

22^º COLÓQUIO BRASILEIRO DE MATEMÁTICA

**MÉTODOS NUMÉRICOS PARA
ESCOAMENTOS EM ALTA VELOCIDADE**

LUIS CARLOS DE CASTRO SANTOS

IMPA 26 - 30 JULHO, 1999



LUIS CARLOS DE CASTRO SANTOS (IME/USP, SP)

COPYRIGHT © by Luis Carlos de Castro Santos
CAPA by Sara Müller

ISBN 85-244-0152-4



Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
INSTITUTO DE MATEMÁTICA PURA E APLICADA
Estrada Dona Castorina, 110 - Jardim Botânico
22460-320 - Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Conteúdo

1	Introdução	5
1.1	Compressibilidade	5
1.2	Velocidade do Som	7
1.3	Ondas de Choque	9
1.4	Técnicas Modernas de Solução	10
2	Equações de Conservação	11
2.1	Princípios	11
2.2	Equação da Continuidade	14
2.3	Equação da Quantidade de Movimento	16
2.4	Equação da Energia	19
2.5	Forma Vetorial Conservativa	20
3	Métodos Numéricos	23
3.1	Discretização do Domínio	23
3.1.1	Malhas Estruturadas	24
3.1.2	Malhas Não-Estruturadas	28
3.2	Discretização das Equações	28
3.3	Método das Diferenças Finitas	32
3.3.1	Solução de Sistemas de Equações	35
3.4	Análise de Estabilidade	37
4	Modelos Simples	41
4.1	A Equação da Onda	41
4.1.1	Métodos Explícitos	43
4.1.2	Métodos Implícitos	44
4.1.3	Métodos de Passo Múltiplo	44
4.2	Problemas Não-Lineares	45

4.2.1	Relações de Compatibilidade	45
4.2.2	O Problema de Riemann	46
4.2.3	A Equação de Burgers	47
4.3	Dissipação Artificial	49
4.4	Métodos de Alta Resolução	51
4.4.1	TVD (Total Variation Diminishing)	51
4.4.2	Esquema TVD de 1ª Ordem	52
5	Escoamentos Compressíveis	53
5.1	Navier-Stokes Compressível	53
5.2	Formulação Explícita	56
5.3	Formulação Implícita	57
5.3.1	Decomposição das Matrizes Jacobianas	59
5.4	Condições de Contorno	61
5.4.1	Superfície sólida	62
5.4.2	Condições em Contornos Fluidos	63
6	Escoamento Hipersônico	67
6.1	Escoamentos a Alto Mach	67
6.1.1	Efeitos de Gás Real	68
6.1.2	Cinética Molecular	69
6.1.3	Reações Químicas	69
6.2	Modelo com Reações Químicas	70
6.2.1	Equilíbrio	70
6.2.2	Não-equilíbrio	71

Capítulo 1

Introdução

1.1 Compressibilidade

Até o início deste século a maioria dos problemas de engenharia, envolvendo a Mecânica dos Fluidos, partia da premissa que a densidade (ou massa específica) do fluido (líquido ou gasoso) era constante. A base de solução desses problemas era a aplicação da equação de Bernoulli:

$$p + \frac{1}{2}\rho V^2 = K$$

onde p é a pressão, ρ é a densidade do fluido e V a velocidade do fluido. A constante K é a mesma para o qualquer ponto ao longo de uma linha de corrente. Entretanto na virada do século começaram a surgir dispositivos nos quais as elevadas velocidades de escoamento não permitiam considerar a hipótese de densidade constante.

Em escoamentos internos, como dutos de área variável ($S = S(x)$) por exemplo, considere duas seções de áreas diferentes, tal que:

$$S_1 > S_2$$

pela conservação da massa:

$$\begin{aligned} \dot{m}_1 &= \dot{m}_2 \\ \rho_1 V_1 S_1 &= \rho_2 V_2 S_2 \end{aligned}$$

se a densidade for constante:

$$V_1 < V_2$$

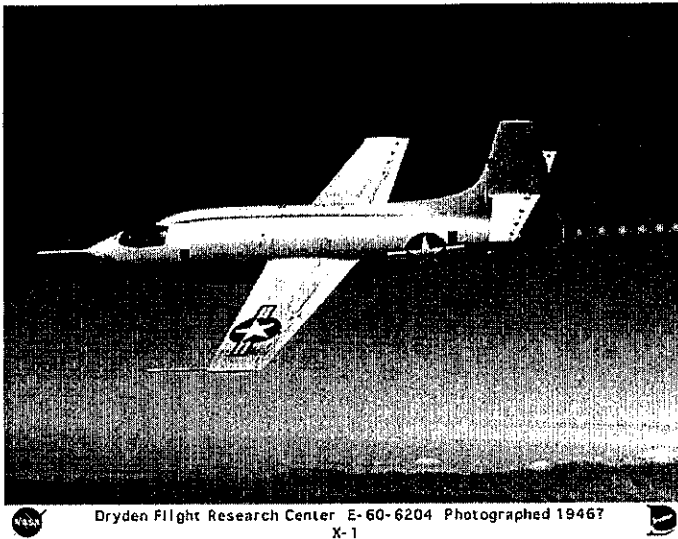


Figura 1.1: Bell XS-1, primeira aeronave supersônica tripulada.

a aplicação da equação de Bernoulli leva a conclusão que:

$$p_1 > p_2$$

A hipótese de densidade constante é contrária as experiências com gases que indicam que:

$$\frac{p}{\rho} = f(T)$$

Logo a aplicação da equação de Bernoulli levanta a questão sobre a compressibilidade do fluido, que é uma propriedade definida como:

$$\tau = \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dp}$$

Para a água, por exemplo, τ vale $5 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{N}$ na pressão atmosférica, enquanto para o ar, nas mesmas condições, vale $1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{N}$. Se existem gradientes de pressão elevados as variações de densidades nos líquidos permanecem pequenas devido ao reduzido valor da compressibilidade, enquanto que nos gases podem atingir valores consideráveis, devido às diferenças de ordens de magnitude. Os gradientes de pressão estão associados a escoamentos,

tanto como causa ou efeito. Dessa forma quando consideramos escoamentos em alta velocidade certamente deve-se considerar o escoamento como compressível.

1.2 Velocidade do Som

Considere um fluido, como por exemplo o ar, que é composto por moléculas diferentes que se movem aleatoriamente em velocidades e energias diferentes a cada instante, ao redor de um valor médio. A temperatura está associada a energia cinética média dessas moléculas e a pressão à variação média da quantidade de movimento das colisões moleculares. Uma explosão, por exemplo, representa uma liberação concentrada de energia, que se traduz numa súbita elevação da temperatura, ou seja energia cinética, e consequentemente velocidade. Logo devido ao aumento do número de colisões, a pressão também sobe. Essa região inicialmente concentrada, se expande em grande velocidade, e define duas regiões distintas: a massa de fluido ainda não perturbada e a massa de fluido que já recebeu uma parcela de energia devido a explosão. Inicialmente vamos considerar uma explosão "fraca" tal que na interface entre as duas regiões as variações tem intensidade infinitesimal. O referencial será posicionado na interface, e o processo será representado pelo fluxo de fluido com velocidade a :

$$\begin{array}{c|c}
 \textit{antes} & \textit{depois} \\
 p & p + dp \\
 T & T + dT \\
 \rho & \rho + d\rho \\
 a & a + da
 \end{array}$$

Se o fluxo de massa, por unidade de volume, entre as duas regiões se conserva:

$$\begin{aligned}
 \rho a &= (\rho + d\rho)(a + da) \\
 \rho a &= \rho a + a d\rho + \rho da + d\rho da
 \end{aligned}$$

Desprezando diferenciais de segunda ordem temos:

$$a = -\rho \frac{da}{d\rho}$$

De maneira semelhante se a quantidade de movimento, por unidade de volume, também se conserva:

$$p + \rho a^2 = (p + dp) + (\rho + d\rho)(a + da)^2$$

Desprezando novamente as diferenciais de ordem superior tem-se:

$$da = -\frac{dp + a^2 d\rho}{2a\rho}$$

Combinando as duas expressões obtém-se:

$$a^2 = \left(\frac{dp}{d\rho}\right)$$

Estas variações infinitesimais correspondem às ondas sonoras, que se propagam através do fluido à velocidade do som a . Esse valor de referência serve para estabelecer os parâmetros de qualificação dos escoamentos quanto a velocidade. Um escoamento em alta velocidade é aquele cuja velocidade média é comparável a velocidade do som. Um parâmetro mais adequado é o número adimensional:

$$M = \frac{V}{a}$$

que recebe o nome de número de Mach, é bastante usado nos estudos de fluidos compressíveis. Da definição de compressibilidade chega-se a expressão:

$$a^2 = \frac{1}{\rho\tau}$$

Logo percebe-se que para os líquidos, onde a compressibilidade é baixíssima, a velocidade do som é extremamente alta, cerca de 1400 m/s . Para o ar, que na maioria das situações de interesse pode ser considerado um gás perfeito, a expressão da velocidade do som torna-se:

$$a^2 = \frac{\gamma p}{\rho} = \gamma RT$$

onde γ é a relação dos calores específicos ($\gamma = 1.4$) e R a constante do gas ($R = 287 \frac{J}{kg \cdot K}$). Nas condições da atmosfera padrão ao nível do mar a velocidade do som é cerca de 340 m/s .

Os regimes de escoamento são classificados pelo número de Mach:

$M < 1$	escoamento subsônico
$M = 1$	escoamento sônico
$M > 1$	escoamento supersônico

1.3 Ondas de Choque

No caso anterior assumiu-se a hipótese que a interface entre as duas regiões de fluido delimitava uma variação infinitesimal. Se estas variações não são desprezíveis a região limite entre as duas regiões é a chamada onda de choque. A espessura dessa onda, onde ocorrem as trocas moleculares é proporcional a $10^{-7} m$, portanto representa-se uma onda de choque como uma descontinuidade nas propriedades do fluido. Considerando as proximidades da interface temos:

<i>antes</i>		<i>depois</i>
p_1		$p_2 > p_1$
T_1		$T_2 > T_1$
ρ_1		$\rho_2 > \rho_1$
u_1		$u_2 < u_1$
$M_1 > 1$		$M_2 < 1$

Novamente considerando o referencial estacionário sobre a onda, e o escoamento da esquerda para a direita, e aplicando-se as conservações de massa, energia e quantidade de movimento para um gás perfeito temos as seguintes relações:

$$M_2^2 = \frac{1 + \left(\frac{\gamma-1}{2}\right) M_1^2}{\gamma M_1^2 - \left(\frac{\gamma-1}{2}\right)}$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma+1) M_1^2}{2 + (\gamma-1) M_1^2}$$

$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1) \right] \left[\frac{2 + (\gamma-1) M_1^2}{(\gamma+1) M_1^2} \right]$$

Estas relações são consistentes para valores de $M_1 < 1$, entretanto se analisarmos a variação de entropia:

$$s_2 - s_1 = c_p \ln \left(\frac{T_2}{T_1} \right) - R \ln \left(\frac{p_2}{p_1} \right) = s(M_1)$$

podemos perceber que se:

$$M_1 < 1 \quad \text{a entropia diminui através do choque}$$

$M_1 = 1$ a entropia se mantém constante

$M_1 > 1$ a entropia aumenta

Logo, de acordo com a segunda lei da termodinâmica apenas a situação $M_1 \geq 1$ tem sentido físico. Também é fácil perceber que se $M_1 = 1$ temos:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{p_2}{p_1} = \frac{T_2}{T_1} = \frac{M_2}{M_1} = 1$$

que corresponde a uma onda de choque infinitesimal, chamada de onda de Mach ou onda simples. Percebe-se que essa situação corresponde a propagação de ondas sonoras, como visto anteriormente.

1.4 Técnicas Modernas de Solução

O tratamento moderno dos problemas em escoamentos compressíveis, tanto internos como externos, é dado pelas técnicas de Mecânica dos Fluidos Computacional. As equações governantes da Mecânica dos Fluidos são resolvidas numericamente por algoritmos dedicados desenvolvidos a partir do estudo de métodos mais simples para as equações diferenciais parciais clássicas. Esta tecnologia permite a representação de problemas realistas, mas requer um uso intenso de recursos computacionais. Os capítulos seguintes se dedicam a descrição dessas técnicas.

Capítulo 2

Equações de Conservação

2.1 Princípios

Uma definição mais precisa de fluido é um dos estados da matéria no qual a deformação independe da força aplicada, como no caso da água que ocupa formatos diferentes em vasilhames diferentes.

