

**MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE DEFESA**

FRANCISCO EDUARDO LIMA DE MEDEIROS

**METODOLOGIA PARA DESENVOLVIMENTO DE
PRÉ-CONDICIONADORES APLICADOS NA SOLUÇÃO DE
ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS COM BAIXO NÚMERO DE
MACH EM SISTEMAS DE MÍSSEIS E FOGUETES**

**Rio de Janeiro
2012**

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

FRANCISCO EDUARDO LIMA DE MEDEIROS

**METODOLOGIA PARA DESENVOLVIMENTO DE PRÉ-CONDICIONADORES
APLICADOS NA SOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS COM BAIXO
NÚMERO DE MACH EM SISTEMAS DE MÍSSEIS E FOGUETES**

Defesa de Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Defesa do Instituto Militar de Engenharia, como requisito para obtenção do título de Doutor em Ciências em Engenharia de Defesa.

Orientador: Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D

Rio de Janeiro
2012

c2012

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
Praça General Tibúrcio, 80-Praia Vermelha
Rio de Janeiro-RJ CEP 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmear ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do autor e do orientador.

005.1 Medeiros, Francisco Eduardo Lima
T465s Metodologia para Desenvolvimento de Pré-Condicionadores aplicados na Solução de Escoamentos Compressíveis com Baixo Número de Mach em Sistemas de Mísseis e Foguetes/Francisco Eduardo Lima de Medeiros; orientado por Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D. Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2012.

156p.: il, graf., tab.

Tese (doutorado) Instituto Militar de Engenharia. Rio de Janeiro, 2012.

1. Método Pré-Condicionado. 2. Escoamentos Compressíveis. 3. Baixo Número de Mach.
I. Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D. II. Título.
III. Instituto Militar de Engenharia.

CDD 005.1

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

FRANCISCO EDUARDO LIMA DE MEDEIROS

**METODOLOGIA PARA DESENVOLVIMENTO DE PRÉ-CONDICIONADORES
APLICADOS NA SOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS COM BAIXO
NÚMERO DE MACH EM SISTEMAS DE MÍSSEIS E FOGUETES**

Defesa de Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Defesa do Instituto Militar de Engenharia, como requisito para obtenção do título de Doutor em Ciências em Engenharia de Defesa.

Orientador: Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D

Aprovada em 06 de Fevereiro de 2012 pela seguinte Banca Examinadora:

Prof. Leonardo Santos de Brito Alves, Ph.D do IME - Presidente

Prof. Itamar Borges Junior, D. Sc. do IME

Prof. Evandro de Souza Nogueira, D. Sc. do IME

Prof. Marcello Augusto Faraco de Medeiros, Ph.D da USP

Prof. Wladimir Mattos da Costa Dourado, D. Sc. do IAE

Rio de Janeiro
2012

Aos meus pais Francisco e Roza que sempre acreditaram no meu potencial. À minha esposa querida Josiany e aos meus filhos amados Pedro e Gustavo que sempre estiveram ao meu lado.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, professor Leonardo, pelo apoio nos momentos de desequilíbrio, pela dedicação na minha orientação e pela confiança depositada no meu trabalho.

Agradeço aos companheiros de laboratório e amigos Flávio, Gabriel, Oberdan, Renan e Ricardo pelas palavras de motivação e conforto nos momentos de dificuldade.

"Nem a arrogância é sinal de competência nem a competência é causa de arrogância. Não nego a competência, por outro lado, de certos arrogantes, mas lamento neles a ausência de simplicidade que, não diminuindo em nada seu saber, os faria gente melhor. Gente mais gente."
Paulo Freire

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	9
LISTA DE TABELAS	20
LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS	21
1 INTRODUÇÃO	25
1.1 Motivação	25
1.2 Modelagem Matemática	27
1.3 Métodos Numéricos	28
1.3.1 Técnicas de Discretização	28
1.3.2 Solução de Sistemas de Equações Algébricas	29
1.3.3 Erro e Eficiência Computacional	30
1.4 Escoamentos com Baixo Número de Mach	30
1.4.1 Métodos Pré-Condicionadores	31
1.4.2 Dificuldades de Convergência dos Métodos Clássicos	35
1.5 Objetivos da Tese de Doutorado	38
2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	40
2.1 Equações de Governo Compressíveis	40
2.1.1 Caso Bidimensional	40
2.1.2 Caso Quase-Unidimensional Não Viscoso	41
2.2 Separação da Pressão	42
2.3 Metodologia Tradicional de Pré-Condicionamento	43
2.3.1 Parâmetros da Matriz Pré-Condicionadora	45
2.4 Nova Metodologia de Pré-Condicionamento	48
2.4.1 Análise de Rigidez Numérica	49
2.4.2 Análise Numérica da Amplificação de Erros	50
2.4.3 Análise Física da Amplificação de Erros	53
3 FORMULAÇÃO NUMÉRICA	56
3.1 Verificação e validação do código computacional	56
3.2 Discretização Temporal	58
3.3 Discretização Espacial	61

3.3.1	Fluxos Viscosos	61
3.3.2	Fluxos Não Viscosos	62
3.4	Condições de Contorno	64
4	EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA	66
4.1	Verificação do Código Computacional	66
4.1.1	Formulação do Problema	66
4.1.2	Análise de Ordem Temporal	67
4.1.3	Análise de Ordem Espacial	71
4.2	Primeira Etapa de Desenvolvimento da Nova Metodologia	73
4.2.1	Otimização de V_p	73
4.2.2	Formulação do Problema	74
4.2.3	Validação	76
4.2.4	Análise de Eficiência Computacional	79
4.3	Segunda Etapa de Desenvolvimento da Nova Metodologia	83
4.3.1	Seleção dos Parâmetros $h_p - V_p - \delta$	83
4.3.2	Formulação do Problema	89
4.3.3	Validação	89
4.3.4	Análise de Eficiência Computacional	89
4.4	Terceira Etapa de Desenvolvimento da Nova Metodologia	106
4.4.1	Correção da Dissipação Artificial	106
4.4.2	Formulação do Problema	107
4.4.3	Validação	107
4.4.4	Análise de Eficiência Computacional	108
4.5	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica	117
4.5.1	Formulação do Problema	117
4.5.2	Validação	119
4.5.3	Análise de Eficiência Computacional	119
4.6	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica	126
4.6.1	Formulação do Problema	126
4.6.2	Validação	126
4.6.3	Análise de Eficiência Computacional	126
4.7	Problema do Ponto de Estagnação Bidimensional	136
4.8	Formulação do Problema	136
4.8.1	Validação	138

4.8.2	Análise de Eficiência Computacional	150
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	160
5.1	Conclusões e Contribuições	160
5.2	Comentários Finais e Trabalhos Futuros	164
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	166
7	APÊNDICE A	170
7.1	Problemas de Otimização Sem Restrição	170
7.2	Método de Powell	171
7.3	Busca Unidimensional por Aproximação Quadrática	172
8	APÊNDICE B	175
8.1	Análise de Eficiência Computacional	175
8.1.1	Número de condicionamento da matriz Γ	175
8.1.2	Razão de Autovalores	178
8.1.3	Número de condicionamento da matriz de autovetores	181
8.1.4	Erro Absoluto da Solução	184
8.2	Validação	187
8.2.1	Solução de Número de Mach	187
8.2.2	Solução de Pressão	188
8.2.3	Solução de Temperatura	193

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG.4.1	Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 8$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	68
FIG.4.2	Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	68
FIG.4.3	Ordem do Erro Temporal - $N_t = 8$, $N_t = 16$ e $N_t = 32$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	69
FIG.4.4	Cruzamento das Soluções Numéricas com $N_t = 8$ e $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	70
FIG.4.5	Soluções Transientes de Massa Específica - $N_t = 8$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	70
FIG.4.6	Soluções Transientes de Massa Específica - $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	71
FIG.4.7	Erros das Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 8$ e $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	72
FIG.4.8	Ordem do Erro Espacial - $N_x = 102$, $N_x = 202$ e $N_x = 402$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	72
FIG.4.9	Soluções Transientes de Massa Específica para $N_x = 102$ e $N_x = 202$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	73
FIG.4.10	Erros Soluções Transientes de Massa Específica para $N_x = 102$ e $N_x = 202$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.	74
FIG.4.11	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	76
FIG.4.12	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	77

FIG.4.13	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	77
FIG.4.14	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	78
FIG.4.15	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	78
FIG.4.16	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	79
FIG.4.17	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	80
FIG.4.18	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	81
FIG.4.19	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	81
FIG.4.20	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	82
FIG.4.21	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	83
FIG.4.22	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	84
FIG.4.23	Relação de δ com a Razão de Autovalores	88
FIG.4.24	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - Mach 10^{-1} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	90
FIG.4.25	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - Mach 10^{-3} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	90
FIG.4.26	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - Mach 10^{-1} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	91
FIG.4.27	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - Mach 10^{-3} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	91
FIG.4.28	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - Mach 10^{-1} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	92
FIG.4.29	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - Mach 10^{-3} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	92
FIG.4.30	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	94

FIG.4.31	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	95
FIG.4.32	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	96
FIG.4.33	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	96
FIG.4.34	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	97
FIG.4.35	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	98
FIG.4.36	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	99
FIG.4.37	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	100
FIG.4.38	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Transiente Inicial do Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	101
FIG.4.39	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Transiente Inicial do Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	101
FIG.4.40	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	102
FIG.4.41	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	103
FIG.4.42	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	104
FIG.4.43	Bocal Convergente-Divergente Subsônico, Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	105

FIG.4.44	Bocal Convergente-Divergente Subsônico, Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	105
FIG.4.45	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	108
FIG.4.46	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	109
FIG.4.47	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	109
FIG.4.48	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	110
FIG.4.49	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	110
FIG.4.50	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	111
FIG.4.51	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	112
FIG.4.52	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	112
FIG.4.53	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	113
FIG.4.54	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	113
FIG.4.55	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	114
FIG.4.56	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	114
FIG.4.57	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	115
FIG.4.58	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	116
FIG.4.59	Função da Temperatura de Entrada	117

FIG.4.60	Advecção Não Viscosa de Onda Térmica, Evolução da Solução de Temperatura no Pseudo-Tempo - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.	119
FIG.4.61	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Γ - Mach 10^{-2} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.	121
FIG.4.62	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Γ - Mach 10^{-4} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.	122
FIG.4.63	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - Mach 10^{-2} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.	123
FIG.4.64	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - Mach 10^{-4} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.	123
FIG.4.65	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Autovetores - Mach 10^{-2} - Nx = 101 pontos - Euler Explícito - MDP de 3ª ordem.	124
FIG.4.66	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Autovetores - Mach 10^{-4} - Nx = 101 pontos - Euler Explícito - MDP de 3ª ordem.	124
FIG.4.67	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - Mach 10^{-2} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	125
FIG.4.68	Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - Mach 10^{-4} - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	125
FIG.4.69	Advecção Viscosa de Onda Térmica, Evolução da Solução de Temperatura no Pseudo-Tempo - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	127
FIG.4.70	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Γ - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	128
FIG.4.71	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matríz Γ - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	129
FIG.4.72	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	130

FIG.4.73	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	131
FIG.4.74	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matriz Autove- tores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	132
FIG.4.75	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matriz Autove- tores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	132
FIG.4.76	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	133
FIG.4.77	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.	133
FIG.4.78	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Efeito da Viscosidade na Convergência do Método de Merkle - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3ª ordem - Centrada 2ª ordem.	134
FIG.4.79	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Efeito da Viscosidade na Convergência da Nova Metodologia - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3ª ordem - Centrada 2ª ordem.	134
FIG.4.80	Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Compara Efeitos da Visco- sidade - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3ª ordem - Centrada 2ª ordem.	135
FIG.4.81	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Pressão Hidro- dinâmica p_h	138
FIG.4.82	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Velocidade u	139
FIG.4.83	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Velocidade v	140
FIG.4.84	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Temperatura	141
FIG.4.85	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	141
FIG.4.86	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	142

FIG.4.87	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Nova Metodologia Sem Correção da Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	142
FIG.4.88	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Nova Metodologia Com Correção da Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	143
FIG.4.89	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	143
FIG.4.90	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	144
FIG.4.91	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	144
FIG.4.92	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	145
FIG.4.93	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	145
FIG.4.94	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	146
FIG.4.95	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	146
FIG.4.96	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	147
FIG.4.97	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Temperatura - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	147
FIG.4.98	Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Temperatura - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP	

de 1ª ordem.	148
FIG.4.99 Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Temperatura - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	148
FIG.4.100 Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Temperatura - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	149
FIG.4.101 Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	150
FIG.4.102 Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	151
FIG.4.103 Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	151
FIG.4.104 Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	152
FIG.4.105 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em X - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	153
FIG.4.106 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em X - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	154
FIG.4.107 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em X - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	154
FIG.4.108 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em X - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	155
FIG.4.109 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em Y - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	156
FIG.4.110 Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em Y -	

	Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	156
FIG.4.111	Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em Y - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	157
FIG.4.112	Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em Y - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.	157
FIG.4.113	Ponto de Estagnação Bidimensional - Erro Absoluto da Solução - $N_x =$ 51 pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.	158
FIG.7.1	Processo de Busca do Método de Powell	171
FIG.7.2	Algoritmo do Método de Powell	172
FIG.7.3	Algoritmo do Método de Busca Unidimensional via Aproximação Qua- drática	174
FIG.8.1	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 =$ 10^{-2} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	175
FIG.8.2	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 =$ 10^{-4} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	176
FIG.8.3	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 =$ 10^{-5} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	176
FIG.8.4	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 =$ 10^{-6} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	177
FIG.8.5	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Γ - $M_0 =$ 10^{-7} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	177
FIG.8.6	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	178
FIG.8.7	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	179
FIG.8.8	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	179
FIG.8.9	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	180
FIG.8.10	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	180

FIG.8.11	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matríz Autove- tores - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	181
FIG.8.12	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matríz Autove- tores - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	182
FIG.8.13	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matríz Autove- tores - $M_0 = 10^{-5}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	182
FIG.8.14	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matríz Autove- tores - $M_0 = 10^{-6}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	183
FIG.8.15	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matríz Autove- tores - $M_0 = 10^{-7}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	183
FIG.8.16	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	184
FIG.8.17	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	185
FIG.8.18	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-5}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	185
FIG.8.19	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-6}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	186
FIG.8.20	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-7}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	186
FIG.8.21	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	187
FIG.8.22	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	188
FIG.8.23	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-5}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	189
FIG.8.24	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-6}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	189
FIG.8.25	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-7}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1 ^a ordem.	190

FIG.8.26	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	190
FIG.8.27	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	191
FIG.8.28	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-5}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	191
FIG.8.29	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-6}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	192
FIG.8.30	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-7}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	192
FIG.8.31	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-2}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	193
FIG.8.32	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-4}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	194
FIG.8.33	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-5}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	194
FIG.8.34	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-6}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	195
FIG.8.35	Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-7}$ - Nx = 201 pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.	195

LISTA DE TABELAS

TAB.3.1	Coeficientes das Derivadas no Tempo Físico	59
TAB.3.2	Definição das Condições de Contorno	65

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

ABREVIATURAS

A, \hat{A}	-	Jacobiano dos fluxos invscidos na direção do escoamento
B, \hat{B}	-	Jacobiano dos fluxos invscidos transversal escoamento
c	-	Velocidade do som
CFL	-	Número de Courant-Friedrichs-Lewy
c_p	-	Calor Específico a Pressão Constante
d	-	Altura do domínio
D	-	Jacobiano do termo fonte
e	-	Energia interna térmica
E	-	Energia interna total
E_i	-	Vetor dos fluxos invscidos na direção do escoamento
E_v	-	Vetor dos fluxos viscosos na direção do escoamento
F_i	-	Vetor dos fluxos invscidos transversal ao escoamento
F_v	-	Vetor dos fluxos viscosos transversal ao escoamento
f	-	Vetor de Resíduo
h	-	Entalpia termodinâmica
H	-	Entalpia termodinâmica total
J	-	Matriz Jacobiana
L	-	Comprimento longitudinal do domínio
M	-	Número de Mach do fluido
N_X	-	Número de pontos na malha na direção longitudinal
N_Y	-	Número de pontos na malha na direção transversal
P	-	Pressão
P_0	-	Pressão hidrostática
P_g	-	Pressão hidrodinâmica
Q	-	Vetor de variáveis conservativas
\hat{Q}	-	Vetor de variáveis primitivas
Re	-	Número de Reynolds
t	-	Tempo físico

T	-	Temperatura
T_J	-	Jacobiano entre as variáveis primitivas e conservativas
u	-	Velocidade longitudinal do fluido
U_1	-	Velocidade longitudinal uniforme do fluido na camada superior
U_2	-	Velocidade longitudinal uniforme do fluido na camada inferior
v	-	Velocidade transversal do fluido
VNN	-	Número de Von Neumann
V_p	-	Pseudo velocidade do som
x	-	Coordenada longitudinal
y	-	Coordenada transversal

SÍMBOLOS

α	-	Parâmetro do condicionamento otimizado
β	-	Parâmetro do condicionamento otimizado
δ	-	Parâmetro do condicionamento otimizado
Δt	-	Incremento no tempo físico
$\Delta \tau$	-	Incremento no pseudo-físico
μ	-	Viscosidade cinemática
τ	-	Pseudo-tempo
λ	-	Autovalores
Γ	-	Matriz condicionadora
ρ	-	Densidade

Resumo

Este estudo estabelece um novo procedimento para selecionar os parâmetros de controle dos métodos pré-condicionados "Density-Based". Esses métodos são usados para simulações de escoamento compressível com baixo número de Mach. O desenvolvimento das matrizes pré-condicionadoras dos métodos "Density-Based" encontrados na literatura são baseados em dois critérios: *i*) minimização da razão dos autovalores acústico/convectivo a fim de reduzir a rigidez numérica *ii*) separação das contribuições estática e dinâmica das variáveis dependentes e, em alguns casos, dos fluxos não viscosos, para reduzir erros de cancelamento. O presente estudo estabelece um novo procedimento para o desenvolvimento de matrizes pré-condicionadoras. Isto é feito através da combinação da estrutura matemática associada aos autovalores, de propagação de erros e de análises autovetores. A análise de autovalores é a mesma utilizada pela metodologia tradicional. No entanto, o controle de propagação de erro inclui uma análise do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora. Este é um passo vital para reduzir a amplificação de quaisquer erros existentes. Além disso, um terceiro critério é incluído. Ele aumenta a robustez minimizando o número de condicionamento da matriz de autovetores. São observadas melhorias significativas na taxa de convergência assintótica.

