

ERNANI VITILLO VOLPE

**ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E
QUANTIDADE DE MOVIMENTO NO ESCOAMENTO LAMINAR
ATRAVÉS DE PASSAGENS COM GEOMETRIA ARBITRÁRIA:
MODELOS COMPRESSÍVEL E INCOMPRESSÍVEL.**

**DISSERTAÇÃO APRESENTADA À ESCOLA
POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO
PAULO, PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
MESTRE EM ENGENHARIA.**

São Paulo, 1993

à meus pais, que jamais pouparam esforços
em prol de minha formação.

Agradecimentos

Durante o desenvolvimenmto desse trabalho, pude contar com a colaboração e o apoio de diversas pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para torná-lo possível. Naturalmente, muitas dessas contribuições permanecerão anônimas. Longe de ter um caráter propósital, isto se dá apenas em razão das circunstâncias. Isso posto, gostaria de externar minha gratidão a algumas dessas pessoas, pelo papel fundamental que desempenharam na elaboração dessa dissertação.

Ao Prof. Dr. Marcos de M. Pimenta, orientador do presente trabalho, e que participa de minha formação desde o curso de graduação. Pelo valioso incentivo recebido e por todas as discussões técnicas que nortearam a elaboração dessa dissertação.

Ao Prof. Dr. José M. S. Jabardo pelo exemplo de dedicação e competência profissional, assim como por todo o apôio durante a fase inicial de meu programa de mestrado.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da EPUSP, na figura de seus professores, a quem devo minha formação, além de inúmeras colaborações valiosas para a consecução desse trabalho.

E, por fim, aos professores da Área Térmica: Arlindo Tribess, Alberto H. Neto e Flávio A. S. Fiorelli; com quem tive a oportunidade de trabalhar até o presente, por todo o apôio recebido.

Resumo

Este trabalho tem por finalidade desenvolver um modelo matemático para a simulação do escoamento viscoso, limitado por fronteiras de geometria arbitrária. Para isso, consideram-se os sistemas de coordenadas ajustados a essas fronteiras, suas principais características, e os métodos para sua geração. Dentre esses, empregam-se os que consistem na solução de sistemas de equações diferenciais parciais elípticas. Os métodos são classificados em função de produzirem, ou não, sistemas de coordenadas ortogonais e de permitirem, ou não, o controle do espaçamento das linhas do sistema. Propõem-se critérios para avaliar propriedades importantes dos sistemas gerados, como a ortogonalidade. Desenvolvem-se exemplos de aplicação desses métodos e se comparam seus resultados. Para a simulação do escoamento, generaliza-se o Método dos Volumes Finitos, para sistemas de coordenadas ortogonais. Para o escoamento incompressível implementam-se os algoritmos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLEC. Para o escoamento compressível, desenvolve-se formulação modificada do algoritmo SIMPLE, que considera o efeito da compressibilidade através de um esquema "UPWIND" para a massa específica na equação de correção de pressão. Em ambos os casos, inclui-se o termo de dissipação viscosa na formulação da equação da energia. Aplicam-se os algoritmos desenvolvidos a uma série de problemas e se discutem os resultados.

Resumo

Este trabalho tem por finalidade última desenvolver um modelo matemático para a simulação do escoamento viscoso, limitado por fronteiras de geometria arbitrária. Para isso, consideram-se inicialmente os sistemas de coordenadas que se ajustam à forma física dessas fronteiras, e se apresentam suas características fundamentais. Dentre os métodos consagrados para a geração desses sistemas, discutem-se aqueles que consistem na solução de equações diferenciais parciais elípticas. Esses são classificados em função de produzirem, ou não, sistemas localmente ortogonais. Além disso, analisam-se tais métodos quanto à possibilidade de controlar algumas características importantes dos sistemas gerados. E, nesse sentido, propõe-se critérios para avaliá-las quantitativamente. Desenvolvem-se alguns exemplos de aplicação dos métodos considerados nessa etapa, e os resultados são discutidos. Numa segunda fase, desenvolve-se uma generalização do Método dos Volumes Finitos (M.V.F.), para os sistemas de coordenadas localmente ortogonais, destinada à simulação do escoamento em passagens de geometria arbitrária. Para o problema incompressível, implementam-se três algoritmos diferentes baseados no M.V.F.. A transferência de calor por convecção recebe tratamento independente. Para o escoamento compressível desenvolve-se formulação especial, que considera os efeitos que a transferência de calor e a compressibilidade induzem no escoamento, através dos gradientes de pressão e temperatura. Em ambos os casos a dissipação viscosa é analisada e incluída na formulação da equação da energia. Aplicam-se então os algoritmos resultantes a uma série limitada de casos, e discutem-se os resultados.

Abstract

The main purpose of this dissertation is to provide a mathematical model for the simulation of viscous fluid flow bounded by frontiers of arbitrary geometry. With this aim, body-fitted coordinate systems are used and their main features are presented. Among the methods designed to produce these systems, those which are based upon the solution of partial differential elliptic equations are discussed. These methods are classified according to their capability of producing orthogonal coordinate systems or not. Besides, it is also considered the possibility of controlling some important features of the systems. Thus, some criteria to evaluate these features are presented. At the second part of this work, it is developed a generalization of the Finite Volume Method (F.V.M.). This enables its use on orthogonal body-fitted co-ordinate systems, in numerical simulation of laminar fluid flow through passages with arbitrary geometries. For the incompressible fluid flow, three different algorithms based upon the F.V.M. are presented, and the heat transfer problems are considered apart. For the compressible fluid flow, a different formulation of the (F.V.M.) is developed, which takes into account the effects that heat transfer and the fluid compressibility itself cause in the flow field, concerning pressure and temperature gradients. In both cases the viscous dissipation is included in the energy equation. The algorithms are applied to a series of numerical examples and the results are discussed.

Índice

Item	Página
Lista de Símbolos.....	vii
1. Introdução.....	1
2. Caracterização do Problema e Objetivos da Pesquisa.....	5
3. Revisão Bibliográfica.....	13
4. A Formulação Generalizada das Equações do Modelo Matemático.....	19
5. Os sistemas de Coordenadas Curvilíneas Ajustados às Fronteiras do Escamento.....	29
6. Métodos para a Geração dos Sistemas de Coordenadas.....	44
7. Métodos para a Geração dos Sistemas de Coordenadas Localmente Ortogonais.....	56
8. Critérios para avaliação da Qualidade dos Sistemas de Coordenadas.....	77
9. Implementação Numérica dos Métodos Analisados.....	85
10. Exemplos de Aplicação dos Métodos de Geração dos Sistemas de Coordenadas.....	105
11. O Método dos Volumes Finitos Aplicado aos Sistemas de Coordenadas Generalizadas.....	126
12. Exemplos de Aplicação dos Algoritmos de Simulação Numérica.....	182
Referências Bibliográficas.....	200
Apêndice A.....	208
Apêndice B.....	220
Apêndice C.....	224

Lista de Símbolos

Símbolo	Definição
$A_{\substack{i_1 i_2 i_3 \dots i_m \\ j_1 j_2 j_3 \dots j_n}}$	Tensor genérico de ordem $(m + n)$.
$a(\xi), b(\eta)$	Funções de estiramento do método de Morice [54].
c_p	Calor específico a pressão constante.
e	Energia interna específica do fluido.
e_{ij}	Tensor deformação, componentes covariantes.
$f(\xi, \eta)$	Relação entre os fatores de escala.
$f^o(\xi, \eta), f^c(\xi, \eta)$	Polinômios interpoladores para a relação entre os fatores de escala.
\vec{g}	Vetor aceleração da gravidade, notação simbólica.
g^i, g_j	Versores dos sistemas de coordenadas generalizados, componentes contravariantes e covariantes, respectivamente.
g^{ij}, g_{ij}	Tensor métrico, componentes contravariantes e covariantes, respectivamente.
h	Entalpia específica do fluido.
$h_{(1)} \text{ e } h_{(2)}$	Fatores de escala dos sistemas curvilíneos localmente ortogonais.
$I_{(1)}$	Funcional do método de Morice [54].
$I_{(B)}$	Funcional que representa a uniformidade do mapeamento, método de Brackbill e Saltzman [14].
$I_{(O)}$	Funcional que representa a ortogonalidade do mapeamento, método de Brackbill e Saltzman

[14].

$I_{(v)}$	Funcional que representa a relação ponderada entre os elementos de volume dos espaços físico e transformado, no método de Brackbill e Saltzman [14].
J	Jacobiano da transformação que leva do sistema cartesiano ao sistema de coordenadas generalizado.
k	condutibilidade térmica.
L	Comprimento típico do domínio físico.
N	Número de pontos típico da malha.
P	Pressão Termodinâmica.
$P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$	Funções de controle do espaçamento da malha, no método de Thompson et al [79].
\vec{q}	Vetor fluxo de calor por unidade de área, notação simbólica.
$R^m_{.ijk}$	Tensor de Rieman-Christoffel.
t	variável tempo.
T	Temperatura.
\vec{u}	Vetor velocidade local, notação simbólica.
u^i, u_i	Componentes do vetor velocidade local.
$v^i _j$ e $v_i _j$	Derivadas covariantes de um vetor genérico \vec{v} .
x^i	Coordenada cartesiana representada em notação indicial. O índice i pode assumir os valores 1, 2 ou 3, correspondendo a x , y e z , respectivamente.
x, y, z	Coordenadas do sistema de referência cartesiano em \mathbb{R}^3 .
$\alpha(\xi), \beta(\eta)$	Derivadas das funções de estiramento do

	método de Morice [54].
$\beta^i_{j\cdot}$	Operador de transformação entre os sistemas de coordenadas $(\xi^{j\cdot})$ e (ξ^i) .
$\bar{\beta}$	Módulo de expansão volumétrica.
$\gamma_{(1)}$	Designação da fronteira física (1).
$\Gamma_{(1)}$	Designação da fronteira transformada (1).
Γ_{ijk}	Símbolo de Christoffel de primeira espécie.
Γ^i_{jk}	Símbolo de Christoffel de segunda espécie.
ρ	Massa específica do fluido.
ξ, η, ζ	Coordenadas generalizadas em \mathbb{R}^3 .
ξ^i	Notação indicial para coordenada generalizada, componente contravariante.
ξ_i	Notação indicial para coordenada generalizada, componente covariante.
τ	Tensor das tensões, notação simbólica.

1. Introdução

Problemas relacionados ao escoamento de fluidos, que envolvem transferência de calor e efeitos de compressibilidade, são freqüentes em uma vasta gama de aplicações na Engenharia, que compreende desde sistemas de ventilação e processos termo-hidráulicos, até características de projeto em aerodinâmica e hidrodinâmica. Por sua importância, estes problemas sempre foram alvo de intensa investigação, quer experimental, através de ensaios em túneis de vento e de água, quer em uma abordagem estritamente teórica, por meio de modelos matemáticos.

A formulação das equações, em que consistem os modelos matemáticos, baseia-se nos princípios da conservação da massa, energia e quantidade de movimento. Para sua solução têm fundamental importância a escolha adequada do sistema de coordenadas em que se descreve o espaço físico do problema, e a adoção de hipóteses que permitam simplificá-lo. Naturalmente estas hipóteses são específicas do caso em estudo e, como tal, devem possuir comprovação empírica. Quanto à adequação do sistema de coordenadas utilizado, torna-se evidente a simplificação do modelo que daí resulta, quando se analisa o escoamento no interior de um conduto de seção circular, onde o emprego de um sistema de coordenadas cartesiano implica numa representação tridimensional do problema e a adoção de um sistema cilíndrico, que considera a simetria axial das fronteiras físicas, representa-o na forma bidimensional.

De fato, a simplificação obtida no exemplo acima deriva da utilização de um sistema de coordenadas curvilíneas, ajustadas às fronteiras físicas do escoamento. Uma propriedade fundamental desses sistemas consiste em representar tais fronteiras como linhas de coordenada constante, o que simplifica consideravelmente a especificação das condições de contorno do problema, quer sejam a derivadas ou a valores prescritos. A análise do escoamento plano em torno de um cilindro é bastante ilustrativa dessa propriedade. Nela, a especificação das condições de aderência e impermeabilidade da fronteira física, em um sistema cilíndrico, dá

-se sobre uma linha de raio constante, enquanto em um sistema de coordenadas cartesianas dependeria da expressão dessa fronteira.

A utilização de sistemas de coordenadas curvilíneas ajustados às fronteiras físicas do escoamento corresponde, em verdade, ao mapeamento do espaço físico, representado por coordenadas cartesianas, em um espaço matemático transformado, representado pelo referido sistema de coordenadas. Dessa forma, as equações da Dinâmica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte devem ser formuladas e resolvidas nestes sistemas, para isso passam a incluir termos referentes a sua métrica, que representam, no espaço transformado, os efeitos de curvatura e distorção locais presentes no espaço físico.

A obtenção de soluções analíticas para os modelos matemáticos está, no entanto, restrita a uma pequena parte dos problemas de interesse. Isso é verdadeiro, ainda quando se usam sistemas de coordenadas como os descritos acima, uma vez que a simplificação alcançada para as condições de contorno pode ser compensada em larga margem pela complexidade que passam a assumir as equações do modelo. Ressalta a importância desta asserção a diversidade das aplicações desenvolvidas na engenharia, quanto aos aspectos de configuração geométrica e fenômenos físicos envolvidos. Tal fato deu impulso ao desenvolvimento das técnicas de simulação numérica, incrementado em tempos recentes pelo aumento da disponibilidade de recursos computacionais avançados.

A simulação numérica do escoamento corresponde à resolução das equações que o governam por um método numérico. Esses métodos consistem basicamente na formulação de aproximações das equações do modelo, que as simplifiquem, e de um algoritmo para resolvê-las. A forma destas aproximações depende essencialmente do método escolhido e sua solução ocorre, não mais sobre um meio contínuo, como é o caso das soluções analíticas, mas sobre um conjunto de pontos discretos que o representa. Em princípio, os métodos podem se basear na substituição dos operadores diferenciais por diferenças algébricas, como no Método das Diferenças Finitas, na minimização do erro na conservação de uma propriedade em estudo, como no Método dos Elementos Finitos, ou na aplicação das equações de transporte a pequenos volumes de controle em que se divide a região de interesse, como no Método dos Volumes Finitos, de que se utiliza o presente trabalho.

Nesse contexto, a metodologia mais adequada para a simulação numérica de um problema de escoamento limitado por fronteiras de geometria arbitrária, seja através de uma passagem ou em torno de um corpo submerso, pode ser dividida em duas etapas: a) geração de um sistema de coordenadas curvilíneas ajustado às fronteiras do escoamento, segundo sua geometria, e b) resolução das equações do modelo matemático sobre esse sistema.

Os sistemas de coordenadas curvilíneas acima referidos dividem-se entre os que são localmente ortogonais e os que não o são. Podem ser determinados, entre outras formas, pela solução de equações diferenciais parciais elípticas, métodos algébricos, técnicas analíticas de mapeamento conforme, ou através da minimização de funcionais que representam propriedades do mapeamento. Alguns dos métodos considerados permitem inclusive o controle do espaçamento da malha gerada, possibilitando seu refinamento em determinadas regiões de interesse, com evidentes vantagens sob o ponto de vista do esforço computacional.

O mérito de tais sistemas, do ponto de vista da simulação numérica, reside em proporcionarem soluções mais precisas, principalmente junto às fronteiras do escoamento, onde os efeitos de curvatura local fazem-se presentes, e os gradientes das grandezas físicas em estudo são normalmente mais acentuados. Isto se deve à representação simplificada, e portanto mais acurada, das fronteiras físicas e das condições de contorno, além do fato de as equações passarem a incorporar os efeitos de curvatura e distorção locais.

A característica que confere a esta forma de abordagem das simulações numéricas grande potencialidade quanto as suas aplicações resulta do fato de serem distintas e independentes as etapas acima descritas. Isto é, a geração de um sistema de coordenadas ajustado às fronteiras do escoamento depende exclusivamente da geometria dessas fronteiras, enquanto a solução das equações de transporte assume os dados da métrica do sistema gerado, obtidas na etapa anterior, e as condições de contorno prescritas, mas ocorre no espaço matemático transformado. Assim, um simulador pode, em princípio, ser construído com dois algoritmos: um dedicado à geração da malha computacional para geometrias arbitrárias, e outro à simulação numérica do escoamento sobre a malha gerada.

Os vários modelos propostos para a geração de sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento revelam características diferenciadas quanto à qualidade do resultado e significativa dependência da geometria em estudo. Ao lado disso, a análise de escoamentos que envolvem transferência de calor e efeitos de compressibilidade compreende os princípios de conservação da massa, quantidade de movimento e energia, além da equação de estado. Por isso resulta num sistema de equações diferenciais parciais de maior complexidade que aquele utilizado na ausência desses efeitos.

Nessas condições, é objetivo deste trabalho analisar comparativamente diversos métodos consagrados para a geração de sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento e desenvolver o algoritmo que permita a simulação numérica do escoamento de fluidos compressíveis com transferência de calor, através do Método dos Volumes Finitos, empregando sistemas de coordenadas localmente ortogonais.

2. Caracterização do Problema e Objetivos da Pesquisa

2.1 A Análise do escoamento Limitado Por Fronteiras de Geometria Arbitrária.

A análise de problemas relacionados ao escoamento de fluidos limitados por fronteiras físicas de configuração geométrica arbitrária é uma necessidade freqüente em diversas áreas de aplicação na Engenharia. Como exemplos podem ser citados o escoamento em bocais, difusores, expansões ou contrações bruscas, coletores, em torno de válvulas em motores de combustão interna, sobre perfis aerodinâmicos ou hidrodinâmicos, em máquinas de fluxo, enfim, uma infinidade de situações diferentes.

Numa primeira etapa de uma abordagem mais abrangente de todos esses problemas, deve-se elaborar um modelo matemático que descreva os fenômenos físicos envolvidos, de maneira coerente. Para os propósitos do presente trabalho, consideram-se unicamente os problemas bidimensionais¹, na ausência de reações químicas, e em regime de escoamento laminar. Portanto, sua modelação matemática deve considerar os princípios da conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Tais equações apresentam-se no espaço físico descrito por um sistema de coordenadas cartesiano na forma apresentada no Apêndice B, nas expressões (B.1) a (B.3) em notação simbólica, ou (B.4) a (B.6), em notação indicial.

Este sistema possui cinco equações diferenciais parciais. Duas são de natureza escalar, continuidade e energia, e as três restantes correspondem às componentes da equação do quantidade de movimento, de natureza vetorial. As incógnitas, no entanto, são em número de 9, correspondendo às três componentes da velocidade, pressão, temperatura, massa específica, condutibilidade térmica, viscosidade dinâmica e entalpia, cuja utilização, em lugar da energia interna, encontra-se justificada em [81]. Restam, portanto, quatro variáveis, que se assumem conhecidas, determinadas por relações auxiliares [83] da forma:

¹ O modelo matemático pode ser estendido aos problemas (3-D).

$$\begin{aligned} \rho &= \rho(p,T); & \mu &= \mu(p,T); \\ h &= h(p,T); & k &= k(p,T). \end{aligned} \tag{2.1}$$

O sistema de equações acima apresentado descreve de forma completa os problemas de escoamento de fluidos compressíveis em regime laminar, com transferência de calor e na ausência de reações químicas. Sua solução permite determinar os perfis de velocidade, temperatura, pressão, bem como das demais propriedades termodinâmicas envolvidas. Entretanto, por se tratarem de equações essencialmente não lineares, as soluções analíticas são possíveis, em princípio, apenas quando as condições do problema permitem simplificá-las, desprezando os termos que representam a não linearidade, ou tornando-as independentes— nos casos de fluido com propriedades constantes ou de escoamento não viscoso. Para os casos em que tais simplificações não são possíveis, a escolha da técnica empregada em sua solução deve recair sobre os métodos numéricos.

De qualquer forma, nos casos em que a configuração geométrica das fronteiras físicas do escoamento é arbitrária, a especificação das condições de contorno do problema passa a apresentar dificuldades. Uma vez que, a prescrição das condições de aderência e impermeabilidade, bem como temperaturas de parede ou fluxos de calor, dá-se sobre essas fronteiras e, portanto, depende de sua representação.

Do ponto de vista da simulação numérica, o espaço físico é representado não mais por um meio contínuo, mas por um conjunto de pontos discretos, e sobre estes também se representam as fronteiras do escoamento. Quando a solução das equações se dá sobre um sistema de coordenadas cartesiano, como o indicado na figura (2.1), costumam-se empregar duas metodologias distintas [51]. A primeira delas consiste no refinamento da malha computacional nas regiões próximas às fronteiras, figura (2.2). A segunda envolve a aproximação da fronteira, na malha computacional por "pseudo-nós", gerados para este fim, figura (2.4).

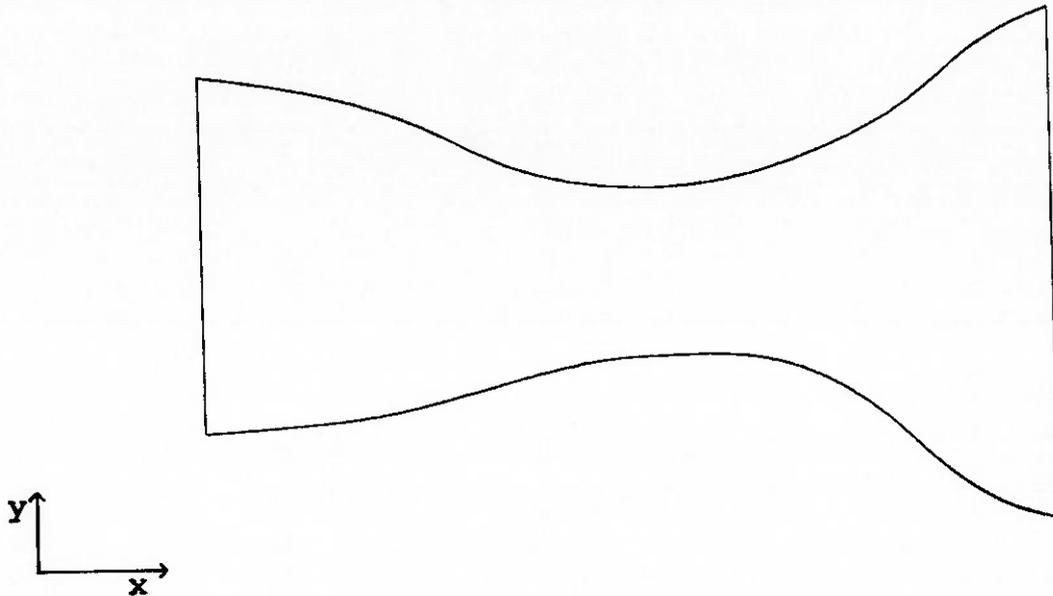


Figura 2.1 - Exemplo de passagem com fronteiras de configuração geométrica arbitrária. Espaço orientado por um sistema de coordenadas cartesiano.

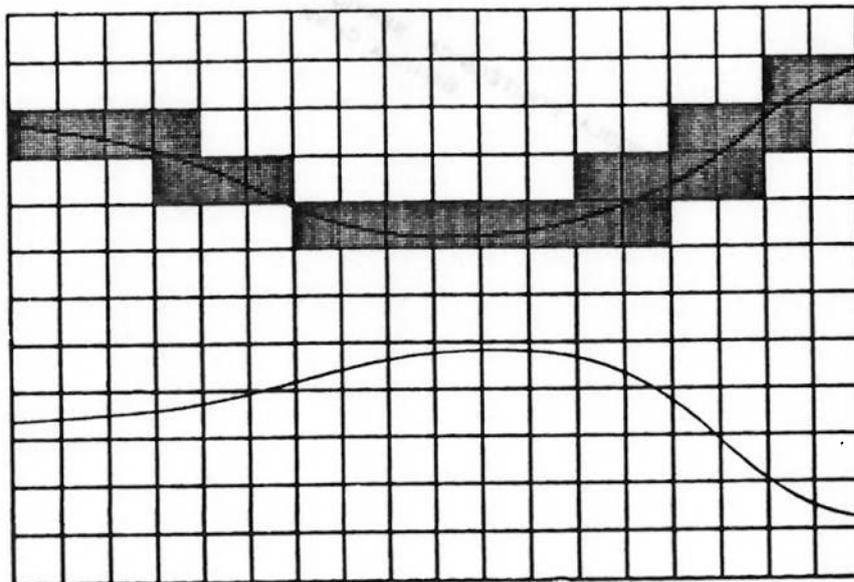


Figura 2.2 - Exemplo de malha computacional construída sobre um sistema de coordenadas cartesiano, com refinamento nas regiões próximas às fronteiras.

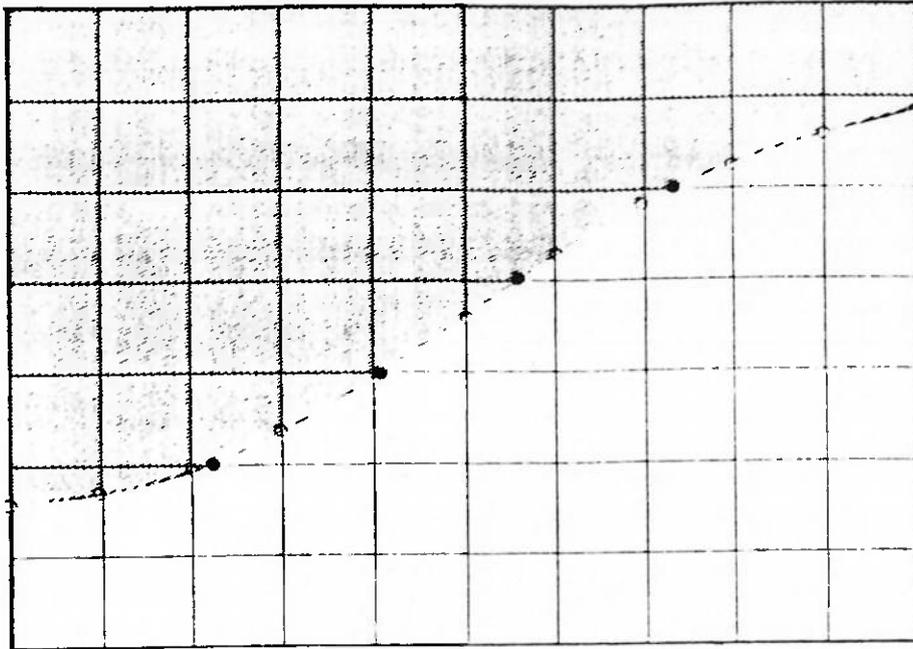


Figura 2.3 - Interpolações realizadas nas intersecções entre as linhas de coordenada constante e o contorno da fronteira física.

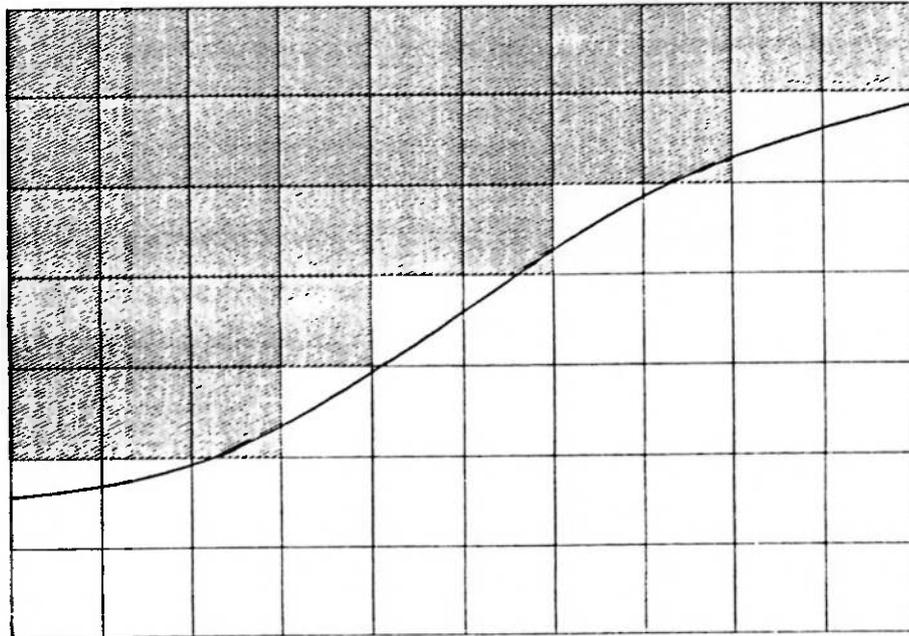


Figura 2.4 - Exemplo de malha computacional com a aproximação da fronteira física real por pseudo-nós.

Na primeira metodologia, ao refinamento da malha nas regiões próximas às fronteiras, seguem-se interpolações das propriedades em estudo, nos pontos em que ocorre a intersecção do contorno físico com as linhas de coordenada constante, figura (2.3).

A utilização dessa metodologia pode, de fato, implicar em considerável aumento de esforço computacional. Isto se deve à necessidade do refinamento, cuja importância cresce para geometrias de curvaturas mais acentuadas. Além disso, a avaliação numérica dos operadores diferenciais presentes nas equações de transporte deve apresentar erros de segunda ordem, uma vez que a formulação dessas equações não considera os efeitos de curvatura local, como acontece quando se empregam os sistemas de coordenadas curvilíneos ajustados a essas fronteiras.

A segunda metodologia, ao definir os "pseudo-nós" em substituição à fronteira física real, representa-a por um contorno idealizado que não possui a regularidade desta, como mostra a figura (2.4). Os valores das grandezas físicas em estudo são, portanto, extrapolados para os pontos desse contorno. Da mesma forma, a utilização de operadores diferenciais formulados sobre um sistema cartesiano, induz erros em sua avaliação numérica. Há, no entanto, o agravante de que as descontinuidades introduzidas na representação da fronteira venham a perturbar a solução das equações, especialmente na escala das camadas limites térmica e hidrodinâmica, nos casos de Reynolds ou Prandtl elevados.

Os sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras físicas do escoamento, entretanto, representam estas fronteiras por linhas de coordenada constante (figura 2.5), e com isto permitem uma representação mais acurada de sua geometria, sem apresentar os inconvenientes dos sistemas cartesianos. Assim, podem-se empregar interpoladores lineares entre os pontos. Além disso, evitam-se os erros de segunda ordem na avaliação numérica dos operadores diferenciais. Pois a geração desses sistemas equivale ao mapeamento do espaço físico do problema (figura 2.5) no espaço matemático transformado, descrito pelas coordenadas (ξ, η) (figura 2.6). De modo que as equações do modelo matemático são formuladas e resolvidas nestes sistemas, e por isso seus termos passam a considerar, no espaço transformado, os efeitos de curvatura e distorção locais presentes no espaço físico do escoamento.

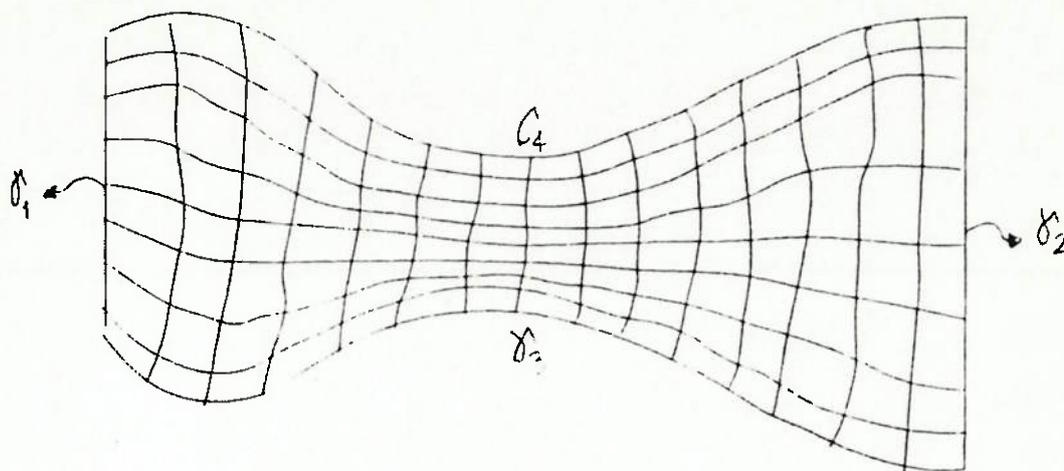


Figura 2.5 - Passagem com fronteiras de configuração geométrica arbitrária, descrita por um sistema de coordenadas ajustado às fronteiras físicas do escoamento. representação do espaço físico.

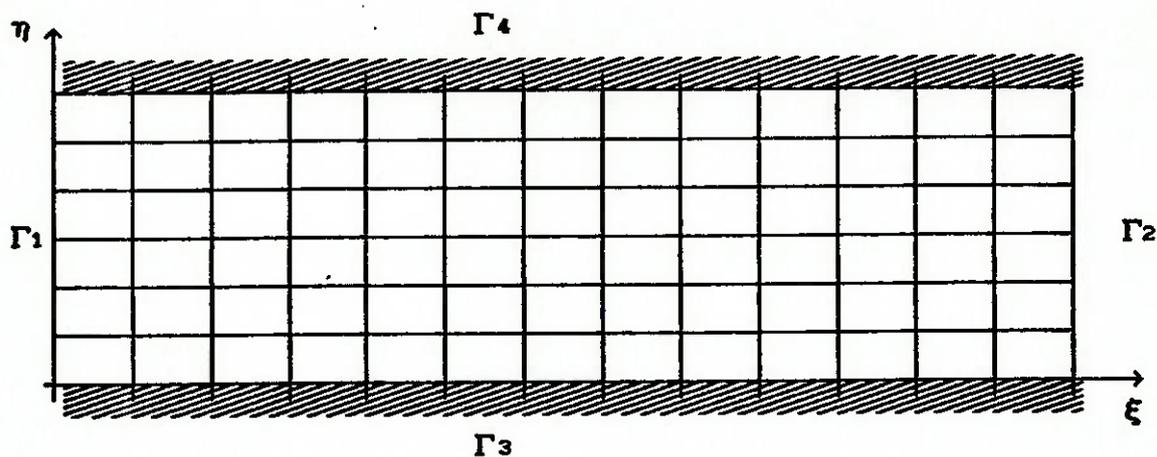


Figura 2.6 - Representação da passagem apresentada na figura 2.5, no espaço matemático transformado.

Com respeito ao modelo matemático, as equações dos princípios da conservação da massa, energia e quantidade de movimento, quando

escritas para o espaço matemático transformado, no sistema (ξ, η) , passam a incluir entre seus termos, elementos da métrica deste espaço, que se referem a efeitos de curvatura e distorção locais, que estão presentes no espaço físico. Assim, assumem a forma apresentada no Apêndice B, nas expressões (B.7) a (B.11).

Deve-se ressaltar, entretanto, que os termos referentes ao sistema de coordenadas são funções apenas das variáveis (x') , do espaço físico, e (ξ') , do espaço matemático transformado. Não envolvem, portanto, nenhuma das incógnitas relativas ao escoamento propriamente dito. Assim, ficam completamente determinadas quando se realiza o mapeamento que produz este sistema, numa fase anterior e independente da resolução das equações de transporte. Isto equivale, para o estudo do escoamento, a uma redefinição dos operadores diferenciais daquelas equações, em que se consideram os efeitos de curvatura e distorção locais do referido sistema, por meio de funções determinadas previamente. Desse modo, os princípios da conservação da massa, quantidade de movimento e energia assumem a forma representada pelas expressões (B.12) a (B.29), do Apêndice B.

No contexto da simulação numérica, as funções da métrica do sistema são determinadas durante a geração da malha computacional. Seus valores são conhecidos apenas nos pontos que representam o espaço transformado. Por isso, aparecem nas equações de transporte como coeficientes, que são constantes em cada ponto. Isto posto, e uma vez que estas equações têm a forma apresentada acima, sua solução pelo Método dos Volumes Finitos [59] dá-se de maneira inteiramente análoga àquela empregada para os sistemas de coordenadas cartesianos. Assim, a metodologia proposta permite a aplicação desse método, porém sobre uma representação mais acurada das fronteiras do escoamento.

2.2 Objetivos da Pesquisa

Nos parágrafos anteriores, procurou-se caracterizar a importância prática da análise do escoamento limitado por fronteiras físicas de geometria arbitrária. Também foram apresentadas as características básicas desses problemas e os argumentos que justificam sua simulação numérica e o emprego dos sistemas de coordenadas ajustados a essas fronteiras.

Em princípio, são esses os argumentos que suportam todo o trabalho realizado. Por outro lado, dada a própria amplitude das possibilidades de aplicação do método, dentro da Dinâmica dos Fluidos, urge delimitar o escopo dos estudos realizados. Nesse sentido, e em função de seu caráter formativo, são objetivos deste trabalho:

1. O estudo dos sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras físicas do escoamento, e dos métodos para sua geração.

2. A comparação entre os sistemas gerados pelos diferentes métodos analisados, com a definição de critérios para a avaliação das propriedades desses sistemas que sejam de interesse para as aplicações desenvolvidas.

3. Implementar, para a simulação numérica, os algoritmos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLEC, que se baseiam Método dos Volumes Finitos.

4. A simulação numérica do escoamento laminar de fluidos através de passagens de geometria arbitrária, envolvendo transferência de calor e efeitos de compressibilidade. Deve-se desenvolver para isso, uma formulação apropriada do algoritmo SIMPLER destinada aos problemas compressíveis.

5. Desenvolver exemplos de aplicação dos algoritmos implementados, com o propósito de discutir seu desempenho e comparar suas soluções. Considerar também a influência das características do sistema de coordenadas utilizado sobre a soluções obtidas.

3. Revisão Bibliográfica

Os estudos desenvolvidos no contexto do presente trabalho dividem-se nos três tópicos enumerados no item 3, quais sejam: álgebra tensorial generalizada, os métodos para a geração dos sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento e o Método dos Volumes Finitos.

Obedecendo a essa classificação, constitui-se na referência bibliográfica central, o trabalho desenvolvido por Meneghini [51], em que se apresenta um estudo sistemático das três linhas de pesquisa acima referidas. Estes autores promovem uma análise comparativa entre métodos consagrados para a geração dos sistemas de coordenadas, localmente ortogonais ou não, baseados em equações diferenciais parciais. Consideram sua aplicação a domínios simplesmente conexos e multiplamente conexos. E promovem a solução numérica das equações da Dinâmica dos Fluidos sobre os sistemas localmente ortogonais, em domínios simplesmente conexos. Entretanto, ainda que as aplicações sejam restritas aos problemas isotérmicos, estende-se a formulação generalizada às equações de transferência de calor e massa. De resto, seu escopo limita-se aos escoamentos em regime laminar, restrição essa que vale também para o presente trabalho.

Quanto à álgebra tensorial generalizada, as referências principais são Aris [7] e Flügge [26]. O primeiro, não sendo inteiramente dedicado ao assunto, quase que se resume a apresentar os resultados importantes dessa álgebra. O segundo, por ser esta a sua finalidade principal, dá especial atenção às demonstrações e aos significados geométricos desses resultados, apresentando a teoria como um conjunto estruturado, com fundamentação conceitual abrangente.

Deve-se mencionar também Butkov [17], onde se encontram conceitos importantes sobre a generalização da métrica em sistemas de coordenadas curvilíneos. Em Kaplan [39], desenvolvem-se resultados da álgebra tensorial para os sistemas localmente ortogonais, e o teorema da função inversa, ambos de fundamental importância para as aplicações aqui desenvolvidas. Outras referências compõem o substrato teórico deste tópico. Como

exemplos, citam-se Churchill [19] e Sveshnicov e Tikohnov [71], pela conceituação das funções analíticas e das transformações conformes, que constituem, de certa forma, uma base conceitual importante para alguns dos métodos de geração analisados.

Quanto aos sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento, propriamente ditos, os métodos para a sua geração podem ser de três tipos, segundo Morice [54] e Thompson et al. [77]: os que se baseiam em técnicas analíticas de transformação conforme, os que fazem uso de equações diferenciais parciais elípticas, parabólicas ou hiperbólicas, e os de natureza algébrica, que empregam polinômios interpoladores ou 'splines'.

Os métodos pertencentes ao primeiro grupo, dos quais cita-se como exemplo aquele proposto por Barfield [10], apresentam algumas restrições quanto a aplicabilidade dos sistemas gerados, e, em verdade, constituem-se em caso particular do segundo grupo. Neste, a geração do sistema corresponde a uma transformação inversível do espaço físico do problema em um espaço matemático transformado. Assim, as propriedades do sistema gerado têm suporte conceitual, o que é muito importante, do ponto de vista da modelação matemática. Os métodos que pertencem ao terceiro grupo não compartilham dessa característica. Por isso, em princípio, não apresentam maior interesse aos propósitos deste trabalho.

Dentre os métodos do segundo grupo, há os que se utilizam de equações parabólicas, e que promovem a geração do sistema de coordenadas entre duas fronteiras especificadas. Há ainda os que se baseiam em equações hiperbólicas, para esses, apenas uma das fronteiras pode ser especificada, sendo as demais determinadas como parte dos resultados. E, enfim, há os que empregam sistemas de equações elípticas, nesses prescrevem-se as condições de contorno sobre toda a borda do domínio transformado, em completa correspondência com a geometria das fronteiras físicas. Esta característica revela-se especialmente útil às aplicações que se desenvolvem neste trabalho, bem como em Meneghini [51], e por isso os métodos analisados pertencem a este grupo.

Entre os primeiros a utilizar esta metodologia, Winslow [84] propôs a utilização de um sistema de equações diferenciais de Laplace para a geração dos sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras de geometria arbitrária. Em princípio, a solução dessas equações no espaço físico apresentaria sérias dificuldades quanto

à prescrição das condições de contorno, dada a complexidade que a configuração das fronteiras apresenta nessas condições. Para evitar tais dificuldades, este autor propôs que se invertessem as variáveis dependentes e independentes das equações de Laplace, que seriam então resolvidas no espaço transformado, com vistas a obter o mapeamento do domínio transformado, de forma retangular, sobre o domínio físico, de geometria arbitrária.

Thompson et al. [79] aperfeiçou este método, extendendo sua aplicação a problemas tridimensionais, domínios multiplamente conexos e sistemas de coordenadas tempo-dependentes. Godunov e Prokopov [32] desenvolveram uma metodologia para promover o controle da disposição das linhas de coordenadas constantes da malha, tendo por base as equações de Laplace do método de Winslow [84]. Com a mesma finalidade de controlar a disposição dessas linhas, Thompson et al. [78] desenvolveram metodologia diversa, empregando um sistema de equações de Poisson, ao invés de equações de Laplace. Neste método, cabe aos termos não homogêneos dessas equações o papel de controle, e sua forma, segundo propõem seus autores, corresponde a somatórias de funções exponenciais.

Há, no entanto, uma restrição ao emprego desse método. Essa restrição refer-se ao fato de que os sistemas de coordenadas por ele gerados não são localmente ortogonais, e esta propriedade é efetivamente importante para a solução numérica das equações do modelo matemático, em especial quando pelo Método dos Volumes Finitos.

Para contornar essa dificuldade, desenvolveram-se métodos para a geração de sistemas de coordenadas localmente ortogonais. Nesse grupo, Ryskin e Leal [66] propuseram um método em que se assume *a priori* as propriedades fundamentais desses sistemas, isto é, a nulidade dos termos do tensor métrico não pertencentes à sua diagonal principal e uma relação entre os fatores de escala das coordenadas curvilíneas. Nestas condições, tomam por base o fato de que os versores do sistema cartesiano têm divergência nula, o que exprime uma identidade tensorial verdadeira, e formulam um sistema de equações diferenciais parciais elípticas, no espaço transformado. Da solução deste, geram-se sistemas de coordenadas localmente ortogonais.

Outros métodos para a geração dos sistemas de coordenadas baseiam-se na otimização de conjuntos de funcionais que exprimem

propriedades esperadas para tais sistemas, entre elas se inclui a ortogonalidade local. Estes métodos também pertencem ao segundo grupo, uma vez que as equações de Euler-Lagrange que determinam seus extremos configuram-se, no espaço transformado, elípticas quasi-lineares. Dentre eles citam-se os trabalhos de: Barfield [9], que propõe dois funcionais, onde um representa a condição de ortogonalidade local combinada a uma relação entre os fatores de escala, e outro representa a uniformidade do sistema gerado. Jacquotte [37], que propõe a minimização de um funcional construído a partir dos invariantes do tensor de Cauchi-Green. Belinskii et al. [11], onde se empregam técnicas de mapeamento quasi-conforme¹. Giannakopoulos e Engel [31], onde se propõe a minimização de um funcional que permite que se produza um sistema de coordenadas orientado segundo dois campos vetoriais independentes, resultantes do modelo físico do problema. Este método, diferente dos anteriores, emprega equações diferenciais parciais hiperbólicas.

Dois outros métodos baseados em princípios variacionais, mais adequados, entretanto, aos propósitos deste trabalho, são considerados em detalhes. O primeiro deles corresponde ao trabalho de Morice [54], que pode ser considerado uma formulação variacional para um método semelhante àquele apresentado por Ryskin e Leal [66], pois propõe a minimização de um funcional cujas equações de Euler-Lagrange equivalem às obtidas por estes, embora com argumentação diversa. O segundo é o trabalho de Brackbill e Saltzman [14], onde se procede a minimização de uma combinação linear de funcionais que representam, respectivamente, a uniformidade do sistema de coordenadas, sua ortogonalidade local e uma relação ponderada entre os elementos de volume dos espaços físico e transformado.

Posterior aos acima citados, o trabalho de Thompson et al. [77] veio a se constituir numa referência central sobre a geração dos sistemas de coordenadas curvilíneos. Isto por desenvolver um amplo e sistemático estudo dos métodos encontrados na literatura

¹ Este trabalho constitui-se em referência frequentemente citada por diversos autores.

para esse fim, incluindo, é claro, aquele que foi proposto pelo grupo. Neste trabalho, apresentam-se conceitos fundamentais sobre tais sistemas, uma classificação dos métodos quanto a seus resultados, e aos tipos de modelos matemáticos em que se baseiam. Incluem-se nessa análise os sistemas localmente ortogonais os tempo-dependentes e os que se adaptam aos resultados da simulação. Também se discutem os métodos que têm formulação variacional, como o de Brackbill e Saltzman [14], os conceitos para a geração de sistemas tridimensionais, e a influência da não ortogonalidade local e da não uniformidade do sistema, no erro da solução numérica das equações do modelo matemático.

Quanto às equações da Dinâmica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte, sua solução é numérica, e emprega-se para este fim o Método dos Volumes Finitos (Patankar [59]). Este autor foi um dos que o desenvolveu, e por isso seu trabalho constitui-se na referência central a respeito do mesmo. Este método propõe, como o próprio nome diz, que se divida o domínio do escoamento em um conjunto de volumes de dimensões finitas, sobre os quais realiza-se o balanço de massa, quantidade de movimento e energia. As equações que descrevem os princípios de conservação dessas grandezas fazem-no na forma diferencial, e são discretizadas e resolvidas numericamente.

Os resultados mais importantes desse trabalho consistem precisamente em determinar a forma mais adequada de realizar essa discretização e a sequência de passos necessária à resolução do sistema de equações acopladas, por elas constituído. Para isso, dois algoritmos são propostos. Em essência, ambos promovem, a cada passo, a iteração da equação da quantidade de movimento, seguida das iterações dos princípios de conservação da massa e energia, nessa ordem. E o fazem sobre uma malha em que os pontos para avaliação da velocidade são deslocados daqueles onde se avaliam as demais grandezas. Diferem, porém, quanto à forma como articulam as correções intermediárias dos termos de pressão e velocidade, sendo que, um deles parte de uma estimativa da primeira, e o outro assume valores iniciais para a segunda.

Alguns dos trabalhos consultados propõem modificações na forma de tratar o acoplamento pressão-velocidade, nas equações discretizadas do modelo, de modo a aperfeiçoar as características de convergência do método. Nesse sentido, situa-se o trabalho de

Van Doormaal e Raithiby [23]. De outro lado, Acharya e Moukalled [1] analisam algoritmos que empregam malhas computacionais que não deslocar os pontos de velocidade das demais grandezas. Em direção semelhante, desenvolvem-se os trabalhos de Thiart [74] e [75]. Jang et al. [38], realizam estudo comparativo entre o método originalmente proposto por Patankar [59], e algumas de suas variantes consagradas.

Outros trabalhos analisam aspectos particulares do Método dos Volumes Finitos. Entre eles Peric' [61], que discute a influência da não ortogonalidade e da não uniformidade das malhas computacionais nos resultados das simulações numéricas, que utilizar o método desenvolvido por Patankar [59]. Ou Shreüder e Plessis [68], que analisam a modelação numérica de fronteiras interiores.

Diversos trabalhos desenvolvidos por outros autores, ou mesmo por Patankar e colaboradores, enfocam aspectos particulares do método, bem como algumas modificações. Dentre eles citam-se: Braaten e Patankar [13], Braga [16], Marchi e Maliska [48], Mazhar e Raithiby [50], Mahdi e Kinney [46] e Patankar [60].

4. A Formulação Generalizada das Equações do Modelo Matemático

As equações diferenciais que compõe o modelo matemático representam leis que governam os fenômenos físicos considerados neste estudo. Fundamentam-se em grande parte na observação destes fenômenos e por isso são, em essência, fenomenológicas, como ressaltar Arpacı [8]. Disto resulta que podem ser formuladas inicialmente para um sistema de coordenadas cartesiano, onde se apresentam na forma mais simples, sendo, a posteriori, estendidas para outros sistemas de referência. De fato, como estabelece Flügge [26], e se constitui num dos resultados mais poderosos de toda a algebra dos sistemas de coordenadas generalizados: uma identidade tensorial verdadeira, enunciada na forma generalizada, é válida para qualquer sistema de coordenadas. Este postulado encontra-se apresentado em detalhes no apêndice A (Eq. A.27) deste volume, e é empregado a seguir, para escrever as referidas equações na forma que serão utilizadas no decorrer deste trabalho.

As equações dos princípios da conservação da massa, energia e quantidade de movimento podem ser deduzidas na forma diferencial, por meio de um balanço destas grandezas físicas em um volume de controle cúbico de dimensões infinitesimais [12], como representado na figura 3.1.

4.1. A Equação da Conservação da Quantidade de Movimento

Considera-se que o domínio físico do escoamento seja descrito por um sistema de coordenadas cartesiano, e nele se representa um volume de controle cúbico de dimensões infinitesimais (figura 3.1). Sobre este volume de controle faz-se um balanço das forças de campo e de contato atuantes, e do fluxo de quantidade de movimento que o atravessa. Deste balanço deve resultar equação da quantidade de movimento.

$$\left(\begin{array}{l} \text{somatória de} \\ \text{forças que} \\ \text{agem no } V_c \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{taxa de} \\ \text{acumulação} \\ \text{de Q. M.} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{fluxo de} \\ \text{Q. M. que} \\ \text{deixa o } V_c \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{fluxo de} \\ \text{Q. M. que} \\ \text{entra no } V_c \end{array} \right) \quad (4.1)$$

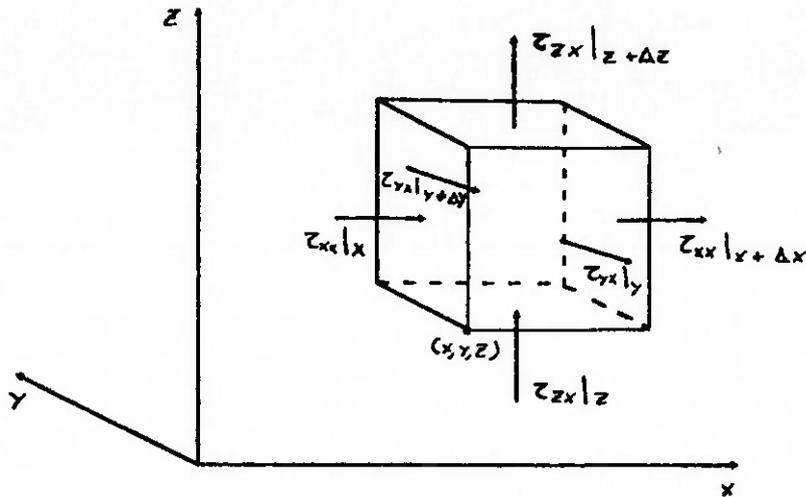


Figura 4.1 - Volume de controle para a dedução da equação da conservação da quantidade de movimento.

Por ser esta equação de natureza vetorial, considera-se inicialmente uma direção genérica do espaço (i), representando um dos eixos coordenados na forma: $x \Rightarrow i=1$, $y \Rightarrow i=2$ e $z \Rightarrow i=3$. Agrupando-se os termos do fluxo de quantidade de movimento na direção (i), que atravessa as faces do Vc, bem como as forças que agem nesta direção, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & \Delta y \Delta z [(\tau^{11})_x - (\tau^{11})_{x+\Delta x}] + \Delta x \Delta z [(\tau^{21})_y - (\tau^{21})_{y+\Delta y}] + \\
 & + \Delta x \Delta y [(\tau^{31})_z - (\tau^{31})_{z+\Delta z}] + \Delta y \Delta z [(P)_x - (P)_{x+\Delta x}] + \Delta x \Delta y \Delta z \rho f \\
 & = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial}{\partial t} (\rho u^1) + \Delta y \Delta z [(\rho u^1 u^1)_x - (\rho u^1 u^1)_{x+\Delta x}] + \\
 & + \Delta x \Delta z [(\rho u^1 u^2)_y - (\rho u^1 u^2)_{y+\Delta y}] + \Delta x \Delta y [(\rho u^1 u^3)_z - (\rho u^1 u^3)_{z+\Delta z}]
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Dividindo esta expressão por $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ e levando ao limite para $\Delta V \rightarrow 0$, obtém-se a equação da quantidade de movimento para os sistemas cartesianos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho u^i u^j) = \rho f^i - \frac{\partial p}{\partial x^i} - \frac{\partial}{\partial x^j} (\tau^{ij}) \quad (4.3)$$

Once o tensor das tensões (τ^{ij}) para os fluidos Newtonianos-Stokesianos ([8], [21], [67] e [83]) é dado por:

$$\tau^{ij} = -\mu \left[\left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} \right) - \frac{2}{3} \delta^{ij} \frac{\partial u^k}{\partial x^k} \right] \quad (4.4)$$

A expressão (3.3) pode ser apresentada em notação simbólica na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p - [\nabla \cdot \tau] + \rho \vec{f} \quad (4.5)$$

Para expressá-la na forma generalizada, deve-se considerar a definição dos operadores diferenciais nessa forma. Esta equação, bem como as demais, será escrita em termos das componentes contravariantes do vetor velocidade local (Apêndice A, [7] e [26]). Procedendo-se termo a termo:

O primeiro termo, referente à derivada temporal da quantidade de movimento não sofre outras alterações além da utilização das componentes contravariantes do vetor velocidade.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) \quad (4.6)$$

O segundo termo, relativo ao divergente da quantidade de movimento, depende da definição desse operador diferencial sobre os sistemas de coordenadas generalizados. Considerando um tensor genérico ϕ , de segunda ordem, tem-se (Eq. A.41):

$$\nabla \cdot (\phi) \rightarrow \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \phi^{ij}) + \Gamma_{mn}^i (\phi^{mn}) \quad (4.7)$$

Portanto o referido termo resulta em :

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \rho u^i u^j) + \Gamma_{mn}^i (\rho u^m u^n) \quad (4.8)$$

O termo relativo ao gradiente de pressão depende da definição desse operador diferencial nos sistemas generalizados (Eq. A33)¹, resultando em:

$$\nabla P \Rightarrow g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) \quad (4.9)$$

O termo referente às forças de campo depende apenas da expressão correta do vetor \vec{f} em termos de suas componentes contravariantes, o que corresponde a:

$$\rho \vec{f}^i = \rho f^i \quad (4.10)$$

Em princípio, as forças de campo consideradas neste trabalho correspondem à força peso, envolvendo a aceleração da gravidade (g^i), ou ao empuxo resultante de gradientes de massa específica (ρ), devidos aos efeitos de convecção natural. Assim:

$$f^i = g^i \quad (4.11)$$

$$f^i = \bar{\rho} \bar{\beta} (T - \bar{T}) g^i \quad (4.12)$$

Onde \bar{T} e $\bar{\rho}$ correspondem a uma temperatura de referência do problema e à massa específica avaliada a esta temperatura, respectivamente. Já $\bar{\beta}$ corresponde ao módulo de expansão volumétrica, avaliado a mesma temperatura, e definido por:

$$\bar{\beta} = - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \Big|_{T=\bar{T}} \quad (4.13)$$

O termo que se refere ao gradiente do tensor das tensões do fluido requer uma avaliação mais detalhada. Para procedê-la, introduz-se inicialmente a expressão desse tensor:

¹ O produto pelo tensor métrico visa atribuir caráter contravariante ao gradiente.

$$\tau_{ij} = -2\mu \left[e_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x^k} (u_k) \right] \quad (4.14)$$

Onde o elemento (e_{ij}) corresponde ao tensor de deformação, na forma covariante, como em [2] e [51]. No sistema cartesiano esse tensor expressa-se por:

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x^j} (u_i) + \frac{\partial}{\partial x^i} (u_j) \right) \quad (4.15)$$

Cada um dos termos da expressão (4.14) é analisado, com vistas a obter a forma generalizada do tensor das tensões, escrita em termos de suas componentes contravariantes.

Em notação tensorial generalizada, as derivadas parciais com respeito às coordenadas transformam-se em derivadas covariantes (Eq. A.32 a Eq. A.37). Então, tomando-se inicialmente (e_{ij}) :

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(u_i|_j + u_j|_i \right) \quad (4.16)$$

Para calcular as componentes contravariantes do tensor de deformação, faz-se seu produto pelo tensor métrico:

$$e^{ij} = g^{im} g^{jn} e_{mn} = \frac{1}{2} \left(g^{im} g^{jn} u_m|_n + g^{im} g^{jn} u_n|_m \right) \quad (4.17)$$

Levando em conta o fato de que a derivada covariante do tensor métrico é intrinsecamente nula (Apêndice A).

$$g^{rs}|_k = 0 \rightarrow (u^s)|_k = (g^{rs} u_r)|_k = g^{rs} u_r|_k \quad (4.18)$$

Assim, pode-se escrever:

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(g^{jn} u^i|_n + g^{in} u^j|_n \right) \quad (4.19)$$

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(g^{jn} (u^i|_n + u^k \Gamma_{nk}^i) + g^{in} (u^j|_n + u^k \Gamma_{nk}^j) \right) \quad (4.20)$$

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(g^{jn} u^i|_n + g^{in} u^j|_n + u^k (\Gamma_{nk}^j g^{in} + \Gamma_{nk}^i g^{jn}) \right) \quad (4.21)$$

Colocando na forma explícita a derivada covariante do tensor

métrico.

$$g^{rs}|_k = g^{rs},_k + \Gamma_{kl}^r g^{ls} + \Gamma_{kl}^s g^{rl} = 0 \quad (4.22)$$

$$\Gamma_{mk}^j g^{im} + \Gamma_{nk}^i g^{jn} = \Gamma_{lk}^j g^{il} + \Gamma_{lk}^i g^{jl} = -g^{ij},_k \quad (4.23)$$

Introduzindo esse resultados na expressão (4.21), obtem-se a forma final do tensor deformação:

$$e^{ij} = \frac{1}{2} \left(u^i,{}_n g^{jn} + u^j,{}_m g^{im} - u^k g^{ij},_k \right) \quad (4.24)$$

O termo que se refere ao divergente da velocidade transforma-se pela expressão (A.40), e pelo fato de que:

$$\delta^{mn} \beta_n^i \beta_n^j = \beta_n^i \beta_n^j = g^{ij} \quad (4.25)$$

Resultando em:

$$\delta^{ij} \frac{\partial u^k}{\partial x^k} \Rightarrow g^{ij} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial x^k} (J u^k) \quad (4.26)$$

Dessa forma, a expressão do tensor das tensões em termos de suas componentes contravariantes fica:

$$\tau^{ij} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(g^{jn} \frac{\partial u^i}{\partial \xi^n} + g^{in} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{ij}}{\partial \xi^n} u^n \right) - \frac{1}{3J} g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^n} (J u^n) \right] \quad (4.27)$$

Empregando-se a expressão (4.7) para $[\nabla \cdot \tau]$, obtem-se:

$$\nabla \cdot \tau = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \tau^{ij}) + \Gamma_{mn}^i (\tau^{mn}) \quad (4.28)$$

Finalmente, reagrupando-se os termos da equação da quantidade de movimento, chega-se à sua forma generalizada:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \rho u^i u^j) + \Gamma_{mn}^i (\rho u^m u^n) = \rho f^i - g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) +$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \tau^{ij}) + \Gamma_{mn}^i (\tau^{mn}) \quad (4.29)$$

Onde τ^{ij} é fornecido pela expressão (4.27) e a força de campo f^i pode ser representada por (4.11) ou (4.12), dependendo do problema considerado.

4.2. A Equação da Continuidade

A argumentação adotada para deduzir a equação da continuidade sobre o sistema de coordenadas cartesiano é inteiramente análoga àquela empregada para a quantidade de movimento. Com a ressalva de que, por se tratar de entidade escalar, seu balanço no volume de controle representado na figura (3.1) tem a forma:

$$\left(\begin{array}{c} \text{taxa de} \\ \text{acumulação} \\ \text{de massa} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{fluxo de} \\ \text{massa que} \\ \text{deixa o } V_c \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{fluxo de} \\ \text{massa que} \\ \text{entra no } V_c \end{array} \right) = 0 \quad (4.30)$$

Resultando em:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.31)$$

Para expressá-la na forma generalizada, basta considerar a expressão do divergente de um vetor nessa forma (eq. A.40), uma vez que a derivada temporal não se modifica.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i) \quad (4.32)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i) = 0 \quad (4.33)$$

4.3 A Equação da Conservação da Energia Térmica

A conservação da energia total no volume de controle cúbico indicado na figura (3.1), no contexto deste estudo, considera apenas os termos referentes à energia interna (e) e cinética (ec), sendo a energia potencial referida diretamente ao trabalho da força peso. Tratam-se de quantidades escalares, da mesma forma que

a massa, e seu balanço corresponde a:

$$\left(\begin{array}{l} \text{Fluxo de calor} \\ \text{para o Vc por} \\ \text{condução} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{troca líquida} \\ \text{de trabalho} \\ \text{sistema/meio} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{taxa de} \\ \text{acumulação} \\ \text{de ec e e} \end{array} \right) +$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{fluxo de ec e e} \\ \text{que sai do Vc} \\ \text{por convecção} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{fluxo de ec e e} \\ \text{que entra no Vc} \\ \text{por convecção} \end{array} \right) \quad (4.34)$$

Que leva a² expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{\rho u^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{u} \left(e + \frac{\rho u^2}{2} \right) \right] = - \nabla \cdot \vec{q} + \rho (\vec{u} \cdot \vec{g}) - \nabla \cdot (P \vec{u}) +$$

$$- \nabla \cdot [\tau \cdot \vec{u}] \quad (4.35)$$

Entretanto, se a equação da quantidade de movimento for multiplicada escalarmente pelo vetor velocidade, obtém-se a equação da conservação da energia mecânica [12], quando se subtrai esta última da expressão (4.35), resulta a equação da conservação da energia térmica³.

$$\rho \frac{D}{Dt} (e) = - (\nabla \cdot \vec{q}) - (P \nabla \cdot \vec{u}) - (\tau : \nabla \vec{u}) \quad (4.36)$$

Esta equação é mais adequada aos propósitos deste trabalho. Por que o princípio da conservação da quantidade de movimento faz parte do modelo matemático, e portanto a equação da energia mecânica, devido à forma como é obtida, não acrescenta novas informações ao sistema. De qualquer forma, é conveniente expressar a equação (4.36) em função da temperatura, para isso introduz-se primeiramente a definição de entalpia [81], resultando⁴:

² A energia cinética da partícula fluida vale: $ec = \frac{\rho u^2}{2}$

³ Devido à equação da conservação da massa, para uma grandeza escalar genérica φ , vale a simplificação:

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

⁴ Para quantificar a troca de calor por condução, emprega-se a Lei de Fourier: $\vec{q} = - k \nabla T$

$$\rho \frac{D}{Dt}(h) = \frac{D}{Dt}(P) + \nabla \cdot (k\nabla T) - (\tau : \nabla \vec{u}) \quad (4.37)$$

Então, escrevendo a entalpia como $h(T,P)$ [81], obtem-se a equação da conservação da energia térmica em função da temperatura:

$$\rho c_p \frac{D}{Dt}(T) = + \nabla \cdot (k\nabla T) - (\tau : \nabla \vec{u}) + \beta T \frac{D}{Dt}(P) \quad (4.38)$$

Devido à equação da continuidade, esta expressão pode ser escrita na forma:

$$c_p \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} T) \right) = + \nabla \cdot (k\nabla T) - (\tau : \nabla \vec{u}) + \beta T \frac{D}{Dt}(P) \quad (4.39)$$

Da mesma forma que para as demais equações do modelo, procede-se uma análise individual dos termos desta equação, com o propósito de generalizá-la.