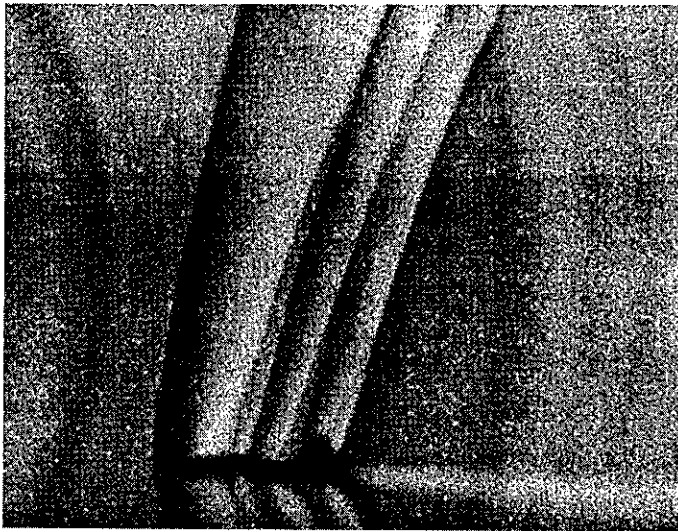
Em seu modelo de fluido, baseado em dinâmica de partículas, Newton postulou que para uma classe de fluidos, chamados Newtonianos, a tensão é diretamente proporcional a taxa de deformação, e não a deformação em si como no caso dos sólidos. A Lei da Viscosidade de Newton tem a forma:

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$$

onde τ é a tensão de cisalhamento gerada pela taxa de variação da deformação com o tempo $\frac{\partial u}{\partial y}$. A constante μ , chamada de viscosidade, é uma propriedade física do fluido.

Os princípios físicos que governam a Mecânica dos Fluidos são as leis básicas de conservação:

1. **Conservação da Massa:** Massa não pode ser criada nem destruída (reações nucleares não são consideradas)
2. **Conservação da Quantidade de Movimento:** A quantidade de movimento se conserva, ou a resultante das forças externas é a variação da quantidade de movimento (2a. Lei de Newton)



Dryden Flight Research Center EC94-42528-1 Photographed 13DEC1993
Schlieren photograph of T-38 shock waves at Wallops Island, MD.
Speed: Mach 1.1 Altitude 13,700 ft. (NASA/Dr. Leonard Weinstein)

Figura 2.1: Fotografia “Schlieren” de aeronave em vôo

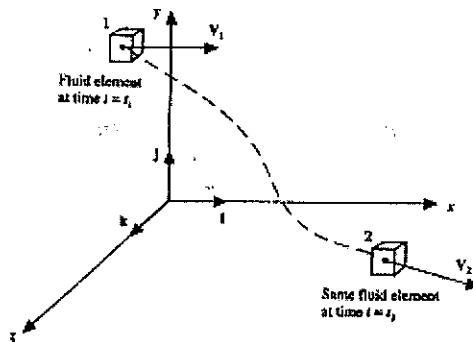


Figura 2.2: Elemento infinitesimal de fluido se movendo com o escoamento.

3. Conservação da Energia: A energia se conserva, embora possa mudar de forma (novamente reações nucleares não são consideradas)

A diferença na aplicação desses princípios, em relação à sistemas mecânicos, para o escoamento de fluidos reside no fato de que em cada ponto do escoamento todas as equações devem ser conservadas. Dessa forma é necessário utilizar uma abordagem de **volume de controle**.

Imagine uma região do escoamento delimitada por uma superfície S contendo um volume V . As equações de conservação podem ser aplicadas para fluido contido no volume a medida que o volume se desloca no escoamento, que é a chamada abordagem *Lagrangeana*. Ou para o fluido que entra e sai do volume fixo no espaço através da superfície de controle, que é a chamada abordagem *Euleriana*.

O escoamento é descrito por um campo vetorial da forma:

$$V = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k}$$

Onde $u(x, y, z, t)$, $v(x, y, z, t)$ e $w(x, y, z, t)$ são as componentes cartesianas da velocidade. Considerando uma propriedade escalar do escoamento, como por exemplo a massa específica:

$$\rho = \rho(x, y, z, t)$$

Considerando dois instantes t_1 e t_2 , podemos expandir a massa específica em Série de Taylor em torno do instante t_1 . Logo:

$$\rho_2 = \rho_1 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_1 (x_2 - x_1) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_1 (y_2 - y_1) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)_1 (z_2 - z_1) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1 (t_2 - t_1) + \dots$$

Desprezando os termos de ordem mais alta e dividindo por $(t_2 - t_1)$ temos:

$$\frac{(\rho_2 - \rho_1)}{(t_2 - t_1)} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_1 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)_1 \frac{(x_2 - x_1)}{(t_2 - t_1)} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right)_1 \frac{(y_2 - y_1)}{(t_2 - t_1)} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right)_1 \frac{(z_2 - z_1)}{(t_2 - t_1)}$$

No limite quando $t_2 \rightarrow t_1$ temos:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) u + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}\right) v + \left(\frac{\partial \rho}{\partial z}\right) w$$

ou:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + (V \cdot \nabla) \rho$$

O termo $\frac{D\rho}{Dt}$ chamado de derivada substantiva representa a taxa de variação no volume infinitesimal a medida em que ele se desloca pelo fluido. O termo $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ é a derivada local que representa a taxa de variação numa posição fixa no espaço. O termo $(V \cdot \nabla) \rho$ é chamado de derivada convectiva e representa taxa de variação da propriedade devido ao movimento do fluido. Ou seja é a variação causada pelo transporte da propriedade, de um ponto a outro, pelo escoamento.

2.2 Equação da Continuidade

Considere um volume infinitesimal de fluido fixo no espaço, como mostra a figura. Vamos analisar agora o fluxo de massa devido ao escoamento através de cada face do volume, por simplicidade alinhadas ao sistema cartesiano.

O fluxo líquido na direção x :

$$\left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx \right] dydz - (\rho u) dydz = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} dx dy dz$$

O fluxo líquido na direção y :

$$\left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dy \right] dx dz - (\rho v) dx dz = \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} dx dy dz$$

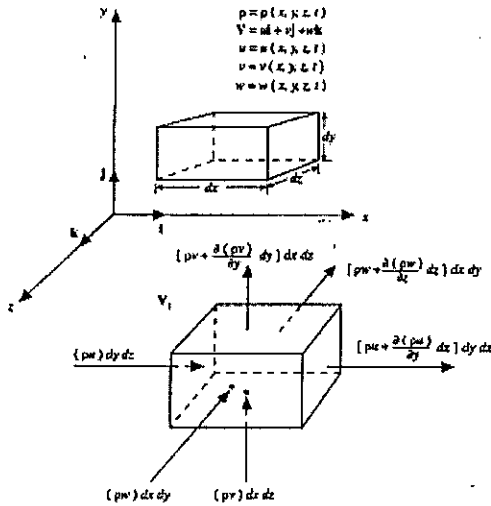


Figura 2.3: Fluxos de massa (direção x).

O fluxo líquido na direção z:

$$\left[\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dz \right] dx dy - (\rho w) dx dy = \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} dx dy dz$$

Logo o fluxo líquido de massa no elemento de volume é:

$$\left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] dx dy dz$$

A taxa de variação da massa no volume infinitesimal é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz$$

Para que haja conservação da massa a taxa de variação de massa no interior do volume de controle deve compensar o fluxo líquido através das superfícies de controle. Dessa forma a conservação é expressa pela relação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \right] = 0$$

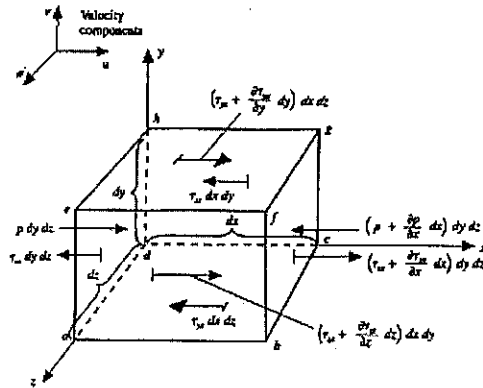


Figura 2.4: Forças de superfície (direção x)

Ou na forma vetorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot (V) = 0$$

2.3 Equação da Quantidade de Movimento

O princípio físico a ser aplicado ao elemento infinitesimal de fluido é a 2ª Lei de Newton:

$$\vec{F} = m \vec{a}$$

Na sua forma mais geral a 2ª Lei de Newton pode ser vista como uma equação de conservação da quantidade de movimento. A força resultante é igual a taxa de variação da quantidade de movimento. Para aplicar essa lei de conservação vamos considerar um elemento infinitesimal que se desloca com o escoamento e analisar as componentes de força que agem sobre esse elemento, em cada direção, como ilustra a figura.

Dentro os tipos de força distinguem-se duas fontes:

- *Forças de Corpo (ou Campo)*: São forças (f_x, f_y, f_z) que agem diretamente sobre a massa ou o volume de fluido à distância. Exemplos

dessas forças são o campo gravitacional, o campo elétrico e o campo magnético.

- *Forças de Superfície:* São forças que agem diretamente por contato com o elemento de fluido através da superfície de controle. Pode-se distinguir componentes normais as faces (como a pressão p termodinâmica e as tensões normais $\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{zz}$) e as tangenciais ($\tau_{yx}, \tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{zy}, \tau_{zx}, \tau_{xz}$) que surgem devido ao escorregamento entre os elementos gerada pela existência da viscosidade.

A força líquida na direção x :

$$F_x = \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx \right) \right] dydz + \left[\left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} dx \right) - \tau_{xx} \right] dydz + \left[\left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) - \tau_{yx} \right] dx dz + \left[\left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) - \tau_{zx} \right] dx dy + \rho f_x dx dy dz$$

Que resulta em:

$$F_x = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dx dy dz + \rho f_x dx dy dz$$

A massa do elemento de fluido é dada por:

$$\rho dx dy dz$$

Logo a aplicação da 2a. Lei de Newton, na direção x , para um volume de fluido em movimento com o escoamento é:

$$\rho dx dy dz \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] dx dy dz + \rho f_x dx dy dz$$

simplificando:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] + \rho f_x$$

De maneira semelhante obtém-se as equações para as direções y e z :

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] + \rho f_y$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \left[-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho f_z$$

Substituindo a relação para a derivada substantiva obtemos as expressões equivalentes:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} \right] = \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] + \rho f_x$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} \right] = \left[-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] + \rho f_y$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \left[\frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho ww)}{\partial z} \right] = \left[-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] + \rho f_z$$

As tensões no fluido são modeladas utilizando os resultados de Newton de que a tensão de cisalhamento é linearmente proporcional ao gradiente de velocidade (ou taxa de deformação) e a constante de proporcionalidade é a viscosidade.

Estendendo este conceito para um volume infinitesimal, Stokes em 1845, obteve as relações:

$$\tau_{xx} = \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\tau_{yy} = \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$\tau_{zz} = \lambda(\nabla \cdot V) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right]$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left[\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]$$

O coeficiente μ é a viscosidade dinâmica do fluido. O coeficiente λ é a chamada segunda viscosidade e está ligado ao trabalho irreversível de compressão. Pela hipótese de Stokes: $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$.

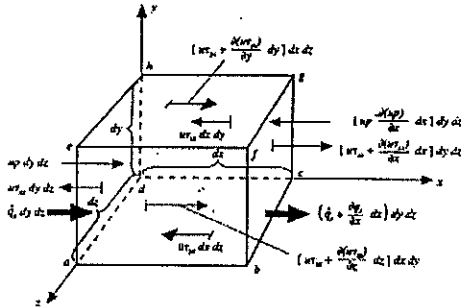


Figura 2.5: Fluxos de energia e trabalho (direção x).

2.4 Equação da Energia

O princípio físico restante é a conservação da energia, que pode ser expressa pela 1ª. Lei da Termodinâmica:

$$\Delta E = Q + W$$

onde ΔE é a taxa de variação da energia, Q o fluxo de calor e W o trabalho realizado pelas forças (de corpo e superfície).

Na figura temos os fluxos de calor e trabalho associados a um elemento se movendo com o fluido.