Abstract

This study establishes a new procedure for selecting the control parameters in preconditioned Density-Based methods. These methods are used for low Mach number compressible flow simulations. Development of preconditioning matrixes for density-based methods found in the literature are based on two criteria: *i*) minimizing the acoustic/convective eigenvalue ratio in order to reduce stiffness and *ii*) separating static and dynamic contributions in dependent variables and, in some cases, inviscid fluxes, to reduce cancellation errors. The present study establishes a new procedure for the development of such matrixes. It does so by combining the mathematical framework provided by eigenvalue, error propagation and eigenvector analyses. Eigenvalue analysis is the same one used by the traditional methodology. However, error propagation control includes an analysis of the preconditioning matrix condition number. This is a vital step to reduce the amplification of any existing errors. Furthermore, a third criterion is included. It enhances robustness by minimizing the eigenvector matrix condition number. Significant convergence improvements are observed in terms of increased asymptotic rates.

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

As atividades de pesquisa científico-tecnológica e de inovação são hoje componentes fundamentais da presença atuante e autônoma de uma nação, como também da agregação de valor a produtos e processos, com reflexos diretos nas possibilidades de inserção competitiva de um país no mercado mundial. O desenvolvimento científico e tecnológico tornou-se um fator determinante na geração de renda e na promoção de bem estar social. Não por acaso, muitas nações se referem à Ciência e Tecnologia (C&T) como uma questão de poder, capaz de dividir o mundo entre os países produtores de conhecimentos e tecnologias e aqueles que, no máximo, conseguem copiá-las (BORGES et al., 2006; PELLANDA, 2008).

No âmbito da Defesa Nacional, a postura estratégica predominantemente dissuasória adotada pelo Estado Brasileiro (BRASIL, 2005) apoia-se fortemente na componente tecnológica, na medida em que esta se torna, cada vez mais, o fator determinante na comparação da capacidade militar de defesa das nações. Neste sentido, fomentar pesquisa científico-tecnológica e inovação na área de defesa constitui um eixo fundamental da soberania do País e da preservação de seus legítimos interesses. Adicionalmente, a necessidade de vigilância e defesa do nosso território de dimensões continentais, em especial da cobiçada região amazônica, leva a uma crescente conscientização da importância da área científico-tecnológica para a soberania e segurança nacionais (BORGES et al., 2006; PELLANDA, 2008).

Historicamente nos países do primeiro mundo o desenvolvimento industrial e as novas descobertas tecnológicas estão intimamente associados com a existência de uma forte indústria de defesa (ACOCELLA, 2004). Este contexto tem levado as instituições federais de fomento à pesquisa e à inovação tecnológica brasileiras a uma série de iniciativas fundamentais no sentido de mudar o quadro atual de estagnação da indústria de defesa no Brasil. Neste contexto, o Governo Federal lançou em 2008 a Estratégia Nacional de Defesa (BRASIL, 2008) com o objetivo de modernizar a estrutura nacional de defesa.

O Programa de Pós-graduação em Engenharia de Defesa (PGED) do Instituto Militar de Engenharia (IME) visa, a partir de uma formação fortemente assentada na pesquisa básica de qualidade, com inserção internacional e de caráter inter e multidisciplinar, preencher essa demanda nacional de pessoal altamente qualificado e especializado nas áreas de ciências e engenharias, contribuindo com o papel reservado ao Brasil no cenário geopolítico mundial. A proposta do

PGED é uma iniciativa inovadora, plenamente capacitada para responder e liderar a superação das supracitadas dificuldades para a Defesa Nacional (ADES et al., 2010). Uma das linhas de pesquisas do PGED trata de Modelagem e Simulação em Sistemas de Defesa. São empregados métodos numéricos, modelos matemáticos, algoritmos computacionais avançados e computação de alto desempenho para investigar aspectos fundamentais de fenômenos físicos e químicos relacionados a sistemas de defesa. Inseridos nessa linha de pesquisa estão os trabalhos de modelagem e simulação dos fenômenos fluido-dinâmicos. As aplicações da dinâmica dos fluidos computacional em sistemas de defesa incluem a análise de escoamentos em aeronaves, mísseis, foguetes e automóveis.

A dinâmica dos fluidos computacional teve uma expressiva evolução nos últimos 20 anos. Inicialmente como uma ferramenta para análise de problemas físicos em nível investigação científica e, atualmente, como uma poderosa ferramenta para o estudo de diversos ramos da engenharia. Surgiram inúmeros programas comerciais capazes de solucionar com agilidade e flexibilidade diversos problemas fluido-dinâmicos (MALISKA, 1995). Entretanto, em função dos e levados custos, das dificuldades de interação e de confiabilidade de informações dos pacotes comerciais, verifica-se a necessidade de elaboração de códigos direcionais, que são programas especificamente desenvolvidos para solução de determinados problemas fluido-dinâmicos (SALVADOR, 2005). Além disso, a elaboração de programas computacionais direcionais possibilita uma maior sensibilidade aos aspectos físicos dos problemas, facilitando assim, a formação de recursos humanos.

De acordo com KESHTIBAN et al. (2004), fluidos escoando em altas velocidades ($Mach \geq 0.3$) não podem ser modelados a partir das formulações incompressíveis. Para tais situações são empregadas as equações compressíveis. Existem várias ocasiões onde a geometria do domínio, no qual o escoamento se desenvolve, produz regiões de altas velocidades, mesmo que o restante do escoamento esteja em baixa velocidade. Como exemplo desse tipo de escoamento pode ser citado o sistema de injeção de um motor de combustão interna, onde o escoamento do combustível pode ser tratado como incompressível ao longo da mangueira de injeção ($Mach < 0.1$). No entanto, velocidades da ordem de $Mach \approx 0.5$ são desenvolvidas próximas à válvula de admissão. Na simulação do escoamento ao redor de um corpo em alta velocidade, a condição de não-eskorregamento reduz as velocidades para zero nas paredes do corpo, mesmo que a velocidade da corrente livre seja hipersônica. Tal situação é habitualmente tratada pela engenharia aeroespacial, como por exemplo, no escoamento ao redor da asa de um avião. Face ao exposto, fica evidente a necessidade de desenvolvimento de códigos robustos, com uma abordagem única, capazes de lidar com tanto com escoamentos compressíveis e quanto incompressíveis.

Adicionalmente, alguns escoamentos com baixas velocidades também são tratados como

compressíveis, tais como quando significativas variações da massa específica ocorrem devido a grandes variações de temperatura. Isso ocorre no escoamento desenvolvido na câmara de combustão de um míssil. Escoamentos compressíveis com baixo número de Mach são rotineiramente tratados pelas engenharias mecânica e aeroespacial. Segundo GRENIER et al. (2011), que simula um escoamento bifásico, com uma fase líquida e uma fase gasosa em um tanque de combustível de um veículo lançador, o emprego de um modelo compressível é mais adequado por ser mais genérico e por facilitar a implementação da simulação da dinâmica de gases.

Existem métodos computacionais capazes de obter soluções adequadas de escoamentos compressíveis perante às adversidades impostas pela baixa velocidade do escoamento. Esses métodos podem ser divididos em duas famílias, os baseados na pressão “Pressure-Based” (HARLOW e Amsden, 1971; KARKI e Patankar, 1989) e os baseados na massa específica “Density-Based” (CHOI e MERKLE, 1985; TURKEL, 1987). O métodos “Pressure-Based” possuem alta eficiência computacional, porém não utilizam formulação conservativa dos fluxos, o que é desejado para simulação de escoamentos com ondas de choque ou com discontinuidades. O métodos “Density-Based” utilizam formulação conservativa dos fluxos, contudo possuem baixa eficiência computacional (ALVES, 2009; MATOS, 2009).

O foco deste trabalho de Tese são métodos “Density-Based”. Essa família de métodos ainda carece de um aumento de eficiência, pois possuem sérias dificuldades de convergência (LEE e LEER, 1993; DARMOFAL e SCHMID, 1996), principalmente associadas à restrições no passo temporal e à amplificação de erros. Por isso, é consenso entre engenheiros e pesquisadores de simulação fluido-dinâmica que há necessidade de desenvolvimento de extensões dessa metodologia tradicional, buscando aumento da eficiência computacional.

1.2 MODELAGEM MATEMÁTICA

Em engenharia, a solução numérica de qualquer problema físico requer inicialmente a criação de um modelo matemático. Este é constituído por um conjunto de equações algébricas e/ou diferenciais ordinárias ou parciais e condições adicionais (iniciais e/ou de contorno) que representam a física do problema estudado dentro das hipóteses adotadas pelo modelo. A seleção de simplificações a serem efetuadas ou a relaxação de determinadas restrições requer um conhecimento aprofundado do problema. A solução de um modelo matemático requer o emprego de um método analítico ou numérico. Um método analítico com a capacidade de resolver as equações diferenciais produz uma solução contínua, sendo possível calcular os valores das variáveis dependentes para um número infinito de pontos. Com frequência, problemas reais não podem ser convenientemente solucionados por meio de fórmulas exatas. Quando não é possível obter

uma solução analítica, há a alternativa de se utilizar uma aproximação numérica da equação diferencial para cálculo de uma solução restrita a um número discreto de pontos (MALISKA, 1995).

Na mecânica dos fluidos, geralmente as equações de Navier-Stokes proporcionam o modelo mais completo para o estudo dos escoamentos compressíveis, viscosos e com condução de calor. As equações descrevem o escoamento de um fluido Newtoniano considerado como meio contínuo e em regime transiente. O conjunto de equações representa os princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia (ANDERSON, 1995).

1.3 MÉTODOS NUMÉRICOS

1.3.1 TÉCNICAS DE DISCRETIZAÇÃO

O ponto de partida de qualquer método numérico é a discretização do domínio e das equações diferenciais que modelam o problema. Existem várias técnicas de discretização, sendo as mais conhecidas: Método dos Elementos Finitos (MEF), Método dos Volumes Finitos (MVF) e Método das Diferenças Finitas (MDF).

No MEF, o domínio é dividido num conjunto discreto de elementos ou elementos finitos. As equações são multiplicadas por uma função peso antes de serem integradas sobre todo o domínio. Na forma mais simples do MEF, a solução é aproximada por uma função linear de maneira a garantir a continuidade da solução através das fronteiras dos elementos. Tal função pode ser construída através dos seus valores nos cantos dos elementos. Seleciona-se a melhor solução dentro do conjunto de funções permitidas, ou seja, aquela que tiver resíduo mínimo. O resultado é um conjunto de equações algébricas não lineares. O principal inconveniente do método é o fato de as matrizes das equações linearizadas possuírem poucos elementos nulos, fazendo com que seja difícil encontrar métodos de resolução eficientes (HUTTON, 2004).

O MVF utiliza como ponto de partida a forma integral da equação da conservação. O domínio de solução é dividido num número finito de volumes de controle (VC) contíguos, e as equações de conservação são aplicadas a cada VC. As integrais de volume e de superfície são aproximados usando fórmulas de quadratura apropriadas. Como resultado, obtém-se uma equação algébrica para cada VC, na qual aparecem os valores das variáveis no centro e nas faces de cada volume. O MVF pode ser aplicado a malhas estruturadas e não estruturadas, adaptando-se a geometrias complexas. Considera-se como principal desvantagem do MVF o fato de métodos de ordem superior a segunda serem mais difíceis de desenvolver (HUTTON, 2004), apesar de recentes avanços, tais como o trabalho de (WOLF, 2006), que apresenta esquemas não oscilatórios de alta ordem de precisão em malhas não estruturadas usando o MVF.

O MDF é o método de discretização mais antigo. É também o método mais expedito para uso em geometrias simples. O domínio de solução é coberto por uma malha espaço-temporal. Em cada ponto da malha, a equação é aproximada substituindo-se as derivadas existentes por aproximações. O resultado é uma equação algébrica ou um sistema de equações algébricas. A fórmula de aproximação por diferenças finitas pode ser obtida a partir da expansão em série de Taylor da função e suas derivadas. A ordem de precisão da aproximação está relacionada com o erro de truncamento da série de Taylor, o qual é expresso pela ordem de grandeza do primeiro termo desprezado da série. Desta forma, a ordem de precisão da diferenciação pode ser aumentada em função do número de pontos utilizados na expansão de Taylor (TANNEHILL et al., 1997). O presente trabalho tem foco no Método das Diferenças Finitas para discretização das equações que modelam os problemas físicos estudados. Nos últimos anos, o grupo de dinâmica dos fluidos computacional do Laboratório de Motores do IME vem desenvolvendo ferramentas computacionais baseadas no MDF.

1.3.2 SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES ALGÉBRICAS

Segundo GOLUB e LOAN (1996), na literatura existem diversas maneiras de se obter a solução de um sistema de equações algébricas. Essas técnicas podem ser divididas em dois grupos, os métodos diretos e os indiretos. No primeiro grupo, todas as variáveis do sistema acoplado são obtidas simultaneamente, tais como Eliminação de Gauss, Eliminação de Thomas e Decomposição LU. Já no segundo grupo, o sistema tem seu acoplamento modificado. O novo sistema é resolvido de maneira explícita e realimentado repetidamente até que o acoplamento original seja recuperado. Métodos indiretos foram desenvolvidos para solução numérica de sistemas quando a matriz é extremamente longa e esparsa, sem nenhum padrão reconhecido na distribuição de elementos nulos que permita a construção de um método direto. Podem ser citados como exemplos de tais métodos, a Iteração de Richardson, a Iteração de Jacobi e a Iteração de Gauss-Seidel. Uma das técnicas mais conhecidas para melhorar a convergência de métodos iterativos latentes é conhecida como relaxação. O principal problema da relaxação, independentemente do método iterativo a ser otimizado, é a escolha adequada dos parâmetros de relaxação. Por isso, técnicas originalmente desenvolvidas para lidar com problemas de otimização passaram a ser alternativas bastante utilizadas para solução de sistemas de equações algébricas.

1.3.3 ERRO E EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

De acordo com FREITAS (2000), nenhum resultado obtido por métodos numéricos tem valor se não houver conhecimento e controle sobre os possíveis erros envolvidos no processo. A noção de erro está presente em todos os campos do cálculo numérico. A partir de dados de entrada não exatos, as operações sobre esses valores imprecisos propagam erros a seus resultados. A propagação de erros está relacionada às operações realizadas pelo método numérico empregado. Existem diversos tipos de erros associados a uma solução numérica. Os dois tipos mais importantes são os erros de arredondamento e os erros de truncamento. Os erros de arredondamento surgem devido à aritmética de precisão finita realizada pelo computador durante as operações numéricas. Os erros de truncamento ocorrem devido às aproximações empregadas para representação de um procedimento matemático exato. O controle da propagação de erros pode ser feito por meio da escolha de um método que utilize um número mínimo de operações para alcançar o resultado esperado.