O primeiro termo, referente à derivada temporal, não se modifica. Quanto ao segundo, relativo ao transporte de energia térmica por convecção, por se tratar do divergente de um vetor (Eq. A.40), fica:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} T) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^1} (J \rho u^1 T) \quad (4.40)$$

O termo referente ao fluxo de calor por condução corresponde ao divergente de um vetor, que é proporcional ao gradiente de temperatura. Empregando-se as expressões (A.33) e (A.40):

$$\nabla \cdot (k\nabla T) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^r} \left(k J g^{rs} \frac{\partial}{\partial \xi^s} T \right) \quad (4.41)$$

Once o tensor métrico é utilizado para que se obtenham as componentes contravariantes do gradiente de temperatura.

No termo referente à dissipação viscosa, deve-se empregar a forma generalizada do tensor das tensões, indicada na expressão (4.27). Além disso, o tensor gradiente de velocidade passa a ser representado pela derivada covariante do vetor velocidade. Assim:

$$\tau : \nabla \vec{u} = \tau^{ij} u_{i,j} = \tau^{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \xi^j} (u_i) - u_k \Gamma_{ij}^k \right) \quad (4.42)$$

O termo restante, relativo à derivada substantiva da pressão pode ser escrito na forma:

$$\beta T \frac{D}{Dt}(P) = \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla P \right) = \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u^n \frac{\partial P}{\partial \xi^n} \right) \quad (4.43)$$

Reagrupando os termos obtém-se a forma final da equação da conservação da energia térmica:

$$c_p \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i T) \right) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^r} \left(J k g^{rs} \frac{\partial}{\partial \xi^s} T \right) + \Phi \quad (4.44)$$

Em que Φ designa o termo fonte desta equação, na forma:

$$\Phi = - \tau^{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \xi^j} (u_i) - u_k \Gamma_{ij}^k \right) + \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u^n \frac{\partial P}{\partial \xi^n} \right) \quad (4.45)$$

Pode-se, no entanto, provar que este termo é significativo apenas para os escoamentos que ocorrem a altas velocidades [81].

Deve-se ressaltar que a formulação das equações da quantidade de movimento e da energia, bem como a expressão do tensor das tensões e do termo de dissipação viscosa apresentadas acima são inteiramente equivalentes às aquelas apresentadas no apêndice B. A única diferença reside no fato de que nessa última os sinais do tensor das tensões e dos termos das equações que o envolvem são invertidos, para simplificar a formulação do modelo.

Além disso, a utilização do postulado sobre a validade das identidades tensoriais generalizadas, apresentado no início deste capítulo e utilizado em toda a sua extensão, deu-se com a introdução das definições dos operadores diferenciais generalizados no espaço físico, representado pelo sistema cartesiano, onde estes operadores são igualmente válidos. Ocorre que os termos da métrica desses sistemas são tais que as equações apresentam-se exatamente na forma como as conhecemos.

Neste item faz-se uso do fato de que as propriedades termodinâmicas são funções escalares e, portanto, permanecem inalteradas durante a transformação.

5. Os Sistemas de Coordenadas Curvilíneas Ajustados às Fronteiras Físicas do Escoamento.

No item 2, foram apresentadas algumas das características básicas dos sistemas de coordenadas curvilíneas ajustados às fronteiras físicas do escoamento. Estas características, quando comparadas àquelas dos sistemas cartesianos, do ponto de vista das simulações numéricas, apresentam importantes vantagens. Especialmente no que se refere à precisão da representação das condições de contorno.

5.1 Fundamentação Teórica

No sistema de coordenadas cilíndrico bidimensional (figura 5.1) as coordenadas curvilíneas (r, θ) relacionam-se com aquelas do sistema cartesiano por meio das expressões:

$$x(r, \theta) = r \cos(\theta) \quad \text{e} \quad y(r, \theta) = r \sin(\theta) \quad (5.1)$$

E a relação inversa expressa-se por:

$$r(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (5.2)$$

$$\theta(x, y) = \arctan(y/x)$$

Em vista das relações acima, o caso em estudo pode ser considerado diretamente no espaço matemático transformado, descrito pelas coordenadas r e θ , conforme indica a figura (5.2). Sob esta óptica, as expressões (5.1) designam a transformação que leva do espaço transformado ao espaço físico, descrito pelas coordenadas cartesianas (x, y) , e as expressões (5.2) representam a transformação inversa. Isto equivale a dizer que estas últimas realizam o mapeamento da região de interesse do plano físico (x, y) no plano transformado (r, θ) , e as primeiras fazem o inverso.

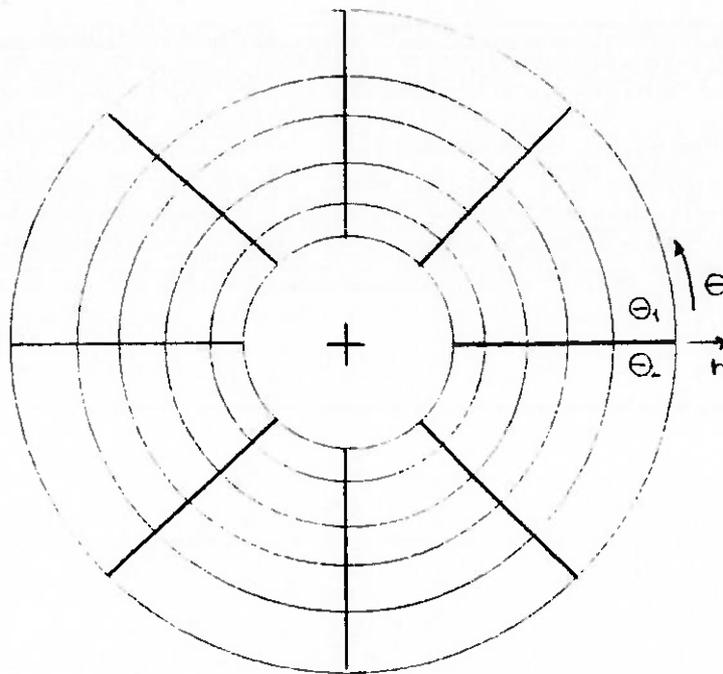


Figura 5.1 - Sistema de coordenadas cilíndrico bidimensional representando a região externa de um cilindro de comprimento infinito.

Deve-se ressaltar, no entanto, que a transformação definida pelas expressões (5.1) e (5.2) é inversível em todos os pontos dos planos físico e transformado, exceto na origem ($x = y = 0, r = 0$), que não pertence à região de interesse, uma vez que se encontra dentro do cilindro. Além disso, as linhas do espaço transformado em que θ assume os valores constantes ($\theta_1 = 0$) e ($\theta_2 = 2\pi$) representam no espaço físico uma mesma reta de direção radial, daí sua correspondência ser indicada na figura (5.2) por uma linha pontilhada.

A exposição das características básicas do sistema de coordenadas cilíndrico, realizada neste exemplo, ressalta a conveniência da utilização dos sistemas de coordenadas curvilíneos ajustados às fronteiras do escoamento. Entretanto a diversidade das possíveis aplicações desses sistemas sugere a necessidade de se generalizá-los para outras geometrias, a partir de suas características básicas, quais sejam: uma das coordenadas ser paralela ao contorno da fronteira física, variando monotonicamente sobre ela, enquanto a outra assume sobre essa fronteira um valor constante.

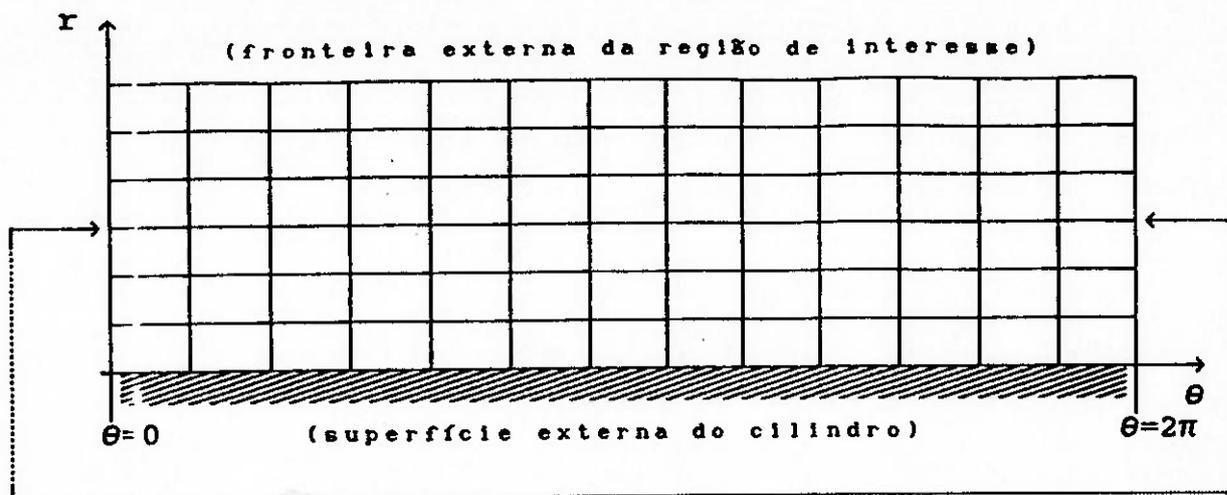


Figura 5.2 - Representação do espaço transformado descrito pelas coordenadas (r, θ) do sistema cilíndrico bidimensional

O primeiro passo para a generalização é a análise das transformações entre os sistemas de coordenadas. Estas devem definir, por meio de relações como aquelas apresentadas, o mapeamento da região de interesse do espaço físico, representado pelas coordenadas cartesianas (x, y) , no espaço matemático transformado, descrito pelas coordenadas curvilíneas (ξ, η) . Impõe-se também, que a correspondência entre os pontos destes espaços seja biunívoca. Para tanto é necessário que as funções de transformação sejam inversíveis dentro da referida região de interesse.

Isto implica que existam funções de transformação definidas em todos os pontos da região de interesse, que mapeiam o plano (x, y) no plano (ξ, η) , na forma:

$$\xi = \xi(x, y) \quad \text{e} \quad \eta = \eta(x, y) \quad (5.3)$$

E que existam suas funções inversas, definidas em toda a região de interesse no plano transformado (ξ, η) , mapeando-o no plano físico:

$$x = x(\xi, \eta) \quad \text{e} \quad y = y(\xi, \eta) \quad (5.4)$$

Para que a transformação de coordenadas seja inversível na região de interesse, seu jacobiano, na forma como é definido (eq. A.45), deve existir e não se anular em nenhum dos pontos dessa região [39].

$$J = \frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (5.5)$$

De fato, o Jacobiano representa geometricamente uma razão entre os elementos infinitesimais de área (ou volume, no caso 3-D) dos domínios físico e transformado [39]. Portanto, não se anulando na região de interesse, previne que um elemento de área (ou volume, no caso 3-D) do domínio físico seja mapeado em um ponto no domínio transformado, e vice-versa.

Como conseqüências diretas da não nulidade do jacobiano da transformação, tem-se:

As linhas de coordenada constante de mesma espécie (ξ ou η) devem ser paralelas entre si.

Que duas linhas de coordenada constante quaisquer, de espécies diferentes (ξ e η) não podem apresentar pontos de tangência, nem se interceptar em mais do que um único ponto.

As funções de transformação obedecem o teorema da função inversa, e suas derivadas de primeira ordem devem existir.

E, finalmente, as funções $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ não realizam extremos dentro do domínio considerado. Assumem valores máximos e mínimos relativos apenas em sua borda, posto que devem ser monotônicas ou constantes sobre estas.

Vale lembrar que, quanto ao exemplo anterior, o jacobiano da transformação para o sistema de coordenadas cilíndrico vale $J=r$, de forma que só se anula na origem desse sistema, ponto onde, conforme mencionado, a transformação não é inversível.

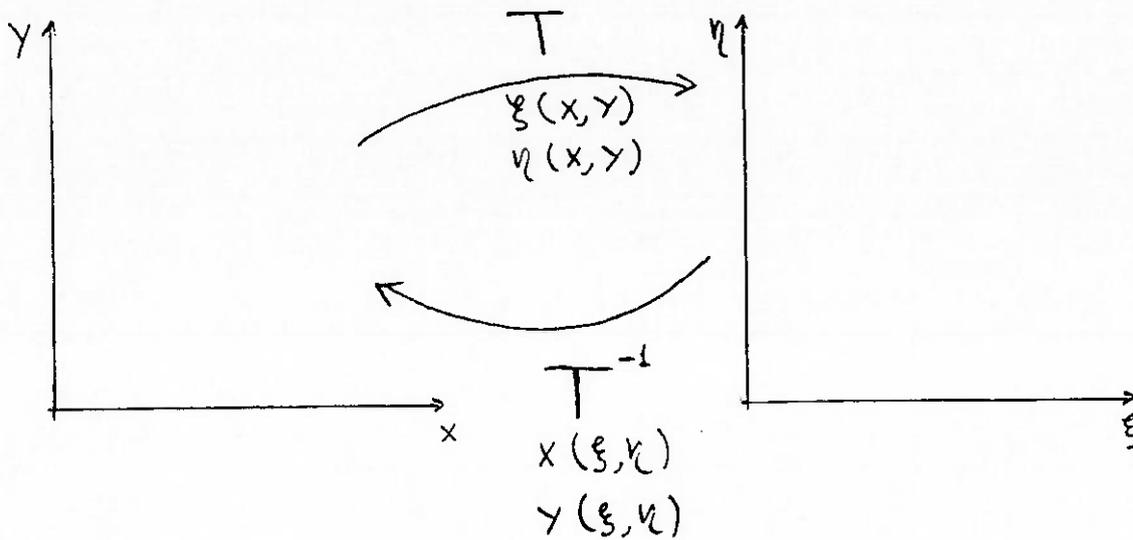


Figura 5.3 - Representação esquemática dos espaços físico e transformado (bidimensionais), e de uma transformação inversível entre eles.

Reunidas estas características básicas, os sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento devem possuir as propriedades enumeradas nos itens anteriores, que os tornam convenientes aos propósitos da simulação numérica. Para esta finalidade, entretanto, é adequado que o mapeamento da região de interesse resulte, no plano transformado, em um retângulo, como indicado na figura (5.2). Para tanto, é necessário analisar com cuidado a disposição física das fronteiras da região de interesse, quanto ao aspecto da conectividade, de fundamental importância para a sua representação naquele plano.

Com esta finalidade, consideram-se inicialmente os espaços físicos simplesmente conexos. São analisados posteriormente os domínios duplamente conexos, como é o caso do exemplo acima, e os que são multiplamente conexos¹.

Os espaços físicos simplesmente conexos ocorrem no estudo

¹ A análise segue o método desenvolvido por Thompson [77], sendo restrita às configurações geométricas consideradas neste trabalho.

do escoamento através de passagens, como o caso representado na figura (5.4). No espaço matemático transformado (figura 5.5), as fronteiras físicas das seções de entrada e saída γ_1 e γ_3 são mapeadas sobre as linhas Γ_1 e Γ_3 , respectivamente.

$$\begin{cases} \gamma_1(x,y) \rightarrow \Gamma_1(\eta) \\ \gamma_3(x,y) \rightarrow \Gamma_3(\eta) \end{cases} \left| \begin{array}{l} \xi_{(1)} = \text{constante} \\ \xi_{(3)} = \text{constante} \end{array} \right. \quad (5.6)$$

E as fronteiras físicas que correspondem à superfície da passagem, γ_2 e γ_4 , são representadas no espaço transformado pelas linhas de η constante Γ_2 e Γ_4 , respectivamente.

$$\begin{cases} \gamma_2(x,y) \rightarrow \Gamma_2(\xi) \\ \gamma_4(x,y) \rightarrow \Gamma_4(\xi) \end{cases} \left| \begin{array}{l} \eta_{(2)} = \text{constante} \\ \eta_{(4)} = \text{constante} \end{array} \right. \quad (5.7)$$

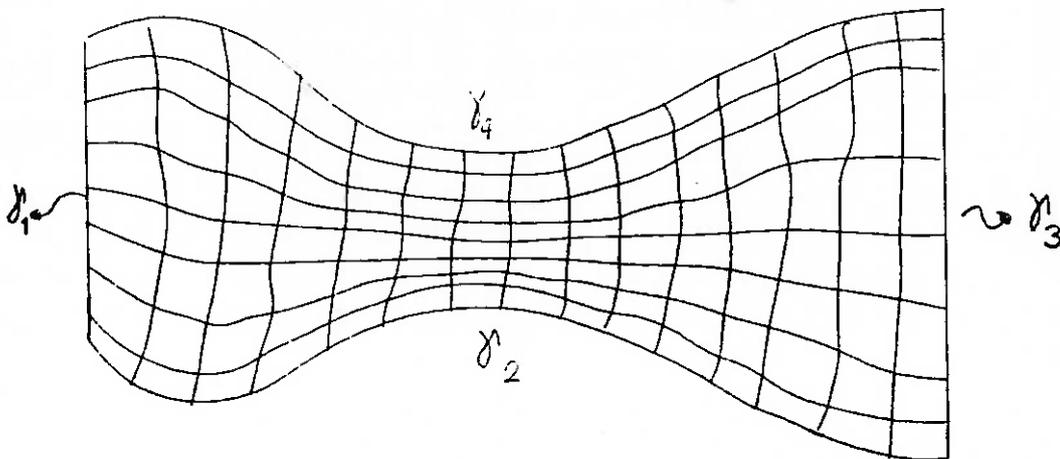


Figura 5.4 - Representação da passagem bidimensional no espaço físico.

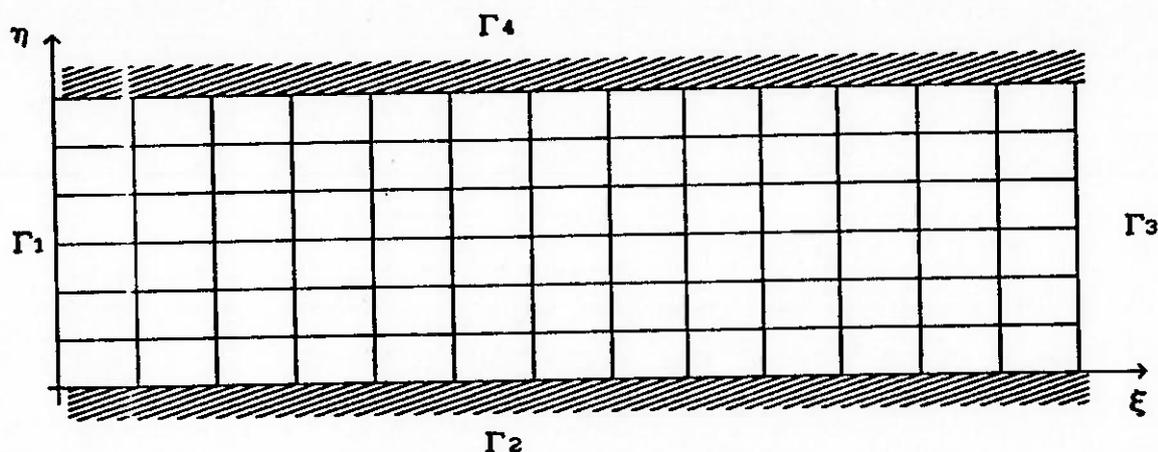


Figura 5.5 - Representação da passagem apresentada na figura 5.4, no espaço matemático transformado.

Para que a transformação entre os espaços físico e transformado corresponda às condições estabelecidas anteriormente, impõe-se que as coordenadas curvilíneas (ξ, η) apresentem variações monotônicas sobre as fronteiras opostas (η sobre Γ_1 e Γ_3 e ξ sobre Γ_2 e Γ_4). Também é necessário que o façam em uma mesma faixa de valores e a uma mesma taxa de variação sobre as fronteiras opostas, [75]. Assim pode-se garantir que, sobre as coordenadas curvilíneas no espaço físico, se um ponto percorrer uma das fronteiras por uma vez, mantendo o sentido de deslocamento; um outro ponto, correspondente ao primeiro, deslocando-se sobre a fronteira oposta, deve realizar um percurso semelhante, sendo que ambos mantem sempre valores iguais para a coordenada que varia sobre essas fronteiras. Com isto previne-se a ocorrência de pontos de intersecção entre linhas de coordenada constante de mesma espécie.

Os espaços físicos duplamente conexos aparecem no estudo do escoamento em torno de um corpo, como no exemplo citado no início desta seção. Isto ocorre devido à presença deste corpo, cujo interior não pertence à região de interesse, mas está imerso nela. Nestes casos, pode-se fazer com que o domínio físico passe a ser simplesmente conexo traçando sobre ele uma linha de corte, que ligue seu contorno externo, eventualmente impróprio, ao contorno

físico do referido corpo (figura 5.6).

As linhas de corte têm este nome porque, embora representem no domínio físico uma única linha, no espaço transformado passam a representar duas linhas distintas. Em verdade, as linhas de corte podem representar a passagem entre duas folhas distintas de uma superfície de Riemann. Este não é, entretanto, o caso presente, uma vez que a solução das equações do modelo matemático exige que se preservem os valores, a continuidade e a diferenciabilidade das funções e das coordenadas curvilíneas, através da linha de corte. Dessa forma, impõe-se que, ao atravessá-la, continue-se na mesma folha.

Um dos problemas típicos que devem ser considerados, refere-se ao estudo do escoamento em torno de um corpo imerso em um meio fluido infinito. Para este tipo de problema pode-se, ao menos em princípio, realizar uma transformação conforme (caso 2-D) que mapeie o meio infinito em uma região de dimensões finitas em um plano complexo, para posteriormente realizar a transformação deste último, no plano transformado de coordenadas (ξ, η) , onde o escoamento será simulado².

Uma outra possibilidade consiste em simplesmente tomar uma área do plano físico, que possa incluir o corpo e uma parte da região não perturbada por sua presença (figura 5.6). Esta última metodologia é adotada neste trabalho.

²Ryskin e Leal [66] e Thompson et al. [77] referem-se a esta técnica. Esses lhe fazem restrições, por produzir malhas de espaçamento muito grande longe do corpo.

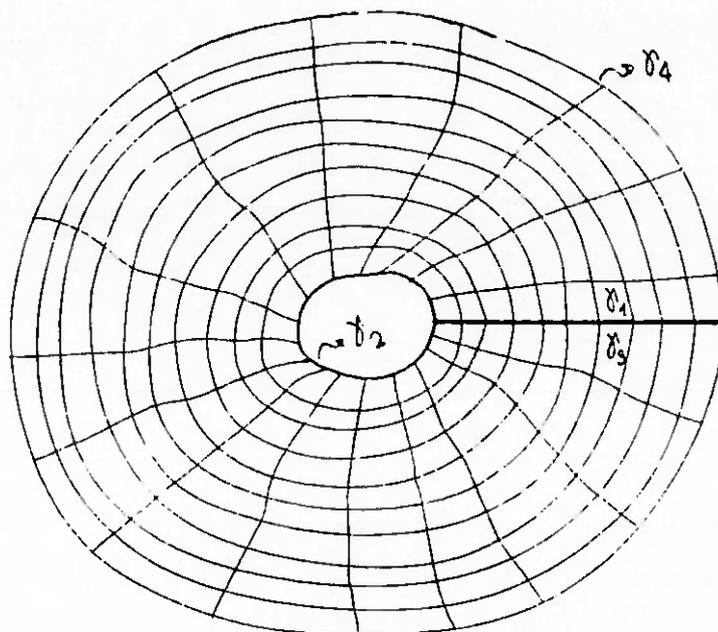


Figura 5.6 - Representação de um corpo de comprimento infinito, no espaço físico.

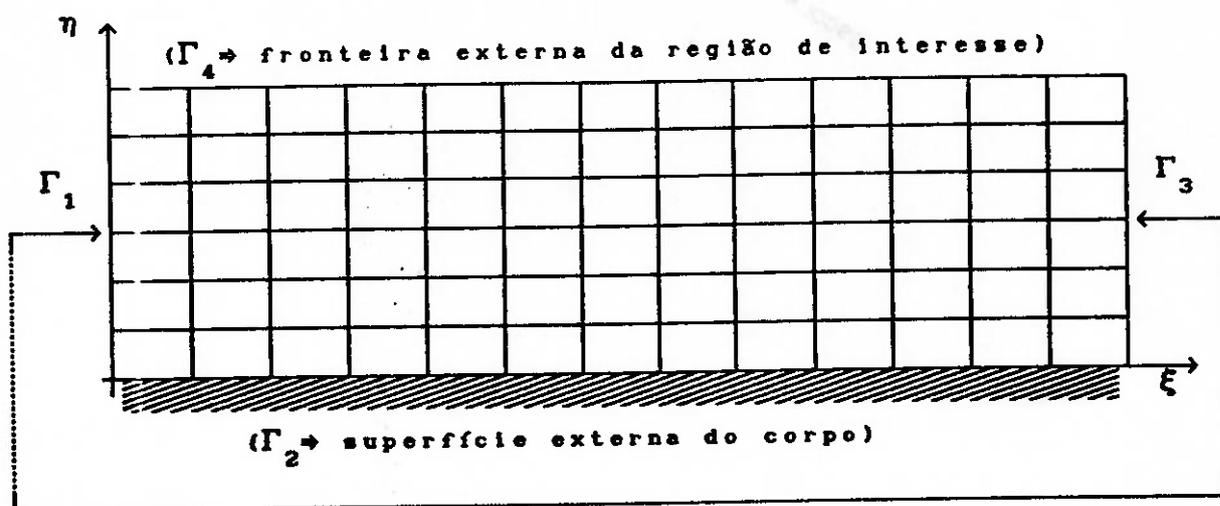


Figura 5.7 - Representação, no espaço transformado, do sistema de coordenadas ajustado ao contorno de um corpo.

A figura (5.7) representa, no espaço transformado, o sistema de coordenadas curvilíneo ajustado às fronteiras do corpo mostrado na figura (5.6). Como se pode observar, no plano (ξ, η) as fronteiras γ_2 e γ_4 , correspondentes à superfície externa do corpo

e ao contorno da fronteira externa da região de interesse, respectivamente, são mapeadas sobre as linhas de coordenada constante Γ_2 e Γ_4 .

$$\begin{cases} \gamma_2(x,y) \rightarrow \Gamma_2(\xi) \\ \gamma_4(x,y) \rightarrow \Gamma_4(\xi) \end{cases} \left| \begin{array}{l} \eta_{(2)} = \text{constante} \\ \eta_{(4)} = \text{constante} \end{array} \right. \quad (5.8)$$

Por outro lado, as linhas γ_1 e γ_3 que representam no espaço físico a linha de corte, sendo por isso coincidentes; são mapeadas no plano transformado por duas linhas distintas Γ_1 e Γ_3 , respectivamente. No entanto, para preservar a continuidade e a diferenciabilidade das funções e das coordenadas curvilíneas sobre estas linhas, conforme mencionado, impõe-se que os valores e as derivadas destas sejam idênticos sobre as referidas linhas. Na figura (5.7), a linha tracejada mostra esta correspondência.

$$\gamma_1(x,y) = \gamma_3(x,y) \quad (5.9)$$

$$\begin{cases} \gamma_1(x,y) \rightarrow \Gamma_1(\eta) \\ \gamma_3(x,y) \rightarrow \Gamma_3(\eta) \end{cases} \left| \begin{array}{l} \xi_{(1)} = \text{constante} \\ \xi_{(3)} = \text{constante} \end{array} \right. \quad (5.10)$$

De resto, preservam-se as características dos mapeamentos realizados sobre os domínios simplesmente conexos, já analisados. Pela forma que possui no espaço físico, este tipo de sistema de coordenadas curvilíneo recebe a denominação genérica de sistema "O". O sistema cilíndrico, empregado no exemplo do início desta seção, pertence a esta categoria.

Outra possibilidade, conhecida como sistema "C", difere da primeira pela maneira como se representa a linha de corte. Preservando, da mesma forma, as demais características dos mapeamentos considerados anteriormente. As figuras (5.8) e (5.9) representam o referido sistema de coordenadas no espaço físico e no espaço transformado, respectivamente.

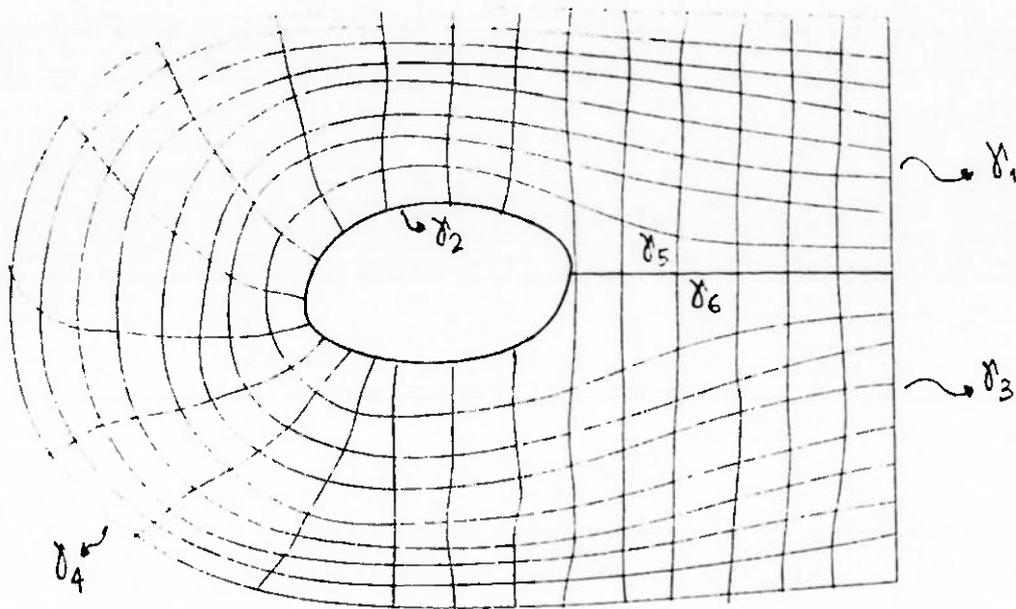


Figura 5.8 - Representação de um corpo de comprimento infinito, no espaço físico. Sistema do tipo "C".

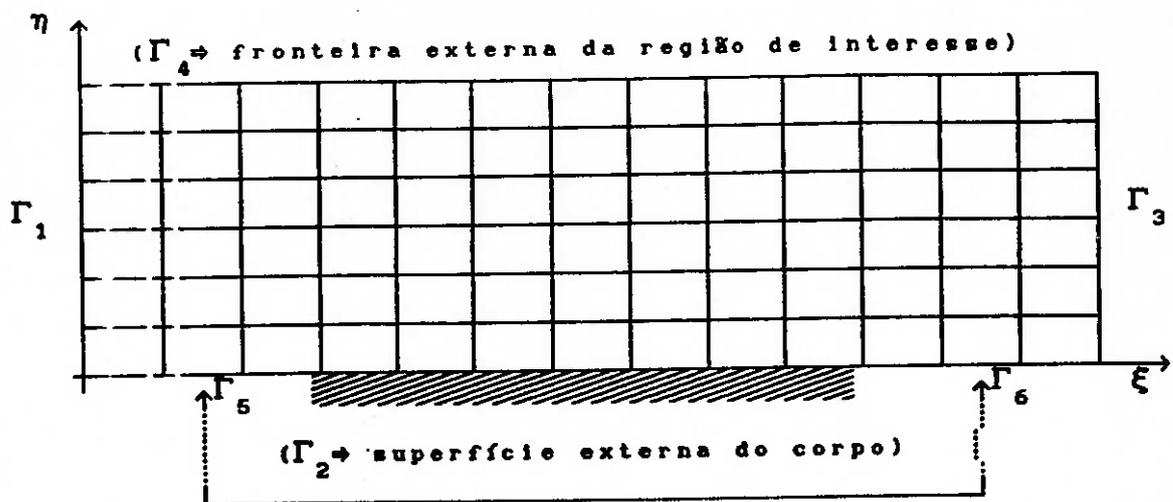


Figura 5.9 - Representação, no espaço transformado, do sistema de coordenadas do tipo "C", ajustado ao contorno de um corpo.

Nos sistemas deste tipo, a linha de corte no plano físico corresponde às linhas coincidentes γ_5 e γ_6 (figura 5.8). No plano transformado, seu mapeamento ocorre sobre dois trechos distintos

da mesma linha de $\eta = \eta_2$ constante que suporta Γ_2 , correspondentes à Γ_5 e Γ_6 , respectivamente (figura 5.9). As demais fronteiras transformam-se de forma semelhante àquela dos domínios simplesmente conexos. Assim:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_1(x, y) \rightarrow \Gamma_1(\eta) \Big|_{\xi_{(1)} = \text{constante}} \\ \gamma_3(x, y) \rightarrow \Gamma_3(\eta) \Big|_{\xi_{(3)} = \text{constante}} \\ \gamma_4(x, y) \rightarrow \Gamma_4(\xi) \Big|_{\eta_{(4)} = \text{constante}} \end{array} \right. \quad (7.11)$$

$$\gamma_5(x, y) \equiv \gamma_6(x, y) \quad (5.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_\xi(x, y) \rightarrow \Gamma_5(\xi,) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \\ \gamma_2(x, y) \rightarrow \Gamma_2(\xi,) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \\ \gamma_6(x, y) \rightarrow \Gamma_6(\xi,) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \end{array} \right. \quad (7.13)$$

Os espaços físicos multiplamente conexos aparecem no estudo do escoamento em torno de um conjunto de corpos, são por isso uma extensão natural do problema duplamente conexo, considerado acima. O que os diferencia é justamente a presença de mais de um corpo imerso na região de interesse. Neste caso, para que o domínio físico passe a ser simplesmente conexo, é preciso que se tracem sobre ele várias linhas de corte unindo os contornos destes corpos e, finalmente, uma linha de corte ligando o último deles ao contorno externo da região de interesse. Desta forma, considerado um conjunto de N corpos imerso em um meio fluido infinito, deve-se obter $(N-1)$ linhas de corte ligando-os entre si, e 1 linha de corte ligando o conjunto à fronteira externa do domínio de interesse. As figuras (5.10) e (5.11) mostram o domínio físico e o transformado, respectivamente, para o estudo do escoamento em torno de dois corpos em um meio fluido infinito.

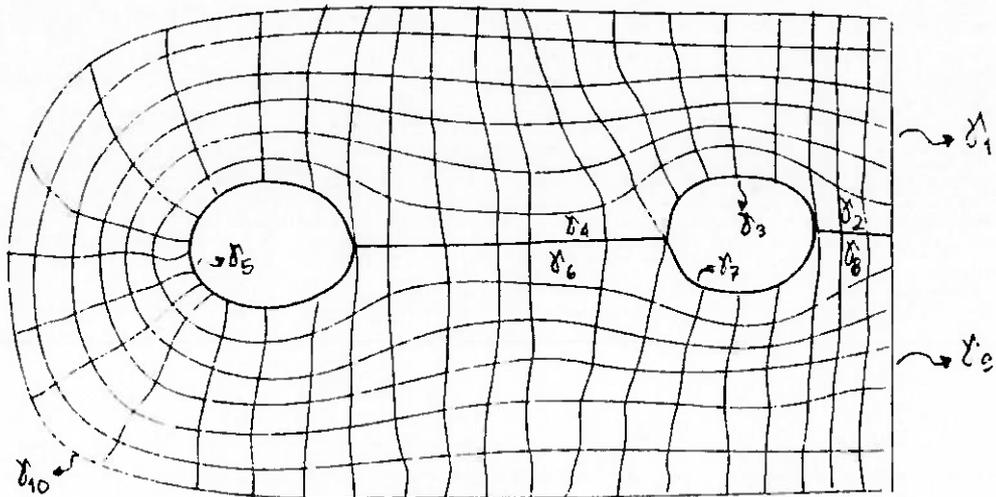


Figura 5.10- Representação de dois corpos de comprimento infinito, no espaço físico. Sistema do tipo "C".

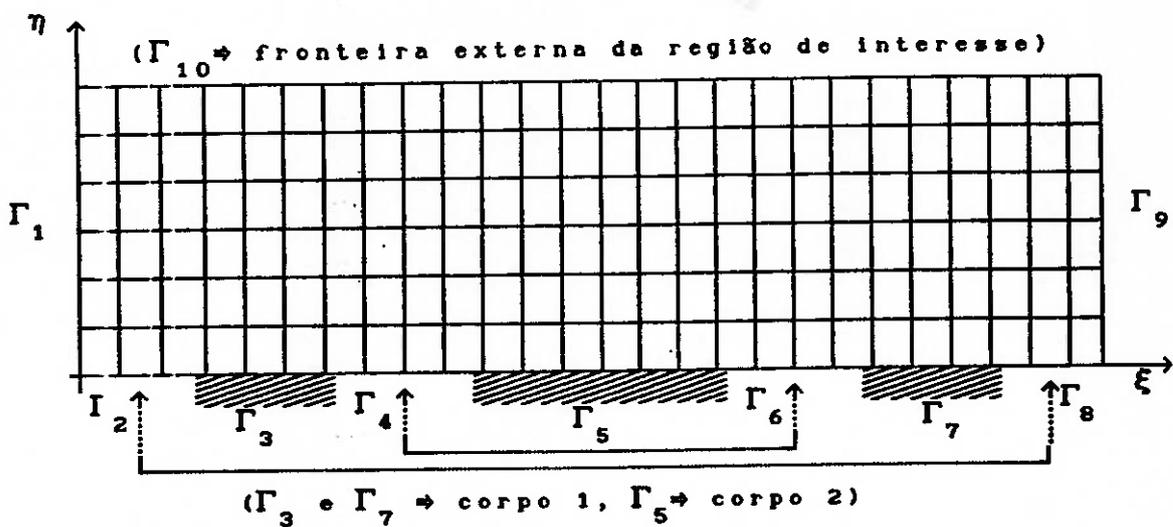


Figura 5.11- Representação, no espaço transformado, do sistema de coordenadas do tipo "C", ajustado ao contorno de dois corpos..

O sistema de coordenadas representado nas figuras acima é do tipo "C", de modo análogo, pode-se contruir um sistema do tipo "O".

Nos sistemas deste tipo, as linhas de corte no plano físico correspondem às linhas $(\gamma_2 \text{ e } \gamma_8)$ e $(\gamma_4 \text{ e } \gamma_6)$, coincidentes duas a duas, (figura 5.10). No plano transformado, seu mapeamento ocorre sobre trechos distintos da mesma linha de $\eta = \eta_2$ constante que suporta os contornos dos corpos. Correspondem a Γ_2 , Γ_8 , Γ_4 e Γ_6 , respectivamente (figura 5.11). As demais fronteiras transformam-se de forma semelhante àquela dos domínios simplesmente conexos.

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_1(x,y) \rightarrow \Gamma_1(\eta) \Big|_{\xi_{(1)} = \text{constante}} \\ \gamma_9(x,y) \rightarrow \Gamma_9(\eta) \Big|_{\xi_{(9)} = \text{constante}} \\ \gamma_{10}(x,y) \rightarrow \Gamma_{10}(\xi) \Big|_{\eta_{(10)} = \text{constante}} \end{array} \right. \quad (5.14)$$

$$\gamma_2(x,y) \equiv \gamma_8(x,y) \quad \text{e} \quad \gamma_4(x,y) \equiv \gamma_6(x,y) \quad (5.15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_2(x,y) \rightarrow \Gamma_2(\xi) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \\ \gamma_4(x,y) \rightarrow \Gamma_4(\xi) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \\ \gamma_6(x,y) \rightarrow \Gamma_6(\xi) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \\ \gamma_8(x,y) \rightarrow \Gamma_8(\xi) \Big|_{\eta_{(2)} = \text{constante}} \end{array} \right. \quad (5.16)$$

As diferentes configurações geométricas dos sistemas nos planos físico e transformado, enfocadas neste trabalho, foram apresentadas de forma genérica, segundo método de análise desenvolvido em Thompson et alii [77]. Nesta discussão procurou-se evidenciar as características básicas dos sistemas de coordenadas ajustados à geometria das fronteiras dos escoamento. Tais características devem ser apresentadas pelos sistemas empregados na simulação do escoamento, independentemente da forma como tenham sido gerados.

Por outro lado, os métodos para sua geração podem ser divididos genericamente em três classes principais ([77] e [54]), quais sejam: os que se baseiam em técnicas analíticas de transformação conforme, os que resultam da solução numérica de sistemas de equações diferenciais parciais (nisto se incluem os

que empregam princípios variacionais), e finalmente, aqueles que empregam técnicas de interpolação numérica, também conhecidos como algébricos.

Os métodos baseados na solução de equações diferenciais parciais podem ser do tipo elíptico, parabólico e hiperbólico. E as transformações conformes podem ser entendidas como pertencentes ao primeiro destes subgrupos, como será visto no próximo capítulo. Os métodos baseados em equações do tipo elíptico são, neste grupo, os mais adequados aos propósitos deste trabalho, uma vez que prevêm a prescrição de condições de contorno em toda a borda da região de interesse para a geração do sistema. Vale ressaltar o fato de que, devido a regularidade do espaço transformado, face à forma arbitrária da região física de interesse, todos os métodos consagrados pertencentes a este grupo realizam, em verdade, o mapeamento do domínio considerado no espaço transformado sobre a região de interesse do espaço físico. Esta é efetivamente uma das características mais importantes destes métodos.

Quanto aos métodos ditos algébricos, ao promoverem a geração da malha computacional por interpolações numéricas, eles não proporcionam, do ponto de vista conceitual, um mapeamento do espaço físico em um espaço matemático transformado, cuja métrica possua as características adequadas. Procuram, ao invés disso, obter tais características por meio de escolha adequada da família de polinômios, ou funções de interpolação.

Por esses motivos, e uma vez que se pretende contar com as propriedades do mapeamento, para determinar as características dos sistemas de coordenadas curvilíneas, os métodos baseados em equações diferenciais parciais elípticas são considerados mais adequados aos propósitos deste estudo. Nos parágrafos que se seguem é apresentado o estudo de alguns dos métodos consagrados para a geração dos sistemas de coordenadas curvilíneas ajustados às fronteiras do escoamento, que pertencem a esta classe.

6. Métodos para a Geração de Sistemas de Coordenadas

Em princípio, os sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento devem preencher as características apontadas no item anterior, para que sejam apropriados às simulações numéricas, uma vez que as equações do modelo foram escritas na forma generalizada. Há, no entanto, outra propriedade importante para esse fim, que consiste na ortogonalidade local do sistema.

Dessa forma, os sistemas, e portanto os métodos para sua geração, podem ser divididos em duas classes principais, quais sejam: os que produzem sistemas de coordenadas localmente ortogonais, e aqueles que geram sistemas não ortogonais. Embora apenas os primeiros sejam efetivamente utilizados nas aplicações ora desenvolvidas, constituem-se, em verdade, num caso particular desses últimos, que, por esse motivo, devem ser apresentados primeiramente. Além disso, os sistemas não ortogonais gerados por estes métodos podem, em última análise, revelar-se boas aproximações iniciais, sobre as quais se aplicam os métodos para sistemas ortogonais.

6.1 Métodos para a Geração de Sistemas de Coordenadas Não Ortogonais

Conforme mostra Thompson et al. [77], as funções que representam as coordenadas generalizadas no espaço físico não devem realizar extremos dentro da região de interesse, para que promovam um mapeamento biunívoco com as características adequadas. Por este motivo, os sistemas de equações diferenciais parciais empregados na obtenção dessas funções devem possuir um princípio de extremo que lhes garanta esta propriedade.

Alguns sistemas de equações diferenciais elípticas satisfazem esse princípio, e por isso podem ser utilizados para a geração dos sistemas de coordenadas. Além disso, uma propriedade importante dos operadores diferenciais elípticos consiste em seu caráter

uniformizador¹, que impede que descontinuidades angulares das fronteiras propaguem-se para dentro do domínio considerado, [77]. Estas características, aliadas ao fato de que as condições de contorno devem ser especificadas sobre toda a fronteira da região de interesse, tornam tais sistemas especialmente adequados a esta finalidade.

O sistema de equações diferenciais mais simples que pertence a esta classe e reúne as propriedades necessárias, é composto de duas equações de Laplace (caso bidimensional)². Dessa forma, as funções de transformação $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ seriam, no espaço físico, soluções de:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = 0 \\ \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 \end{cases} \quad (6.1)$$

Este sistema obedece a um princípio de extremo, que impede que suas soluções realizem máximos ou mínimos dentro da região de interesse, como provam Marion [47] e Protter and Weinberger [58]. Além disso, Thompson et al. [78] demonstram que, se as funções $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ forem harmônicas³, o jacobiano da transformação não se anula, o que garante sua inversibilidade e a correspondência biunívoca entre os pontos dos planos físico (x,y) e transformado (ξ,η) .

Na forma como foram apresentadas, estas equações devem ser resolvidas no espaço físico, com condições de contorno a valor prescrito (Dirichlet) que, para um domínio simplesmente conexo como apresentado na figura (7.4), corresponderiam a:

¹ Por 'caráter uniformizador' entenda-se a tendência a proporcionar soluções de variação suave.

² Este sistema foi proposto inicialmente por Winslow [84], constituindo-se posteriormente, na base do método desenvolvido por Thompson e seus colaboradores (Thompson et al. [79]).

³ Funções harmônicas são as que satisfazem a equação de Laplace.

$$\gamma_1 \rightarrow \begin{cases} \xi = \xi_{(1)} = \text{constante} \\ \eta = \eta_{(1)}(x, y) \end{cases} \quad (6.2)$$

$$\gamma_2 \rightarrow \begin{cases} \xi = \xi_{(2)}(x, y) \\ \eta = \eta_{(2)} = \text{constante} \end{cases} \quad (6.3)$$

$$\gamma_3 \rightarrow \begin{cases} \xi = \xi_{(3)} = \text{constante} \\ \eta = \eta_{(3)}(x, y) \end{cases} \quad (6.4)$$

$$\gamma_4 \rightarrow \begin{cases} \xi = \xi_{(4)}(x, y) \\ \eta = \eta_{(4)} = \text{constante} \end{cases} \quad (6.5)$$

Estas condições de contorno, dada a forma arbitrária das fronteiras, que se pode notar na figura (7.4), tornam necessárias interpolações, para avaliar $\xi(x, y)$ e $\eta(x, y)$ sobre elas. Por este motivo Winslow [84] propôs que, ao invés de se realizar o mapeamento do espaço físico no espaço matemático transformado, se fizesse o contrário, ou seja, o mapeamento deste último sobre o primeiro. Neste caso as funções que se procura obter são, na verdade, as inversas $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$, que levam do plano (ξ, η) ao plano (x, y) . As vantagens são, em princípio, óbvias, uma vez que, no espaço transformado as fronteiras sempre têm a mesma configuração, que corresponde a um retângulo, independente de que forma possam apresentar no espaço físico.

Para que isso seja possível, entretanto, é necessário que nas equações do sistema (6.1), as variáveis dependentes passem a ser x e y , e as independentes sejam ξ e η . Então, para escrevê-las no espaço transformado, aplica-se reiteradamente o teorema da função inversa (Kaplan [39])⁴, sobre as referidas equações, obtendo-se

⁴Estas passagens são indicadas em Winslow [84].

como resultado, o sistema de equações elípticas quasi-lineares:

$$\begin{cases} g_{22} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} = 0 \\ g_{22} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \end{cases} \quad (6.6)$$

Once os componentes covariantes do tensor métrico são determinados (considerando a simetria deste tensor) por:

$$\begin{cases} g_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \\ g_{12} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ g_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \end{cases} \quad (6.7)$$

Como estas equações são resolvidas no espaço transformado, as condições de contorno assumem sua forma mais simples, correspondendo a valores das funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ prescritos sobre as bordas do retângulo em que se constitui o domínio do mapeamento.

$$\Gamma_1 \Rightarrow \begin{cases} x = x(\xi_{(1)}, \eta) \\ y = y(\xi_{(1)}, \eta) \end{cases} \quad (6.8)$$

$$\Gamma_2 \Rightarrow \begin{cases} x = x(\xi, \eta_{(2)}) \\ y = y(\xi, \eta_{(2)}) \end{cases} \quad (6.9)$$

$$\Gamma_3 \Rightarrow \begin{cases} x = x(\xi_{(3)}, \eta) \\ y = y(\xi_{(3)}, \eta) \end{cases} \quad (6.10)$$

$$\Gamma_4 \Rightarrow \begin{cases} x = x(\xi, \eta_{(4)}) \\ y = y(\xi, \eta_{(4)}) \end{cases} \quad (6.11)$$

Vale ressaltar que, embora o sistema de equações escrito no plano transformado resulte mais complicado que sua forma no plano físico, sua solução não oferece maiores problemas, uma vez que se utiliza um método numérico. Por outro lado, as condições de contorno adquirem forma simplificada e, por essa razão, dispensam o uso de interpolações, o que contribui decisivamente para a precisão da solução numérica.

Nos casos em que existem linhas de corte no espaço físico, deve-se impor a continuidade e a diferenciabilidade⁵ das funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre os trechos que mapeiam essa linha no espaço transformado. Isso equivale, do ponto de vista teórico, à prescrição de condições de contorno periódicas sobre tais linhas e implica que seus pontos obedeçam às mesmas equações que os pontos do interior do domínio. De resto a correspondência entre seus trechos impõe sobre eles:

$$\begin{cases} x(\xi, \eta)_{LC1} = x(\xi, \eta)_{LC2} \\ y(\xi, \eta)_{LC1} = y(\xi, \eta)_{LC2} \\ \left. \frac{\partial x}{\partial \xi} \right|_{LC1} = \left. \frac{\partial x}{\partial \xi} \right|_{LC2} \\ \left. \frac{\partial x}{\partial \eta} \right|_{LC1} = \left. \frac{\partial x}{\partial \eta} \right|_{LC2} \end{cases} \quad (6.12)$$

Onde (LC1) e (LC2) correspondem aos dois trechos que mapeiam a linha de corte do domínio duplamente conexo, no espaço transformado, segundo a forma indicada no item 5, para os casos "O" e "C".

Por outro lado, deve-se observar [51] que a definição de equações análogas a (6.1), diretamente no plano transformado, como fazem Barfield [9] e Amdsen e Hirt [4]:

⁵ Esta diferenciabilidade é considerada para as derivadas de primeira e segunda ordens.

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + a \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} = 0 \\ \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + a \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \end{cases} \quad (6.13)$$

Com (a) constante, leva, por meio da inversão de variáveis dependentes e independentes, a equações não lineares no espaço físico:

$$\begin{cases} \bar{g}_{22} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - 2\bar{g}_{12} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x \partial y} + \bar{g}_{11} \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = 0 \\ \bar{g}_{22} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - 2\bar{g}_{12} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y} + \bar{g}_{11} \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 \end{cases} \quad (6.14)$$

$$\begin{cases} \bar{g}_{22} = a \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \\ \bar{g}_{12} = a \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial y} \\ \bar{g}_{11} = a \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \end{cases} \quad (6.15)$$

Que não obedecem a um princípio de máximo no plano físico, onde seria, de fato, necessário (Thompson et al. [78]). Portanto permitindo a ocorrência de pontos degenerados na transformação.

Cake a esta altura, uma comparação entre o método de mapeamento ora apresentado e o mapeamento conforme, que de certa forma, pode ser considerado um caso particular do primeiro.

Considerando que o mapeamento conforme se faz por funções analíticas, tem-se que $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ devem obedecer às condições Cauchy-Riemann:

$$\begin{cases} \frac{\partial \xi}{\partial x} = + \frac{\partial \eta}{\partial y} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} = - \frac{\partial \eta}{\partial x} \end{cases} \quad (6.16)$$

Derivando estas identidades, a primeira por x e a segunda por y , uma vez que $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ devem ser continuamente diferenciáveis (Churchill et al. [19]), e portanto a ordem de diferenciação não importa no cálculo de suas derivadas mistas, obtém-se que:

$$\begin{cases} \frac{\xi^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = 0 \\ \frac{\xi^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 \end{cases} \quad (6.17)$$

Que implica que as funções analíticas são harmônicas conjugadas. De um lado, o jacobiano da transformação é sempre positivo, pois seu inverso corresponde a:

$$J^{-1} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \quad (6.18)$$

Por outro, os elementos do tensor métrico são determinados invertendo-se as variáveis das relações (6.17)⁶ e empregando os resultados nas expressões (6.7):

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{J} \right) \frac{\partial y}{\partial \eta} = + \left(\frac{1}{J} \right) \frac{\partial x}{\partial \xi} \\ \left(\frac{-1}{J} \right) \frac{\partial x}{\partial \eta} = - \left(\frac{-1}{J} \right) \frac{\partial y}{\partial \xi} \end{cases} \quad (6.19)$$

$$g_{11} = g_{22} = 1 \quad \text{e} \quad g_{21} = g_{12} = 0 \quad (6.20)$$

E estas condições (6.20) são extremamente restritivas para os propósitos de mapeamento, como será visto adiante.

⁶Utiliza-se o teorema da função inversa.

6.2 O Controle do Espaçamento da Sistema de Coordenadas

Dos princípios da Dinâmica dos Fluidos e Fenômenos de Transporte, tem-se que as camadas limites térmica e hidrodinâmica acomodar gradientes mais altos de velocidade e temperatura, respectivamente. Além disso, nos escoamentos que envolvem fronteiras de curvatura acentuada, também se manifestam variações maiores das grandezas físicas. Nas simulações numéricas destes problemas, é de se esperar que seja necessária uma malha computacional mais refinada e com um espaçamento menor. Se, no entanto, esta malha for estendida a todo o domínio do escoamento, envolvendo também uma região onde os gradientes são menores, e que não necessita de refinamento, incorre-se, de certa forma, em desperdício de memória e de esforço computacionais.

Para enfrentar estas situações, Thompson e seus colaboradores [79] desenvolveram uma metodologia que permite o controle do espaçamento do sistema de coordenadas gerado em regiões especificadas. Assim pode-se proporcionar um espaçamento menor para as regiões em que se desenvolvem as camadas limites, e aquelas de curvatura acentuada, conservando o espaçamento mais grosseiro para as demais regiões do domínio.

No entanto, deve ficar claro que os mesmos autores, em trabalho posterior [77], recomendam cuidado para com as variações intensas do espaçamento do sistema gerado dentro da região de interesse, especialmente sobre os locais em que a variação das grandezas do escoamento é intensa. Isto se deve ao comprometimento da solução numérica que daí resultaria.

A metodologia proposta baseia-se no acréscimo de termos não homogêneos às equações de Laplace (6.1), transformando-as em equações de Poisson.

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = P(\xi, \eta) \\ \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = Q(\xi, \eta) \end{cases} \quad (6.21)$$

Procedendo-se de forma análoga, no sentido de inverter as variáveis dependentes e independentes deste sistema, obtém-se, no

espaço transformado:

$$\begin{cases} g_{22} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + J^2 \left(P \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0 \\ g_{22} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2g_{12} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + g_{11} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + J^2 \left(P \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0 \end{cases} \quad (6.22)$$

Onde os componentes contravariantes do tensor métrico determinam-se, da mesma maneira, pelas expressões (6.7).

O efeito da introdução dos termos não homogêneos $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$ sobre os sistemas de coordenadas é analisado detalhadamente por Thompson et al. [77], considerando as propriedades dos operadores elípticos⁷, no sentido de preservar a correspondência biunívoca entre os pontos dos espaços físico e transformado, e portanto a inversibilidade da transformação.

Nessas condições, se os termos não homogêneos são ambos nulos ($P = Q = 0$), então recai-se no caso anterior, onde as funções $\xi(x, y)$ e $\eta(x, y)$ são harmônicas. Vale notar [77] que, ainda neste caso, existe uma tendência natural a que as linhas de coordenada constante sejam atraídas por fronteiras convexas e repelidas por fronteiras concavas às quais sejam paralelas. Tal fato tem conseqüências importantes sobre os sistemas gerados em domínios físicos multiplamente conexos, onde fronteiras convexas aparecem com freqüência nos corpos.

⁷ Pode-se citar Protter and Weinberger [58] como referência sobre este tópico.

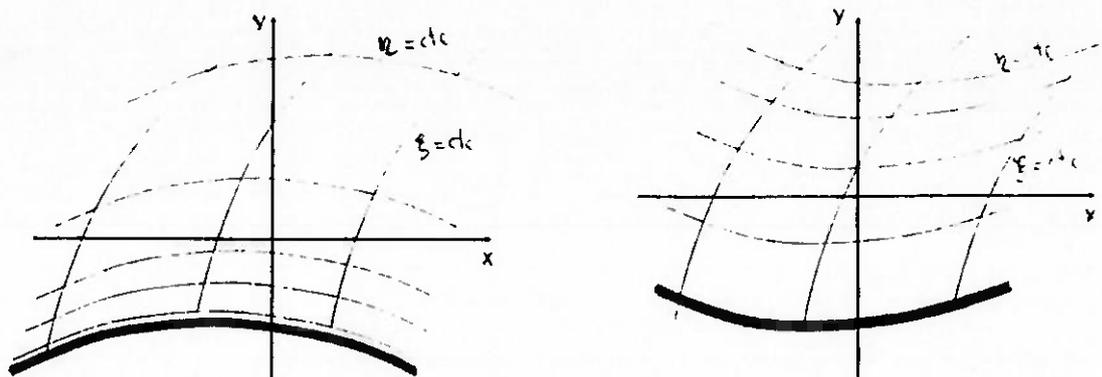


Figura 6.1 - Representação de trechos de fronteiras físicas convexas e concavos, respectivamente, e seus efeitos sobre a distribuição das linhas de coordenada constante.

Esta tendência explica-se pela imposição, no plano físico, de $\nabla^2 \xi = \nabla^2 \eta = 0$. Assim, se a fronteira é convexa, tem-se $\eta_{xx} > 0$, e portanto $\eta_{yy} < 0$, logo, η_y e o espaçamento entre as linhas de η constante devem crescer com y . Para as fronteiras de curvatura concava, $\eta_{xx} < 0$ e inverso é válido (figura 6.1).

Por outro lado, valores positivos das funções P e Q fazem com que $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$, soluções do sistema (6.21), sejam funções sub-harmônicas no domínio físico, e dessa forma as linhas de coordenada ξ constante tendem a mover-se na direção de ξ crescente, de modo análogo, as linhas de η constante devem mover-se na direção de η crescente. Para valores negativos dessas funções, $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ são super-harmônicas e a tendência é oposta, implicando numa aproximação das linhas de ξ e η constantes na direção decrescente das coordenadas ξ e η , respectivamente.

Uma analogia física às equações (6.21) é possível [51], considerando na teoria do eletromagnetismo a equação que relaciona o potencial elétrico ϕ a uma função distribuição de cargas ρ , ($\nabla^2 \phi = -4\pi\rho$). Nesta, quando ρ assume valores negativos próximo da região de $\phi(\text{mínimo})$, ocorre concentração das linhas equipotenciais nesta região. Tem-se, portanto, que ϕ e ρ

desempenham papéis análogos a ξ e P , ou a η e Q , respectivamente. Outra analogia física possível, diz respeito ao escoamento potencial na presença de fontes ou sorvedouros.

Estas tendências introduzidas pelas funções $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$, manifestam-se com relação aos pontos das fronteiras, de duas formas, dependendo da maneira como se prescrevem as condições de contorno no espaço transformado. Para valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ prescritos, os pontos correspondentes da fronteira do espaço físico são fixos, não se exercendo sobre eles os efeitos dos termos não homogêneos⁸. Podem, entretanto, ser prescritos os ângulos de intersecção das linhas de coordenada constante com as referidas fronteiras e, nesse caso, seus pontos não tem posição fixa, ajustando-se às condições de contorno a derivada prescrita.

Para controle efetivo do espaçamento do sistema de coordenadas gerado, Thompson et al. [79] empregando as propriedades dos operadores elípticos apresentadas acima, propõe que as funções $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$ sejam tomadas na forma:

$$\begin{aligned}
 P(\xi, \eta) = & - \sum_{i=1}^n a_{(i)} \operatorname{sgn}(\xi - \xi_{(i)}) \exp(-c_{(i)} |\xi - \xi_{(i)}|) - \\
 & - \sum_{j=1}^n b_{(j)} \operatorname{sgn}(\xi - \xi_{(j)}) \exp\left(-d_{(j)} \sqrt{(\xi - \xi_{(j)})^2 + (\eta - \eta_{(j)})^2}\right)
 \end{aligned}
 \tag{6.23}$$

$$\begin{aligned}
 Q(\xi, \eta) = & - \sum_{i=1}^n p_{(i)} \operatorname{sgn}(\eta - \eta_{(i)}) \exp(-r_{(i)} |\eta - \eta_{(i)}|) - \\
 & - \sum_{j=1}^n q_{(j)} \operatorname{sgn}(\eta - \eta_{(j)}) \exp\left(-s_{(j)} \sqrt{(\xi - \xi_{(j)})^2 + (\eta - \eta_{(j)})^2}\right)
 \end{aligned}
 \tag{6.24}$$

Estas funções permitem que os efeitos de atração ou repulsão de linhas de coordenada constante ocorram com relação a outras

⁸ Com isso cria-se uma região do sistema que não pode ser utilizada na simulação numérica do escoamento.

linhas de coordenada constante de mesma espécie (primeiro termo), ou a pontos (segundo termo). Os índices subscritos entre parênteses indicam precisamente as coordenadas (ξ, η) destes pontos ou linhas, que são especificados a priori.

Os coeficientes $a_{(i)}$, $b_{(j)}$, $p_{(i)}$ e $q_{(j)}$ são amplitudes constantes dos termos de P e Q que, se positivos, determinam os efeitos de atração e, se negativos, invertem tais efeitos. Os coeficientes $c_{(i)}$, $d_{(j)}$, $r_{(i)}$ e $s_{(j)}$ são fatores de decaimento das exponenciais, constantes positivas. A função sinal $\text{sgn}(\xi)$ assume os valores -1, para $\xi < \xi_{(i)}$, 0 para $\xi = \xi_{(i)}$, ou +1 para $\xi > \xi_{(i)}$, permitindo que os efeitos de atração ocorram de ambos os lados da linha ou ponto especificados. Sua ausência faz com que a atração ocorra apenas do lado de ξ crescente, provocando repulsão no outro.

Por se tratarem de somatórias de funções exponenciais, seus efeitos sobre o sistema decaem com a distância das linhas de coordenada constante às linhas ou pontos de atração. No primeiro caso esta distância é tomada com relação a uma mesma coordenada apenas⁹ e provoca a atração de linhas de coordenada constante inteiras. No segundo refere-se sempre a ambas as coordenadas e a atração se dá apenas sobre porções dessas linhas.

⁹ ξ para linhas de ξ constante, ou η para linhas de η constante.

7. Métodos para a Geração dos Sistemas de Coordenadas Localmente Ortogonais

Os sistemas de coordenadas localmente ortogonais são os mais adequados aos propósitos da simulação numérica do escoamento. E são duas as razões básicas que os trazem a esta condição: a simplificação algébrica das equações do modelo matemático, cujos motivos apresentam-se adiante, e o fato apontado por Thompson et al. [77], de que a ausência da ortogonalidade local tem o efeito de ampliar os erros decorrentes da solução numérica das equações. No primeiro caso, a razão tem natureza estritamente teórica, sendo portanto abrangente. A segunda razão é de natureza essencialmente numérica e, dessa forma, a condição de ortogonalidade local deve ser entendida como uma propriedade da malha computacional¹ que é alcançada dentro do nível de precisão em que se resolveram as equações que a geraram. Assim, tanto "melhor" será o sistema, quanto mais próximo esteja dessa condição.

Por outro lado, deve-se ressaltar que a utilização desses sistemas está restrita aos casos em que as linhas que limitam o domínio de interesse, no espaço físico, sejam ortogonais, uma vez que são também linhas de coordenada constante. Isso naturalmente restringe a esses casos, a aplicação dos métodos que geram tais sistemas, com excessão dos problemas em que se podem empregar fronteiras móveis.