A partir da equação da quantidade de movimento podemos obter o trabalho por unidade de volume:

$$\begin{aligned} W = & - \left(\frac{\partial(wp)}{\partial x} + \frac{\partial(vp)}{\partial y} + \frac{\partial(wp)}{\partial z} \right) \\ & + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\ & + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) \\ & + \left(\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right) \\ & + \rho(uf_x + vf_y + wf_z) \end{aligned}$$

O fluxo de calor, por unidade volume, no elemento é dado por uma parcela associada ao volume (por exemplo: transferência de calor por radiação ou reação química) e outra devido a condução através da superfície de controle:

$$Q = \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$

A energia total no sistema, no caso o volume infinitesimal, se divide em duas partes: a energia interna termodinâmica ligada a cinética molecular do fluido e a energia cinética macroscópica devido ao escoamento. A energia por unidade de volume é dada por:

$$\Delta E = \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right)$$

Logo a expressão para a equação da energia é dada por:

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ &\quad - \left(\frac{\partial(u\dot{p})}{\partial x} + \frac{\partial(v\dot{p})}{\partial y} + \frac{\partial(w\dot{p})}{\partial z} \right) \\ &\quad + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\ &\quad + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) + \rho(u\dot{f}_x + v\dot{f}_y + w\dot{f}_z) \end{aligned}$$

2.5 Forma Vetorial Conservativa

Para facilitar a representação das equações de Navier-Stokes (*Claude Louis Marie Navier, 1785-1836; Sir George Gabriel Stokes, 1819-1903.*) pode-se utilizar a forma conservativa vetorial:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = G + \frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial y}$$

onde :

$$\begin{aligned}
 Q &= \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e_T \end{Bmatrix}, \\
 E &= \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho e_T + p) u \end{Bmatrix}, \\
 F &= \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e_T + p) v \end{Bmatrix}, \\
 R &= \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ k \frac{\partial T}{\partial x} + u \tau_{xx} + v \tau_{xy} \end{Bmatrix}, \\
 S &= \begin{Bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ k \frac{\partial T}{\partial y} + u \tau_{xy} + v \tau_{yy} \end{Bmatrix}, \\
 G &= \begin{Bmatrix} 0 \\ \rho f_x \\ \rho f_y \\ \rho \dot{q} + \rho(u f_x + v f_y) \end{Bmatrix}
 \end{aligned}$$

onde a energia total é dada pela adição da energia interna termodinâmica à energia cinética do escoamento:

$$e_T = \left(e + \frac{V^2}{2} \right)$$

Para fechar o sistema de equações é necessária uma relação constitutiva para a pressão, que depende do fluido :

$$p = p(\rho, e, u, v, w)$$

Essa forma permite uma aplicação direta do teorema da divergência na integração das equações. Integrando a equação em um volume Ω temos:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \right) dx dy = \int_{\Omega} \left(G + \frac{\partial R}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial y} \right) dx dy$$

o que resulta em:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} \right) dx dy + \oint_{\Gamma} (E dy - F dx) = \int_{\Omega} (G) dx dy + \oint_{\Gamma} (R dy - S dx)$$

onde Γ representa o contorno do domínio Ω . Nessa forma pode-se interpretar as equações de Navier-Stokes como equações de conservação dos fluxos dos vetores E , F , R e S nas interfaces de volumes elementares.

Capítulo 3

Métodos Numéricos

Como visto no capítulo anterior as equações de Navier-Stokes são um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não-lineares. Soluções analíticas são obtidas para geometrias e condições de escoamento extremamente limitadas em termos de aplicação. Portanto o único caminho viável é o uso de soluções numéricas.

Um método numérico consiste em:

- Discretizar o domínio, ou seja distribuir um certo número de pontos discretos no espaço onde a solução será conhecida;
- Discretizar as equações transformando o sistema de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas.

A partir desse ponto recorre-se a técnicas de solução das equações algébricas. Esse capítulo ilustra algumas possibilidades de discretização, tanto do domínio quanto do sistema de equações

3.1 Discretização do Domínio

Para a realização da aproximação numérica é necessária a discretização do domínio de interesse. Como mencionado anteriormente a solução é computada no interior do domínio e as fronteiras representam o problema de interesse, em geral uma das fronteiras é uma superfície sólida, relacionada a algum dispositivo ou veículo, ou até uma topografia como por exemplo nos problemas de previsão atmosférica.

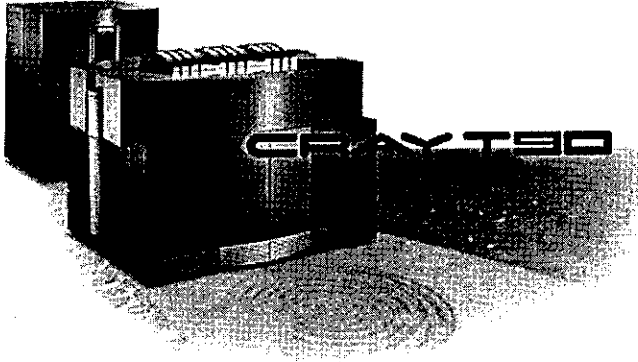


Figura 3.1: Supercomputador Vetorial

As possibilidades de escolha da posição dos pontos discretos onde a solução será calculada, e a forma de aplicação das leis de conservação nessa malha são diversas, com vantagens e desvantagens associadas a cada uma.

- **Malha Estruturada:** Os nós da malha podem ser identificados por índices requerendo uma quantidade reduzida de informação espacial armazenada. O custo de geração de malha é reduzido, mas a técnica é limitada em problemas geometricamente complexos, requerendo a divisão do domínio de solução em sub-domínios (multi-bloco).
- **Malhas Não-Estruturadas:** Os elementos da malha não seguem nenhuma estrutura indicial e devem ser identificados individualmente. Entretanto permitem representar geometrias complexas com maior flexibilidade. A geração apesar de onerosa, e eventual adaptação, pode ser automatizada.

3.1.1 Malhas Estruturadas

Uma malha é dita estruturada se cada ponto da malha pode ser localizado por uma sequência de índices ordenados. Considere uma malha bidimensional

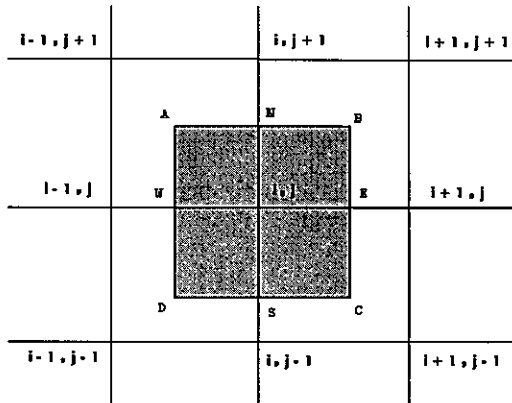


Figura 3.2: Indexação de malha estruturada.

cartesiana. O ponto $P(x, y)$ tem como vizinhos:

$$P(x + \Delta x, y), \quad P(x - \Delta x, y), \quad P(x, y + \Delta y), \quad P(x, y - \Delta y)$$

Um sistema estruturado permite associar índices tal que: $P_{i,j} = P(x, y)$ e seus vizinhos são associados respectivamente a $P_{i+1,j}$, $P_{i-1,j}$, $P_{i,j+1}$ e $P_{i,j-1}$. Dessa forma a única informação a ser armazenada é a relação dos índices com as posições dos pontos.

Os métodos de discretização por aproximação polinomial produzem expressões mais simples se aplicados em coordenadas cartesianas com espaçamento constante. Entretanto a maioria das aplicações de interesse ocorre justamente em domínios complexos que em geral não são retangulares.

A figura, a seguir, apresenta uma malha conforme de superfície, utilizando uma transformação de coordenadas desse tipo.

Neste caso é necessário transformar o domínio físico não-retangular em um domínio computacional cartesiano onde os pontos da malha são igualmente espaçados. Essa transformação permite alinhar uma das coordenadas a superfície de interesse facilitando a imposição das condições de contorno. A relação entre o espaço físico e o computacional, em duas dimensões, é dada pela relação:

$$\xi = \xi(x, y)$$

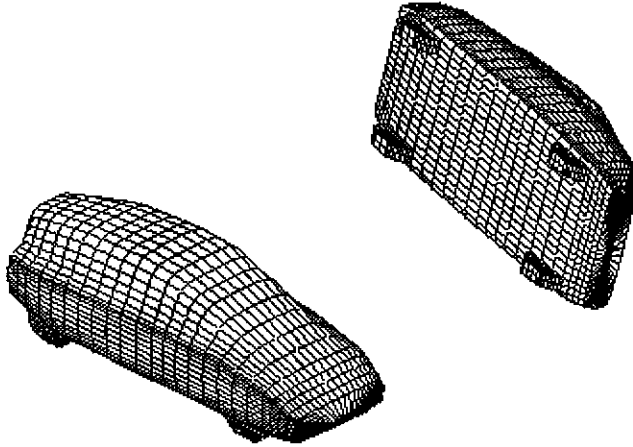


Figura 3.3: Exemplo de malha estruturada.

$$\eta = \eta(x, y)$$

As métricas da transformação ξ_x , ξ_y , η_x e η_y são mais facilmente definidas a partir das relações no espaço físico. Comparando as relações diferenciais:

$$\begin{aligned} d\xi &= \xi_x dx + \xi_y dy \\ d\eta &= \eta_x dx + \eta_y dy \end{aligned}$$

Com as relações diferenciais da transformação inversa:

$$\begin{aligned} dx &= x_\xi d\xi + x_\eta d\eta \\ dy &= y_\xi d\xi + y_\eta d\eta \end{aligned}$$

pode-se escrever um par de sistemas associados:

$$\begin{Bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix}, \quad \begin{Bmatrix} dx \\ dy \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{Bmatrix}$$

logo:

$$\begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{bmatrix}^{-1}$$

Calculando a inversa obtém-se a relação entre as métricas dos sistemas de coordenadas:

$$\begin{aligned}\xi_x &= Jy_\eta \\ \xi_y &= -Jx_\eta \\ \eta_x &= -Jy_\xi \\ \eta_y &= Jx_\xi\end{aligned}$$

O Jacobiano da transformação J , é uma relação entre a deformação dos elementos em cada um dos espaços, e pode ser escrito como:

$$J = \frac{1}{x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x$$

Considere a equação de Laplace:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

Pela regra da cadeia as derivadas parciais podem ser transformadas:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \xi_x \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \xi_y \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial}{\partial \eta}\end{aligned}$$

Logo a equação de Laplace no sistema de coordenadas curvilíneo é dada por:

$$(\xi_x^2 + \xi_y^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + 2(\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} + (\eta_x^2 + \eta_y^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} = 0$$

O surgimento de uma derivada cruzada em ξ e η , que aumenta a complexidade da equação, é o preço que se paga pela utilização de malhas conformes.

Em alguns casos é impossível encontrar uma única transformação de coordenadas capaz de mapear todo domínio em um retângulo (ou em um cubo em 3-D), um artifício bastante utilizado é subdivisão do domínio em diversos blocos, onde cada um pode ser transformado em um domínio regular. Essa técnica introduz interfaces artificiais no interior do domínio, e o tratamento dessas interfaces é realizado de maneira semelhante à condições de contorno. Esse processo, em geral, retarda a convergência da solução, entretanto

permite a análise de domínio complexos em memória reduzida. Essa abordagem foi muito usada na indústria aeronáutica para a solução de sistemas complexos como o ilustrado na figura. Cada bloco diferente, pode ser computado em uma máquina serial em um sistema de reveasamento, ou numa máquina paralela simultaneamente com troca de informação nas interfaces.

3.1.2 Malhas Não-Estruturadas

Em uma malha não estruturada cada elemento, ou volume, possui uma identificação própria não existindo uma estrutura indexada. As informações sobre os elementos vizinhos e a conectividade dos nós deve ser armazenada em uma tabela.

Um elemento triangular, por exemplo, pode ser definido por $T_A(P_1, P_2, P_3)$ onde $P_1(x_1, y_1)$, $P_2(x_2, y_2)$ e $P_3(x_3, y_3)$ são os vértices do triângulo T_A . Os triângulos vizinhos a T_A devem ter faces comuns. Logo para definir um triângulo é necessário saber quais são as faces que o constituem e quais triângulos são seus vizinhos. Isso requer uma estrutura de dados mais sofisticada do que nas malhas estruturadas.

Apesar da maior necessidade de informação para identificação dos nós, as malhas não-estruturadas permitem mapear domínios extremamente complexos sem a necessidade de subdivisão em multiblocos.

Essa característica representa um ganho computacional considerável, uma vez que não necessário é conectar os blocos através de condições de contorno, o que reduziria a taxa de convergência. Entretanto processos de geração de malha não-estruturadas automáticos (Triangularização de Delaunay, Método do Avanço de Fronteira) requerem não só um maior custo computacional em relação a geradores estruturados, mas também algoritmos robustos para evitar anomalias.

A solução das equações de Navier-Stokes em malhas não-estruturadas utilizam métodos específicos, como veremos a seguir.

3.2 Discretização das Equações

Uma vez discretizado o domínio, para se obter a solução numérica é necessário transformar o sistema de equações diferenciais parciais em um sistema de

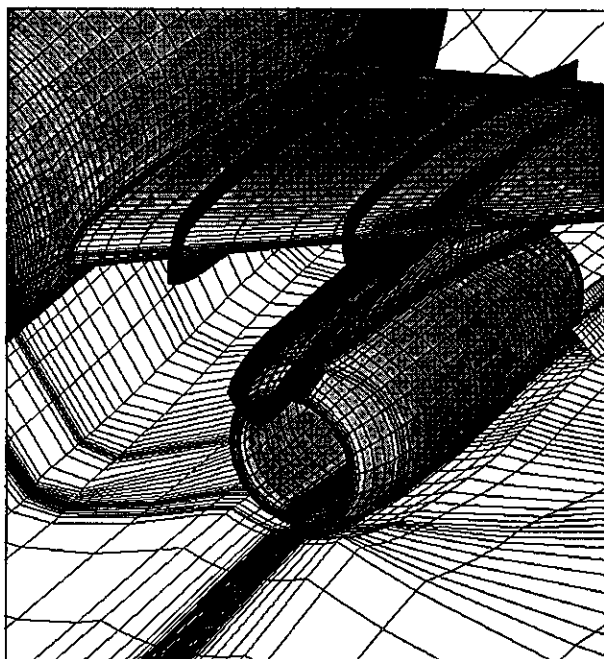


Figura 3.4: Exemplo de malha estruturada multibloco.