Segundo CHAPRA e CANALE (2008), alguns problemas físicos e algoritmos numéricos possuem a propriedade de amplificar drasticamente os erros presentes nos dados de entrada. No contexto do cálculo numérico, esse fenômeno é denominado instabilidade numérica. O número de condicionamento é uma medida de sensibilidade do sistema a presença de perturbações. O sistema é tão mal condicionado quanto maior for seu número de condicionamento, sendo mais sujeito à amplificações do erro numérico. A eficiência de um método computacional está relacionada com a propagação e a amplificação do erro numérico ao longo do processo iterativo. Geralmente mensura-se a eficiência de um método computacional pelo número de operações aritméticas por iteração ou pelo número total de iterações necessárias para atingir a solução com uma precisão desejada.

1.4 ESCOAMENTOS COM BAIXO NÚMERO DE MACH

Simulações numéricas de escoamentos compressíveis com baixas velocidades geralmente são problemáticas, pois ocorre uma degradação da convergência dos algoritmos de marcha no tempo. A perda de eficiência computacional se manifesta por dois motivos diferentes.

O primeiro fator está relacionado com a propagação de erros de arredondamento no cálculo da derivada espacial da pressão na equação da quantidade de movimento. Essa fonte de instabilidade numérica tem origem na discrepância existente entre as contribuições dinâmica (hidrodinâmica) e estática (termodinâmica) da pressão. Além disso, na adimensionalização da equação da quantidade de movimento, a derivada espacial da pressão é multiplicada por um fator da ordem de $1/M^2$ (VENKATESWARAN e MERKLE, 1999), que atinge elevados valores

quando Mach tende para zero. A redução da propagação desses erros se dá pela introdução de estados de referência conhecidos, calculando-se a solução somente para as flutuações restantes. As contribuições hidrodinâmica e termodinâmica da pressão são separadas, assumindo-se que a contribuição estática seja constante (MERKLE e CHOI, 1988; TURKEL et al., 1993; SESTERHENN et al., 1999).

O segundo fator é classicamente tratado como rigidez numérica e está relacionado com restrições no passo temporal. Quando o número de Mach é muito reduzido, observa-se uma disparidade muito grande entre os autovalores convectivos e acústicos do sistema de equações governantes. As velocidades de propagação das informações acústicas são muito maiores do que as velocidades das informações convectivas. O passo no tempo fica limitado pelos elevados valores das velocidades acústicas, apesar das velocidades convectivas permitirem passos maiores. Diferentes técnicas de aceleração de convergência foram desenvolvidas para eliminação do problema de restrição no passo temporal (KESHTIBAN et al., 2004), podendo-se dar destaque ao pré-condicionamento das equações governantes. Trata-se de uma técnica clássica que força todos os autovalores a terem a mesma ordem de magnitude.

1.4.1 MÉTODOS PRÉ-CONDICIONADORES

Os métodos de pré-condicionamento das equações de Navier-Stokes compressíveis são baseados na técnica da pseudo-compressibilidade ou compressibilidade artificial (CHORIN, 1967). A pseudo-compressibilidade é uma técnica estabelecida para a solução das equações de Navier-Stokes em escoamentos incompressíveis. A compressibilidade artificial se originou como alternativa ao procedimento clássico de cálculo dos gradientes de pressão por meio de uma equação de Poisson, a qual era obtida pelo divergente da equação da quantidade de movimento. O método MAC “Marker-and-Cell” (WELCH et al., 1966) e o algoritmo SIMPLE “Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations” (PATANKAR, 1980) estão na classe de métodos que utilizam a equação de Poisson para a pressão. Em geral, utiliza-se uma previsão para a pressão para corrigir um campo de velocidade intermediário, que satisfaz a equação de conservação da massa. O objetivo da metodologia de CHORIN (1967) era evitar o inconveniente de se trabalhar com uma equação hiperbólica/parabólica, como é a equação da quantidade de movimento, em conjunto com uma equação elíptica, como é uma equação de Poisson. A pseudo-compressibilidade é realizada pela adição de uma derivada temporal da pressão multiplicada por um fator de compressibilidade artificial na equação da continuidade, gerando uma equação hiperbólica, eliminando, assim, a necessidade de se trabalhar com uma equação elíptica. O método introduz uma mudança do estado transiente das equações, gerando um pseudo-

tempo.

A filosofia dos métodos pré-condicionadores consiste na multiplicação de uma matriz pré-condicionadora às equações de Navier-Stokes compressíveis de tal forma que os autovalores do sistema sejam modificados, eliminando o problema de diferença de magnitude entre os mesmos. Para isso, alguns parâmetros presentes na matriz pré-condicionadora são pré-estabelecidos e calculados em função das velocidades do escoamento. Estes métodos abrangem desde escoamentos com baixas velocidades até o supersônico, incluindo problemas que envolvem reações químicas. Como desvantagem, o pré-condicionamento das equações governantes faz com que o transiente calculado pelas equações governantes não tenha significado físico. A solução de regime permanente da equação original é recuperada quando se atinge o regime permanente do pseudo-tempo.

Em BRILEY et al. (1983), os pré-condicionadores foram empregados para melhorar a taxa de convergência de esquemas de discretização temporal implícitos baseados em fatoração implícita de direções alternadas (ADI) (BEAM e WARMING, 1976). O método foi utilizado para solução de regime permanente das equações de Navier-Stokes com entalpia total constante (isoenergéticas) para baixos números de Mach. Houve incorporação de um modelo de turbulência nas equações governantes. O método mostrou ter boa taxa de convergência para valores tão baixos quanto $M = 0.05$.

No trabalho de CHOI e MERKLE (1985) foi apresentado um esquema de pré-condicionamento generalizado tanto para regimes incompressíveis quanto compressíveis. Para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente, foram utilizados esquemas implícitos baseados em fatoração ADI. Realizou-se uma análise de estabilidade do emprego desses métodos de marcha para solução das equações de Euler unidimensionais e bidimensionais. A análise mostrou que a taxa de convergência do método e a precisão da solução final dependiam do número de Mach. Além disso, concluiu-se que o erro gerado pela fatoração aproximada deveria ser removido. Indicou-se que para números de Mach por volta de 0.05 o método apresentava boas taxas de convergência.

O estudo de RIZZI e ERIKSSON (1985) utilizou o esquema de pré-condicionadores para resolver as equações de Euler isoenergéticas. Eles concluíram que os pré-condicionadores eram eficientes para equações de Euler bidimensionais e tridimensionais. Para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente foi empregado um método de Runge-Kutta explícito com três estágios intermediários.

TURKEL (1987) realizou uma revisão dos métodos de compressibilidade artificial e apresentou um esquema de pré-condicionamento generalizado tanto para as regimes incompressíveis quanto compressíveis. Na generalização de sua teoria, Turkel introduziu funções arbitrárias

α e β na matriz pré-condicionadora, sendo β semelhante ao fator de compressibilidade artificial de Chorin, mostrando como as matrizes deveriam ser para não introduzir fenômenos não físicos. Calculou-se um valor ótimo para β , a partir de um dado valor de α , para minimização da disparidade das velocidades características do sistema. Para modelo do escoamento, foram utilizadas as equações de Euler bidimensionais escrita em coordenadas Cartesianas (x, y). Turkel comparou o emprego dos métodos Euler explícito e implícito para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente, relacionando a limitação do passo no pseudo-tempo dos métodos explícitos a uma maior sensibilidade aos problemas de rigidez numérica. Por isso, observou que os métodos explícitos eram mais adequados para uma análise do aumento da taxa de convergência. O trabalho considerou como variáveis primitivas a pressão, as velocidades nas direções cartesianas x e y , e uma variável adicional que poderia ser entropia ou massa específica. Salientou que o uso da entropia como variável adicional facilita as análises do sistema, uma vez que a equação de conservação de energia poderia ser desacoplada do sistema de equações. Entretanto, esclareceu que o emprego da massa específica como variável adicional, apesar de dificultar as análises do sistema, facilitaria o pré-condicionamento das equações. Foi verificado que ao usar a densidade como variável adicional, para um caso particular em que $\alpha=0$, seu método era semelhante ao apresentado em CHOI e MERKLE (1985).

O estudo de MERKLE e CHOI (1987) concluiu que o esquema de pré-condicionamento apresentado em CHOI e MERKLE (1985), que relacionava convergência e precisão da solução com o número de Mach, não era adequado para escoamentos invíscidos abaixo de $M=0.01$. Para baixas velocidades, os termos do gradiente de pressão apresentavam comportamento singular. Por isso, foi desenvolvido o método de expansão de perturbação das equações de Navier-Stokes, o qual gerou boas taxas de convergência independente do número de Mach, chegando a valores como $M = 10^{-5}$. Para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente, foram utilizados esquemas implícitos baseados em fatoração aproximada alternada ADI. Realizou-se uma análise de estabilidade do emprego desses métodos de marcha no pseudo-tempo implícitos para solução numérica de escoamentos com baixos números de Reynolds e baixos números de Mach, com adição de termo fonte. A análise mostrou que os erros introduzidos pelo uso de fatoração aproximada causavam instabilidade para números de Reynolds por volta de 100.

Em SHUEN et al. (1992) foram implementadas modificações no esquema dos pré-condicionadores para obtenção da solução transiente. A metodologia consistia basicamente no acréscimo de uma derivada no tempo físico do vetor de variáveis conservativas nas equações governantes. Essa técnica foi criada por MERKLE e ATHAVALE (1987) e é conhecida como método de passo no tempo duplo (DTS). Combina-se procedimentos de aceleração de convergência para regime permanente, tais como o emprego de pré-condicionadores, com a

obtenção de soluções transientes. Para cada passo no tempo físico, marcha-se até a solução de regime permanente no pseudo-tempo. Com isso, recupera-se a equação original transiente. Para discretização da derivada do pseudo-tempo é comum a utilização de métodos de marcha que permitem uma convergência rápida, incondicionalmente estáveis, possibilitando o uso de passos maiores, como o método de Euler implícito. O alto nível de dissipação temporal desses métodos de marcha não foi considerado um problema, uma vez que em regime permanente a derivada do pseudo-tempo se anula. Utilizando-se uma formulação residual (EHLE, 1968) para o vetor de variáveis, a solução de regime permanente torna-se independente do passo no pseudo-tempo. Para a derivada no tempo físico, métodos de marcha multi-passos implícitos são muito empregados, com destaque para os métodos multi-passo de diferença atrasada (BDF) de 2ª ordem e Crank-Nicolson. Entretanto, foi demonstrado matematicamente que todos os métodos multi-passo são condicionalmente estáveis acima de segunda ordem (DAHLQUIST, 1963). Desta forma, o uso da metodologia DTS com métodos de marcha multi-passos encontra sérias dificuldades na solução transiente de problemas rígidos nos quais altas ordens de precisão temporal e estabilidade numérica são pré-requisitos fundamentais, tais como simulações envolvendo escoamentos turbulentos e estudos de problemas de instabilidade térmica e hidrodinâmica.

O trabalho de CHOI e MERKLE (1993) propôs um novo esquema de pré-condicionamento para escoamentos viscosos. O trabalho considerou como variáveis primitivas a pressão, as velocidades nas direções Cartesianas x e y , e a temperatura. Para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente, foram utilizados esquemas implícitos baseados em fatoração aproximada alternada ADI. O método de expansão de perturbação das equações de Navier-Stokes, usado com sucesso em MERKLE e CHOI (1987), foi aprimorado pela inclusão de um mecanismo de controle dos parâmetros relacionados aos fluxos invíscidos e viscosos. A matriz pré-condicionadora se tornou mais complexa do que a do trabalho de MERKLE e CHOI (1987), pois se realizou uma separação das contribuições invíscidas e viscosas. Uma constante β e o número de Mach foram usados como parâmetros escalonadores. Apesar da maior complexidade, o método se tornou robusto a elevados números de Reynolds e números de Mach bastante reduzidos.

O estudo de WEISS e SMITH (1995) apresentou uma metodologia de seleção dos parâmetros utilizados no cálculo da velocidade do som pré-condicionada com a finalidade de aumentar a taxa de convergência dos métodos baseados na massa específica “Density-Based”. Os escoamentos foram modelados pelas equações de Navier-Stokes. As discretizações foram feitas via técnica de volumes finitos. Utilizou-se um vetor de variáveis compreendendo pressão, velocidade e temperatura. Uma vez que o emprego de pré-condicionadores modifica o transiente das

soluções, o estudo aplicou a técnica DTS para recuperação do tempo físico. Foram simulados três problemas. O primeiro foi o escoamento bidimensional transônico através de uma turbina axial. Os resultados das simulações deste problema comprovaram o desempenho da metodologia de seleção de parâmetros, com aumento da taxa de convergência. Além disso, foi verificado que o uso de pré-condicionadores não prejudicou a precisão da solução. O segundo caso teste foi a convecção natural induzida por gravidade em uma tubulação horizontal. Os resultados obtidos nas simulações deste problema evidenciaram a importância do pré-condicionamento das equações para solução de escoamentos com baixo número de Mach. Por fim, simulou-se a geração transiente de vorticidade em um cilindro triangular com escoamento incompressível turbulento. A finalidade dessas últimas simulações foi demonstrar o uso da técnica DTS em conjunto com o esquema de pré-condicionamento das equações.

O trabalho de TURKEL et al. (1996) apresentou uma forma de minimizar o problema de singularidades em pontos de estagnação, calculando-se os parâmetros da matriz pré-condicionadora de forma adequada em função do número de Mach. Para marcha no pseudo-tempo até o regime permanente, foram empregados esquemas implícitos baseados em fatoração aproximada alternada ADI. Para discretização espacial, foram usadas aproximações centradas com dissipação artificial para estabilização e acoplamento das equações. Foi realizada uma análise do emprego da dissipação artificial nas formas conservativa e não conservativa. Simulou-se um escoamento bidimensional em um aerofólio. Os resultados comprovaram a eficiência da formulação apresentada para redução das dificuldades de simulação em pontos de estagnação.

VENKATESWARAN e MERKLE (1999) iniciou com uma discussão a respeito da convergência dos métodos de marcha no tempo. Para tanto, utilizou-se a análise de estabilidade de Von Neumann. Ao longo dos capítulos do livro, foram definidos diferentes parâmetros relacionados aos fluxos invíscidos e viscosos para controle da velocidade do som pré-condicionada, tanto para as equações de Euler quanto para as equações de Navier-Stokes. Utiliza-se um vetor de variáveis compreendendo pressão, velocidade e temperatura. No capítulo final, os autores apresentaram uma formulação de pré-condicionadores específica para escoamentos turbulentos.

1.4.2 DIFICULDADES DE CONVERGÊNCIA DOS MÉTODOS CLÁSSICOS

A metodologia de simulação computacional clássica baseada na massa específica “Density-Based” é uma das mais empregadas em escoamentos compressíveis com baixo número de Mach. Essa família de métodos utiliza esquemas de pré-condicionamento das equações governantes e de separação das contribuições estática e dinâmica da pressão do escoamento. Os trabalhos existentes na literatura mostram que o pré-condicionamento das equações consegue

significativa redução da rigidez numérica. Ao mesmo tempo, a separação das contribuições da pressão diminui a propagação de erros de arredondamento oriundos da derivada espacial da pressão. Entretanto, os métodos esses pré-condicionadores clássicos ainda apresentam dificuldades de convergência.

O trabalho de LEE e LEER (1993) apresenta algumas matrizes pré-condicionadoras, fazendo comparações com as matrizes apresentadas por TURKEL (1987). O estudo estabelece como objetivo a obtenção de matrizes pré-condicionadoras mais eficientes. Descreve que há um grande número de graus de liberdade no desenvolvimento de pré-condicionadores para as equações de Euler. Sinaliza que o princípio orientador para a obtenção de um pré-condicionador eficiente não deve ser apenas a minimização da disparidade entre os autovalores do sistema, mas também o desvio mínimo da ortogonalidade associada aos autovetores. Segundo o trabalho, alguns métodos pré-condicionadores conduzem a estruturas de autovetores menos ortogonais do que outros, e que a liberdade de mudança dessas estruturas é útil quando critérios adicionais devem ser atendidos pelo projeto do pré-condicionador.