Voltando à primeira razão, referente às simplificações algébricas, ela é consequência direta de uma característica fundamental dos sistemas de coordenadas localmente ortogonais. Esta corresponde à nulidade de todos os elementos não pertencentes à diagonal principal do tensor métrico desses sistemas. Ou seja:

$$g_{ij} = g_{ji} = g^{ij} = g^{ji} = 0 \text{ para } i \neq j \quad (7.1)$$

¹ O termo 'malha computacional' designa a discretização numérica do sistema de coordenadas.

Neste sentido, a transformação conforme resulta, na verdade, em um sistema de coordenadas ortogonal, como se pode ver pelas expressões (6.19). A característica que a torna restritiva, no entanto, é aquela que impõe que a relação entre os termos da diagonal principal do tensor métrico, ou seja, os fatores de escala do sistema, seja igual a unidade²:

$$g_{ij} = g_{ji} = g^{ij} = g^{ji} = 1 \text{ para } i = j \quad (7.2)$$

Embora seja justamente este fato que garante que o ângulo, entre duas curvas quaisquer no plano físico, conserve-se no plano transformado, e que o estiramento seja o mesmo em ambos os eixos neste plano. Estas condições produzem muitas vezes sistemas de coordenadas mal condicionados e sem utilidade prática [51].

Partindo deste princípio, uma das possibilidades de produzir sistemas de coordenadas localmente ortogonais consiste precisamente em conservar a nulidade dos elementos do tensor métrico não pertencentes à diagonal principal, e impor àqueles que a ela pertencem, uma relação que seja diferente da unidade. Entre os métodos que o fazem, analisados inclusive por Thompson et al. [77], encontram-se aqueles que impõe que tal relação seja uma constante, e os que a consideram como sendo uma função das coordenadas (ξ, η) , conforme cita [51].

Os métodos pertencentes a este último grupo são os que possuem maior flexibilidade, sendo por isso os mais adequados. Dentre eles pode ser citado o trabalho de Ryskin and Leal [66], inicialmente analisado por Meneghini [51], que será apresentado em detalhes a seguir.

A utilização de princípios variacionais representa outra possibilidade para gerar sistemas ortogonais. Nos métodos que os empregam, tais sistemas resultam da otimização de funcionais que medem (quantificam) propriedades destes sistemas. Esta otimização se dá por meio equações do tipo Euler-Lagrange, e portanto é a solução destas equações que promove a geração do sistema. Neste

²No caso bidimensional, i e j assumem os valores 1 ou 2.

grupo podem ser citados os trabalhos de Morice [54] e Brackbill and Saltzman [14], considerados adequados às aplicações aqui desenvolvidas. Vale notar, que o primeiro deles guarda certas semelhanças com o método de Ryskin and Leal [66], e o segundo o faz com relação ao método de Thompson et al. [79]. Ambos são considerados detalhadamente abaixo.

7.1 O Emprego da Relação entre os Fatores de Escala

O método desenvolvido por Ryskin e Leal [66] parte de uma identidade tensorial verdadeira, que, como tal, pode ser formulada no espaço transformado, para a geração do sistema de coordenadas. Esta identidade exprime o fato de que, por serem as coordenadas (x,y) do espaço físico, funções escalares e lineares de posição, seus gradientes são vetores constantes, portanto de divergência nula.

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\nabla x) = \nabla^2 x = 0 \\ \nabla \cdot (\nabla y) = \nabla^2 y = 0 \end{cases} \quad (7.3)$$

Não obstante seja trivial, essa informação proporciona o sistema de equações para o cálculo das funções de mapeamento $x(\xi,\eta)$ e $y(\xi,\eta)$. Sabe-se, porém, que as propriedades da métrica do espaço transformado, como a ortogonalidade local, expressam-se diretamente na forma de seu tensor métrico. Portanto não basta generalizar as equações (7.3), é preciso antes especificar as características que se pretende imprimir ao sistema gerado, sobre esse tensor. E, para isso, impõe-se analisar os graus de liberdade nele presentes.

Em princípio, devido à simetria do tensor métrico, o número de elementos independentes corresponde a $m=3$ em 2-D e $m=6$ em 3-D. Por outro lado há a necessidade de que o espaço transformado seja Euclídeano, como acontece com o espaço físico. Isto implica que o primeiro não possua curvatura intrínseca, ou seja, que nele também

possa ser introduzido um sistema de coordenadas cartesiano³. Esta exigência é verificada quando o tensor de Riemann-Christoffel (Eq. A.39) é nulo no espaço transformado⁴.

Em virtude disso, impõe-se, segundo os autores, uma restrição ao tensor métrico 2-D, reduzindo seus graus de liberdade a dois, e três restrições ao caso 3-D, reduzindo a três seus graus de liberdade. Porém, deve se acrescentar que a própria existência das funções de mapeamento $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ garante que o espaço transformado seja Euclidiano, posto que estabelece a transformação para um sistema de coordenadas cartesiano (x, y) . Dessa forma a nulidade do tensor de Riemann-Christoffel configura-se numa condição de integrabilidade das equações (7.3) no espaço transformado.

Ainda segundo os próprios autores, não se pode, em princípio, garantir que sempre existam funções de mapeamento a satisfazer as exigências impostas ao tensor métrico, como ocorre no caso das transformações conformes, onde a existência é comprovada pelo teorema de mapeamento de Riemann (Sveshnicov and Tikhonov [71]).

De qualquer forma, impondo-se, nessas condições, a nulidade dos elementos não pertencentes à diagonal principal do tensor métrico, resta ainda um grau de liberdade no caso 2-D. No caso 3-D não resta nenhum grau de liberdade, em virtude de serem três os elementos nessa condição. Dessa forma o tensor métrico no primeiro caso fica:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} g_{11} & 0 \\ 0 & g_{22} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad g^{ij} = \begin{bmatrix} g^{11} & 0 \\ 0 & g^{22} \end{bmatrix} \quad (7.4)$$

³ Como exemplo de um sistema 2-D intrinsecamente curvo, pode-se tomar uma casca esférica. Nela definitivamente não se pode introduzir um sistema de coordenadas cartesiano. Estas configurações geométricas não pertencem, entretanto, ao escopo deste trabalho.

⁴ Vale notar que a nulidade do tensor de Riemann-Christoffel garante a intercambiabilidade da segunda derivada covariante.

Pode-se ainda utilizar o grau de liberdade restante no caso 2-D, para impor uma relação entre os elementos não nulos, ou seja, aqueles que pertencem à diagonal principal. Para isso, atribui-se a esta relação, uma função das coordenadas do plano transformado (ξ, η) . Em verdade, esses elementos designam fatores de escala das coordenadas localmente ortogonais [39], e apenas nos no caso 2-D é possível prescrever uma relação entre eles. No caso 3-D isso não é possível, o que confere certa "rigidez" aos sistemas localmente ortogonais, em virtude de não se poder controlar o espaçamento de suas coordenadas⁵ dessa forma. Assim, no caso 2-D:

$$f(\xi, \eta) = \frac{\sqrt{g_{(11)}}}{\sqrt{g_{(22)}}} = \frac{\sqrt{g^{(22)}}}{\sqrt{g^{(11)}}} = \frac{h_{(1)}}{h_{(2)}} \quad (7.5)$$

O jacobiano, nesses casos, é dado por (Eq. A.25):

$$J = \sqrt{g_{(11)}g_{(22)}} = \frac{1}{\sqrt{g^{(11)}g^{(22)}}} = h_{(1)}h_{(2)} \quad (7.6)$$

Pode-se então proceder a formulação das identidades tensoriais (7.3) no plano (ξ, η) , empregando para isso a definição do operador laplaciano generalizada, obtida a partir da combinação das expressões (A.33) e (A.40):

$$\nabla^2 \phi = \phi|_{rr} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^r} \left[J g^{rs} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^s} \right] \quad (7.7)$$

Introduzindo as expressões (7.3), (7.4) e (7.5) na equação (7.6), obtem-se:

⁵ Excessão feita aos sistemas 3-D gerados a partir de sistemas 2-D, com a adição de uma direção perpendicular, como no caso das geometrias axissimétricas.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{f} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{f} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0 \end{cases} \quad (7.8)$$

Este é o sistema de equações diferenciais parciais proposto por Ryskin e Leal [66] para a geração de sistemas de coordenadas curvilíneos localmente ortogonais, ajustados às fronteiras do escoamento. Há, no entanto, algumas considerações muito importantes, que devem ser feitas quanto a função $f(\xi, \eta)$.

A primeira delas diz respeito a sua natureza. E aparece também no trabalho de Morice [54] que, embora tenha formulação variacional, apresenta muita semelhança com o presente método, no que se refere à forma final das equações de Euler-Lagrange. Este autor nota que o sistema (7.6) pode ser obtido da derivação das seguintes condições⁶:

$$\begin{cases} f \frac{\partial x}{\partial \xi} = + \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} = -f \frac{\partial y}{\partial \xi} \end{cases} \quad (7.9)$$

Estas correspondem a uma composição entre uma transformação conforme, que satisfaz as condições de Cauchy-Riemann, entre o plano físico (x, y) e um plano transformado (ϕ, ψ) , seguida de duas transformações de estiramento unidimensionais⁷.

A segunda consideração, mais importante do ponto de vista da aplicação do método, refere-se ao fato do sistema de equações

⁶ Ryskin and Leal [66] também fazem esta observação.

⁷ Ryskin e Leal [66] citam que, para f e $(1/f)$ limitadas, este seria um caso particular de transformação quasi-conforme, para o qual o módulo de dilatação conforme (μ) seria $\mu = (1-f)/(1+f)$, de existência comprovada.

(7.8) poder ser aplicado a três tipos diferentes de problemas, dependendo da forma como se especificam as condições de contorno, quais sejam:

1. A forma das fronteiras físicas não é conhecida a priori, sendo determinada como parte do problema, nos casos que apresentam fronteiras livres.

2. A forma dessas fronteiras é conhecida, porém não se fixa a distribuição dos pontos sobre elas. Esta é determinada pelo mapeamento.

3. A forma das fronteiras físicas é conhecida e a distribuição dos pontos sobre seu contorno é fixa, havendo portanto especificação completa da geometria destas fronteiras.

Nesse contexto, distinguem-se dois modos de aplicação do referido sistema de equações. Um deles é conhecido por 'método da restrição forte', e recebe este nome porque envolve a especificação da função $f(\xi, \eta)$ explicitamente sobre todo o domínio de interesse, no plano transformado. Neste caso, o grau de liberdade que restara ao sistema após a imposição da ortogonalidade local sobre o tensor métrico, foi utilizado na especificação dessa função f . Assim, não se pode especificar de forma completa a geometria das fronteiras⁸, o que restringe sua aplicação aos casos 1 e 2. Há que se notar ainda, que a escolha de $f(\xi, \eta)$ depende das condições do caso em estudo, na medida em que deve envolver a modelação de fenômenos físicos que influam na forma dessas fronteiras.

Para que a especificação completa da geometria das fronteiras seja possível, é preciso que uma das restrições fortes, a ortogonalidade ou a especificação de $f(\xi, \eta)$, seja relaxada. Esta forma de aplicação, designa o 'método da restrição fraca', que se destina aos problemas dos tipos 2 e 3.

Dessa forma, o método da restrição fraca mantém a primeira delas ($g_{12} = g_{21} = 0$), substituindo a segunda pela especificação

⁸ Esta afirmação resulta do fato de que, ao especificar $x(\xi_c, \eta)$, sobre uma fronteira (ξ_c) , sendo $f(\xi, \eta)$ conhecida, $y(\xi_c, \eta)$ fica determinada a partir das equações (9.9). E, por outro lado, ao especificar valores constantes (Dirichlet) para x e derivadas nulas (Neumann) para y (ou o inverso), também satisfaz-se (9.9).

completa dos pontos das fronteiras, e por uma regra para determinar $f(\xi, \eta)$ nos pontos internos, a partir de seus valores sobre essas fronteiras. Estes últimos são calculados pelas expressões (6.7) e (7.5). E a regra é essencialmente arbitrária, desde que sujeita à condição de $f > 0$, podendo corresponder a uma interpolação ou a uma equação diferencial parcial elíptica⁹ [66]. Tais condições denominam-se restrições fracas e são equivalentes à imposição de uma restrição forte.

Por outro lado, uma vez que a função $f(\xi, \eta)$ é simultaneamente parte do sistema (7.8) e sujeita a uma regra de cálculo, o que se tem é a adição de mais uma equação esse sistema, na forma desta regra. Além disso, deve-se ressaltar que o cálculo dos valores de f nas fronteiras pressupõe o conhecimento dos valores das primeiras derivadas de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre essas fronteiras. A nível da implementação numérica deste método, estas derivadas envolvem valores de x e y internos ao domínio, e portanto é necessário um procedimento iterativo com aproximações sucessivas. Tal procedimento é delineado pelos autores na forma:

0. Especificar os valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre as fronteiras.

1. Proceder uma estimativa inicial para $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ e, a partir desta, obter a estimativa inicial de $f(\xi, \eta)$, calculando-a nas fronteiras pela definição (6.7 e 7.8), e no interior pela regra, para ela, adotada.

2. Usar as condições de Dirichlet estabelecidas para x e y no passo 0, e a estimativa de $f(\xi, \eta)$ do passo 1 para obter, por meio do sistema (7.8), novos valores para $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$.

3. Com os valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ obtidos no passo 2 e as condições de contorno prescritas para estas funções, recalcular $f(\xi, \eta)$ nas fronteiras, por meio da definição (6.7 e 7.8).

4. Determinar os valores da função $f(\xi, \eta)$ no interior do

⁹ Neste caso $f(\xi, \eta)$ seria calculada a partir de seus valores nas fronteiras por:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} = 0$$

domínio, por meio da regra adotada, a partir de seus valores nas fronteiras, obtidos no passo 3, e dos novos valores de x e y obtidos no passo 2.

5. Retornar ao passo 2 para reiteração.

Como regras para o cálculo de $f(\xi, \eta)$ nos pontos internos do domínio de interesse, Ryskin e Leal [66] consideram duas possibilidades, sujeitas às condições de que f seja sempre positiva e, preferencialmente, de variação suave. A primeira corresponde a equação de Laplace no domínio transformado, citada acima. E a segunda corresponde a uma interpolação algébrica, na forma proposta:

$$f(\xi, \eta) = f^o(\xi, \eta) - f^c(\xi, \eta) \quad (7.10)$$

$$f^o(\xi, \eta) = \left(1 - \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)}\right) f(1, \eta) + \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)} f(\xi_{(\max)}, \eta) + \\ + \left(1 - \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)}\right) f(\xi, 1) + \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)} f(\xi, \eta_{(\max)}) \quad (7.11)$$

$$f^c(\xi, \eta) = \left(1 - \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)}\right) \left(1 - \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)}\right) f(1, 1) + \\ + \left(1 - \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)}\right) \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)} f(1, \eta_{(\max)}) + \\ + \left(1 - \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)}\right) \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)} f(\xi_{(\max)}, 1) + \\ + \frac{(\xi - 1)}{(\xi_{(\max)} - 1)} \frac{(\eta - 1)}{(\eta_{(\max)} - 1)} f(\xi_{(\max)}, \eta_{(\max)}) \quad (7.12)$$

Normalizam-se as variáveis ξ e η porque as formulas referem-se, em princípio, ao intervalo real $0 \leq (\xi, \eta) \leq 1$, ao passo que os mapeamentos acontecem no intervalo $1 \leq \xi \leq \xi_{\max}$ e $1 \leq \eta \leq \eta_{\max}$, onde tais variáveis assumem apenas valores inteiros. De resto, esta forma de cálculo de $f(\xi, \eta)$ é recomendada pelos autores, devido à sua simplicidade, e por isso é efetivamente adotada neste trabalho.

Ryskin e Leal [66] também fazem referência ao fato de que a

especificação dos pontos das fronteiras pode ser feita de modo a permitir algum controle do espaçamento da malha computacional, uma vez que sua distribuição não precisa ser necessariamente uniforme. Exemplos dessa possibilidade encontram-se apresentados no item 12, referente aos exemplos de aplicação.

7.2 O Emprego dos Princípios Variacionais

Entre os métodos analisados que utilizam princípios variacionais, os mais adequados aos objetivos deste trabalho são os de Morice [54] e Brackbill e Saltzman [14], que serão apresentados a seguir.

O método de Morice [54] propõe, para os casos em que a fronteira da região de interesse no plano físico é conhecida, a minimização de um funcional que representa a integral da soma dos quadrados das relações generalizadas de Cauchy-Riemann, expressões (7.9).

$$I_1 = \iint_D \left[\left(\sqrt{f} \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{1}{\sqrt{f}} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\sqrt{f} \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{f}} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right] d\xi d\eta \quad (7.13)$$

Que também pode ser expresso na forma:

$$I_1 = \iint_D f \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right] + \frac{1}{f} \left[\left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right] d\xi d\eta - \iint_D 2J d\xi d\eta \quad (7.14)$$

Ao fazê-lo, busca um ajuste do sistema de coordenadas a estas relações, no sentido de minimizar o erro quadrático médio.

Ao lado disso, este método define tais relações generalizadas como resultantes da composição entre uma transformação conforme entre o plano físico e um plano transformado intermediário, deformada posteriormente por duas transformações de estiramento unidimensionais. Assim, apresenta argumentação semelhante àquela de Ryskin e Leal [66].

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial x} = + \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} = - \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \phi(\xi, \eta) = a(\xi) \mid a(0)=0 \text{ e } a(1)=1 \\ \psi(\xi, \eta) = \mu b(\eta) \mid b(0)=0 \text{ e } b(1)=1 \end{cases} \quad (7.15)$$

De forma que $f(\xi, \eta)$ seja dada por:

$$f(\xi, \eta) = \frac{\mu \beta(\eta)}{\alpha(\xi)} \rightarrow \begin{cases} \alpha(\xi) = \frac{\partial a}{\partial \xi} > 0 \\ \beta(\eta) = \frac{\partial b}{\partial \eta} > 0 \end{cases} \quad (7.16)$$

Onde μ é um escalar positivo, que corresponde ao inverso do modulo da transformação conforme. Pode ser determinado pela integração da primeira das relações (7.9), sobre o domínio de interesse no plano (ξ, η) , $0 \leq (\xi, \eta) \leq 1$.

$$\mu = \frac{\int_0^1 [y(\xi, 1) - y(\xi, 0)] \alpha(\xi) d\xi}{\int_0^1 [x(1, \eta) - x(0, \eta)] \beta(\eta) d\eta} \quad (7.17)$$

Estas considerações conferem uma interpretação conceitual, não só ao método proposto por Morice [54], como também àquele apresentado por Ryskin e Leal [66]. Posto que o sistema de equações do tipo Euler-Lagrange que minimiza este funcional corresponde precisamente às equações (7.8).

Da mesma forma que Ryskin e Leal [66], Morice [54] coloca que a prescrição das funções $a(\xi)$ e $b(\eta)$, que indiretamente determinam $f(\xi, \eta)$, impede que se obtenham sistemas de coordenadas ortogonais para domínios cujas fronteiras são fixas. Entretanto não define uma regra para a determinação de $a(\xi)$ e $b(\eta)$, como fazem os primeiros. Ao invés disso, define funções de distribuição dos pontos sobre as fronteiras $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ e $\gamma_4)$, isto é, $v_1(\eta)$, $v_2(\xi)$, $v_3(\eta)$ e $v_4(\xi)$ no plano transformado, respectivamente, e estabelece que: Ou se tem a e b fixas, e as fronteiras são móveis. Ou então duas funções v_i são fixas (por exemplo v_1 e v_2) e, nesse caso, a e b ajustam-se, o mesmo ocorrendo a f , e os pontos de γ_3 e γ_4 ficam livres.

Uma observação importante de Morice [54] diz respeito à necessidade de estabelecer de forma criteriosa a escolha das funções $a(\xi)$ e $b(\eta)$, uma vez que o sistema (7.8) não obedece a um princípio de extremo no espaço físico, onde seria comprovadamente necessário.

Ao lado disso, pode-se observar que o funcional I_1 , na forma

da equação (7.14), guarda certa semelhança¹⁰ com dois dos funcionais utilizados no método de Brackbill e Saltzman [14], apresentado a seguir. De fato, Morice [54] faz importantes comparações entre as equações de seu método e aquelas do método de Thompson et al. [79], que estão relacionadas aos funcionais apresentados por Brackbill e Saltzman [14]. Com isso se estabelece, em princípio, a possibilidade de relacionar os diferentes métodos considerados. Além de fundamentar os conceitos envolvidos no trabalho de Ryskin e Leal [66].

O método desenvolvido por Brackbill e Saltzman [14] propõe a otimização de uma combinação linear de funcionais que representam explicitamente propriedades que se deseja imprimir ao mapeamento. Estas propriedades referem-se à sua uniformidade, à ortogonalidade local e a uma relação ponderada entre os elementos de área (volume, no caso 3-D) dos espaços físico e transformado. Cada uma destas propriedades é representada por um funcional diferente, sendo que apenas aquele que representa a primeira possui solução única, os demais exprimem restrições ao problema variacional.

A uniformidade do mapeamento é medida por um funcional que representa, no espaço físico, a densidade linear da distribuição de pontos sobre as linhas de $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$ constantes. Thompson et al. [77] consideram que, ao minimizar esta propriedade, promove-se a maximização da uniformidade pretendida. No plano (x,y) , a forma deste funcional corresponde a:

$$I_{(u)} = \int_D [(\nabla\xi)^2 + (\nabla\eta)^2] dA \quad (7.18)$$

Segundo estes mesmos autores, o integrando deste funcional revela suas características importantes. Uma refere-se ao fato de que sua expressão representa a razão entre o quadrado dos comprimentos das faces de uma célula pela sua área. Assim, o

¹⁰ Embora, é claro, existam diferenças. Estas se devem, entretanto, à presença da função f .

significado geométrico do mínimo seria a célula encerrar a maior área com o menor perímetro, o que proporciona elementos cujos lados têm o mesmo comprimento. A outra implica que sua minimização tem o sentido dos 'mínimos quadrados'.

Além disso, Thompson e seus colaboradores mostram que, as equações de Euler para este funcional correspondem, no espaço físico, exatamente ao sistema de equações de Laplace (6.1)¹¹. Este fato tem conseqüências extremamente importantes, do ponto de vista conceitual. Pois implica que o sistema de coordenadas mais uniforme é justamente aquele que satisfaz as equações de Laplace e, uma vez que tais equações obedecem a um princípio de extremo no plano físico, a formulação variacional gera sistemas que preenchem as condições necessárias apresentadas acima. De outra forma, pode-se concluir que o extremo do referido funcional é representado no plano físico pelas funções $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$, que são harmônicas, e portanto (estas funções) não realizam extremos dentro do domínio físico considerado.

Faz-se a inversão das variáveis dependentes e independentes do integrando deste funcional, da mesma forma que nos métodos anteriores, para representá-lo no plano transformado (ξ, η) :

$$I_{(s)} = \int_1^N \int_1^M \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right] d\xi d\eta \quad (7.19)$$

$$I_{(s)} = \int_1^N \int_1^M \frac{g_{11} + g_{22}}{J} d\xi d\eta \quad (7.20)$$

A ortogonalidade local do sistema de coordenadas curvilíneo é avaliada por um funcional que representa, no espaço físico, o produto escalar dos gradientes das funções $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$, que,

¹¹Embora Brackbill e Saltzman [14] afirmem que, no espaço transformado, há coincidência entre o sistema de equações de seu método e o sistema (8.6), que é a forma transformada de (8.1), apenas em um caso particular.

afinal, correspondem aos versores deste sistema. Quando a condição de ortogonalidade local é satisfeita, naturalmente este produto se anula, o mesmo acontecendo ao funcional.

$$I_{(o)} = \int_D [\nabla\xi \cdot \nabla\eta]^2 J^3 dA \quad (7.21)$$

A inclusão do cubo do jacobiano no integrando é, segundo Thompson et al. [77], arbitrária, representando uma função que pondera a propriedade em questão, e que tem o efeito de "ênfatisar fortemente a ortogonalidade nas células maiores".

Porém, Brackbill e Saltzman [14] notam que a nulidade deste funcional, que representa seu valor mínimo, não determina uma solução que seja única. De fato, diferentes sistemas de coordenadas localmente ortogonais podem ser gerados para uma mesma geometria das fronteiras— basta considerar aqueles que satisfazem a uma condição de uniformidade do espaçamento, e aqueles que não o fazem. Por este motivo, o referido funcional representa apenas uma restrição ao problema variacional. Uma restrição do tipo isoperimétrico, segundo Gelfand e Fomin [30].

De qualquer forma, procedendo-se a inversão das variáveis dependentes e independentes deste funcional, para representá-lo no plano transformado (ξ, η) , tem-se:

$$I_{(o)} = \int_1^N \int_1^M \frac{1}{J} \left[\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right]^2 d\xi d\eta = \int_1^N \int_1^M \frac{g_{12}^2}{J} d\xi d\eta \quad (7.22)$$

E finalmente, relação ponderada entre os elementos de área (volume, no caso 3-D) é representada pelo seguinte funcional¹²:

Thompson et al. [77] define este funcional com o integrando na forma: $(wJ)^2$. Empregam, portanto uma função w ao quadrado.

$$I_{(v)} = \int_D w J dV \quad (7.23)$$

Com a inversão das variáveis, sua forma no espaço transformado (ξ, η) passa a ser:

$$I_{(v)} = \int_1^N \int_1^M w J^2 d\xi d\eta \quad (7.24)$$

Once a função de ponderação w depende exclusivamente das coordenadas cartesianas (x, y) do espaço físico, $w = w(x, y)$, sendo especificada a priori. E tem, em princípio, o efeito de provocar a diminuição do espaçamento dos pontos nas regiões em que assume valores altos. Delineiam-se com isto suas características mais importantes:

1. A função w refere-se à posição dos pontos no espaço físico, pois depende apenas das coordenadas (x, y) . Portanto não se associa diretamente aos pontos ξ e η do espaço transformado, como ocorreria, caso dependesse destas variáveis. Ao lado disso, na equação de Euler-Lagrange, é a dependência direta de w , e não a implícita, que aparece. Tais razões tornam possível à funções do tipo $w(x, y)$ referirem-se diretamente aos gradientes da solução no espaço físico, o que é muito conveniente. Thompson et al. [77] discutem vários tipos destas funções, que possuem a propriedade de gerar malhas de menor espaçamento nas regiões onde estes gradientes são altos ou onde a solução realiza extremos. Há também os casos que aliam as duas características. Estas funções destinam-se, entretanto, à construção de malhas adaptativas, e por isso não pertencem ao escopo deste trabalho.

2. Seu significado físico repousa na analogia apontada por Thompson et al. [77], entre sua representação no espaço transformado (equação 7.24) e a energia potencial elástica acumulada por uma membrana elástica, no caso 2-D (sólido elástico no caso 3-D), conformada às fronteiras do domínio físico. Neste caso, o jacobiano representa a deformação elástica e a função $w(x, y)$ designa o coeficiente de elasticidade generalizado como propriedade local desta membrana ou sólido.

Por outro lado, a minimização deste funcional também não apresenta solução única, como mostram Brackbill e Saltzman [14]. Uma vez que se podem contruir diferentes sistemas de coordenadas que realizam seu extremo para uma mesma função $w(x,y)$ e mesma geometria.

Feitas as considerações necessárias, tem-se que o funcional a ser minimizado corresponde a uma combinação linear dos funcionais acima apresentados, na forma:

$$I = I_{(s)} + \lambda_{(v)} I_{(v)} + \lambda_{(o)} I_{(o)} \quad (7.25)$$

Thompson et al. [77] faz uma análise de ordem de magnitude dos funcionais, considerados sobre o espaço físico, tomando como escalas naturais um comprimento (L) e um número de pontos (N), característicos do problema. De forma a ter para as coordenadas deste espaço ($x_1 \propto L$) e para as do espaço transformado ($\xi^1 \propto N$). Com isso, no caso plano tem-se ($J \propto (L/N)^2$), e como a integração é no espaço físico ($dA \propto L^2$). Assim:

$$I_{(s)} \propto \frac{N^2}{L^2} L^2, \quad I_{(v)} \propto W \frac{L^2}{N^2} L^2, \quad I_{(o)} \propto \frac{L^2}{N^2} L^2 \quad (7.26)$$

Onde W representa um valor médio de $w(x,y)$ sobre todo o domínio, na forma:

$$W = \frac{1}{A} \int_1^N \int_1^M w J^2 dA \quad (7.27)$$

Inserindo-se as relações (4.64) na equação (4.63), obtém-se para o caso plano¹³:

¹³ Para o caso (3-D), tem-se: $dV \propto L^3$, $J \propto (L/N)^3$, $WV = (\iiint w dV)$

$$I_{(s)} \propto (N/L)^2 L^3, \quad I_{(v)} \propto (L/N)^3 L^3 W, \quad I_{(o)} \propto (L/N)^5 L^3$$

$$I = I_{(s)} + \lambda_{(v)} \frac{(N/L)^5}{N} I_{(v)} + \lambda_{(o)} (N/L)^7 I_{(o)}$$

$$I = I_{(s)} + \lambda_{(v)} \left(\frac{N}{L} \right)^4 \frac{1}{W} I_{(v)} + \lambda_{(o)} \left(\frac{N}{L} \right)^4 I_{(o)} \quad (7.28)$$

Thompson e seus colaboradores propõe que as escalas naturais L e N sejam:

L estimada pela raiz quadrada da área total considerada, ou a raiz cúbica do volume, no caso (3-D).

N estimada com base na raiz quadrada do produto do número de pontos nas direções ξ e η da malha $(\xi_{\max} * \eta_{\max})^{1/2}$, ou a raiz cúbica $(\xi_{\max} * \eta_{\max} * \zeta_{\max})^{1/3}$, no caso tridimensional.

De qualquer modo, quer se use a expressão (7.25) (Brackbill e Saltzman [14]), ou a (7.28) (Thompson et al. [77]), aos multiplicadores de Lagrange devem ser atribuídos a priori valores não negativos ($\lambda_o \geq 0$ e $\lambda_v \geq 0$). Portanto, eles não resultam do problema variacional, mas são impostos como coeficientes de ponderação e dessa forma impõem a ênfase relativa que cada propriedade terá no sistema gerado. Assim valores altos de λ_o enfatizam a ortogonalidade local, às custas da relação ponderada de áreas (ou volumes, no caso 3-D), e o inverso deve ocorrer para valores altos de λ_v .

Os extremos desse funcional composto (7.25) são determinados por um sistema de equações diferenciais parciais de Euler-Lagrange, que geram o sistema de coordenadas curvilíneo. Este sistema de equações é resolvido sobre o espaço transformado, onde as condições de contorno assumem a forma simplificada.

Para formular as equações de Euler-Lagrange no espaço matemático transformado faz-se uso do princípio da invariância destas equações sobre qualquer mudança de coordenadas. Tomam-se então os funcionais escritos para o sistema (ξ, η) , apresentados acima, e considera-se, no caso de um funcional Φ :

Thompson et al. [77] usam w^2 , e a média: $WV = (\iiint w^2 dV)$

$$\Phi = \iiint_D F(\xi^1, x_j, \frac{\partial}{\partial \xi^1}(x_j)) dV \quad (7.29)$$

As equações de Euler-Lagrange são (Gelfand and Fomin [30]):

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial \xi^1} \frac{\partial F}{\partial (x_j \xi^1)} = 0 \quad (7.30)$$

Aplicando-se estas definições para os funcionais apresentados acima, obtem-se um conjunto de equações diferenciais parciais de segunda ordem quasi-lineares, onde os coeficientes são funções quadráticas das derivadas primeiras [77].

Para o funcional $I_{(s)}$:

$$\begin{cases} +E \left[\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \right] - A \left[\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \right] = 0 \\ -A \left[\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \right] + C \left[\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \right] = 0 \end{cases} \quad (7.31)$$

Onde os coeficientes são dados por:

$$\begin{cases} A = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ B = \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \\ C = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \end{cases} \quad (7.32)$$

$$\alpha = (g_{22}/J^3) \quad \beta = (g_{12}/J^3) \quad \gamma = (g_{11}/J^3) \quad (7.33)$$

Brackbill e Saltzman estabelecem que, se $(A^2 - BC \neq 0)$, o sistema (4.69) pode ser fatorado, resultando no sistema de equações de Laplace transformadas (4.17). Mas no caso geral o sistema fica:

$$\begin{cases} b_{s1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b_{s2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + b_{s3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + a_{s1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + a_{s2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + a_{s3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \\ a_{s1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + a_{s2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + a_{s3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + c_{s1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + c_{s2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + c_{s3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \end{cases} \quad (7.34)$$

Once os coeficientes são reagrupados:

$$\begin{cases} a_{s1} = -A\alpha & a_{s2} = 2A\beta & a_{s3} = -A\gamma \\ b_{s1} = B\alpha & b_{s2} = -2B\beta & b_{s3} = B\gamma \\ c_{s1} = C\alpha & c_{s2} = -2C\beta & c_{s3} = C\gamma \end{cases} \quad (7.35)$$

Para o funcional $I_{(0)}$:

$$\begin{cases} b_{o1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b_{o2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + b_{o3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + a_{o1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + a_{o2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + a_{o3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \\ a_{o1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + a_{o2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + a_{o3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + c_{o1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + c_{o2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + c_{o3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = 0 \end{cases} \quad (7.36)$$

Onde os coeficientes são dados por:

$$\begin{cases} a_{o1} = \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} & , & a_{o2} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} & & a_{o3} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ b_{o1} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 & , & b_{o2} = 2 \left(2 \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) & , & b_{o3} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 \\ c_{o1} = \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 & , & c_{o2} = 2 \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + 2 \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) & & c_{o3} = \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \end{cases} \quad (7.37)$$

E, finalmente, para o funcional $I_{(v)}$:

$$\begin{cases} w \left(b_{v1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b_{v2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + b_{v3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + a_{v1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + a_{v2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + a_{v3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \right) = -\frac{J^2}{2} \frac{\partial w}{\partial x} \\ w \left(a_{v1} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + a_{v2} \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + a_{v3} \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + c_{v1} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + c_{v2} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + c_{v3} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \right) = -\frac{J^2}{2} \frac{\partial w}{\partial y} \end{cases} \quad (7.38)$$

Onde os coeficientes são dados por:

$$\begin{cases} a_{v1} = -\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \eta} & , a_{v2} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} & , a_{v3} = -\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ b_{v1} = +\left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2 & , b_{v2} = -2\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} & , b_{v3} = +\left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2 \\ c_{v1} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 & , c_{v2} = -2\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} & , c_{v3} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 \end{cases} \quad (7.39)$$

As equações acima podem ser somadas e seus coeficientes reagrupados, resultando em:

$$\begin{cases} b_1 \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b_2 \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + b_3 \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + a_1 \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + a_2 \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + a_3 \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = -\frac{J^2}{2} \frac{\partial w}{\partial x} \\ a_1 \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + a_2 \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + a_3 \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + c_1 \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + c_2 \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + c_3 \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = -\frac{J^2}{2} \frac{\partial w}{\partial y} \end{cases} \quad (7.40)$$

De maneira que a regra para a formação dos coeficientes seja:

$$\begin{cases} a_1 = a_{s1} + \lambda a_{v1} w + \lambda a_{o1} \\ b_1 = b_{s1} + \lambda b_{v1} w + \lambda b_{o1} \\ c_1 = c_{s1} + \lambda c_{v1} w + \lambda c_{o1} \end{cases} \quad (7.41)$$

Este é efetivamente o sistema de equações diferenciais que, resolvido no espaço matemático transformado, promove a geração dos sistemas de coordenadas curvilíneas, segundo o método de Brackbill e Saltzman [14]. As condições de contorno correspondem a valores prescritos das funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre as bordas da região de interesse neste espaço.

8. Critérios de Avaliação da Qualidade dos Sistemas de Coordenadas

Os vários métodos propostos para a geração de sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento possuem duas características básicas, que são comuns a todos:

A primeira delas refere-se ao fato de que tais métodos conferem propriedades diferentes aos sistemas gerados, com a finalidade de fazê-los adequados às suas aplicações. Assim, alguns enfatizam a ortogonalidade local, enquanto outros fazem-no com respeito à uniformidade do espaçamento ou à possibilidade de controlá-lo, por exemplo. Com isso, diferentes propriedades podem ser prescritas para os sistemas de coordenadas curvilíneas, em função de suas aplicações e dos métodos utilizados para gerá-los.

A segunda característica é consequência direta do emprego de técnicas numéricas para a solução das equações desses métodos. Pois, na medida em que estas técnicas substituem as diferenciações por fórmulas algébricas de diferenças finitas, sua solução é obtida de forma aproximada, dentro de um nível de precisão predefinido. Isto estabelece uma distinção clara entre os sistemas de coordenadas curvilíneos, que são meios contínuos, sob o aspecto conceitual, e as malhas computacionais, que correspondem a conjuntos finitos de pontos discretos que os representam, sob o aspecto puramente numérico.

Diante disso, torna-se muito conveniente a formulação de critérios para avaliar de forma quantitativa as propriedades desses sistemas de coordenadas. Uma vez que eles se prestariam tanto à comparação entre os resultados obtidos por diferentes métodos para uma dada geometria, quanto para verificar em que nível tais resultados satisfazem às propriedades que lhes tenham sido especificadas¹. Nessas condições, esses critérios podem, em princípio, ser de dois tipos: os específicos e os de aplicação geral.

Os primeiros referem-se apenas às malhas geradas por um determinado método. Como exemplos destes, podem-se citar os que

¹ O objetivo final dessa análise é verificar a relação entre a qualidade da malha e a precisão dos resultados da simulação numérica.

avaliam o erro quadrático médio da malha computacional, no que diz respeito às equações que a tenham gerado.

Os métodos de aplicação geral referem-se às características dos sistemas, que sejam de interesse para as aplicações propriamente ditas. Por isso normalmente representam propriedades dos sistemas de coordenadas curvilíneas, como a ortogonalidade, por exemplo, e, ao contrário dos primeiros, podem ser aplicados aos resultados dos diferentes métodos, com propósitos comparativos. Dessa forma, sua avaliação pode ser local ou referir-se uma região definida do domínio de interesse, dependendo da natureza da propriedade em estudo.

No presente trabalho utilizam-se critérios deste tipo, em avaliações locais ou de regiões do domínio. Para essas últimas empregam-se funcionais advindos dos métodos variacionais de geração de sistemas. Em sua análise desses métodos, Thompson et al. [77] propõe uma série de funcionais que exprimem diferentes propriedades dos sistemas de coordenadas. Entretanto, o presente estudo deve restringir-se àquelas que têm relevância para as aplicações ora desenvolvidas, quais sejam: a ortogonalidade local, a uniformidade do espaçamento da malha e a relação entre os elementos de área, ou volume, no caso 3-D, dos espaços físico e matemático transformado. Estas correspondem precisamente aos funcionais apresentados no método de Brackbill e Saltzman [14].

Para o caso geral 3-D, onde as coordenadas dos espaços físico e transformado são (x,y,z) e (ξ,η,ζ) , respectivamente, a forma desses funcionais sobre o domínio físico corresponde a:

Para a uniformidade do espaçamento:

$$I_{(s)} = \iiint_D [(\nabla\xi)^2 + (\nabla\eta)^2 + (\nabla\zeta)^2] dV \quad (8.1)$$

Onde a intergração se dá sobre o elemento de volume $dV=dx dy dz$.

Para a ortogonalidade local existem, segundo Thompson et al. [77], duas formas de avaliação:

Uma delas baseia-se nos ângulos entre os gradientes das funções $\xi(x,y,z)$, $\eta(x,y,z)$ e $\zeta(x,y,z)$, e portanto refere-se a vetores normais às superfícies de ξ constante, η constante e ζ constante, respectivamente.

$$I_{(o)} = \iiint_D [(\nabla\xi \cdot \nabla\eta)^2 + (\nabla\eta \cdot \nabla\zeta)^2 + (\nabla\zeta \cdot \nabla\xi)^2] J^3 dV \quad (8.2)$$

A outra refere-se aos ângulos entre vetores perpendiculares aos gradientes das funções $\xi(x,y,z)$, $\eta(x,y,z)$ e $\zeta(x,y,z)$, quando tomados dois a dois, isto é, $(\nabla\xi \wedge \nabla\eta)$, $(\nabla\eta \wedge \nabla\zeta)$ e $(\nabla\zeta \wedge \nabla\xi)$.

$$I_{(o')} = \iiint_D \{ [(\nabla\xi \wedge \nabla\eta) \cdot (\nabla\eta \wedge \nabla\zeta)]^2 + [(\nabla\eta \wedge \nabla\zeta) \cdot (\nabla\zeta \wedge \nabla\xi)]^2 + [(\nabla\zeta \wedge \nabla\xi) \cdot (\nabla\xi \wedge \nabla\eta)]^2 \} J^3 dV \quad (8.3)$$

O método proposto por Brackbill e Saltzman [14] faz uso da primeira forma de avaliação, que corresponde à expressão do funcional $I_{(o)}$ (8.2).

E finalmente, a relação entre os elementos de volume dos espaços físico e transformado, que é ponderada por uma função predefinida $w(x,y,z)$.

$$I_{(v)} = \iiint_D w(x,y,z) J dV \quad (8.4)$$

Sob o ponto de vista da aplicação desses critérios, é conveniente que sejam integrados sobre o espaço transformado. Para tanto procede-se a mudança das variáveis de integração de (x,y,z) para (ξ,η,ζ) , e o elemento de volume para $dV = J d\xi d\eta d\zeta$. Os integrandos têm suas variáveis dependentes (ξ,η,ζ) e independentes (x,y,z) invertidas, por meio da aplicação do teorema da função inversa [39]. Sua forma no espaço transformado resulta, respectivamente, em:

$$I_{(s)} = \iiint_D [g_{jj} g_{kk} - g_{jk}^2] \frac{1}{J} d\xi d\eta d\zeta \quad (8.5)$$

$$I_{(o)} = \iiint_D [g_{ij}g_{ik} - g_{ii}g_{jk}]^2 d\xi d\eta d\zeta \quad (8.6)$$

$$I_{(o')} = \iiint_D g_{jk}^2 d\xi d\eta d\zeta \quad (8.7)$$

$$I_{(v)} = \iiint_D wJ^2 d\xi d\eta d\zeta \quad (8.8)$$

O jacobiano da transformação J é dado pela expressão (A.45).

Quando escritos em função das coordenadas (ξ, η, ζ) , os significados geométricos dos integrandos desses funcionais dizem respeito ao espaço transformado.

Assim, o integrando do funcional $I_{(s)}$ (Eq. 8.5) representa o quadrado da área lateral de uma célula elementar, dividido pela razão entre os elementos de volume.

$$[g_{jj}g_{kk} - g_{jk}^2]/J = (g_j \wedge g_k)^2/J \quad (8.9)$$

De forma análoga o integrando de $I_{(o)}$ (Eq. 8.6) representa o quadrado do produto escalar entre as normais às faces da célula elementar do sistema curvilíneo.

$$[g_{ij}g_{ik} - g_{ii}g_{jk}]^2 = [(g_i \wedge g_j) \cdot (g_k \wedge g_i)]^2 \quad (8.10)$$

O funcional $I_{(o')}$ (Eq. 8.7) representa diretamente o quadrado do produto escalar dos versores desse sistema curvilíneo.

$$g_{jk}^2 = (g_j \cdot g_k)^2 \quad (8.11)$$

E o integrando de $I_{(v)}$ (Eq. 8.8) representa o quadrado do volume de uma célula elementar, multiplicado por uma função de ponderação w .

$$wJ^2 = w(g_1 \cdot g_2 \wedge g_3)^2 \quad (8.12)$$

8.1 A Formulação dos Critérios de Qualidade para o Caso Bidimensional

Uma vez feitas as considerações necessárias, quanto ao significado geométrico dos funcionais apresentados acima, deve-se reformulá-los para o caso bidimensional, onde têm lugar as aplicações deste trabalho. Para isso, impõem-se simplificações que os reduzem àqueles do método de Brackbill e Saltzman [14], para o caso 2-D. Neste, considera-se que o espaço físico seja representado pelo plano (x,y) e o transformado por (ξ,η) . Os elementos de área são $dx dy$ e $J d\xi d\eta$, respectivamente. No plano físico os funcionais resultam em:

$$I_{(s)} = \iint_D [(\nabla\xi)^2 + (\nabla\eta)^2] dA \quad (8.13)$$

No caso 2-D a direção representada por $\nabla\zeta$ sempre pode ser tomada como perpendicular ao plano (ξ,η) . Fica implícita aqui a ressalva de que este espaço bidimensional não seja intrinsecamente curvo. Assim $I_{(o)}$ fica:

$$I_{(o)} = \iint_D [\nabla\xi \cdot \nabla\eta]^2 J^3 dA \quad (8.14)$$

E $I_{(o')}$ conserva a forma da expressão (8.3), apenas com a ressalva de que $\nabla\zeta$ é perpendicular ao plano (ξ,η) , e tem módulo unitário $|\nabla\zeta| = 1$. Quanto a $I_{(v)}$, a forma também se conserva, a menos do fato que a integração agora se dá sobre uma área e, evidentemente w é função de (x,y) apenas. O Jacobiano J corresponde à forma apresentada na expressão (7.5).²

$$I_{(v)} = \iint_D w J dA \quad (8.15)$$

No espaço matemático transformado, os funcionais resultam:

$$I_{(s)} = \int_1^N \int_1^M \frac{g_{11} + g_{22}}{J} d\xi d\eta \quad (8.16)$$

² Julgamos adequado manter a notação $I_{(v)}$

$I_{(o)}$ e $I_{(o')}$ são equivalentes no caso bidimensional, por este motivo, representa-se aqui apenas $I_{(o)}$.

$$I_{(o)} = \int_1^N \int_1^M \frac{g_{12}^2}{J} d\xi d\eta \quad (8.17)$$

$$I_{(v)} = \int_1^N \int_1^M w J^2 d\xi d\eta \quad (8.18)$$

8.2 A Importância dos Critérios de Qualidade

Do ponto de vista da simulação numérica do escoamento, o interesse na avaliação dos funcionais $I_{(s)}$ e $I_{(o)}$ justifica-se em razão do estabelecido por Thompson et al. [77]. Seus estudos demonstram que malhas computacionais muito distantes da condição de ortogonalidade local e de uniformidade implicam em comprometimento da solução das equações do modelo matemático. Daí, desaconselham variações acentuadas do espaçamento da malha, nas regiões onde se desenvolvam gradientes altos da solução, como as camadas limites, por exemplo. Estes autores consideram especialmente o caso 2-D, onde impõe condições limites para as derivadas de segunda ordem das funções $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$ e a ortogonalidade, com o objetivo de assegurar a manutenção da ordem de sua representação por diferenças finitas³.

Ao lado disso, Peric' [61] analisa os efeitos do emprego de uma formulação ortogonal das equações do modelo, sobre sistemas não ortogonais, considerando algoritmos consagrados do Método dos Volumes Finitos. Conclui que o desvio acentuado daquela condição torna a convergência de sua solução muito lenta, senão impossível. Também estabelece que a não uniformidade contribui para estas limitações, na ausência da condição de ortogonalidade local.

Esses autores também atestam que a não uniformidade compromete os resultados mormente na ausência da condição de ortogonalidade local. De resto, o próprio método de Thompson et al. [79] permite o controle do espaçamento, apenas não encorajando

³ Estas condições estabelecem que determinadas funções dessas derivadas sejam limitadas no domínio de interesse no plano (ξ, η) .

seu uso indiscriminado. Nessas condições, pode-se concluir que a exigência dessa última é mais restritiva que a primeira.

As razões acima citadas justificam amplamente a adoção de critérios que avaliem a ortogonalidade local e a uniformidade das malhas computacionais. Quanto à terceira propriedade mencionada, a relação entre os elementos de área (ou volume, no caso 3-D), sua avaliação é relevante para estabelecer comparações entre as malhas geradas pelo método de Brackbill e Saltzman [14] e aquelas geradas por outros métodos.

Vale ressaltar, entretanto, que a utilização de técnicas de controle do espaçamento implica em obter, para os funcionais que avaliam a uniformidade e a relação entre os elementos de área (volume, no caso 3-D) valores distintos dos que se obteriam para a mesma geometria, sem empregá-las. Esta observação é válida para quaisquer dessas técnicas, sejam as funções P e Q do método de Thompson et al. [79], ou mesmo a função f , do método de Ryskin e Leal [66], ou Morice [54]. A função w no método de Brackbill e Saltzman [14], por outro lado, constitui-se em caso especial, posto que sua utilização pode ser avaliada diretamente pelo funcional $I_{(v)}$. De qualquer forma, fica claro que o emprego de tais técnicas impõe restrições a uma comparação pura e simples entre os resultados dos diferentes métodos para uma mesma geometria.

8.3 A Aplicação dos Critérios de Qualidade

A aplicação dos funcionais apresentados, para a avaliar as propriedades dos sistemas de coordenadas, é realizada sobre todo o domínio de interesse no espaço físico, ou sobre uma região especificada dele. A primeira forma, apresentada em [51] e [82], resulta numa avaliação global da malha, que permite verificar, por exemplo, se a precisão com que esta foi gerada é suficiente para garantir a qualidade dos resultados, quanto às propriedades em questão. A segunda permite analisar aspectos particulares de uma dada geometria, como bordos de ataque e de fuga de perfis aerodinâmicos, ou regiões de grande curvatura, de maneira geral.

Em particular no caso da ortogonalidade, pode-se também avaliá-la localmente, por meio do cálculo de g_{12} para os pontos da

malha computacional, uma vez que a nulidade deste elemento do tensor métrico denota, no caso bidimensional, a ortogonalidade local. Esta forma de avaliação da referida propriedade é adotada neste trabalho, juntamente com as já apresentadas.

8.4 A Reiteração da Malha Computacional

Pode-se associar aos critérios de qualidade, o emprego de um dos métodos de geração de sistemas de coordenadas localmente ortogonais. Isso permite a aplicação deste método sobre a região avaliada, seja ela referente à totalidade do domínio de interesse, ou parte dele, com a finalidade de aprimorar sua qualidade. Nesse trabalho, adota-se para isso o método de Ryskin e Leal [66], que enfatiza a condição de ortogonalidade local, em detrimento da uniformidade do espaçamento. Poderia-se adotar o método de Brackbill e Saltzman [14]. Isto não é feito, entretanto, pelos motivos apresentados no item (8.2).

No caso de se proceder essa reiteração sobre uma parte do domínio de interesse, as linhas de coordenada constante que a delimitam são tomadas como condições de contorno com valores prescritos. Estas linhas podem ser internas ao domínio considerado, e portanto sua precisão pode ser inferior à desejada. Assim, seu emprego como condição de contorno implica em introduzir esta imprecisão de posicionamento na região recalculada. Por outro lado, se o principal critério de qualidade é a ortogonalidade local, pode-se proceder a reiteração de uma análise local desta propriedade, e então escolher, como condições de contorno, apenas linhas internas que a satisfaçam individualmente, em um nível de precisão adequado. Pelos mesmos motivos, é imperativo que esta operação seja sempre seguida da reiteração do cálculo de toda a malha.

Nessas condições, a reiteração permite obter aumentos da precisão do sistema como um todo, e isto se verifica nos resultados obtidos. Esta operação poderia ser aperfeiçoada com a utilização do método de Ryskin e Leal [66], considerando os limites da região que forem internos ao domínio como fronteiras com pontos flutuantes. Esta aplicação encontra-se em fase de desenvolvimento.

9. Implementação Numérica dos Métodos Analisados

As equações dos métodos analisados para a geração dos sistemas de coordenadas são resolvidas no espaço matemático transformado. Para isso, têm suas diferenciações aproximadas por diferenças finitas de segunda ordem, resultando num sistema de equações algébricas não lineares. Este sistema é posteriormente resolvido pelo método iterativo de Gauss-Seidel com sobre-relaxações sucessivas.

A aproximação das diferenciações por esquemas de diferenças finitas centradas é comum a todos os métodos analisados. Sua apresentação considera inicialmente os sistemas tridimensionais, sendo, *a posteriori*, simplificada para os sistemas bidimensionais.

9.1. Aproximação das Diferenciações por Diferenças Finitas Centradas.

Considere-se o caso mais geral, em que o espaço físico tem três dimensões e é representado por um sistema de coordenadas cartesianas (x, y, z) . Funções de transformação $\xi(x, y, z)$, $\eta(x, y, z)$ e $\zeta(x, y, z)$ realizam o mapeamento dos pontos deste em um espaço matemático transformado definido pelas coordenadas (ξ, η, ζ) , e as funções inversas $x(\xi, \eta, \zeta)$, $y(\xi, \eta, \zeta)$ e $z(\xi, \eta, \zeta)$ fazem o oposto. Do ponto de vista estritamente conceitual, ambos os espaços são meios contínuos, e as funções de transformação são contínuas e diferenciáveis. Sob o aspecto computacional, a malha corresponde a um conjunto de pontos do espaço transformado, sobre o qual se determinam os valores dessas funções.

Uma vez que o problema consiste em realizar o mapeamento de um retângulo do espaço transformado sobre o domínio de interesse no espaço físico, há liberdade para se prescrever as dimensões desse retângulo. Isto é feito impondo que cada uma de suas arestas (L_1, L_2, L_3) tenha o comprimento correspondente à diferença entre os valores máximo e mínimo de uma das coordenadas.

$$L_1 = (\xi^{\max} - \xi^{\min}), \quad L_2 = (\eta^{\max} - \eta^{\min}), \quad L_3 = (\zeta^{\max} - \zeta^{\min}). \quad (9.1)$$

Em virtude disto, pode se impor que os valores máximos e

mínimos das variáveis (ξ, η, ζ) sejam inteiros e que a diferença entre dois valores consecutivos quaisquer de uma mesma coordenada seja unitária.

$$\Delta\xi = 1, \Delta\eta = 1, \Delta\zeta = 1. \quad (9.2)$$

Desse modo, nos pontos da malha computacional, as coordenadas (ξ, η, ζ) assumem apenas valores inteiros. Isto é, em princípio, muito conveniente para a formulação das aproximações algébricas das diferenciações. Pois permite que se atribua aos valores máximo e mínimo de cada uma das coordenadas o número total de pontos marcados em sua direção e a unidade, respectivamente.

$$\begin{cases} \xi^{\max} = N_{\max}(\xi) = I_{\max}, & \xi^{\min} = 1 \\ \eta^{\max} = N_{\max}(\eta) = J_{\max}, & \eta^{\min} = 1 \\ \zeta^{\max} = N_{\max}(\zeta) = K_{\max}, & \zeta^{\min} = 1 \end{cases} \quad (9.3)$$

Onde os valores I_{\max} , J_{\max} e K_{\max} são constantes inteiras.

Assim, como se determinam os valores de x , y e z apenas sobre os pontos da malha computacional, estes valores são armazenados em matrizes de terceira ordem, na forma X_{IJK} , Y_{IJK} e Z_{IJK} . Os índices (I, J, K) correspondem exatamente às coordenadas do ponto (ξ, η, ζ) sobre o qual as funções $x(\xi, \eta, \zeta)$, $y(\xi, \eta, \zeta)$ e $z(\xi, \eta, \zeta)$ assumem tais valores.

As características acima reunidas são comuns a todas as malhas computacionais empregadas pelos métodos analisados neste trabalho. Ao lado disso tem-se que, embora as equações diferenciais parciais elípticas sejam próprias de cada um desses métodos, todas envolvem derivadas parciais de x , y e z , de primeira e segunda ordens, que são aproximadas da mesma forma, por diferenças algébricas centradas.

A dedução das expressões de diferenças centradas que aproximam essas derivadas, encontrada em Hornbeck [34], baseia-se na expansão em série de Taylor da função a ser derivada, sobre um trecho do eixo da variável de derivação, centrado no ponto em que se vai avaliá-la. Adota-se para esse trecho um comprimento igual a um múltiplo da amplitude do intervalo entre dois pontos consecutivos do mesmo eixo. Apresentam-se abaixo somente as deduções das derivadas de segunda ordem mista e de primeira

ordem nas fronteiras. A primeira com a finalidade de ilustrar o procedimento, e a segunda porque Thompson et al. [77] apresentam apenas sua forma final.

Adota-se a notação indicial, e faz-se referência direta ao fato de que os índices (I,J,K) correspondem aos valores de (ξ, η, ζ) , no ponto considerado.

$$\begin{cases} \xi = \xi^1 \rightarrow I \\ \eta = \xi^2 \rightarrow J \\ \zeta = \xi^3 \rightarrow K \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} x = x^1 \\ y = x^2 \\ z = x^3 \end{cases} \quad (9.4)$$

Ambas as derivadas de primeira e segunda ordens são aproximadas por expressões que apresentam erro de segunda ordem, com respeito ao truncamento da série de Taylor.

Considerando a expressão (9.2), a derivada de primeira ordem de x^1 com respeito a ξ^j assume a forma:

$$\frac{\partial x^1}{\partial \xi} = \frac{x^1(I+1, J, K) - x^1(I-1, J, K)}{2} \quad (9.5)$$

$$\frac{\partial x^1}{\partial \eta} = \frac{x^1(I, J+1, K) - x^1(I, J-1, K)}{2} \quad (9.6)$$

$$\frac{\partial x^1}{\partial \zeta} = \frac{x^1(I, J, K+1) - x^1(I, J, K-1)}{2} \quad (9.7)$$

E as derivadas de segunda ordem, segundo uma mesma variável:

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi^2} = x^1(I+1, J, K) - 2x^1(I, J, K) + x^1(I-1, J, K) \quad (9.8)$$

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \eta^2} = x^1(I, J+1, K) - 2x^1(I, J, K) + x^1(I, J-1, K) \quad (9.9)$$

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \zeta^2} = x^1(I, J, K+1) - 2x^1(I, J, K) + x^1(I, J, K-1) \quad (9.10)$$

A derivada de segunda ordem mista é deduzida para o caso em que $\zeta = C$, onde C é uma constante. Para isso, expande-se a função

$x^1(\xi, \eta, C)$ em série de Taylor, para os seguintes pontos¹:

$$\begin{aligned} x^1(\xi + \Delta\xi, \eta + \Delta\eta, C) &= x^1(\xi, \eta, C) + (\Delta\xi x^1_{\xi} + \Delta\eta x^1_{\eta}) + \\ &+ \frac{1}{2!}(\Delta^2 \xi x^1_{\xi\xi} + 2\Delta\xi\Delta\eta x^1_{\xi\eta} + \Delta^2 \eta x^1_{\eta\eta}) + \dots \end{aligned} \quad (9.11)$$

$$\begin{aligned} x^1(\xi - \Delta\xi, \eta - \Delta\eta, C) &= x^1(\xi, \eta, C) - (\Delta\xi x^1_{\xi} + \Delta\eta x^1_{\eta}) + \\ &+ \frac{1}{2!}(\Delta^2 \xi x^1_{\xi\xi} + 2\Delta\xi\Delta\eta x^1_{\xi\eta} + \Delta^2 \eta x^1_{\eta\eta}) + \dots \end{aligned} \quad (9.12)$$

$$\begin{aligned} x^1(\xi + \Delta\xi, \eta - \Delta\eta, C) &= x^1(\xi, \eta, C) + (\Delta\xi x^1_{\xi} - \Delta\eta x^1_{\eta}) + \\ &+ \frac{1}{2!}(\Delta^2 \xi x^1_{\xi\xi} - 2\Delta\xi\Delta\eta x^1_{\xi\eta} + \Delta^2 \eta x^1_{\eta\eta}) + \dots \end{aligned} \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} x^1(\xi - \Delta\xi, \eta + \Delta\eta, C) &= x^1(\xi, \eta, C) + (-\Delta\xi x^1_{\xi} + \Delta\eta x^1_{\eta}) + \\ &+ \frac{1}{2!}(\Delta^2 \xi x^1_{\xi\xi} - 2\Delta\xi\Delta\eta x^1_{\xi\eta} + \Delta^2 \eta x^1_{\eta\eta}) + \dots \end{aligned} \quad (9.14)$$

Admite-se que $\Delta\xi = \Delta\eta = \delta$. Então soma-se a expressão (6.11) a (6.12), e (6.13) a (6.14), após o que subtrai-se da primeira soma o resultado da segunda, obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi \partial \eta} &= \frac{x^1(\xi + \delta, \eta + \delta, C) - x^1(\xi - \delta, \eta + \delta, C) - x^1(\xi + \delta, \eta - \delta, C) + x^1(\xi - \delta, \eta - \delta, C)}{4\delta^2} \\ &+ c(\delta^2) \end{aligned} \quad (11.15)$$

Considerando que, no caso presente, $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\zeta = \delta = 1$, há correspondência entre (I, J, K) e (ξ, η, ζ) , e as derivadas mistas com respeito às outras variáveis obtêm-se de modo análogo:

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi \partial \eta} = \frac{x^1(I+1, J+1, K) - x^1(I-1, J+1, K) - x^1(I+1, J-1, K) + x^1(I-1, J-1, K)}{4} \quad (9.16)$$

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \eta \partial \zeta} = \frac{x^1(I, J+1, K+1) - x^1(I, J-1, K+1) - x^1(I, J+1, K-1) + x^1(I, J-1, K-1)}{4} \quad (9.17)$$

¹Os índices subscritos (ξ, η, ζ) designam derivações.

$$\frac{\partial^2 x^1}{\partial \zeta \partial \xi} = \frac{x^1(I+1, J, K+1) - x^1(I-1, J, K+1) - x^1(I+1, J, K-1) + x^1(I-1, J, K-1)}{4} \quad (9.18)$$

Na avaliação numérica das derivadas junto às fronteiras do domínio considerado, deve-se observar que não se conhecem valores da função diferenciada que sejam externos a este domínio, posto que esta função normalmente não é sequer definida para tais pontos. Além disso, valores limites não podem ser empregados, pois se referem a meios contínuos, o que não corresponde ao caso presente. Por outro lado, em alguns dos métodos analisados, há a necessidade de se avaliar numericamente as derivadas de primeira ordem junto às fronteiras. Para solucionar esta questão, Thompson et al. [77] propõem uma forma de fazê-lo semelhante àquela apresentada acima, e que também possui erro de truncamento de segunda ordem.

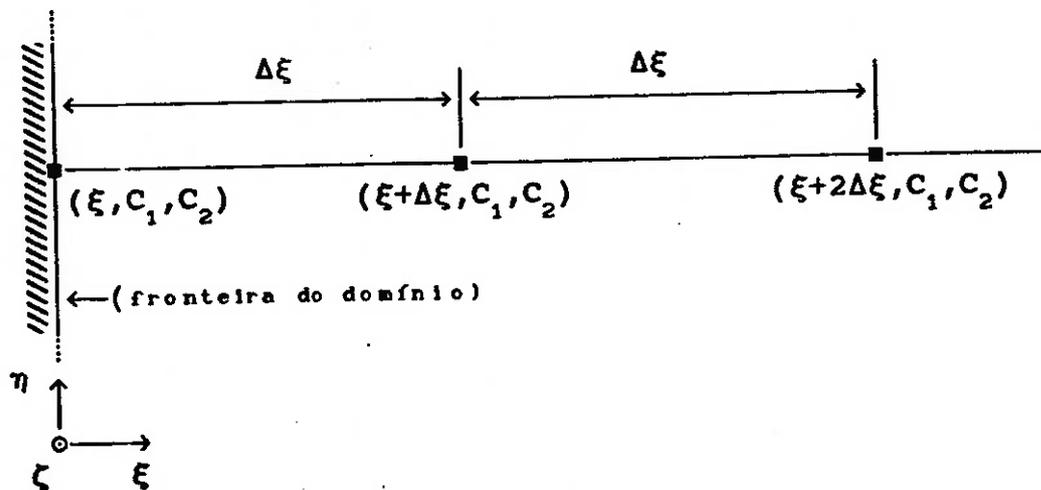


Figura 9.1 - Representação esquemática de um ponto da malha computacional junto à fronteira.