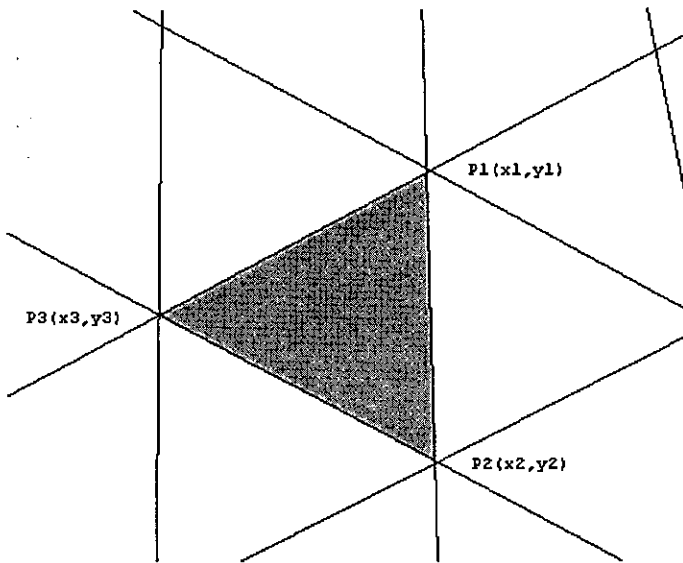


Figura 3.5: Elemento triangular em malha não-estruturada.

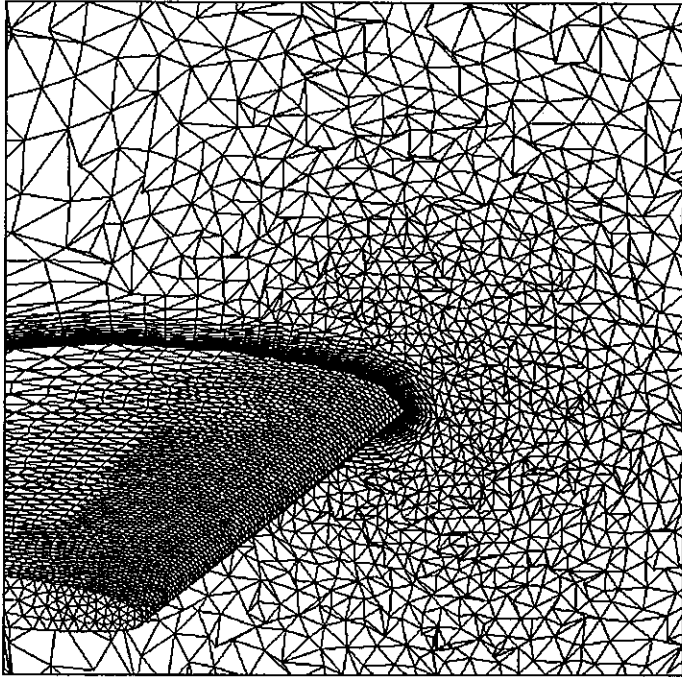


Figura 3.6: Exemplo de malha não-estruturada.

equações algébricas.

Esse processo é feito através da aproximação das equações assumindo que a solução tem forma polinomial entre pontos adjacentes da malha. Algumas escolhas para esse processo são apresentadas neste item.

- **Método das Diferenças Finitas:** Após a definição da malha as soluções são aproximadas por séries de Taylor e as derivadas, no tempo e no espaço, substituídas por fórmulas de diferenças. A solução consistirá nos valores das variáveis em cada nó da malha.
- **Método dos Elementos Finitos:** O domínio é discretizado por elementos de forma e tamanhos arbitrários. Nesses elementos são definidos pontos nodais (nos vértices ou interior de cada elemento) onde os valores da solução serão obtidos. A solução é aproximada em cada nó por uma função de forma, geralmente funções polinomiais de ordem arbitrária permitindo a avaliação das quantidades conservadas em pontos internos ao elemento.
- **Método dos Volumes Finitos:** Pode ser descrito como um caso particular do Método dos Elementos Finitos onde a solução é constante no interior do elemento e os fluxos nas interfaces são conservados. Essa garantia de conservação adiciona robustez e eficiência a custo reduzido.

3.3 Método das Diferenças Finitas

O Método das Diferenças Finitas (MDF) consiste em aproximar as derivadas por fórmulas de diferenças. Expandindo uma função $T(x)$ em séries de Taylor em torno de um valor (x_i) , onde $i = 0, \dots, n$ representam pontos discretos na reta real, temos:

$$T(x_i + \Delta x) = T(x_i) + \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{(x_i)} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_{(x_i)} + \dots$$

e

$$T(x_i - \Delta x) = T(x_i) - \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{(x_i)} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_{(x_i)} + \dots$$

Subtraindo as equações obtém-se:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{(x_i)} = \frac{T(x_i + \Delta x) - T(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Adicionando-se temos:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{(x_i)} = \frac{T(x_i + \Delta x) - 2T(x_i) + T(x_i - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

Essas duas expressões são aproximações de ordem $O(\Delta x^2)$ da primeira e da segunda derivada centradas em (x_i) .

Utilizando outras combinações de expansões em série pode-se deduzir fórmulas de diferenças como apresentam as tabelas 3.1 a 3.3.

	f_{i-2}	f_{i-1}	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}
$2(\Delta x) \frac{\partial f}{\partial x}$		-1	0	1	
$(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$			1	-2	1
$2(\Delta x)^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$	-1	2	0	-2	1
$(\Delta x)^4 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}$	1	-4	6	-4	1

Tabela 3.1 - Representações de diferenças centradas de $O(\Delta x)^2$

	f_{i-5}	f_{i-4}	f_{i-3}	f_{i-2}	f_{i-1}	f_i
$2(\Delta x) \frac{\partial f}{\partial x}$				1	-4	3
$(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$			-1	4	-5	2
$2(\Delta x)^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$		3	-14	24	-18	5
$(\Delta x)^4 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}$	-2	11	-24	26	-14	3

Tabela 3.2 - Representações de diferenças regressivas de $O(\Delta x)^2$

	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}	f_{i+3}	f_{i+4}	f_{i+5}
$2(\Delta x) \frac{\partial f}{\partial x}$	-3	4	1			
$(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$	2	-5	4	-1		
$2(\Delta x)^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$	-5	18	-24	14	-3	
$(\Delta x)^4 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}$	3	-14	26	-24	11	-2

Tabela 3.3 - Representações de diferenças progressivas de $O(\Delta x)^2$

Para a solução numérica as equações devem ser discretizadas. Como exemplo vamos aplicar a técnica ao modelo de condução de calor unidimensional:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Utilizando uma certa escolha de aproximações para a equação de condução unidimensional obtemos a equação discretizada:

$$\begin{aligned} & \frac{T(x_i, t_j + \Delta t) - T(x_i, t_j)}{\Delta t} \\ = & \frac{T(x_i + \Delta x, t_j) - 2T(x_i, t_j) + T(x_i - \Delta x, t_j)}{\Delta x^2} + O(\Delta t, \Delta x^2) \end{aligned}$$

Trabalhando com os índices temos:

$$T_{i,j+1} = \alpha T_{i+1,j} + (1 - 2\alpha)T_{i,j} + \alpha T_{i-1,j}$$

onde $\alpha = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

Dada uma condição inicial em $T(x, 0)$, e condições de contorno $T(x_0, t)$ e $T(x_n, t)$, a solução pode ser calculada para o instante de tempo seguinte. O método de discretização exemplificado é denominado FTCS (“*Forward in Time, Centered in Space*”).

O método de solução que nesse caso é o método de Euler simples, chamado *explícito*, pois os valores da solução no instante t_{j+1} são independentes entre si, dependendo apenas da solução no instante t_j . Para aumentar a ordem de aproximação temporal de 1a. para 2a. ordem pode-se utilizar por exemplo o método de Euler preditor-corretor:

$$\begin{aligned} T_{i,j+\frac{1}{2}} &= \alpha T_{i+1,j} + (1 - 2\alpha)T_{i,j} + \alpha T_{i-1,j} \\ T_{i,j+1} &= T_{i,j} + \frac{1}{2} (\alpha T_{i+1,j} - 2\alpha T_{i,j} + \alpha T_{i-1,j}) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\alpha T_{i+1,j+\frac{1}{2}} - 2\alpha T_{i,j+\frac{1}{2}} + \alpha T_{i-1,j+\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

Dependendo da ordem desejada de integração temporal pode-se utilizar outros métodos explícitos, como por exemplo o método de Runge-Kutta.

A vantagem do método explícito está no custo computacional por iteração, entretanto como veremos a seguir métodos explícitos possuem restrições em relação a estabilidade.

Um método *implícito* consistiria em escrever a equação discretizada para todo o nível t_{j+1} e isolar a solução no instante t_j no lado direito da equação:

$$\alpha T_{i+1,j+1} - (1 + 2\alpha)T_{i,j+1} + \alpha T_{i-1,j+1} = -T_{i,j}$$

Dessa forma a equação forma um sistema linear de equações acopladas. Apesar do custo mais alto em relação a uma solução implícita, os métodos implícitos são em geral incondicionalmente estáveis.

3.3.1 Solução de Sistemas de Equações

Para resolver sistemas lineares existem diversos métodos. Os métodos diretos, que possuem um custo computacional de ordem n^3 , não aproveitam a esparsidade das matrizes geradas pela aproximação por diferenças, portanto raramente são usados. Os métodos iterativos entretanto são em geral mais eficientes e inevitáveis no cálculo de soluções para equações não-lineares.

Considerando um problema não-linear geral resultante de uma aproximação por diferenças finitas, por exemplo, de uma EDP, da forma:

$$Au = b$$

onde a matrix $A = A(u)$.

Considerando uma solução aproximada u^n , que por não satisfazer a equação exatamente, produz um resíduo r^n :

$$Au^n = b - r^n = Au - r^n \implies A(u - u^n) = r^n$$

Considerando uma decomposição da matriz $A = M - N$ tal que:

$$Mu^{n+1} = Nu^n + b$$

ou usando uma forma alternativa:

$$M\Delta u = r^n$$

com $\Delta u = (u - u^n)$, deseja-se um método iterativo que produza uma sequência de soluções aproximadas do sistema original e que reduza monotonicamente o resíduo a zero.

Um método iterativo eficiente é aquele em que o número de operações por passo é reduzido, e que converge rapidamente. Se a matriz A é esparsa, sua decomposição também será esparsa, logo o cálculo de Nu^n , por exemplo, será simples. Além disso a matriz M deverá ser facilmente inversível. Do ponto de vista prático M deve ser diagonal, tridiagonal, triangular, ou talvez, bloco tridiagonal ou triangular.

O método de Gauss-Seidel consiste em decompor a matrizes na forma:

$$\begin{aligned} M &= L + D \\ N &= -U \end{aligned}$$

onde D é a matriz diagonal, L a matriz triangular inferior e U a matriz triangular superior associadas a matriz A .

No caso específico do exemplo anterior, observa-se que a matriz A já é tridiagonal. O *algoritmo de Thomas*, uma particularização do método de eliminação de Gauss para matrizes tridiagonais, permite uma solução a baixo custo sem a necessidade de armazenamento da matriz cheia.

Para um sistema da forma:

$$a_k x_{k-1} + b_k x_k + c_k x_{k+1} = f_k$$

com $k = 1, \dots, N$ e as condições de contorno $a_1 = c_N = 0$, o algoritmo de Thomas consiste em um passo progressivo:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= b_1 \\ \beta_k &= b_k - a_k \frac{c_{k-1}}{\beta_{k-1}} \\ \gamma_1 &= \frac{-a_k \gamma_{k-1} + f_k}{\beta_k} \end{aligned}$$

com $k = 2, \dots, N$, e um passo regressivo:

$$\begin{aligned}x_N &= \gamma_N \\x_k &= \gamma_k - x_{k+1} \frac{c_k}{\beta_k}\end{aligned}$$

com $k = N - 1, \dots, 1$. Esse processo requer cerca de $5n$ operações.

3.4 Análise de Estabilidade

A solução numérica de EDP está sujeita dois tipos de erros. Um devido a aproximação na discretização espacial e outro que está relacionado ao arredondamento e truncamento devido ao uso de um computador de precisão finita. Se esses erros não são controlados o método numérico pode tornar-se instável.

A priori, pode-se analisar os métodos numéricos, e estabelecer condições de estabilidade utilizando aproximações da solução.