O estudo de DARMOFAL e SCHMID (1996) salientou que os métodos pré-condicionadores das equações de Euler compressíveis somente foram desenvolvidos a partir de uma análise de autovalores. Entretanto, evidências numéricas indicavam que os autovetores também tinham influência na performance dos métodos pré-condicionadores, e por isso deveriam ser incluídos no desenvolvimento desses métodos. No trabalho é apresentada uma ferramenta matemática para análise de autovetores, baseada na análise de estabilidade hidrodinâmica. O estudo mostrou que a ortogonalidade dos autovetores influenciava no potencial de amplificações de perturbações no transiente inicial da solução. Além disso, esclarece que a não ortogonalidade dos autovetores causaria dificuldades de convergência em pontos de estagnação. O trabalho estabeleceu uma relação matemática entre a amplificação máxima de perturbações no transiente inicial e o número de condicionamento da matriz de autovetores. Observou-se ainda que diversos métodos pré-condicionadores existentes eram pouco ortogonais para baixos valores de Mach, tais como os apresentados por TURKEL (1987) e CHOI e MERKLE (1985, 1993). Uma outra questão levantada no trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996) era a respeito de um parâmetro arbitrário ϵ usado no cálculo da velocidade do som pré-condicionada em TURKEL (1987) e CHOI e MERKLE (1985, 1993). Segundo DARMOFAL e SCHMID (1996), as formulações genéricas para o parâmetro ϵ apresentadas nos referidos trabalhos buscavam minimizar os problemas de amplificações de perturbações no transiente inicial e de dificuldade de convergência em pontos de estagnação por meio do controle dos autovalores. Apesar das constatações de DARMOFAL e SCHMID (1996), não há método pré-condicionador que tenha deixado de focar nos autovalores, passando a levar em consideração a influência dos autovetores em seu

desenvolvimento. O trabalho sinalizou que autovetores devem ser selecionados de tal forma a minimizarem a não ortogonalidade para baixos valores de Mach. Além disso, os parâmetros da matriz pré-condicionadora Γ devem ser selecionados de tal forma que reduzam o número de condicionamento da matriz de autovetores.

O trabalho de SESTERHENN et al. (1999) investigou o problema da amplificação de erros presente nas simulações numéricas de escoamentos compressíveis com baixas velocidades. As discretizações foram feitas utilizando-se uma técnica explícita de volumes finitos. O estudo demonstrou como os erros de cancelamento associados às contribuições da pressão do escoamento eram gerados e amplificados. Além disso, alegou-se que os métodos pré-condicionadores até então desenvolvidos possuíam uma falha, pois os mesmos desconsideravam os erros de cancelamento associados à contribuição da energia cinética na energia total. O trabalho mostrou que a redução da propagação desses erros poderia se dar pela introdução de estados de referência conhecidos, calculando-se a solução somente para as flutuações restantes. O estudo apresentou um mecanismo de seleção dos estados de referência. Os resultados das simulações realizadas comprovaram a eficiência da metodologia de redução da amplificação de erros. Analisou-se baixos números de Mach, atingindo $M = 10^{-11}$.

Em LEE (2005) realizou-se uma investigação mais profunda das questões levantadas por SESTERHENN et al. (1999). O trabalho fez um estudo das taxas de convergência dos métodos pré-condicionadores das equações de Euler. Uma análise de perturbação foi realizada para pesquisar a relação existente entre taxa de convergência e número de Mach. O foco do trabalho era a influência da amplificação de erros na taxa de convergência, não se preocupando com a magnitude dos autovalores do sistema. As características de convergência foram bem explicitadas pela análise de perturbação. O estudo mostrou que a convergência dos métodos pré-condicionados é fortemente dependente das características da matriz pré-condicionadora Γ . O estudo descreveu ainda que, quando o número de Mach era reduzido para valores abaixo de $M = 10^{-6}$, a convergência das equações da continuidade e da quantidade de movimento eram menos afetadas do que a equação da energia. A análise de perturbações indicou que a magnitude da variação dos termos da equação da energia era muito maior do que das outras equações para baixos números de Mach.

O trabalho de LEE (2007) fez um estudo das taxas de convergência dos métodos pré-condicionadores das equações de Navier-Stokes. O trabalho de LEE (2007) seguiu a mesma linha de LEE (2005), investigando a relação existente entre taxa de convergência e número de Mach, com foco na influência da amplificação de erros. Identificou-se que o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ da matriz pré-condicionadora Γ era proporcional a $1/M^2$, sendo a principal fonte da amplificação de erros para baixos valores de Mach. Por isso, decidiu-se atribuir

valor zero para o termo em questão da matriz Γ . Os resultados das simulações realizadas no estudo apontaram para uma redução na amplificação de erros. Simulou-se o problema do escoamento viscoso ao redor de um cilindro até baixos números de Mach, atingindo $M = 10^{-9}$. Entretanto, a consideração feita atribuindo-se o valor zero para o termo da matriz Γ foi equivocada, uma vez que fez o método gerar soluções fisicamente incorretas. Apesar da inconsistência observada, o trabalho serviu para confirmar estudos anteriores, mostrando que os problemas da amplificação de erros e do ponto de estagnação estão relacionados com a magnitude do termo da equação da energia presente na matriz pré-condicionadora Γ .

Conforme foi visto nos trabalhos de LEE e LEER (1993), DARMOFAL e SCHMID (1996), SESTERHENN et al. (1999) e LEE (2005, 2007), os métodos pré-condicionadores clássicos ainda apresentam dificuldades de convergência relacionadas com a amplificação de erros. No que diz respeito ao controle de erro, esses métodos pré-condicionadores se limitaram às origens dos erros de arredondamento, não havendo preocupação com a amplificação destes erros no decorrer do processo iterativo.

Adicionalmente ao problema de amplificação de erros, os trabalhos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) mostram que a razão dos autovalores obtida por esses métodos após o pré-condicionamento é aproximadamente 2.6. Sendo assim, espera-se que, caso se consiga minimizar a razão dos autovalores (≈ 1), a rigidez numérica será minimizada.

1.5 OBJETIVOS DA TESE DE DOUTORADO

O objetivo científico deste trabalho de Tese é definir uma metodologia para desenvolvimento de pré-condicionadores, buscando aumentar a eficiência computacional dos métodos pré-condicionadores pertencentes à família “Density-Based”. Para tanto, serão propostas modificações nos esquemas clássicos de pré-condicionamento das equações. Esse objetivo foi motivado por dois fatores:

- as conclusões dos estudos de LEE e LEER (1993), DARMOFAL e SCHMID (1996), SESTERHENN et al. (1999) e LEE (2005, 2007) que apontam para o problema de amplificação de erros existente nos métodos pré-condicionadores clássicos;
- possibilidade de minimizar a razão dos autovalores obtida pelos pré-condicionadores clássicos (≈ 2.6), permitindo assim, a minimização da rigidez numérica.

O trabalho também possui o objetivo tecnológico de aplicar essa nova ferramenta computacional para simular problemas fluido-dinâmicos presentes em sistemas de defesa de interesse

do Exército Brasileiro (EB), reduzindo a dependência do EB aos programas comerciais.

2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

2.1 EQUAÇÕES DE GOVERNO COMPRESSÍVEIS

2.1.1 CASO BIDIMENSIONAL

Para um escoamento compressível, bidimensional e viscoso, as equações de Navier-Stokes na forma conservativa são expressas por:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = 0 \quad (2.1)$$

Os vetores \mathbf{Q} das variáveis conservativas, \mathbf{E}_i e \mathbf{F}_i dos fluxos não viscosos, \mathbf{E}_v e \mathbf{F}_v dos fluxos viscosos são definidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= (\rho, \rho u, \rho v, \rho E)^T \\ \mathbf{E}_i &= (\rho, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u)^T \\ \mathbf{F}_i &= (\rho, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v)^T \\ \mathbf{E}_v &= (0, \tau_{x,x}, \tau_{x,y}, u\tau_{x,x} + v\tau_{x,y} + \dot{q}_{x,e})^T \\ \mathbf{F}_v &= (0, \tau_{x,y}, \tau_{y,y}, u\tau_{x,y} + v\tau_{y,y} + \dot{q}_{y,e})^T \end{aligned} \quad (2.2)$$

sendo ρ a massa específica, u e v os componentes cartesianos da velocidade e p a pressão.

A energia interna total E é calculada em função da energia interna térmica e por:

$$E = e + (u^2 + v^2)/2. \quad (2.3)$$

Os tensores normais ($\tau_{x,x}$ e $\tau_{y,y}$), o tensor cisalhante ($\tau_{x,y}$) e os fluxos difusivos de energia ($\dot{q}_{x,e}$ e $\dot{q}_{y,e}$) são dados por:

$$\begin{aligned} \tau_{x,x} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{y,y} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{x,y} &= \tau_{y,x} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \dot{q}_{x,e} &= k \frac{\partial T}{\partial x} \\ \dot{q}_{y,e} &= k \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.4)$$

sendo μ a viscosidade dinâmica, k a condutividade térmica e T a temperatura.

Nas equações de governo (2.1), os fluxos não viscosos \mathbf{E}_i e \mathbf{F}_i estão associados às informações convectivas do escoamento, ao passo que os fluxos viscosos \mathbf{E}_v e \mathbf{F}_v se relacionam com as informações difusivas. As características de propagação das informações convectivas são fornecidas pelos autovalores das matrizes Jacobianas dos fluxos não viscosos $\mathbf{A} = \partial\mathbf{E}_i/\partial\mathbf{Q}$ e $\mathbf{B} = \partial\mathbf{F}_i/\partial\mathbf{Q}$. Estas matrizes são dados por:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \rho} - u^2 & 2u + \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} \\ -uv & v & u & 0 \\ u \frac{\partial p}{\partial \rho} - (\rho E + p) \frac{u}{\rho} & u \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} + \frac{\rho E + p}{\rho} & u \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & u \left(1 + \frac{\partial p}{\partial(\rho E)}\right) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \rho} - v^2 & \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & 2v + \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} \\ v \frac{\partial p}{\partial \rho} - (\rho E + p) \frac{v}{\rho} & v \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & v \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} + \frac{\rho E + p}{\rho} & v \left(1 + \frac{\partial p}{\partial(\rho E)}\right) \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

As derivadas da pressão em relação as variáveis dependentes conservativas são dadas por FEDKIW et al. (1997):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial \rho} &= (\gamma - 1) \left(\frac{u^2 + v^2}{2} - h + c_p T \right) \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} &= -(\gamma - 1)u \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} &= -(\gamma - 1)v \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} &= (\gamma - 1) \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde γ é a razão entre os calores específicos a pressão c_p e volume c_v constantes, $\gamma = c_p/c_v$.

2.1.2 CASO QUASE-UNIDIMENSIONAL NÃO VISCOSO

Escoamentos em tuberias de mísseis com formato do tipo bocal De Laval são considerados fenômenos puramente não viscosos em função dos elevados valores que a velocidade atinge. Esse e outros problemas bidimensionais não viscosos podem ser modelados pelas equações de Euler compressíveis quase-unidimensionais. Essas equações são aproximações de modelos bidimensionais, nos quais a variação da área da seção transversal $A(x)$ é pequena. A partir das equações de governo apresentadas em (2.1), a derivada em y do termo invíscido \mathbf{F}_i é substituída

por uma expressão calculada a partir do termo fonte de área \mathbf{H} e do fluxo invíscido \mathbf{E}_i na direção x , chegando a:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}_i}{\partial x} = \frac{1}{A(x)} \frac{\partial A(x)}{\partial x} (\mathbf{H} - \mathbf{E}_i) \quad (2.8)$$

sendo \mathbf{H} o termo fonte de variação de área dado por

$$\mathbf{H} = (0, p, 0)^T \quad (2.9)$$

Os vetores \mathbf{Q} das variáveis conservativas e \mathbf{E}_i dos fluxos invíscidos são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= (\rho, \rho u, \rho E)^T \\ \mathbf{E}_i &= (\rho, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u)^T \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.2 SEPARAÇÃO DA PRESSÃO

Além do problema de rigidez numérica, um segundo problema afeta a taxa de convergência das simulações computacionais de escoamentos compressíveis com baixas velocidades. Os erros de arredondamento no cálculo do gradiente espacial da pressão na equação da quantidade de movimento são amplificados. Isso ocorre em função da discrepância existente entre as contribuições da pressão, a hidrodinâmica p_h , proporcional a ρu^2 , e a termodinâmica p_T , proporcional a ρc^2 . Além disso, de acordo com VENKATESWARAN e MERKLE (1999), a derivada espacial da pressão é multiplicada por um fator da ordem de $1/M^2$, o qual atinge elevados valores quando Mach tende para zero.

Para minimizar este problema, as contribuições hidrodinâmica e termodinâmica da pressão são separadas de acordo com $p = p_T + p_h$, onde se assume que p_T seja constante no espaço, como por exemplo uma pressão atmosférica (MERKLE e CHOI, 1988; TURKEL et al., 1993; SESTERHENN et al., 1999). Com isso, o gradiente espacial da pressão na equação da quantidade de movimento é reescrito da seguinte forma:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p_T}{\partial x} + \frac{\partial p_h}{\partial x} \cong \frac{\partial p_h}{\partial x} \quad (2.11)$$

2.3 METODOLOGIA TRADICIONAL DE PRÉ-CONDICIONAMENTO

Os autovalores das matrizes Jacobianas **A** e **B** fornecem as velocidades de propagação das informações do escoamento nas direções x e y , como se segue:

$$\mathbf{A} \implies \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\} = \{u, u, u + c, u - c\} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{B} \implies \{\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \bar{\lambda}_3, \bar{\lambda}_4\} = \{v, v, v + c, v - c\}$$

sendo c a velocidade do som no escoamento.

Uma simples análise dos autovalores de **A** e **B** evidencia o problema de rigidez numérica presente nas simulações de escoamentos compressíveis com baixas velocidades. Somente os autovalores da matriz **A** associados à propagação das informações na direção x serão considerados. As conclusões obtidas podem ser estendidas de maneira análoga para a direção y . Para baixos valores de Mach ($u \ll c$), os autovalores acústicos têm magnitude muito maior do que os autovalores convectivos. O passo no tempo fica limitado pelos autovalores acústicos, uma vez que o mesmo é calculado em função do autovalor de maior magnitude, como se segue:

$$\Delta t = \min \left\{ \frac{CFL \cdot \Delta x}{|\lambda_1|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|\lambda_2|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|\lambda_3|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|\lambda_4|} \right\} \quad (2.13)$$

$$\Delta t = \min \left\{ \frac{CFL \cdot \Delta x}{|u|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|u|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|u + c|}, \frac{CFL \cdot \Delta x}{|u - c|} \right\}$$

onde Δx é um comprimento característico, geralmente o espaçamento da malha. O número de Courant-Friedrich-Lewy (CFL) relaciona as velocidades físicas com a velocidade numérica ($\Delta x_c / \Delta t$). O CFL é usado para definir o critério de estabilidade numérica de um método de marcha no tempo, indicando o quanto a velocidade numérica pode crescer em relação às velocidades físicas sem provocar instabilidade.

Dessa forma, mesmo em problemas nos quais as informações acústicas são irrelevantes, não se consegue realizar simulações usando a velocidade convectiva como referência para o passo no tempo, ficando preso aos baixos valores do passo no tempo acústico.

O problema de rigidez numérica é solucionado por meio do pré-condicionamento das equações governantes. Para que o emprego dessa técnica de aceleração de convergência possibilite a separação das contribuições da pressão, as equações de governo devem estar na forma primitiva. Assim, as equações bidimensionais (2.1) passam a ser escritas como:

$$\mathbf{T} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = 0 \quad (2.14)$$

sendo o conjunto de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$ dado pelo vetor transposto abaixo

$$\hat{\mathbf{Q}} = (p_h, u, v, T)^T \quad (2.15)$$

Apesar das propriedades pressão e velocidade freqüentemente estarem presentes no vetor de variáveis $\hat{\mathbf{Q}}$, a temperatura pode ser substituída por entalpia (SHUEN et al., 1993) ou entropia (TURKEL, 1987), dentre outros.

A matriz Jacobiana \mathbf{T} de mudança de variáveis conservativas para primitivas expressa por

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial p} & 0 & 0 & \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ u \frac{\partial \rho}{\partial p} & \rho & 0 & u \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ v \frac{\partial \rho}{\partial p} & 0 & \rho & v \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ H \frac{\partial \rho}{\partial p} + \rho \frac{\partial h}{\partial p} - 1 & \rho u & \rho v & H \frac{\partial \rho}{\partial T} + \rho \frac{\partial h}{\partial T} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

sendo $h = e + p/\rho$ a entalpia por unidade de massa e $H = h + (u^2 + v^2)/2$ a entalpia total por unidade de massa.