Para proceder sua demonstração, toma-se, sobre a linha ($\eta=C_1$, $\zeta=C_2$) um ponto (ξ, C_1, C_2) junto à fronteira da região de interesse (figura 9.1). Expande-se a função $x^1(\xi, \eta, \zeta) = x^1(\xi, C_1, C_2) = x^1(\xi)$ em série de Taylor, para os pontos $(\xi+\Delta\xi, C_1, C_2)$ e $(\xi+2\Delta\xi, C_1, C_2)$:

$$x^1(\xi + \Delta\xi) = x^1(\xi) + (\Delta\xi)x^1_{\xi} + \frac{(\Delta\xi)^2}{2!}x^1_{\xi\xi} + \frac{(\Delta\xi)^3}{3!}x^1_{\xi\xi\xi} + \dots \quad (9.19)$$

$$x^1(\xi + 2\Delta\xi) = x^1(\xi) + 2(\Delta\xi)x^1_{\xi} + 4\frac{(\Delta\xi)^2}{2!}x^1_{\xi\xi} + 8\frac{(\Delta\xi)^3}{3!}x^1_{\xi\xi\xi} + \dots \quad (9.20)$$

Multiplicando a expressão (9.18) por 4, e diminuindo do resultado, a expressão (9.19), obtem-se a derivada de primeira ordem no ponto (ξ, C_1, C_2) :

$$\frac{\partial x^1}{\partial \xi} = \frac{4x^1(\xi + \Delta\xi) - x^1(\xi + 2\Delta\xi) - 3x^1(\xi)}{2\Delta\xi} + O(\Delta^2\xi) \quad (9.21)$$

A expressão acima (9.21) refere-se ao caso em que a fronteira é representada no espaço transformado pelo plano $\xi = \xi^{\min} = 1$. Expressões análogas podem ser deduzidas para as demais fronteiras. Apresentam-se a seguir tais expressões, já escritas em função dos índices (I, J, K) .

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \xi} \right|_{I=1} = \frac{4x^1(I+1, J, K) - x^1(I+2, J, K) - 3x^1(I, J, K)}{2} \quad (9.22)$$

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \eta} \right|_{J=1} = \frac{4x^1(I, J+1, K) - x^1(I, J+2, K) - 3x^1(I, J, K)}{2} \quad (9.23)$$

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \zeta} \right|_{K=1} = \frac{4x^1(I, J, K+1) - x^1(I, J, K+2) - 3x^1(I, J, K)}{2} \quad (9.24)$$

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \xi} \right|_{I=I_{\max}} = - \left(\frac{4x^1(I-1, J, K) - x^1(I-2, J, K) - 3x^1(I, J, K)}{2} \right) \quad (9.25)$$

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \eta} \right|_{J=J_{\max}} = - \left(\frac{4x^1(I, J-1, K) - x^1(I, J-2, K) - 3x^1(I, J, K)}{2} \right) \quad (9.26)$$

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \zeta} \right|_{K=K_{\max}} = - \left(\frac{4x^1(I, J, K-1) - x^1(I, J, K-2) - 3x^1(I, J, K)}{2} \right) \quad (9.27)$$

Há ainda o caso das superfícies de corte presentes no espaço físico, através das quais se deve impor a continuidade das funções x^1 e de suas derivadas de primeira e segunda ordens. Para preservar essas condições no espaço transformado, onde tais superfícies transformam-se em porções distintas de planos de coordenada constante, Thompson et al. [77], propõem um procedimento baseado na construção camadas auxiliares de pontos.

Estas camadas auxiliares são externas ao domínio, e fazem frente às porções dos planos de coordenada constante, que representam os lados opostos de uma mesma superfície de corte. Aos ditos pontos auxiliares, atribuem-se os mesmos valores que as funções x^1 assumem nos pontos internos à malha, vizinhos ao lado oposto deste corte. Cria-se, assim, a correspondência entre os pontos internos próximos a um dos lados do corte, e aqueles que representam seu lado oposto, através dos pontos auxiliares.

Nessas condições, as derivadas de primeira e segunda ordens podem ser calculadas sobre a linha de corte, exatamente da mesma forma que o são para os pontos internos. Para isso basta que se utilizem os pontos auxiliares nas expressões (9.5), (9.6), (9.7), (9.8), (9.9), (9.10), (9.16), (9.17) e (9.18), sempre que o cálculo da derivada envolva pontos de ambos os lados da linha de corte.

Segundo os autores, este é o procedimento aplicável aos sistemas tridimensionais. E certamente também é válido para o caso bidimensional, analisado a seguir. Do ponto de vista do código computacional, considerada sua implementação, este procedimento seria o mais simples.

9.2 A Formulação das Diferenças Centradas no Caso Bidimensional

Para os problemas bidimensionais, o espaço físico é representado pelas coordenadas cartesianas (x, y) , e o espaço transformado, pelo par de coordenadas (ξ, η) . As funções de transformação correspondem a $\xi(x, y)$ e $\eta(x, y)$, e as funções inversas a $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$.

A formulação das expressões de diferenças finitas centradas

para os sistemas bidimensionais resume-se a uma simplificação daquelas apresentadas acima. Assim, (ξ, η) assumem apenas valores inteiros sobre a malha, em correspondência àqueles registrados para os índices (I, J) . A figura (9.2) representa esquematicamente uma malha bidimensional e a figura (9.3) mostra uma célula computacional típica.

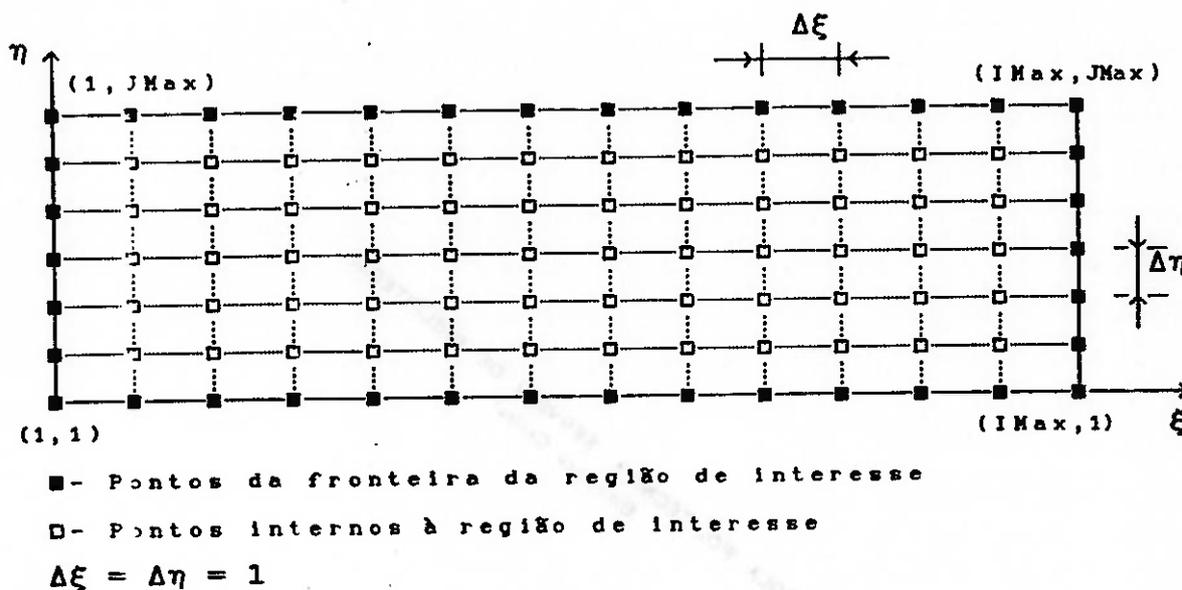


Figura 9.2 - Representação esquemática da malha bidimensional.

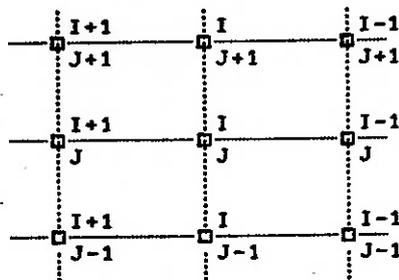


Figura 9.3 - Representação esquemática da célula computacional típica.

As derivadas de primeira ordem ficam:

$$\frac{\partial x^1}{\partial \xi} = \frac{x^1(I+1, J) - x^1(I-1, J)}{2} \quad (9.28)$$

$$\frac{\partial x^1}{\partial \eta} = \frac{x^1(I, J+1) - x^1(I, J-1)}{2} \quad (9.29)$$

As derivadas de segunda ordem:

$$\frac{\partial^2 x^i}{\partial \xi^2} = x^i(I+1, J) - 2x^i(I, J) + x^i(I-1, J) \quad (9.30)$$

$$\frac{\partial^2 x^i}{\partial \eta^2} = x^i(I, J+1) - 2x^i(I, J) + x^i(I, J-1) \quad (9.31)$$

$$\frac{\partial^2 x^i}{\partial \xi \partial \eta} = \frac{x^i(I+1, J+1) - x^i(I-1, J+1) - x^i(I+1, J-1) + x^i(I-1, J-1)}{4} \quad (9.32)$$

As derivadas de primeira ordem nas fronteiras:

$$\left. \frac{\partial x^i}{\partial \xi} \right|_{I=1} = \frac{4x^i(I+1, J) - x^i(I+2, J) - 3x^i(I, J)}{2} \quad (9.33)$$

$$\left. \frac{\partial x^i}{\partial \eta} \right|_{J=1} = \frac{4x^i(I, J+1) - x^i(I, J+2) - 3x^i(I, J)}{2} \quad (9.34)$$

$$\left. \frac{\partial x^i}{\partial \xi} \right|_{I=I_{\max}} = - \left(\frac{4x^i(I-1, J) - x^i(I-2, J) - 3x^i(I, J)}{2} \right) \quad (9.35)$$

$$\left. \frac{\partial x^i}{\partial \eta} \right|_{J=J_{\max}} = - \left(\frac{4x^i(I, J-1) - x^i(I, J-2) - 3x^i(I, J)}{2} \right) \quad (9.36)$$

Nos espaços bidimensionais, as linhas de corte aparecem nos sistemas de coordenadas destinados à análise do escoamento em torno de um ou mais corpos. Esses sistemas podem assumir diversas configurações, como mostra Thompson et al. [77]. No presente trabalho, entretanto, consideram-se apenas as configurações mais adequadas às aplicações desenvolvidas, que são os sistemas dos tipos "O" e "C", representados nas figuras (9.4) e (9.5), respectivamente.

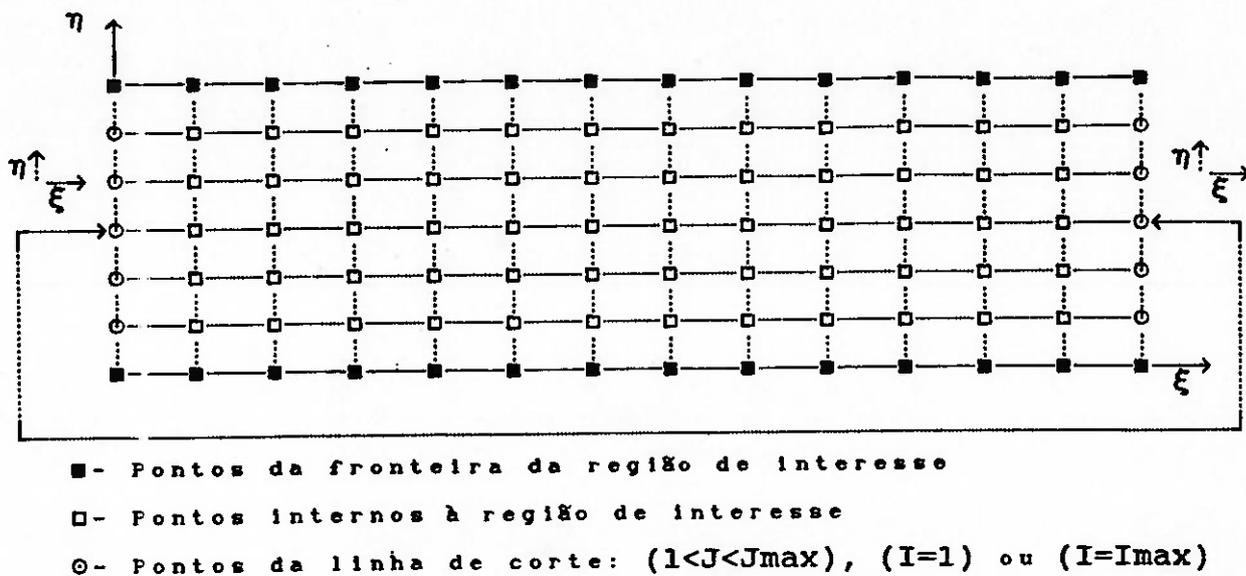
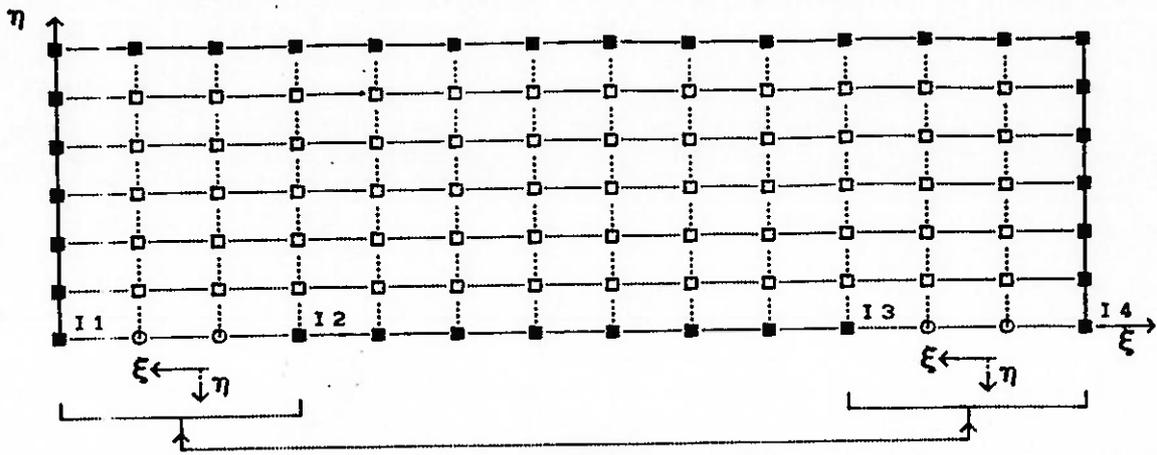


Figura 9.4 - Representação, no espaço transformado, do sistema "O". Os sistemas indicados em linhas pontilhadas representam a correspondência dos lados opostos da linha de corte, no sistema curvilíneo sobre o plano físico.

Na figura (9.4), os sistemas de coordenadas (ξ, η) indicados em linhas pontilhadas representam direção e sentido que essas coordenadas têm no espaço físico, sobre o sistema curvilíneo, em lados opostos da linha de corte. Pode-se notar, para os sistemas do tipo "O", que a orientação dos versores de ξ e η é idêntica em ambos os lados da linha de corte. O mesmo não ocorre, porém, com os sistemas do tipo "C" onde a imagem dos versores ξ e η do lado oposto da linha de corte é especular, como se observa na figura (9.5) abaixo.

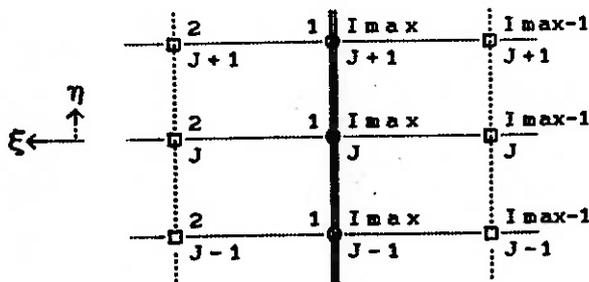
Por outro lado, o cálculo das derivadas ao longo da linha de corte exige que a orientação dos versores de ξ e η seja preservada através dela. A figura (9.6) mostra a configuração das linhas de corte no espaço físico, para células computacionais elementares, nos sistemas dos tipos "O" e "C".

Nos sistemas do tipo "O", tal restrição satisfaz-se automaticamente. E, portanto, há correspondência entre os pontos de um lado e de outro, quanto à orientação dos eixos (ξ, η) , para o cálculo das derivadas. Nestes sistemas, a linha de corte é mapeada por duas linhas de ξ constante, $\xi = \xi^{\min}$ e $\xi = \xi^{\max}$. Sobre ela, a

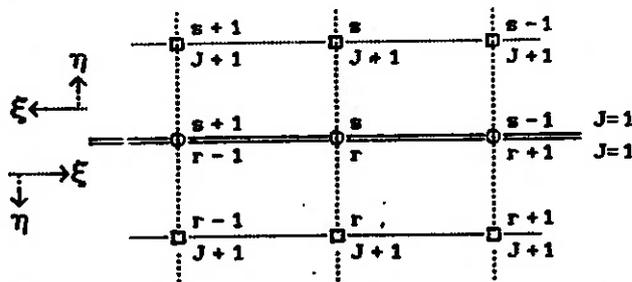


- - Pontos da fronteira da região de interesse
- - Pontos internos à região de interesse
- - Pontos da linha de corte: $(I_1 < I_2)$ e $(I_3 < I_4)$, $(J=1)$.

Figura 9.5 - Representação, no espaço transformado, do sistema "C". Os eixos indicados em linhas pontilhadas representam a correspondência dos lados opostos da linha de corte, no sistema curvilíneo sobre o plano físico.



(a) - sistema do tipo "0"



(b) - sistema do tipo "C"

$s = I$ para $\{I_1 < I < I_2\}$
então, $\{I_1 < s < I_2\}$
define-se: $\{I_3 < r < I_4\}$
 $r = I_4 - s + 1$

Figura 9.6 - Representação das células computacionais elementares no espaço físico, sobre as linhas de corte (traço duplo): a- sistema "0". b- sistema "C".

coordenada η tem variação normal e suas derivadas têm a forma apresentada acima. Para as derivadas em ξ , por outro lado, impõe-se que sejam sempre idênticas para os pontos $(1,J)$ e (I_{\max},J) , que representam a linha de corte (LC). Assim:

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \xi} \right|_{LC} = \frac{x^1(2,J) - x^1(I_{\max}-1,J)}{2} \quad (9.37)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi^2} \right|_{LC} = x^1(2,J) - 2x^1(1,J) + x^1(I_{\max}-1,J) \quad (9.38)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{LC} = \frac{x^1(2,J+1) - x^1(I_{\max}-1,J+1) - x^1(2,J-1) + x^1(I_{\max}-1,J-1)}{4} \quad (9.39)$$

Os sistemas do tipo "C", entretanto, demandam algumas precauções, no sentido de preservar a orientação dos versores ξ e η através da linha de corte, para o cálculo das derivadas. Nestes sistemas (figura 9.5), a linha de corte é representada no espaço transformado por dois trechos distintos $(I_1 < I < I_2)$ e $(I_3 < I < I_4)$, da linha $\eta = J = 1$. As derivadas em ξ são determinadas do mesmo modo que para os pontos internos. Para as derivadas em η , por outro lado, definem-se sobre os intervalos (I_1, I_2) e (I_3, I_4) os índices auxiliares (r) e (s) , conforme indicado na figura (9.6). Para garantir a correspondência necessária entre os pontos dos dois trechos, impõe-se $(L.C. \rightarrow J=1)$:

$$\{s \in (I_1, I_2) \mid s=I\} \Rightarrow \{r \in (I_3, I_4) \mid r=I_4-s+1\} \quad (9.40)$$

$$x^1(s,J) \equiv x^1(r,J) \quad (9.41)$$

Disto resulta para as derivadas:

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \eta} \right|_{LC} = \frac{x^1(s,J+1) - x^1(r,J+1)}{2} \quad (9.42)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \eta^2} \right|_{LC} = x^1(s,J+1) - 2x^1(s,J) + x^1(r,J+1) \quad (9.43)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{LC} = \frac{1}{4} \left(x^1(s+1, J+1) - x^1(s-1, J+1) + \right. \\ \left. - x^1(r-1, J+1) + x^1(r+1, J+1) \right) \quad (9.44)$$

Procedimento semelhante a este deve ser aplicado às linhas de corte que ligam dois corpos distintos, nos casos de sistemas multiplemente conexos. Pois tais linhas são análogas àquelas dos sistemas do tipo "C". Basta que se definam outros pares de índices auxiliares (r_1, s_1) e (r_2, s_2) da mesma forma que (r, s) , para cada um dos trechos das linhas de corte, sobre a reta $(J = 1)$.

Outra forma de tratar as derivações sobre a linha de corte corresponde àquela que faz uso das camadas de pontos auxiliares, apresentada para os sistemas tridimensionais. Nessa metodologia, não há necessidade de impor a correspondência entre os pontos vizinhos à L.C., pois os pontos auxiliares já o fazem. A figura (9.7) mostra a construção dessas camadas, para um sistema do tipo "O".

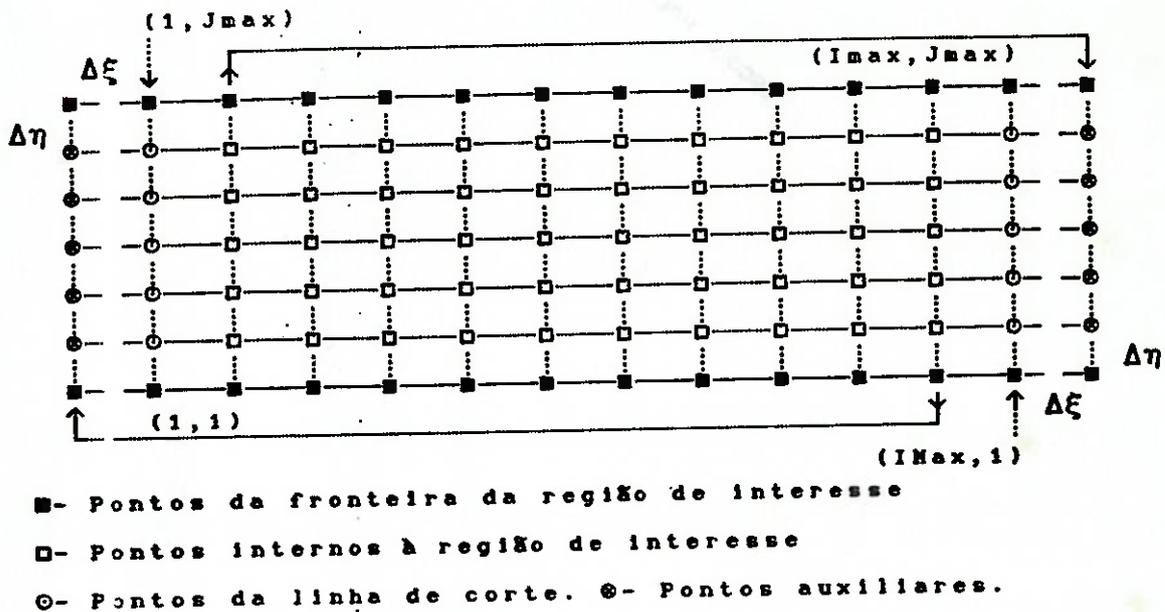


Figura 9.7 - Representação, no espaço transformado, do sistema "O". As camadas de pontos auxiliares situam-se em ambos os lados da linha de corte.

Assim, designando por (A) e por (B) as camadas auxiliares que fazem frente às linhas de $I=1$ e $I=Imax$, respectivamente, dá-se a

a seguinte atribuição de valores às funções x^1 :

$$x^{1(A)}(J) = x^1(\text{Imax}-1, J) \quad \text{e} \quad x^{1(B)}(J) = x^1(2, J) \quad (9.45)$$

E as derivadas em ξ ficam:

$$\left. \frac{\partial x^1}{\partial \xi} \right|_{LC} = \frac{x^{1(B)}(J) - x^{1(A)}(J)}{2} \quad (9.46)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi^2} \right|_{LC} = x^{1(B)}(J) - 2x^1(1, J) + x^{1(A)}(J) \quad (9.47)$$

$$\left. \frac{\partial^2 x^1}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{LC} = \frac{x^{1(B)}(J+1) - x^{1(A)}(J+1) - x^{1(B)}(J-1) + x^{1(A)}(J-1)}{4} \quad (9.48)$$

Esta formulação apresenta a vantagem de simplificar o código computacional, conforme se nota nas expressões das derivadas. Em verdade, esta vantagem é bastante importante para configurações geométricas mais complexas que as analisadas neste trabalho, e que são apresentadas em Thompson et al. [77]. Por outro lado, é evidente que as camadas auxiliares representam um aumento da quantidade de memória computacional utilizada. E esse aumento pode ser significativo para malhas que envolvem grande número de pontos. Por essas razões, e porque a presente análise restringe-se aos sistemas dos tipos "O" e "C", a escolha recai sobre a primeira formulação, que impõe diretamente a correspondência entre os pontos vizinhos à linha de corte.

9.3. A Implementação dos Métodos Numéricos para a Geração dos Sistemas de Coordenadas Ajustados às Fronteiras do Escoamento.

No item 9.2, foram apresentadas as expressões algébricas que aproximam as derivadas parciais por diferenças finitas centradas. É objetivo deste, analisar os métodos propostos para a geração dos sistemas de coordenadas, sob o ponto de vista da técnica numérica empregada na solução de suas equações.

O primeiro passo nesse sentido consiste na substituição das

derivadas parciais presentes nas equações e nos coeficientes, pelas expressões de diferenças centradas correspondentes, definidas no item anterior. Em particular para o jacobiano da transformação e os coeficientes do tensor métrico, que são comuns a todos os métodos, empregam-se em sua avaliação as expressões (7.5) e (8.7), respectivamente. Para os últimos, adota-se a notação abreviada: $g_{22}=\alpha$, $g_{12}=\beta$ e $g_{11}=\gamma$,

O Método de Thompson et al. [79]. A solução numérica do sistema de equações diferenciais parciais (8.22) emprega o método de Gauss-Seidel com sobre-relaxações sucessivas, e os passos podem ser descritos na seqüência:

0). Prescrevem-se as condições de contorno com a fixação dos valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre os pontos das bordas da malha computacional. No caso de domínios múltiplamente conexos, os valores dessas funções sobre os pontos das linhas de corte são prescritos como estimativa inicial, já que tais pontos devem satisfazer às equações do método e, portanto sua forma final é determinada como parte do resultado. Para os pontos internos, por outro lado, adota-se uma estimativa inicial com valores nulos para x e y .

1). Com base na estimativa disponível para os valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$, calculam-se, no ponto (I, J) , os valores dos resíduos em x e y para a iteração corrente (v) : $R_x^{(v)}(I, J)$ e $R_y^{(v)}(I, J)$, respectivamente.

$$\begin{cases} \alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + J^2 \left(P \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = R_x^{(v)}(I, J) \\ \alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + J^2 \left(P \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = R_y^{(v)}(I, J) \end{cases} \quad (9.49)$$

2). Com os resíduos calculados no passo anterior, atualizam-se os valores das funções x e y , na forma:

$$x^{(v+1)}(I, J) = x^{(v)}(I, J) + \frac{\omega}{(2\alpha + 2\gamma)} R_x^{(v)}(I, J) \quad (9.50)$$

$$y^{(U+1)}(I,J) = y^{(U)}(I,J) + \frac{\omega}{(2\alpha+2\gamma)} R_y^{(U)}(I,J) \quad (9.51)$$

Onde (ω) é o coeficiente de sobre-relaxação adotado.

3). Calculam-se as variâncias em x e y , correspondentes aos valores atualizados, para todos os pontos da malha.

$$v^{(1)} = \begin{cases} \left| \frac{x^{(U)} - x^{(U-1)}}{x^{(U)}} \right| & \text{se } x^{(U)} \neq 0 \\ 0 & \text{se } x^{(U)} = x^{(U-1)} = 0 \\ 1 & \text{se } x^{(U)} = 0 \text{ e } x^{(U-1)} \neq 0 \end{cases} \quad (9.52)$$

O valor máximo registrado pela variância sobre a malha (Varmax) é comparado a um número real positivo Δ , que representa o nível de precisão predefinido. Enquanto (Varmax $>$ Δ), retorna-se ao passo 1, reiniciando nova iteração.

O Método de Ryskin e Leal [66]. Este método destina-se à geração de sistemas de coordenadas localmente ortogonais. Por esse motivo, sobre as linhas de corte, onde se prescrevem valores idênticos das funções x e y , a continuidade dessas funções e de suas derivadas de primeira ordem ficam implicitamente garantidas.

O procedimento que se utiliza para a solução de suas equações corresponde ao analisado no item 9, que é descrito em detalhes a seguir:

0). Especificam-se valores de $x(\xi,\eta)$ e de $y(\xi,\eta)$, como condições de contorno de Dirichlet sobre as fronteiras.

1). Obtem-se estimativas iniciais para $x(\xi,\eta)$, $y(\xi,\eta)$ e, a partir destas, também para $f(\xi,\eta)$. Esta última é calculada sobre as fronteiras, por sua definição, as expressões (8.7) e (9.5), e nos pontos interiores pela regra adotada, expressões (9.10), (9.11) e (9.12).

2). Usam-se as condições de Dirichlet estabelecidas no passo 0, e a estimativa de $f(\xi,\eta)$ do passo 1 para obter, por meio do sistema abaixo, novos valores para $x(\xi,\eta)$ e $y(\xi,\eta)$.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{f} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = R_x^{(U)}(I, J) \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(f \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{f} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = R_y^{(U)}(I, J) \end{cases} \quad (9.53)$$

$$x^{(U+1)}(I, J) = x^{(U)}(I, J) + \frac{\omega}{\left(2f + \frac{2}{f} \right)} R_x^{(U)}(I, J) \quad (9.54)$$

$$y^{(U+1)}(I, J) = y^{(U)}(I, J) + \frac{\omega}{\left(2f + \frac{2}{f} \right)} R_y^{(U)}(I, J) \quad (9.55)$$

3). Com os valores de $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ obtidos no passo 2 e as condições de contorno, recalcula-se $f(\xi, \eta)$ nas fronteiras, pela definição.

4). Determinam-se novos valores de $f(\xi, \eta)$ nos pontos interiores, por meio das expressões (9.10), (9.11) e (9.12), usando os valores de f nas fronteiras, obtidos no passo 3, e os novos valores de x e y , obtidos no passo 2.

5). Retorna-se ao passo 2 para reiteração, até que a variação máxima dos resultados satisfaça à precisão prescrita.

O Método de Brackbill e Saltzman [14]. Neste, o método numérico iterativo de Gauss-Seidel é empregado em sua forma generalizada (Meneghini [51]). Assim, precedem a apresentação dos passos do algoritmo propriamente dito, algumas definições necessárias ao seu desenvolvimento.

Em primeiro lugar, as derivadas parciais de suas equações são substituídas pelas expressões de diferenças centradas e sua avaliação, em uma dada iteração (U), resulta em resíduo não nulo. definem-se esses resíduos na forma:

$R_{x(s)}^{(U)}$ e $R_{y(s)}^{(U)}$ como resíduos do sistema de equações (9.34).

$R_{x(o)}^{(U)}$ e $R_{y(o)}^{(U)}$ como resíduos do sistema de equações (9.36).

$R_{x(v)}^{(U)}$ e $R_{y(v)}^{(U)}$ como resíduos do sistema de equações (9.38).

Por serem tais equações acopladas, avaliam-se os resíduos totais em x e em y :

$$R_x^{(U)}(I, J) = R_{x(s)}^{(U)} + \lambda_o R_{x(o)}^{(U)} + \lambda_v R_{x(v)}^{(U)} \quad (9.56)$$

$$R_y^{(U)}(I, J) = R_{y(s)}^{(U)} + \lambda_o R_{y(o)}^{(U)} + \lambda_v R_{y(v)}^{(U)} \quad (9.57)$$

Brackbill e Saltzman apresentam as derivadas parciais, com respeito às coordenadas do espaço físico (x,y), dos resíduos totais:

$$\frac{\partial}{\partial x} [R_x^{(U)}(I, J)] = -2(b_1 + b_3) \quad (9.58)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} [R_y^{(U)}(I, J)] = \frac{\partial}{\partial y} [R_x^{(U)}(I, J)] = -2(a_1 + a_3) \quad (9.59)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} [R_y^{(U)}(I, J)] = -2(c_1 + c_3) \quad (9.60)$$

Também se definem os incrementos em x e em y, entre duas iterações sucessivas (v) e (v+1), como:

$$\delta x^{(v+1)} = x^{(v+1)}(I, J) - x^{(v)}(I, J) \quad (9.61)$$

$$\delta y^{(v+1)} = y^{(v+1)}(I, J) - y^{(v)}(I, J) \quad (9.62)$$

Com essas definições, o procedimento do método iterativo fica estabelecido:

0). Especificam-se valores de $x(\xi, \eta)$ e de $y(\xi, \eta)$, como condições de contorno de Dirichlet sobre as fronteiras.

1). Com base nessas condições de contorno, e nos valores mais recentes disponíveis para x e y, avaliam-se os resíduos parciais dos sistemas (9.34), (9.36) e (9.38), e por eles os resíduos totais, definidos nas expressões (9.56) e (9.57). Naturalmente, todas as diferenciações presentes nas equações desses sistemas, bem como em seus coeficientes, são avaliados pelas expressões de diferenças centradas, acima definidas.

2). Proceder-se a determinação dos incrementos δx e δy , não mais diretamente pelas equações do método, como nos casos anteriores, Mas por um sistema de equações baseado na expansão dos

resíduos totais em séries de Taylor sobre as coordenadas (x,y):

$$R_x^{(U)} + \frac{\partial}{\partial x} [R_x^{(U)}] \delta x^{(U+1)} + \frac{\partial}{\partial y} [R_x^{(U)}] \delta y^{(U+1)} = 0 \quad (9.63)$$

$$R_y^{(U)} + \frac{\partial}{\partial x} [R_y^{(U)}] \delta x^{(U+1)} + \frac{\partial}{\partial y} [R_y^{(U)}] \delta y^{(U+1)} = 0 \quad (9.64)$$

3). A atualização dos valores de x e y faz-se na forma:

$$x^{(U+1)}(I,J) = x^{(U)}(I,J) + \omega \delta x^{(U+1)} \quad (9.65)$$

$$y^{(U+1)}(I,J) = y^{(U)}(I,J) + \omega \delta y^{(U+1)} \quad (9.66)$$

4). Retorna-se ao passo 1, contando com novos valores de x e y, para proceder a reiteração. Esta seqüência encerra-se quando os incrementos nessas variáveis, δx e δy respectivamente, são próximos de zero, dentro de uma precisão predefinida.

Vale ressaltar que, neste método, os multiplicadores de Lagrange assumem valores impostos a priori, que atribuem pesos relativos às propriedades de ortogonalidade local e relação ponderada de volumes.

Em particular no que se refere à primeira, os sistemas de coordenadas que a possuam, se ajustados a domínios multiplamente conexos, satisfazem implicitamente às condições de continuidade das funções $x(\xi,\eta)$ e $y(\xi,\eta)$, bem como de suas derivadas de primeira ordem, sobre as linhas de corte.

Sobre estes sistemas cabe observar que: para garantir a continuidade das derivadas de segunda ordem sobre as linhas de corte, deve-se, em princípio, fazer com que seus pontos passem a satisfazer às equações diferenciais dos métodos, como pontos internos ao domínio, que é o caso do método de Thompson et al. [79], e não mais apenas como condições de contorno. Para tanto, uma possibilidade seria empregar o método de Ryskin e Leal [66], ou de Morice [54], fazendo com que os pontos das linhas de corte sejam flutuantes. Esta possibilidade encontra-se atualmente em estudo.

Os Critérios para a Avaliação da Qualidade das Malhas Computacionais. O cálculo dos funcionais apresentados no item 10,

como forma de avaliar as propriedades dos sistemas de coordenadas, é realizado sobre o domínio transformado, de coordenadas (ξ, η) , por um método de quadratura numérica para integrais múltiplas, baseado na regra do trapézio (Hornbeck [34]). Este autor mostra que o uso dessa regra em uma integração simples resulta em erro de truncamento de segunda ordem. Além disso, ressalta que, na integral iterada, acumulam-se os erros de cada uma das integrações, porém não faz uma análise quantitativa desse erro.

Metodologia: Para o funcional que representa a uniformidade da malha (I_u) , integra-se a expressão (8.16). Para a ortogonalidade local, representada pelo funcional (I_o) , integra-se a expressão (8.17). E para a relação ponderada dos elementos de área, funcional (I_v) , a expressão (8.18) é integrada.

Estas integrações são realizadas sobre todo o domínio de interesse, ou sobre uma porção limitada deste. Procede-se, nas mesmas condições, a integração do jacobiano da transformação, com vistas a determinar a área da região sobre a qual os funcionais são avaliados. Dividem-se pela primeira, os valores obtidos para estes últimos, como forma de obter parâmetros de comparação entre as partes e o todo, que sejam independentes da área de integração.

Vale notar que, em se tratando de quadraturas numéricas, a precisão das integrações depende essencialmente do número total de pontos da malha, ou de parte dela, caso a avaliação não se refira à sua totalidade.

As estimativas de ordem de magnitude dos funcionais, apresentadas nas relações (9.26), também são calculadas, juntamente com os próprios funcionais, para efeito de comparação entre os valores estimados e aqueles efetivamente obtidos.

Faz-se, ainda, a avaliação local da ortogonalidade da malha, por meio do cálculo do coeficiente g_{12} do tensor métrico, empregando as expressões de diferenças finitas apresentadas acima. Este coeficiente é determinado para todos os pontos. A diferença entre seus valores máximo e mínimo, em módulo, é dividida em subintervalos de igual amplitude. E os pontos são classificados como pertencentes a cada um desses subintervalos. Este recurso é bastante útil quando se procura reiterar parte da malha, visando o aprimoramento da ortogonalidade local. Pois, se os pontos que a limitam são tomados como condições de contorno, é razoável fixar como tal, aqueles que mais se aproximem desta condição.

10. Exemplos de Aplicação dos Métodos de Geração dos Sistemas de Coordenadas

A implementação dos algoritmos para a geração dos sistemas de coordenadas, analisados no item anterior, exige o desenvolvimento de códigos computacionais apropriados. Para isso, foram elaborados programas em linguagem Pascal, a partir daqueles desenvolvidos em Meneghini e Pimenta [51], na mesma linguagem.

Realizou-se a aplicação desses algoritmos a uma série de condições de contorno, representando fronteiras de diferentes configurações geométricas, com o propósito de comparar seus resultados. Destes, apresentam-se a seguir os mais significativos, sob o ponto de vista das aplicações que se pretende desenvolver ao longo deste trabalho. Neste sentido, consideram-se dois casos, um envolvendo domínio simplesmente conexo e outro envolvendo domínio duplamente conexo.

Os problemas tridimensionais, ou bidimensionais multiplamente conexos não são considerados em virtude de não pertencerem ao escopo das aplicações deste trabalho, embora sua formulação tenha sido discutida nos itens 7, 8 e 9.

Os métodos empregados na geração dos sistemas de coordenadas apresentados a seguir são indicados nas figuras. O valor padrão adotado para a precisão numérica das soluções é de $\Delta=10^{-5}$. Caso seja adotado um valor diferente do padrão, este é indicado nos resultados.

Domínio simplesmente conexo.

Utiliza-se o perfil de um difusor, bidimensional, cujas paredes obedecem a uma expressão baseada na função tangente. Trata-se de uma configuração geométrica que proporciona condições de contorno livres de descontinuidades angulares e cujas linhas estão próximas da condição de ortogonalidade. Ao reunir tais características, essas condições de contorno podem ser prescritas a qualquer dos métodos analisados, com o propósito de comparar seus resultados.

A malha computacional considerada apresenta 40 pontos na direção ξ , e 20 pontos na direção η (figura 10.1).

O primeiro método utilizado para a geração do sistema de coordenadas é o de Thompson et al. [79], sem o controle do espaçamento, ou seja, assumindo para as funções de controle $P(\xi, \eta) = Q(\xi, \eta) = 0$. A estimativa inicial assumiu valores nulos para as funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$, na região interna do domínio. O fator de sobre-relaxação foi de $\omega = 1,5$ e o número de iterações correspondeu a $n = 212$. O resultado é apresentado na figura 10.1 abaixo, que também relaciona os valores obtidos para os funcionais $I_{(s)}$, $I_{(c)}$ e $I_{(v)}$, divididos pela área de integração A . Estes representam-se por I_s , I_o e I_v , respectivamente.

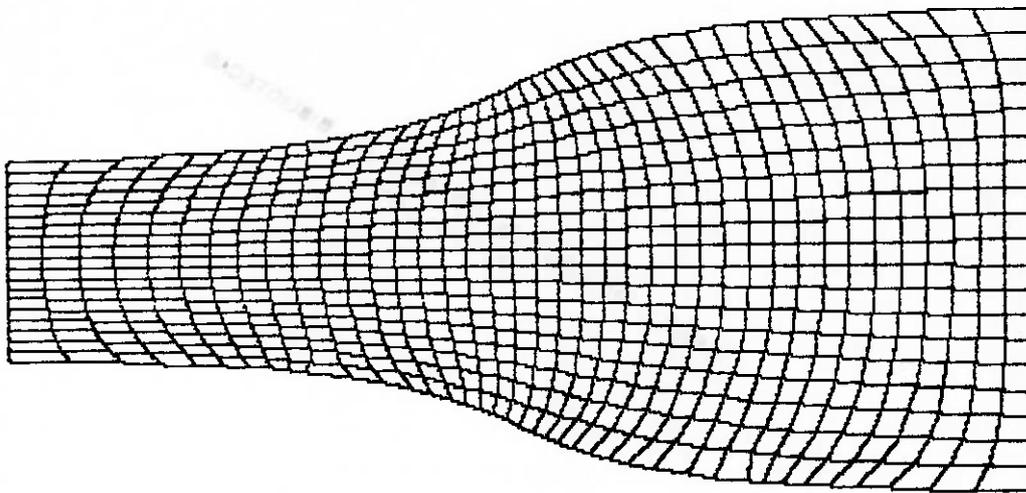


Figura 10.1 - Malha gerada pelo método de Thompson et al. [79], com $P = Q = 0$, $\omega = 1,5$ e $n = 212$. $I_s = -6,1 \cdot 10^2$, $I_o = 2,1 \cdot 10^{-4}$, $I_v = 4,4 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

Posteriormente, tendo essa malha como estimativa inicial, empregou-se o método de Thompson et al. [79], com controle do espaçamento, para provocar a atração das linhas de η constante para as linhas de $\eta_{(1)} = 1$ e $\eta_{(2)} = 20$. Para isso, empregam-se as funções P e Q na forma sugerida por esses autores (eq. 8.23 e 8.24). Assim, atribui-se aos coeficientes de Q os valores $p_{(1)} = p_{(2)} = 500$, e $r_{(1)} = r_{(2)} = 0,5$. Aos demais coeficientes dessa função, bem como à própria função P , atribui-se o valor 0 (zero). O resultado (figura 10.2) foi obtido ao fim de $n = 300$ iterações, com o coeficiente de sobre relaxação $\omega = 1,2$.

Em condições idênticas, mas partindo de uma estimativa inicial com valores zero, para os pontos do interior do domínio, obteve-se o mesmo resultado após $n = 319$ iterações. Esse resultado não confirma a utilidade de se empregar a primeira malha, obtida com $P = Q = 0$, como estimativa inicial. De fato, uma vez que o sistema de equações do método é válido para ambos os casos, não há razão para supor que tal procedimento seja imprescindível. Porém, como a convergência depende da geometria em estudo, não se descarta, em princípio, a possibilidade de recorrer a este artifício para acelerá-la, em outras situações.

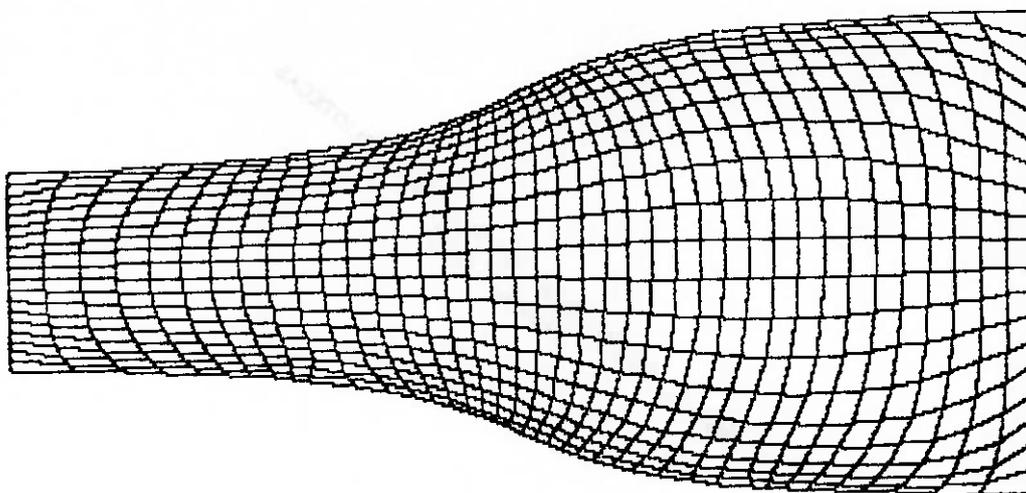


Figura 10.2 - Malha gerada pelo método de Thompson *et al.* [79], com $P = 0$, $Q \rightarrow p_{(1)} = p_{(2)} = 500$, e $r_{(1)} = r_{(2)} = 0,5$ e demais coeficientes nulos. $\omega = 1,2$ e $n = 319$. $I_s = -7,0 \cdot 10^2$, $I_o = 1,0 \cdot 10^{-3}$, $I_v = 4,9 \cdot 10^{-3}$ e $A = 28$.

A primeira observação que se deve fazer quanto aos valores dos funcionais e da área é que seu cálculo está sujeito aos erros inerentes à quadratura numérica, como fica evidente na variação apresentada nesta última, já que as dimensões do domínio são idênticas às da figura 10.1. Por outro lado a variação registrada em I_o , por ser maior, parece indicar um afastamento da condição de ortogonalidade local da malha.

O segundo método a ser empregado corresponde ao de Ryskin e Leal [65]. Para isso partiu-se de uma estimativa inicial com

valores zero e adotou-se um coeficiente de sobre-relaxação $\omega = 1,5$. O resultado (figura 10.3) foi obtido ao fim de $n = 285$ iterações.

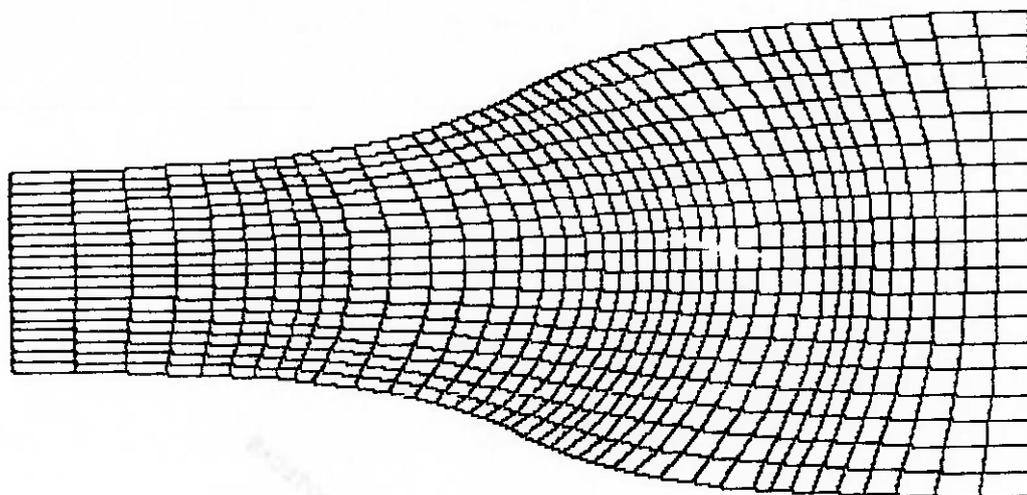


Figura 10.3 - Malha gerada pelo método de Ryskin e Leal [66] com $\omega = 1,5$ e $n = 285$. $I_s = -6,5 \cdot 10^2$, $I_o = 3,3 \cdot 10^{-6}$, $I_v = 4,5 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

Como este método produz sistemas localmente ortogonais, percebe-se claramente a diminuição em I_o que ele proporciona, numa forte indicação de que o sistema aproxima-se da condição de ortogonalidade local. Não se registram, por outro lado, variações sensíveis em I_s e I_v , o que comprova o fato de que tal método não apresenta nenhuma tendência de uniformizar o espaçamento da malha.

A seguir, procedeu-se a reiteração deste sistema de coordenadas, por partes, utilizando o método de Ryskin e Leal [66]. Para esta operação adotou-se o nível de precisão $A = 10^{-8}$, e a malha foi dividida em três partes: (A) limitada por $1 \leq \xi \leq 10$ e $1 \leq \eta \leq 20$. (B) limitada por $10 \leq \xi \leq 30$ e $1 \leq \eta \leq 20$. E (C) limitada por $30 \leq \xi \leq 40$ e $1 \leq \eta \leq 20$. Estas regiões foram recalculadas na seqüência em que se apresentam, empregando-se como estimativa inicial para a primeira delas o sistema apresentado acima, e para as demais, o resultado obtido na reiteração anterior. As figuras 10.4, 10.5 e 10.6 abaixo apresentam esses resultados.

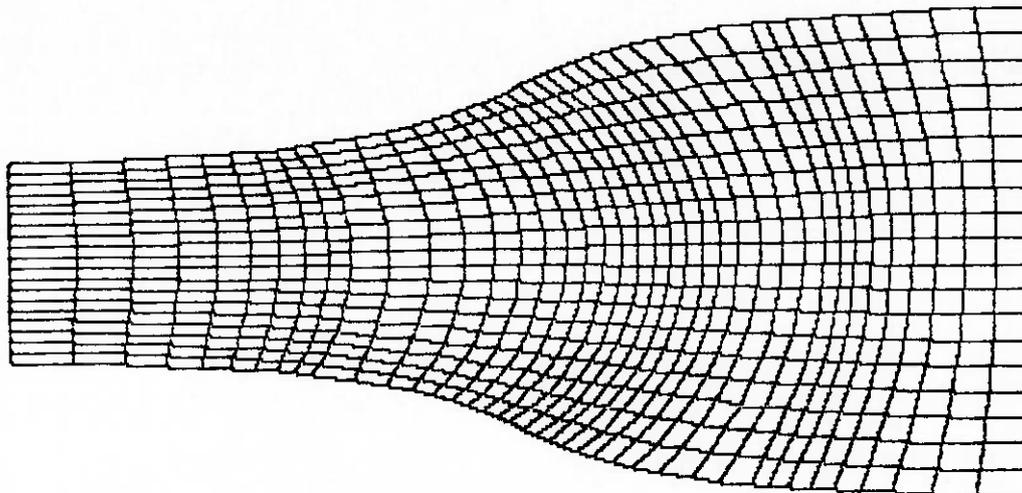


Figura 10.4 - Malha reiterada pelo método de Ryskin e Leal [66].

Região (A), com $\omega = 1,5$ e $n = 160$, $\Delta = 10^{-8}$. $I_s = -6,5 \cdot 10^2$, $I_o = 3,1 \cdot 10^{-6}$, $I_v = 4,5 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

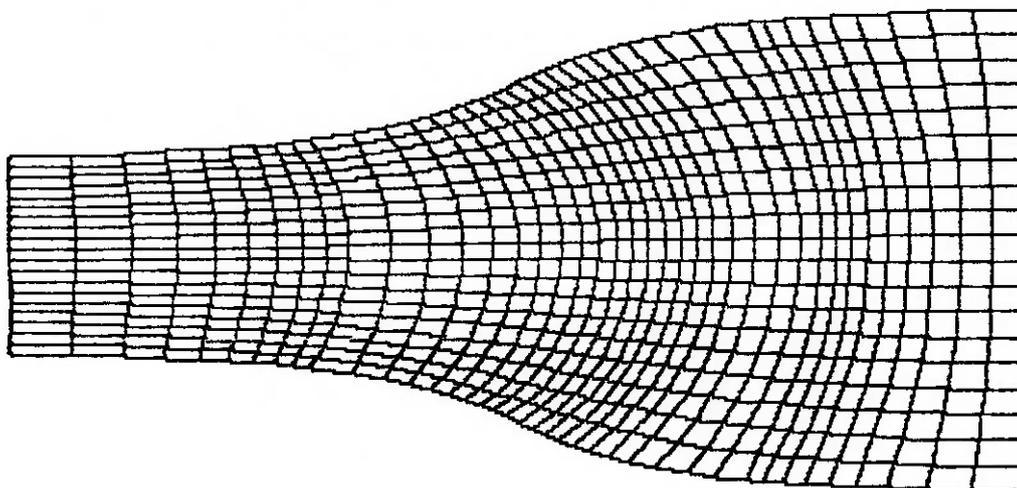


Figura 10.5 - Malha reiterada pelo método de Ryskin e Leal [66].

Região (B), com $\omega = 1,5$ e $n = 350$, $\Delta = 10^{-8}$. $I_s = -6,5 \cdot 10^2$, $I_o = 3,1 \cdot 10^{-6}$, $I_v = 4,5 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

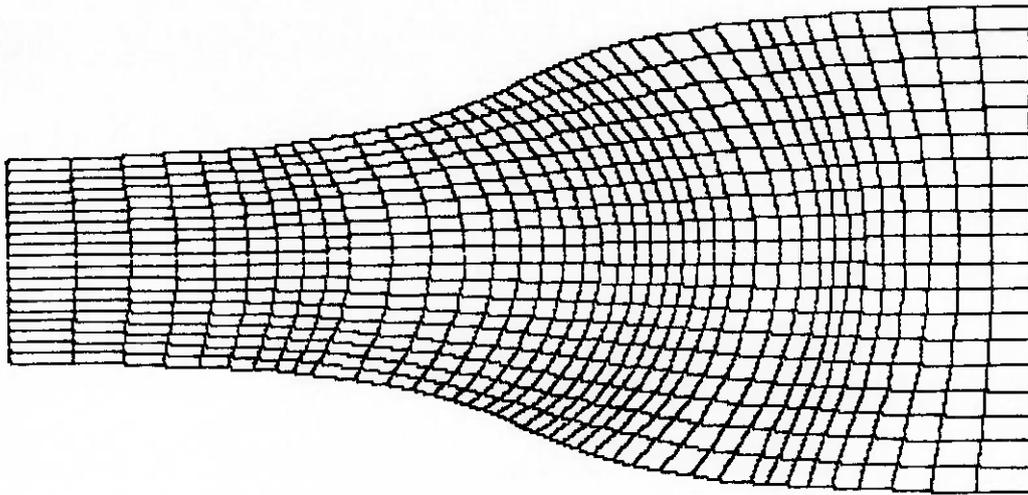


Figura 10.6 - Malha reiterada pelo método de Ryskin e Leal [66].
 Região (C), com $\omega = 1,5$ e $n = 120$, $\Delta = 10^{-8}$. $I_s = -6,5 \cdot 10^2$, $I_o = 2,1 \cdot 10^{-6}$, $I_v = 4,6 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

Ao fim desse processo, realizou-se a reiteração de todo o domínio, para a mesma precisão de $\Delta = 10^{-8}$, alcançando-se a convergência após $n = 500$ iterações (figura 10.7). Resultado idêntico a esse, foi obtido pela aplicação do mesmo método, diretamente ao sistema de coordenadas apresentado na figura 10.3, atribuindo-se à precisão, o valor indicado acima. Neste caso, a convergência deu-se em $n = 490$ iterações.

As reiterações parciais envolvem número menor de pontos, e por isso consomem menor tempo de processamento. Entretanto, devido ao número de passos necessários à convergência deste exemplo, seu emprego não apresentou vantagens, do ponto de vista da utilização dos recursos computacionais.

Deve-se, entretanto, considerar que, se a motivação foi aprimorar a condição de ortogonalidade local, sobre regiões do domínio que não a satisfiziam dentro do nível desejado, esse propósito foi alcançado. Ocorre que, para isso, empregam-se como condições de contorno, linhas internas ao domínio que, embora muitas vezes apresentem valores baixos para g_{12} , não necessariamente apresentam valores baixos para o resíduo do método

até o valor $\omega = 1,0$, ao longo do processo.

Em verdade, duas formas de resolução do sistema composto pelas equações (11.63) e (11.64), para o cálculo do resíduo deste método, foram testadas. O primeiro deles, proposto em Meneghini e Pimenta [51], emprega expressões baseadas na regra de Kramer. O segundo, proposto neste trabalho, emprega um algoritmo baseado na triangularização de matrizes. Neste, o tempo de processamento de cada iteração é maior, em compensação, tem-se revelado mais robusto, quanto aos sistemas mal condicionados que normalmente ocorrem no início do processo. Em particular no caso em estudo, onde foi o único a convergir.

As figuras (10.8) e (10.9) apresentam os resultados da aplicação deste método. Na primeira, impõe-se aos multiplicadores de Lagrange os valores $\lambda_o = 10$ e $\lambda_v = 1$, adota-se como estimativa inicial o sistema representado na figura (10.1) e se obtém o resultado após 856 iterações. A segunda toma como estimativa inicial o resultado da primeira e assume $\lambda_o = 100$ e $\lambda_v = 1$, a convergência é alcançada em 900 iterações.

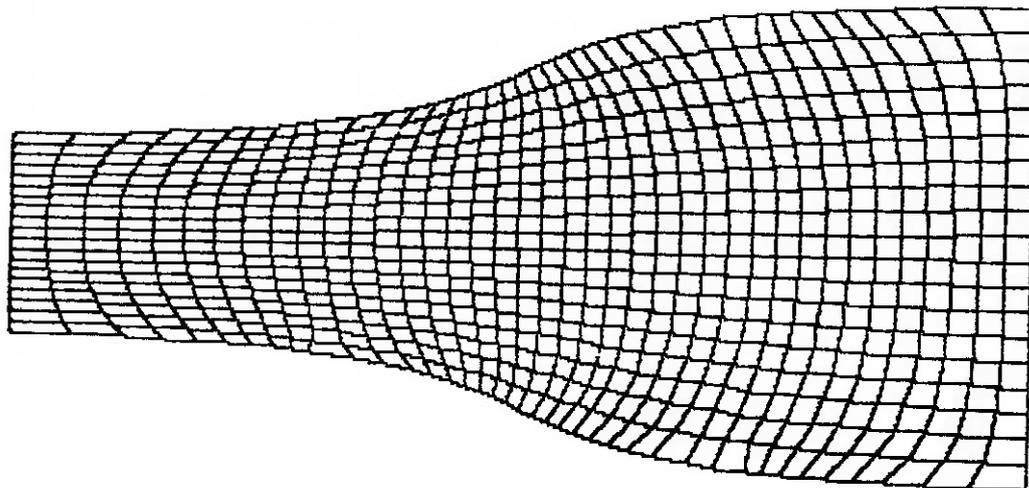


Figura 10.8 - Malha gerada pelo método de Brackbill e Saltzman [14]. $\lambda_o = 10$ e $\lambda_v = 1$. $\omega = \{0,2; 0,4; 0,8; 1,0\}$, $n = 856$. $I_S = -6,1 \cdot 10^2$, $I_o = 2,1 \cdot 10^{-4}$, $I_v = 4,4 \cdot 10^{-3}$, $A = 30$.

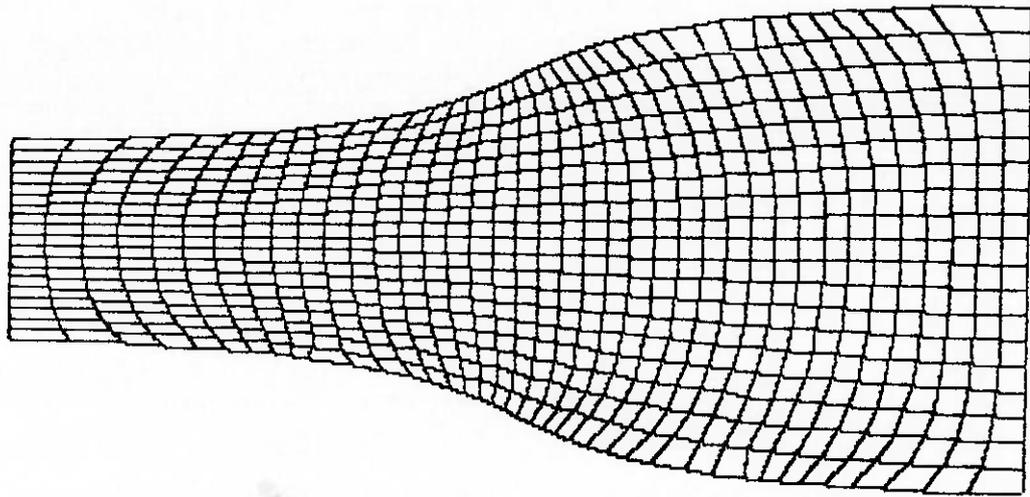


Figura 10.9 - Malha gerada pelo método de Brackbill e Saltzman [14], a partir do sistema da figura (10.8). Com $\lambda_o = 100$ e $\lambda_v = 1$. $\omega = 1,0$, $n = 800$. $I_S = -6,1 \cdot 10^2$, $I_o = 2,1 \cdot 10^{-4}$, $I_v = 4,4 \cdot 10^{-3}$ e $A = 30$.

Pode-se observar dessas figuras que os valores obtidos para os funcionais I_s , I_o e I_v são os mesmos que se registram na figura (10.1), cujo sistema foi obtido pelo método de Thompson et al. [79]. Isso se deve aos valores atribuídos λ_o e λ_v , que representam pesos relativos das propriedades a que se referem. De qualquer forma, o primeiro desses funcionais refere-se à uniformidade do espaçamento, e esta é uma característica que as equações de Laplace também imprimem aos sistemas por ela gerados, como é o caso da figura (10.1).

A comparação destes resultados com o sistema gerado pelo método de Ryskin e Leal para a mesma precisão (figura 10.3), é importante. Pois mostra claramente que este último não apresenta nenhuma tendência a uniformizar o espaçamento. Ao contrário, introduz no sistema curvilíneo as características da distribuição dos pontos nas fronteiras. O mesmo não acontece com o método de Brackbill e Saltzman que, de certa forma, restringe a não uniformidade dessa distribuição às regiões próximas às fronteiras.

Quanto à avaliação local da ortogonalidade, as figuras (10.10) (10.11), (10.12) e (10.13) mostram os pontos com os menores valores de g_{12} , em módulo, para os sistemas das figuras

(10.3), (10.6), (10.7) e (10.9), respectivamente.

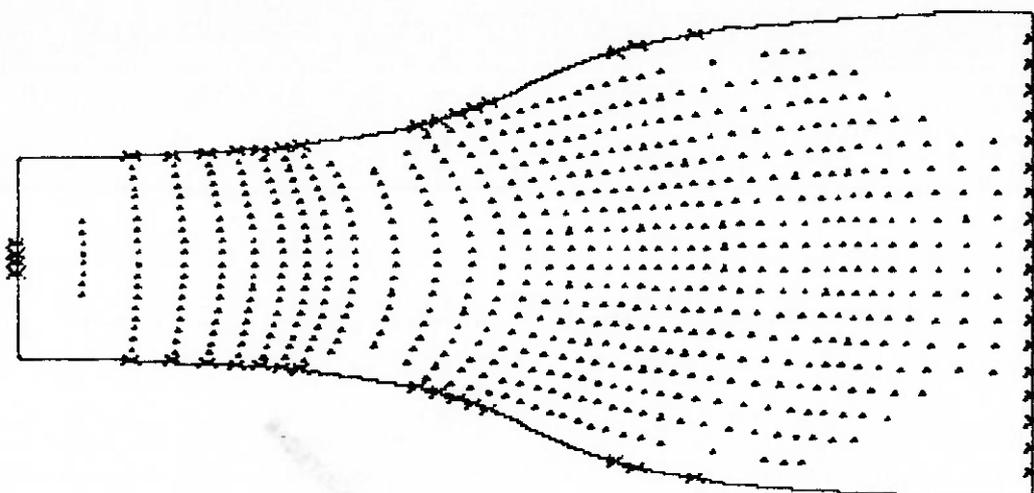


Figura 10.10- Malha da figura (10.3), pontos com:
 $1,4 \cdot 10^{-4} \leq |g_{12}| \leq 1,5 \cdot 10^{-8}$.