Considere a equação exemplo utilizada anteriormente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Aproximando a solução por uma série de Fourier da forma:

$$u_k^n = U^n e^{ik\theta}$$

onde $i = \sqrt{-1}$, U^n é a amplitude no instante n , $\theta = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta x$ é o angulo de fase sendo λ o comprimento de onda. Aproximando a equação modelo por diferenças finitas temos:

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{\Delta x^2}$$

Definindo um *número de difusão* $d = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ temos:

$$u_k^{n+1} = u_k^n + d (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n)$$

Substituindo a expansão em Série de Fourier:

$$U^{n+1} e^{ik\theta} = U^n e^{ik\theta} + d [U^n e^{i(k+1)\theta} - 2U^n e^{ik\theta} + U^n e^{i(k-1)\theta}]$$

Cancelando o fator comum:

$$U^{n+1} = U^n [1 + d (e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta})] = U^n [1 + 2d (\cos \theta - 1)]$$

Introduzindo um fator de amplificação $G = \frac{U^{n+1}}{U^n}$ temos:

$$G = 1 + 2d (\cos \theta - 1)$$

Para que o método seja estável é necessário que a solução permaneça limitada, logo o fator de amplificação deve ser tal que $|G| \leq 1$, o que resulta em:

$$d \leq \frac{1}{2}$$

Ou seja a relação entre a discretização espacial e temporal deve ser tal que:

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

Esse tipo de análise, chamada de análise de estabilidade de Von Neumann, permite analisar os métodos numéricos e prever limites práticos para a discretização levando em conta a física do escoamento, no caso o valor do coeficiente de difusão α .

No caso onde a parte imaginária é não-nula pode-se realizar uma análise gráfica. A curva associada ao fator de amplificação deve permanecer no interior de um círculo de raio unitário.

Analisando a estabilidade de um método explícito para a equação da onda:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

A equação discretizada tem a forma:

$$u_k^{n+1} = 2u_k^n - u_k^{n-1} + c^2 (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n)$$

onde $c = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$ é o chamado *número de Courant*. A condição de estabilidade, segundo a análise de Von Neumann é:

$$c^2 \leq 1$$

ou seja, a relação entre a velocidade da onda a deve ser inferior a escala de velocidade computacional $\frac{\Delta x}{\Delta t}$.

Considerando agora um problema unidimensional com difusão e convecção temos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

A análise de Von Neumann resulta em um par de condições de estabilidade, a primeira é o limite do número de difusão: $d \leq \frac{1}{2}$. A segunda é dada por:

$$Re = a \frac{\Delta x}{\alpha} \leq \frac{2}{c}$$

A expressão $Re = a \frac{\Delta x}{\alpha}$ é denominada *número de Reynolds da célula*, ou seja um relação entre a convecção e a difusão.

Considerando agora uma implementação implícita para a equação de difusão:

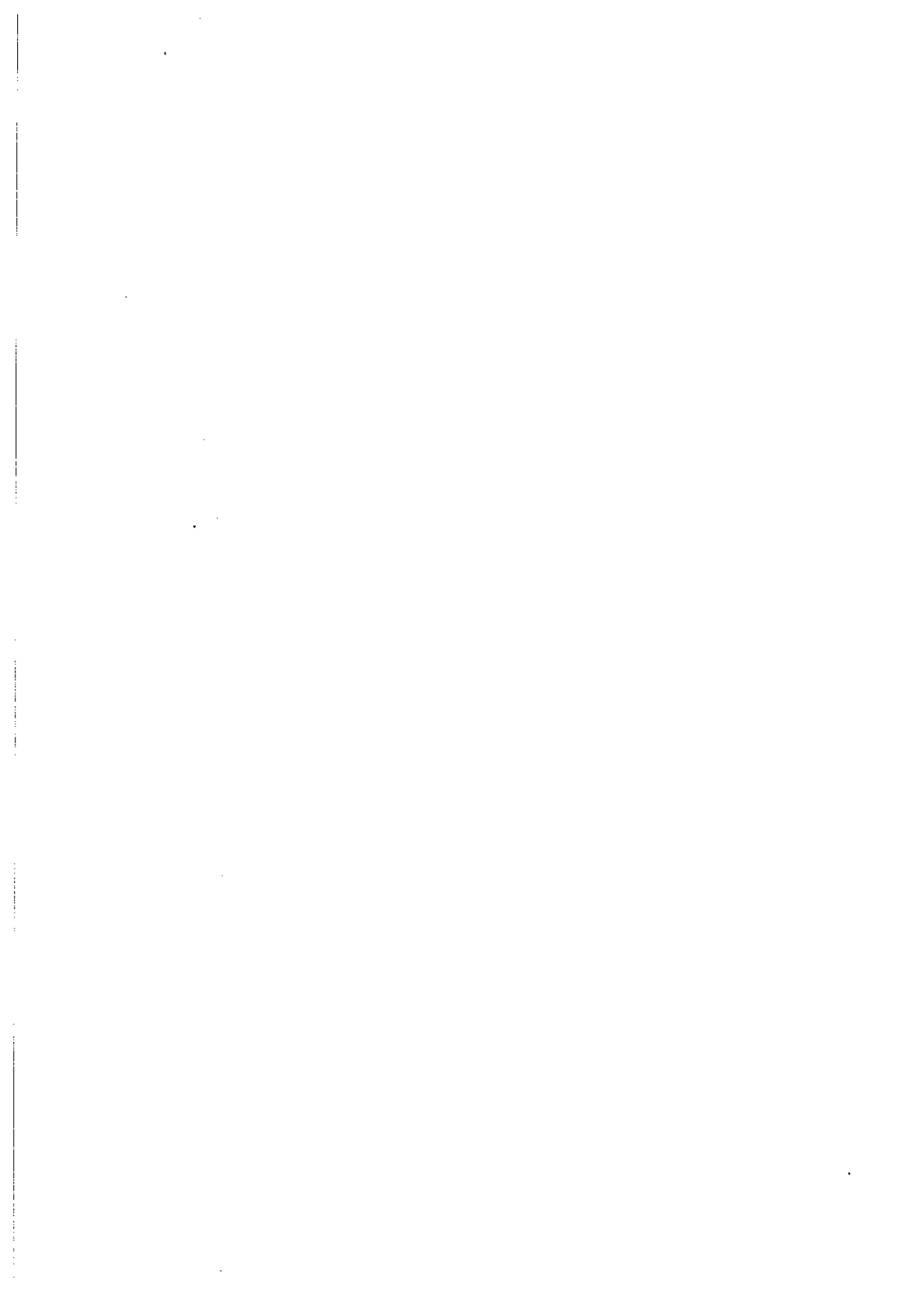
$$u_k^{n+1} = u_k^n + d (u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1})$$

O fator de amplificação tem a forma:

$$G = \frac{1}{1 - 2d(1 - \cos \theta)}$$

para qualquer valor de d o método é estável. Essa é uma característica predominante nos métodos implícitos.

No tratamento de equações não-lineares a análise de estabilidade se torna trabalhosa, podendo ser inviável face a resolução do problema. Neste caso uma análise qualitativa é utilizada para estimar a influência da discretização na estabilidade. Mesmo assim os parâmetros obtidos podem ser usados desde que se apliquem coeficientes de relaxação.



Capítulo 4

Modelos Simples

4.1 A Equação da Onda

O modelo de equação hiperbólica mais simples é a equação da onda, que pode ser obtida das equações de conservação da massa e quantidade de movimento, unidimensionais, desprezando-se os efeitos viscosos :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + u \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) &= -\frac{\partial p}{\partial x} = -a^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}\end{aligned}$$

considerando uma hipótese de pequenas perturbações, ou seja, que o valor instantâneo das variáveis pode ser representado por um valor médio somado a uma flutuação, tal que:

$$\begin{aligned}\rho &= \bar{\rho} + \rho' \\ u &= \bar{u} + u'\end{aligned}$$

substituindo esses valores nas equações e desprezando os termos de ordem mais alta tem-se:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial u'}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial u'}{\partial t} + \frac{\bar{a}^2}{\bar{\rho}} \frac{\partial \rho'}{\partial x} &= 0\end{aligned}$$

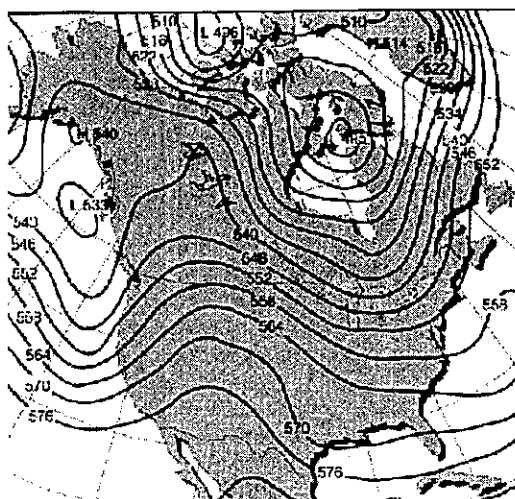


Figura 4.1: Ondas de “Rossby” sobre o hemisfério norte.

Estas equações são chamadas equações acústicas que descrevem a evolução temporal das flutuações devido a passagem de ondas sonoras. Essas equações tem a forma da equação hiperbólica linear, considerando uma propriedade genérica u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

As soluções dessa equação tem a forma geral:

$$u = f(x - at) + g(x + at)$$

ou seja dada uma condição inicial $u_0(x)$ essa condição se propaga sem deformações ao longo de uma reta de inclinação $\pm a$, no diagrama espaço-tempo. Descrevendo-se as linhas por:

$$\begin{aligned} x - at &= K \\ x + at &= K \end{aligned}$$

onde K é uma constante. Essas linhas são chamadas de características.

Aplicando a aproximação de diferenças finitas pode-se estabelecer uma série de métodos numéricos. A diferença entre estes métodos está na escolha dos níveis de aproximação das derivadas, tanto no tempo como no espaço.

4.1.1 Métodos Explícitos

O número de Courant $c = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$ é o parâmetro de estabilidade para os métodos relativos a problemas hiperbólicos explícitos. A seguir descreve-se rapidamente alguns dos métodos encontrados na literatura.

- **Diferença Progressiva de Primeira Ordem (“Upwind”):**

$$u_i^{k+1} = u_i^k - c(u_i^k - u_{i-1}^k)$$

se $c > 0$ ou:

$$u_i^{k+1} = u_i^k - c(u_{i+1}^k - u_i^k)$$

se $c < 0$. O método tem ordem $O(\Delta t, \Delta x)$ e é estável para $|c| \leq 1$.

- **Lax:**

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^k + u_{i-1}^k) - \frac{1}{2}c(u_{i+1}^k - u_{i-1}^k)$$

O método tem ordem $O(\Delta t, \frac{\Delta x^2}{\Delta t})$ e é estável para $|c| \leq 1$.

- **“Leapfrog”:**

$$u_i^{k+1} = u_i^{k-1} - c(u_{i+1}^k - u_{i-1}^k)$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|c| \leq 1$. São necessárias duas condições iniciais para iniciar o método.

- **Lax-Wendroff I:**

$$u_i^{k+1} = u_i^k - \frac{1}{2}c(u_{i+1}^k - u_{i-1}^k) + \frac{1}{2}c^2(u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k)$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|c| \leq 1$.

4.1.2 Métodos Implícitos

Todos os métodos implícitos apresentados a seguir são incondicionalmente estáveis.

- **BTCS** (“Backward in Time Centered in Space”) Implícito:

$$\frac{1}{2}cu_{i-1}^{k+1} - u_i^{k+1} - \frac{1}{2}cu_{i+1}^{k+1} = -u_i^k$$

O método tem ordem $O(\Delta t, \Delta x^2)$ e é incondicionalmente estável.

- **Crank-Nicolson**:

$$\frac{1}{4}cu_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1} - \frac{1}{4}cu_{i-1}^{k+1} = u_i^k - \frac{1}{4}c(u_{i+1}^k - u_{i-1}^k)$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é incondicionalmente estável.

4.1.3 Métodos de Passo Múltiplo

Os métodos de passo múltiplo são uma boa alternativa para resolver problemas com ordem de aproximação mais alta.

- **Lax-Wendroff II**:

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^k + u_i^k) - \frac{1}{2}c(u_{i+1}^k - u_i^k)$$

$$u_i^{k+1} = u_i^k - c\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}\right)$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|c| \leq 1$.

- **Mac Cormack**:

$$u_i^* = u_i^k - c(u_{i+1}^k - u_i^k)$$

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{2}[u_i^k + u_i^* - c(u_{i+1}^* - u_i^*)]$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|c| \leq 1$.

Todos os métodos se equivalem a menos do nível de difusão causada pela aproximação numérica. A medida que t cresce a solução da equação da onda, que deveria permanecer invariante por translação, em relação aos dados iniciais, apresenta oscilações e espalhamento.

4.2 Problemas Não-Lineares

4.2.1 Relações de Compatibilidade

Considerando agora uma perturbação no escoamento, ainda unidimensional e invíscido, mas de magnitude tal que não se possa aplicar a hipótese de pequenas perturbações:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + u \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) &= -\frac{\partial p}{\partial x} = -a^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}\end{aligned}$$

Sabendo-se que $a^2 = \left(\frac{dp}{d\rho}\right)$ pode dizer que:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{1}{a^2} \frac{\partial p}{\partial t} \\ \frac{\partial \rho}{\partial x} &= \frac{1}{a^2} \frac{\partial p}{\partial x}\end{aligned}$$

substituindo estas relações na equação da continuidade tem-se:

$$\frac{1}{\rho a^2} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Multiplicando-se esta equação por $\frac{a}{\rho}$ e adicionando-se e subtraindo-se da equação da quantidade de movimento geram-se duas equações:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + (u + a) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho a} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + (u + a) \frac{\partial p}{\partial x} \right] &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + (u - a) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho a} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + (u - a) \frac{\partial p}{\partial x} \right] &= 0\end{aligned}$$

Como $u = u(x, t)$:

$$du = \frac{\partial u}{\partial t} dt + \frac{\partial u}{\partial x} dx$$

considerando uma curva característica C_+ construída tal que:

$$dx = (u + a)dt$$

tem-se:

$$\begin{aligned} du &= \left[\frac{\partial u}{\partial t} + (u + a) \frac{\partial u}{\partial x} \right] dt \\ dp &= \left[\frac{\partial p}{\partial t} + (u + a) \frac{\partial p}{\partial x} \right] dt \end{aligned}$$

Portanto da equação obtida a partir da quantidade movimento:

$$du + \frac{1}{\rho a} dp = 0$$

De maneira análoga, seguindo a a curva característica C_- , definida por:

$$dx = (u - a)dt$$

tem-se:

$$du - \frac{1}{\rho a} dp = 0$$

Estas relações, válidas ao longo das linhas características são chamadas relações de compatibilidade.

