eds. Joe F. Thompson, Bharart K. Soni, Nigel P. Weatherill, CRC Press LLC.

Zienkiewicz, O. C.; Löhner, R.; Morgan, K. e Nakazawa, S., 1984. “Finite elements in fluid mechanics – A decade of progress”, **Finite Elements in Fluids V**, cap.1, pp. 1-26, John Wiley, New York.

Zienkiewicz, O. C. e Taylor, R. L., 1991. **The finite element method, solid and fluid mechanics dynamics and non-linearity**, vol.2, 4 ed., McGraw-Hill, Singapore.

Termos Difusivos

A.1 Expansão dos Termos Difusivos

Os termos difusivos são expandidos para sua inclusão na formulação completa das equações de Navier-Stokes, segundo Burbridge [1999].

O vetor de termos difusivos foi definido pelas seguintes equações:

$$\mathbf{G}_i^n = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ -\tau_{i1} \\ -\tau_{i2} \\ -\tau_{i3} \\ -\tau_{ij}v_j - K \frac{\partial u}{\partial x_i} \end{array} \right\}^n \quad (\text{A.1})$$

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right] + \lambda \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (\text{A.2})$$

com $i, j = 1, 2, 3$

Como pode observar-se nas equações acima, os termos correspondentes ao vetor \mathbf{G}_i^n envolvem derivadas primeiras das variáveis v_i e u . Levando em consideração que nas equações de conservação aparece o termo $\partial \mathbf{G}_i^n / \partial x_i$, verifica-se que os termos difusivos contêm derivadas segunda das variáveis. Portanto, para relaxar as condições de continuidade impostas às funções de interpolação quando é aplicado o método de Galerkin, convém trabalhar com a forma fraca da equação integral. Integrando por partes os termos difusivos e de condutibilidade térmica, obtém-se:

$$\int_{\Omega_e} [\Phi]^T \frac{\partial \mathbf{G}_i^n}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Gamma_e} [\Phi^*]^T \mathbf{G}_i^n n_i d\Gamma - \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \mathbf{G}_i^n d\Omega \quad (\text{A.3})$$

Assim, pode-se observar que no lado direito desta última expressão, ficam integrais contendo apenas derivadas primeira das variáveis de campo.

A primeira integral do lado direito da expressão (A.3) corresponde aos termos de contorno. Estes termos já foram desenvolvidos no Capítulo 4 e, portanto, não serão tratados aqui. Interessa, então, estudar a segunda integral do lado direito da expressão anterior.

Expandindo o vetor \mathbf{G}_i^n nesta última integral, observa-se que a mesma não agrega nenhuma contribuição na Equação de Conservação de Massa, enquanto que as suas respectivas contribuições nas Equações de Conservação de Quantidade de Movimento e de Energia são as seguintes:

- Equação de Conservação da Quantidade de Movimento:

$$-\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \mathbf{G}_i^n d\Omega = -\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-\tau_{ij}^n) d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega \quad (\text{A.4})$$

- Equação de Conservação da Energia:

$$\begin{aligned} -\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \mathbf{G}_i^n d\Omega &= -\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} (-\tau_{ij}^n v_j^n) d\Omega - \int_{\Omega_e} -K \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_i} d\Omega = \\ &= \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n v_j^n d\Omega + \int_{\Omega_e} K \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_i} d\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Unicamente para mostrar o procedimento, expande-se a integral correspondente à Equação de Conservação da Quantidade de Movimento. Introduzindo a expressão (A.2) em (A.4), obtém-se:

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right]^n d\Omega \quad (\text{A.6})$$

Substituem-se, então, as variáveis aproximadas v_i^n pelas suas correspondentes expressões interpoladas que se mostram abaixo:

$$v_i^n = [\Phi] \{v_i\}^n \quad (\text{A.7})$$

obtendo-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = & \left(\int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_j} d\Omega \right) \{v_i\}^n + \left(\int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_i} d\Omega \right) \{v_j\}^n + \\ & + \left(\int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial [\Phi]}{\partial x_k} d\Omega \right) \{v_k\}^n \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Esta expressão poderia ser utilizada diretamente mas, ainda pode-se efetuar uma transformação que permite reduzir a quantidade de termos necessários.

Se a expressão anterior é expandida para os subíndices $i, j, k = 1, 2, 3$, obtém-se três equações contendo nove termos cada uma. Se sobre estas equações é efetuado um agrupamento dos termos, extraindo as componentes de velocidade como fator comum, e logo após se levam as equações novamente à forma compacta, pode-se provar que a equação (A.8) é equivalente à seguinte expressão:

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial [\Phi]^T}{\partial x_i} \tau_{ij}^n d\Omega = [D]_{ij} \{v_i\}^n \quad (\text{A.9})$$

onde,

$$[D]_{ij} = \begin{cases} \int_{\Omega_e} \mu \left(2 + \frac{\lambda}{\mu} \right) \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_{(i)}} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_{(i)}} d\Omega + \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_k} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_k} d\Omega ; \\ \text{se } i = j, \text{ e } \begin{cases} i = 1 \rightarrow k = 2, 3 \\ i = 2 \rightarrow k = 1, 3 \\ i = 3 \rightarrow k = 1, 2 \end{cases} \\ \\ \int_{\Omega_e} \mu \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega_e} \lambda \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_j} \frac{\partial[\Phi]}{\partial x_i} d\Omega ; \\ \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

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

Para os termos iterativos, as matrizes são as mesmas, isto é:

$$-\int_{\Omega_e} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta \mathbf{G}_i^{n+1} d\Omega = -\int_{\Omega_e} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} (-\Delta \tau_{ij}^{n+1}) d\Omega = \int_{\Omega_e} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta \tau_{ij}^{n+1} d\Omega \quad (\text{A.11})$$

sendo,

$$\int_{\Omega_e} \frac{\partial[\Phi]^T}{\partial x_i} \Delta \tau_{ij}^{n+1} d\Omega = [D]_{ij} \{ \Delta v_i \}^{n+1} \quad (\text{A.12})$$

Um processo similar ao efetuado acima deve ser realizado para expandir os termos difusivos correspondentes à Equação de Conservação de Energia. Porém, deve-se observar que os termos difusivos da Equação de Conservação de Energia contêm um produto de funções, isto é, o produto $\tau_{ij}^n v_i^n$ que aparece na expressão (A.7). Isto conduz à aparição de matrizes adicionais unicamente para os termos iterativos, devido a que o incremento temporal $\Delta(\tau_{ij}^n v_i^n)^{n+1}$ tem que ser desenvolvido através da regra da derivada de um produto, ou seja:

$$\Delta(\tau_{ij} v_i)^{n+1} = v_i^n \Delta \tau_{ij}^{n+1} + \tau_{ij}^n \Delta v_i^{n+1} \quad (\text{A.13})$$

No capítulo 4, aquelas matrizes adicionais têm sido denominadas $[E^*]_i$.