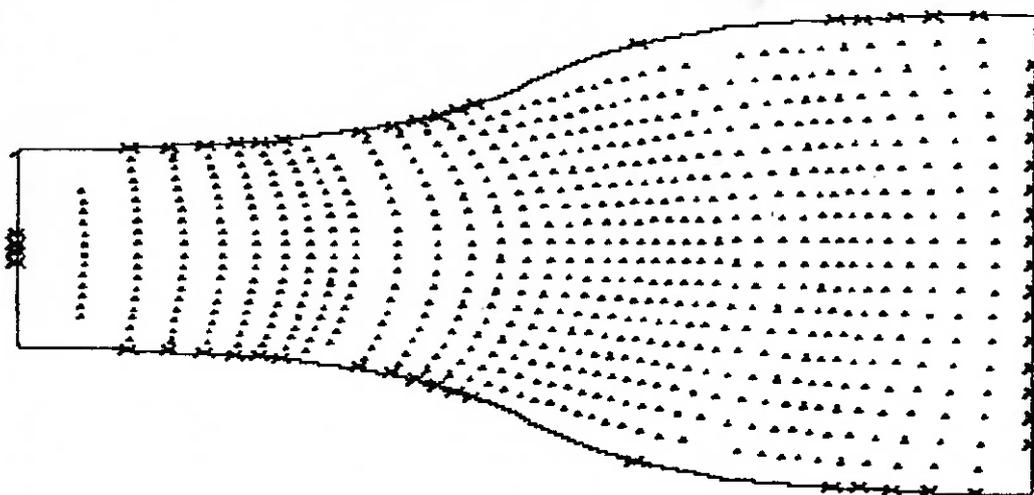


Figura 10.11- Malha da figura (10.6), pontos com:
 $1,4 \cdot 10^{-4} \leq |g_{12}| \leq 4,2 \cdot 10^{-10}$.

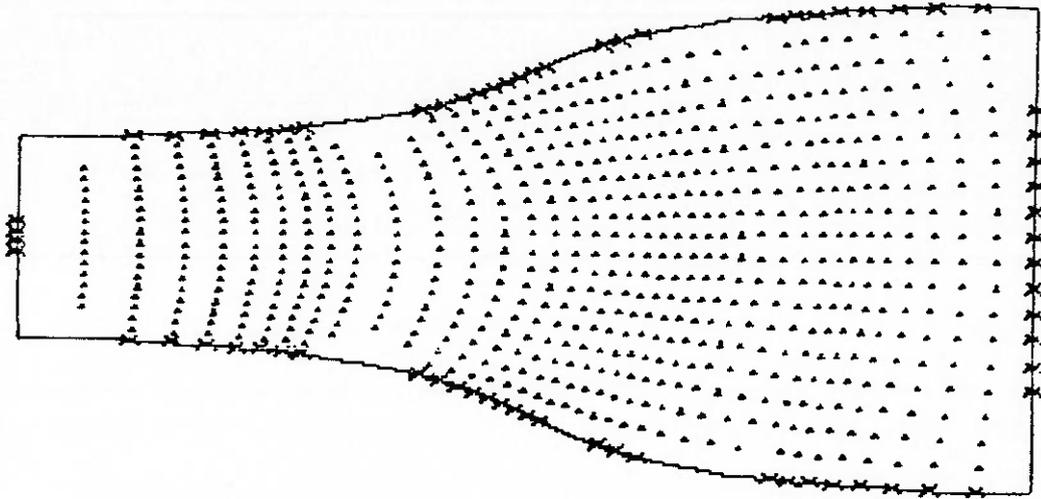


Figura 10.12- Malha da figura (10.7), pontos com:
 $1,4 \cdot 10^{-4} \leq |g_{12}| \leq 2,2 \cdot 10^{-7}$.

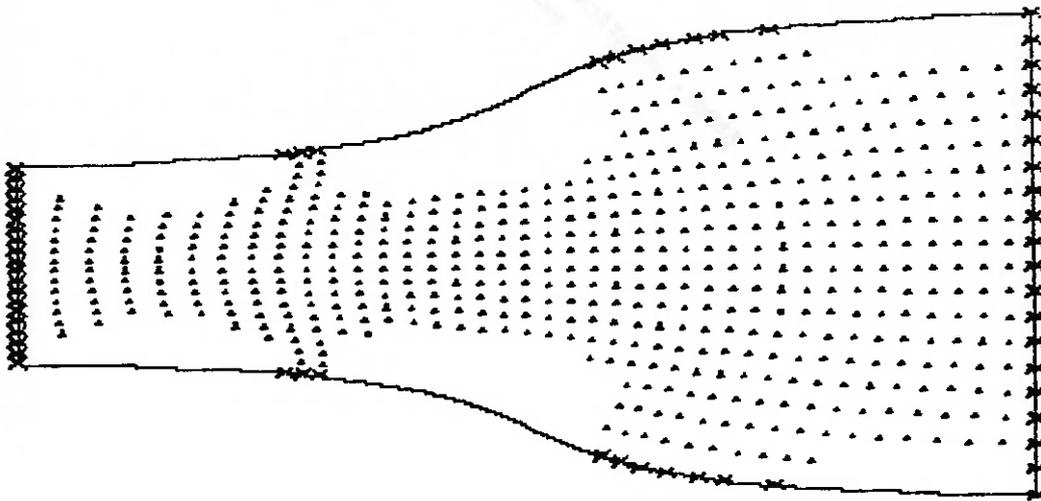


Figura 10.13- Malha da figura (10.9), pontos com:
 $8,2 \cdot 10^{-4} \leq |g_{12}| \leq 6,3 \cdot 10^{-6}$.

Comparando as figuras (10.10) e (10.11), pode-se perceber o aprimoramento da condição de ortogonalidade local obtido pelas reiterações parciais, e finalmente as alterações provocadas pela reiteração de todo o domínio, comparando-as à figura (10.12).

A comparação das figuras (10.10) e (10.13), por outro lado, permite analisar as diferenças entre os sistemas gerados para essa geometria, pelos métodos de Ryskin e Leal [66] e de Brackbill e Saltzman [14], quanto à condição de ortogonalidade local.

Domínio Duplamente Conexo.

Para a análise destes, toma-se como exemplo o perfil aerodinâmico NACA 4412, bidimensional [51]. Os sistemas do tipo "C", de que se utiliza este trabalho, são gerados pelos diferentes métodos considerados acima. A malha computacional considerada apresenta 57 pontos na direção ξ , e 21 pontos na direção η (figura 10.14).

Empregou-se inicialmente o método de Thompson et al. [79], sem o controle do espaçamento, ou seja, com $P = Q = 0$, mas impondo a continuidade e a diferenciabilidade das funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ sobre a linha de corte. A estimativa inicial assumiu valores nulos para essas funções, na região interna do domínio. O valor adotado para o fator de sobre-relaxação foi de $\omega = 1,5$ e o número de iterações correspondeu a $n = 205$. O resultado é apresentado na figura 10.14 abaixo.

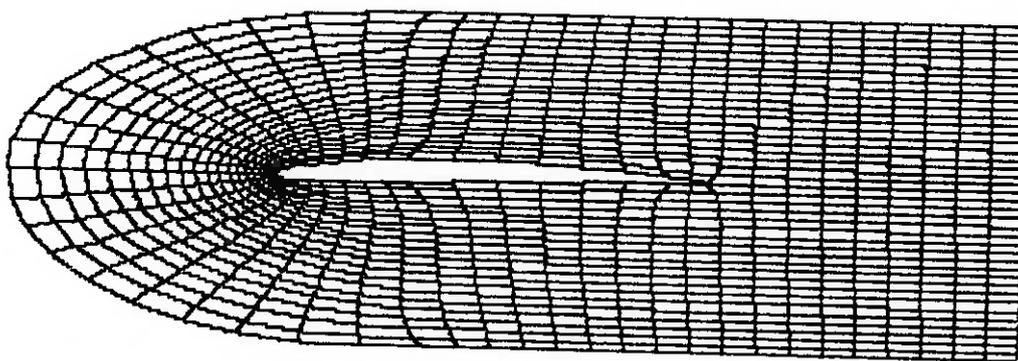


Figura 10.14- Malha gerada pelo método de Thompson et al. [79], com $P = Q = 0$, $\omega = 1,5$ e $n = 205$. $I_s = -9,8 \cdot 10^2$, $I_o = 5,8 \cdot 10^{-5}$, $I_v = 3,0 \cdot 10^{-3}$ e $A = 31$.

Utilizou-se, em seguida, o método de Thompson et al. [79] com controle do espaçamento, para provocar a atração das linhas de η constante para a linha de $\eta_{(1)} = 1$. Para isso, empregaram-se as equações (8.23) e (8.24), atribuindo aos coeficientes de Q os valores $p_{(1)} = 10^3$, e $r_{(1)} = 0,5$. Aos demais coeficientes dessa função, bem como à própria função P, atribuiu-se o valor zero.

Numa primeira tentativa, adotou-se como estimativa inicial o resultado acima (figura 10.14), não se verificando a convergência. Nas mesmas condições, adotou-se uma estimativa inicial com valores nulos, e o resultado foi obtido ao fim de cerca de 300 iterações (figura 10.15) com o coeficiente de relaxação $\omega = 1,0$.

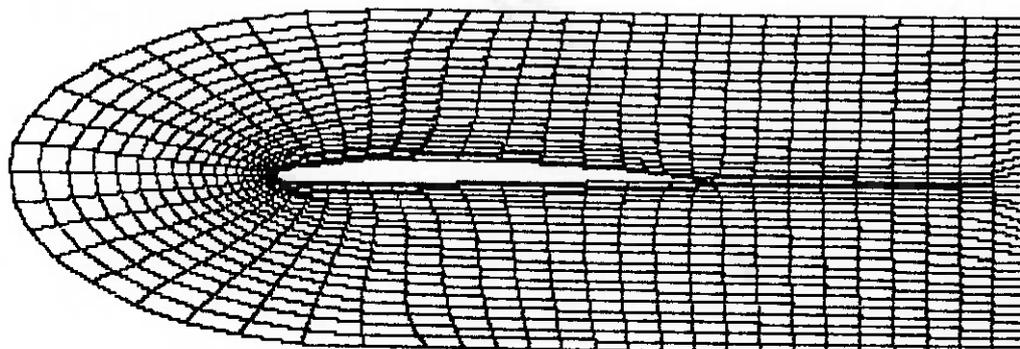


Figura 10.15- Malha gerada pelo método de Thompson et al. [79], com $P = 0$, $Q \Rightarrow p_{(1)} = 1000$, e $r_{(1)} = 0,5$ e demais coeficientes nulos. $\omega = 1,0$ e $n = 300$. $I_s = -1,3 \cdot 10^3$, $I_o = 6,6 \cdot 10^{-5}$, $I_v = 3,0 \cdot 10^{-3}$ e $A = 28$.

Utilizou-se o método de Ryskin e Leal [66] de dois modos. Primeiramente a partir de uma estimativa inicial com valores nulos, assumindo $\omega = 1,5$. O resultado (figura 10.16) foi obtido ao cabo de 176 iterações. No segundo caso, adotou-se como estimativa inicial o resultado apresentado na figura (10.15), mas a aplicação do método deu-se exclusivamente sobre a região $3 \leq \xi \leq 55$ e $1 \leq \eta \leq 21$. Para tanto adotou-se $\omega = 1,5$ e o resultado foi obtido após $n = 435$ iterações. A figura (10.17) mostra todo o domínio e a fig. (10.18)

mostra apenas a região reiterada.

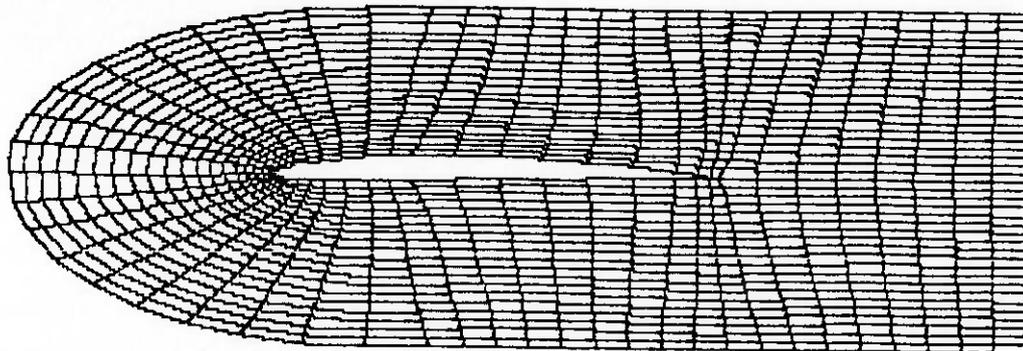


Figura 10.16- Malha gerada pelo método de Ryskin e Leal [66] com $\omega = 1,5$ e $n = 176$. $I_S = -9,6 \cdot 10^2$, $I_o = 1,8 \cdot 10^{-5}$, $I_v = 3,0 \cdot 10^{-3}$ e $A = 32$.

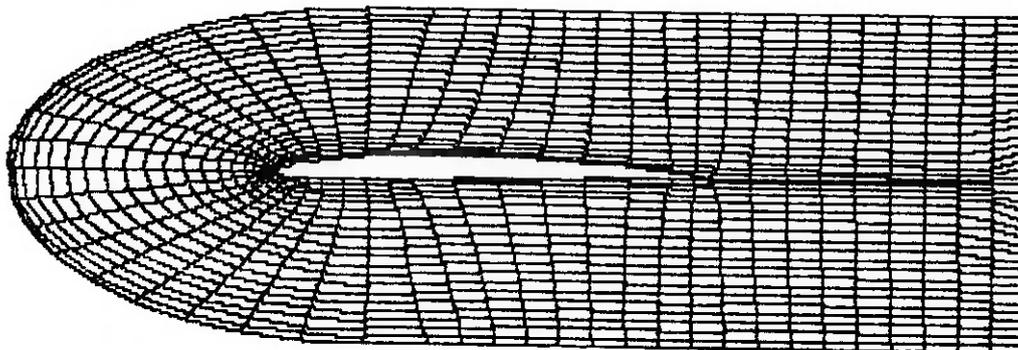


Figura 10.17- Malha reiterada pelo método de Ryskin e Leal [66] na região limitada por $3 \leq \xi \leq 55$ e $1 \leq \eta \leq 21$. Com $\omega = 1,5$ e $n = 435$. Para todo o Domínio tem-se: $I_S = -9,6 \cdot 10^2$, $I_o = 1,8 \cdot 10^{-5}$, $I_v = 3,0 \cdot 10^{-3}$ e $A = 32$.

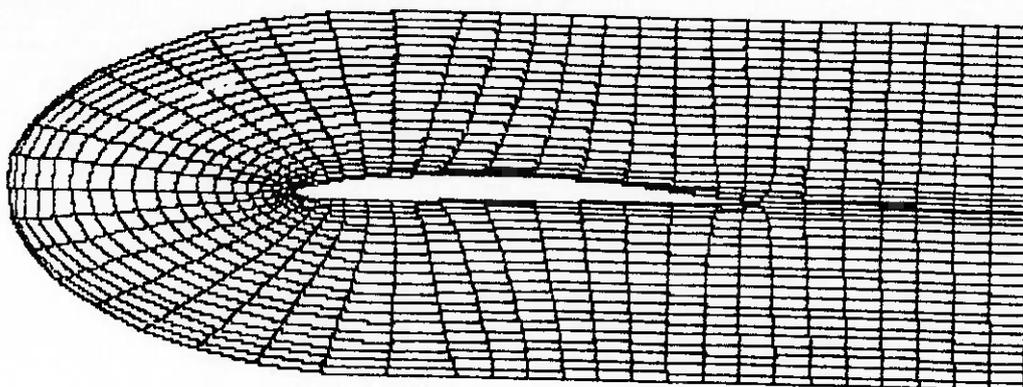


Figura 10.18- Região reiterada pelo método de Ryskin e Leal [66], limitada por $3 \leq \xi \leq 55$ e $1 \leq \eta \leq 21$. $I_s = -1,5 \cdot 10^3$, $I_o = 7,6 \cdot 10^{-6}$, $I_v = 3,1 \cdot 10^{-3}$ e $A = 28$.

A análise desses resultados, revela comportamento semelhante ao apresentado para o domínio simplesmente conexo, quanto à uniformidade do espaçamento. Pois a utilização das funções de controle P e Q, no método de Thompson et al. [79], induz um aumento nos valores dos funcionais I_s e I_v .

Por outro lado, o método de Ryskin e Leal [66] proporciona resultados satisfatórios, tanto para o caso em que se aplica sobre todo o domínio, quanto para a reiteração parcial do sistema obtido com controle do espaçamento. Em particular neste último, reúnem-se duas características importantes que são a ortogonalidade local e o controle do espaçamento.

Deve-se ressaltar que isso só foi possível com o uso da reiteração parcial, uma vez que aplicá-la a todo o domínio produziria, se convergisse, resultado semelhante ao da figura (10.16). Além disso, dos métodos analisados para gerar sistemas ortogonais, apenas os que não procuram uniformizar o espaçamento, como é o caso do método de Ryskin e Leal [66], podem ser aplicados com esta finalidade.

A comparação das figuras (10.17) e (10.18) evidencia a influência das regiões não reiteradas sobre os valores dos funcionais, em particular de I_o . Porém a simulação do escoamento

não emprega tais regiões, restringindo-se ao sistema apresentado na última figura, que reúne as condições apropriadas. Estes motivos justificam o emprego das reiterações parciais.

O método de Brackbill e Saltzman [14] foi utilizado fixando-se os valores $\lambda_o = 100$ e $\lambda_v = 1$. Como estimativa inicial, foi adotado um sistema de coordenadas obtido pela aplicação do método de Thompson et al. [79], sem a imposição da continuidade e diferenciabilidade das funções x e y sobre a linha de corte. O motivo para isso reside no fato de que tal imposição altera a distribuição dos pontos sobre essa linha, o que pode prejudicar a convergência do método de Brackbill e Saltzman [14].

Para o coeficiente de sub-relaxação foram adotados os seguintes valores $\omega = \{0,2; 0,5; 0,8; 1,0\}$ e o resultado foi obtido para $n = 1175$ iterações.

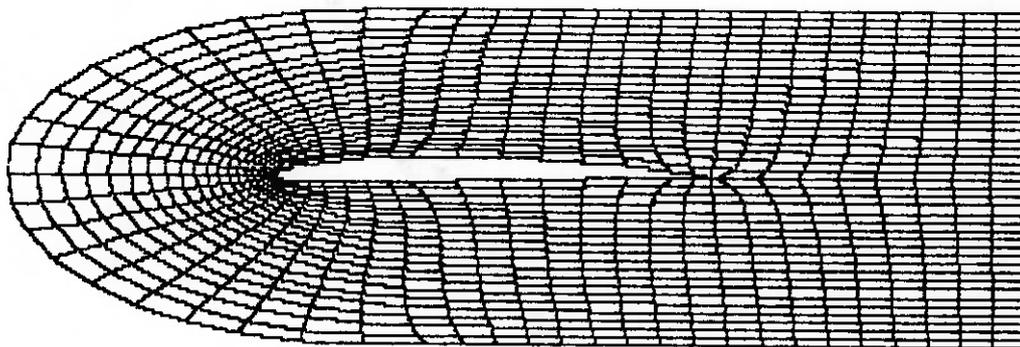


Figura 10.19- Malha gerada pelo método de Brackbill e Saltzman [14]. $\lambda_o = 100$, $\lambda_v = 1$. $\omega = \{0,2; 0,5; 0,8; 1,0\}$, $n = 1175$. $I_s = -9,8 \cdot 10^2$, $I_o = 8,1 \cdot 10^{-5}$, $I_v = 3,1 \cdot 10^{-3}$ e $A = 31$.

Comparando este resultado com aquele obtido pelo método de Ryskin e Leal [66] (figura 10.16), pode se observar que, embora ambos obtenham valores próximos de I_s e I_v , o método de Brackbill e Saltzman [14] proporciona um valor maior de I_o , indicando um sistema mais afastado da condição de ortogonalidade local.

Naturalmente isto é consequência dos valores atribuídos aos multiplicadores de Lagrange que, se modificados, podem produzir resultados diferentes.

As figuras (10.20), (10.21) e (10.22) representam os pontos com os menores valores de g_{12} , em módulo, para os sistemas das figuras (10.16), (10.17) e (10.19), respectivamente.

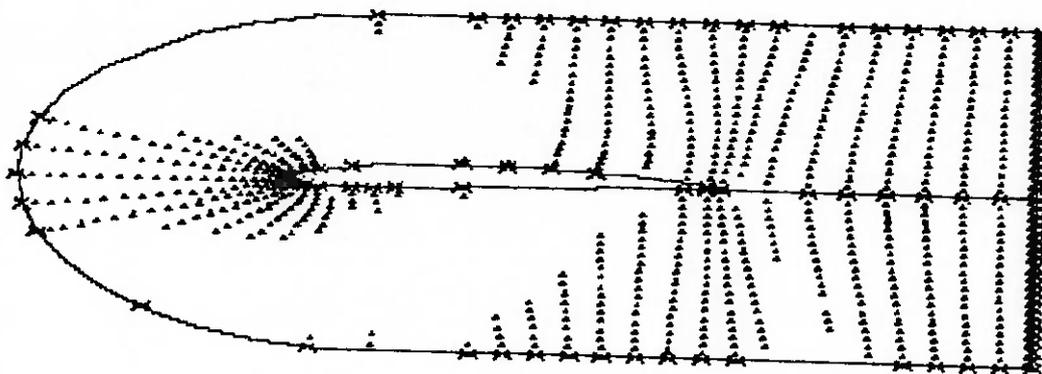


Figura 10.20- Malha da figura (10.16), pontos com: $0 \leq |g_{12}| \leq 2,4 \cdot 10^{-4}$.

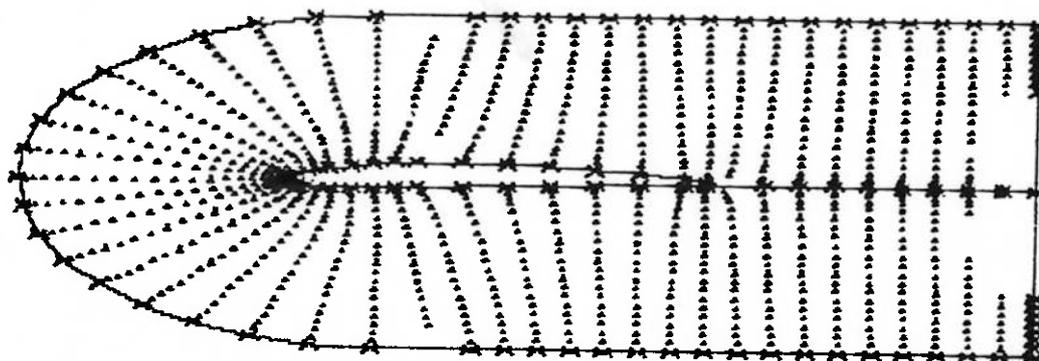


Figura 10.21- Malha da figura (10.17), pontos com: $0 \leq |g_{12}| \leq 4,3 \cdot 10^{-4}$.

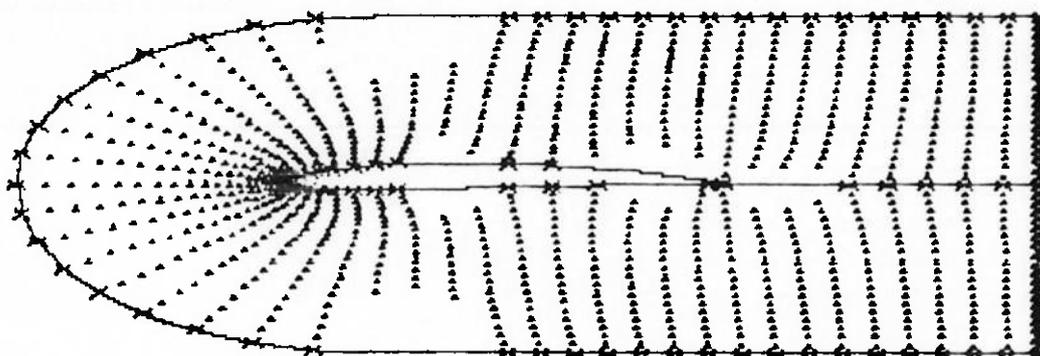


Figura 10.22- Malha da figura (10.19), pontos com: $0 \leq |g_{12}| \leq 7,0 \cdot 10^{-4}$.

Pode-se notar dessas figuras que, para o espaçamento uniforme, o método de Brackbill e Saltzman [14] proporciona um maior número de pontos dentro da faixa de menores valores em módulo para g_{12} . Embora o faça para uma faixa de amplitude um pouco maior. Por outro lado, quando o espaçamento não é uniforme, apenas o método de Ryskin e Leal [66] pode ser aplicado, resultando que quase todos os pontos da malha pertencem a essa faixa, a exceção daqueles da região não reiterada e de dois pontos da fronteira da região reiterada.

O mesmo perfil aerodinâmico também foi testado em sistemas do tipo "O", com a aplicação do método de Thompson et al. [79]. Neste caso, foi imposta a continuidade e a diferenciabilidade das funções x e y , e adotou-se o coeficiente de sobre-relaxação $\omega = 1.85$. E alcançou-se convergência após 220 iterações (fig. 10.23).

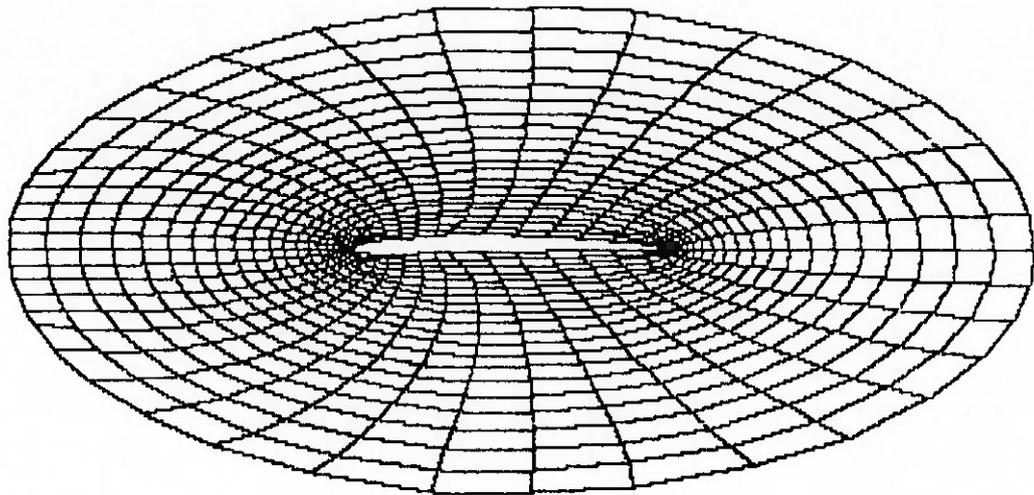


Figura 10.23- Malha gerada pelo método de Thompson et al. [79], com $P = Q = 0$, $\omega = 1,85$ e $n = 220$. $I_s = -6,3 \cdot 10^2$, $I_o = 3,0 \cdot 10^{-4}$, $I_v = 1,2 \cdot 10^{-2}$ e $A = 46$.

Em todos os sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras de um perfil aerodinâmico, pode-se notar o efeito de atração que os trechos convexos introduzem nas linhas que lhes são paralelas, a exemplo do bordo de ataque. Por outro lado, o bordo de fuga, de onde parte a linha de corte que o liga à fronteira externa do domínio, tem características diferentes para os sistemas dos tipos "C" e "O".

Nos primeiros, sobre os dois pontos que coincidem no bordo de fuga, a linha $\eta = 1$ constante tem curvatura finita. Portanto sobre eles as linhas de ξ e η constante não podem ser exatamente perpendiculares, a menos, é claro, que o formato do perfil seja cúspide no bordo de fuga. Nos sistemas do tipo "O", entretanto, o bordo de fuga tem sempre uma curvatura finita e muito alta. No caso específico de um formato cúspide, essa curvatura é infinita.

Nessas condições, os sistemas "C" possuem nos bordos de fuga descontinuidades angulares que, para os métodos analisados e, em particular, o de Thompson et al. [79], não se propagam para dentro do domínio. Nos sistemas "O", por outro lado, a alta curvatura introduz um forte efeito de atração das linhas η constante, por

serem estas paralelas a uma fronteira fortemente "convexa¹". Este efeito, que pode ser observado na figura (10.23) acima, foi apontado por Thompson et al. [77], na aplicação de seu método.

Conclusões.

Além dos resultados apresentados, várias outras configurações geométricas foram analisadas, como por exemplo, a utilização das funções das controle P e Q para os sistemas do tipo "0", a prescrição de diferentes escalas e distribuições de pontos para as fronteiras dessas configurações. Desta análise, as principais conclusões que se obteve revelam que:

-As características de convergência dos métodos considerados dependem fortemente da geometria das fronteiras e da distribuição dos pontos sobre elas. E, além disso, apresentam comportamentos bastante diferenciados para mesmas condições de contorno. Daí a importância de se dispor de diferentes métodos.

-De maneira geral, o método de Thompson et al. [79] mostrou-se o mais robusto, quanto à aplicabilidade. Os métodos para sistemas ortogonais, por outro lado, têm a restrição de que as fronteiras devem ser perpendiculares. Mas, satisfeita esta restrição, o método de Ryskin e Leal [66] foi o que revelou maior aplicabilidade.

-O método de Brackbill e Saltzman [14] apresentou algumas dificuldades quanto à convergência, com respeito à estabilidade e ao número de iterações. Além disso, há a necessidade de testar diversos valores para os multiplicadores de Lagrange até que se obtenha a qualidade adequada para a malha, o que pode ser uma restrição, considerando o número de iterações típico desse método.

-O método de Ryskin e Leal [66] permite, dentro de certos limites, alterações no espaçamento da malha por meio de distribuições apropriadas dos pontos das fronteiras. Enquanto que, no método de Brackbill e Saltzman [14], este recurso depende da implementação de funções de ponderação adequadas.

-As condições de ortogonalidade local e uniformidade do espaçamento são ambas muito importantes para os sistemas de coordenadas ajustados às fronteiras do escoamento, no sentido de diminuir os erros da simulação numérica deste. Porém, considera-se que a primeira deva estar sempre presente, enquanto que a segunda

¹ Este termo tem sentido do ponto de vista numérico apenas.

possa, em princípio, tolerar variações pequenas, proporcionadas pelo recurso ao controle do espaçamento.

Nessas condições, considera-se adequado aos propósitos deste trabalho, empregar preferencialmente o método de Ryskin e Leal [66], utilizando, se necessário, o método de Thompson et al. [79] com controle do espaçamento para obter boas estimativas iniciais. Os funcionais apresentados por Brackbill e Saltzman [14] e Morice [54] devem ser utilizados na avaliação da qualidade dos resultados.

Para os casos de Domínios duplamente conexos, recomendam-se, em princípio, os sistemas do tipo "C" são. Embora tais problemas não pertençam ao escopo do presente trabalho.

11. O Método dos Volumes Finitos Aplicado aos Sistemas de Coordenadas Generalizadas

Conforme estabelecido anteriormente, o emprego de sistemas de coordenadas generalizadas para a simulação numérica pressupõe a determinação prévia das características da métrica desses sistemas, representadas pelo tensor métrico, símbolos de Christoffel e o jacobiano da transformação. Posteriormente, emprega-se um algoritmo para a solução das equações do modelo matemático, escritas na forma generalizada.

A apresentação do Método dos Volumes Finitos (M.V.F.) na sua forma generalizada segue ordem análoga. Numa primeira etapa discutem-se a forma de cálculo dos termos da métrica e a caracterização completa da célula computacional elementar utilizada nas simulações. Apresentam-se, a posteriori, a discretização das equações do modelo matemático para o Método dos Volumes Finitos. Nessa etapa, a exposição obedece a ordem de complexidade dos casos considerados, partindo do problema difusivo, passando ao problema difuso-convectivo e finalmente àquele que envolve a determinação do campo de velocidades do escoamento, quando então se apresentam os algoritmos SIMPLE, SIMPLOC e SIMPLER, baseados no M.V.F.. Apresenta-se ainda a formulação de algoritmo baseado no SIMPLE para a simulação de escoamento compressível envolvendo transferência de calor.

11.1. A Célula Computacional Elementar e a Determinação dos Termos da Métrica dos Sistemas de Coordenadas Generalizadas

A célula computacional elementar corresponde ao volume de controle para o qual se formulam as equações discretizadas do M.V.F.. Para os problemas bidimensionais ela tem, no espaço transformado, a forma quadrada, sendo que o ponto central da área caracteriza as propriedades do V.C. e os pontos centrais de suas faces representam os fluxos que as atravessam.

Empregando a notação adotada por Patankar [51], o ponto central do V.C. considerado recebe a designação P e os pontos vizinhos são nomeados: oeste (W), leste (E), norte (N) e sul (S), conforme sua posição relativa a P, como mostra a Figura (11.1). As

interfaces correspondentes são designadas por (w), (e), (n) e (s), respectivamente. Segundo esse autor, a ocorrência de volumes de controle em que dois lados tem dimensão $(\Delta\xi^1/2)$, junto às fronteiras do domínio, não é recomendada. Para evitá-la, consideram-se os pontos da malha como vértices dos V.C. alocando os demais pontos posteriormente.

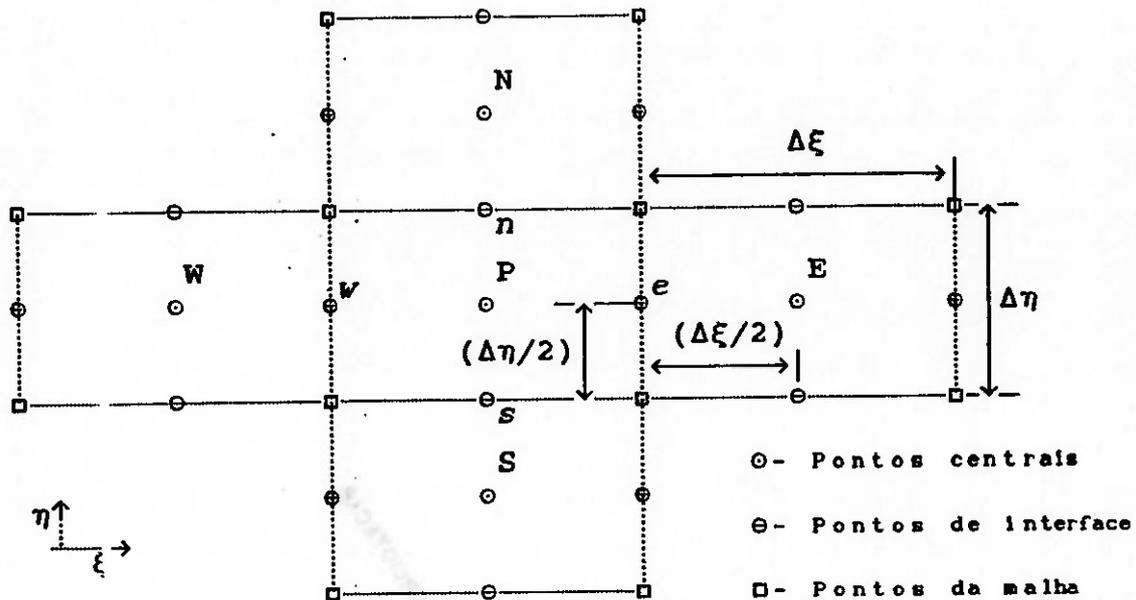


Figura 11.1 - Representação das células computacionais elementares com os pontos que têm relevância para o M.V.F..

No espaço transformado, considerando as coordenadas (ξ, η) , a localização desses pontos (P, w, e, n, s) sobre a célula é imediata, entretanto é preciso obter os valores correspondentes das funções $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$. Para isso podem-se empregar médias aritméticas dos valores dessas funções sobre os pontos da malha, o que corresponde a uma avaliação em primeira ordem, ou realizar expansões em séries de Taylor das mesmas, obtendo avaliações com erros de truncamento de ordem superior.

Adotando-se prática semelhante à utilizada para os métodos de geração das malhas, onde as avaliações numéricas das derivadas são de segunda ordem, optou-se por determinar os valores das coordenadas físicas dos pontos em questão, por meio de expansões em série de Taylor, a partir dos pontos da malha (0), com erro de truncamento de segunda ordem. Vale ressaltar que tal procedimento não tem implicação direta sobre o esforço computacional envolvido

nas simulações numéricas, uma vez que é realizada previamente. Assim, para as coordenadas dos pontos centrais tem-se:

$$\begin{aligned}
 x_{(c)}^i(\xi, \eta) &= x_{(o)}^i\left(\xi + \frac{\Delta\xi}{2}, \eta + \frac{\Delta\eta}{2}\right) = x_{(o)}^i(\xi, \eta) + \left(\frac{\Delta\xi}{2}x_{\xi}^i + \frac{\Delta\eta}{2}x_{\eta}^i\right) + \\
 &+ \frac{1}{2!} \left(\frac{(\Delta\xi)^2}{4}x_{\xi\xi}^i + \frac{(\Delta\eta\Delta\xi)}{2}x_{\xi\eta}^i + \frac{(\Delta\eta)^2}{4}x_{\eta\eta}^i\right) + O(\Delta\xi)^2 + O(\Delta\eta)^2
 \end{aligned}
 \tag{11.1}$$

Considerando que $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$, obtém-se:

$$x_{(c)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi + \frac{\Delta\xi}{2}, \eta + \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i + \frac{1}{2}(x_{\xi}^i + x_{\eta}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i + 2x_{\xi\eta}^i + x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.2}$$

Ou para os pontos próximos às fronteiras, onde se empregam expansões a partir de pontos interiores ao domínio:

$$x_{(c)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi - \frac{\Delta\xi}{2}, \eta + \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i + \frac{1}{2}(x_{\eta}^i - x_{\xi}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i - 2x_{\xi\eta}^i + x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.3}$$

$$x_{(c)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi + \frac{\Delta\xi}{2}, \eta - \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i + \frac{1}{2}(x_{\xi}^i - x_{\eta}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i - 2x_{\xi\eta}^i + x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.4}$$

$$x_{(c)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi - \frac{\Delta\xi}{2}, \eta - \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i - \frac{1}{2}(x_{\xi}^i + x_{\eta}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i + 2x_{\xi\eta}^i + x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.5}$$

Para os pontos nas interfaces (we):

$$x_{(w)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi + \frac{\Delta\xi}{2}, \eta\right) \cong x^i + \frac{1}{2}(x_{\xi}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i)
 \tag{11.6}$$

$$x_{(w)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi - \frac{\Delta\xi}{2}, \eta\right) \cong x^i - \frac{1}{2}(x_{\xi}^i) + \frac{1}{8}(x_{\xi\xi}^i)
 \tag{11.7}$$

E para os pontos nas interfaces (ns):

$$x_{(n)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi, \eta + \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i + \frac{1}{2}(x_{\eta}^i) + \frac{1}{8}(x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.8}$$

$$x_{(n)}^i(\xi, \eta) = x_{(o)}^i\left(\xi, \eta - \frac{\Delta\eta}{2}\right) \cong x^i - \frac{1}{2}(x_{\eta}^i) + \frac{1}{8}(x_{\eta\eta}^i)
 \tag{11.9}$$

Once as derivadas parciais são avaliadas pelos mesmos esquemas de diferenças centradas apresentados no item 11.

Os valores das coordenadas físicas dos pontos da malha, pontos centrais e das interfaces leste-oeste e norte-sul, são armazenados em matrizes distintas: $(X_{(0)}, Y_{(0)})$, $(X_{(c)}, Y_{(c)})$, $(X_{(we)}, Y_{(we)})$ e $(X_{(ns)}, Y_{(ns)})$, respectivamente. Os índices de seus elementos obedecem à relação apresentada na figura (16.2) abaixo.

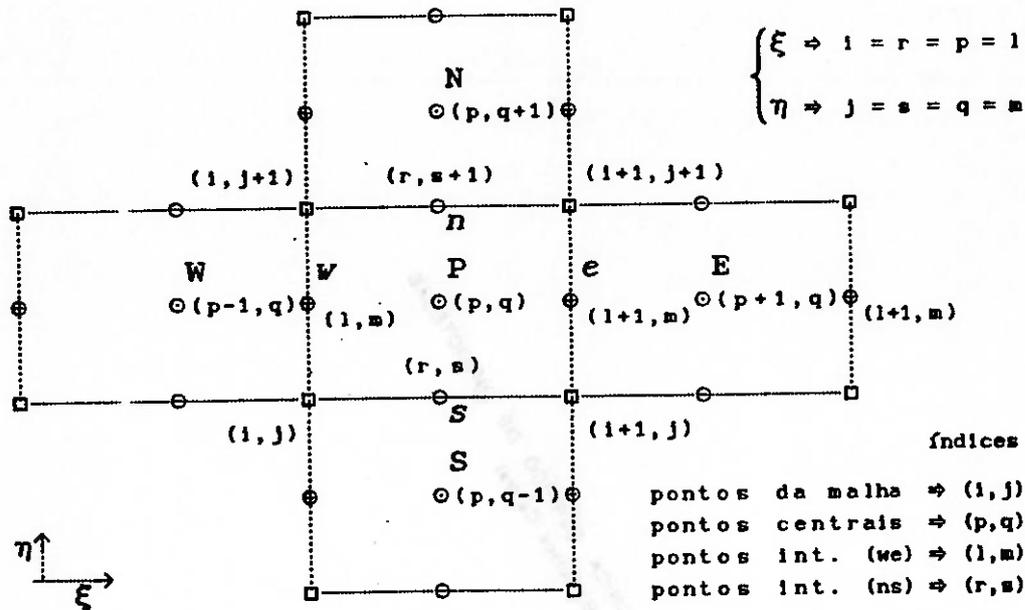


Figura 16.2 - Representação dos índices dos pontos central e das interfaces de um V.C. típico.

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi \Rightarrow i = r = p = 1 \\ \eta \Rightarrow j = s = q = m \end{array} \right. \quad (11.10)$$

Por meio dessas relações determinam-se, para um dado V.C., as coordenadas de seu ponto central (c), dos pontos das interfaces (we) e (ns) e de seus vértices (0). Também se estabelece que, para uma malha com (I_{\max}, J_{\max}) pontos, o número de elementos de cada matriz vale:

$$\left\{ \begin{array}{l} (c) \Rightarrow (I_{\max}, J_{\max}) \\ (c) \Rightarrow (I_{\max} - 1, J_{\max} - 1) \\ (we) \Rightarrow (I_{\max}, J_{\max} - 1) \\ (ns) \Rightarrow (I_{\max} - 1, J_{\max}) \end{array} \right. \quad (11.11)$$

Os termos da métrica do sistema de coordenadas generalizadas, relevantes para a formulação das equações do modelo matemático, são: o jacobiano da transformação (J), o tensor métrico (g^{ij}, g_{ij}), os operadores das transformações entre os espaços físico e matemático transformado ($\beta_j^{i\circ}, \beta_{i\circ}^j$), e os símbolos de Christoffel de primeira e segunda espécies ($\Gamma_{ijk}^l, \Gamma_{ij}^k$).

O jacobiano determina-se por meio da expressão:

$$J = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (11.12)$$

Quanto ao tensor métrico, considera-se que a ortogonalidade local dos sistemas de coordenadas curvilíneos impõe a nulidade dos componentes que não pertencem à sua diagonal principal ($g^{ij} = g^{ji} = g_{ij} = g_{ji} = 0$ para $i \neq j$). Assim, determinam-se seus componentes covariantes g_{11} e g_{22} , por meio das expressões:

$$\begin{cases} g_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \\ g_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \end{cases} \quad (11.13)$$

A partir desses, calculam-se os componentes contravariantes, levando em conta a nulidade dos termos da diagonal principal, segundo as expressões:

$$g^{ri} g_{rj} = \delta_j^i \Rightarrow \begin{cases} g^{11} = (g_{11})^{-1} \\ g^{22} = (g_{22})^{-1} \end{cases} \quad (11.14)$$

O operador da transformação que leva do espaço transformado (índice i) ao espaço físico (índice j) é determinado a partir da expressão:

$$\beta_j^{i\circ} = \frac{\partial x^{j\circ}}{\partial \xi^i} \Rightarrow \begin{cases} \beta_1^1 = \frac{\partial x}{\partial \xi} & , & \beta_2^1 = \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \beta_1^2 = \frac{\partial y}{\partial \xi} & , & \beta_2^2 = \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{cases} \quad (11.15)$$

Para as transformações dos vetores de velocidade entre os

sistemas de coordenadas cartesiano e curvilíneo, usa-se o fato de que no primeiro há coincidência entre as componentes covariantes e contravariantes dos mesmos ($v^{i_0} \equiv v_{i_0}$). Assim, empregam-se as expressões:

$$\begin{cases} v^{i_0} = \beta_j^{i_0} v^j \\ v^r = g^{rs}(v_s) = g^{rs}(\beta_s^{i_0} v_{i_0}) \end{cases} \quad (11.16)$$

Portanto não é necessário determinar o operador da transformação inversa ($\beta_{i_0}^j$).

Os símbolos de Christoffel de primeira espécie são determinados a partir da identidade (A.31):

$$2\Gamma_{ijk} = g_{jk,i} + g_{ki,j} - g_{ij,k} \quad (11.17)$$

Esta identidade também pode ser simplificada para os sistemas localmente ortogonais, em função da nulidade dos termos da diagonal principal do tensor métrico nesses sistemas. Resultando nas expressões:

$$\begin{cases} \Gamma_{111} = + (g_{11,1})/2 \\ \Gamma_{112} = - (g_{11,2})/2 \\ \Gamma_{121} = \Gamma_{211} = + (g_{11,2})/2 \\ \Gamma_{222} = + (g_{22,2})/2 \\ \Gamma_{221} = - (g_{22,1})/2 \\ \Gamma_{212} = \Gamma_{122} = + (g_{22,1})/2 \end{cases} \quad (11.18)$$

Os símbolos de Christoffel de segunda espécie são obtidos a partir dos anteriores por meio da multiplicação com o tensor métrico:

$$\begin{cases}
 \Gamma_{11}^1 &= + g^{11}(g_{11,1})/2 \\
 \Gamma_{11}^2 &= - g^{22}(g_{11,2})/2 \\
 \Gamma_{12}^1 &= \Gamma_{21}^1 = + g^{11}(g_{11,2})/2 \\
 \Gamma_{22}^2 &= + g^{22}(g_{22,2})/2 \\
 \Gamma_{22}^1 &= - g^{11}(g_{22,1})/2 \\
 \Gamma_{21}^2 &= \Gamma_{12}^2 = + g^{22}(g_{22,1})/2
 \end{cases} \quad (11.19)$$

Essas relações são escritas unicamente em função dos componentes contravariantes do tensor métrico. Para isso empregam-se as expressões (11.14), resultando na substituição das derivadas das componentes covariantes pela expressão:

$$g_{jj,1} = \frac{-1}{(g^{jj})^2} g^{jj},1 \quad (11.20)$$

Da mesma forma que para os valores das coordenadas físicas dos pontos centrais e das interfaces, as derivadas parciais das expressões dos termos da métrica são avaliadas por meio dos esquemas de diferenças centradas apresentados no item 11. Além disso, seu cálculo é realizado de forma independente para os pontos da malha (0), centrais (c) e das interfaces (we) e (ns). Com isso se evita fazê-lo por meio de médias aritméticas de seus valores nos pontos da malha, prática não recomendada por Thompson [77].

Os valores do Jacobiano e das componentes não nulas do tensor métrico são armazenados em matrizes distintas, da mesma forma que as coordenadas físicas: $J_{(o)}$, $J_{(c)}$, $J_{(we)}$, $J_{(ns)}$, $g_{(o)}^{ij}$, $g_{(c)}^{ij}$, $g_{(we)}^{ij}$, $g_{(ns)}^{ij}$, $g_{ij(o)}$, $g_{ij(c)}$, $g_{ij(we)}$ e $g_{ij(ns)}$, para $(i=j=1)$ e para $(i=j=2)$. Os operadores da transformação e os símbolos de Christoffel, por serem de utilização menos freqüente, são calculados apenas quando necessário.

O emprego de matrizes distintas para armazenar os dados dos pontos da malha, centrais ou das interfaces (we e ns), visa obter uma relação simplificada entre esses elementos. As conseqüências de tal procedimento sobre os algoritmos de simulação é imediata, permitindo simplificações significativas em sua formulação, especialmente no que se refere ao emprego de malhas deslocadas

entre si para as equações da quantidade de movimento nas direções independentes (ξ) e (η).

11.2. O Problema Difusivo

Tomando a equação de difusão de uma grandeza física escalar genérica, escrita nas coordenadas ($\xi^1 = \xi$ e $\xi^2 = \eta$), do espaço matemático transformado, tem-se:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \frac{1}{J} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \lambda g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \lambda g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right\} + s''' \quad (11.21)$$

Onde s''' representa uma fonte volumétrica referente à grandeza em questão, e λ designa um coeficiente de difusão da mesma. Integrando-se essa expressão sobre o volume de controle indicado figura (11.3):

$$\int_W^N \int_W^E \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} J d\xi d\eta = \int_W^N \int_W^E \frac{1}{J} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \lambda g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \lambda g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right\} J d\xi d\eta + \int_W^N \int_W^E s''' J d\xi d\eta \quad (11.22)$$

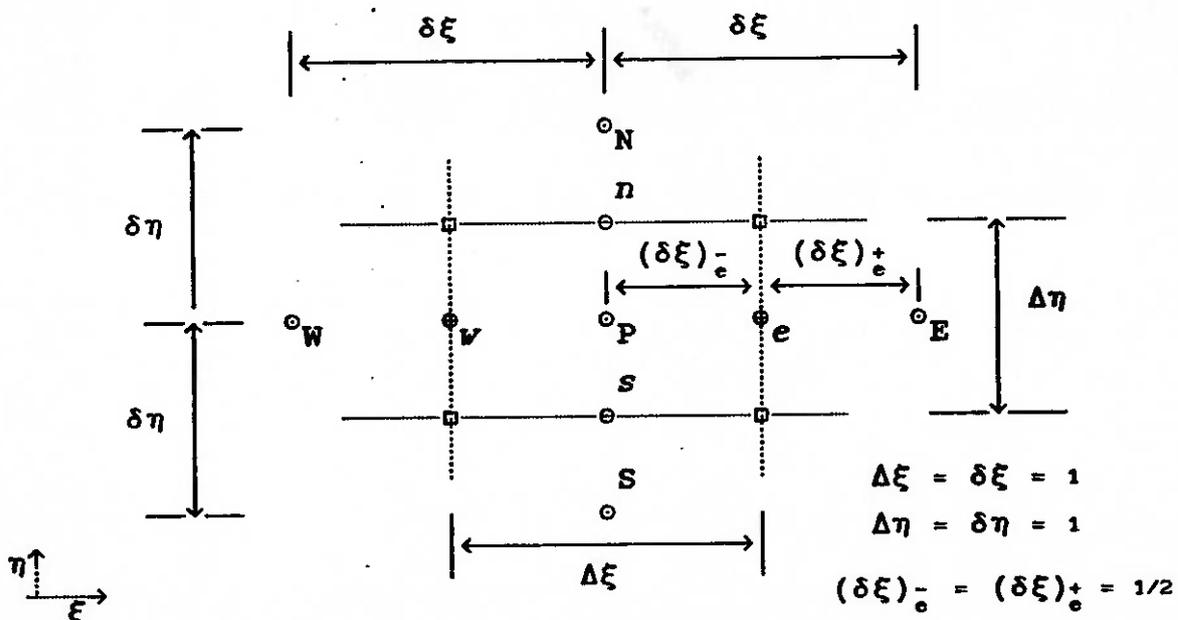


Figura 11.3 - Representação das dimensões do V.C. típico, no espaço matemático transformado.

Admitindo-se que os valores indicados entre parenteses prevaleçam sobre o volume de controle considerado¹, o resultado da integração vale:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right] J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta &= \left\{ \left(J\lambda g^{11} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right)_{(e)} - \left(J\lambda g^{11} \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right)_{(w)} \right\} \Delta\eta + \\ &+ \left\{ \left(J\lambda g^{22} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right)_{(n)} - \left(J\lambda g^{22} \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right)_{(s)} \right\} \Delta\xi + \bar{s} J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta \end{aligned} \quad (11.23)$$

Onçe \bar{s} representa o valor de s''' integrado sobre o volume de controle— evidentemente, se s''' é constante sobre este, então $\bar{s} = s'''$. Assumindo um perfil linear por trechos (Patankar [59]) para a variável ϕ , podem-se aproximar suas derivadas por diferenças centradas, o que resulta:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right] J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta &= \left\{ \left(J\lambda g^{11} \frac{(\phi_E - \phi_P)}{(\delta\xi)} \right)_{(e)} - \left(J\lambda g^{11} \frac{(\phi_P - \phi_W)}{(\delta\xi)} \right)_{(w)} \right\} \Delta\eta + \\ &+ \left\{ \left(J\lambda g^{22} \frac{(\phi_N - \phi_P)}{(\delta\eta)} \right)_{(n)} - \left(J\lambda g^{22} \frac{(\phi_P - \phi_S)}{(\delta\eta)} \right)_{(s)} \right\} \Delta\xi + \bar{s} J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta \end{aligned} \quad (11.24)$$

Nessa expressão, defininem-se os coeficientes:

$$\begin{cases} \varepsilon_E = \left(\frac{Jg^{11}\lambda}{(\delta\xi)} \right)_{(e)} \Delta\eta & a_W = \left(\frac{Jg^{11}\lambda}{(\delta\xi)} \right)_{(w)} \Delta\eta \\ \varepsilon_N = \left(\frac{Jg^{22}\lambda}{(\delta\eta)} \right)_{(n)} \Delta\xi & a_S = \left(\frac{Jg^{22}\lambda}{(\delta\eta)} \right)_{(s)} \Delta\xi \end{cases} \quad (11.25)$$

E pode-se rescrever a equação (11.24) na forma:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right] J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta &= \left\{ a_E(\phi_E - \phi_P) - a_W(\phi_P - \phi_W) + a_N(\phi_N - \phi_P) - \right. \\ &\left. + \varepsilon_S(\phi_P - \phi_S) \right\} + J_{(c)} \bar{s} \Delta\xi\Delta\eta \end{aligned} \quad (11.26)$$

¹ Os subscritos entre parênteses referem-se às interfaces do V.C. onde esses termos são avaliados.

Integrando-se a expressão (11.26), no intervalo de tempo Δt :

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\dot{\varepsilon}(\rho\phi)}{\partial t} J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} \left\{ a_E(\phi_E - \phi_P) - a_W(\phi_P - \phi_W) + a_N(\phi_N - \phi_P) - \right. \\ \left. + \varepsilon_S(\phi_P - \phi_S) + J_{(c)} \bar{\varepsilon} \Delta\xi\Delta\eta \right\} dt \quad (11.27)$$

Para essa integração, adota-se uma formulação totalmente implícita. Isso equivale a assumir que os valores mais recentes das variáveis, instante $(t+\Delta t)$, prevaleçam sobre todo o intervalo de integração (Δt) , ao invés daqueles referentes ao instante anterior, doravante designados (ϕ^0) . Assim, obtém-se:

$$\left[(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0) J_{(c)} \right] \Delta\xi\Delta\eta = \Delta t \left\{ a_E(\phi_E - \phi_P) - a_W(\phi_P - \phi_W) + a_N(\phi_N - \phi_P) - \right. \\ \left. + \varepsilon_S(\phi_P - \phi_S) + J_{(c)} \bar{\varepsilon} \Delta\xi\Delta\eta \right\} \quad (11.28)$$

Empregando-se os coeficientes definidos em (11.25), essa equação pode ser reescrita na forma:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (11.29)$$

Onçe:

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 \quad (11.30)$$

$$b = J_{(c)} \bar{\varepsilon} \Delta\xi\Delta\eta + a_P^0 \phi_P^0 \quad (11.31)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta}{\Delta t} \quad (11.32)$$

Nas expressões (11.25), conforme mencionado anteriormente, os subscritos (w) , (e) , (n) e (s) referem-se às interfaces do volume de controle, onde esses coeficientes são avaliados. Para fazê-lo, considera-se que, em se tratando do espaço transformado, vale: $\Delta\xi = \Delta\eta = \delta\xi = \delta\eta = 1$. Além disso, os valores dos termos da métrica, no caso J , g^{11} e g^{22} , nessas interfaces foram determinados

previamente.

Resta portanto avaliar o coeficiente de difusão (λ). Quando seu valor é constante sobre todo o domínio de interesse, não se encontram maiores problemas. Porém, nos casos em que esse coeficiente depende da variável (ϕ), cujos valores são conhecidos apenas nos pontos centrais (P, E, N e S), Patankar [59] propõe que se faça a avaliação com base nas distâncias entre a interface considerada e os pontos que lhe são adjacentes (figura 11.3), na forma:

$$\lambda_e = \left(\frac{(1-f_e)}{\lambda_P} + \frac{f_e}{\lambda_E} \right) \quad (11.33)$$

Onde os valores de λ_P e λ_E determinam-se a partir de ϕ_P e ϕ_E nos pontos centrais, e define-se $f_e = (\delta\xi)_e / (\delta\xi)$. Como, no espaço transformado, $f_e = 0.5$, resulta:

$$\lambda_e = \frac{2\lambda_P\lambda_E}{\lambda_P + \lambda_E} \quad (11.34)$$

Além disso, é necessário avaliar o termo referente à fonte volumétrica da equação \bar{s} . Se seu valor é constante no domínio de interesse, aplica-se diretamente à expressão (11.31). Se, por outro lado, \bar{s} é função de ϕ , deve-se garantir que a relação entre ambas possa ser representada na forma linear, uma vez que se empregam para resolver as equações do modelo, técnicas de solução de sistemas de equações lineares. Assim, a forma final linearizada dessa relação deve ser do tipo:

$$\bar{s} = s_c + s_p\phi_P \quad (11.35)$$

Onde s_c corresponde a uma constante e s_p representa um coeficiente de proporcionalidade, referente ao valor da variável ϕ sobre o ponto P. Nessas condições o coeficiente a_p e o termo b da equação (11.29) assumem nova forma:

$$\begin{cases} a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - s_p J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta \\ b = a_P^0\phi_P^0 + s_c J_{(c)} \Delta\xi\Delta\eta \end{cases} \quad (11.36)$$

Para que o sistema de equações do modelo, colocadas na forma da expressão (11.31), possa fornecer soluções fisicamente realísticas, é necessário que todos os coeficientes ($a_p, a_w, a_e, a_n, a_s = a_p^0$) possuam o mesmo sinal, positivo, no caso. Essa exigência, estabelecida por Patankar [59], pode ser violada em função do sinal de s_p na expressão (11.36).

Em virtude dessa possibilidade, coloca-se uma restrição a representação linear de $\bar{s}(\phi)$, impondo que $s_p < 0$. Entre as diversas formas de linearização que satisfazem essa restrição, algumas delas discutidas por Patankar [59], destaca-se aquela em que se faz $s_p = 0$ e se determina o termo constante em função dos valores da variável ϕ na iteração anterior (ϕ^*), de modo que:

$$\bar{s} = s_c = s''''(\phi_p^*) \quad (11.37)$$

Essa forma não é sempre a mais indicada, pois pode-se provar [59] que um coeficiente $s_p < 0$ tem o efeito de sub-relaxar o processo iterativo de solução das equações, o que é, em última análise, uma atitude prudente. Por outro lado a prática de fazer $s_p = 0$ é muitas vezes a alternativa mais viável, dada a complexidade da forma que a expressão de $\bar{s}(\phi)$ pode assumir. De fato essa é a prática adotada no presente trabalho, em função das formas que essas funções têm quando as equações do modelo são escritas no espaço transformado, como se pode notar no apêndice B.

11.2.1. Condução de Calor.

Pode-se aplicar diretamente a esse problema os resultados desenvolvidos acima. Para isso, o ponto de partida é a equação que descreve o fenômeno, escrita no sistema de coordenadas generalizadas:

$$c_p \frac{\partial(\rho T)}{\partial t} = \frac{1}{J} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J k g^{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J k g^{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right\} \quad (11.38)$$

Nessas condições, e assumindo que o material que compõe o domínio de interesse tenha propriedades constantes, a variável ϕ corresponde à temperatura, e o coeficiente de difusão do modelo vale $\lambda = k/c_p$, conforme estabelecido no apêndice B.

11.2.2. Condições de Contorno.

As condições de contorno podem ser de dois tipos: temperatura prescrita ou fluxo de calor prescrito. Podendo nesse caso ser, o fluxo, resultante de convecção de calor no meio externo ao corpo sólido considerado, o que implica na necessidade de prescrever o valor do coeficiente de película (h) correspondente.

No primeiro caso, as temperaturas das fronteiras do corpo são conhecidas, não havendo necessidade de formular novas equações discretizadas para os volumes de controle adjacentes a elas. O algoritmo se aplica diretamente, tal como foi formulado acima.

No segundo caso, considera-se um volume de controle adjacente à fronteira, que possua $\Delta\xi=0$ e $\Delta\eta=1$. Por possuir comprimento nulo na direção ξ , esse V.C. não troca calor com seus vizinhos na direção η , tão pouco apresenta geração volumétrica devida à fonte s''' ou termo referente ao transitório, uma vez que $\Delta\xi\Delta\eta=0$. Além disso, deve-se considerar que nele ocorre a coincidência entre as interfaces na direção ξ e o ponto central: $w=p=e$, conforme indica a figura (11.4). Assim, o único vizinho com que esse V.C. interage é aquele que se situa a leste (E). Sua equação é obtida com a introdução dessas condições na expressão (11.22):

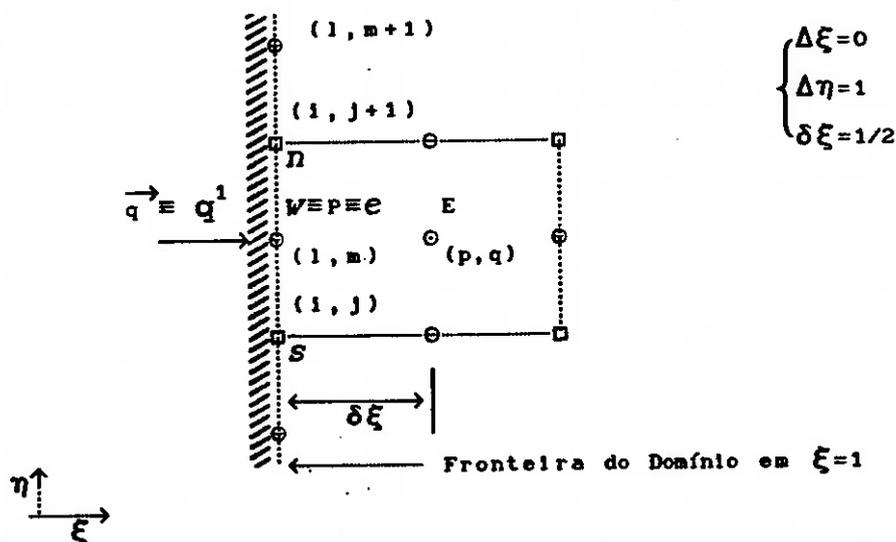


Figura 11.4 - Representação de V.C. próximo à fronteira do domínio de interesse, com fluxo de calor prescrito como condição de contorno.

$$0 = \int_{\eta}^{\eta'} \int_{\xi}^{\xi'} \left\{ \frac{1}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (Jq^1) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J\lambda g^{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J\lambda g^{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right\} J d\xi d\eta \quad (11.39)$$

Once a integração em ξ é realizada da mesma forma que para os demais volumes de controle, sendo o resultado posteriormente levado ao limite em que $\Delta\xi \rightarrow 0$. Disso resulta:

$$0 = \left\{ \left(Jq^1 \right)_{(w)} + \left(J\lambda g^{11} \frac{(T_E - T_P)}{(\delta\xi)} \right)_{(e)} \right\} \Delta\eta \quad (11.40)$$

Que pode ser posta na forma da expressão (11.29):

$$a_P T_P = a_E T_E + b \quad (11.41)$$

$$a_P = a_E \quad (11.42)$$

$$b = J_{(w)} q^1 \Delta\eta \quad (11.43)$$

Quando q^1 é resultado de transferência de calor por convecção, com coeficiente de película (h): $q^1 = h(T_P - T_\infty)$. As equações (11.42) e (11.43) tornam-se:

$$a_P = a_E + J_{(w)} h \Delta\eta \quad (11.44)$$

$$b = - J_{(w)} h T_\infty \Delta\eta \quad (11.45)$$

Há que se observar ainda, que o cálculo dos coeficientes para os volumes de controle adjacentes às fronteiras do domínio está sujeito a restrições quanto aos valores de $\delta\xi$ e $\delta\eta$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi = 1 \rightarrow (\delta\xi)_w = 1/2 \\ \xi = \xi_{\max} \rightarrow (\delta\xi)_e = 1/2 \\ \eta = 1 \rightarrow (\delta\eta)_s = 1/2 \\ \eta = \eta_{\max} \rightarrow (\delta\eta)_n = 1/2 \end{array} \right. \quad (11.46)$$

Nas demais faces dos V.c.: $\Delta\xi = \Delta\eta = \delta\xi = \delta\eta = 1$

11.2.3. Código Computacional.

Nessas condições foi desenvolvido e implementado o código computacional para simular numericamente problemas de condução de calor em sólidos de configuração geométrica arbitrária, com propriedades termodinâmicas constantes, e considerando fontes ou sorvedouros de calor de intensidade constante. O método numérico empregado na solução do sistema de equações lineares dos tipos (11.22) e (11.41) corresponde ao método de Gauss-Seidel com sobre-relaxações sucessivas. A abordagem desse tópico teve o propósito de constituir uma base de instrumentos de 'software' necessários aos desenvolvimentos que se seguem, com a finalidade última de prover-lhes de estruturas semelhantes.