No caso não-linear as características são curvas, pois dependem da solução ao longo do tempo. A partir de uma condição inicial pode-se ter uma situação na qual as características convergem para um ponto (no diagrama espaço-tempo) , isto equivale a formação de uma onda de choque.

4.2.2 O Problema de Riemann

Baseando-se nas relações de compatibilidade e considerando o gás como caloricamente perfeito, ou seja:

$$a^2 = \frac{\gamma p}{\rho}$$

pode-se escrever:

$$R_+ = u + \frac{2a}{\gamma - 1}$$

$$R_- = u + \frac{2a}{\gamma - 1}$$

onde R_+ e R_- são chamados invariantes de Riemann e correspondem aos valores das constantes, para as respectivas características C_+ e C_- .

Considerando uma descontinuidade que separa dois estados diferentes denominados e (esquerda) e d (direita). As características C_+ do estado e se projetam na direção positiva de x e as características C_- de d na direção negativa de x . Nos pontos de interseção, teremos:

$$a = \frac{\gamma - 1}{4} (R_+^e - R_-^d)$$

$$u = \frac{1}{2} (R_+^e - R_-^d)$$

Dada a distribuição inicial pode-se traçar as curvas que correspondem aos invariantes de Riemann para incrementos de Δt e construir a solução no instante $t + \Delta t$. Esse procedimento é uma descrição simplificada do *Método das Características*, que é encontrar direções, ou coordenadas que transformam as EDPs, no caso as leis de conservação, em EDOs, respectivamente as relações de compatibilidade.

4.2.3 A Equação de Burgers

A equação de Burgers é um equação hiperbólica não-linear que exhibe soluções descontínuas, sendo bastante útil para a proposição de algoritmos de solução das equações de Navier-Stokes.

Considerando uma propriedade genérica u a equação de Burgers tem a forma::

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial E}{\partial x}$$

com o fluxo E dado por $\frac{1}{2}u^2$.

O número de Courant, $c = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$, depende da solução e varia no domínio, portanto a análise de estabilidade devem levar em conta os valores extremos da solução no domínio.

Alguns métodos, vistos no item anterior, aplicados a estas equação são:

- **Lax:**

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{2} (u_{i+1}^k - u_{i-1}^k) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{i+1}^k - E_{i-1}^k)$$

O método tem ordem $O(\Delta t, \Delta x^2)$ e é estável para $|u_{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x}| \leq 1..$

- **Lax-Wendroff:**

$$u_i^{k+1} = u_i^k - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{i+1}^k - E_{i-1}^k) + \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 [(u_{i+1}^k + u_i^k) (E_{i+1}^k - E_i^k) - (u_i^k - u_{i-1}^k) (E_i^k - E_{i-1}^k)]$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|u_{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x}| \leq 1.$

- **MacCormack:**

$$u_i^* = u_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{i+1}^k - E_i^k)$$

$$u_i^{k+1} = \frac{1}{2} \left[u_i^k + u_i^* - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_i^* - E_{i-1}^*) \right]$$

O método tem ordem $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ e é estável para $|u_{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x}| \leq 1.$

Todos estes métodos introduzem oscilações e espalhamento em alguns casos comprometendo a qualidade da solução, em especial na representação das descontinuidades.

4.3 Dissipação Artificial

Considere o método *implícito de Beam e Warming* para a equação de Burgers:

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)_i^k + \left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)_i^{k+1} \right] + O(\Delta t^2)$$

como $E = \frac{1}{2}u^2$ o método é não-linear. Para linearizar o método utiliza-se a expansão:

$$\begin{aligned} E(t + \Delta t) &= E(t) + \frac{\partial E}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= E(t) + \frac{\partial E}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

Logo:

$$E^{k+1} = E^k + \frac{\partial E}{\partial u} \left(\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2)$$

Chamando $[A] = \frac{\partial E}{\partial u}$ a matriz jacobiana, que nesse caso unidimensional $[A] = u$, temos a aproximação:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)_i^{k+1} = \left(\frac{\partial E}{\partial x} \right)_i^k + \frac{\partial}{\partial x} \{ [A] (u_i^{k+1} - u_i^k) \}$$

Aproximando o termo $\frac{\partial}{\partial x} \{ [A] (u_i^{k+1} - u_i^k) \}$ por uma diferença centrada de segunda-ordem, e rearranjando os termos temos o sistema tridiagonal:

$$\begin{aligned} & -\alpha [A]_{i-1}^k u_{i-1}^{k+1} + u_i^{k+1} + \alpha [A]_{i+1}^k u_{i+1}^{k+1} \\ = & u_i^k - 2\alpha (E_{i+1}^k - E_{i-1}^k) + \alpha [A]_{i+1}^k u_{i+1}^{k+1} - \alpha [A]_{i-1}^k u_{i-1}^{k+1} \end{aligned}$$

onde $\alpha = \frac{\Delta t}{4\Delta x}$.

Apesar de estável e de segunda-ordem essa implementação apresenta fortes oscilações na proximidade de descontinuidades, tornando a solução inaceitável. Para reduzir essas oscilações introduz-se *dissipação artificial*.

Como o esquema é de segunda-ordem a introdução de um termo de dissipação de quarta-ordem, que não altera a ordem do problema, como por exemplo:

$$\begin{aligned} D_e &= -\varepsilon_e (\Delta x)^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &= -\varepsilon_e (u_{i-2} - 4u_{i-1} + 6u_i - 4u_{i+1} + u_{i+2}) \end{aligned}$$

Em geral termos dessa forma são adicionados de modo explícito, ou seja no lado direito da equação. Apesar de estabilizar a solução termos de quarta-ordem podem ser excessivamente suaves, principalmente nas proximidades de descontinuidades.

Para resolver esse problema utiliza-se um termo de segunda-ordem, em geral implícito:

$$\begin{aligned} D_i &= \varepsilon_i (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ &= \varepsilon_i (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) \end{aligned}$$

Os parâmetros são arbitrários visando estabilizar a solução. Uma sugestão da literatura é: $\varepsilon_e = \frac{1}{8}$ e $\varepsilon_i = 2\varepsilon_e$. Os termos de segunda e quarta ordem podem ser controlados em regiões diferentes do domínio, permitindo uma boa resolução da ondas de choque, mas sem atenuar excessivamente a solução. Estes termos de ordem mais alta introduzem difusão nas equações, e apesar de estabilizantes interferem na qualidade da solução. Em poucas palavras o uso de dissipação artificial substitui oscilações por espalhamento, tem caráter estabilizante em relação ao método numérico.

4.4 Métodos de Alta Resolução

4.4.1 TVD (Total Variation Diminishing)

Define-se a variação total de uma variável u por exemplo, como:

$$TV(u) = \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| dx$$

Na forma discreta:

$$TV(u) = \sum_{-\infty}^{+\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n|$$

Uma propriedade desejável dos métodos numéricos aplicados a equações hiperbólicas é redução da variação total, conhecido como TVD (*Total Variation Diminishing*), ou seja que:

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$$

Considerando uma forma explícita geral de um método numérico para uma equação hiperbólica:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + A_{i+\frac{1}{2}} \Delta u_{i+\frac{1}{2}}^n - B_{i-\frac{1}{2}} \Delta u_{i-\frac{1}{2}}^n$$

onde :

$$\begin{aligned} \Delta u_{i+\frac{1}{2}}^n &= u_{i+1}^n - u_i^n \\ \Delta u_{i-\frac{1}{2}}^n &= u_i^n - u_{i-1}^n \end{aligned}$$

os coeficientes e dependem do método escolhido. Pode-se provar que um esquema será TVD se:

$$\begin{aligned} A_{i+\frac{1}{2}} &\geq 0 \\ B_{i-\frac{1}{2}} &\geq 0 \\ 0 &\leq A_{i+\frac{1}{2}} + B_{i+\frac{1}{2}} \leq 1 \end{aligned}$$

A partir daí desenvolveram-se famílias de métodos que buscam essa propriedade.

4.4.2 Esquema TVD de 1ª Ordem

Considerando um esquema progressivo de primeira ordem para a equação de Burgers:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{i+1}^n - E_i^n)$$

se $\alpha_{i+\frac{1}{2}} < 0$, e

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_i^n - E_{i-1}^n)$$

se $\alpha_{i+\frac{1}{2}} > 0$. Onde :

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \frac{E_{i+1}^n - E_i^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}$$

para $\Delta u_{i+\frac{1}{2}}^n \neq 0$, caso contrário $\alpha_{i+\frac{1}{2}} = u_i^n$. Escrevendo-se o método na forma geral tem-se:

$$\begin{aligned} A_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\left| \alpha_{i+\frac{1}{2}} \right| - \alpha_{i+\frac{1}{2}} \right) \\ B_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\left| \alpha_{i-\frac{1}{2}} \right| + \alpha_{i-\frac{1}{2}} \right) \\ B_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\left| \alpha_{i+\frac{1}{2}} \right| + \alpha_{i+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned}$$

Percebe-se que todas condições serão cumpridas se:

$$0 \leq \left| \alpha_{i+\frac{1}{2}} \right| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

que é uma restrição ao número de Courant correspondente ao esquema.

Este método apesar da ordem baixa preserva a descontinuidade com qualidade superior a encontrada em métodos dissipativos de ordem mais alta.

Capítulo 5

Escoamentos Compressíveis

5.1 Navier-Stokes Compressível

Considerando um escoamento bidimensional pode-se escrever as equações de Navier-Stokes na forma conservativa como:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial E_v}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial y}$$

Os vetores de fluxo tem a forma:

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \end{bmatrix}$$

$$E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho e + p) u \end{bmatrix}$$

$$F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e + p) v \end{bmatrix}$$

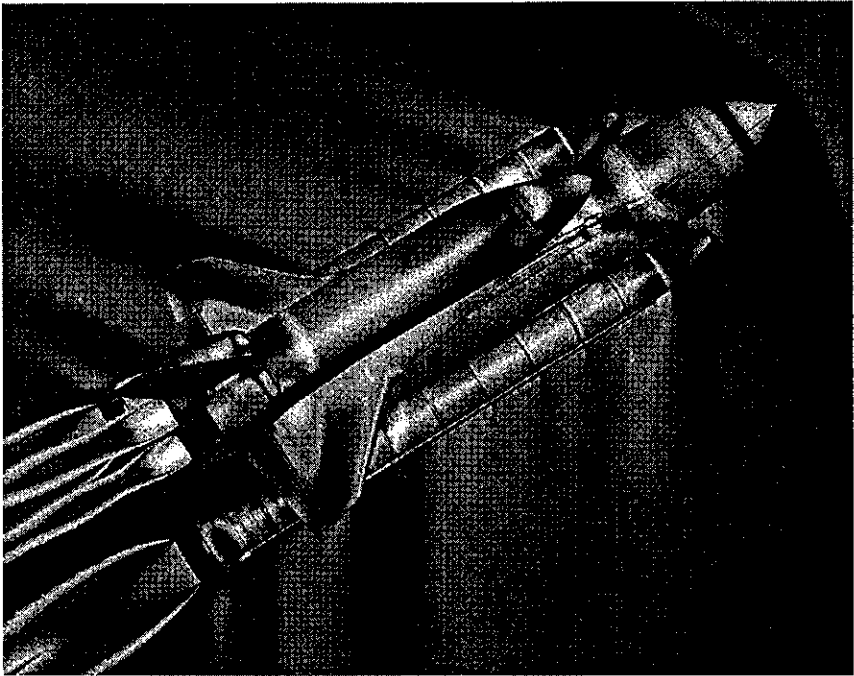


Figura 5.1: Solução numérica para o escoamento ao redor do ônibus espacial.

$$E_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \end{bmatrix}$$

$$F_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y \end{bmatrix}$$

onde:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{yy} &= \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \left(\frac{4}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ \tau_{xy} &= \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{\theta\theta} &= \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \left[-\frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{4}{3} \frac{v}{y} \right] \\ q_x &= -\frac{\mu}{\text{Re}_\infty \text{Pr} (\gamma - 1) M_\infty^2} \frac{\partial T}{\partial x} \\ q_y &= -\frac{\mu}{\text{Re}_\infty \text{Pr} (\gamma - 1) M_\infty^2} \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned}$$

Como foi visto anteriormente domínios computacionais complexos requerem transformações de coordenadas para uma aplicação precisa das condições de contorno.