As dependências da massa específica e da entalpia em relação à pressão e à temperatura são determinadas a partir da equação de estado para gases perfeitos mostrada abaixo:

$$p = \rho R T \quad \text{e} \quad h = h_f^0 + \int_{T_0}^T c_p(s) ds \quad (2.17)$$

onde T_0 é uma temperatura de referência, R é a constante específica dos gases e h_f^0 é o calor de formação por unidade de massa.

A equação de estado (2.17) nos leva às seguintes relações (MERKLE e CHOI, 1987):

$$\frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{1}{RT} \quad , \quad \frac{\partial \rho}{\partial T} = -\frac{\rho}{T} \quad , \quad \frac{\partial h}{\partial p} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial h}{\partial T} = c_p \quad (2.18)$$

O pré-condicionamento das equações de governo bidimensionais (2.14) é feito substituindo-se a matriz \mathbf{T} por uma matriz pré-condicionadora $\mathbf{\Gamma}$, chegando a:

$$\mathbf{\Gamma} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = 0 \quad (2.19)$$

O pré-condicionamento altera a evolução transiente do escoamento. Com isso, o tempo físico t é perdido e a solução é obtida em um pseudo-tempo τ . Analisando as equações de governo bidimensionais não pré-condicionadas (2.1) e as equações bidimensionais pré-condicionadas (2.19) verifica-se que a solução de regime permanente do tempo físico $t \rightarrow \infty$ é recuperada no regime permanente do pseudo-tempo $\tau \rightarrow \infty$.

A matriz pré-condicionadora $\mathbf{\Gamma}$ é dada por:

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & 0 & \rho_T \\ u \rho_p & \rho & 0 & u \rho_T \\ v \rho_p & 0 & \rho & v \rho_T \\ H \rho_p - (1 - \rho h_p) & \rho u & \rho v & H \rho_T + \rho h_T \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Para o caso quase-unidimensional não viscoso, as equações de governo pré-condicionadas são dadas por:

$$\Gamma \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \frac{\partial \mathbf{E}_i}{\partial x} = \frac{1}{A(x)} \frac{\partial A(x)}{\partial x} (\mathbf{H} - \mathbf{E}_i) \quad (2.21)$$

O conjunto de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$ e a matriz pré-condicionadora Γ são definidas para o caso quase-unidimensional da seguinte maneira:

$$\hat{\mathbf{Q}} = (p, u, T)^T \quad (2.22)$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & \rho_T \\ u\rho_p & \rho & u\rho_T \\ H\rho_p - (1 - \rho h_p) & \rho u & H\rho_T + \rho h_T \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

2.3.1 PARÂMETROS DA MATRIZ PRÉ-CONDICIONADORA

A dependência da massa específica em relação à temperatura ρ_T é obtida por meio da seguinte expressão:

$$\rho_T = \delta \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad (2.24)$$

A dependência da massa específica em relação à pressão ρ_p é dada por:

$$\rho_p = \frac{1}{V_p^2} - \rho_T (1 - \rho h_p) / (\rho h_T) \quad (2.25)$$

A expressão de ρ_p é proveniente da relação (2.26) para um fluido de equação de estado arbitrária, como se segue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{1}{c^2} - \frac{\partial \rho}{\partial T} \left(1 - \rho \frac{\partial h}{\partial p} \right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} \right) \quad (2.26)$$

De acordo com TURKEL (1987), para que ocorra a repetição dos autovalores convectivos do sistema pré-condicionado, ou seja, os autovalores de $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{A}}$ e $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{B}}$, mantendo intacta a natureza matemática do sistema não pré-condicionado com matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B} , a dependência da entalpia em relação à temperatura h_T deve ser imposta da seguinte forma:

$$h_T = \frac{\partial h}{\partial T} \quad (2.27)$$

A maioria dos métodos pré-condicionadores clássicos TURKEL (1987); WEISS e SMITH (1995); VENKATESWARAN e MERKLE (1999) calculam a dependência da entalpia em relação à pressão h_p da seguinte forma:

$$h_p = \frac{\partial h}{\partial p} \quad (2.28)$$

A velocidade do som pré-condicionada V_p , cuja fórmula será derivada a seguir, e o parâmetro δ variam em função do método de pré-condicionamento adotado. Tomando-se $\delta = 0$, temos o pré-condicionamento de VENKATESWARAN e MERKLE (1999). Para $\delta = 1$, temos o pré-condicionamento de WEISS e SMITH (1995).

Após o pré-condicionamento das equações de governo bidimensionais (2.19), as velocidades de propagação das informações do escoamento nas direções x e y passam a ser fornecidas pelos autovalores das matrizes $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{A}}$ e $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{B}}$, onde $\hat{\mathbf{A}} = \partial\mathbf{E}_i/\partial\hat{\mathbf{Q}}$ e $\hat{\mathbf{B}} = \partial\mathbf{F}_i/\partial\hat{\mathbf{Q}}$. As novas matrizes Jacobianas dos fluxos invíscidos são dados por:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} u \frac{\partial \rho}{\partial p} & \rho & 0 & u \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ 1 + u^2 \frac{\partial \rho}{\partial p} & 2\rho u & 0 & u^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ uv \frac{\partial \rho}{\partial p} & \rho v & \rho u & uv \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ u \frac{\partial(\rho H)}{\partial p} & \rho(H + u^2) & \rho uv & u \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} v \frac{\partial \rho}{\partial p} & \rho & 0 & v \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ uv \frac{\partial \rho}{\partial p} & \rho v & \rho u & uv \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ 1 + v^2 \frac{\partial \rho}{\partial p} & 2\rho v & 0 & v^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \\ v \frac{\partial(\rho H)}{\partial p} & \rho uv & \rho(H + v^2) & v \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

onde

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial p} = H \frac{\partial \rho}{\partial p} + \rho \frac{\partial h}{\partial p}, \quad \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} = H \frac{\partial \rho}{\partial T} + \rho \frac{\partial h}{\partial T}. \quad (2.31)$$

Os autovalores acústicos do sistema pré-condicionado assumem a forma:

$$u \pm c \implies \frac{u}{2} \left(1 + \frac{V_p^2}{c^2} \right) \pm \sqrt{V_p^2 + \left(\frac{u}{2} \left(1 - \frac{V_p^2}{c^2} \right) \right)^2} \quad (2.32)$$

$$v \pm c \implies \frac{v}{2} \left(1 + \frac{V_p^2}{c^2} \right) \pm \sqrt{V_p^2 + \left(\frac{v}{2} \left(1 - \frac{V_p^2}{c^2} \right) \right)^2} \quad (2.33)$$

A velocidade do som pré-condicionada V_p é selecionada de tal forma a re-escalonar os autovalores das matrizes Jacobianas (2.5) e (2.6), fazendo com que os novos autovalores acústicos (2.32) e (2.33) sejam da mesma ordem de grandeza dos autovalores convectivos.

Para TURKEL (1987), a velocidade do som pré-condicionada é expressa por:

$$V_p = \min\{\sqrt{u^2 + v^2}, c\} \quad (2.34)$$

Para evitar problemas em situações que a velocidade do escoamento fica muito reduzida, TURKEL (1987) estabeleceu um chaveamento com um parâmetro arbitrário ϵ . Assim, a velocidade do som pré-condicionada passou a ser obtida da seguinte maneira:

$$V_p = \min\{\max\{\sqrt{u^2 + v^2}, \epsilon\}, c\} \quad (2.35)$$

O trabalho de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) definiu com mais detalhes as características do parâmetro ϵ . Inicialmente definiu-se a contribuição invíscida da velocidade do som pré-condicionada da seguinte forma:

$$V_{invi} = \sqrt{u^2 + v^2} \quad (2.36)$$

Pontos de estagnação no escoamento podem causar problemas ao esquema de pré-condicionamento proposto, uma vez que as magnitudes das velocidades do escoamento se aproximam de zero. Por esta razão, em VENKATESWARAN e MERKLE (1999) definiu-se mais uma contribuição da velocidade do som pré-condicionada, dada por:

$$V_{dinam} = \sqrt{\frac{\Delta p}{\rho}} \quad (2.37)$$

onde Δp é a variação de pressão em dois pontos consecutivos da malha espacial.

De acordo com VENKATESWARAN e MERKLE (1999), a expressão de V_p ainda sofre uma modificação por conta das escalas viscosas, como se segue:

$$V_{visco}^2 = \max\left\{\frac{\alpha(\alpha - 1)}{(\alpha - 1 + \frac{c}{u^2})}c^2, \frac{\beta(\beta - 1)}{(\beta - 1 + \frac{c}{v^2})}c^2\right\} \quad (2.38)$$

sendo os parâmetros α e β dados por

$$\alpha = \frac{CFL}{VNN} \frac{AR^2}{Re_x} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{CFL}{VNN} \frac{1}{AR^2 Re_y} \quad (2.39)$$

com

$$Re_x = \frac{u\Delta x}{\mu}, \quad Re_y = \frac{v\Delta y}{\mu} \quad \text{e} \quad AR = \frac{\Delta x}{\Delta y} \quad (2.40)$$

onde Δx e Δy são comprimentos característicos nas direções x e y , μ é a viscosidade cinemática e VNN é o número de Von Neumann.

Por fim, chega-se à expressão de V_p utilizada por VENKATESWARAN e MERKLE (1999) sendo:

$$V_p = \min\{\max\{V_{invi}, V_{dinam}, V_{visco}\}, c\} \quad (2.41)$$

ou ainda, utilizando-se o parâmetro ϵ

$$V_p = \min\{\max\{V_{invi}, \epsilon\}, c\} \quad (2.42)$$

onde

$$\epsilon = \max\{V_{dinam}, V_{visco}\} \quad (2.43)$$

As formulações de ϵ apresentadas nos trabalhos de TURKEL (1987) e CHOI e MERKLE (1985, 1993) buscam minimizar, por meio dos autovalores do sistema, os já conhecidos problemas de amplificações de perturbações no transiente inicial e de dificuldade de convergência em pontos de estagnação (DARMOFAL e SCHMID, 1996).

Analisando-se a expressão obtida para a velocidade do som pré-condicionada (2.41), verifica-se que, quando o sistema pré-condicionado está sujeito à velocidades supersônicas, o chaveamento existente em faz com que $V_p = c$, recuperando-se o sistema original com os autovalores apresentados em (2.12).

2.4 NOVA METODOLOGIA DE PRÉ-CONDICIONAMENTO

Em função das constatações de que é possível minimizar a razão de autovalores dos pré-condicionadores clássicos (≈ 2.6), adicionando-se as conclusões dos estudos de LEE e LEER (1993), DARMOFAL e SCHMID (1996), SESTERHENN et al. (1999) e LEE (2005, 2007) quanto ao problema de amplificação de erros desses métodos pré-condicionadores, o objetivo científico deste trabalho de Tese é definir uma metodologia para desenvolvimento de pré-condicionadores, buscando um aumento da eficiência computacional. Para tanto, serão propostas modificações nos esquemas clássicos de pré-condicionamento das equações.

A filosofia da nova metodologia de simulação computacional é baseada na seleção ótima de parâmetros livres (h_p , V_p e δ) da matriz pré-condicionadora Γ , em cada ponto da malha espacial, de maneira a satisfazer critérios de desempenho definidos com o objetivo de minimizar a razão de autovalores e a amplificação de erros.

Para a definição dos critérios de desempenho, nas seções subsequentes, são realizadas as seguintes análises:

- análise de rigidez numérica;
- análise numérica da amplificação de erros;

- análise física da amplificação de erros.

2.4.1 ANÁLISE DE RIGIDEZ NUMÉRICA

Para a realização da análise de rigidez numérica, somente serão considerados os autovalores associados às velocidades de propagação das informações de um escoamento unidimensional. As conclusões obtidas podem ser extendidas de maneira análoga para escoamentos bidimensionais ou tridimensionais.

A partir da matriz pré-condicionadora Γ definida em (2.20) e da matriz Jacobiana $\hat{\mathbf{A}}$ apresentada em (2.29), os autovalores de $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{A}}$ podem ser escritos da seguinte maneira:

$$\hat{\lambda}_1 = u \quad , \quad \hat{\lambda}_2 = \hat{C}_1 - \hat{C}_2 \quad \text{e} \quad \hat{\lambda}_3 = \hat{C}_1 + \hat{C}_2 \quad (2.44)$$

onde coeficientes adicionais \hat{C}_1 e \hat{C}_2 são dados por

$$\hat{C}_1 = \frac{u}{2} \left\{ 1 + \left(\frac{\rho}{c^2} \frac{\partial h}{\partial T} + \rho \left(\rho_T - \frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \left(h_p - \frac{\partial h}{\partial p} \right) \right) / \left(\rho_T (1 - \rho h_p) + \rho \rho_P \frac{\partial h}{\partial T} \right) \right\} \quad (2.45)$$

$$\hat{C}_2 = \sqrt{\hat{C}_1^2 + \rho \frac{\partial h}{\partial T} \left(1 - \frac{u^2}{c^2} \right) / \left(\rho_T (1 - \rho h_p) + \rho \rho_P \frac{\partial h}{\partial T} \right)} \quad (2.46)$$

É fácil verificar que $\hat{C}_1 = u$ e $\hat{C}_2 = c$ se o pré-condicionamento for removido, ou seja, $\Gamma = \mathbf{T}$. Além disso, uma inspeção dessas expressões revela que $\hat{C}_1 \simeq u/2$ e $\hat{C}_2 \gtrsim \hat{C}_1$ quando o pré-condicionador é aplicado. Isto significa que $\hat{\lambda}_2 < \hat{\lambda}_1 < \hat{\lambda}_3$ quando a velocidade é positiva, mas $\hat{\lambda}_3 < \hat{\lambda}_1 < \hat{\lambda}_2$ caso não seja.

Como a rigidez numérica está associada com a razão entre os autovalores, pode-se definir rigorosamente a rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ como se segue:

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{cases} |\hat{\lambda}_3| / |\hat{\lambda}_2| & ; \quad u > 0 \\ |\hat{\lambda}_2| / |\hat{\lambda}_3| & ; \quad u < 0 \end{cases} \quad , \quad (2.47)$$

o que nos leva ao primeiro critério de desempenho para a seleção ótima dos parâmetros livres (h_p , V_p e δ) da matriz pré-condicionadora Γ . A rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ deve ser minimizada tal forma que:

$$\boxed{\hat{\mathbf{R}} \rightarrow 1} \quad (2.48)$$

Pode-se estimar a rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ obtida pelos métodos pré-condicionadores clássicos (VENKATESWARAN e MERKLE, 1999) para baixo número de Mach. Para isso, simplifica-se os coeficientes apresentados em (2.45) e (2.46) da seguinte forma:

$$\hat{C}_1 = \frac{u}{2} \left(1 + \frac{V_p^2}{u^2} \right) \quad (2.49)$$

$$\hat{C}_2 = \sqrt{\hat{C}_1^2 + V_p^2 \left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right)} \quad (2.50)$$

e assumindo-se que $V_p = u$ (VENKATESWARAN e MERKLE, 1999), a rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ é calculada sendo

$$\hat{\mathbf{R}} \simeq \frac{\sqrt{5} + 1}{\sqrt{5} - 1} \simeq 2.618 + O(M^2) \quad (2.51)$$

2.4.2 ANÁLISE NUMÉRICA DA AMPLIFICAÇÃO DE ERROS

Como já foi visto, no que diz respeito ao controle de erro, os métodos pré-condicionadores clássicos se limitaram às origens dos erros de arredondamento. Entretanto, este trabalho de Tese emprega uma abordagem diferente, na qual devemos nos preocupar também com a amplificação de erros no decorrer do processo iterativo.

A análise numérica clássica de STOER e BULIRSCH (1993) pode ser usada para esclarecer o papel desempenhado pela matriz pré-condicionadora na amplificação de erros. Para isso, inicialmente as equações de governo pré-condicionadas (2.19) devem ser reescritas da seguinte maneira:

$$\Gamma \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) - \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) \quad (2.52)$$

O resíduo explícito \mathbf{R} do sistema de equações é dado por:

$$\mathbf{R} = -\frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) - \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) \quad (2.53)$$

o que torna possível representar o sistema de equações (2.52) em função do resíduo explícito da seguinte forma

$$\Gamma \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} = \mathbf{R} \quad (2.54)$$

Em seguida, chega-se às equações de governo na forma linearizada, discreta e residual, como se segue:

$$\Gamma_0 \Delta \hat{\mathbf{Q}} = -\Delta \tau \mathbf{R}_0 \quad (2.55)$$

onde $\Delta \hat{\mathbf{Q}}$ é o incremento adicionado ao estado anterior da solução $\hat{\mathbf{Q}}_0$, após um passo no pseudo-tempo $\Delta \tau$, e \mathbf{R}_0 é o resíduo explícito no mesmo instante do pseudo-tempo.