11.3. O Problema Difuso-Convectivo

Torando-se como ponto de partida a equação geral de transporte de uma grandeza física escalar genérica ϕ , no espaço matemático transformado:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \left\{ \frac{1}{J} \frac{\partial(J\rho u^1\phi)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(J\rho u^2\phi)}{\partial \eta} \right\} = \frac{1}{J} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J\lambda g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J\lambda g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right\} + s''' \quad (11.47)$$

Essa equação pode ser reescrita na forma:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J\rho u^1\phi - J\lambda g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J\rho u^2\phi - J\lambda g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) = s''' \quad (11.48)$$

Define-se os fluxos totais \tilde{y} na forma:

$$\tilde{y}^1 = J \left(\rho u^1\phi - \lambda g^{11} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \quad (11.49)$$

$$\tilde{y}^2 = J \left(\rho u^2\phi - \lambda g^{22} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \quad (11.50)$$

E a equação (11.48) fica:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{1}{J} \left(\frac{\partial \tilde{y}^1}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{y}^2}{\partial \eta} \right) = s''' \quad (11.51)$$

Então, integra-se esta equação primeiramente sobre o V.c. e posteriormente em t, segundo o esquema totalmente implícito, de modo análogo aquele do problema difusivo. O resultado obtido vale:

$$\frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta + \tilde{y}_{(e)}^1 - \tilde{y}_{(w)}^1 + \tilde{y}_{(n)}^2 - \tilde{y}_{(s)}^2 = \bar{s} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta \quad (11.52)$$

Onde \bar{s} representa o valor da fonte volumétrica s''' integrado sobre o volume de controle. Considerando separadamente a equação da continuidade (B.17):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} (J \rho u^1) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} (J \rho u^2) = 0 \quad (11.53)$$

Integrando-a no V.c. e em t, da mesma forma que nos casos anteriores:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta + (J \rho u^1 \Delta \eta)_{(e)} - (J \rho u^1 \Delta \eta)_{(w)} + \\ + (J \rho u^2 \Delta \xi)_{(n)} - (J \rho u^2 \Delta \xi)_{(s)} = 0 \end{aligned} \quad (11.54)$$

Definem-se os fluxos de massa:

$$\begin{cases} F^1 = J \rho u^1 \Delta \eta \\ F^2 = J \rho u^2 \Delta \xi \end{cases} \quad (11.55)$$

E a equação (11.54) fica:

$$\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta + F_{(e)}^1 - F_{(w)}^1 + F_{(n)}^2 - F_{(s)}^2 = 0 \quad (11.56)$$

Multiplicando-se a expressão (11.56) por ϕ_P e subtraindo-a da equação (11.52), obtém-se:

$$\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta \xi} \rho_P^0 J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta + \left(\tilde{y}_{(e)}^1 - F_{(e)}^1 \phi_P \right) - \left(\tilde{y}_{(w)}^1 - F_{(w)}^1 \phi_P \right) +$$

$$+ \left(\tilde{y}_{(n)}^2 - F_{(n)}^2 \phi_P \right) - \left(\tilde{y}_{(s)}^2 - F_{(s)}^2 \phi_P \right) = \bar{S} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta \quad (11.57)$$

Prova-se (Patankar [59]) que, numa expressão desse tipo, os termos referentes aos fluxos (F e \tilde{y}) podem ser escritos em função das diferenças entre os valores de ϕ no ponto P e seus vizinhos (E , W , N e S), e coeficientes de proporcionalidade, na forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\tilde{y}_{(e)}^1 - F_{(e)}^1 \phi_P \right) = a_E (\phi_P - \phi_E) \\ \left(\tilde{y}_{(w)}^1 - F_{(w)}^1 \phi_P \right) = a_W (\phi_P - \phi_W) \\ \left(\tilde{y}_{(n)}^2 - F_{(n)}^2 \phi_P \right) = a_N (\phi_P - \phi_N) \\ \left(\tilde{y}_{(s)}^2 - F_{(s)}^2 \phi_P \right) = a_S (\phi_P - \phi_S) \end{array} \right. \quad (11.58)$$

Para expressar de forma adequada os coeficientes a_P , a_E , a_W , a_N e a_S , é preciso definir antes os termos referentes aos dois mecanismos de transporte de ϕ presentes na equação (11.47), quais sejam: a difusão e a convecção. Os primeiros têm, como é de se esperar, formulação idêntica aos coeficientes do problema difusivo, expressão (11.25):

$$\left\{ \begin{array}{ll} I_e = \left(\frac{Jg^{11}\lambda}{(\delta\xi)} \right)_{(e)} \Delta \eta & D_w = \left(\frac{Jg^{11}\lambda}{(\delta\xi)} \right)_{(w)} \Delta \eta \\ I_n = \left(\frac{Jg^{22}\lambda}{(\delta\eta)} \right)_{(n)} \Delta \xi & D_s = \left(\frac{Jg^{22}\lambda}{(\delta\eta)} \right)_{(s)} \Delta \xi \end{array} \right. \quad (11.59)$$

E os termos referentes à convecção têm a forma definida na expressão (11.55):

$$\left\{ \begin{array}{ll} F_e = (J\rho u^1 \Delta \eta)_{(e)} & F_w = (J\rho u^1 \Delta \eta)_{(w)} \\ F_n = (J\rho u^2 \Delta \xi)_{(n)} & F_s = (J\rho u^2 \Delta \xi)_{(s)} \end{array} \right. \quad (11.60)$$

Com isso define-se o número de Peclet (Pe), como sendo a razão entre os termos de convecção e difusão do problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} Pe_e = \frac{F_e}{D_e} \\ Pe_n = \frac{F_n}{D_n} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} Pe_w = \frac{F_w}{D_w} \\ Pe_s = \frac{F_s}{D_s} \end{array} \right. \quad (11.61)$$

Assim, os coeficientes da expressão (11.58) são definidos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_e = D_e A(|Pe_e|) + [-F_e, 0] \\ \varepsilon_w = D_w A(|Pe_w|) + [F_w, 0] \\ \varepsilon_n = D_n A(|Pe_n|) + [-F_n, 0] \\ \varepsilon_s = D_s A(|Pe_s|) + [F_s, 0] \end{array} \right. \quad (11.62)$$

Onçe o operador $[a,b]$ fornece o maior valor entre os elementos (a) e (b). E a função $A(Pe)$ assume expressões que tornam o método adequado aos diferentes esquemas de aproximação das equações diferenciais discutidos por Patankar [59]. Essas expressões correspondem a:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Diferença Central} & \Rightarrow A(|Pe|) = 1 - 0.5|Pe| \\ \text{Upwind} & \Rightarrow A(|Pe|) = 1 \\ \text{Híbrido} & \Rightarrow A(|Pe|) = [0, (1 - 0.5|Pe|)] \\ \text{Lei de Potência} & \Rightarrow A(|Pe|) = [0, (1 - 0.1|Pe|)^5] \\ \text{Exponencial} & \Rightarrow A(|Pe|) = \frac{|Pe|}{(e^{|Pe|} - 1)} \end{array} \right. \quad (11.63)$$

Dentre esses esquemas, segundo o mesmo autor, aquele que se baseia em diferenças centrais implica, em essência, em assumir para a variável ϕ nas interfaces dos V.c., valores correspondentes a médias aritméticas de seus valores nos pontos centrais dos V.c. que lhe são adjacentes. Isso permite que os coeficientes definidos

em (11.62) assumam valores negativos, o que não garante a convergência do método, não sendo por isso recomendável.

O esquema 'Upwind', por outro lado, representa essencialmente a hipótese de que nas interfaces a variável ϕ assumam valores correspondentes àqueles registrados no V.C. que se situa a montante da referida interface. Evita-se com isso a ocorrência de valores negativos para os coeficientes (11.62), o que é, em última análise, uma garantia quanto à convergência do método para soluções fisicamente realísticas.

O método exponencial, por sua vez, corresponde à solução exata da equação diferencial do problema, no caso unidimensional. Por isso representa o comportamento físico real para os problemas (1-D) e fornece avaliações fisicamente realísticas, não exatas, nos casos (2-D) e (3-D). Assim, se por exemplo, o fluxo convectivo de ϕ através da interface (e), no sentido $\xi > 0$, for alto o bastante para predominar sobre o transporte difusivo (escalar), o termo do coeficiente a_e que diz respeito à difusão será nulo, evidenciando essa predominância. Vale ressaltar que, embora a predominância de um mecanismo de transporte sobre o outro seja avaliada diretamente pelo Peclet, os esquemas de diferenças centrais, e mesmo o 'Upwind', não apresentam essa característica, representando portanto sempre os dois mecanismos de transporte.

Entretanto, o cálculo dos coeficientes pelo esquema exponencial é normalmente custoso, do ponto de vista do esforço computacional. Por esse motivo, foram desenvolvidos os esquemas híbrido e de lei de potência, que por sua vez representam aproximações numéricas do esquema exponencial. Nesse sentido, o esquema de lei de potência é aquele que proporciona a melhor aproximação do esquema exponencial, sendo por isso recomendado em Patankar [59], e utilizado preferencialmente nesse trabalho.

Feitas essas considerações, a equação (11.57) pode ser escrita na forma final:

$$a_p \phi_p = a_e \phi_e + a_w \phi_w + a_n \phi_n + a_s \phi_s + b \quad (11.64)$$

Onde:

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_p^0 \quad (11.65)$$

$$b = J_{(c)} \bar{\epsilon} \Delta \xi \Delta \eta + a_p^0 \phi_p^0 \quad (11.66)$$

$$a_p^0 = \frac{\rho_p^0 J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta t} \quad (11.67)$$

Essas expressões são idênticas às (11.29) - (11.32), com a diferença que os coeficientes (a_p , a_e , a_w , a_n e a_s) são agora determinados pelas expressões (11.62), com a função $A(|Pe|)$ fornecida pelo esquema de lei de potência, expressão (11.63). A equação (11.64) aplica-se ao volume de controle representado na figura (11.5).

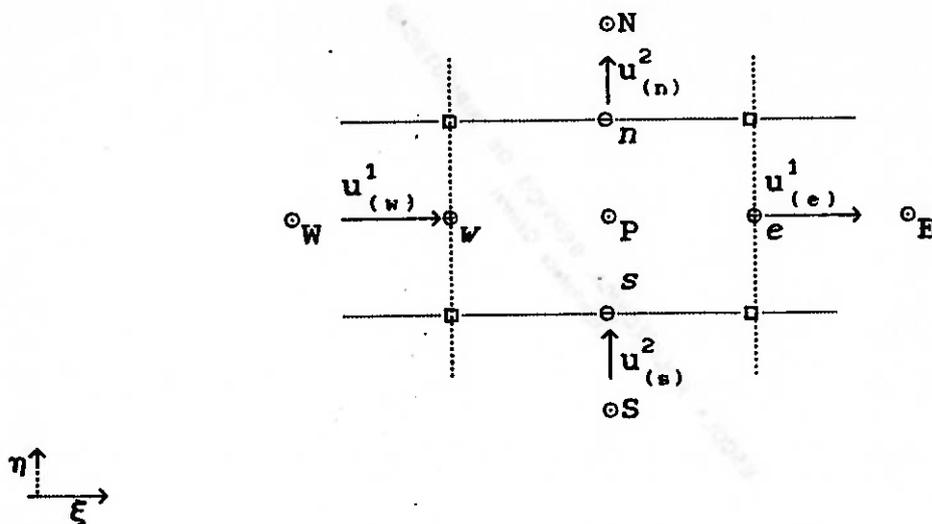


Figura 11.5 - Representação do V.C. típico, para o problema difuso convectivo.

Nesse volume de controle, como se pode notar na figura acima, as componentes u^1 da velocidade são conhecidas apenas nas interfaces (e) e (w), enquanto as componentes u^2 o são apenas nas interfaces (n) e (s).

11.3.1. A Equação da Energia.

Tomando-se essa equação na forma completa (B.9), tem-se que $\phi = T$, $\lambda = k/c_p$ e os resultados obtidos acima aplicam-se diretamente. Resta discutir a formulação do termo fonte s''' , que

no caso é obtida a partir da função Φ (B.11), que é tratada em detalhes abaixo.

$$\Phi = \tau^{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \xi^j} (u_i) - u_k \Gamma_{ij}^k \right) + \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u^n \frac{\partial P}{\partial \xi^n} \right) \quad (11.68)$$

$$\tau^{ij} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(g^{jn} \frac{\partial u^i}{\partial \xi^n} + g^{in} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{ij}}{\partial \xi^n} u^n \right) - \frac{1}{3J} g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^n} (J u^n) \right] \quad (11.69)$$

Que para os espaços bidimensionais representam:

$$\begin{aligned} \Phi = & \tau^{11} \left(\frac{\partial u_1}{\partial \xi} - u_1 \Gamma_{11}^1 - u_2 \Gamma_{11}^2 \right) + \tau^{12} \left(\frac{\partial u_1}{\partial \eta} - u_1 \Gamma_{12}^1 - u_2 \Gamma_{12}^2 \right) + \\ & + \tau^{21} \left(\frac{\partial u_2}{\partial \xi} - u_1 \Gamma_{21}^1 - u_2 \Gamma_{21}^2 \right) + \tau^{22} \left(\frac{\partial u_2}{\partial \eta} - u_1 \Gamma_{22}^1 - u_2 \Gamma_{22}^2 \right) + \\ & + \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u^1 \frac{\partial P}{\partial \xi} + u^2 \frac{\partial P}{\partial \eta} \right) \end{aligned} \quad (11.70)$$

Once os termos do tensor das tensões representam:

$$\tau^{ij} = \mu \left[g^{jn} \frac{\partial u^i}{\partial \xi^n} + g^{in} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{ij}}{\partial \xi^n} u^n - \frac{2g^{ij}}{3} \left(\frac{\partial u^n}{\partial \xi^n} + \frac{u^n}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi^n} \right) \right] \quad (11.71)$$

E seus componentes:

$$\begin{aligned} \tau^{11} = & \mu \left[\frac{4g^{11}}{3} \frac{\partial u^1}{\partial \xi} - \frac{2g^{11}}{3} \frac{\partial u^2}{\partial \eta} - \left(u^1 \frac{\partial g^{11}}{\partial \xi} + u^2 \frac{\partial g^{11}}{\partial \eta} \right) + \right. \\ & \left. - \frac{2g^{11}}{3} \left(\frac{u^1}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \frac{u^2}{J} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right] \end{aligned} \quad (11.72)$$

$$\tau^{12} = \tau^{21} = \mu \left[g^{22} \frac{\partial u^1}{\partial \eta} + g^{11} \frac{\partial u^2}{\partial \xi} \right] \quad (11.73)$$

$$\begin{aligned} \tau^{22} = & \mu \left[\frac{4g^{22}}{3} \frac{\partial u^2}{\partial \eta} - \frac{2g^{22}}{3} \frac{\partial u^1}{\partial \xi} - \left(u^1 \frac{\partial g^{22}}{\partial \xi} + u^2 \frac{\partial g^{22}}{\partial \eta} \right) + \right. \\ & \left. - \frac{2g^{22}}{3} \left(\frac{u^1}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \frac{u^2}{J} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right] \end{aligned} \quad (11.74)$$

O termo referente à fonte volumétrica da equação da conservação da energia vale: $s''' = \Phi/c_p$. Portanto, assumindo que seu valor seja constante sobre todo o volume de controle, sua integração sobre o mesmo resulta:

$$J_{(c)} \bar{s} \Delta \xi \Delta \eta = \iint_{\Delta V} \frac{\Phi}{c_p} J d\xi d\eta = J_{(c)} \frac{\Phi}{c_p} \Delta \xi \Delta \eta \quad (11.75)$$

Para os fluidos incompressíveis $\beta = 0$, e o termo referente às pressões não aparece. Para os gases perfeitos, $\beta = (T)^{-1}$, onde T representa a temperatura absoluta do gás.

Desse modo, devido à complexidade que assume o termo fonte \bar{s} na sua forma completa, optou-se pela formulação constante, fazendo $s_p = 0$ e $s_c = (\Phi^*/c_p)$, onde (Φ^*) é calculado a partir dos valores das variáveis na iteração anterior. Além disso, adotou-se a prática de calcular antes os componentes do tensor das tensões no V.c., para depois avaliar a função Φ propriamente dita.

As vantagens desse método sobre a formulação explícita da função Φ são evidentes, quando se considera a facilidade de depuração dos algoritmos desenvolvidos. E, o que é mais importante, a construção de rotinas específicas para o cálculo dos componentes do tensor das tensões revela-se muito útil, já que esse tensor é utilizado com maior frequência na formulação das equações de Navier-Stokes, como se verá a seguir, e tais rotinas podem ser testadas modularmente.

Ainda é necessário fazer algumas observações quanto ao cálculo de \bar{s} :

1- Uma vez que o volume de controle é centrado, empregam-se apenas os termos da métrica que foram calculados previamente para os pontos centrais dos volumes de controle.

2- Todas as derivações encontradas nessa formulação são avaliadas numericamente segundo um esquema de diferenças centrado,

com erro de truncamento de segunda ordem, conforme apresentado no item 11. Para essa finalidade foi desenvolvida uma rotina destinada a calcular essas derivadas para qualquer dos entes físicos ou geométricos presentes na formulação.

3- As componentes do vetor velocidade são conhecidas apenas nas interfaces do V.c., por outro lado, é preciso avaliá-las no ponto central do mesmo para que se possa calcular \bar{s} . Para contornar esse problema, contruíram-se rotinas que determinam as componentes da velocidades nesse ponto por meio de médias aritméticas:

$$\begin{cases} v_{(c)}^1 = (u_{(w)}^1 + u_{(e)}^1)/2 \\ v_{(c)}^2 = (u_{(n)}^2 + u_{(s)}^2)/2 \end{cases} \quad (11.76)$$

4- Na formulação de Φ aparecem componentes covariantes da velocidade. Essa é a única das equações do modelo matemático em que tais termos são utilizados. Em virtude disso, optou-se por avaliá-las apenas durante o cálculo de Φ , em processamento. Para tanto foram desenvolvidas rotinas que as determinam por meio da multiplicação pelo tensor métrico:

$$\begin{cases} v_{(c)1} = u_{(c)}^1/g^{11} \\ v_{(c)2} = u_{(c)}^2/g^{22} \end{cases} \quad (11.77)$$

11.3.2. Condições de Contorno.

As condições de contorno com respeito à temperatura têm formulação idêntica àquela apresentada para o problema difusivo. com as diferenças de que: os coeficientes são agora determinados pelas expressões (11.62), os fluxos de calor prescritos são especificados para fronteiras impermeáveis, onde $u^1 = u^2 = 0$, e não se consideram efeitos de convecção externos ao domínio do escoamento.

Surge evidentemente uma dificuldade, no que se refere à prescrição de condições de contorno para a seção de saída do domínio do escoamento, onde usualmente não se conhece o perfil de temperaturas, posto que esse deve resultar da simulação.

Segundo estabelece Patankar [59], se naquela seção o valor do Peclet for suficientemente alto, o mecanismo de convecção passa a predominar sobre o de difusão, e o problema assume um

comportamento parabólico, em contraste com o caráter elíptico da equação. Nesse caso, se a fronteira em questão não apresentar contrafluxo (velocidades negativas), a influência das condições de contorno nela prescritas não se fará sentir sobre a solução obtida, não importando, a rigor, sua especificação. Deve-se observar que essa condição só se verifica quando se adotam os esquemas exponencial, híbrido ou de lei de potência, onde, por sinal, basta que $Pe > 10$ para que tal ocorra.

11.3.3. Código Computacional.

Com base nos resultados acima, foram desenvolvidas duas rotinas para a simulação numérica de problemas de convecção de calor em escoamentos através de passagens de geometria arbitrária. O primeiro destinado aos problemas que envolvem fluidos incompressíveis com propriedades constantes, onde os sistemas de equações lineares discretizadas é resolvido pelo método de Gauss-Seidel com sobre-relaxações sucessivas. O segundo destina-se à simulação do escoamento de fluidos compressíveis e é discutido adiante, em tópico específico.

11.4. A Determinação do Campo de Velocidades

11.4.1. A Equação de Navier-Sokes

Essa equação assume forma análoga àquela apresentada no problema difuso-convectivo, com a diferença de que os volumes de controle empregados para as componentes ξ e η da velocidade são, neste caso, deslocados em relação ao V.c. central, nas direções ξ e η , respectivamente (figura 11.6).

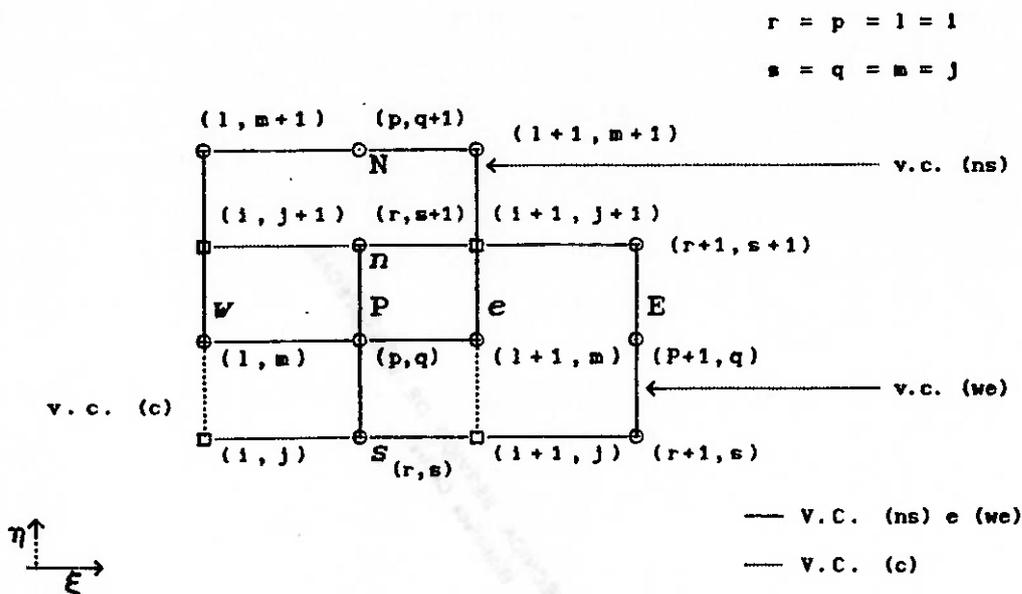


Figura 11.6 - Representação das posições relativas dos V.C. central (c), V.c. deslocado na direção ξ (we) e V.c. deslocado na direção η (ns)

Assim, considerando as expressões (B.18) - (B.23) do apêndice B, observa-se que, para o transporte de quantidade de movimento nas direções ξ e η , as componentes contravariantes da velocidade (u^i) correspondem à variável ϕ , e o coeficiente de difusão λ representa a viscosidade μ .

De resto, os métodos de integração empregados para a equação geral de transporte também se aplicam às equações de Navier-Stokes em cada uma das direções ξ e η , dada sua semelhança com a expressão (11.47). Os limites de integração, que correspondem às fronteiras dos volumes de controle, entretanto, modificam-se em virtude do deslocamento desses últimos. Dessa forma, os valores dos termos da métrica e das velocidades nessas fronteiras passam a

ser avaliados em pontos distintos daqueles anteriormente utilizações. Nesse sentido, as figuras (11.7) e (11.8) representam em detalhes as malhas dos V.c. deslocados na direção ξ e η , designações oeste-leste (*we*) e norte-sul (*ns*), respectivamente.

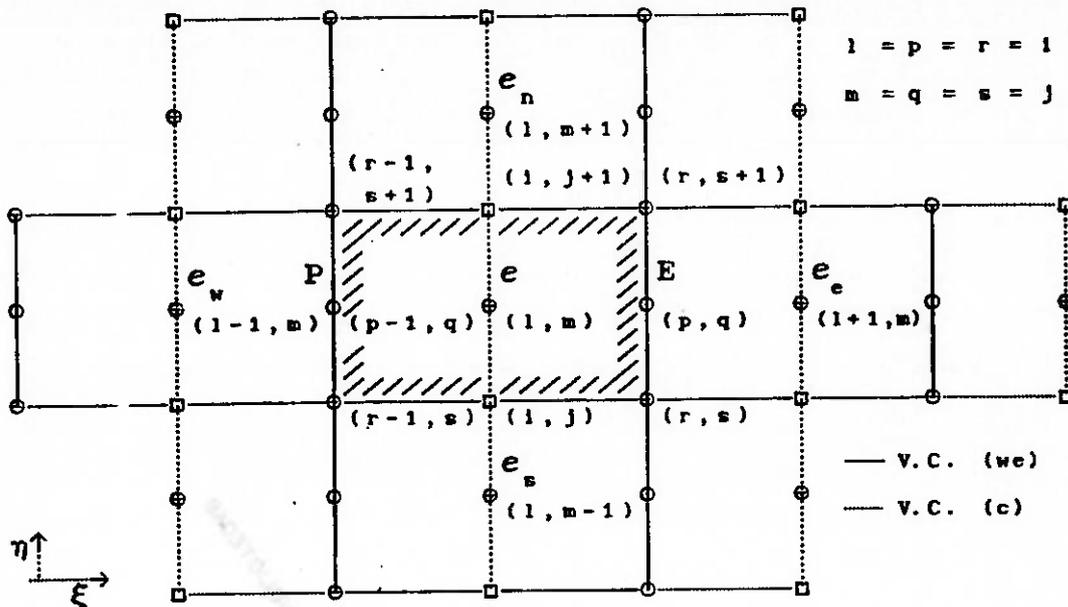


Figura 11.7 - Representação dos V.c. deslocados na direção ξ (*we*)

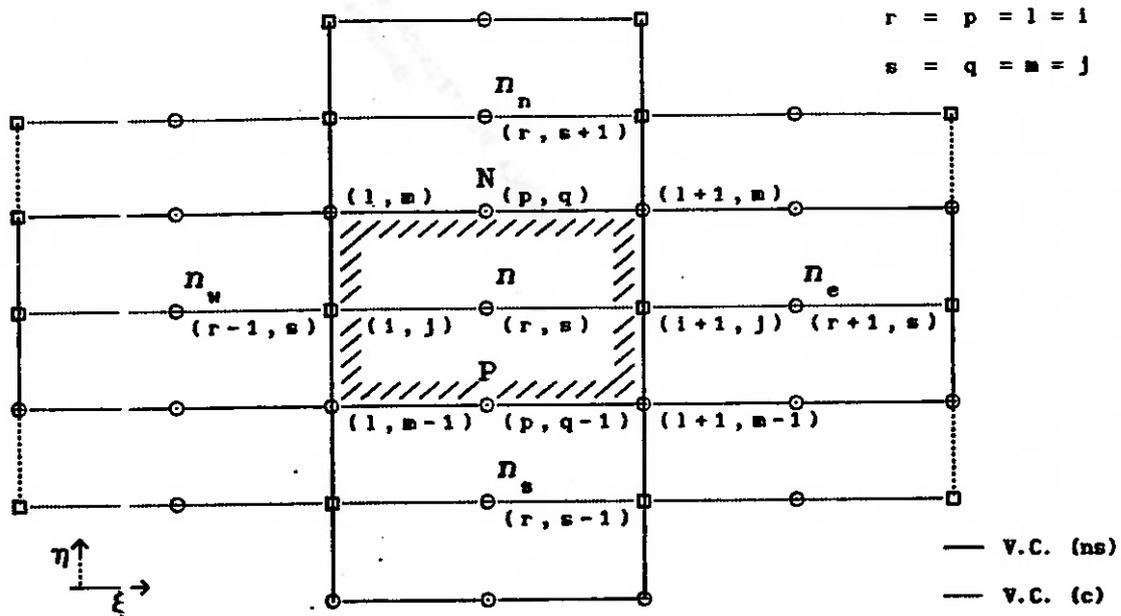


Figura 11.8- Representação dos V.c. deslocados na direção η (*ns*)

Como se pode notar das figuras (11.7) e (11.8), para os volumes de controle do tipo (*we*), as fronteiras oeste e leste estão localizadas sobre os pontos centrais P e E, respectivamente,

enquanto as fronteiras norte e sul situam-se sobre pontos da malha (o). Analogamente, para os volumes de controle do tipo (ns), as fronteiras sul e norte situam-se sobre os pontos centrais P e N, respectivamente, enquanto as fronteiras leste e oeste recaem sobre pontos da malha (o). Por isso, ao avaliar os fluxos nas interfaces desses volumes de controle, os termos da métrica utilizados devem referir-se a esses pontos.

As componentes da velocidade u^1 e u^2 por sua vez, não são conhecidas nas interfaces dos V.c. deslocados, mas apenas em pontos dos tipos (we) e (ns), respectivamente. Logo, para avaliá-las são necessárias interpolações, como indicam as figuras (11.9) e (11.10).

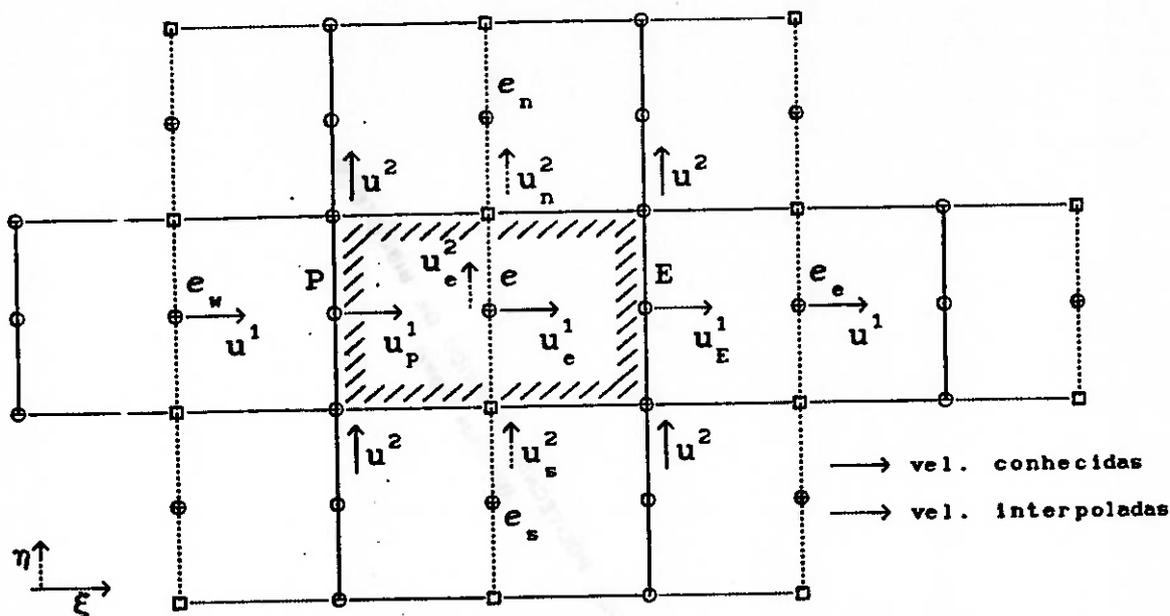


Figura 11.9 - Representação dos V.c. deslocados na direção ξ (we) com as componentes da velocidade nas fronteiras.

Com isso, a avaliação dos fluxos de quantidade de movimento que atravessam as fronteiras de cada volume de controle deslocado, seja do tipo (we) ou (ns), faz uso de termos da métrica calculados especialmente para os pontos dessas fronteiras, mas emprega componentes de velocidade interpoladas.

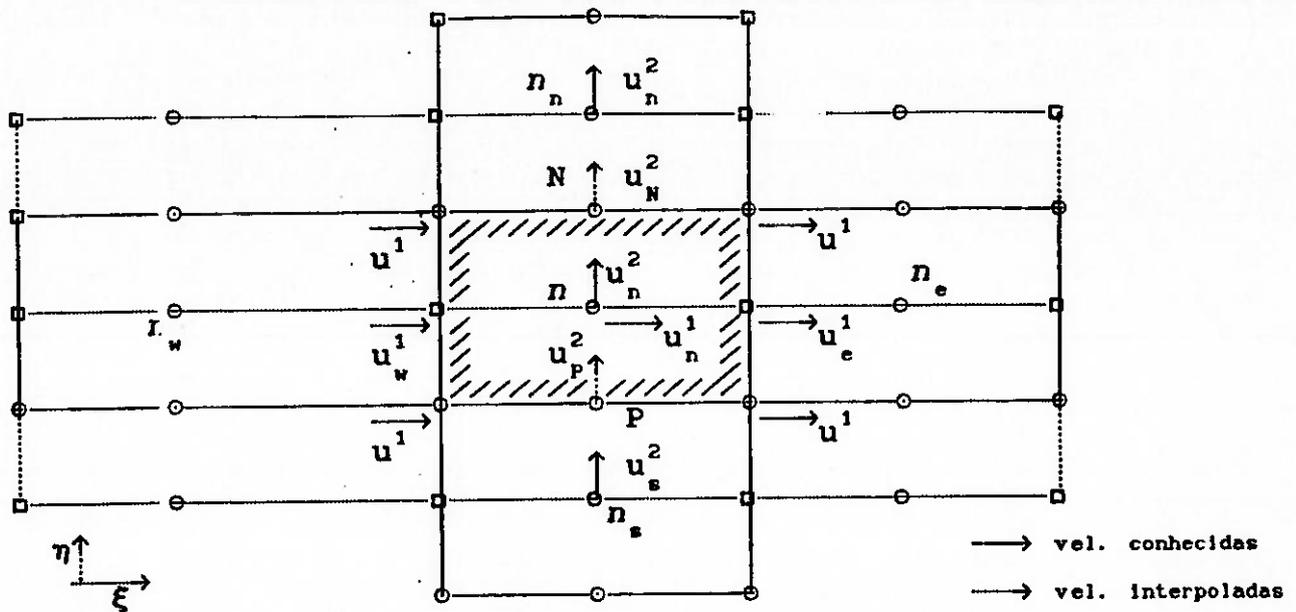


Figura 11.10 - Representação dos V.c. deslocados na direção η (n_s) com as componentes da velocidade nas fronteiras.

Assim, para os volumes de controle do tipo (w_e), as velocidades interpoladas são determinadas por:

$$\begin{cases} u_e^2(1,m) = [u^2(r,s) + u^2(r,s+1) + u^2(r+1,s+1) + u^2(r+1,s)]/4 \\ u_n^2(i,j+1) = [u^2(r-1,s+1) + u^2(r,s+1)]/2 \\ u_s^2(i,j) = [u^2(r-1,s) + u^2(r,s)]/2 \end{cases} \quad (11.78)$$

Na fronteira $\xi=1 \Rightarrow (l=i=r=1)$ ou $\xi=\xi_{\max} \Rightarrow (i=l=\xi_{\max}, r=\xi_{\max}-1)$, e as relações (11.78) são substituídas por:

$$\begin{cases} u_e^2(1,m) = u_e^2(1+1,m) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} [u_e^2(1+1,m)] \\ u_r^2(i,j+1) = u^2(r+1,s+1) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} [u^2(r+1,s+1)] \\ u_s^2(i,j) = u^2(r+1,s) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} [u^2(r+1,s)] \end{cases} \quad (11.79)$$

O sinal positivo vale para a fronteira $\xi=1$ e o sinal negativo para a fronteira $\xi=\xi_{\max}$.

E para as componentes interpoladas de u^1 tem-se:

$$\begin{cases} u_p^1(p-1, q) = [u^1(l-1, m) + u^1(l, m)]/2 \\ u_E^1(p, q) = [u^1(l, m) + u^1(l+1, m)]/2 \end{cases} \quad (11.80)$$

Analogamente, para os volumes de controle do tipo (ns), as velocidades interpoladas são determinadas por:

$$\begin{cases} u_n^1(r, s) = [u^1(l, m) + u^1(l+1, m) + u^1(l+1, m-1) + u^1(l, m-1)]/4 \\ u_c^1(i+1, j) = [u^1(l+1, m) + u^1(l+1, m-1)]/2 \\ u_w^1(i, j) = [u^1(l, m) + u^1(l, m-1)]/2 \end{cases} \quad (11.81)$$

Na fronteira $\eta=1 \Rightarrow (s=j=m=1)$ ou $\eta=\eta_{\max} \Rightarrow (s=j=\eta_{\max}, m=\eta_{\max}-1)$, e se empregam as seguintes relações:

$$\begin{cases} u_n^1(r, s) = u_n^1(r, s+1) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} [u_n^1(r, s+1)] \\ u_c^1(i+1, j) = u^1(l+1, m) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} [u^1(l+1, m)] \\ u_w^1(i, j) = u^1(l, m) \pm \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} [u^1(l, m)] \end{cases} \quad (11.82)$$

O sinal positivo vale para a fronteira $\eta=1$ e o sinal negativo para a fronteira $\eta=\eta_{\max}$.

E para as componentes interpoladas de u^2 tem-se:

$$\begin{cases} u_p^2(p, q-1) = [u^2(r, s-1) + u^2(r, s)]/2 \\ u_N^2(p, q) = [u^2(r, s) + u^2(r, s+1)]/2 \end{cases} \quad (11.83)$$

Deve-se observar que as interpolações de velocidades são empregadas nas fronteiras apenas nos casos em que as condições de contorno não as especificam diretamente.

Feitas as considerações necessárias com relação aos termos da métrica e às velocidades interpoladas, faz-se a integração da equação de Navier-Stokes nas direções ξ e η . Disso resultam coeficientes que têm forma inteiramente análoga às expressões (11.59) - (11.63). Entretanto sua avaliação se dá agora sobre as fronteiras do volume de controle (vc) quando essa equação

refere-se à componente u^1 da velocidade, e ao volume de controle (ns) quando com respeito à componente u^2 . A forma final das equações discretizadas, por sua vez, é semelhante às expressões (11.64) - (11.67), com uma diferença no tratamento do termo fonte (vide B 22), que tem o componente que se refere ao gradiente de pressão tratado separadamente. Para efetuar esse tratamento, convem tomar como ponto de partida a expressão desse termo:

$$s'' = -\Gamma_{mn}^i (\rho u^n u^n - \tau^{mn}) + \rho f^1 - g^{1j} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[J \mu \left(g^{1n} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\partial g^{1j}}{\partial \xi^n} u^n - \frac{2}{3J} g^{1j} \frac{\partial}{\partial \xi^n} (J u^n) \right) \right] \quad (11.84)$$

Considerando a expressão dos componentes do tensor das tensões (11.71), torna-se evidente que o último termo da expressão acima pode ser escrito na forma:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \tau^{1j}) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[J \mu g^{1n} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} \right] + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left\{ J \mu \left[g^{1n} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\partial g^{1j}}{\partial \xi^n} u^n - \frac{2g^{1j}}{3} \left(\frac{\partial u^n}{\partial \xi^n} + \frac{u^n}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi^n} \right) \right] \right\} \quad (11.85)$$

O primeiro termo do lado direito da expressão (11.85) corresponde ao termo de difusão da equação da quantidade de movimento. Assim, pode-se definir um tensor de segunda ordem contravariante κ^{1j} , da forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \kappa^{1j} = \tau^{1j} - \mu g^{1n} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} \\ \kappa^{1j} = \mu \left[g^{1n} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{1j}}{\partial \xi^n} u^n - \frac{2g^{1j}}{3} \left(\frac{\partial u^n}{\partial \xi^n} + \frac{u^n}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi^n} \right) \right] \end{array} \right\} \quad (11.86)$$

Os componentes do tensor κ^{1j} no sistema de coordenadas (ξ, η) correspondem a:

$$\kappa^{11} = \mu \left[g^{11} \frac{\partial u^1}{\partial \xi} - \left(u^1 \frac{\partial g^{11}}{\partial \xi} + u^2 \frac{\partial g^{11}}{\partial \eta} \right) - \frac{2g^{11}}{3} \left(\frac{\partial u^1}{\partial \xi} + \frac{\partial u^2}{\partial \eta} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{u^1}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \frac{u^2}{J} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right] \quad (11.87)$$

$$\kappa^{12} = \mu \left[g^{11} \frac{\partial u^2}{\partial \xi} \right] \quad (11.88)$$

$$\kappa^{21} = \mu \left[g^{22} \frac{\partial u^1}{\partial \eta} \right] \quad (11.89)$$

$$\kappa^{22} = \mu \left[g^{22} \frac{\partial u^2}{\partial \eta} - \left(u^1 \frac{\partial g^{22}}{\partial \xi} + u^2 \frac{\partial g^{22}}{\partial \eta} \right) - \frac{2g^{22}}{3} \left(\frac{\partial u^1}{\partial \xi} + \frac{\partial u^2}{\partial \eta} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{u^1}{J} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \frac{u^2}{J} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right] \quad (11.90)$$

Vale ressaltar, nas expressões (11.88) e (11.89) acima, que o tensor κ^{ij} não é simétrico como τ^{ij} . Com isso, a expressão (11.84) pode ser reescrita:

$$s'''' = \left(\Gamma_{mn}^i (\tau^{mn} - \rho u^m u^n) + \rho f^i + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \kappa^{ij}) \right) - g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) \quad (11.91)$$

De onde se define s''''_{Pre} e s''''_0 , de forma que:

$$s'''' = s''''_0 + s''''_{Pre} \quad (11.92)$$

$$\begin{cases} s''''_c = \left(\rho f^i + \Gamma_{mn}^i (\tau^{mn} - \rho u^m u^n) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \kappa^{ij}) \right) \\ s''''_{Fre} = - g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) \end{cases} \quad (11.93)$$

Dessa forma, pode-se expressar a fonte da equação de Navier-Stokes em termos de suas componentes em cada uma das direções, ξ ou η , representadas por s''''^1 e s''''^2 e integrá-la nos volumes de controle (ve) e (ns) , respectivamente. Considerando inicialmente o

termo s'''_{fre} , tem-se:

$$\bar{s}_{Pr}^{-1} = - \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} g^{11} \frac{\delta P}{\delta \xi} J d\xi d\eta = (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P_P - P_E) \quad (11.94)$$

$$\bar{s}_{Pr}^{-2} = - \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} g^{22} \frac{\delta P}{\delta \eta} J d\xi d\eta = (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P_P - P_N) \quad (11.95)$$

Torando agora os termos de s'''_0 , na ordem em que aparecem na expressão (11.93):

$$\blacksquare \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} f f^1 J d\xi d\eta = (J \delta \xi \Delta \eta)_{(we)} \rho f^1 \quad (11.96)$$

$$\blacksquare \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} f f^2 J d\xi d\eta = (J \Delta \xi \delta \eta)_{(ns)} \rho f^2 \quad (11.97)$$

$$\blacksquare \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} \left(\Gamma_{11}^1 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^1 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \Gamma_{22}^1 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right) J d\xi d\eta =$$

$$\left(\Gamma_{11}^1 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^1 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \Gamma_{22}^1 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right) (J \delta \xi \Delta \eta)_{(we)} \quad (11.98)$$

$$\blacksquare \int_{\xi}^{\eta} \int_{W}^{\alpha} \left(\Gamma_{11}^2 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^2 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \Gamma_{22}^2 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right) J d\xi d\eta =$$

$$\left(\Gamma_{11}^2 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^2 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \Gamma_{22}^2 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right) (J \Delta \xi \delta \eta)_{(ns)} \quad (11.99)$$

$$\begin{aligned} \int_{\xi}^{\xi+\delta\xi} \int_{\eta}^{\eta+\delta\eta} -\frac{1}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (J\kappa^{11}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\kappa^{12}) \right) J d\xi d\eta = & \left[\kappa^{11} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \kappa^{12} \frac{\partial J}{\partial \eta} + J \left(\frac{\partial \kappa^{11}}{\partial \xi} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial \kappa^{12}}{\partial \eta} \right) \right] (\delta\xi \delta\eta)_{(we)} \end{aligned} \quad (11.100)$$

$$\begin{aligned} \int_{\xi}^{\xi+\delta\xi} \int_{\eta}^{\eta+\delta\eta} -\frac{1}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (J\kappa^{21}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J\kappa^{22}) \right) J d\xi d\eta = & \left[\kappa^{21} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \kappa^{22} \frac{\partial J}{\partial \eta} + J \left(\frac{\partial \kappa^{21}}{\partial \xi} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial \kappa^{22}}{\partial \eta} \right) \right] (\delta\xi \delta\eta)_{(ns)} \end{aligned} \quad (11.101)$$

Assim, as expressões completas dos termos fonte que não dependem do gradiente de pressão, nas direções ξ e η , respectivamente, valem:

$$\begin{aligned} \bar{S}_0^1 = \delta\xi \delta\eta \left\{ J\rho f^1 + J \left[\Gamma_{11}^1 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^1 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + \Gamma_{22}^1 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right] + J \left(\frac{\partial \kappa^{11}}{\partial \xi} + \frac{\partial \kappa^{12}}{\partial \eta} \right) + \left(\kappa^{11} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \kappa^{12} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right\}_{(we)} \end{aligned} \quad (11.102)$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_0^2 = \Delta\xi \delta\eta \left\{ J\rho f^2 + J \left[\Gamma_{11}^2 (\tau^{11} - \rho u^1 u^1) + 2\Gamma_{12}^2 (\tau^{12} - \rho u^1 u^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + \Gamma_{22}^2 (\tau^{22} - \rho u^2 u^2) \right] + J \left(\frac{\partial \kappa^{21}}{\partial \xi} + \frac{\partial \kappa^{22}}{\partial \eta} \right) + \left(\kappa^{21} \frac{\partial J}{\partial \xi} + \kappa^{22} \frac{\partial J}{\partial \eta} \right) \right\}_{(ns)} \end{aligned} \quad (11.103)$$

Os componentes do tensor das tensões τ^{ij} são determinados a partir das expressões (11.72) - (11.74) e as componentes do tensor κ^{ij} por meio das expressões (11.87) - (11.90).

Foram desenvolvidas rotinas específicas para avaliar esses tensores e as componentes dos termos da fonte das equações de

Navier-Stokes. Tais rotinas tem uma estrutura comum, que é partilhada por todos códigos computacionais que envolvem a solução dessas equações.

Em virtude da complexidade da expressão completa de \bar{s} , optou-se por representá-la também na forma constante, isto é, fazendo $s_p = 0$ e $s_c = \bar{s}_0^*$. Onde \bar{s}_0^* é calculado a partir dos valores das velocidades na iteração anterior. O termo referente à pressão é tratado em separado na forma final discretizada das componentes da equação da quantidade de movimento:

$$\left\{ \begin{aligned} a_e^{1,1} &= \sum_{nb} a_{nb}^1 u_{nb}^1 + b + (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P_p - P_E) \\ a_e^1 &= \sum_{nb} a_{nb}^1 + a_e^{01} \\ b &= J_{(c)} \bar{s}_c \Delta \xi \Delta \eta + a_e^{01} u_e^{01} \\ a_e^{01} &= \frac{\rho_e^0 J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta t} \end{aligned} \right. \quad (11.104)$$

$$\left\{ \begin{aligned} a_n^{2,2} &= \sum_{nb} a_{nb}^2 u_{nb}^2 + b + (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P_p - P_N) \\ a_n^2 &= \sum_{nb} a_{nb}^2 + a_n^{02} \\ b &= J_{(c)} \bar{s}_c \Delta \xi \Delta \eta + a_n^{02} u_n^{02} \\ a_n^{02} &= \frac{\rho_n^0 J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta t} \end{aligned} \right. \quad (11.105)$$

Onçe os índices super-escritos dos coeficientes indicam que se referem aos volumes de controle (we), para u^1 , ou (ns) para u^2 , e o sub-escrito (nb) designa os volumes de controle vizinhos ao volume considerado.

Entretanto, se durante o processo iterativo, for introduzido nas equações (11.104) e (11.105) um campo de pressões ainda incorreto, designado (P^*), o campo de velocidades (u^*) resultante também será incorreto:

$$a_e^1 u_e^{1*} = \sum_{nb} a_{nb}^1 u_{nb}^{1*} + b + (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P_P^* - P_E^*) \quad (11.106)$$

$$a_n^2 u_n^{2*} = \sum_{nb} a_{nb}^2 u_{nb}^{2*} + b + (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P_P^* - P_N^*) \quad (11.107)$$

Definem-se então os termos P' , $u^{1'}$ e $u^{2'}$, que têm a função de corrigir os campos de pressão e velocidades P^* , u^{1*} e u^{2*} , para os valores corretos (P , u^1 e u^2), na forma:

$$\begin{cases} P = P^* + P' \\ u^1 = u^{1*} + u^{1'} \\ u^2 = u^{2*} + u^{2'} \end{cases} \quad (11.108)$$

Dessa forma, subtraindo-se as expressões (11.106) e (11.107) de (11.104) e (11.105), resulta:

$$a_e^1 u_e^{1'} = \sum_{nb} a_{nb}^1 u_{nb}^{1'} + (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P_P' - P_E') \quad (11.109)$$

$$a_n^2 u_n^{2'} = \sum_{nb} a_{nb}^2 u_{nb}^{2'} + (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P_P' - P_N') \quad (11.110)$$

Patankar [59] propõe que os termos referentes à somatórias das velocidades vizinhas sejam desprezados. Vale ressaltar que tal procedimento não deve comprometer a solução final, uma vez que ao longo do processo iterativo a convergência da solução implica, no limite, na nulidade dos termos de correção (P' , $u^{1'}$ e $u^{2'}$). Assim, das expressões (11.109) e (11.110) resultam:

$$a_e^1 u_e^{1'} = (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P_P' - P_E') \quad (11.111)$$

$$a_n^2 u_n^{2'} = (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P_P' - P_N') \quad (11.112)$$

Definem-se então os coeficientes:

$$\begin{cases} C_e = \frac{(g^{11} J \Delta \eta)_{(we)}}{a_e} \\ C_n = \frac{(g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)}}{a_n} \end{cases} \quad (11.113)$$

Logo, as equações de correção da velocidade podem ser reescritas como:

$$\begin{cases} u_e^1 = u_e^{1*} + C_e (P'_P - P'_E) \\ u_n^2 = u_n^{2*} + C_n (P'_P - P'_N) \end{cases} \quad (11.114)$$

11.4.2. A Equação da Continuidade.

Essa equação é introduzida no modelo na forma de uma equação de correção das pressões. Para isso toma-se sua expressão em termos dos fluxos de massa (11.54) e introduz-se nela as expressões (11.114). Uma vez que o campo correto de velocidades (u^1) satisfaz a continuidade, a expressão resultante é função unicamente das correções de pressão P' e das velocidades (u^{1*}), podendo ser escrita na forma:

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b \quad (11.115)$$

Onde os coeficientes correspondem a:

$$\begin{cases} a_E = (J \Delta \eta)_{(e)} C_e \rho \\ a_W = (J \Delta \eta)_{(w)} C_w \rho \\ a_N = (J \Delta \eta)_{(n)} C_n \rho \\ a_S = (J \Delta \eta)_{(s)} C_s \rho \\ a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \\ b = \frac{\rho_P^0 - \rho_P}{\Delta t} J_c \Delta \xi \Delta \eta + \rho (J_w u_w^{1*} - J_e u_e^{1*}) \Delta \eta + \\ + \rho (J_s u_s^{2*} - J_n u_n^{2*}) \Delta \xi \end{cases} \quad (11.116)$$

A equação acima aplica-se ao volume de controle central, como representado na figura (11.5). Não necessita, portanto, de

interpolações de velocidades para avaliar os fluxos nas interfaces.

Há que se notar, ainda, que a expressão do termo b representa, nesse caso, o balanço de massa sobre cada volume de controle do domínio considerado. Por essa razão, e uma vez que os perfis de velocidades corretos devem satisfazer à conservação da massa, esse termo tende a desaparecer ao longo do processo iterativo, à medida em que este se aproxima da convergência. Assim, a obtenção da solução exata implicaria, no limite, em $b=0$ e na solução trivial ($P'=0$) para a equação (11.115). Na prática o que ocorre é que, durante o processo iterativo, o termo b e as correções de pressão P' devem tornar-se arbitrariamente pequenos.

11.4.3. Condições de Contorno.

A equação da quantidade de movimento para ambas as direções, ξ e η , tem forma análoga à equação geral de difusão, o tratamento de suas condições de contorno é portanto o mesmo, .

A equação de correção de pressões, por outro lado, deve ser considerada à parte, em razão das diferenças em sua estrutura. Nesse sentido, as condições de contorno para essa equação podem ser de dois tipos: a velocidade normal ou a pressão prescrita.

No primeiro caso, a velocidade normal na face de todo volume de controle que coincida com a fronteira do domínio (figura 11.11.a) é especificada por seu valor real ($u_w^{i*} = u_w^i$). Não é, portanto, necessário corrigi-la, isto é ($u_w^{i'} = 0$). Assim, o cálculo do termo b da expressão (11.116) envolve a própria u_w^i e, devido à nulidade da correção, a equação (11.115) para esse volume de controle não envolve P'_w , o que equivale a fazer ($a_w = 0$). Vale ressaltar que esse tipo de condição de contorno aplica-se às fronteiras sólidas impermeáveis, além, é claro, daquelas em que se conhecem efetivamente os perfis de velocidades.

No segundo caso, considera-se um volume de controle deslocado em relação à fronteira, referente ao ponto em que se determina a velocidade que a atravessa, conforme indica a figura (11.11-b). A pressão é então especificada sobre a face desse V.c. externa ao domínio. Tal procedimento têm duas conseqüências importantes:

1. A velocidade na fronteira na qual se especifica a pressão não é, em princípio, conhecida, nem tão pouco se mantém constante

durante o processo iterativo. Assim, para determiná-la, deve-se aplicar a equação da quantidade de movimento sobre esse volume de controle. No entanto, devido às características do mesmo, tal aplicação dá-se exatamente da mesma forma que para os demais.

2. Por outro lado, conservando a estrutura dos volumes de controle deslocados para pressão e velocidades, adotada no interior do domínio, pode-se considerar que o ponto em que a pressão é especificada representa o centro de um V.c. de pressão, adjacente à fronteira. O valor prescrito então aparece na equação (11.115) como a pressão de um V.c. vizinho à fronteira, para o qual não há correção, ou seja ($P'_E = 0$). Portanto o coeficiente a_E é calculado e aparece efetivamente na equação (11.115).

Entretanto, para que tal equação possa ser usada, é preciso avaliar o valor da velocidade num ponto vizinho à fronteira em questão, externo ao domínio considerado. Quando essa fronteira representa a seção de saída, faz-se uso do fato, discutido acima, de que, se sobre ela não houver contrafluxo e os valores de Peclet forem suficientemente altos, então ($a_E = 0$) e a especificação dessa velocidade não importa. Por outro lado, em se tratando da seção de entrada, são necessárias extrapolações para avaliá-las.

Por esse motivo, no presente trabalho adota-se a condição de pressão prescrita apenas na seção de saída do domínio do escoamento, onde o perfil de velocidades é determinado como parte da solução.

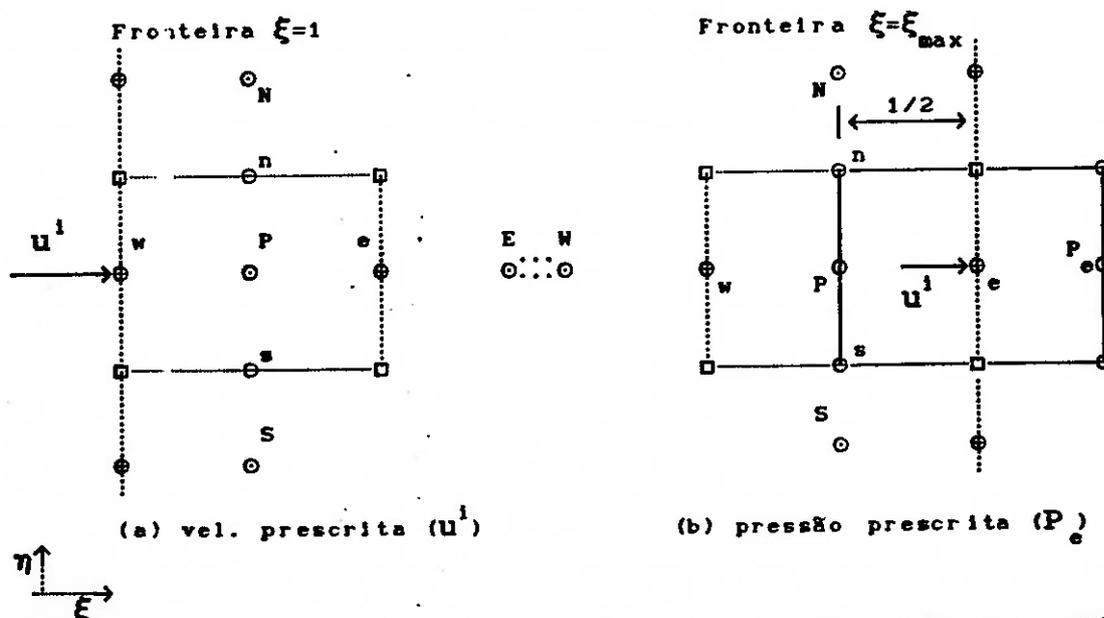


Figura 11.11 - Representação de volumes de controle adjacentes às fronteiras do domínio transformado.

11.5. O algoritmo SIMPLE

Definidas as equações do modelo matemático na forma generalizada, pode-se estabelecer a seqüência de operações em que consiste o algoritmo destinado a solucioná-las, conforme Patankar [59]:

1. Estimar um campo de pressões P^* .
2. Resolver as equações (11.106) e (11.107), de modo a determinar o campo de velocidades correspondente (u^{1*}, u^{2*}).
3. Resolver a equação (11.115), para obter os valores de P' .
4. Determinar o campo de pressões P , por meio da equação (11.108).
5. Determinar o campo de velocidades (u^1, u^2), utilizando as equações (11.114).
6. Resolver as equações gerais de difusão de outras grandezas físicas, como por exemplo a equação da energia. Ressalte-se que isso deve ser feito apenas se essas grandezas influenciam efetivamente o campo de velocidades. Caso contrário, é evidente que é melhor fazê-lo após a determinação desse campo.
7. Tratar o novo campo de pressões P como P^* , retornar ao passo 2 e repetir a seqüência até que se obtenha a solução convergida.

11.5.1. Considerações a respeito do algoritmo SIMPLE

1. Para a solução das equações da quantidade de movimento e de correção de pressões, faz-se uso de algoritmo baseado no método 'Line by Line', apresentado e recomendado por Patankar [59]. Este método consiste essencialmente em resolver as equações para uma linha, ou coluna, da matriz que armazena os valores das incógnitas. Para isso se assume como constantes nas equações, os valores mais recentes disponíveis dessas incógnitas nas linhas, ou colunas, adjacentes. Desse modo, as equações confrmam-se como um sistema tridiagonal, que é resolvido pelo algoritmo de Thomas. Esse procedimento permite que as informações das condições de contorno penetrem no domínio do escoamento com maior rapidez que

na solução ponto a ponto.

2. O critério de convergência adotado para as equações da quantidade de movimento (11.106 e 11.107) impõe que o módulo de seu resíduo seja inferior a um valor prefixado ($0 < \Delta < 1$), que corresponde à precisão da solução. Esse resíduo representa o erro cometido ao substituir em cada uma das equações os valores mais recentes das velocidades. Para considerar todo o domínio da solução, toma-se o maior valor de resíduo aí encontrado a cada iteração, para compará-lo à precisão (Δ).

3. Para a equação de correção das pressões o critério adotado implica em comparar com a precisão Δ , o maior valor do termo b (11.116), em módulo, encontrado no domínio do escoamento, a cada iteração. Uma vez que a convergência impõe que ($b \neq 0$) e esta condição garante, de per si, que a solução satisfaça a conservação da massa.

4. Como as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento demandam critérios de convergência diferentes entre si, o código computacional desenvolvido emprega ambos, comparando os valores máximos, em módulo, do termo b e dos resíduos das equações (11.106) e (11.107) com a precisão Δ , a cada iteração.

5. Para obter as equações de correção das velocidades (11.114) e das pressões (11.115), os termos referentes às correções de velocidades na vizinhança do ponto considerado foram desprezadas (11.109 e 11.110). Tal procedimento confere ao algoritmo resultante um caráter semi-implícito. Torna-se, portanto, necessário empregar sub-relaxações para obter a convergência. Assim, ao resolver as equações da quantidade de movimento (passo 2), corrigem-se os resultados obtidos com um coeficiente de sub-relaxação (α_u), usualmente da ordem de 0.5. Do mesmo modo, na correção de P a partir de P (passo 4) emprega-se um coeficiente de sub-relaxação (α_p), normalmente da ordem de 0,8, na forma ($P = P^* + \alpha_p P'$).

6. A correção de u^1 e u^2 (passo 5), por outro lado, não deve ser relaxada. Porque, a despeito do caráter aproximado da equação de correção de pressões, quando se utilizam seus resultados para corrigir as velocidades, o campo resultante deve satisfazer a equação da continuidade.

7. Quando as condições de contorno em todas as fronteiras do domínio prescrevem velocidades, num problema estacionário, a

equação de correção de pressões, devido à sua forma, fica impedida de determinar valores absolutos para a variável P' . Logo, se P' é solução, $(P' + C)$, onde C é constante em todo o domínio, também o é. Portanto essa variável assume caráter relativo e a solução do campo de pressões não é única. Por outro lado, como a equação (11.115) é resolvida iterativamente, obtém-se uma solução cujos valores dependem da estimativa inicial adotada. Vale notar (Patankar [59]), que um método não iterativo encontraria uma matriz singular para P' e não obteria resposta.

8. A indeterminação de P' pode ser explicada a partir da própria equação (11.115). Pois, quando se deixa de resolvê-la para um único V.c. em todo o domínio, a solução assim obtida ainda satisfaz à continuidade. Isto se dá porque tal equação foi aplicada a todos os seus vizinhos, balanceando seus fluxos de massa. Dessa forma, os fluxos que atravessam as interfaces do V.c. em questão foram indiretamente balanceados. Fica, portanto, evidente que tal equação não traz nenhuma informação a esse V.c. que não esteja implicitamente contida na solução dos demais. Pode-se então remover a indeterminação de P' fixando um valor conveniente sobre um dos V.c., no caso ($P'_p = 0$), e resolvendo a equação (11.115) para os demais.

9. Assim procedendo, a conservação da massa não é violada e, devido à forma da equação de correção de pressões, a solução implicará necessariamente em ($P' = 0$) sobre todo o domínio, para ($b = 0$). Com isso também se impede que P' adquira valores excessivamente altos durante o processo iterativo. Com o mesmo propósito, é também recomendável tomar ($P' = 0$) como estimativa inicial para P' , a cada nova iteração.

10. Deve-se enfatizar que, quando se prescreve a pressão em uma das fronteiras do domínio, não ocorre a indeterminação de P' . O mesmo vale quando se considera o fluido compressível, pois nesse caso $\rho = \rho(P, T)$, as pressões são absolutas e a indeterminação desaparece.

11.6. O Algoritmo SIMPLE para o Escoamento Compressível

Nos problemas em que a dependência entre a massa específica do fluido e a pressão é significativa, as simplificações adotadas na equação de correção de pressões (11.115) traduzem-se em forte

tendência à divergência do processo iterativo. Para essas situações Patankar [59] sugere, na forma de um problema proposto, que se reformule a equação de correção de pressões, de modo a considerar os efeitos de compressibilidade. Esta proposição é desenvolvida a seguir.