Dessa forma utilizam-se as equações na sua forma transformada:

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial \eta} = \frac{\partial \bar{E}_v}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{F}_v}{\partial \eta}$$

onde ξ e η são as coordenadas curvilíneas (ortogonais ou não) e J é jacobiano da transformação.

Os vetores de fluxo transformados são dados por aplicações simples das métricas:

$$\begin{aligned}\bar{Q} &= \frac{Q}{J} \\ \bar{E} &= \frac{1}{J} (\xi_t Q + \xi_x E + \xi_y F) \\ \bar{F} &= \frac{1}{J} (\eta_t Q + \eta_x E + \eta_y F) \\ \bar{E}_v &= \frac{1}{J} (\xi_x E_v + \xi_y F_v) \\ \bar{F}_v &= \frac{1}{J} (\eta_x E_v + \eta_y F_v)\end{aligned}$$

Para escoamentos complexos em alta velocidade a hipótese de incompressibilidade não é válida sendo necessário analisar o fluido como compressível.

Além disso novos fenômenos associado a formação de descontinuidades (ondas de choque) são soluções possíveis das equações e os métodos numéricos devem ser adequados para permitir a captura dessas soluções.

5.2 Formulação Explícita

No capítulo anterior o esquema de Mac Cormack foi utilizado para resolver a equação de Burgers. O processo consiste em um passo preditor utilizando diferenças progressivas para os fluxos e um passo corretor utilizando diferenças regressivas.

O método é de segunda ordem tanto no tempo quanto no espaço. Aproximando a equação no passo corretor obtém-se (abandonando a barra sobre as variáveis e considerando o sistema em coordenadas curvilíneas):

$$\begin{aligned}Q_{i,j}^* &= Q_{i,j}^k - \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} (E_{i+1,j}^k - E_{i,j}^k) - \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} (F_{i,j+1}^k - F_{i,j}^k) \\ &+ \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} [(E_v)_{i+1,j}^k - (E_v)_{i,j}^k] + \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} [(F_v)_{i,j+1}^k - (F_v)_{i,j}^k]\end{aligned}$$

No passo preditor:

$$Q_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{2} \left\{ Q_{i,j}^k + Q_{i,j}^* - \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} (E_{i,j}^* - E_{i-1,j}^*) - \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} (F_{i,j}^* - F_{i,j-1}^*) \right. \\ \left. + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} [(E_v)_{i+1,j}^* - (E_v)_{i,j}^*] + \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} [(F_v)_{i,j+1}^* - (F_v)_{i,j}^*] \right\}$$

As derivadas internas aos fluxos são calculadas no sentido inverso dos fluxos.

Um critério de estabilidade empírico, uma vez que as Equações de Navier-Stokes não permite uma análise exata do critério de estabilidade, é dado por:

$$\Delta\tau \leq \frac{\sigma (\Delta\tau)_{inv}}{1 + \frac{2}{Re_c}}$$

onde σ é um fator de relaxação (cerca de 0.8), e $(\Delta\tau)_{inv}$ é um passo de tempo associado ao número de Courant do escoamento invíscido:

$$(\Delta\tau)_{inv} \leq \left[\frac{|U|}{\Delta\xi} + \frac{|V|}{\Delta\eta} + a \left(\frac{1}{\Delta\xi^2} + \frac{1}{\Delta\eta^2} \right) \right]^{-\frac{1}{2}}$$

O número de Reynolds da célula é obtida através da comparação entre as direções:

$$Re_c = \min \left(\frac{\rho |U| \Delta\xi}{\mu}, \frac{\rho |V| \Delta\eta}{\mu} \right)$$

5.3 Formulação Implícita

A técnica de separação de fluxo é semelhante ao processo utilizado por MacCormack, permitindo a captura de discontinuidades no escoamento. Entretanto permite melhor resolução das ondas de choque, pelas propriedades TVD. Propondo uma discretização por diferenças finitas:

$$\frac{Q^{k+1} - Q^k}{\Delta\tau} + \left(\frac{\partial E}{\partial \xi} \right)^{k+1} + \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{k+1} - \left(\frac{\partial E_v}{\partial \xi} \right)^{k+1} - \left(\frac{\partial F_v}{\partial \eta} \right)^{k+1} = 0$$

Aplicando-se as matrizes jacobianas pode-se linearizar as equações tal que:

$$\begin{aligned} E^{n+1} &= E^n + \frac{\partial E}{\partial Q} \Delta Q = E^n + [A] \Delta Q \\ F^{n+1} &= F^n + \frac{\partial F}{\partial Q} \Delta Q = F^n + [B] \Delta Q \\ E_v^{n+1} &= E_v^n + \frac{\partial E_v}{\partial Q} \Delta Q = E_v^n + [A_v] \Delta Q \\ F_v^{n+1} &= F_v^n + \frac{\partial F_v}{\partial Q} \Delta Q = F_v^n + [B_v] \Delta Q \end{aligned}$$

A equação linearizada tem a forma:

$$\left\{ I + \Delta \tau \left[\frac{\partial [A]}{\partial \xi} + \frac{\partial [B]}{\partial \eta} - \frac{\partial [A_v]}{\partial \xi} - \frac{\partial [B_v]}{\partial \eta} \right] \right\} \Delta Q = S^k$$

onde:

$$S^k = -\Delta \tau \left[\frac{\partial E}{\partial \xi} + \frac{\partial F}{\partial \eta} - \frac{\partial E_v}{\partial \xi} - \frac{\partial F_v}{\partial \eta} \right]$$

As matrizes jacobianas são decompostas de acordo com o sinal de seus autovalores inclusive no termo do lado direito. As derivadas são aplicadas de maneira oposta, formando uma equação bloco-pentadiagonal. A fatorização aproximada resulta em um par de equações da forma:

$$\left\{ I + \Delta \tau \left[\delta_{\xi}^- A^+ + \delta_{\eta}^- B^+ - \frac{1}{2} \delta_{\xi}^- A_v^+ - \frac{1}{2} \delta_{\eta}^- B_v^+ \right] \right\} \Delta Q^* = S^k$$

$$\left\{ I + \Delta \tau \left[\delta_{\xi}^+ A^- + \delta_{\eta}^+ B^- - \frac{1}{2} \delta_{\xi}^+ A_v^- - \frac{1}{2} \delta_{\eta}^+ B_v^- \right] \right\} \Delta Q^{k+1} = \Delta Q^*$$

Utilizando uma notação compacta temos:

$$[a]_{ij} \Delta Q_{i-1,j}^* + [b]_{ij} \Delta Q_{i,j}^* + [c]_{ij} \Delta Q_{i+1,j}^* = S_{i,j}$$

e

$$[d]_{ij} \Delta Q_{i,j-1} + [e]_{ij} \Delta Q_{i,j} + [f]_{ij} \Delta Q_{i,j+1} = \Delta Q_{i,j}^*$$

com:

$$\begin{aligned} [a]_{ij} &= \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} \left[-A_{i-1,j}^+ + \frac{1}{2} (A_v)_{i-1,j} \right] \\ [b]_{ij} &= I + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} \left[A_{i,j}^+ + \frac{1}{2} (A_v)_{i,j} \right] + \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} \left[B_{i,j}^+ + \frac{1}{2} (B_v)_{i,j} \right] \\ [c]_{ij} &= \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} \left[-B_{i,j-1}^+ + \frac{1}{2} (B_v)_{i,j-1} \right] \\ [d]_{ij} &= \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} \left[A_{i+1,j}^- - \frac{1}{2} (A_v)_{i+1,j} \right] \\ [e]_{ij} &= I + \frac{\Delta\tau}{\Delta\xi} \left[-A_{i,j}^- + \frac{1}{2} (A_v)_{i,j} \right] + \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} \left[-B_{i,j}^- + \frac{1}{2} (B_v)_{i,j} \right] \\ [f]_{ij} &= \frac{\Delta\tau}{\Delta\eta} \left[B_{i,j+1}^- - \frac{1}{2} (B_v)_{i,j+1} \right] \end{aligned}$$

5.3.1 Decomposição das Matrizes Jacobianas

Considere a *equação de Euler* em duas dimensões:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = 0$$

onde os termos viscosos foram desprezados. Os termos remanescentes, puramente convectivos, admitem descontinuidades na solução. Uma maneira de obter soluções com descontinuidades, mas sem oscilações, é adicionar de viscosidade artificial. Entretanto a adição de viscosidade pode afetar a solução, em alguns casos induzindo a resultados imprecisos. Uma outra alternativa é a decomposição das matrizes Jacobianas.

Aproximando os fluxos temos:

$$E^{n+1} = E^n + \frac{\partial E}{\partial Q} \Delta Q = E^n + [A] \Delta Q$$

$$F^{n+1} = F^n + \frac{\partial F}{\partial Q} \Delta Q = F^n + [B] \Delta Q$$

onde:

$$[A] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -u^2 + \frac{(\gamma-1)U}{2} & (3-\gamma)u & -(\gamma-1)v & (\gamma-1) \\ -uv & v & u & 0 \\ u \left[-\frac{a^2}{(\gamma-1)} + \left(\frac{\gamma}{2} - 1\right)U \right] & \left[\frac{a^2}{(\gamma-1)} + \frac{1}{2}U \right] - (\gamma-1)u^2 & -(\gamma-1)uv & \gamma u \end{bmatrix}$$

$$[B] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ -v^2 + \frac{(\gamma-1)U}{2} & -(\gamma-1)u & (3-\gamma)v & (\gamma-1) \\ v \left[-\frac{a^2}{(\gamma-1)} + \left(\frac{\gamma}{2} - 1\right)U \right] & -(\gamma-1)uv & \left[\frac{a^2}{(\gamma-1)} + \frac{1}{2}U \right] - (\gamma-1)v^2 & \gamma u \end{bmatrix}$$

com $U = (u^2 + v^2)$, e a é a velocidade do som no fluido.

Os autovalores da matriz $[A]$ são dados por:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = u$$

$$\lambda_3 = u + a$$

$$\lambda_4 = u - a$$

De maneira semelhante para a matriz $[B]$ temos:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = v$$

$$\lambda_3 = v + a$$

$$\lambda_4 = v - a$$

A matriz dos autovetores de $[A]$ é:

$$X_A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & u & u + a & u - a \\ 1 & 0 & v & v - a \\ v & \frac{(u^2 - v^2)}{2} & \frac{(u^2 + v^2)}{2} + \frac{a^2}{(\gamma - 1)} + au & \frac{(u^2 + v^2)}{2} + \frac{a^2}{(\gamma - 1)} - au \end{bmatrix}$$

Logo a matriz jacobiana $[A]$ pode ser decomposta na forma:

$$[A] = [A^+] + [A^-]$$

onde:

$$[A^+] = [X_A] [D_A^+] [X_A^{-1}]$$

$$[A^-] = [X_A] [D_A^-] [X_A^{-1}]$$

as matrizes diagonais $[D_A^+]$ e $[D_A^-]$ são compostas pelos autovalores, sendo os positivos armazenados em $[D_A^+]$ e os negativos em $[D_A^-]$.

Dessa forma ficam respeitadas as condições sobre as características que entram e saem de cada interface entre volumes o que resolve o problema das oscilações.

O mesmo procedimento é seguido para a matriz $[B]$.

5.4 Condições de Contorno

As equações apresentadas descrevem o tratamento dos pontos interiores ao domínio de solução. Para se obter a solução é necessário aplicar condições de contorno.

Em mecânica dos fluidos os problemas estão sempre relacionados a um domínio, seja o escoamento interno a um duto, ou externo sobre uma aeronave é necessário estabelecer condições sobre a fronteira desse domínio de modo a tornar a solução única.

As condições de contorno são relações impostas sobre as fronteiras que em geral relacionam os valores das variáveis de estado na fronteira com os valores no interior da malha.

As fronteiras mais comuns, e as condições contorno associadas, são:

5.4.1 Superfície sólida

Na superfície sólida duas condições podem ser aplicadas de acordo com o grau de representatividade do escoamento. A primeira é que não há escoamento normal à superfície sólida e a segunda que o escoamento tangencial também é nulo. No caso de escoamento de um fluido viscoso a condição mais realista é a segunda que representa a aderência molecular. Essa é uma condição de Dirichlet, pois o fato das velocidades normais e tangenciais serem nulas leva a:

$$u = v = w = 0$$

No caso de escoamento em alta velocidade, ou de fluidos pouco viscosos, onde os efeitos da viscosidade se restringem a uma fina camada próxima a superfície sólida, pode-se utilizar uma relação geométrica que força apenas a tangência do escoamento à superfície:

$$\begin{aligned}(\rho u)^{n+1} &= (\rho V)^n \cos(\alpha) \\ (\rho v)^{n+1} &= (\rho V)^n \sin(\alpha)\end{aligned}$$

onde $(\rho V) = \sqrt{(\rho u)^2 + (\rho v)^2}$ e α a inclinação local da superfície.