Considerando-se o erro $\delta(\Delta \hat{\mathbf{Q}})$ gerado no cálculo de $\Delta \hat{\mathbf{Q}}$ devido ao erro $\delta(\mathbf{R}_0)$ existente em \mathbf{R}_0 , as equações (2.55) podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\Gamma_0 (\Delta \hat{\mathbf{Q}} + \delta(\Delta \hat{\mathbf{Q}})) = -\Delta \tau (\mathbf{R}_0 + \delta(\mathbf{R}_0)) \quad (2.56)$$

Subtraindo-se as equações (2.55) das equações (2.56), verifica-se que o erro $\delta(\Delta \hat{\mathbf{Q}})$ pode ser expresso por:

$$\delta(\Delta \hat{\mathbf{Q}}) = -\Delta \tau \Gamma_0^{-1} \delta(\mathbf{R}_0) \quad (2.57)$$

assumindo que Γ_0 possa ser invertida.

Aplicando-se uma norma p arbitrária $L_p = \|\cdot\|_p$ às equações (2.57), pode-se obter uma expressão para $\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p$ da seguinte forma:

$$\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p = \Delta\tau \|\Gamma_0^{-1} \delta(\mathbf{R}_0)\|_p \quad (2.58)$$

Como a norma de um produto $\|AB\|_p$ é menor ou igual ao produto das normas dos elementos $\|A\|_p \|B\|_p$, chegamos a:

$$\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p \leq \Delta\tau \|\Gamma_0^{-1}\|_p \|\delta(\mathbf{R}_0)\|_p \quad (2.59)$$

Aplicando-se uma norma p arbitrária $L_p = \|\cdot\|_p$ às equações (2.55), pode-se obter uma expressão para $\|\Gamma_0 \Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p$ da seguinte forma:

$$\|\Gamma_0 \Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p = \Delta\tau \|\mathbf{R}_0\|_p \quad (2.60)$$

Pode-se relacionar o erro relativo da solução com o erro relativo do resíduo. Para isso, inicialmente deve-se dividir o resultado obtido em (2.59) pelas equações (2.60), como se segue:

$$\frac{\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p}{\|\Gamma_0 \Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p} \leq \frac{\Delta\tau \|\Gamma_0^{-1}\|_p \|\delta(\mathbf{R}_0)\|_p}{\Delta\tau \|\mathbf{R}_0\|_p} \quad (2.61)$$

Novamente considerando que a norma de um produto $\|AB\|_p$ é menor ou igual ao produto das normas dos elementos $\|A\|_p \|B\|_p$, chegamos a:

$$\frac{\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p}{\|\Gamma_0\|_p \|\Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p} \leq \frac{\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p}{\|\Gamma_0 \Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p} \leq \frac{\Delta\tau \|\Gamma_0^{-1}\|_p \|\delta(\mathbf{R}_0)\|_p}{\Delta\tau \|\mathbf{R}_0\|_p} \quad (2.62)$$

obtendo, após uma manipulação algébrica, o seguinte resultado

$$\frac{\|\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})\|_p}{\|\Delta\hat{\mathbf{Q}}\|_p} \leq \|\Gamma_0\|_p \|\Gamma_0^{-1}\|_p \frac{\|\delta(\mathbf{R}_0)\|_p}{\|\mathbf{R}_0\|_p} \quad (2.63)$$

Analisando a equação (2.63), constata-se que o fator que relaciona o erro relativo da solução com o erro relativo do resíduo é o número de condicionamento da matriz Γ , como se segue:

$$\mathcal{K}_p(\Gamma_0) = \|\Gamma_0\|_p \|\Gamma_0^{-1}\|_p \quad (2.64)$$

Repetindo o procedimento realizado para obtenção das equações de governo na forma apresentada em (2.56), porém considerando agora o erro $\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})$ gerado no cálculo de $\Delta\hat{\mathbf{Q}}$ devido ao erro $\delta(\Gamma_0)$ existente em Γ_0 . Com isso, as equações (2.55) podem ser reescritas da seguinte forma:

$$(\Gamma_0 + \delta(\Gamma_0))(\Delta\hat{\mathbf{Q}} + \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})) = -\Delta\tau \mathbf{R}_0 \quad (2.65)$$

Pode-se relacionar o erro relativo da solução com o erro relativo da matriz pré-condicionadora. Para isso, deve-se subtrair as equações (2.55) das equações (2.65), como se segue:

$$(\mathbf{\Gamma}_0 + \delta(\mathbf{\Gamma}_0))(\Delta\hat{\mathbf{Q}} + \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})) - \mathbf{\Gamma}_0 \Delta\hat{\mathbf{Q}} = 0 \quad (2.66)$$

chegando a

$$\mathbf{\Gamma}_0 \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) + \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \Delta\hat{\mathbf{Q}} + \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) = 0 \quad (2.67)$$

Assumindo que o erro de uma variável é muito menor que esta variável, pode-se considerar que o produto dos erros $\delta(\mathbf{\Gamma}_0) \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}})$ tenha valor desprezível. Sendo assim, as equações (2.67) tomam a seguinte forma:

$$\mathbf{\Gamma}_0 \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) + \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \Delta\hat{\mathbf{Q}} = 0 \quad (2.68)$$

que, após manipulações algébricas, pode ser escrita como

$$\delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) = -\mathbf{\Gamma}_0^{-1} \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \Delta\hat{\mathbf{Q}} \quad (2.69)$$

Aplicando-se uma norma p arbitrária $L_p = \| \|_p$ às equações (2.69) chega-se a:

$$\| \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) \|_p = \| \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \Delta\hat{\mathbf{Q}} \|_p \quad (2.70)$$

Considerando-se que a norma de um produto $\| A B C \|_p$ é menor ou igual ao produto das normas dos elementos $\| A \|_p \| B \|_p \| C \|_p$, as equações (2.70) tomam a seguinte forma:

$$\| \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) \|_p \leq \| \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \|_p \| \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \|_p \| \Delta\hat{\mathbf{Q}} \|_p \quad (2.71)$$

que, após manipulações algébricas, pode ser escrita como

$$\frac{\| \delta(\Delta\hat{\mathbf{Q}}) \|_p}{\| \Delta\hat{\mathbf{Q}} \|_p} \leq \| \mathbf{\Gamma}_0 \|_p \| \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \|_p \frac{\| \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \|_p}{\| \mathbf{\Gamma}_0 \|_p} \quad (2.72)$$

se e somente se a relação

$$0 \leq \| \mathbf{\Gamma}_0 \|_p \| \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \|_p \frac{\| \delta(\mathbf{\Gamma}_0) \|_p}{\| \mathbf{\Gamma}_0 \|_p} < 1 \quad (2.73)$$

for satisfeita.

Analisando a equação (2.72), constata-se que o número de condicionamento da matriz $\mathbf{\Gamma}$ também é o fator que relaciona o erro relativo da solução com o erro relativo da matriz pré-condicionadora. Sendo assim, pode-se afirmar que o número de condicionamento da matriz $\mathbf{\Gamma}$ é uma medida de sensibilidade do sistema à amplificação de erros durante o processo iterativo.

Dessa forma, a sensibilidade assintótica $\hat{\mathbf{S}}_a$ do sistema à amplificação de erros pode ser rigorosamente definida por:

$$\hat{\mathbf{S}}_a = \mathcal{K}_p(\mathbf{\Gamma}_0) = \| \mathbf{\Gamma}_0 \|_p \| \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \|_p \quad (2.74)$$

Chega-se ao segundo critério de desempenho para a seleção ótima dos parâmetros livres (h_p , V_p e δ) da matriz pré-condicionadora Γ . A sensibilidade assintótica do sistema à perturbações \hat{S}_a deve ser minimizada de tal forma que:

$$\boxed{\hat{S}_a \rightarrow \mathbf{1}} \quad (2.75)$$

A formulação apresentada nesta seção foi desenvolvida para a hipótese de emprego de métodos de marcha no pseudo-tempo explícitos, uma vez que o uso desses métodos de marcha faz com que o sistema de equações algébricas resultante seja do tipo bloco diagonal. Verifica-se que os elementos da diagonal principal são originados exclusivamente pelas matrizes pré-condicionadoras. Utilizando-se métodos de marcha implícitos, o sistema algébrico resultante passa a ser tridiagonal. Porém, frequentemente constata-se que esses sistemas tridiagonais possuem dominância diagonal, tornando a formulação desta seção também válida para métodos implícitos com esta propriedade.

2.4.3 ANÁLISE FÍSICA DA AMPLIFICAÇÃO DE ERROS

As ferramentas matemáticas tradicionalmente empregadas em análise de estabilidade hidrodinâmica clássica têm sido empregadas em análise de estabilidade numérica de problemas de valor inicial, proporcionando melhoria nos limites superiores impostos ao CFL (VANDORSSELAER et al., 1993), uma vez que são baseadas nos autovalores do sistema. Uma variante desta teoria, baseada em uma análise de estabilidade algébrica, foi utilizada para a análise de estabilidade de esquemas pré-condicionadores (MOINIER e GILES, 2002). Uma nova análise de estabilidade, aplicada no contexto de pré-condicionadores, foi abordada no trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996). Este estudo mostrou que a ortogonalidade dos autovetores influenciava no potencial de amplificações de perturbações durante o transiente inicial do processo iterativo de obtenção da solução.

Apesar dos avanços feitos por DARMOFAL e SCHMID (1996), constata-se que nenhum estudo levou em consideração a influência dos autovetores no desenvolvimento de matrizes pré-condicionadoras adequadas para baixo número de Mach. O próprio estudo de DARMOFAL e SCHMID (1996) apenas tenta explicar a falta de robustez destes métodos, justificando quantitativamente a necessidade do chaveamento arbitrário da velocidade do som pré-condicionada com o parâmetro ϵ utilizado na literatura pelos pré-condicionadores clássicos.

Para se verificar como os autovetores podem ser inseridos no desenvolvimento de métodos pré-condicionadores, pode-se aplicar a transformada de Fourier nas equações de governo pré-condicionadas. Para facilitar a análise, o regime é considerado unidimensional e invíscido. As

equações pré-condicionadas (2.21) tomam a forma:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \hat{\mathbf{M}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial x} = 0 \quad (2.76)$$

sendo

$$\hat{\mathbf{M}} = \Gamma^{-1} \hat{\mathbf{A}} \quad (2.77)$$

obtendo, após o uso da transformada de Fourier,

$$\frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\tau} + k \hat{\mathbf{M}} \hat{\mathbf{q}} = 0 \quad (2.78)$$

onde k é o número de onda e $\hat{\mathbf{q}}$ é a transformada de Fourier do vetor de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$ definido em (2.22).

A solução das equações (2.78) pode ser escrita usando-se a matriz exponencial de GREENBERG (1998) da seguinte maneira:

$$\hat{\mathbf{q}}(\tau) = \hat{\mathbf{q}}_0 \exp[-k \hat{\mathbf{M}}_0 \tau] \quad (2.79)$$

onde $\hat{\mathbf{q}}_0$ é a transformada de Fourier do estado de referência $\hat{\mathbf{Q}}_0$, também usado para gerar a matriz linearizada $\hat{\mathbf{M}}_0$ e, ainda, como condição inicial para o próximo passo no pseudo-tempo.

Conforme descrito no estudo de DARMOFAL e SCHMID (1996), a amplificação máxima da solução $G(\tau)$, para um determinado instante do pseudo-tempo, pode ser expressa pela norma de uma matriz exponencial, como se segue:

$$G(\tau) = \|\exp[-k \hat{\mathbf{M}}_0 \tau]\|_p \quad (2.80)$$

com

$$\hat{\mathbf{M}}_0 = \hat{\mathbf{R}}_0 \hat{\mathbf{\Lambda}}_0 \hat{\mathbf{R}}_0^{-1} \quad (2.81)$$

chegando a

$$G(\tau) = \|\hat{\mathbf{R}}_0 \exp[-k \hat{\mathbf{\Lambda}}_0 \tau] \hat{\mathbf{R}}_0^{-1}\|_p \quad (2.82)$$

onde $\hat{\mathbf{R}}_0$ é a matriz de autovetores a direita e $\hat{\mathbf{\Lambda}}_0$ é a matriz diagonal de autovalores, com elementos não nulos fornecidos em (2.44), os quais são avaliados e normalizados por $\hat{\mathbf{q}}_0$.

Aplicando-se uma norma p arbitrária $L_p = \|\|\|_p$ às equações (2.82) tem-se que:

$$G(\tau) \leq \|\hat{\mathbf{R}}_0\|_p \|\hat{\mathbf{R}}_0^{-1}\|_p \|\exp[-k \hat{\mathbf{\Lambda}}_0 \tau]\|_p \quad (2.83)$$

O número de condicionamento da matriz de autovetores $\mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}_0)$ pode ser obtido aplicando-se uma norma p arbitrária $L_p = \|\|\|_p$ em $\hat{\mathbf{R}}_0$ da seguinte maneira:

$$\mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}_0) = \|\hat{\mathbf{R}}_0\|_p \|\hat{\mathbf{R}}_0^{-1}\|_p \quad (2.84)$$

A partir das equações (2.83) e (2.84), pode-se conectar a amplificação máxima da solução $G(\tau)$ com o número de condicionamento da matriz de autovetores $\mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}_0)$, por:

$$G(\tau) \leq \mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}_0) \|\exp[-k \hat{\mathbf{\Lambda}}_0 \tau]\|_p \quad (2.85)$$

Segundo DARMOFAL e SCHMID (1996), a amplificação máxima da solução pode ser generalizada, para todos os instantes τ do pseudo-tempo considerados no transitório inicial do processo iterativo de obtenção da solução, da seguinte forma:

$$\mathbf{G}_{max} \equiv \sup[G(\tau)] \quad (2.86)$$

Ainda de acordo com DARMOFAL e SCHMID (1996), a amplificação máxima generalizada da solução \mathbf{G}_{max} pode ser limitada por:

$$1 \leq \mathbf{G}_{max} \leq \mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}) \quad (2.87)$$

Analisando a equação (2.87), constata-se que o número de condicionamento da matriz de autovetores dado por

$$\mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}) = \|\hat{\mathbf{R}}\|_p \|\hat{\mathbf{R}}^{-1}\|_p \quad (2.88)$$

pode ser encarado como um limite superior da amplificação máxima generalizada da solução \mathbf{G}_{max} . Sendo assim, pode-se afirmar que o número de condicionamento da matriz de autovetores é uma medida de sensibilidade do sistema à amplificação de erros durante o transitório inicial do processo iterativo de obtenção da solução.

Dessa forma, a sensibilidade transitória (\hat{S}_t) do sistema à amplificação de erros pode ser rigorosamente definida por:

$$\hat{S}_t = \mathcal{K}_p(\hat{\mathbf{R}}) \quad (2.89)$$

A partir da expressão (2.89), chega-se ao terceiro critério de desempenho para a seleção ótima dos parâmetros livres (h_p , V_p e δ) da matriz pré-condicionadora $\mathbf{\Gamma}$. A sensibilidade transitória do sistema à perturbações \hat{S}_t deve ser minimizada de tal forma que:

$$\boxed{\hat{S}_t \rightarrow 1} \quad (2.90)$$

3 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

3.1 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL

Em computação científica, a verificação de um código tem por objetivo assegurar que este represente fielmente o modelo matemático proposto. A verificação é uma etapa fundamental durante o desenvolvimento de qualquer código computacional. A precisão do resultado numérico obtido durante a simulação de um problema físico dependerá de diversos valores arbitrados durante o desenvolvimento do código, tais como o tipo de discretização adotado, o grau de refinamento da malha computacional, as tolerâncias adotadas, entre outros. No entanto, independente dos parâmetros escolhidos, é possível certificar-se de que o código desenvolvido está livre de erros de programação, através de procedimentos de verificação que utilizam os resultados obtidos pelo próprio código implementado. Por outro lado, a validação do código computacional e do modelo matemático proposto analisa se estes são capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico que se deseja simular (OBERKAMPF, 2010).

A análise da ordem de erro do método programado é um rigoroso critério de verificação, onde é possível analisar não somente a convergência da solução numérica, como também se o erro de discretização reduz, com a mesma taxa da ordem teórica do método, quando a malha espacial e/ou temporal é refinada. A ordem teórica de um código é definida através de análise da ordem do erro de truncamento que surge durante a discretização. Já a ordem real do código programado pode ser calculada por um procedimento prático, onde deve ser avaliado se a taxa com que o erro de discretização decresce é condizente com a ordem teórica do método. Através da análise de ordem, é possível identificar diversas fontes de erros que possam existir na programação do código implementado. Uma fonte comum de erro durante o desenvolvimento de um código computacional ocorre nos contornos do domínio, devido à imposição de condições equivocadas. Com a análise de ordem, é possível verificar se as condições de contorno impostas estão coerentes com o problema simulado, gerando, com isso, uma solução de mesma ordem em todo o domínio (KNUPP, 2000).