O ponto de partida para a formulação compressível da equação de correção de pressões reside na constatação de que, a forma (11.115) exibe comportamento elíptico, de modo que a variável P' tem mesma influência em todas as direções, não importando a direção do escoamento. Comporta-se, portanto, de forma semelhante à temperatura na condução de calor. Por outro lado, os efeitos de compressibilidade podem conferir à pressão um caráter parabólico, modificando sua influência na direção e no sentido do escoamento. Esse é o caso dos escoamentos supersônicos, onde a pressão à jusante não altera as condições de montante.

Para incorporar essa característica à equação de correção das pressões, é preciso considerar inicialmente uma equação de estado do tipo $\rho = \rho(P,T)$. No presente estudo, dada a natureza dos problemas analisados, considera-se a equação dos gases perfeitos:

$$Pv = RT \rightarrow \rho = \frac{P}{RT} \quad (11.117)$$

Torna-se então um escoamento unidimensional estacionário, figura (11.12), e assumindo para a pressão e a massa específica perfis lineares por trechos, a conservação da massa pode ser expressa na forma:

$$(\int \rho u^1 \Delta \eta)_e - (\int \rho u^1 \Delta \eta)_w = 0 \quad (11.118)$$

$$\rho_e = \frac{\rho_E + \rho_P}{2} \quad e \quad \rho_w = \frac{\rho_P + \rho_W}{2} \quad (11.119)$$

$$P_e = \frac{P_E + P_P}{2} \quad e \quad P_w = \frac{P_P + P_W}{2} \quad (11.120)$$

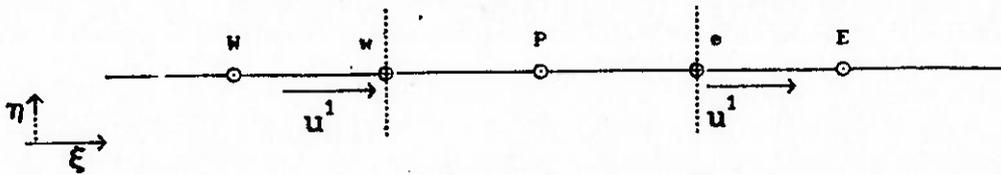


Figura 11.12 - Representação de V.c. em problema unidimensional.

Define-se, de modo análogo a (11.108), uma expressão de correção da massa específica em função da correção de pressão P' , usando para isso a equação de estado (11.117):

$$\rho = \rho^* + \rho' \Rightarrow \frac{P}{RT} = \frac{P^*}{RT} + \frac{P'}{RT} \Rightarrow \rho = \rho^* + BP' \quad (11.121)$$

Once o coeficiente B é definido como: $B = (RT)^{-1}$. Assim, o produto (ρu^1) pode ser escrito na forma:

$$(\rho u^1) = (\rho^* + \rho')(u^{1*} + u^{1'}) = \rho^* u^{1*} + \rho^* u^{1'} + \rho' u^{1*} + \rho' u^{1'} \quad (11.122)$$

Despreza-se o último termo, referente ao produto das correções $(\rho' u^{1'})$, já que se assume que essas devam desaparecer na convergência. Aplica-se o resultado à expressão (11.118):

$$\begin{aligned} & (J_e \rho_e^* u_e^{1*} \Delta \eta - J_w \rho_w^* u_w^{1*} \Delta \eta) + (J_e \rho_e^* u_e^{1'} \Delta \eta - J_w \rho_w^* u_w^{1'} \Delta \eta) \\ & + (J_e \rho_e' u_e^{1*} \Delta \eta - J_w \rho_w' u_w^{1*} \Delta \eta) = 0 \end{aligned} \quad (11.123)$$

Considerando que:

$$\begin{cases} u_e^{1'} = C_e (P_P' - P_E') \\ u_w^{2'} = C_w (P_P' - P_N') \end{cases} \quad (11.124)$$

$$\begin{cases} \rho_e' = B_e P_e' = B_e (P_E' + P_P')/2 \\ \rho_w' = B_w P_w' = B_w (P_W' + P_P')/2 \end{cases} \quad (11.125)$$

Once B_e e B_w são avaliados por meio de médias aritméticas das temperaturas no pontos adjacentes às fronteiras consideradas. Ressalte-se que isso equivale a assumir um perfil linear por

trechos para a temperatura, do mesmo modo que foi feito para a pressão e a massa específica. Assim, a expressão (11.123) pode ser reescrita:

$$\begin{aligned}
 & (J_e \rho_e^* u_e^{1*} \Delta \eta - J_w \rho_w^* u_w^{1*} \Delta \eta) + \left[\rho_e^* C_e (P'_E - P'_E) - \rho_w^* C_w (P'_P - P'_N) \right] + \\
 & + \left[J_e u_e^{1*} B_e \Delta \eta \frac{(P'_E + P'_P)}{2} - J_w u_w^{1*} B_w \Delta \eta \frac{(P'_E + P'_P)}{2} \right] = 0 \quad (11.126)
 \end{aligned}$$

Nessa equação, definem-se os termos difusivo (\mathcal{G}) e convectivo (\mathcal{J}), análogos àqueles definidos para a equação geral da difusão:

$$\mathcal{G}_e = \rho_e^* C_e \quad e \quad \mathcal{J}_e = J_e u_e^{1*} B_e \Delta \eta \quad (11.127)$$

Essa equação (11.126) pode ser posta na forma:

$$\begin{cases}
 a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + b \\
 a_E = \mathcal{G}_e - \mathcal{J}_e/2 \\
 a_W = \mathcal{G}_w + \mathcal{J}_w/2 \\
 a_P = \mathcal{G}_e + \mathcal{G}_w + (\mathcal{J}_e - \mathcal{J}_w)/2 \\
 b = \mathcal{G}_w - \mathcal{G}_e
 \end{cases} \quad (11.128)$$

Nessa forma, a equação de correção de pressões permite que a variável P' exerça a mesma influência em ambas as direções, ($\xi > 0$) e ($\xi < 0$). Ao lado disso, a possibilidade de divergência fica evidente quando se considera que os coeficientes a_w , a_E e a_P , podem assumir sinais diferentes entre si, violando uma das regras que garantem a convergência.

A razão disso é a interpolação adotada para P' nas faces dos volumes de controle. Ou seja, a adoção da média aritmética falha, uma vez que confere o mesmo peso aos valores de P' à montante e à jusante da interface. Em verdade, uma melhor aproximação da realidade física deve conferir preponderância ao valor de P' à montante dessa interface. Isto pode ser obtido ao se interpolar a correção de pressão por um esquema do tipo 'Upwind', fazendo:

$$\begin{cases} I'_e = P'_P & \text{se } \delta_e > 0 \\ I'_e = P'_E & \text{se } \delta_e < 0 \end{cases} \quad (11.129)$$

$$\text{Logo: } \delta_e P'_e = P'_P [\delta_e, 0] - P'_E [-\delta_e, 0] \quad (11.130)$$

Com isso, a expressão (11.123) pode ser reformulada, resultando em:

$$\begin{cases} a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + b \\ a_E = \mathcal{G}_e + [-\delta_e, 0] \\ a_W = \mathcal{G}_w + [\delta_w, 0] \\ a_P = a_E + a_W \\ b = \mathcal{G}_w - \mathcal{G}_e \end{cases} \quad (11.131)$$

Esta forma confere a preponderância necessária ao valor de P' à montante da interface, sem, no entanto, violar jamais a exigência de que os coeficientes da equação tenham sempre o mesmo sinal. Com isso, pode-se prontamente generalizá-la para o problema bidimensional não estacionário, no caso, ou mesmo tridimensional, se necessário. Para tanto toma-se a equação da continuidade na forma completa (11.54), introduz-se nela esses resultados, donde se obtém:

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b \quad (11.133)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_E = \mathcal{G}_e + [-\delta_e, 0] \\ \varepsilon_W = \mathcal{G}_w + [\delta_w, 0] \\ \varepsilon_N = \mathcal{G}_n + [-\delta_n, 0] \\ \varepsilon_S = \mathcal{G}_s + [\delta_s, 0] \\ \varepsilon_P = a_E + a_W + a_N + a_S \\ k = (\mathcal{G}_w - \mathcal{G}_e) + (\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_n) + \frac{\rho_P(P^0, T^0) - \rho_P(P, T)}{\Delta t} J_{(c)} \Delta \xi \Delta \eta \end{cases} \quad (11.134)$$

Essa forma da equação de correção de pressões é empregada na simulação numérica do escoamento compressível. Para tanto emprega-se o mesmo algoritmo SIMPLE descrito anteriormente, com a

diferença de que, neste caso, inclui a solução da equação da conservação da energia, resultando na forma:

1. Estimar um campo de pressões P^* .
2. Resolver as equações (11.106) e (11.107), de modo a determinar o campo de velocidades correspondente (u^{1*}, u^{2*}) .
3. Resolver a equação (11.133), para obter os valores de P' .
4. Determinar o campo de pressões P , por meio da equação (11.108).
5. Determinar o campo de velocidades (u^1, u^2) , utilizando as equações (11.114).
6. Resolver a equação da energia na forma completa (11.64) com o termo fonte fornecido pela expressão (11.75).
7. Tratar o novo campo de pressões P como P^* , retornar ao passo 2 e repetir a seqüência até que se obtenha a solução convergida.

Os valores de pressão e temperatura utilizados são sempre absolutos.

Deve-se ressaltar que, por ser a massa específica neste caso, dependente da temperatura e da pressão, $\rho = \rho(P, T)$, ela deve ser avaliada à partir dos valores dessas variáveis, em cada ponto, para todas as equações do modelo, em todos os termos em que estiver presente. Para os pontos centrais dos V.c., isto é feito diretamente pela equação de estado, uma vez que sobre esses se conhecem diretamente os valores de pressão e temperatura. Nos pontos das interfaces dos tipos (we) ou (ns), empregam-se médias aritméticas dos valores de $\rho(P, T)$ nos pontos centrais (c) adjacentes. Da mesma forma, para os pontos da malha, tipo (o), fazem-se médias aritméticas dos valores da massa específica nos 4 pontos centrais que os circundam (no caso 2-D).

Os pontos das fronteiras do domínio, por outro lado, tem os valores de temperatura conhecidos, porque são prescritos nas condições de contorno, ou porque são obtidos como parte da simulação. Dessa forma, empregam-se esses valores de temperatura, juntamente com expansões em série de Taylor, em primeira ordem, dos valores de pressão nos pontos centrais vizinhos, para avaliar ρ , a partir da equação de estado.

De resto, valem para a simulação do escoamento compressível a

mesma forma especificação das condições de contorno apresentada acima, e todas as observações que se seguiram para o algoritmo SIMPLE. Com especial atenção ao fato, já mencionado, de que neste caso, não ocorre a intederminação da pressão.

11.7. O Algoritmo SIMPLEX

O algoritmo SIMPLEX, desenvolvido por Van Doormal e Raithby [23], consiste numa série de modificações aplicáveis à fomulação do algoritmo SIMPLE, que são recomendadas pelos autores, como forma de aprimorar seu desempenho.

A primeira delas diz respeito à forma de sub-relaxar a equação geral da difusão que, segundo a proposta original de Patankar [59], pode ser escrita:

$$\frac{a_p}{\alpha} \phi_p = \sum_{n_b} a_{nb} \phi_{nb} + b + \frac{1 - \alpha}{\alpha} a_p \phi_p^* \quad (11.135)$$

Onóe α representa o coeficiente de sub-relaxação e ϕ_p^* o valor da variável ϕ no ponto P, na iteração anterior. Nesse caso, a formulação do termo fonte linearizado é do tipo $s = -s_p \phi_p + s_c$, onde ($s_p > 0$) e s_c é constante. Assim, o coeficiente a_p assume a forma:

$$a_p = \sum_{n_b} a_{nb} + a_p^0 - s_p \Delta \xi \Delta \eta \quad (11.136)$$

Sendo que os demais coeficientes conservam a forma apresentada neste trabalho. Os autores propõem que a equação (11.135) seja posta na forma:

$$a_p \left(1 + \frac{1}{E} \right) \phi_p = \sum_{n_b} a_{nb} \phi_{nb} + b + \frac{a_p}{E} \phi_p^* \quad (11.137)$$

$$\text{Onde: } E = \frac{\alpha}{1 - \alpha} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{E}{1 + E} \quad (11.138)$$

Embora essa modificação seja simples, o fator E permite uma analogia física. Para tanto, considere-se que a expressão (11.137) corresponde à equação que se obtém quando ϕ é atualizada para um transitório com intervalo de tempo Δt , que é proporcional a um

intervalo de referência Δt^* , na forma:

$$\Delta t = E \Delta t^* \quad \text{onde: } \Delta t^* = \frac{\rho \Delta \xi \Delta \eta}{a_p} \quad (11.139)$$

Onde o Δt^* está relacionado ao intervalo de tempo necessário para a difusão e a convecção de uma variação de ϕ sobre o volume de controle centrado em (P). É, portanto, uma escala de tempo da forma discreta da equação geral. Por esse motivo, valores de E no intervalo ($0 < E \leq 1$) fazem com que Δt fique na faixa requerida para a estabilidade da convergência de uma solução explícita de ϕ . Por outro lado, valores de E maiores que a unidade têm o efeito de acalorar a convergência de uma solução implícita, como é o caso do método ora descrito, sendo por isso amplamente utilizados.

Vale ressaltar que a escala de tempo varia com o V.C. considerado e, por isso um valor constante de E implica que o intervalo de tempo Δt não seria constante sobre o domínio considerado. Ao lado disso, os valores de E adotados para as diversas variáveis ϕ de um problema podem ser diferentes entre si, fazendo com que tais variáveis sejam atualizadas a taxas diferentes no processo iterativo. Tal procedimento, segundo os autores, é favorável à convergência do método.

Por se tratar de um caso particular da equação geral da difusão, aplica-se diretamente à equação da quantidade de movimento o tratamento acima exposto. É, entretanto nessa equação que se procede a modificação mais importante do algoritmo SIMPLEC.

Discute-se, nesse sentido, a aproximação feita na equação da correção de pressões, ao desprezar pura e simplesmente o termo que se refere à somatória do produto dos coeficientes pelas velocidades nos pontos vizinhos a (P), expressões (11.109) e (11.110). Segundo os autores, esse termo tem a mesma ordem de magnitude de $(a_e^1 u_e^1)$ ou $(a_n^2 u_n^2)$, dependendo da direção considerada. Por isso, uma aproximação mais consistente pode ser feita subtraindo-se de ambos os lados dessas expressões os termos $\sum_{nb}^1 u_{nb}^1$ e $\sum_{nb}^2 u_{nb}^2$, respectivamente:

$$\begin{cases} (\varepsilon_e^1 - \Sigma a_{nb}^1) u_e^{1'} = \left[\sum_{nb} a_{nb}^1 (u_{nb}^{1'} - u_e^{1'}) \right] + (g^{11} J \Delta \eta)_{(we)} (P'_P - P'_E) \\ (a_n^2 - \Sigma a_{nb}^2) u_n^{2'} = \left[\sum_{nb} a_{nb}^2 (u_{nb}^{2'} - u_n^{2'}) \right] + (g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)} (P'_P - P'_N) \end{cases}$$

(11.140)

Desse modo, os termos entre colchetes representam diferenças entre elementos de mesma ordem de magnitude. Assim, ao desprezá-los, incorre-se em menor erro e, portanto numa aproximação mais consistente.

Com isso, obtém-se uma formulação da equação de correção de pressões inteiramente semelhante a (11.115), a menos dos coeficientes C_e e C_n , expressão (11.113), que têm sua forma alterada para:

$$\begin{cases} C_e = \frac{(g^{11} J \Delta \eta)_{(we)}}{(a_e^1 - \Sigma a_{nb}^1)} \\ C_n = \frac{(g^{22} J \Delta \xi)_{(ns)}}{(a_n^2 - \Sigma a_{nb}^2)} \end{cases} \quad (11.141)$$

Com essa modificação, não há necessidade de sub-relaxar a correção de P , logo faz-se $\alpha_p = 1$. Além disso, os autores fazem referência ao fato de que, quando o coeficiente s_p da linearização da fonte é nulo, como no caso do presente trabalho, o algoritmo que resulta dessas modificações corresponde exatamente ao método do intervalo de tempo consistente, desenvolvido por Raithby e Schneider []. Nesse caso, $\alpha_p = (1 + E)^{-1}$.

Para a solução da equação de correção de pressões, os autores recomendam que se utilize o método 'Line-by-Line', adotado no presente trabalho. No entanto propõem que se modifique sua aplicação, no sentido de acelerar a convergência. Para isso considera-se a aplicação desse método à referida equação, ao longo de uma linha de (i) constante na matriz que armazena P' :

$$a_{ij} P'_{ij} = b_{ij} P'_{i+1j} + c_{ij} P'_{i-1j} + (d_{ij} P'_{i+1j+1} + e_{ij} P'_{i+1j-1} + f_{ij})$$

(11.142)

$$\text{Onde: } \begin{cases} a_{1j} = a_P & b_{1j} = a_E & c_{1j} = a_W \\ d_{1j} = a_N & e_{1j} = a_S & f_{1j} = b \end{cases} \quad (11.143)$$

Para os termos entre parenteses na expressão (11.142) adotam-se os valores mais recentes disponíveis. Nesse sentido, se o domínio é percorrido no sentido de (i) crescente, o valor de P'_{i-1j} adotado corresponde a iteração atual. O valor adotado para P'_{i+1j} , por outro lado, resulta da iteração anterior, o que pode retardar a convergência.

Propõe-se então que P'_{i+1j} seja avaliado a partir de seu valor na iteração anterior (P'_{i+1j}^*), e do valores de P'_{ij} nas iterações atual e anterior, pelo seguinte procedimento:

$$P'_{i+1j} = P'_{i+1j}^* + (\theta - 1)(P'_{ij} - P'_{ij}^*) \quad (11.144)$$

Onde θ representa um coeficiente de sobre-relaxação. A substituição dessa expressão em (11.142) resulta:

$$\begin{aligned} (a_{1j} - d_{1j}(\theta-1))P'_{ij} &= b_{1j}P'_{i+1j} + c_{1j}P'_{i-1j} + (d_{1j}[P'_{i+1j}^* + \\ &- (\theta-1)P'_{ij}^*] + e_{1j}P'_{i,j-1} + f_{1j}) \end{aligned} \quad (11.145)$$

Os valores recomendados para θ situam-se no intervalo $(1.85 \leq \theta \leq 1.95)$, sendo normalmente utilizado o valor $(\theta = 1.85)$. Valores superiores a 2.0 normalmente provocam divergência.

Os autores também recomendam que se proceda a solução da equação acima pelo 'Line-by-Line', tanto para as linhas de (i) constante, como para as linhas de (j) constante, a cada iteração.

11.7.1. Condições de Contorno

As recomendações dos autores Van Doormal e Raithby [23] para o tratamento das condições de contorno de pressão prescrita e velocidade prescrita, normal à fronteira, traduzem-se em resultados idênticos aos discutidos acima.

11.7.2. Critério de Convergência.

Propõe-se também uma modificação no critério de convergência adotado para a equação de correção de pressões, empregando a norma dos resíduos dessa equação:

$$\|r_p\| = \sqrt{\sum (a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b - a_P P'_P)^2} \quad (11.146)$$

Onção a somatória refere-se a todos os pontos interiores ao domínio.

O critério proposto impõe que se estime o valor inicial dessa norma $\|r_p\|^0$, calculado para a distribuição inicial de P' (P'^0), e que se compare ao resultado obtido os valores da norma obtidos a cada nova iteração (k), na forma:

$$\|r_p\|^k \leq \gamma_p \|r_p\|^0 \quad (11.147)$$

O valor adotado para γ_p situa-se normalmente entre 0.05 e 0.25.

Para cada iteração do algoritmo SIMPLEX, a equação de correção de pressões é resolvida em ambas as direções (ξ e η), reiteradamente, até que o limite expresso em (11.147) seja satisfeito.

A justificativa para esse critério reside no fato de que outros critérios consagrados, que impõem simplesmente que a norma mais recente seja inferior a uma precisão ϵ , demandam muito maior tempo computacional, exigindo maior número de iterações da equação de P' no início do processo e muito poucas no seu final.

Há que se enfatizar, porém, que a convergência da equação de correção de pressões implica necessariamente em que ($b \neq 0$). E isso, quando se remove a indeterminação de pressões, impõe que ($P' \neq 0$) em todo o domínio (observações 7, 8, e 9, do item 11.5.1). Por esse motivo, na implantação desse algoritmo no presente trabalho, ao invés de adotar o critério de convergência exposto acima, optou-se por adotar diretamente a condição $[\max(|b|) \leq \Delta]$.

Foram realizados testes preliminares em que, a cada iteração, resolvia-se a equação de P' , para (i) constante e para (j) constante, até que b fosse inferior a uma precisão intermediária ϵ , tal que ($\epsilon > \Delta$). Entretanto, a ausência desses procedimentos não impediu que obtivesse a convergência da solução. Por isso,

optou-se por não utilizá-los no presente trabalho. Adotou-se, por outro lado, as proposições referentes à relaxação das equações do modelo e à forma revisada da equação de correção de pressões.

11.8. O Algoritmo SIMPLER

Este algoritmo foi proposto por Patankar [59], com a finalidade de aprimorar o emprego da equação de correção de pressões. No sentido de que essa equação é muito apropriada para corrigir as velocidades, mas apresenta problemas na correção das pressões, em virtude das simplificações adotadas em sua formulação.

Nessas condições, propõe que se utilizem a correção de pressões, e o campo de P' resultante, apenas para corrigir as velocidades, provendo o modelo de outra equação destinada a corrigir o campo de pressões com mais eficiência.

Para obter essa nova equação, considera-se novamente a equação da quantidade de movimento nas direções ξ e η , expressões (11.104) e (11.105), e as reescreve na forma:

$$\begin{cases} u_e^1 = \frac{\sum_{nb}^1 u_{nb}^1 + b}{a_e} + C_e (P'_P - P'_E) \\ u_n^2 = \frac{\sum_{nb}^2 u_{nb}^2 + b}{a_n} + C_n (P'_P - P'_N) \end{cases} \quad (11.148)$$

Ressalte-se que com isso não se introduz nenhuma simplificação na referida equação. Definem-se então as pseudovelocidades \hat{u}^1 e \hat{u}^2 :

$$\begin{cases} \hat{u}_e^1 = \frac{\sum_{nb}^1 u_{nb}^1 + b}{a_e} \\ \hat{u}_n^2 = \frac{\sum_{nb}^2 u_{nb}^2 + b}{a_n} \end{cases} \quad (11.149)$$

Deve-se enfatizar que esse não é um sistema de equações, mas apenas relações de recorrência que permitem calcular diretamente as pseudovelocidades à partir do campo de velocidades. Assim,

pode-se escrever expressões análogas a (11.114), que relacionam u^1 e u^2 a \hat{u}^1 e \hat{u}^2 , respectivamente:

$$\begin{cases} u_e^1 = \hat{u}_e^1 + C_e(P'_P - P'_E) \\ u_n^2 = \hat{u}_n^2 + C_n(P'_P - P'_N) \end{cases} \quad (11.150)$$

Com isso, pode-se obter, à partir da equação da continuidade, uma equação para as pressões propriamente ditas, inteiramente análoga à equação de correção das pressões. Com uma única diferença no que diz respeito ao termo b, que agora se refere às pseudovelocidades:

$$a_P P_P = a_E P_E + a_W P_W + a_N P_N + a_S P_S + b \quad (11.151)$$

$$\begin{cases} a_E = (J\Delta\eta)_{(we)} C_e \rho \\ a_W = (J\Delta\eta)_{(we)} C_w \rho \\ a_N = (J\Delta\eta)_{(ns)} C_n \rho \\ a_S = (J\Delta\eta)_{(ns)} C_s \rho \\ a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \\ b = \frac{\rho_P^0 - \rho_P}{\Delta t} J_c \Delta\xi \Delta\eta + \rho (J_w \hat{u}_w^1 - J_e \hat{u}_e^1) \Delta\eta + \\ + \rho (J_s \hat{u}_s^2 - J_n \hat{u}_n^2) \Delta\xi \end{cases} \quad (11.152)$$

Uma vez que nenhuma aproximação foi feita na dedução dessa equação, ao se introduzir o perfil correto de velocidades, ela deve fornecer prontamente o campo correto de pressões. Além disso, suas condições de contorno são tratadas da mesma forma que as da equação de correção de pressões, já que ambas têm estrutura inteiramente análoga.

Deve-se ressaltar que o termo b da expressão (11.152) não pode ser usado como critério de convergência. Pois não se anula ao longo do processo iterativo, uma vez que não envolve velocidades verdadeiras e não representa, portanto, um balanço de massa nos volumes de controle. Além disso, sua nulidade implicaria em uma

solução trivial para o campo de pressões. Fisicamente isso só é possível para os escoamentos governados pela tensão de cisalhamento, como o de Couette, que são casos particulares.

Desse modo, um critério de convergência para a equação de pressões deve se basear em seu resíduo. Porém, devido à sua forma, essa equação resulta, a cada iteração, diretamente num campo de pressões que corresponde ao campo de velocidades disponível. Assim, sua convergência para o campo de pressões fisicamente correto implica que se utilize o campo de velocidades igualmente correto. Os campos de velocidade e pressão corretos, por sua vez, devem satisfazer à equação da quantidade de movimento. Logo, a convergência desta última, impõe necessariamente que se satisfaça a primeira.

Empregando esses resultados, o algoritmo SIMPLER desenvolvido por Patankar [59] corresponde a:

1. Estimar um campo de velocidades (u^1, u^2).
2. Calcular os coeficientes da equação da quantidade de movimento em ambas as direções (ξ e η) e determinar os valores das pseudovelocidades (\hat{u}^1, \hat{u}^2), sobre todo o domínio.
3. Calcular os coeficientes da equação de pressão (11.151), e resolvê-la para obter o campo de pressões (P).
4. Tratando esse campo de pressões como (P^*), resolver a equação da quantidade de movimento nas direções ξ e η , para determinar u^{1*} e u^{2*} .
5. Calcular o termo b da equação de correção de pressões (11.115) e resolvê-la para obter os valores de P' sobre todo o domínio.
6. Empregar os valores de P' obtidos no passo anterior para corrigir as velocidades, mas não corrigir as pressões.
7. Resolver a equação geral de difusão para outras grandezas físicas ϕ , se necessário.
8. Retornar ao passo 2 para reiteração, até que os valores máximos dos módulos dos resíduos da equação da quantidade de movimento em ambas as direções e do termo b na equação de correção das pressões sejam arbitrariamente pequenos.

Não se define nesse trabalho, pelos motivos acima expostos, um critério de convergência diretamente aplicado à equação de

pressões. Considera-se, ao invés disso, a convergência da própria equação da quantidade de movimento.

Vale observar que, pelos motivos expostos acima, o emprego do perfil correto de velocidades, como estimativa inicial, para o algoritmo SIMPLER, fornece prontamente a solução do campo de pressões. Para o algoritmo SIMPLE, por outro lado, o emprego do mesmo perfil, juntamente com um campo estimado de pressões deve produzir inicialmente um perfil degenerado de velocidades. Pois estes se utiliza do campo estimado de pressões para obter u^1 e u^2 . Portanto, no algoritmo SIMPLE a convergência deve implicar em várias iterações.

Assim, no algoritmo SIMPLER, se de um lado a equação de correção de pressões produz campos de velocidades razoáveis, de outro, a equação de pressões deve produzir a partir destes, campos de pressão também razoáveis. Logo, a convergência deve envolver um número de iterações menor que o SIMPLE, embora cada iteração do primeiro demande maior esforço computacional que deste último.

11.9. A Difusão Numérica

Considere-se um problema difuso-convectivo, de caráter estacionário, em que se deve resolver a equação geral (11.64) para uma grandeza física genérica ϕ , considerando nulo o coeficiente de difusão ($\lambda=0$). Não se espera, obviamente, que a solução seja influenciada por um mecanismo de transporte difusivo, que não está presente nesse caso.

Entretanto, segundo Patankar [59], em pontos do domínio onde a direção do vetor velocidade não concorda com nenhum dos versores (g^1 ou g^2), deve ocorrer a difusão da grandeza ϕ através de um mecanismo de transporte de natureza puramente numérica. Esse mecanismo também é conhecido como difusão falsa e pode, em determinadas circunstâncias, comprometer definitivamente a solução obtida.

Essa forma de difusão restringe-se, porém, àquelas regiões onde, conforme citado, a direção do vetor velocidade não é perpendicular a nenhuma das faces dos volumes de controle. Pois tem como causa o fato de se ter tratado o fluxo convectivo em cada face dos volumes de controle como localmente unidimensional, ao se deduzir a equação (11.64). Nesse sentido, ainda segundo Patankar

[59], uma forma de avaliar o coeficiente de difusão falsa (λ_f), para problemas bidimensionais em coordenadas cartesianas seria:

$$\lambda_f = \frac{\rho \|\vec{u}\| \Delta x \Delta y \sin(2\theta)}{4[\Delta x(\sin\theta)^3 + \Delta y(\cos\theta)^3]} \quad (11.153)$$

Once $\|\vec{u}\|$ corresponde ao modulo da velocidade local, teta designa o ângulo ($0 \leq \theta \leq \pi/2$) entre o vetor \vec{u} e o eixo x, e os valores Δx e Δy representam as dimensões dos volume de controle bidimensional. Pode-se notar dessa expressão, que o λ_f é máximo quando ($\theta = \pi/4$).

Patankar [59] também refere-se ao fato de que mesmo a utilização do esquema de diferenças centradas não resolve o problema. Uma vez que tal esquema favorece a ocorrência de soluções degeneradas, conforme apresentado acima, principalmente nos casos em que os valores de Peclet são altos. Sugere então, como forma de minimizar o problema, as seguintes medidas:

1. Como na maioria dos problemas físicos o mecanismo de difusão está presente, bastaria poder garantir que o coeficiente de difusão falsa fosse inferior àquele de natureza física.

2. Minimizar λ_f fazendo Δx e Δy menores nas regiões propensas ao aparecimento do fenômeno.

3. Procurar, sempre que possível, construir a malha nessas regiões de tal forma que o perfil esperado de velocidades se alinhe a um dos eixos coordenados, de modo a obter menores valores para θ .

Para os sistemas de coordenadas generalizados, por outro lado, pode-se aplicar o procedimento 2 por meio dos métodos de controle do espaçamento, procurando obter malhas mais finas nas regiões propensas à difusão falsa. Ao lado disso, se se puder fazer com que o traçado das linhas de coordenada constante no espaço físico se assemelhe ao contornos das linhas de corrente do escoamento, o procedimento 3 estará implicitamente satisfeito.

12. Exemplos de Aplicação dos Algoritmos de Simulação Numérica.

Neste tópico apresentam-se alguns exemplos de aplicação dos algoritmos baseados no Método dos Volumes Finitos, utilizando sistemas de coordenadas generalizados. Esses exemplos procuram enfocar alguns problemas típicos de simulação numérica, sem no entanto esgotar todas as possibilidades de aplicação. Nesse sentido, os casos considerados abaixo são de dois tipos:

I. Os que se referem a problemas cuja solução analítica é conhecida e têm como finalidade testar o algoritmo proposto. Para tanto, comparam-se a essa solução, os resultados da simulação numérica. Naturalmente esses problemas devem envolver configurações geométricas simples para as fronteiras do escoamento.

II. Os casos que envolvem fronteiras de configuração geométrica arbitrária. Esses se destinam, em última análise, a testar o desempenho dos algoritmos com respeito a efeitos decorrentes da métrica do sistema de coordenadas. Verifica-se também, se as soluções obtidas apresentam comportamento fisicamente compatível, com relação a efeitos introduzidos pela curvatura das fronteiras como, por exemplo, o descolamento da camada limite devido a gradientes de pressão adversos.

Para considerar esses aspectos nas simulações ora desenvolvidas, convém estabelecer como se manifestam os efeitos genericamente atribuídos à métrica dos sistemas de coordenadas. Para tanto, invocam-se os conceitos sobre a transformação entre os espaços físico e transformado, apresentados anteriormente. Com base nesses conceitos, pode-se estabelecer quatro classes distintas de malhas computacionais, quais sejam:

1. As malhas cartesianas, onde as fronteiras não apresentam nenhuma curvatura e não se emprega nenhum estiramento das coordenadas. Nesse caso específico, os operadores da transformação correspondem ao tensor unitário, portanto nenhum efeito da métrica se faz presente.

2. Os problemas onde as fronteiras são retilíneas, mas se empregam transformações de estiramento com módulo constante para as coordenadas, normalmente com o propósito de economizar o número de pontos da malha. Nestes casos, os efeitos da métrica fazem-se

presentes apenas através desses estiramentos, produzindo termos constantes para a métrica, embora não sejam unitários como no caso anterior. Excessão deve ser feita aos elementos que envolvem derivadas dos termos da métrica, como os símbolos de Christoffel, que são identicamente nulos em ambos.

3. Os casos em que as fronteiras são retilíneas, mas empregam-se métodos de controle de espaçamento da malha. Com esse procedimento, obtém-se estiramento variável das coordenadas. Portanto, os efeitos da métrica manifestam-se de forma completa, através de termos variáveis. Logo, os elementos que dependem das derivadas desses termos, a exemplo dos símbolos de Christoffel, não se anulam, como para as classes 1 e 2.

4. Problemas em que as fronteiras exibem curvatura. Para esses, os efeitos da métrica também se manifestam através de coeficientes variáveis, como no caso anterior, independente do fato de se empregar ou não o controle do espaçamento.

A conveniência dessa classificação deriva do fato de que um mesmo algoritmo generalizado deve se aplicar indistintamente a problemas pertencentes a qualquer um desses tipos. Ao lado disso, tem-se que a precisão dos termos da métrica depende da qualidade da malha. Como esses termos estão presentes nas equações do modelo, deve-se esperar que a qualidade da solução numérica também esteja condicionada à qualidade da malha. Isso é especialmente crítico nos casos 3 e 4, devido à importância que então assumem tais termos. Impõe-se, desse modo, que se empreguem precisões relativamente altas para a geração da malha computacional.

Outro aspecto importante a ser considerado reside no fato de que, embora do ponto de vista do processo iterativo a influência dos coeficientes da métrica tenha sempre natureza puramente numérica, não importando se representam efeitos de curvatura, controle de espaçamento, ou ambos. Do ponto de vista do problema considerado os primeiros têm significado físico para a solução, enquanto o segundo tem como único propósito aprimorar sua qualidade.

Nas simulações realizadas, empregaram-se condições de contorno a velocidade prescrita nas seções de entrada do domínio do escoamento e nas fronteiras físicas, garantindo as condições de aderência e impermeabilidade. Para sua seção de saída, empregou-se a condição de pressão constante. Precreveu-se, para isso, o valor

zero para os problemas incompressíveis, implicando que os algoritmos de simulação trabalham com pressões relativas. Para os escoamentos compressíveis, por outro lado, prescreveu-se a pressão absoluta $P_c = 101325.0$ Pa.

O esquema utilizado nas interpolações para o cálculo dos coeficientes do Método dos Volumes Finitos foi o da lei de potências, recomendado por Patankar [59].

Além disso, a pressão em cada ponto (i,j) ($P_{(i,j)}$), é adimensionalizada em função dos valores máximo e mínimo, dessa variável no domínio considerado, ($P_{(max)}$) e ($P_{(min)}$) respectivamente, segundo a relação [51]:

$$\bar{P}_{(i,j)} = \frac{P_{(i,j)} - P_{(min)}}{P_{(max)} - P_{(min)}} \quad (12.1)$$

Nas simulações de escoamentos incompressíveis o fluido considerado é o óleo, com as seguintes propriedades constantes, avaliadas à temperatura média de 60.C:

$$\rho = 864,04 \text{ Kg/m}^3 ; \quad c_p = 2,047 \cdot 10^3 \text{ J/Kg.C};$$

$$k = 0.14 \text{ W/m.C} ; \quad \mu = 0.725 \text{ Kg/ms.}$$

E para as simulações de escoamentos compressíveis o fluido considerados é o ar atmosférico, para o qual se assume o comportamento de gás perfeito, sendo tomadas como constantes as seguintes propriedades avaliadas à temperatura média de 27.C:

$$c_p = 1,0057 \cdot 10^3 \text{ J/Kg.C};$$

$$k = 0.02624 \text{ W/m.C} ; \quad \mu = 1,983 \cdot 10^{-5} \text{ Kg/ms.}$$

O valor da precisão adotado para as simulações é $\Delta = 10^{-4}$, salvo aviso em contrário.

Nestas condições, aplicaram-se os algoritmos desenvolvidos a diversos problemas de simulação do escoamento e transferência de calor, com o propósito de testá-los. Destes, apresentam-se a seguir os mais significativos.

Os valores numéricos das componentes físicas das velocidades e pressões encontram-se listados no apêndice C. Neste item

apresentam-se exclusivamente as representações gráficas dos resultados.

12.1. O Escoamento através de uma Passagem Retangular Simples

O escoamento através de uma passagem bidimensional plana, de seção retangular, pertencente à classe 2, foi utilizado como problema de teste para todos os algoritmos desenvolvidos. Para isso tomou-se o perfil de velocidades do escoamento laminar desenvolvido, que foi prescrito como condição de entrada. O número de Reynolds do escoamento foi calculado com base na altura da passagem, e o valor adotado para a condição de entrada foi de: $Re \approx 2,4 \cdot 10^3$. Em que pese o fato de ser esse valor próximo ao limite do regime laminar para tubos, sua utilização permitiu que se observassem as características de convergência dos algoritmos para velocidades mais altas.

Vale observar que a prescrição desse perfil de velocidades apenas na seção de entrada, empregando valores nulos para as velocidades em todo o resto do domínio, equivale, do ponto de vista da simulação, a um transiente hidrodinâmico. Nesse sentido, a condição inicial corresponde precisamente ao perfil imposto naquela seção, que encontra no início da contagem do tempo, o fluido estacionário. Em virtude desse procedimento guardar uma relação com um problema físico, ele se constitui em mais um teste importante para os algoritmos, sendo por isso adotado para todos os exemplos de aplicação ora considerados.

Essas condições foram aplicadas inicialmente aos algoritmos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLEC. Os resultados obtidos foram comparados entre si, revelando diferenças da ordem da precisão adotada. Tal ocorrência justifica-se completamente, uma vez que todos empregam as mesmas rotinas para o cálculo dos termos da fonte e demais coeficientes, diferindo apenas em sua estrutura final. Por esse motivo, apresenta-se nas figuras (12.1) e (12.2), o resultado obtido por apenas um deles, no caso o SIMPLER, para os campos de pressão e velocidade, respectivamente.

A comparação com a solução analítica, entretanto, revela para a componente da velocidade na direção (x), um erro máximo da ordem de 2%. Para a direção (y), por outro lado, os valores obtidos para a componente da velocidade são da ordem de 10^{-4} m/s, enquanto

a solução analítica prevê o valor zero. Com isso, o maior erro cometido no módulo da velocidade tem a mesma ordem daquele que se refere a sua componente em (x), e o erro máximo da direção do vetor velocidade tem a ordem do erro cometido para a componente na direção (y).

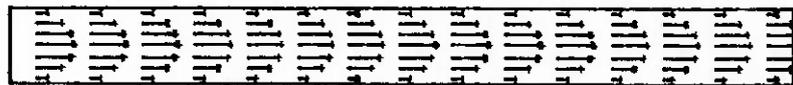


Figura 12.1 - Campo de velocidades do escoamento de óleo na passagem bidimensional plana.

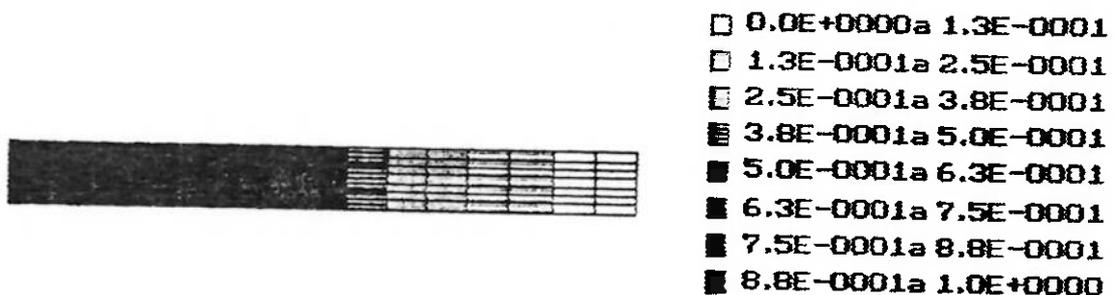


Figura 12.2 - Campo de pressões do escoamento de óleo na passagem bidimensional plana.

Muito embora as soluções obtidas sejam muito próximas, dentro da precisão considerada, o processo iterativo tem características nitidamente distintas para cada um desses algoritmos. Nesse sentido, os fatores de sub-relaxação (ω) empregados e o número de iterações até a convergência (N) valem, para cada um deles:

Algoritmo	Fatores de sub-relaxação		N
	Velocidade (ω_v)	Pressão (ω_p)	
SIMPLE	0.4	0.3	371
SIMPLER	0.6	-	322
	Coefficiente E	Coefficiente θ	N
SIMPLEC	10^5	1.2	1039

Como se pode notar da tabela acima, nesse caso os algoritmos SIMPLE e SIMPLER tiveram desempenho, a grosso modo, semelhante, enquanto o SIMPLEC demandou de um número muito maior de iterações para convergir. Para esse último os coeficientes utilizados não se mostraram os mais adequados ao problema, embora o fossem em outros casos. Além disso, deve-se ressaltar que, embora tais coeficientes estejam distantes daqueles normalmente adotados para o algoritmo, eles se revelam capazes de levar à convergência.

O mesmo problema foi considerado com relação ao escoamento compressível de ar, com $Re = 2,4 \cdot 10^3$, primeiramente para o escoamento isotérmico. Nesse caso a convergência foi alcançada ao fim de $N = 418$ iterações, com precisão de $\Delta = 10^{-5}$. Para isso, os fatores de sub-relaxação empregados são $\omega_v = 0,4$ para a velocidade, $\omega_p = 0,3$ para a pressão, e $\omega_T = 0,3$ para a temperatura. O resultado é apresentado nas figuras (12.3) e (12.4), para os campos de velocidade e pressão:

A comparação desses resultados com o perfil de velocidades analítico revela um erro máximo na componente da velocidade em (x) da ordem de 5% e componentes da velocidade em (y) da ordem de 10^{-5} . Valem portanto as mesmas considerações com respeito aos erros cometidos na aproximação do módulo do vetor velocidade e de sua direção.



Figura 12.3 - Campo de velocidades do escoamento isotérmico de ar na passagem bidimensional plana.

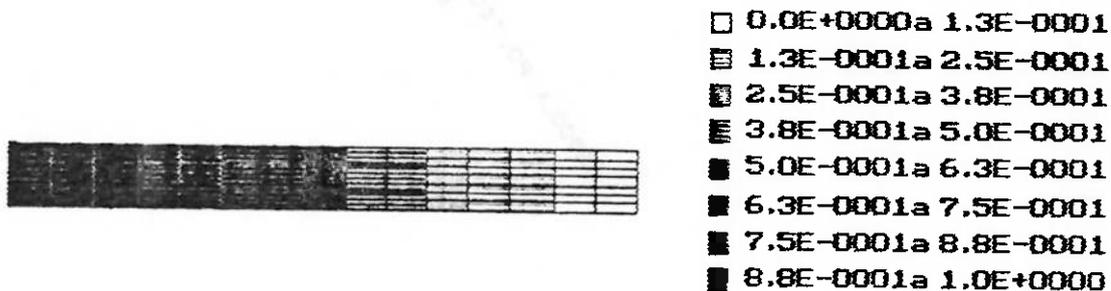


Figura 12.4 - Campo de pressões do escoamento isotérmico de ar na passagem bidimensional plana.

Sob as mesmas condições de contorno para a velocidade, mas agora prescrevendo temperaturas constantes nas paredes da passagem de $T_w = 350k$ e uma temperatura de entrada para o ar constante $T_0 = 300k$. Como estimativa inicial considerou-se o problema isotérmico

análise acima, de forma que a simulação passa a representar um transitório térmico. A convergência foi obtida ao fim de $N = 100$ iterações empregando os mesmos coeficientes de sub-relaxação do problema anterior. Apresentam-se os campos de velocidades, pressão e temperatura nas figuras (12.5), (12.6) e (12.7) abaixo:

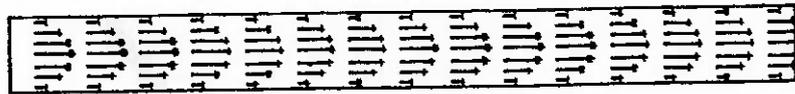


Figura 12.5 - Campo de velocidades do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w = 350k$.

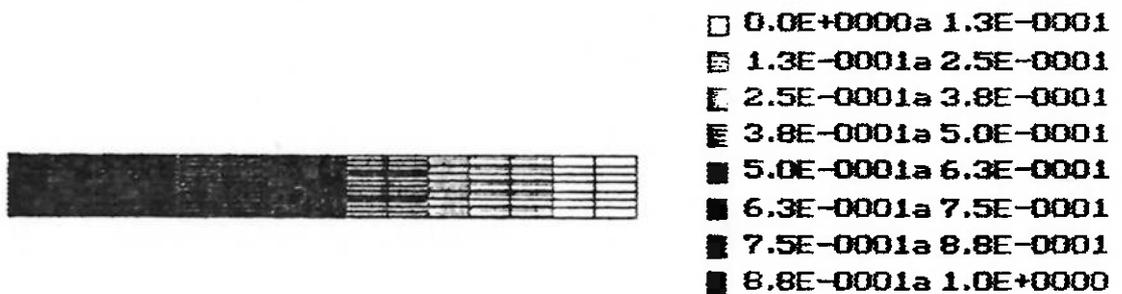


Figura 12.6 - Campo de pressões do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w = 350k$.



Figura 12.7 - Campo de temperaturas do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w = 350\text{k}$.

Foi também simulada transferência de calor no escoamento incompressível através dessa passagem. Para isso se considerou o escoamento de mercúrio ($\rho = 13264,28 \text{ kg/m}^3$, $c_p = 0,1365 \cdot 10^3 \text{ J/kg.C}$, $k = 11,49 \text{ W/m.C}$ e $\mu = 0.00113 \text{ kg/ms}$), com $\omega_T = 1.0$ e $\Delta = 10^{-3}$. O perfil de velocidades foi prescrito como uniforme em todo o domínio, implicando numa vazão mássica de 0.13 Kg/s e em $Re = 1,2 \cdot 10^2$. Considera-se então a temperatura de entrada uniforme $T_e = 300.\text{C}$, e se prescreve um fluxo de calor constante nas paredes, valendo $q''_w = 10 \text{ W/m}^2$. Os resultados, obtidos em cerca de 80 iterações, apontam para o desenvolvimento do perfil de temperaturas em que as diferenças entre os valores dessa variável para uma dada seção de (x) constante dependem apenas da coordenada (y), conforme ocorre na solução analítica. A figura (12.8) abaixo mostra o campo de temperaturas. Nela se pode perceber uma degeneração do campo de temperaturas na região imediatamente anterior à seção de saída. Isso se deve à utilização de velocidades baixas para o escoamento, que implicam em valores de Peclet também baixos, o que permite que as temperaturas prescritas para essa seção ($T = 300.\text{C}$ no caso) influam no domínio do escoamento através do mecanismo de difusão.



- 2.8E+0001 a 2.8E+0001
- ▣ 2.8E+0001 a 2.9E+0001
- ▤ 2.9E+0001 a 2.9E+0001
- ▥ 2.9E+0001 a 2.9E+0001
- ▦ 2.9E+0001 a 2.9E+0001
- ▧ 2.9E+0001 a 3.0E+0001
- ▨ 3.0E+0001 a 3.0E+0001
- ▩ 3.0E+0001 a 3.0E+0001

Figura 12.8 - Campo de temperaturas do escoamento de mercúrio na passagem bidimensional plana, com $q_w'' = 10W/m^2$.

12.2. O Escoamento através de uma Passagem Retangular com Controle de Espaçamento da Malha Computacional

Para essa configuração geométrica, pertencente à classe 3, foram simulados o escoamento laminar desenvolvido para o óleo, e o problema de entrada térmica e hidrodinâmica para o ar. Para ambos os casos considerou-se $Re = 2,4 \cdot 10^3$ e os valores dos coeficientes de sub-relaxação são os apresentados acima.

No primeiro, emprega-se o algoritmo SIMPLER e a solução dos campos de pressão e temperatura é apresentada nas figuras (12.9) e (12.10) abaixo. Sua comparação com a solução analítica revelou, nesse caso, erros máximos um pouco inferiores àqueles obtidos nos exemplos anteriores. Em princípio, deveria-se esperar resultados significativamente melhores, uma vez que o controle do espaçamento permite detalhar as regiões próximas às fronteiras físicas, justamente onde ocorrem os gradientes mais acentuados de velocidade.

Entretanto a avaliação da qualidade da malha computacional para diversos casos que apresentaram imprecisões significativas na solução, permitiu concluir que erros decorrentes daquela influem efetivamente na qualidade dessa última. Atribui-se a esse fato, os efeitos apontados acima.

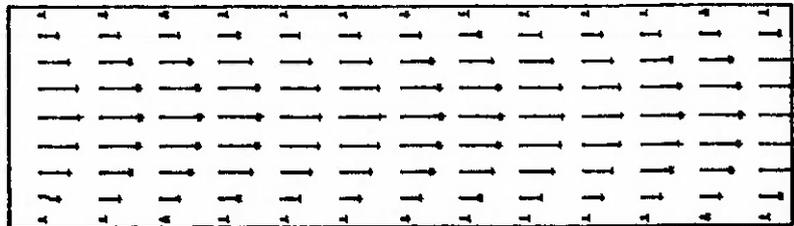


Figura 12.9 - Campo de velocidades do escoamento de óleo na passagem bidimensional plana, com controle de espaçamento

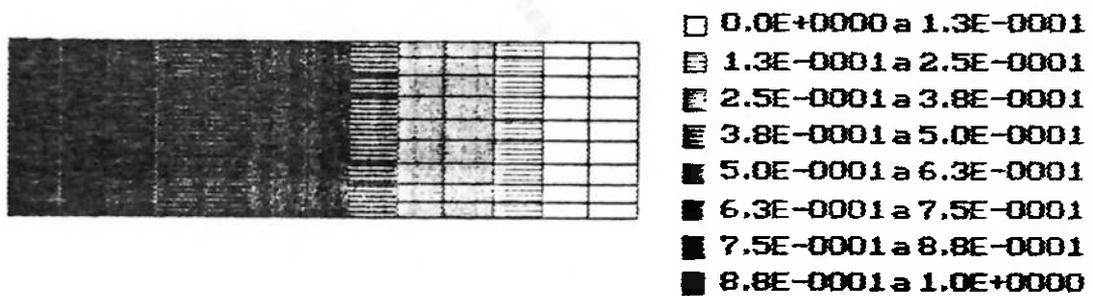


Figura 12.10 - Campo de pressões do escoamento de óleo na passagem bidimensional plana, com controle de espaçamento.

Para o problema da entrada térmica e hidrodinâmica, considerou-se na seção de entrada perfis uniformes de velocidade e

temperatura ($T_e = 300k$). Para as paredes prescreveu-se $T_w = 350k$, constante. As figuras (12.11), (12.12) e (12.13) a seguir mostram os campos de velocidades, pressão e temperatura obtidos. Embora as camadas limites térmica e hidrodinâmica não se tenham desenvolvido completamente.

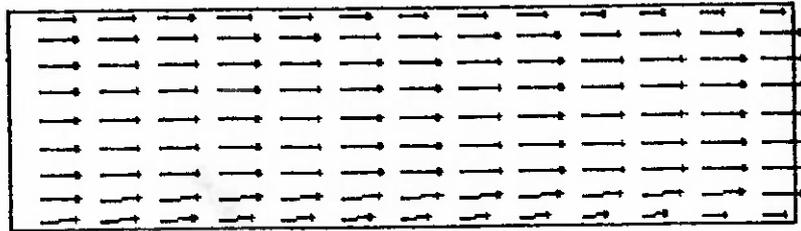


Figura 12.11- Campo de velocidades do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w = 350k$.

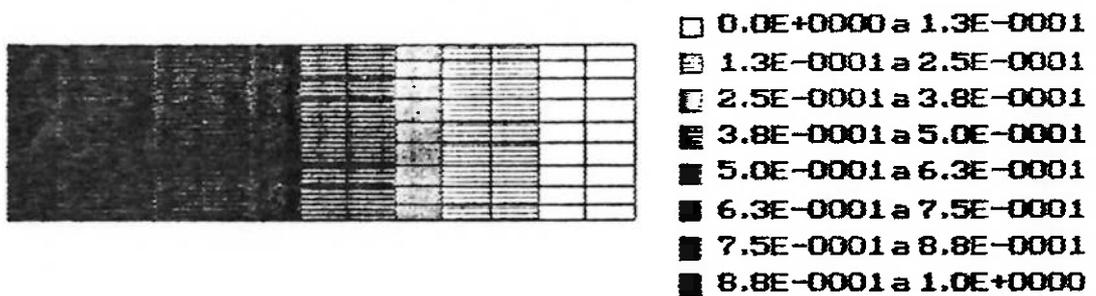


Figura 12.12 - Campo de pressões do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w = 350k$.

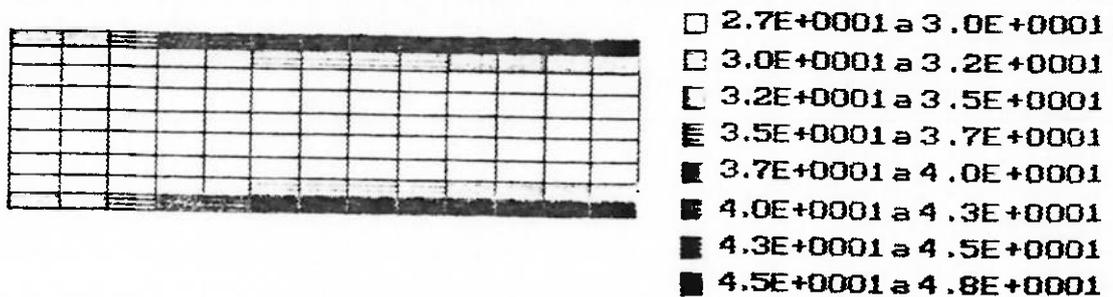


Figura 12.13 - Campo de temperaturas do escoamento de ar na passagem bidimensional plana, com $T_w=350k$.

12.3. Escoamento em uma Contração Brusca com Controle de Espaçamento

Foi realizada a simulação do escoamento incompressível em uma contração brusca, com controle do espaçamento. Para isso prescreveu-se um perfil de velocidades uniforme na seção de entrada, com $Re \approx 2,3 \cdot 10^3$. Para tanto empregou-se o algoritmo SIMPLE, utilizando os seguintes fatores de sub-relaxação, na seqüência: $\omega_v = 0,6; 0,2; 0,1$. A convergência foi obtida ao fim de 1264 iterações. Em seguida simulou-se a transferência de calor no escoamento, para o campo de velocidades obtido na etapa anterior, prescrevendo temperatura constante $T_w=350.C$ nas paredes e a temperatura de entrada $T_e=300.C$. Os campos de velocidades pressão e temperatura resultantes são apresentados nas figuras (12.14), (12.15) e (12.16), respectivamente.

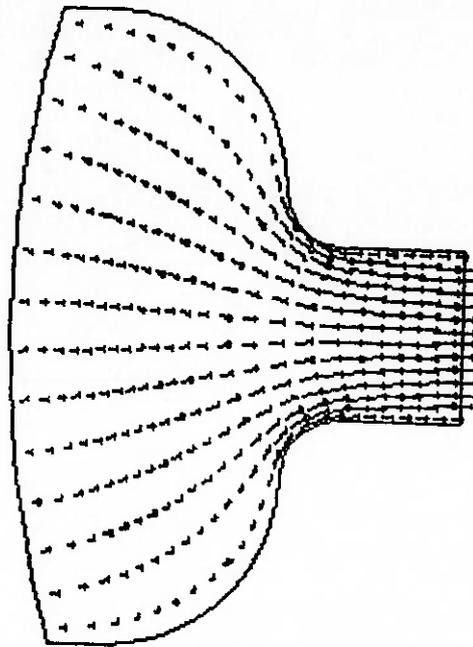


Figura 12.14- Campo de velocidades do escoamento de óleo na contração brusca.

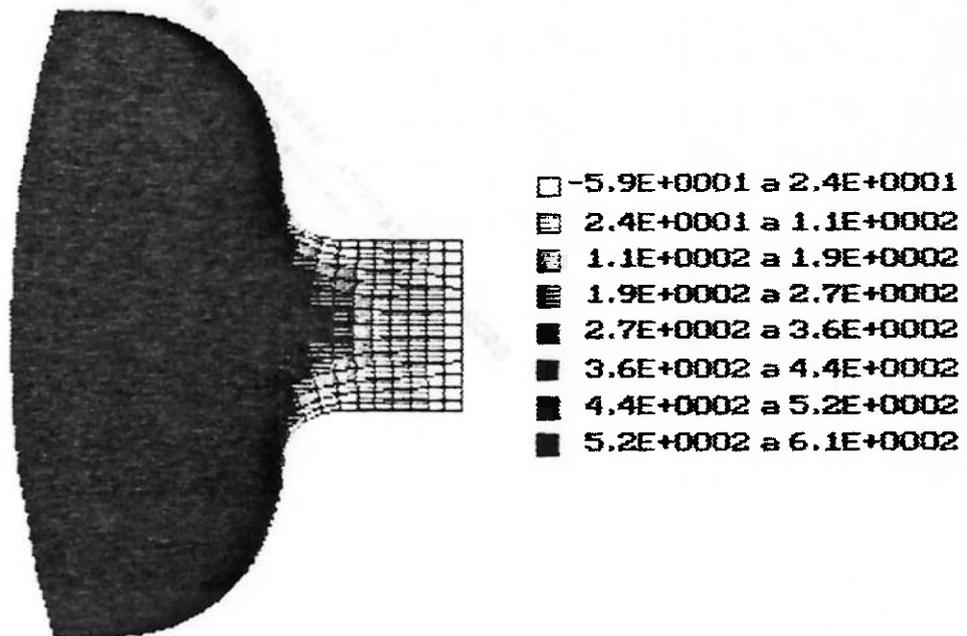
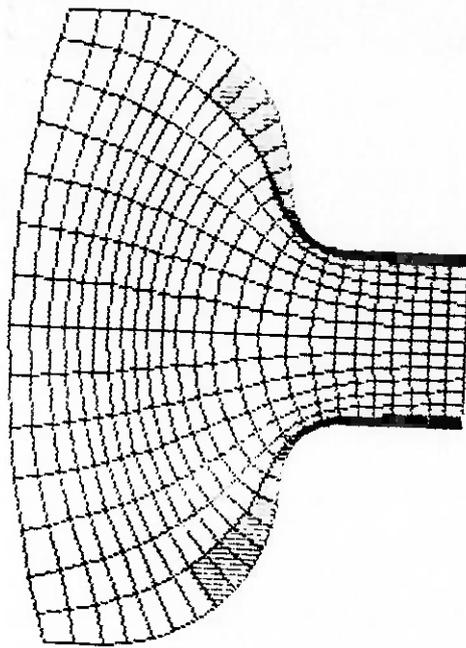


Figura 12.15 - Campo de pressões do escoamento óleo na contração brusca.



TESTE

- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- ▨ 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001
- 2.7E+0001 a 2.7E+0001

Figura 12.16 - Campo de temperaturas do escoamento de óleo na contração brusca.

Pode-se notar na figura (12.15) que os valores mais baixos de pressão ocorrem junto à garganta da contração, alcançando inclusive pressões relativas (não adimensionalizadas), inferiores à zero. Após deixar essa região, o fluido recupera em parte sua pressão até atingir a pressão de saída. Tal efeito se apresenta no campo de velocidades como uma pequena região de descolamento, que entretanto não pode ser percebida claramente na figura (12.14) em função de a malha não apresentar qualidade suficiente naquela região.

12.4. Escoamento em uma Passagem Bidimensional Curva

Simulou-se o escoamento de ar em uma passagem bidimensional curva, no caso isotérmico, tomando como, condição de entrada o perfil laminar desenvolvido com $Re=2,3 \cdot 10^3$, baseado na altura. Para as temperaturas prescreveu-se o valor constante de 300k. A convergência foi obtida para uma precisão $\Delta=10^{-3}$, após 1432 iterações. Para isso, empregaram-se os seguintes valores dos coeficientes de sub-relaxação, na seqüência: $\omega_v=0,4$ e $0,2$; $\omega_p=0,3$ e $0,1$. Os campos de velocidade, pressão e temperatura são apresentados nas figuras (12.17), (12.18), e (12.19) a seguir. Deve-se notar que, nessa última, as variações de temperatura são

de pequena amplitude, e decorrem de efeitos do campo de pressão.

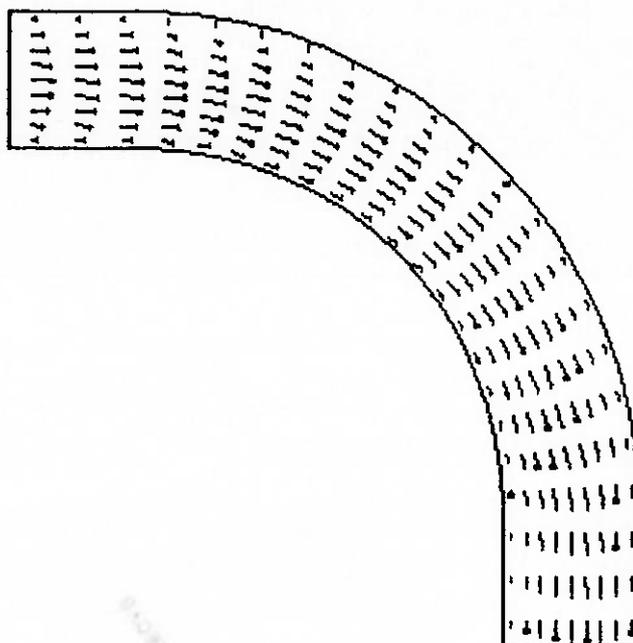


Figura 12.17- Campo de velocidades do escoamento de ar na passagem bidimensional curva.

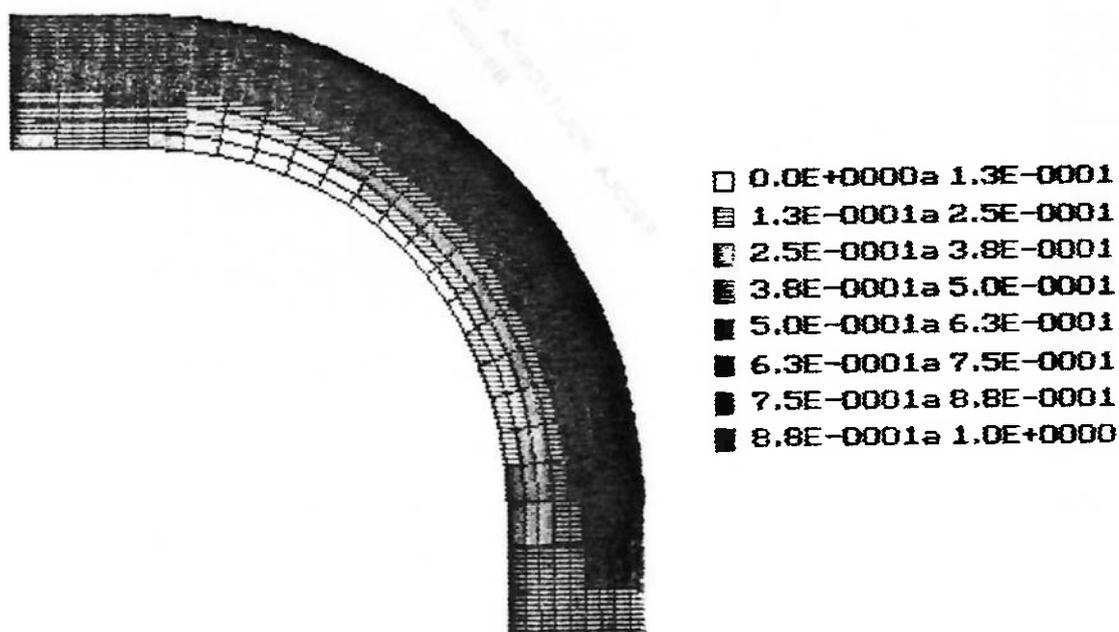


Figura 12.18 - Campo de pressões do escoamento de ar na passagem bidimensional curva.