Alguma condição adicional sobre o campo de temperatura deve ser especificada para tornar a solução única, ou tipo de Dirichlet:

$$T = T_w$$

onde T_w é uma temperatura imposta sobre a superfície sólida, ou do tipo Neumann:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = q_w$$

onde q_w é o fluxo de calor adicionado ou retirado do fluido, ou de Robin:

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_w)$$

onde o fluxo de calor é proporcional a diferença de temperatura entre a parede e o fluido.

5.4.2 Condições em Contornos Fluidos

Nos contornos fluidos são necessárias condições para os campos de velocidade, pressão e temperatura. A especificação das condições depende das características do escoamento. Considerando o caso bidimensional em variáveis primitivas:

$$Q = \begin{Bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{Bmatrix}$$

para a parte convectiva da equação:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + [A] \frac{\partial Q}{\partial x} + [B] \frac{\partial Q}{\partial y} = 0$$

onde as matrizes $[A]$ e $[B]$ são matrizes jacobianas avaliadas em algum estado de referência. A matriz A é dada por:

$$A = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & \frac{1}{\rho} \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho a^2 & 0 & u \end{bmatrix}$$

Diagonalizando a matriz por uma transformação de similaridade:

$$T^{-1}AT = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u+a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u-a \end{bmatrix} = \Lambda$$

onde T é a matriz dos autovetores pela direita de A , e T^{-1} a matriz dos autovetores pela esquerda. Λ é a matriz diagonal cujas elementos são os autovalores de A .

$$T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{a^2} & 0 & \frac{1}{2q^2} & \frac{1}{2a^2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\rho a} & -\frac{1}{2\rho a} \\ 0 & \frac{1}{\rho a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad T^{-1} = \begin{bmatrix} -a^2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \rho a & 0 \\ 0 & \rho a & 0 & 1 \\ 0 & -\rho a & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Considerando que a convecção na direção x é dominante a equação se reduz a:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + [A] \frac{\partial Q}{\partial x} = 0$$

multiplicando-se por T^{-1} produz-se:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + [\Lambda] \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0$$

onde:

$$\Phi = T^{-1}Q = \begin{Bmatrix} p - \rho a^2 \\ \rho a v \\ \rho a u \\ p - \rho a u \end{Bmatrix}$$

Percebe-se que esse sistema é desacoplado. Os elementos de Φ são as variáveis características linearizadas e os elementos da diagonal de Λ indicam as direções de propagação da informação.

Por exemplo se o escoamento é subsônico, $0 < u < a$, as três primeiras características indicam a propagação das variáveis na direção do escoamento u (a jusante) e a quarta e última na direção oposta (a montante). Neste caso os três primeiros valores são positivos e o último negativo. Se o escoamento supersônico todas as características são positivas, logo só a propagação a jusante.

Essa mesma análise é utilizada no estabelecimento de condições de contorno para as fronteiras fluidas. Para que o problema seja determinado o número de variáveis a serem prescritos na fronteira ou extrapolados do interior do domínio devem ser escolhidos de acordo com as direções das características na respectiva fronteira.

Por exemplo, na entrada de um bocal em escoamento subsônico, três características são positivas, ou seja vem de fora para dentro do domínio, logo três das quatro variáveis, devem ser prescritas. A variável restante deve ser extrapolada a partir de valores (ainda não convergidos) do interior do domínio. Na saída supersônica de um bocal, todas as características deixam o domínio, logo todas as variáveis devem ser extrapoladas.

O respeito a essas condições acelera a taxa de convergência do processo, e permite uma redução na extensão dos domínios computacionais. Além disso as condições de contorno se adaptam durante o processo de solução.

Capítulo 6

Escoamento Hipersônico

6.1 Escoamentos a Alto Mach

Considerando as equações referentes as ondas de choque normal, para a temperatura e pressão:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1) \right] \left[\frac{2 + (\gamma - 1) M_1^2}{(\gamma + 1) M_1^2} \right]$$
$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1)$$

Se o número de Mach é elevado ($M_1 \gg 1$) temos:

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{2\gamma(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} M_1^2$$
$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_1^2$$

Logo tanto a temperatura como a pressão após a onda de choque são proporcionais ao quadrado do número de Mach.

A definição do limite inferior de Mach para o regime hipersônico não é precisa, mas em geral associa-se a faixa $5 < M < 6$ como o limiar do regime, onde os efeitos de temperatura e pressão devem ser levados em consideração pelo modelo de análise.

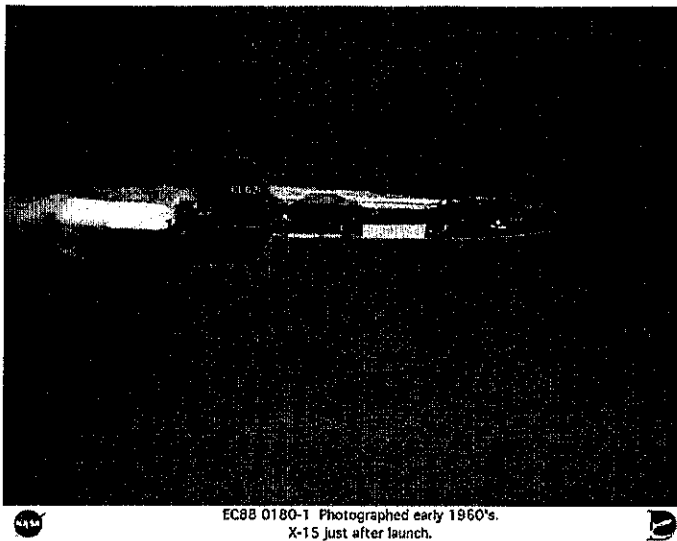


Figura 6.1: X-15, avião experimental hipersônico.

6.1.1 Efeitos de Gás Real

O aumento da pressão leva as moléculas que compõe o fluido a se aproximarem. Em condições atmosféricas a distância média das moléculas é cerca de 10 diâmetros moleculares, portanto as forças de atração fracas ainda são desprezíveis. A aproximação aumenta a influência das forças fracas. Para modelar adequadamente esse efeito deve-se substituir a equação de estado dos gases perfeitos pela equação de Van der Waals:

$$(p + a\rho^2) \left(\frac{1}{\rho} - b \right) = RT$$

onde a e b são constantes específicas para o gás. Na prática essa equação raramente é utilizada, mesmo em escoamento hipersônico, adaptando-se a equação de estado por um fator de compressibilidade Z , que é uma função da pressão e da temperatura, tal que:

$$p = Z(\rho RT)$$

O fator de compressibilidade $Z = Z(p, T)$ para o gás é obtido a partir de experimentos.

6.1.2 Cinética Molecular

Considerando a estrutura molecular do gás, distinguem-se quatro parcelas de energia que compõem a energia interna:

- Energia Translacional - É a energia associada a translação do centro de massa da molécula
- Energia Rotacional - É a energia associada a rotação da molécula em torno dos seus eixos.
- Energia Vibracional - É a energia associada a vibração da molécula em relação a uma posição de equilíbrio.
- Energia Eletrônica - É a energia associada ao movimento dos elétrons dentro do campo elétrico do núcleo.

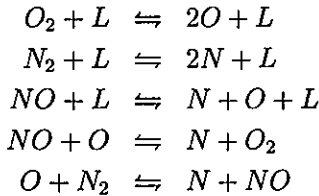
De acordo com a estrutura da molécula o número de graus de liberdade total, considerando todos os modos, varia. E cada um desses modos é excitado a um nível de energia diferente. Além disso esses níveis de energia são quantizados, mesmo os translacionais, ou seja cada um requer um acréscimo discreto para saltar para o próximo nível, liberando uma quantidade também discreta para descer de nível. Esse fato complica consideravelmente a expressão da energia interna (muito longe de $e = c_v T$) tendo-se que recorrer a Mecânica Estatística. Esse processo de ativação e desativação de níveis quânticos influencia o balanço de energia e deve ser contabilizado.

6.1.3 Reações Químicas

A elevação da temperatura e da pressão pode favorecer reações químicas no escoamento. Um gás, como o ar que é uma mistura de substâncias, por exemplo, pode se dissociar favorecendo recombinações dos elementos, e se ionizar liberando elétrons e íons no escoamento. Estes processos requerem e liberam energia no escoamento e precisam se contabilizados na solução do problemas. Uma vez escolhido um modelo de cadeia de reações pode-se associá-lo ao modelo do escoamento, as equações de Navier-Stokes, e resolvê-los simultaneamente.

6.2 Modelo com Reações Químicas

Considere uma cadeia de reações químicas para o ar:



onde L representa um elemento não reativo, que pode ser qualquer um dos reagentes, ou seja O_2 , N_2 , NO , O ou N . Este modelo está limitado a temperaturas inferiores a $8000K$ pois além desse valor ocorre ionização. Uma consideração importante é a magnitude das taxas de reação em relação a velocidade do escoamento.

6.2.1 Equilíbrio

Se o escoamento tem densidade alta o bastante para que um número suficiente de colisões ocorram levando a altas taxas de reação pode-se considerar que as reações estão em equilíbrio, ou seja a velocidade do escoamento, ou melhor os efeitos convectivos, são desprezíveis diante das taxas de reação química. Existe uma indicação prática que para os veículos que voam abaixo de 50 km a hipótese de equilíbrio químico é válida.

O tratamento adequado consistiria em considerar as equações para as pressões parciais das espécies químicas e outras relações de equilíbrio, entretanto como a maioria dos estudos em escoamento hipersônico está relacionado ao ar pode-se utilizar funções interpoladoras de tabelas experimentais.

Em escoamentos com reações químicas dois estados devem ser definidos para calcular as variáveis restantes. Uma prática comum é utilizar:

$$\begin{aligned} \hat{\gamma} &= f(\rho, e) \\ T &= g(\rho, p) \end{aligned}$$

onde f e g são funções não lineares baseadas em coeficientes obtidos experimentalmente para o ar, e utilizar a equação de estado:

$$p = \rho e (\hat{\gamma} - 1)$$

Para iniciar o processo utiliza-se $\hat{\gamma} = \gamma$, que converge ao longo da solução.

6.2.2 Não-equilíbrio

Para as baixas densidades compatíveis, com as camadas mais altas da atmosfera, as colisões moleculares não ocorrem tão rapidamente e o efeito de convecção é importante em relação a taxa de reação. Neste caso deve-se resolver as equações de continuidade química para cada espécie. Para efeitos didáticos considere um escoamento no interior de bocal convergente divergente axissimétrico, neste caso a continuidade das espécies é escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (SQ_c) + \frac{\partial}{\partial x} (E_c) + SW = 0$$

onde $S = S(x)$ é a seção transversal da bocal, e os vetores são definidos como:

$$\begin{aligned} (Q_c)_i &= \rho C_i, \\ (E_c)_i &= \rho u C_i \\ (W)_i &= -\dot{w}_i \end{aligned}$$

As espécies são indexadas tal que 1 corresponde a O_2 , 2 a N_2 , 3 a NO , 4 a O e 5 a N .

Os valores C_i correspondem as frações em massa, logo:

$$\sum_{i=1}^5 C_i = 1$$

As componentes de W representam as taxas de produção de cada espécie:

$$\dot{w}_i = \frac{\rho C_i}{[L_i]} \frac{d[L_i]}{dt}$$

onde $[L_i]$ é a concentração de cada espécie. As relações entre as concentrações e suas taxas de variação para cada espécie dependem de uma série de valores tabelados.

Estas equações vão determinar os valores para os estados termodinâmicos de maneira semelhante ao equilíbrio químico.

Bibliografia

- [1] R. J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser Verlag, 1992.
- [2] R. J. LeVeque. *Finite Diference Methods for Differential Equations*. AMath 585-6 notes, 1998.
- [3] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Chapman & Hall. 1989.
- [4] W. F. Ames. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Academic Press. 1992.
- [5] G. F. Carrier, C. E. Pearson. *Partial Differential Equations*. 1988.
- [6] I. N. Sneddon. *Elements of Partial Differential Equations*. 1957.
- [7] Anderson Jr. *Modern Compressible Flow*. McGraw-Hill, New York, 1990.
- [8] Anderson, J.D.; *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*, McGraw-Hill, New York, 1995.
- [9] Hirsch, C.; *Numerical Computation of Internal and External Flows: Volumes I & II*, John Wiley & Sons, 1988.
- [10] Hoffman, K.A., Chiang, S.T.; *Computational Fluid Dynamics for Engineers: Volumes I & II*, Engineering Education System, University of Kansas, 1993.
- [11] Peyret, R., Taylor, T.D.; *Computational Methods for Fluid Flow*, Springer-Verlag Series in Computational Physics, New York, 1983.

- [12] Lomax,H., Pulliam,T.H.,Zingg,D.W.; *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, Nasa Ames Resarch Center e University of Toronto, relatório disponível pela Internet, 1997.(http://george.arc.nasa.gov/~tpulliam/Classes/Book.1997/new_html.html).
- [13] Ferziger,J.H., Peric,M.; *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag Berlim-Heidelberg, 1996.

Impresso na Gráfica da



pelo Sistema Xerox / 5390