De forma geral, pode-se dizer que a verificação da ordem de precisão de um código analisa se as equações governantes estão sendo resolvidas de forma correta, enquanto que a validação demonstra que as equações a serem resolvidas representam, com fidelidade, o fenômeno físico em questão. Desta forma, fica claro que se deve realizar a verificação do código antes

da validação, uma vez que um código não verificado pode produzir resultados insatisfatórios, devido a algum erro de programação ou, simplesmente, por terem sido utilizados parâmetros insuficientemente rigorosos durante a solução numérica.

Segundo KNUPP (2000), um método frequentemente empregado para calcular a ordem de precisão da solução gerada por um código computacional consiste em executar o código em questão para três malhas consecutivamente refinadas. Seleccionando-se duas soluções, calcula-se o erro entre as mesmas considerando a solução obtida pela malha mais refinada como uma solução “exata”. Repete-se o procedimento realizado, utilizando uma nova solução e uma das duas soluções já empregadas. Com isso, é possível calcular o erro de discretização em função de h , sendo este parâmetro a distância entre os pontos na malha para o cálculo da ordem espacial ou o tamanho do passo no tempo para o cálculo da ordem temporal.

Portanto, para qualquer método discreto, sabe-se que a ordem do erro da solução é uma função de h , ou seja:

$$E \propto E(h) \quad (3.1)$$

Sabendo que o erro de truncamento em uma discretização é da ordem de h^p , sendo p a ordem teórica da discretização empregada, para duas malhas consecutivamente refinadas tem-se:

$$E_{Malha1} - E_{Malha2} \propto O(h^p) \quad (3.2)$$

$$E_{Malha2} - E_{Malha3} \propto O\left(\left(\frac{h}{r}\right)^p\right) \quad (3.3)$$

sendo r o refinamento empregado na malha. O produto entre os erros descritos acima é dado por:

$$\frac{E_{Malha1} - E_{Malha2}}{E_{Malha2} - E_{Malha3}} = r^p \quad (3.4)$$

Com isso, a ordem real do código implementado pode ser obtida conforme a equação (3.5). Entretanto, cabe ressaltar que não existe uma maneira única para cálculo da ordem, podendo ser usadas outras fórmulas.

$$p = \frac{\log\left(\frac{E_{Malha1} - E_{Malha2}}{E_{Malha2} - E_{Malha3}}\right)}{\log(r)} \quad (3.5)$$

Quando a ordem calculada é menor que a ordem teórica do método, deve-se rever a programação em busca de possíveis erros no código. Nos casos em que a ordem real calculada é igual ou aproximadamente igual à ordem teórica, após alguns testes com diferentes malhas, significa que a ordem do código programado foi verificada com sucesso. Um código com ordem real verificada deve ser, por fim, validado para que seja considerado confiável.

3.2 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

O foco deste trabalho de Tese são simulações de regime permanente, uma vez que o pré-condicionamento das equações governantes altera a evolução transiente do escoamento, restando somente a solução no regime permanente do pseudo-tempo. Contudo, como será visto em seções subsequentes, empregou-se um problema transiente para verificação do código computacional utilizado, tanto da ordem espacial quanto da ordem temporal. Para isso, implementou-se o método DTS, no qual a acurácia temporal é recuperada reintroduzindo-se a derivada no tempo físico $\partial\hat{\mathbf{Q}}/\partial t$ na equação pré-condicionada (2.19), como se segue:

$$\Gamma \frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\tau} + \frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = 0 \quad (3.6)$$

Para obtenção da solução transiente, a cada passo no tempo físico, deve-se marchar até o regime permanente do pseudo-tempo, recuperando o sistema de equações governantes não pré-condicionadas (2.1). A derivada no pseudo-tempo ($\partial\hat{\mathbf{Q}}/\partial\tau$) deve ser reduzida a um erro arbitrário ($error \equiv \varepsilon$), menor do que o erro espacial, indicando que a marcha atingiu o regime permanente do pseudo-tempo. Em regime permanente, o erro da solução numérica fica restrito ao erro da discretização espacial. O passo no pseudo-tempo $\Delta\tau$ é escolhido para uma convergência ótima em cada iteração, enquanto que o passo no tempo físico Δt é escolhido de acordo com a física do problema. Contudo, existe uma correlação entre eles. Quanto maior o passo dado no tempo físico, maior será o número de passos no pseudo-tempo necessário para se atingir o regime permanente no pseudo-tempo.

Na marcha no pseudo-tempo, a aproximação da derivada temporal ($\partial\hat{\mathbf{Q}}/\partial\tau$) é realizada pelo método de Euler implícito, com um passo uniforme no pseudo-tempo $\Delta\tau$, por:

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{Q}}}{\partial\tau} \simeq \frac{\Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\Delta\tau} + O(\Delta\tau) \quad (3.7)$$

com $\Delta\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}^{p+1} - \hat{\mathbf{Q}}^p$.

A representação $\Delta\hat{\mathbf{Q}}$ é a forma incremental ou residual (TANNEHILL et al., 1997) do vetor de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$.

Na marcha no tempo físico, a aproximação da derivada temporal ($\partial\mathbf{Q}/\partial t$) é realizada pelo método multi-passo de diferença atrasada (BDF), sendo:

$$\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} \simeq \hat{a}_{N_t} \mathbf{Q}^{p+1} + \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + O(\Delta t^{N_t+1}) \quad (3.8)$$

onde $N_t = 0$ para a primeira iteração no tempo físico, $N_t = 1$ para a segunda iteração e assim por diante. Para as simulações feitas nesta dissertação utilizamos $N_t = 0$ e $N_t = 1$ onde a

precisão máxima no tempo físico é equivalente a $O(\Delta t^2)$. A iteração no tempo físico $n + 1$ é aproximada pela iteração no pseudo tempo $p + 1$. Isto é rigorosamente verdadeiro apenas quando o regime permanente do pseudo-tempo é atingido em cada passo no tempo físico. Os coeficientes \hat{a}_{N_t} e $a_{N_t,i}$ são fornecidos na tabela 3.1:

	$N_t = 0$	$N_t = 1$	$N_t = 2$
\hat{a}_{N_t}	$\frac{1}{t_{n+1} - t_n}$	$\frac{1}{t_{n+1} - t_{n-1}} + \frac{1}{t_{n+1} - t_n}$	$\frac{1}{t_{n+1} - t_{n-2}} + \frac{1}{t_{n+1} - t_{n-1}} + \frac{1}{t_{n+1} - t_n}$
$a_{N_t,0}$	$\frac{1}{t_{n+1} - t_n}$	$-\frac{t_{n+1} - t_{n-1}}{(t_{n+1} - t_n)(t_n - t_{n-1})}$	$-\frac{(t_{n+1} - t_{n-2})(t_{n+1} - t_{n-1})}{(t_{n+1} - t_n)(t_n - t_{n-2})(t_n - t_{n-1})}$
$a_{N_t,1}$	0	$\frac{t_{n+1} - t_n}{(t_{n+1} - t_{n-1})(t_n - t_{n-1})}$	$\frac{(t_{n+1} - t_{n-2})(t_{n+1} - t_n)}{(t_{n+1} - t_{n-1})(t_n - t_{n-1})(t_{n-1} - t_{n-2})}$
$a_{N_t,2}$	0	0	$-\frac{(t_{n+1} - t_{n-1})(t_{n+1} - t_n)}{(t_{n+1} - t_{n-2})(t_n - t_{n-2})(t_{n-1} - t_{n-2})}$

TAB. 3.1: Coeficientes das Derivadas no Tempo Físico

Considerando-se $(p + 1)$ iterações no pseudo-tempo e $(n + 1)$ iterações no tempo físico, as equações (3.6) podem ser escritas como:

$$\Gamma^p \frac{\hat{\mathbf{Q}}^{p+1} - \hat{\mathbf{Q}}^p}{\Delta\tau} + \hat{a}_{N_t} \mathbf{Q}^{p+1} + \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v)^{p+1} + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v)^{p+1} = 0 \quad (3.9)$$

Para a construção de um método de marcha implícita no pseudo-tempo, a equação (3.9) necessita ser linearizada. Utilizando-se a série de Taylor, um vetor \mathbf{f} genérico pode ser linearizado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^{p+1} &\simeq \mathbf{f}^p + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \tau} \right|^p \Delta\tau + O(\Delta\tau^2) \\ &= \mathbf{f}^p + \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} \right)^p \Delta\tau + O(\Delta\tau^2) \\ &\simeq \mathbf{f}^p + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \right|^p \Delta\hat{\mathbf{Q}} + O(\Delta\tau^2), \end{aligned} \quad (3.10)$$

Para os fluxos não viscosos (\mathbf{E}_i e \mathbf{F}_i), o Jacobiano $\partial \mathbf{f} / \partial \hat{\mathbf{Q}}$ é dado por (2.29) e (2.30). O vetor \mathbf{Q}^{p+1} é linearizado usando o Jacobiano $\mathbf{T} = \partial \mathbf{Q} / \partial \hat{\mathbf{Q}}$, que é equivalente à matriz (2.16).

Os fluxos viscosos (\mathbf{E}_v e \mathbf{F}_v) são linearizados da seguinte forma:

$$\left(\frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} \right)^{p+1} \simeq \left(\frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} \right)^p + \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right)^p \Delta\hat{\mathbf{Q}} \quad (3.11)$$

onde a primeira parcela fornece a contribuição explícita dos fluxos viscosos. A segunda parcela que é multiplicada por $\Delta\hat{\mathbf{Q}}$ representa a contribuição implícita, cujas derivadas cruzadas foram

removidas para simplificar a solução do sistema resultante. Simplificações nessas derivadas não afetam a precisão da solução, uma vez que a contribuição implícita é multiplicada pela forma incremental ou residual $\Delta\hat{\mathbf{Q}}$ do vetor de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$, que em regime permanente é reduzida a um erro arbitrário ($error \equiv \varepsilon$). A contribuição implícita influi somente na taxa de convergência do método numérico (TANNEHILL et al., 1997).

Os Jacobianos difusivos $\partial f/\partial\hat{\mathbf{Q}}$ são dados por:

$$\mathbf{R}_{x,x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 3/4\mu u & \mu v & k \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{R}_{y,y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3/4\mu & 0 \\ 0 & \mu u & 3/4\mu v & k \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Após a linearização das equações (3.9), obtém-se:

$$\left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} (\hat{\mathbf{A}} \cdot) + \frac{\partial}{\partial y} (\hat{\mathbf{B}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}^p \Delta\hat{\mathbf{Q}} = -\Delta\tau \mathbf{R}^p \quad (3.14)$$

onde \mathbf{S}^p e \mathbf{R}^p são dados por

$$\mathbf{S}^p = \mathbf{\Gamma}^p + \Delta\tau (\hat{a}_{N_t} \mathbf{T})^p \quad (3.15)$$

$$\mathbf{R}^p = \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v)^p + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v)^p$$

A solução das equações (3.14) e (3.15) impõe ao método numérico um alto custo computacional, haja visto que o lado esquerdo de (3.14) gera uma matriz implícita pentadiagonal com elementos nulos entre as diagonais mais externas. Torna-se inviável o emprego de técnicas específicas para solução eficiente de sistemas com matrizes pentadiagonais. Nestes casos, uma aproximação desta matriz implícita deve ser usada. Geralmente, para solução desses sistemas pentadiagonais, pode-se utilizar o método da fatoração implícita de direções alternadas (ADI) (BEAM e WARMING, 1976; BRILEY et al., 1983). Entretanto, a análise de estabilidade realizada no trabalho de BUELOW et al. (1994) mostrou que essa metodologia é condicionalmente estável para problemas tridimensionais.

O estudo de BUELOW et al. (1994) também apresentou um esquema incondicionalmente estável para problemas tridimensionais, baseada em relaxação das diagonais da matriz do sistema. Implementando-se essa técnica, um sistema bidimensional é resolvido, alternadamente,

como se fosse unidimensional. Cada passo no pseudo-tempo é resolvido em dois estágios. Em cada estágio, os termos da diagonal principal relacionados com a direção contrária são relaxados e introduzidos no lado explícito da direção que está sendo resolvida.

A partir das equações (3.14), considerando-se que o primeiro estágio seja a solução na direção x , com relaxação dos termos da direção y , tem-se que:

$$\begin{aligned} & \left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} (\hat{\mathbf{A}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\}^p \Delta\hat{\mathbf{Q}}_1 = \\ & -\Delta\tau \mathbf{R}^p - \left\{ \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial y} (\hat{\mathbf{B}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right) \right\}^p \Delta\hat{\mathbf{Q}}_0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

sendo $\hat{\mathbf{Q}}_0$ a solução obtida no passo anterior do pseudo-tempo e $\hat{\mathbf{Q}}_1$ uma predição para a solução no passo atual do pseudo-tempo.

O segundo estágio com solução na direção y e relaxação dos termos da direção x é dado por:

$$\begin{aligned} & \left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial y} (\hat{\mathbf{B}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}^p \Delta\hat{\mathbf{Q}}_2 = \\ & -\Delta\tau \mathbf{R}^p - \left\{ \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} (\hat{\mathbf{A}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \right\}^p \Delta\hat{\mathbf{Q}}_1 \end{aligned} \quad (3.17)$$

sendo $\hat{\mathbf{Q}}_2$ uma correção da solução no passo atual do pseudo-tempo.

Para equações de governo quase-unidimensionais, a matriz implícita do lado esquerdo de (3.14) é tridiagonal. Neste caso, o sistema é facilmente resolvido aplicando-se, por exemplo, o método da Eliminação de Thomas, adaptado para solução de sistemas em bloco.

3.3 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

3.3.1 FLUXOS VISCOSOS

Aproximações centradas utilizam em sua formulação pontos da malha espacial tomados simetricamente em ambos os sentidos. Essas aproximações são adequadas para a discretização das derivadas espaciais dos fluxos viscosos, pois as informações difusivas do escoamento se propagam igualmente em ambos os sentidos quando o fluido possui propriedades isotrópicas.

As equações (3.11) apresentaram as contribuições explícita e implícita dos fluxos viscosos. A contribuição explícita tem fluxos viscosos E_v e F_v na forma conservativa, enquanto que a contribuição implícita tem estes fluxos na forma não conservativa. Isto é justificado uma vez que, segundo CHOI e MERKLE (1993), a contribuição implícita, quando representada na forma conservativa, pode causar problemas de instabilidade numérica ao método empregado. A forma não conservativa é menos precisa do que a conservativa, entretanto é mais estável numericamente. Além do mais, a representação da contribuição implícita na forma não conservativa não

interfere na precisão do resultado final, uma vez que a contribuição implícita é multiplicada pelo vetor de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}}$ na forma residual $\Delta\hat{\mathbf{Q}}$, que em regime permanente é reduzida a um erro arbitrário ($error \equiv \varepsilon$). A contribuição implícita influi somente na taxa de convergência do método numérico (TANNEHILL et al., 1997).

Utilizando-se uma aproximação centrada de segunda ordem para discretização da contribuição explícita dos fluxos viscosos na direção x , chega-se a:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} \right|_i = \frac{(\mathbf{E}_v)_{i+1} - (\mathbf{E}_v)_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.18)$$

onde i representa o ponto da malha espacial no qual está se tomando a derivada.

A partir das equações apresentadas em (3.11), a contribuição implícita na direção x necessita da seguinte manipulação:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Delta\hat{\mathbf{Q}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial \Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\partial x} \right) = \frac{\partial \mathbf{R}_{x,x}}{\partial x} \frac{\partial \Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\partial x} + \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial^2 \Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\partial x^2} \quad (3.19)$$

Empregando-se aproximações centradas de segunda ordem para discretização das derivadas envolvidas em (3.19), chega-se a:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{R}_{x,x}}{\partial x} \right|_i = \frac{(\mathbf{R}_{x,x})_{i+1} - (\mathbf{R}_{x,x})_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.20)$$

$$\left. \frac{\partial \Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\partial x} \right|_i = \frac{(\Delta\hat{\mathbf{Q}})_{i+1} - (\Delta\hat{\mathbf{Q}})_{i-1}}{2\Delta x} \quad (3.21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \Delta\hat{\mathbf{Q}}}{\partial x^2} \right|_i = \frac{(\Delta\hat{\mathbf{Q}})_{i+1} - 2(\Delta\hat{\mathbf{Q}})_i + (\Delta\hat{\mathbf{Q}})_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (3.22)$$

3.3.2 FLUXOS NÃO VISCOSOS

Aproximações parcialmente atrasadas/avançadas, também conhecidas como “biased-upwind schemes”, utilizam em sua formulação pontos da malha espacial tomados em um sentido preferencial. Por isso, levam em consideração as direções de propagação de informação no escoamento. Essas aproximações são adequadas para a discretização das derivadas espaciais dos fluxos convectivos, pois as informações convectivas do escoamento se propagam em um sentido preferencial.