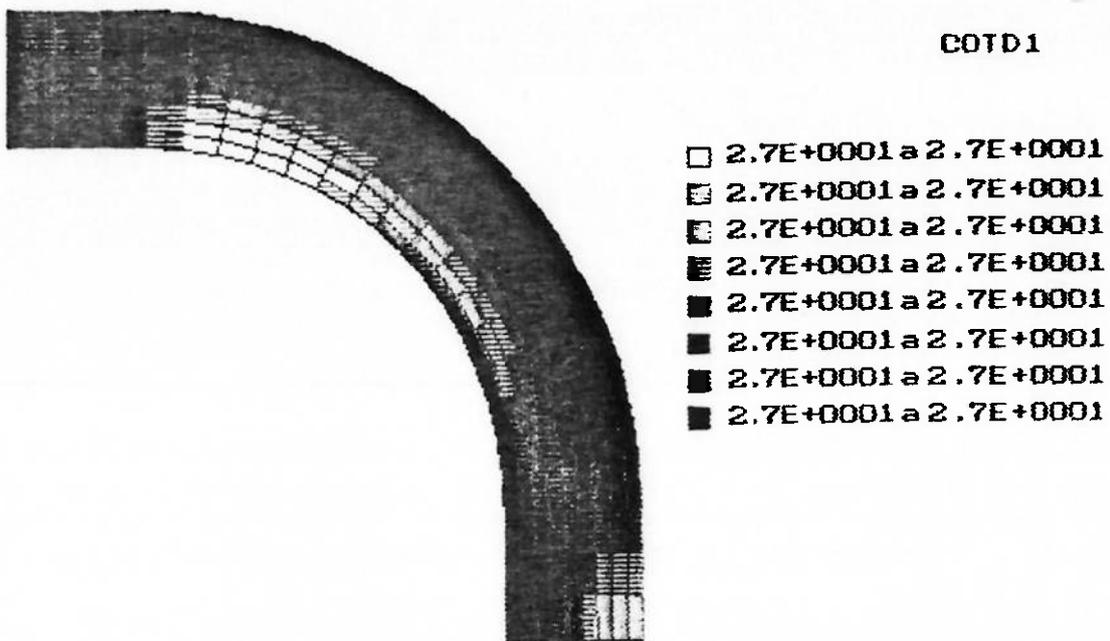


Figura 12.19 - Campo de temperaturas do escoamento de ar na passagem bidimensional curva.

12.5. Conclusões

As simulações realizadas e os resultados obtidos permitem algumas conclusões importantes a respeito dos algoritmos de simulação desenvolvidos, e da influência da qualidade dos sistemas de coordenadas na solução e no processo iterativo:

- O emprego da sub-relaxação revelou-se estritamente necessário para os todos algoritmos de simulação do escoamento utilizados. Isto se deve basicamente à não linearidade das equações do modelo, e à formulação do termo fonte dessas equações.

- Para os problemas dos tipos 3 e 4, verificou-se a necessidade de empregar coeficientes de sub-relaxação mais baixos ($\omega \leq 0.6$). Testes com valores próximos da unidade mostraram a desestabilização do processo iterativo. O que se deve provavelmente às imprecisões da métrica dos sistemas de coordenadas, uma vez que seus efeitos manifestam-se mais intensamente nos problemas desses tipos.

- Observou-se que o aumento da qualidade da malha através do emprego do controle do espaçamento, e de uma distribuição adequada dos pontos nas fronteiras, pode contribuir significativamente para produzir soluções mais precisas, em particular nas regiões em que ocorrem gradientes elevados das grandezas físicas analisadas.

- Verificou-se também que o emprego desses recursos impõe que as malhas sejam geradas com precisão compatível. Porque a finalidade de sua aplicação consiste unicamente em aprimorar a precisão da simulação, não devendo portanto introduzir nenhum efeito no aspecto físico da solução. Esses efeitos, que são nocivos aos resultados, fazem-se presentes quando se utilizam tais recursos sem garantir a necessária qualidade da malha, quanto à ortogonalidade local, por exemplo.

- As aplicações desenvolvidas justificaram amplamente o emprego da avaliação dos critérios de qualidade dos sistemas de coordenadas e a verificação da ortogonalidade local. Pois se pôde verificar que a obtenção de soluções fisicamente realistas está condicionada à utilização de malhas que satisfazem aqueles critérios com razoável precisão. Em particular no que se refere à ortogonalidade local, posto que a própria formulação das equações do modelo considera essa propriedade.

- Constatou-se que, embora os algoritmos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLEC apresentem desempenho semelhante para os problemas simples, para problemas mais complexos seu comportamento apresenta diferenças bastante significativas. Nessas condições o algoritmo SIMPLER revelou-se o mais robusto, por ser menos sensível aos efeitos decorrentes das imprecisões da métrica, e demandar normalmente de um menor número de iterações convergir. Isto se dá porque esse algoritmo possui uma equação apropriada para o campo de pressões, não necessitando portanto corrigi-lo a partir da equação de correção de pressões, como fazem os demais.

Verificou-se também, que esses algoritmos produzem soluções próximas, dentro da precisão considerada. Assim, em virtude das características apresentadas pelo algoritmo SIMPLER, recomenda-se utilizá-lo preferencialmente para a simulação do escoamento incompressível.

- Para o escoamento compressível, recomenda-se a aplicação do algoritmo SIMPLE em sua forma apropriada, inicialmente para o caso isotérmico, gerando um campo de velocidades e pressões razoáveis, empregados como estimativa inicial para o problema completo.

Com isso caracterizam-se em linhas gerais, alguns dos principais aspectos dos problemas de simulação numérica do escoamento.

Referências Bibliográficas

1. ACHARAYA, S. and MOUKALLED, *Improvements to Incompressible Flow Calculation on a Nonstaggered Curvilinear Grid*. Numerical Heat Transfer, 1989, Part B, 15:131-152.
2. AGRAWAL, A. K. and PECKOVER, R. S. - *A Co-ordinate Transformation method for thermohydraulics in arbitrary geometries*. UKAEA, TECHNICAL REPORT CULHAM LABORATORY, 1980 (CIM-R 209), U.K., Jul.
3. AGRAWAL, A. K. and PECKOVER, R. S. - *Nonuniform grid generation for boundary layer problems*. COM.PHYS.COMN., 1980, 19:171-178.
4. AMSDEN, A. A. and HIRT, C. W. - *A simple Scheme for Generating General Curvilinear Grids*. J.COMPUT.PHYS., 1973, 11:348-359.
5. ANATOKU, M., SAKURAI, T. and TAKEDA, H. - *Numerical Solution of Two-dimensional Channel Flow of Viscous Incompressible Fluid past an Elliptic Cylinder*. TECHNICAL REPORT FAC.ENG. KYOTO UNIV., 1987, 19(1).
6. ANDERSON, D. A., TANNEHILL, J. C. and PLETCHER, R. H. - *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. New York, Hemisphere Publishing Corporation, Inc, 1984.
7. ARIS, R. - *Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Prentice-Hall, 1962.
8. ARPACI, V. S. and LARSEN, P. S. - *Convection Heat Transfer*. New Jersey, Prentice-Hall, Inc, 1984.
9. BARFIELD, W. D. - *An Optimal Mesh Generator for Lagrangean Hydrodynamics Calculations in Two Space Dimensions*. J.COMPUT.PHYS., 1970, 6: 417.
10. BARFIELD, W. D. - *Numerical Method for Orthogonal Curvilinear Meshes* J.COMPUT.PHYS., 1970, 5: 23.

11. BEIINSKII, P. P., GODUNOV, S. K., IVANOV, Yu. B. and YANENKO, I. K. - *The Use of a Class of Quasiconformal Mappings to Construct Difference Nets in Domains with Curvilinear Boundaries.* USSR COMPUTATIONAL MATHEMATICS and MATHEMATICAL PHYSICS, 1975, 15(133).
12. BIRD, R. B., STEWART, W. E., and LIGHTFOOT, E. N. - *Transport Phenomena.* New York, John Wiley & Sons, Inc, 1960.
13. BRAATEN, M. E. and PATANKAR, S. V. - *A Block-Corrected Subdomain Solution Procedure for Recirculating Flow Calculations.* Numerical Heat Transfer, 1989, Part B, 15:1-20.
14. BRACKBILL, J. U. and SALTZMAN, J. S. - *Adaptative Zoning for Singular Problems in Two Dimensions.* J.COMPUT.PHYS., 1982, 46: 342-368.
15. BRADSHAW, P. - *Effects of Streamline Curvature on Turbulent Flow.* TECHNICAL REPORT AGARD, 1973(AG-169).
16. BRAGA W. - *On the Use of Some Weighted Upwind Schemes for Strongly Convective Flows.* NUMERICAL HEAT TRANSFER, Part B, vol. 18 pp. 43-60, 1990.
17. BUTKOV, J. - *Física Matemática.* São Paulo, MacGraw-Hill do Brasil, 1978.
18. CHU, W. H. - *Development of a General Finite Difference Approximation for a General Domain, Part I: Machine Transformation.* J.COMPUT.PHYS., 1971, 8:392.
19. CHURCHILL, R. V., BROWN, J. W. and VERKEY, R. F. - *Complex Variables and Applications.* 3 rd. ed., New York, MacGraw-Hill, 1974.
20. CUNSOLO, D. and ORLANDI, P. - *Accuracy in Non Orthogonal Grid Reference Systems.* Proceedings of the First International Conference of Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, Pentech, 1978. pp.899-912.
21. CURRIE, I. G. - *Fundamentals of Mechanics of Fluids.* Toronto, McGrall-Hill, Inc, 1974.

22. DAVIES, C. W. - *An Initial Value Approach to the Production of Discrete Orthogonal Coordinates.* J.COMPUT.PHYS., 1981, 39: 164-177.
23. DOORMAAL, J. P. and RAITBY, G. D. - *Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows.* Numerical Heat Transfer, 1984, 7:147-163.
24. DWOYER, D. L., LEWIS, C. H. and HILL, J. A. - *Laminar and/or Turbulent Three-dimensional Incompressible Boundary Layers Including Surface Heat Transfer and Curvature Effects.* Proceedings of the First International Conference of Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, Pentech, 1978. pp.353-368.
25. FEYNMAN, J. T., Leighton, R. B., Sands, M. - *The Feynman Lectures on Physics.* Massachusetts, Addison-Wesley, 1964.
26. FLÜGGE, W. - *Tensor Analysis and Continuum Mechanics.* Stanford, Springer-Verlag, 1972.
27. FORNBERG, B. - *A Numerical Method for conformal Mapping.* SOC. INT.APPL.MATH.J.SCI.STAT.COMP, 1980, 1:336.
28. FRANKEL, S. P. - *Some Qualitative Comments on Stability Considerations in Partial Difference Equations.* In: SYMPOSIA in APPLIED MATHEMATICS, 6, 1956. - Proceedings. v.6, pp73-75.
29. GAL-CHEN, T. and SOMERVILLE, R. C. J. - *On the Use of a Coordinate Transformation for the Solution of the Navier-Stokes Equations.* J.COMPUT.PHYS., 1975, 17:209-228.
30. GELFAND, I. M. and FOMIN S. V. - *Calculus of Variations* PRINTICE-HALL, INC., Englewood Cliffs, N. J., 1963
31. GIANNAKOPOULOS, A. E. and ENGEL, A. J. - *Directional Control in Grid Generation.* J.COMPUT.PHYS., 1988:422-439.
32. GODUNOV, S. K. and PROKOPOV, G. P. - *The Use of Moving Meshes in Gas Dynamics Computations.* USSR COMPUTATIONAL MATHEMATICS and MATHEMATICAL PHYSICS, 1972, 12(182).

33. HAUSSLING, H.J. and COLEMAN, R. M. - *A Method for Generation of Orthogonal and Nearly Orthogonal Boundary-Fitted Coordinate Systems.* J.COMPU.PHYS., 1981, 43:373-381.
34. HOINBECK, R. W. - *Numerical Methods.* Quantum, Inc. New York, 1980.
35. HUMES, A.F.P.C. et alii. - *Noções Básicas de Cálculo Numérico.* São Paulo, USP, 1982. (Notas de Aula).
36. HUNG, T.K. and BROWN, T. D. - *An Implicit Finite-Difference Method for Solving the Navier-Stokes Equation Using Orthogonal Curvilinear Coordinates.* J.COMPUT.PHYS., 1977, 23:343-363.
37. JACQUOTTE, A. P. - *A New Mechanical Approach For Grid Generation in Computational Fluid Dynamics.* ONERA TECHNICAL PAPER, 1987(174).
38. JANG, D. S. and JETLI R. and ACHARYA S. - *Comparison of the Piso, Simpler, and Simplec Algorithms for the Treatment of the Pressure-velocity Coupling in Steady Flow Problems.* NUMERICAL HEAT TRANSFER, vol. 10, pp. 209-228, 1986.
39. KAPLAN, W - *Cálculo Avançado.* Edgard Blücher, São Paulo, 1972, vl.
40. KAYS, W. M., and CRAWFORD, M. E. - *Convective Heat and Mass Transfer* - New York, McGrall-Hill, 1980.
41. KNAPP, R. T.; DAILY, J. W. & HAMMITT, F. G. - *Cavitation.* New York , McGraw-Hill, 1970.
42. KOREN, Barry - *Upwind Discretization of the Steady Navier-Stokes Equations.* INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, vol. 11, 99-117, 1990.
43. LANDAU, L. D. & LIFSHITZ, E. M. - *Fluid Mechanics* - London, Pergamon Press, 2nd. Edition, 1987.
44. LAURIA, D. - *Ein Beitrag zur Berechnung des gesamten turbulenten Stroemungsfelds in Launfraedern hydraulischer Maschinen.* T. U. Muenchen, 1986. (Dissertação).

45. LETHO, Virtanen - *Quasi-conformal Mappings in the Plane*.
Second Edition, 1973
46. MAHDI, Hashim S. and KINNEY Robert B. - *Time-Dependent Natural Convection in a Square Cavity: Application of a New Finite Volume Method*. INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, vol. 11, 57-86, 1990.
47. MARION, J. R., HEALD, M. A. - *Classical Electromagnetic Radiation*. 2nd.ed., New York, Academic Press, 1970.
48. MARCHI, C. H. and MALISKA, C. R. - *A Boundary-Fitted Numerical Method for the Solution of Three Dimensional All Speed Flows Using Co-Located Variables*. Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, SC.
49. MAUGHAN, J. R. and INCOPRERA F. P. - *Fully Developed Mixed Convection in a Horizontal Channel Heated Uniformly From Above and Below*. NUMERICAL HEAT TRANSFER, Part A, vol. 17 pp. 417-430, 1990
50. MAZHAR Z. and RAITBY, G. D. - *A Refined PUMPIN (Pressure Update by Multiple Path Integration) Method for Updating Pressures in the Numerical Solution of the Incompressible Fluid Flow Equations*. Proceedings of the Second International Conference of Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Veneza, Itália, 1981. pp.255-266.
51. MENECHINI, J. R. - *Geração e Utilização de Sistemas de Coordenadas Orientados de acordo com as Fronteiras do Escoamento*. Dissertação de Mestrado apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 1989.
52. MOBLEY, C. D. and STEWARD, R. J. - *On the Numerical Generation of Boundary-Fitted Orthogonal Curvilinear Coordinate Systems*. J.COMPUT.PHYS., 1980, 34:124-135.
53. MORCE, P. M. & FESHBACH, H. - *Methods of Theoretical Physics*. McGraw-Hill, 1953, New York.
54. MORICE, Ph. - *Numerical Generation of Boundary-Fitted Coordinates Systems with Optimal Control of Orthogonality*.

55. MURTHY, J. Y. and PATANKAR, S. V. - *A Partially Parabolic Calculation Procedure for Duct Flows in Irregular Geometries. Part I: Formulation.* NUMERICAL HEAT TRANSFER, Part B, vol. 16, pp. 1-15, 1989.
56. MURTHY, J. Y. and PATANKAR, S. V. - *A Partially Parabolic Calculation Procedure for Duct Flows in Irregular Geometries. Part II: Test Problems.* NUMERICAL HEAT TRANSFER, Part B, vol. 16, pp. 17-30, 1989.
57. Özisik, M. N. - *Boundary Value Problems of Heat Conduction.* Dover, INC., New York, 1968.
58. PROTTER, M. H. & WEINBERGER, H. F. - *Maximum Principles in Differential Equations.* PRENTICE-HALL, INC. Englewood Cliffs, New Jersey, 1967
59. PATANKAR, S. V. - *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow -* New York, MacGraw-Hill Book Company, 1980.
60. PATANKAR, S. V. - *A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations.* Numerical Heat Transfer, 1981, 4:409-425.
61. PERIC', M. - *Analysis of Pressure-Velocity Coupling on Nonorthogonal Grids.* Numerical Heat Transfer, 1990, Part B, 17:63-82.
62. POPE, S. B. - *The Calculation of Turbulent Recirculating Flows in General Orthogonal Coordinates.* J.COMPUT.PHYS., 1978, 26: 197-217.
63. RAITBY, G. D. - *Some Recent Advances in Computational Fluid Dynamics.* COBEM87 - IX Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Florianópolis, SC - (Dezembro, 1987).
64. FIVAS, E. K. - *On the Use of Nonuniform Grids in Finite-Difference Equations.* J.COMPUT.PHYS., 1972, 10: 202-210.
65. ROACHE, P. J. - *Computational Fluid Dynamics -* Albuquerque, Hermosa Pub., 1972.

66. FYSKIN, G. and LEAL, L. G. - Orthogonal Mapping. J.COMPUT.PHYS., 1983, 23:71:100.
67. SCHLICHTING, H. - Boundary-Layer Theory. 7a.ed. New York, McGraw-Hill, 1979.
68. SCHREÜDER, W. A. and PLESIS, J. P. - Numerical Modeling of Interior Boundaries. Numerical Heat Transfer, 1990, 17: 197-125.
69. SHIH, T. M. - A Literature Survey on Numerical Heat Transfer. NUMERICAL HEAT TRANSFER, VOL. 5, PP. 369-420, 1982.
70. SHIH, T. M. and TAN, C. H. and HWANG B. C. - Equivalence of Artificial Compressibility Method and Penalty-Function Method. NUMERICAL HEAT TRANSFER, Part B, vol. 15, pp. 127-130, 1989.
71. SVESHNIKOV, A & TIKHONOV, A - The Theory of Functions of a Complex Variable, MIR, Moscow, 1974.
72. TENNEKES, H. and LUMLEY, J. L. - A First Course in Turbulence - Cambridge, Mass., MIT Press, 1972.
73. THAMES, F. C., THOMPSON, J. F., MASTIN, C. W. and WALKER, R.L. - Numerical Solution for Viscous and Potential Flow about Arbitrary Two-Dimensional Bodies Using Body-Fitted Coordinate Systems. J.COMPUT.PHYS., 1977, 24:245-273.
74. THIART, G. D. - Finite Difference Scheme for the Numerical Solution of Fluid Flow and Heat Transfer Problems on Nonstaggered Grids. Numerical Heat Transfer, 1990, Part B 17:43-62.
75. THIART, G. D. - Improved Finite Difference Scheme for the Solution of Convection-Diffusion Problems with the SIMPLEN Algorithm. Numerical Heat Transfer, 1990, Part B, 18:81-95.
76. THOMPSON, J. F. and WARSI, Z. U. A. - Boundary-Fitted Coordinate Systems for Numerical Solution of Partial Differential Equations-A Review. J.COMPUT.PHYS., 1982, 47:1-108.

77. THOMPSON, J. F., WARSI, Z. U. A. and MASTIN C. W. - Numerical Grid Generation - Foundations and Applications ELSEVIER SCIENCE CO., INC 1985.
78. THOMPSON, J. F., THAMES, F. C. and MASTIN, C. W. - TOMCAT - A Code for Numerical Generation of Boundary-Fitted Curvilinear Coordinate Systems on Fields Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies. J.COMPUT.PHYS., 1977, 24:274-302,
79. THOMPSON, J. F., THAMES, F. C. and MASTIN, C. W. - Automatic Numerical Generation of Body-Fitted Curvilinear Coordinate Systems for Field Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies. J.COMPUT.PHYS., 1974, 15:299-319.
80. TRIBESS, A. - Solução Numérica de Problemas de Transferência de Calor em Escoamentos Confluentes em Geometrias Arbitrárias. Dissertação de mestrado apresentada na Universidade Federal de Santa Catarina. Santa Catarina, 1986.
81. VOLPE, E. V. e PIMENTA, M. M. - O Paradoxo da Equação da Energia. EPUSP, PMC, 1990, Monografia n^o 47/90.
82. VOLPE, E. V., MENECHINI, J. R. e PIMENTA, M. M. - Métodos Numéricos para a Geração de Sistemas de Coordenadas Orientados de acordo com as Fronteiras do Escoamento: Estudo Comparativo. XI COBEM, São Paulo, 1990.
83. WHITE, F. M. - Viscous Fluid Flow - New York, MacGraw-Hill Corpany, 1974.
84. WINSLOW, A. J. - Numerical Solution of Quase-linear Poisson Equation in a Non-Uniform Triangular Mesh. J.COMPUT.PHYS., 1966, 2:149.
85. ZURIGAT Yousef H. and GHAJAR Afshin J. - Comparative Study of Weighted Upwind and Second Order Upwind Difference Schemes. NUMERICAL HEAT TRANSFER, part B, vol. 18, pp. 61-80, 1990.

Apêndice A

Álgebra Tensorial Generalizada

Este apêndice tem o propósito de introduzir alguns resultados da álgebra tensorial generalizada, que são importantes para as aplicações desenvolvidas no presente trabalho. Em seu desenvolvimento, adotam-se o formalismo e a notação presentes em Flügge [26]. Para uma abordagem mais detalhada deste tópico, indica-se a consulta a referências que tratam da Teoria dos Campos, como Morce e Feshbach [53], e Butkov [17], ou da Mecânica dos Meios Contínuos, como Aris [7] e o próprio Flügge [26].

A.1 Sistemas de Coordenadas Generalizados

Os sistemas de coordenadas podem assumir as mais diversas configurações, dependendo da forma das curvas sobre as quais apenas uma coordenada varia [51], e do fato de serem localmente ortogonais ou não. Assim, se nos sistemas cartesianos os eixos das coordenadas x , y e z são retas, nos sistemas cilíndricos os eixos das coordenadas r e z são retas, a curva sobre a qual apenas a coordenada θ varia, permanecendo r e z constantes, é uma circunferência centrada na origem. Do mesmo modo, outros tipos de sistemas, como os esféricos ou os elípticos, impõem outras formas a essas curvas.

Por essa razão, um mesmo ente matemático de caráter tensorial é representado de forma diversa, em sistemas de coordenadas diferentes. As identidades matemáticas que os envolvem, entretanto, não dependem da forma de representação. Daí decorre a necessidade de formulá-las de modo que preservem a validade em qualquer sistema de coordenadas. Esta é a finalidade básica da Álgebra Tensorial Generalizada.

Para isso, entretanto, é necessário considerar as características dos sistemas de coordenadas na forma mais geral possível, ou seja, tomando como ponto de partida um sistema de coordenadas curvilíneo não ortogonal. A figura A.1 mostra os

versores de um sistema bidimensional desse tipo¹.

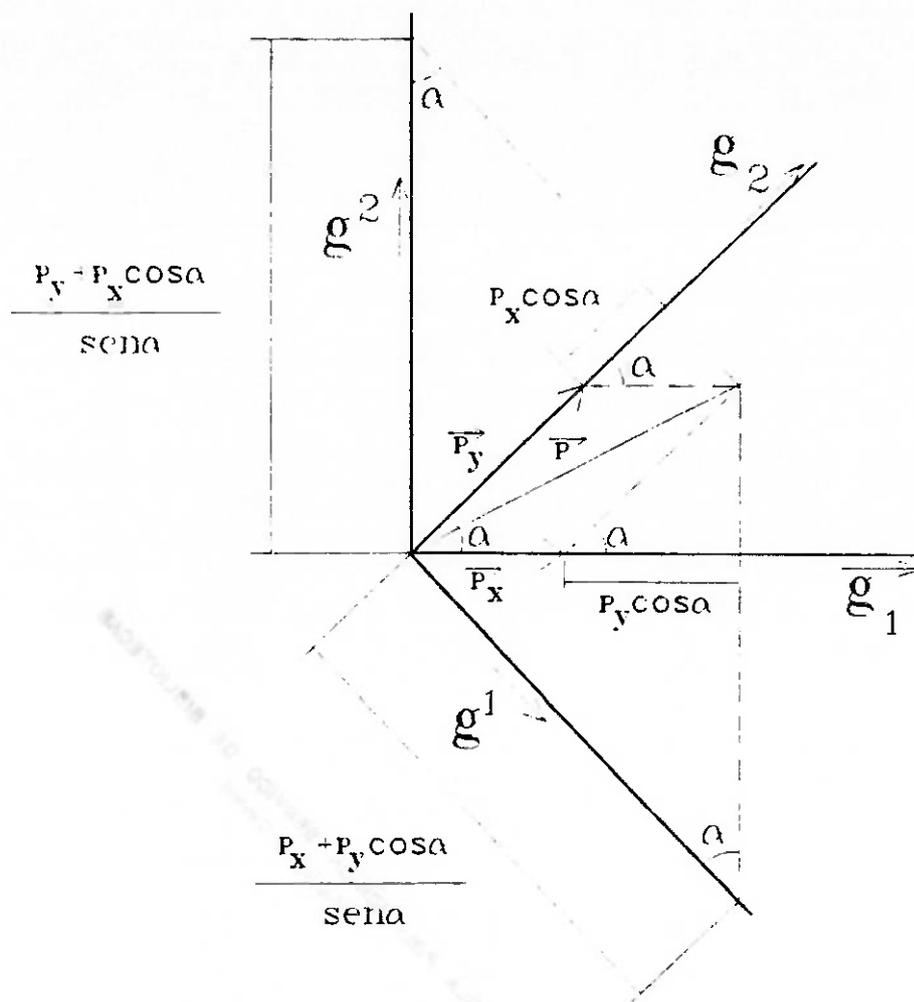


Figura A.1 - Sistema de coordenadas (2-D), não ortogonal, com versores covariantes e contravariantes.

Na figura A.1, o sistema de coordenadas não ortogonal é representado por dois pares distintos de versores: \mathbf{g}^1 e \mathbf{g}^2 , ou \mathbf{g}_1 e \mathbf{g}_2 . De forma que \mathbf{g}^1 é perpendicular a \mathbf{g}_2 , e \mathbf{g}^2 é perpendicular a \mathbf{g}_1 . Assim, o mesmo vetor \mathbf{P} pode ser escrito de duas formas distintas:

$$\mathbf{P} = P^1 \mathbf{g}_1 + P^2 \mathbf{g}_2 \quad (\text{A.1})$$

¹ Os sistemas bidimensionais, servem como ponto de partida para introduzir os conceitos, que são em seguida estendidos ao caso (3-D).

$$\text{Onde: } \begin{cases} P^1 = \vec{P} \cdot \vec{g}_1 = P_x \\ P^2 = \vec{P} \cdot \vec{g}_2 = P_y \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

$$\vec{P} = P_1 \vec{g}^1 + P_2 \vec{g}^2 \quad (\text{A.3})$$

$$\text{Onde: } \begin{cases} P_1 = P_x + P_y \cos \alpha \\ P_2 = P_y + P_x \cos \alpha \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$\text{E: } \begin{cases} |\vec{g}^1| = (\sin \alpha)^{-1} \\ |\vec{g}^2| = (\sin \alpha)^{-1} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

$$\text{Pois: } \vec{P} = \frac{P_x + P_y \cos \alpha}{\sin \alpha} \vec{g}^1 + \frac{P_y + P_x \cos \alpha}{\sin \alpha} \vec{g}^2 \quad (\text{A.6})$$

Neste exemplo básico, os símbolos com índices superescritos são definidos como contravariantes e os que têm índices subscritos como covariantes.

É evidente, que no caso dos sistemas localmente ortogonais, $\alpha = (\pi/2)$, as relações acima continuam válidas. Com a única restrição de, que sobre eles, os versores contravariantes e covariantes coincidem, na forma: $\vec{g}_1 = \vec{g}^1$ e $\vec{g}_2 = \vec{g}^2$.

Dadas as relações de perpendicularidade que os versores mantêm entre si, e a forma geral das expressões, define-se a regra da somatória nestes sistemas, que pode ser prontamente generalizada:

Considerando um espaço de dimensão $n=3$, representado pelo sistema de coordenadas com componentes contravariantes ξ^i e (ξ^1, ξ^2, ξ^3) e covariantes $\xi_j \in (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$.

1. Componentes contravariantes só podem multiplicar versores covariantes e componentes covariantes multiplicam apenas os versores contravariantes.

2. O produto de dois entes que cujo índice é representado por uma mesma letra (i), sendo que um dos fatores é covariante e o outro é contravariante, implica na soma dos termos desse produto, para $i = 1$, $i = 2$ e $i = 3$.

Assim, devido às relações de perpendicularidade entre os versores, redefine-se o delta de Kronecker:

$$g^i \cdot g_j = \delta_j^i = \begin{cases} 1, & \text{para } i = j \\ 0, & \text{para } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

O produto escalar entre dois vetores \vec{u} e \vec{P} fica:

$$\vec{u} \cdot \vec{P} = u^i g_i \cdot P_j g^j = u^i P_j \delta_i^j = u^i P_i \quad (\text{A.8})$$

Definindo um vetor de posição \vec{r} que ligue um ponto genérico desse espaço à origem do sistema de coordenadas. Para um elemento infinitesimal desse vetor ($d\vec{r}$), considerando a regra de cadeia, pode-se escrever:

$$d\vec{r} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi^i} d\xi^i \quad (\text{A.9})$$

Mas este elemento também pode ser expresso por: $d\vec{r} = d\xi^i g_i$.

$$\text{Então define-se: } g_i = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi^i} \quad (\text{A.10})$$

O que implica que a derivada parcial com respeito a uma coordenada contravariante assume um caráter covariante.

A.2 A Métrica dos Sistemas de Coordenadas Generalizados

Define-se, para os sistemas de coordenadas generalizados, um tensor de segunda ordem cuja função é fazer a correspondência entre os versores covariantes e contravariantes.

$$g^i = g^{ij} g_j \quad \text{ou} \quad g_j = g_{ij} g^i \quad (\text{A.11})$$

Dá-se a este tensor o nome de tensor métrico. O símbolo g_{ij} representa suas componentes covariantes e g^{ij} as contravariantes. De (A.11) obtém-se as expressões que servem para determinar seus elementos:

$$\begin{cases} g_i \cdot g_j = g_{ik} g^k \cdot g_j = g_{ik} \delta_j^k = g_{ij} \\ g^i \cdot g^j = g^{ik} g_k \cdot g^j = g^{ik} \delta_k^j = g^{ij} \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Das expressões (A.12), é imediato que nos sistemas localmente ortogonais, os elementos deste tensor não pertencentes à diagonal principal, ou seja, que têm $i \neq j$, são nulos.

A simetria do produto escalar confere a propriedade de simetria ao tensor métrico: $g_{ij} = g_{ji}$ e $g^{ij} = g^{ji}$. Além disso, combinando as expressões (A.7) e (A.11), obtém-se:

$$\delta_j^i = g^i \cdot g_j = g_{ik} g^k \cdot g^{jl} g_l = g_{ik} g^{jl} \delta_l^k = g_{ik} g^{jk} \quad (\text{A.13})$$

O último termo da expressão acima corresponde ao produto dos componentes covariantes e contravariantes do tensor métrico, contraído uma vez, no índice k . Portanto representa o produto escalar das duas representações deste tensor, donde se conclui que estas são inversas.

O tensor métrico permite determinar os componentes contravariantes de um vetor a partir dos covariantes. Para isso considera-se um vetor \vec{u} expresso de ambas as formas.

$$\begin{cases} \vec{u} = u^i g_i = u^i g_{ij} g^j \\ \vec{u} = u_j g^j \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

Igualando os últimos termos dessas expressões e multiplicando ambos os lados da igualdade resultante por g_k :

$$u_k = u^i g_{ik} \quad \text{e} \quad u^k = u_i g^{ik} \quad (\text{A.15})$$

Além disso, tomando um vetor de comprimento infinitesimal $d\vec{s}$, tangente a uma curva $s(\xi^i)$. Pode-se calcular o módulo desse vetor da forma:

$$d\vec{s} \cdot d\vec{s} = ds = g_i d\xi^i \cdot g_j d\xi^j = g_{ij} d\xi^i d\xi^j \quad (\text{A.16})$$

A expressão (A.16) relaciona o tensor métrico com a métrica do sistema de coordenadas generalizado, pois permite calcular a distância entre dois pontos sobre uma curva qualquer, representada sobre o referido sistema.

A.3 As Transformações entre os Sistemas de Coordenadas

Para realizar a transformação entre dois sistemas de coordenadas distintos, representados por ξ^i e $\xi^{i'}$ (ou ξ_i e $\xi_{i'}$), respectivamente, define-se um operador (β) de natureza matricial, que determina os versores de um dos sistemas, em função dos versores de mesma variação do outro:

$$g_{i'} = \beta_{i'}^j g_j \quad \text{e} \quad g^{i'} = \beta^{i'}_j g^j \quad (\text{A.17})$$

Retomando a expressão (A.7) e realizando a mudança do sistema ($g_{i'} \cdot g^{j'} = \delta_{i'}^{j'}$) para o sistema ($g_i \cdot g^j = \delta_i^j$), por meio da aplicação das expressões (A.17):

$$\beta_{i'}^j \beta^{k'}_j = \delta_{i'}^{k'} \quad (\text{A.18})$$

Esta expressão revela que a matriz dos coeficientes $\beta_{i'}^j$ é inversa daquela que contém os coeficientes de $\beta^{k'}_j$. Por outro lado, multiplicando-se a primeira das expressões (A.17) por $\beta^{i'}_k$:

$$g_{i'} \beta^{i'}_k = \beta^{i'}_k \beta_{i'}^j g_j = \delta_k^j g_j = g_k \rightarrow g_{i'} \beta^{i'}_k = g_k \quad (\text{A.19})$$

Que corresponde à transformação inversa. Resultado semelhante é obtido a partir da segunda expressão (A.17): $g^{i'} \beta_{i'}^k = g^k$.

Para analisar a transformação de um vetor \vec{v} , sob a mudança do sistema de coordenadas, consideram-se inicialmente suas representações em ambos os sistemas:

$$\vec{v} = v_i g^i = v^i g_{i'} = v_{i'} g^{i'} = v^{i'} g_{i'} \quad (\text{A.20})$$

Os versores contravariantes e covariantes do sistema (1) podem ser expressos em função daqueles do sistema (1'), pela expressão (A.19). Multiplicando, em seguida, as igualdades resultantes por $(g^{j'})$ e $(g_{j'})$, respectivamente, obtém-se:

$$\begin{cases} v^i g_i = v^i \beta_i^{k \cdot} g_{k \cdot} = v^i \cdot g_{i \cdot} \xrightarrow{(*g^{j \cdot})} v^i \beta_i^{j \cdot} = v^{j \cdot} \\ v_i g^i = v_i \beta_i^{k \cdot} g^{k \cdot} = v_{i \cdot} g^{i \cdot} \xrightarrow{(*g_{j \cdot})} v_i \beta_i^{j \cdot} = v_{j \cdot} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Estas expressões dão significado aos termos 'covariante' e 'contravariante'. Isto é feito tomando como padrão o versor do tipo (g_i) . Todos os entes cuja transformação se dá por meio de $(\beta_i^{j \cdot})$, como (g_i) , são denominados covariantes, e todos aqueles que se transformam por $(\beta_i^{j \cdot})$ recebem a denominação de contravariantes.

A natureza dos termos desses operadores, entretanto, pode ser determinada a partir das expressões (A.9) e (A.10). Da primeira vem que:

$$d\vec{r}^i = g_i d\xi^i = \beta_i^{k \cdot} g_{k \cdot} d\xi^i \quad (\text{A.22})$$

Por outro lado, pela regra de cadeia:

$$d\vec{r}^i = g_{k \cdot} d\xi^{k \cdot} = g_{k \cdot} \frac{\partial \xi^{k \cdot}}{\partial \xi^i} d\xi^i = \frac{\partial \vec{r}^i}{\partial \xi^i} \frac{\partial \xi^{k \cdot}}{\partial \xi^i} d\xi^i \quad (\text{A.23})$$

Considerando separadamente os casos em que $d\vec{r}^i \equiv d\xi^i$, $d\vec{r}^i \equiv d\xi^2$ e $d\vec{r}^i \equiv d\xi^3$ e multiplicando o resultado por $g^{j \cdot}$ conclui-se que:

$$\beta_i^{j \cdot} = \frac{\partial \xi^{j \cdot}}{\partial \xi^i} \quad \text{e} \quad \beta_{j \cdot}^i = \frac{\partial \xi^i}{\partial \xi^{j \cdot}} \quad (\text{A.24})$$

Da expressão acima pode-se provar que o determinante da matriz $(\beta_{j \cdot}^i)$ corresponde ao jacobiano (J) da transformação que leva do sistema de coordenadas $(\xi^{i \cdot})$ ao sistema (ξ^j) . Também é possível provar a relação entre o jacobiano e o determinante do tensor métrico:

$$\det(\beta_{j \cdot}^i) = [\det(\beta_{j \cdot}^i)]^{-1} = \sqrt{\det(g_{ij})} = \left[\sqrt{\det(g^{ij})} \right]^{-1} = \pm J \quad (\text{A.25})$$

Os operadores $(\beta_{j \cdot}^i)$ e $(\beta_{i \cdot}^j)$ permitem estabelecer a definição formal dos tensores, qualquer que seja sua ordem: Um tensor de ordem $(m + n)$ é um ente matemático $A_{j_1 j_2 j_3 \dots j_n}^{i_1 i_2 i_3 \dots i_m}$, composto de

$P^{(m+n)}$ componentes, onde $P=3$ no caso (3-D) e $P=2$ no caso (2-D), de carácter covariante (n) e contravariante (m), se, e somente se, seus componentes transformam-se de um sistema de coordenadas (ξ^i) para um sistema ($\xi^{i'}$) segundo a expressão:

$$A_{j_1 j_2 j_3 \dots j_n}^{i_1 i_2 i_3 \dots i_m} = \beta_{i_1}^{j_1} \dots \beta_{i_m}^{j_m} \beta_{j_1}^{j'_1} \dots \beta_{j_n}^{j'_n} A_{j'_1 j'_2 j'_3 \dots j'_n}^{i_1 i_2 i_3 \dots i_m} \quad (\text{A.26})$$

O corolário mais importante desta definição estabelece: Uma vez que qualquer identidade tensorial verdadeira pode ser escrita na forma:

$$A_{j_1 j_2 j_3 \dots j_n}^{i_1 i_2 i_3 \dots i_m} = 0 \quad (\text{A.27})$$

Sua expressão algébrica pode ser transformada para outro sistema de coordenadas ($\xi^{i'}$) pela relação (A.26), preservando sua validade sob a transformação.

A.4 Diferenciações dos Tensores em Coordenadas Generalizadas

Considerando-se um sistema de coordenadas curvilíneo, e percorrendo-se a distância entre dois pontos distintos representados sobre ele, variam ao longo do percurso a orientação e o módulo dos versores do sistema. A diferenciação de qualquer ente tensorial sobre tais sistemas deve, por isso, considerar essa variação. Assim, tem-se²:

$$\vec{v}_{,j} = (v^i g_i)_{,j} = v^i_{,j} g_i + v^i g_{i,j} \quad (\text{A.28})$$

$$\vec{v}_{,j} = (v_i g^i)_{,j} = v_{i,j} g^i + v_i g^i_{,j} \quad (\text{A.29})$$

Para isso se definem os símbolos de Christoffel de primeira e segunda espécies, respectivamente:

² Adota-se para as derivadas parciais, a notação: $\frac{\partial}{\partial \xi^j} (\phi_i) = \phi_{i,j}$

$$\begin{cases} \Gamma_{ijk} = g_{i,j} \cdot g_k \\ \Gamma_{ij}^k = g_{i,j} \cdot g^k \end{cases} \quad (\text{A.30})$$

Esses símbolos de Christoffel não são tensores de 3^a ordem. Prova-se que apenas o terceiro índice comporta-se como o índice de um vetor, podendo ser transformado em covariante ou contravariante, por meio da multiplicação pelo tensor métrico. Os dois primeiros índices não têm esta propriedade, mas podem ser permutados entre si. Além disso, eles podem ser obtidos a partir da derivação do tensor métrico, em expressões do tipo:

$$2\Gamma_{ijk} = g_{jk,i} + g_{ki,j} - g_{ij,k} \quad (\text{A.31})$$

Introduzindo-os nas expressões (A.28) e (A.29), resulta:

$$\begin{cases} \vec{v}^{\rightarrow}_{,j} = (v^i_{,j} + v^k \Gamma_{ijk}) g_i = v^i|_j g_i \\ \vec{v}^{\rightarrow}_{,j} = (v_{i,j} - v_k \Gamma_{ij}^k) g^i = v_i|_j g^i \end{cases} \quad (\text{A.32})$$

Estas expressões recebem a designação de derivadas covariantes do vetor \vec{v} . Onde $v^i|_j$ e $v_i|_j$ são tensores de 2^a ordem, o primeiro tem variação mista e o segundo é covariante. Assim, todos os resultados da álgebra tensorial são igualmente válidos.

Os escalares, por não dependerem do sistema de coordenadas, apresentam apenas as derivadas parciais com respeito a essas coordenadas, não possuindo derivada covariante. Assim, o gradiente de um escalar (ϕ) tem a forma:

$$\frac{\partial}{\partial \xi^j} (\phi) = \phi_{,j} \quad (\text{A.33})$$

Para um tensor de segunda ordem genérico (A), por outro lado, a expressão da derivada covariante depende de sua variação, podendo assumir as seguintes formas:³

$$A_{ij}|_k = A_{ij,k} - A_{ij}^l \Gamma_{lk}^1 - A_{il} \Gamma_{kj}^1 \quad (\text{A.34})$$

³ O ponto ($A^i_{,j}$) empregado para os tensores de variação mista tem a função de indicar qual a ordem índices.

$$A^i_{.j.k} = A^i_{.j,k} + A^i_{.j}\Gamma^i_{kl} - A^i_{.l}\Gamma^l_{jk} \quad (\text{A.35})$$

$$A^j_{i.k} = A^j_{i,k} - A^j_{i.}\Gamma^i_{lk} + A^j_{i.}\Gamma^j_{kl} \quad (\text{A.36})$$

$$A^{ij}_{.k} = A^{ij}_{.k} + A^{ij}\Gamma^i_{kl} + A^{ij}\Gamma^j_{kl} \quad (\text{A.37})$$

Algumas observações importantes devem ser feitas:

1. A derivada covariante é um operador tensorial de caráter generalizado, isso significa que a formulação de equações diferenciais parciais em termos dessas derivadas é válida em qualquer sistema de coordenadas. Um resultado muito relevante desse fato é que, uma vez que o tensor métrico é constante e coincide com o tensor unitário no sistema cartesiano, sua derivada covariante nesse sistema é nula, portanto pode-se afirmar que a derivada covariante do tensor métrico é nula em qualquer sistema de coordenadas. Deve-se ressaltar, por outro lado, que isso não implica, de forma alguma, que sejam nulas as derivadas parciais desse tensor sobre outros sistemas que não o sistema cartesiano.

2. Para determinar a segunda derivada covariante de um vetor, deve-se empregar as expressões apresentadas para a derivação de tensores de segunda ordem (A.34) a (A.37), apenas considerando a variância do tensor a que corresponde a primeira derivada covariante do referido vetor. Há, por outro lado, a questão da ordem da derivação covariante. Tomando um vetor genérico v_i , prova-se que as derivadas covariantes de segunda ordem relacionam-se segundo a seguinte expressão:

$$v_i|_{jk} - v_i|_{kj} = v_m(\Gamma^m_{lk,j} - \Gamma^m_{lj,k} + \Gamma^m_{lj}\Gamma^l_{ik} - \Gamma^m_{lk}\Gamma^m_{ij}) \quad (\text{A.38})$$

$$v_i|_{jk} - v_i|_{kj} = v_m R^m_{.ijk} \quad (\text{A.39})$$

O tensor de quarta ordem, contravariante no primeiro índice e covariante nos demais, designado por $(R^m_{.ijk})$, é conhecido como tensor de Riemann-Christoffel. Prova-se que esse tensor é nulo para todos os espaços Euclidianos. Os espaços que pertencem a esta classe têm em comum o fato de não possuírem curvatura intrínseca, e por isso podem ser descritos por sistemas de coordenadas

cartesianos. Vale ressaltar que estes espaços também podem ser descritos por sistemas de coordenadas curvilíneos. Os espaços não Euclidianos, por outro lado, não podem ser descritos por sistemas cartesianos. Um exemplo bastante comum desses últimos é a casca esférica, sobre ela não é possível inscrever tal sistema.

Assim, a nulidade do tensor de Riemann-Christoffel garante a intercambiabilidade da derivada covariante de segunda ordem nos espaços Euclidianos. Como todos os problemas de aplicação do presente trabalho referem-se a esse tipo de espaço, fica implicitamente garantido esse resultado.

A.5 Os Operadores Diferenciais em Coordenadas Generalizadas

Nos parágrafos anteriores, foram apresentados os resultados básicos da álgebra tensorial generalizada. Empregando esses resultados, é possível generalizar a formulação dos operadores diferenciais utilizados nas equações do modelo matemático, que correspondem ao gradiente, ao divergente, o laplaciano e o rotacional. Entretanto, dada a exiguidade do espaço disponível, apresentam-se a seguir apenas os resultados.

Nessas condições, o gradiente de um escalar assume a forma apresentada na expressão (A.33).

O divergente de um vetor (\vec{v}) pode ser escrito:

$$\text{div}(\vec{v}) = v^i |_{,i} = v^i_{,i} + v^k \Gamma^i_{ik} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^k} (Jv^k) \quad (\text{A.40})$$

O último termo da expressão acima resulta da contração de dois dos índices do símbolo de Christoffel, e constitui-se num resultado importante da álgebra tensorial, sendo largamente utilizado. Assim, para o divergente de um tensor de segunda ordem genérico (u^{ij}), tem-se :

$$u^{ij}_{,j} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^k} (Ju^{ij}) + u^{ij} \Gamma^i_{ji} \quad (\text{A.41})$$

E o rotacional de um vetor tem a forma:

$$\text{rot}(\vec{v}) = \epsilon^{ijk} v_k |_{,j} \quad (\text{A.42})$$

O tensor (ϵ^{ijk}) corresponde ao tensor de permutação, que é dado por:

$$\epsilon^{ijk} = \frac{1}{J} e^{ijk} \quad \text{ou} \quad \epsilon_{ijk} = J e_{ijk} \quad (\text{A.43})$$

Onde (e^{ijk}) e (e_{ijk}) designam os símbolos de permutação, cuja forma coincide com a dos tensores de permutação, no sistema cartesiano. Esses símbolos são definidos por:

$$e^{ijk} = e_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j, k) = (1, 2, 3); (2, 3, 1); (3, 1, 2) \\ -1 & \text{se } (i, j, k) = (2, 1, 3); (1, 3, 2); (3, 2, 1) \\ 0 & \text{para quaisquer outros valores de } (i, j, k) \end{cases} \quad (\text{A.44})$$

Outra aplicação dos tensores de permutação é o cálculo do jacobiano da transformação (J).

$$J = \frac{1}{6} \beta_1^i \beta_m^j \beta_n^k \epsilon_{i,j,k} \epsilon^{lmn} \quad (\text{A.45})$$

Apêndice B

Equações do Modelo Matemático

A análise dos problemas relacionados ao escoamento de fluidos que envolvem transferência de calor e efeitos de compressibilidade utiliza-se dos princípios da conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Em notação simbólica, suas equações correspondem a:

Equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{B.1})$$

Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = - \nabla p - [\nabla \cdot \tau] + \rho \vec{f} \quad (\text{B.2})$$

Equação da conservação da energia térmica:

$$\rho \frac{D}{Dt} (e) = - (\nabla \cdot \vec{q}) - (P \nabla \cdot \vec{u}) - (\tau : \nabla \vec{u}) \quad (\text{B.3})$$

Pode-se, entretanto, apresentá-las em notação indicial, que é a forma como são utilizadas no decorrer deste trabalho. Para isso, introduz-se a expressão do tensor das tensões (τ) para os fluidos Newtonianos-Stokesianos¹ e resultam, para os princípios da conservação da massa, quantidade de movimento e energia respectivamente, as expressões?

¹ Adota-se a hipótese de Stokes quanto ao segundo coeficiente de viscosidade λ , fazendo $\lambda = -2\mu/3$.

² Acrescente-se que a extensão dos estudos para os escoamentos laminares tridimensionais não envolve, em princípio, problemas que não os de natureza algébrica, dada a adição de um grau de liberdade ao sistema. Por este motivo, apresentam-se as equações do modelo em sua forma mais geral, sendo apenas a simulação restrita aos problemas planos. Quanto aos estudos dos escoamentos turbulentos, ou na presença de reações químicas, estes dependem da inclusão do equacionamento destes fenômenos físicos ao modelo matemático.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho u^i) = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho u^j u^i) &= \rho f^i - \frac{\partial p}{\partial x^i} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left[\mu \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u^j}{\partial x^i} \right) + \right. \\ &+ \left. \delta_j^i \lambda \frac{\partial u^k}{\partial x^k} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial h}{\partial t} + u^j \frac{\partial h}{\partial x^j} \right] &= \left[\frac{\partial p}{\partial t} + u^j \frac{\partial p}{\partial x^j} \right] + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x^j} \right) + \left[\mu \left(\frac{\partial u^i}{\partial x^j} \frac{\partial u^i}{\partial x^j} + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \frac{\partial u^i}{\partial x^j} \frac{\partial u^j}{\partial x^i} \right) + \lambda \frac{\partial u^j}{\partial x^j} \frac{\partial u^k}{\partial x^k} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Sobre os sistemas de coordenadas generalizados, essas equações assumem a forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i) = 0 \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \rho u^j u^i) + \Gamma_{mn}^i (\rho u^m u^n) &= \rho f^i - g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) + \\ \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \tau^{ij}) + \Gamma_{mn}^i (\tau^{mn}) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$c_p \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i T) \right) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^r} \left(J k g^{rs} \frac{\partial}{\partial \xi^s} T \right) + \Phi \quad (\text{B.9})$$

Onde τ^{ij} corresponde ao tensor das tensões do fluido e Φ designa a função dissipação viscosa.

$$\tau^{ij} = 2\mu \left[\frac{1}{2} \left(g^{jn} \frac{\partial u^i}{\partial \xi^n} + g^{in} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{ij}}{\partial \xi^n} u^n \right) - \frac{1}{3J} g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^n} (J u^n) \right] \quad (\text{B.10})$$

$$\Phi = \tau^{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \xi^j} (u_i) - u_k \Gamma_{ij}^k \right) + \beta T \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u^n \frac{\partial P}{\partial \xi^n} \right) \quad (\text{B.11})$$

A exceção de τ^{ij} , representam-se em **negrito** os demais elementos de natureza tensorial destas expressões. Os termos g^{ij} , J , Γ_{mn}^i e Γ_{ij}^k referem-se ao sistema de coordenadas curvilíneo, correspondendo ao tensor métrico, ao jacobiano da transformação e a símbolos de Christoffel de segunda espécie, respectivamente. Sua formulação encontra-se apresentada no apêndice A.

Procedendo-se a redefinição dos operadores diferenciais, as equações podem ser escritas na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \nabla^* \cdot (\rho u^i \phi) = \nabla^* \cdot (\lambda (\nabla \phi)) + S^* \quad (\text{B.12})$$

Onçe o operador divergente é definido:

$$\nabla^* \cdot (v^k) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^k} (J v^k) \quad (\text{B.13})$$

Para a equação da continuidade tem-se:

$$\phi = 1 \quad (\text{B.14})$$

$$\lambda = 0 \quad (\text{B.15})$$

$$S^* = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \nabla^* \cdot (\rho u^i) = 0 \quad (\text{B.17})$$

Para a equação da quantidade de movimento:

$$\phi = u^i \quad (\text{B.18})$$

$$\lambda = \mu \quad (\text{B.19})$$

$$\nabla^* \cdot (\rho u^i u^j) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (J \rho u^i u^j) \quad (\text{B.20})$$

$$\nabla^* \cdot (\mu (\nabla u^i)) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left(J \mu g^{jn} \frac{\partial u^i}{\partial \xi^n} \right) \quad (\text{B.21})$$

$$\begin{aligned}
s^{\bullet} = & -\Gamma_{mn}^i(\rho u^m u^n - \tau^{mn}) + \rho f^i - g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} (P) + \\
& + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[J \mu \left(g^{in} \frac{\partial u^j}{\partial \xi^n} - \frac{\partial g^{ij}}{\partial \xi^n} u^n - \frac{2}{3J} g^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^n} (J u^n) \right) \right]
\end{aligned} \tag{B.22}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u^i) + \nabla^{\bullet} \cdot (\rho u^i u^j) = \nabla^{\bullet} \cdot (\mu (\nabla u^i)) + s^{\bullet} \tag{B.23}$$

E para o princípio da conservação da energia térmica:

$$\phi = T \tag{B.24}$$

$$\lambda = k/c_p \tag{B.25}$$

$$\nabla^{\bullet} \cdot (\rho u^i T) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^i} (J \rho u^i T) \tag{B.26}$$

$$\nabla^{\bullet} \cdot (k(\nabla T)) = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi^r} \left(J k g^{rs} \frac{\partial}{\partial \xi^s} T \right) \tag{B.27}$$

$$s^{\bullet} = \dot{\phi} \tag{B.28}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \nabla^{\bullet} \cdot (\rho u^i T) = \nabla^{\bullet} \cdot (k(\nabla T)) + s^{\bullet} \tag{B.29}$$

Apêndice C

Valores numéricos dos campos de velocidade e pressão resultantes das simulações realizadas.

Solucao analitica do perfil de velocidades
Passagem bidimensional plana
sem controle de espacamento (óleo)

Eta	U1
1	0.7959
2	2.0204
3	2.7551
4	3
5	2.7551
6	2.0204
7	0.7959

Perfis de velocidades
 Passagem bidimensional plana
 sem controle do espaçamento
 Solucao numerica
 Algoritmo Simpler

		Csi		
U1		1	7	15
Eta	1	0.7968	0.8064	0.8146
	2	2.0201	2.0173	2.0155
	3	2.7547	2.7503	2.7462
	4	2.9996	2.9948	2.9903
	5	2.7547	2.7503	2.7462
	6	2.0201	2.0173	2.0155
	7	0.7968	0.8064	0.8146

		Csi		
U2		1	7	15
Eta	1	-0.00019	-0.00014	-8.2E-05
	2	-0.00032	-0.00024	-0.00015
	3	-0.00017	-0.00014	-9.3E-05
	4	3.1E-11	2.7E-12	-1.6E-10
	5	0.00017	0.00014	9.3E-05
	6	0.00032	0.00024	0.00015
	7	0.00019	0.00014	8.2E-05

		Csi		
P		1	7	15
Eta	1	152.5315	93.9044	10.6944
	2	152.6306	93.9019	10.6931
	3	152.7399	93.8978	10.6905
	4	152.7856	93.896	10.6893
	5	152.7399	93.8978	10.6905
	6	152.6306	93.9019	10.6931
	7	152.5315	93.9044	10.6944

Perfis de velocidades
Passagem bidimensional plana
sem controle do espaçamento
Solução analítica (Ar)

	U1	Csi
	1	0.0796
	2	0.202
	3	0.2755
Eta	4	0.3
	5	0.2755
	6	0.202
	7	0.0796

Perfis de velocidades
 Passagem bidimensional plana
 sem controle do espaçamento
 Solucao numerica
 Algoritmo Simple compressivel
 Problema isotermico

		Csi		
U1		1	7	15
Eta	1	0.159	0.1617	0.1666
	2	0.4039	0.4036	0.4053
	3	0.5508	0.5501	0.5509
	4	0.5998	0.599	0.5995
	5	0.5508	0.5501	0.5509
	6	0.4039	0.4036	0.4054
	7	0.159	0.1618	0.1666

		Csi		
U2		1	7	15
Eta	1	-3.2E-05	-2.8E-05	-1.5E-05
	2	-5.2E-05	-5.2E-05	-3.4E-05
	3	-2.7E-05	-3.1E-05	-2.5E-05
	4	8.4E-07	1.3E-06	7.5E-07
	5	2.8E-05	3.2E-05	2.6E-05
	6	5.1E-05	5.6E-05	3.4E-05
	7	3E-05	3.3E-05	1.5E-05

		Csi		
P		1	7	15
Eta	1	101325	101325	101325
	2	101325	101325	101325
	3	101325	101325	101325
	4	101325	101325	101325
	5	101325	101325	101325
	6	101325	101325	101325
	7	101325	101325	101325

Perfis de velocidades
 Passagem bidimensional plana
 sem controle do espacamento
 Solucao numerica
 Algoritmo Simple compressivel
 Temperetura de parede (Tw=350k)

		Csi		
U1		1	7	15
Eta	1	0.1598	0.1651	0.1685
	2	0.4042	0.4053	0.4075
	3	0.5511	0.5517	0.5526
	4	0.6001	0.6007	0.6012
	5	0.5511	0.5517	0.5526
	6	0.4042	0.4054	0.4075
	7	0.1598	0.1651	0.1685

		Csi		
U2		1	7	15
Eta	1	1.6E-05	-3.9E-06	-0.00015
	2	2.8E-05	-1.9E-06	-0.00034
	3	1.6E-05	3.1E-06	-0.00025
	4	4.2E-07	8.3E-07	5.6E-06
	5	-1.5E-05	-1.2E-06	0.00026
	6	-2.8E-05	3.9E-06	0.00034
	7	-1.6E-05	4.8E-06	0.00015

		Csi		
P		1	7	15
Eta	1	101325	101325	101325
	2	101325	101325	101325
	3	101325	101325	101325
	4	101325	101325	101325
	5	101325	101325	101325
	6	101325	101325	101325
	7	101325	101325	101325

Perfis de velocidades
Passagem bidimensional p
com controle do espacame
Solucao analitica

U1

	1	0.0932
	2	0.2813
	3	0.4474
Eta	4	0.5604
	5	0.6002
	6	0.5608
	7	0.4484
	8	0.2824
	9	0.0932

U2

	1	0.00014
	2	-0.00051
	3	-0.0014
Eta	4	-0.0017
	5	-0.002
	6	-0.0024
	7	-0.0024
	8	-0.0013
	9	-0.00014

Perfis de velocidades
 Passagem bidimensional plana
 com controle do espaçamento
 Solucao numerica
 algoritmo Simpler

		U1		
		1	7	13
Eta	1	0.1863	0.1849	0.1835
	2	1.5625	0.5627	0.5624
	3	0.8947	0.8949	0.8952
	4	1.1204	1.1206	1.1213
	5	1.2001	1.2003	1.2012
	6	1.1213	1.1215	1.1222
	7	0.8966	0.8969	0.8971
	8	0.5647	0.565	0.5646
	9	0.1863	0.1857	0.1844

		U2		
Eta	1	2.8E-05	2.5E-05	-6.9E-06
	2	-0.0018	5.7E-05	-6.3E-05
	3	-0.0037	5.4E-05	-0.00014
	4	-0.0041	3.9E-05	-0.00012
	5	-0.004	1.5E-05	-2.1E-05
	6	1.9958	-9.9E-06	8.4E-05
	7	-0.0038	-2.8E-05	0.00011
	8	-0.0019	-3.5E-05	5.5E-05
	9	-9.3E-06	-1.6E-05	3.5E-06

		P		
Eta	1	10.4609	5.4517	0.7043
	2	10.4051	5.4513	0.6689
	3	10.2403	5.4489	0.5567
	4	10.0379	5.4455	0.4146
	5	9.9403	5.4464	0.3488
	6	10.0167	5.4537	0.4149
	7	10.2023	5.4632	0.5584
	8	10.3571	5.4689	0.6721
	9	10.4084	5.4702	0.708

Perfis de velocidades
 Passagem bidimensional plana
 com controle do espaçamento
 Solucao numerica
 algoritmo Simple compressivel

entrada termica e hidrodinamica

		U1			
		1	7	13	
Eta	1	0.0983	0.075	0.0579	
	2	0.1007	0.1039	0.1037	
	3	0.1006	0.1077	0.1118	
	4	0.1005	0.1077	0.1124	
	5	0.1005	0.1076	0.1123	
	6	0.1005	0.1077	0.1124	
	7	0.1006	0.1077	0.1118	
	8	0.1007	0.104	0.1036	
	9	0.0983	0.0753	0.0575	

		U2			
Eta	1	0.00072	0.00058	-0.00045	
	2	0.0011	0.0013	-0.0011	
	3	0.00047	0.0011	-0.0011	
	4	5.1E-05	0.00057	-0.00057	
	5	-0.00034	-6.8E-07	-8.9E-05	
	6	-0.0008	-0.00057	0.00038	
	7	-0.0013	-0.0011	0.00085	
	8	-0.0017	-0.0013	0.00091	
	9	-0.00072	-0.00059	0.00035	

		P			
Eta	1	101325	101325	101325	
	2	101325	101325	101325	
	3	101325	101325	101325	
	4	101325	101325	101325	
	5	101325	101325	101325	
	6	101325	101325	101325	
	7	101325	101325	101325	
	8	101325	101325	101325	
	9	101325	101325	101325	

Perfis de velocidades
 Contracao brusca
 com controle do espacamento
 Solucao numerica
 algoritmo Simpler
 perfil de velocidade uniforme na entrada

U1		1	8	17	25
Eta	1	0.3488	0.1945	1.0578	0.7885
	2	0.3523	0.2798	1.2693	1.3558
	3	0.3538	0.3414	1.2609	1.4235
	4	0.3577	0.3889	1.2138	1.4306
	5	0.3605	0.4205	1.1611	1.4229
	6	0.3634	0.438	1.1193	1.4124
	7	0.366	0.4455	1.0963	1.4046
	8	0.3673	0.4452	1.0962	1.4049
	9	0.3667	0.437	1.1188	1.4131
	10	0.3634	0.4186	1.1607	1.4244
	11	0.3563	0.3868	1.2141	1.433
	12	0.3465	0.3409	1.2602	1.425
	13	0.3376	0.2824	1.2596	1.3501
	14	0.3399	0.1971	1.0239	0.7626
U2					
Eta	1	0.031	0.17	0.53	0.0035
	2	0.076	0.19	0.64	0.018
	3	0.068	0.19	0.57	0.022
	4	0.053	0.16	0.45	0.018
	5	0.039	0.12	0.32	0.013
	6	0.026	0.077	0.19	0.008
	7	0.011	0.026	0.06	0.0026
	8	-0.0066	-0.027	-0.062	-0.0025
	9	-0.026	-0.078	-0.19	-0.0078
	10	-0.047	-0.13	-0.32	-0.013
	11	-0.069	-0.17	-0.45	-0.018
	12	-0.083	-0.19	-0.57	-0.02
	13	-0.079	-0.2	-0.63	-0.016
	14	-0.045	-0.17	-0.53	-0.0019
P					
Eta	1	902.1158	922.4057	-125.046	9.1138
	2	907.0686	907.0864	4.9583	7.0912
	3	905.3482	889.7958	168.5949	7.9501
	4	899.25	874.2333	312.9329	11.2412
	5	891.713	862.2004	415.1736	14.4216
	6	885.4587	854.2903	475.2225	16.5254
	7	882.0761	850.4441	502.0019	17.4666
	8	882.1374	850.5084	501.9514	17.4036
	9	885.6053	854.4969	475.0838	16.3349
	10	891.8293	862.5499	414.9074	14.112
	11	899.2233	874.6482	312.1782	10.8689
	12	905.2712	890.1737	166.8952	7.7086
	13	907.2416	907.4567	3.5233	6.9883
	14	903.1085	922.8929	-122.584	9.153