Para discretização espacial dos fluxos convectivos, ao invés de separar diretamente os fluxos por aproximações tradicionais avançadas/atrasadas, neste trabalho de Tese, utiliza-se uma abordagem alternativa. Será usado o método da Matriz de Dissipação Pré-condicionada (MDP)

(SCHWER, 1999; BUELOW et al., 2001). No esquema MDP, emprega-se uma aproximação centrada com dissipação matricial pré-condicionada. Essa abordagem alternativa é similar aos tradicionais esquemas avançados/atrasados, uma vez que qualquer aproximação avançada/atrasada pode ser reescrita, após manipulação algébrica, em uma aproximação centrada mais dissipação. Por isso, da mesma forma que os esquemas avançados/atrasados, o MDP leva em consideração as direções de propagação de informação no escoamento, o que não ocorre nos esquemas centrados tradicionais.

O uso do esquema MDP é justificado uma vez que os trabalhos de VANLEER et al. (1991); WEISS e SMITH (1995) mostram que quando são utilizados métodos pré-condicionadores, a dissipação artificial deve ser pré-condicionada.

O esquema do MDP é apresentado a seguir:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{E}_i}{\partial x} \right|_i = \frac{(\tilde{\mathbf{E}}_i)_{i+\frac{1}{2}} - (\tilde{\mathbf{E}}_i)_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \quad \text{onde} \quad (\tilde{\mathbf{E}}_i)_{i\pm\frac{1}{2}} = (\mathbf{E}_i)_{i\pm\frac{1}{2}} - (\tilde{\mathbf{D}})_{i\pm\frac{1}{2}} \quad (3.23)$$

sendo que as faces das células da malha espacial são localizadas em $i \pm \frac{1}{2}$ e os centros das células estão em $i = 1, 2, \dots, N$.

Os fluxos não viscosos $(\mathbf{E}_i)_{i\pm\frac{1}{2}}$ e as dissipações artificiais $(\tilde{\mathbf{D}})_{i\pm\frac{1}{2}}$ são dadas por:

$$(\mathbf{E}_i)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(\mathbf{E}_i)_i + (\mathbf{E}_i)_{i+1}}{2} \quad \text{e} \quad (\mathbf{E}_i)_{i-\frac{1}{2}} = \frac{(\mathbf{E}_i)_i - (\mathbf{E}_i)_{i-1}}{2} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}} = \tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^- = & C_1 \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) - C_2 \left(\Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{3}{2}}^- \right) + \dots \\ & \dots + C_3 \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{3}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^- \right) + C_4 \left(\Delta \mathbf{E}_{i-\frac{3}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{5}{2}}^- \right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{D}}_{i-\frac{1}{2}} = \tilde{\mathbf{D}}_{i-\frac{1}{2}}^+ + \tilde{\mathbf{D}}_{i-\frac{1}{2}}^- = & C_1 \left(\Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^- \right) - C_2 \left(\Delta \mathbf{E}_{i-\frac{3}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) + \dots \\ & \dots + C_3 \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i-\frac{3}{2}}^- \right) + C_4 \left(\Delta \mathbf{E}_{i-\frac{5}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{3}{2}}^- \right) \end{aligned} \quad (3.26)$$

onde os fluxos pré-condicionados positivos e negativos são definidos como

$$\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^\pm = \hat{\mathbf{A}}_{i+\frac{1}{2}}^\pm \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{i+\frac{1}{2}} \quad \text{com} \quad \hat{\mathbf{A}}^\pm = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} = \Gamma \hat{\mathbf{M}} \hat{\mathbf{A}}^\pm \hat{\mathbf{M}}^{-1} \quad \text{e} \quad \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{\mathbf{Q}}_{i+1} - \hat{\mathbf{Q}}_i \quad (3.27)$$

e os autovalores positivos e negativos do sistema pré-condicionado são obtidos por

$$\hat{\mathbf{A}}^\pm = \frac{\hat{\mathbf{A}} \pm |\hat{\mathbf{A}}|}{2} \quad \text{com} \quad \hat{\mathbf{M}}^{-1} \left(\Gamma^{-1} \hat{\mathbf{A}} \right) \hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{A}} \quad (3.28)$$

A equação (3.27) é satisfeita se e somente se $\hat{\mathbf{A}}$ é calculada nas faces das células com o uso da formulação apresentada em ROE (1981), como se segue:

$$(\cdot)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\rho_i} (\cdot)_i + \sqrt{\rho_{i+1}} (\cdot)_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}} \quad \text{e} \quad \rho_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{\rho_i \rho_{i+1}} \quad (3.29)$$

A ordem de precisão do método é determinada em função das constantes C_1 a C_4 , como se segue:

- primeira ordem

$$C_1 = \frac{1}{2}, \quad C_2 = 0, \quad C_3 = 0 \quad \text{e} \quad C_4 = 0 \quad (3.30)$$

- terceira ordem

$$C_1 = \frac{1}{6}, \quad C_2 = \frac{1}{6}, \quad C_3 = 0 \quad \text{e} \quad C_4 = 0 \quad (3.31)$$

Perto dos contornos, a ordem de precisão espacial deve ser reduzida quando houver ausência de periodicidade do fenômeno simulado na respectiva direção. Além disso, a redução de ordem também deve ser feita para aumentar a estabilidade numérica global da resolução espacial, uma vez que quanto maior for a ordem de precisão menor será a estabilidade numérica do esquema espacial quando malhas uniformes são utilizadas (SHUKLA e ZHONG, 2005) e (SHUKLA et al., 2007).

O esquema de terceira ordem é reduzido para segunda ordem junto aos contornos. Os componentes da dissipação artificial junto ao contorno da esquerda tornam-se:

$$\tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{3}{2}}^- - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^- \right) / 2 \quad \text{e} \quad \tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{3}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^+ \right) / 6 \quad (3.32)$$

enquanto que, junto ao contorno da direita, os componentes da dissipação artificial são reduzidos para

$$\tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^- = \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^- - \Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^- \right) / 6 \quad \text{e} \quad \tilde{\mathbf{D}}_{i+\frac{1}{2}}^+ = \left(\Delta \mathbf{E}_{i+\frac{1}{2}}^+ - \Delta \mathbf{E}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) / 2 \quad (3.33)$$

3.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Um dos pontos críticos da simulação computacional de problemas fluido-dinâmicos é a implementação adequada de condições de contorno. O tratamento das mesmas deve ser feito com muito cuidado, pois uma aplicação imprópria nas fronteiras do domínio pode conduzir a soluções errôneas ou produzir instabilidade computacional (PULLIAN, 1986). Por isso, elas devem ser consistentes com as características físicas do problema.

Neste estudo, de acordo com o descrito em POINSOT e LELE (1992), as condições de contorno foram definidas para o vetor de variáveis primitivas $\hat{\mathbf{Q}} = (p_h, u, T)^T$ em função dos

	Subsônico	Supersônico
Entrada	Duas Condições Prescritas	Três Condições Prescritas
Saída	Uma Condição Prescrita	Nenhuma Condição Prescrita

TAB. 3.2: Definição das Condições de Contorno

sentidos de propagação das informações convectiva e acústicas do escoamento normal aos contornos artificiais, como apresentado na Tabela 3.2.

A qualidade das condições de contorno é determinada em função da técnica utilizada para obtenção das mesmas. O estudo de TEIXEIRA e ALVES (2011) descreve em maiores detalhes como modelar as condições de contorno em fronteiras artificiais. Entretanto, neste trabalho de Tese, não há preocupação profunda com a precisão ou a acurácia da solução. Sendo assim, foram utilizadas condições de contorno simples, tais como de derivada zero. Maiores detalhes serão dados na descrição dos problemas a serem resolvidos.

4 EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

4.1 VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL

Inicialmente, foi realizada a verificação do código computacional, uma vez que um código não verificado pode produzir resultados insatisfatórios, devido a algum erro de programação ou, simplesmente, por terem sido utilizados parâmetros insuficientemente rigorosos durante a solução numérica (KNUPP, 2000). Na verificação, utilizou-se o problema da onda entrópica periódica como caso teste.

4.1.1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O fenômeno físico foi caracterizado como um escoamento transiente, unidimensional e não viscoso de um fluido newtoniano, compressível e termicamente perfeito. A onda entrópica é produzida por perturbações na massa específica com pressão constante. As modificações geradas na temperatura são obtidas por meio da equação de estado. Pequenas perturbações na massa específica são simplesmente ondas que se propagam na direção do escoamento sem qualquer mudança de amplitude, fase ou frequência (ALVES, 2010). O problema foi modelado pelas equações de Euler unidimensionais.

A solução transiente exata da massa específica é obtida pelo método das características da seguinte maneira (ALVES, 2010):

$$\rho(x, t)/\rho_0 = f(x - u_0 t) \quad (4.1)$$

Como metodologia numérica, foi empregada a técnica DTS com o método de Euler Implícito para marcha no pseudo-tempo e o método BDF de 2ª ordem para marcha no tempo físico. As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com uso de MDP de 3ª ordem. O esquema de pré-condicionamento das equações foi feito de acordo com o método tradicional de VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Como condição inicial, para os pontos do domínio espacial, considerou-se:

- pressão total $p_0 = 10^5 \text{ N/m}^2$;
- razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes $\gamma = C_p/C_v = 1.4$;
- velocidade do som e número de Mach $C_0 = \sqrt{\gamma RT_0}$ e $M_0 = 10^{-2}$;

- velocidade do escoamento $U_0 = M_0 C_0$.

Para a massa específica, uma função arbitrária $f(x)$ é utilizada como condição inicial:

$$\frac{\rho(x, 0)}{\rho_0} = f(x) = 1 + \delta_0 \sin[2\pi x/l_0], \quad \text{para } 0 \leq x \leq l_0 \quad (4.2)$$

onde o valor da massa específica na entrada é calculada por $\rho_0 = p_0/(RT_0)$. A amplitude, o comprimento de onda e o período da perturbação são dados por $\delta_0 = 0.01$, $l_0 = 1$ e $t_0 = l_0/U_0$.

Por se tratar de um problema periódico, as condições de contorno na entrada e na saída do domínio ($i = 1$) e ($i = N$) foram definidas em função de uma correlação com outros pontos da malha espacial, como se segue:

- para a pressão hidrodinâmica $p_h|_1 = p_h|_{N-1}$ e $p_h|_N = p_h|_2$;
- para a velocidade $u|_1 = u|_{N-1}$ e $u|_N = u|_2$;
- para a temperatura $T|_1 = T|_{N-1}$ e $T|_N = T|_2$.

O passo no tempo físico Δt é calculado em função de quantos passos no tempo físico se pretende dar para cada período da perturbação l_0 , ou seja:

$$\Delta t = \frac{l_0}{N_t} \quad (4.3)$$

sendo N_t o número de passos no tempo físico por período da perturbação.

4.1.2 ANÁLISE DE ORDEM TEMPORAL

As Figuras 4.1 e 4.2 apresentam a evolução das soluções transientes de massa específica para $N_t = 8$ e $N_t = 16$, ou seja, com 8 e 16 passos no tempo físico por cada período da perturbação. Utilizou-se uma malha espacial com 1602 pontos para garantir que o erro temporal fosse dominante.

Para o cálculo da ordem do erro temporal (O), conforme é descrito em KNUPP (2000), devem ser utilizadas três soluções numéricas obtidas em três malhas diferentes. Sendo assim, foram empregadas soluções numéricas de massa específica com $N_t = 8$ (ρ_8), $N_t = 16$ (ρ_{16}) e com $N_t = 32$ (ρ_{32}). As soluções foram obtidas no 2º passo no tempo para $N_t = 8$, no 4º passo no tempo para $N_t = 16$ e no 8º passo no tempo para $N_t = 32$. Utilizou-se uma malha espacial com 1602 pontos para garantir que o erro temporal fosse dominante. A partir da equação (3.5), chega-se à equação usada para cálculo da ordem do erro temporal, como se segue:

$$O = \log_2 \frac{|\rho_8 - \rho_{16}|}{|\rho_{16} - \rho_{32}|} \quad (4.4)$$

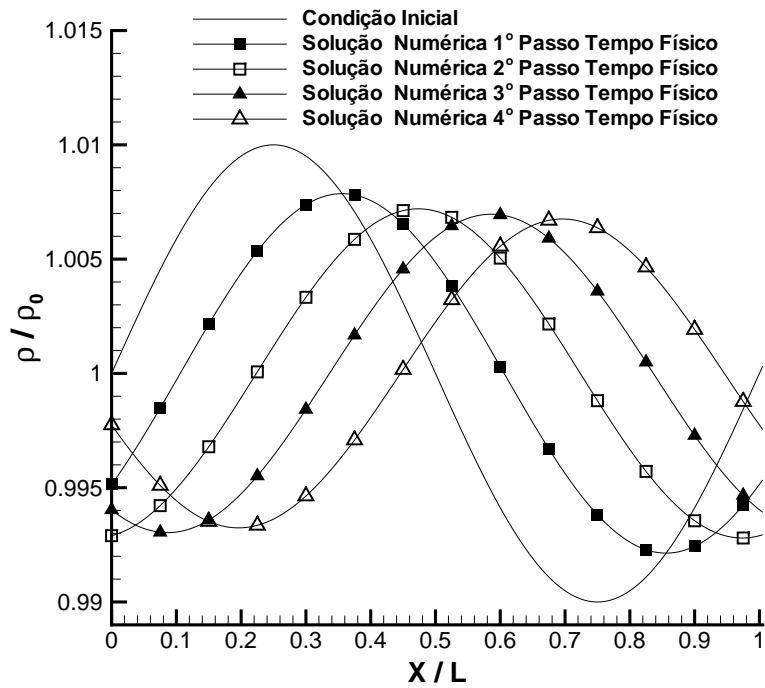


FIG. 4.1: Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 8$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

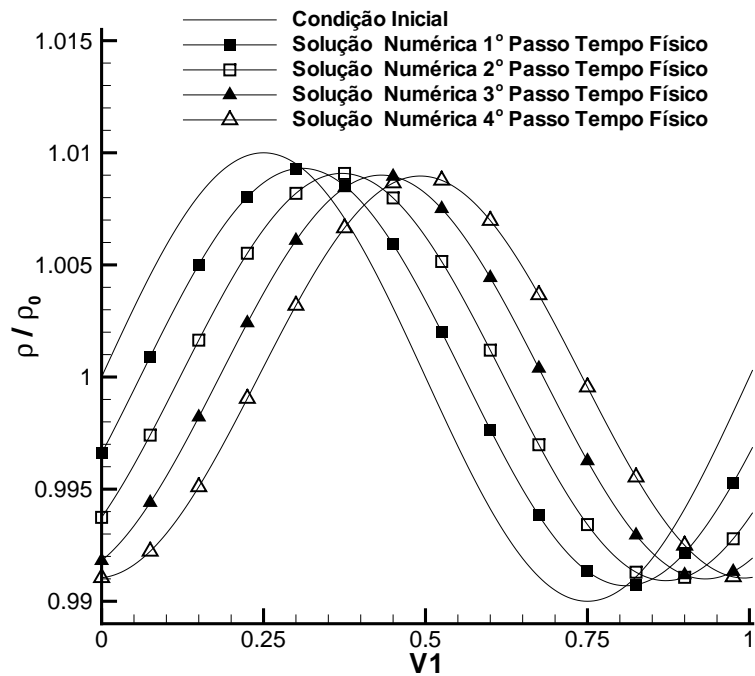


FIG. 4.2: Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

A Figura 4.3 apresenta a ordem temporal calculada pela equação (4.4) para todos os pontos do domínio espacial. Pode-se observar que os valores obtidos estão bem próximos de 2, de acordo com o esperado, já que a marcha no tempo físico foi realizada com método BDF de 2ª ordem. As discontinuidades notadas são geradas por cruzamentos que ocorrem entre as soluções numéricas utilizadas, como pode ser observado na Figura 4.4

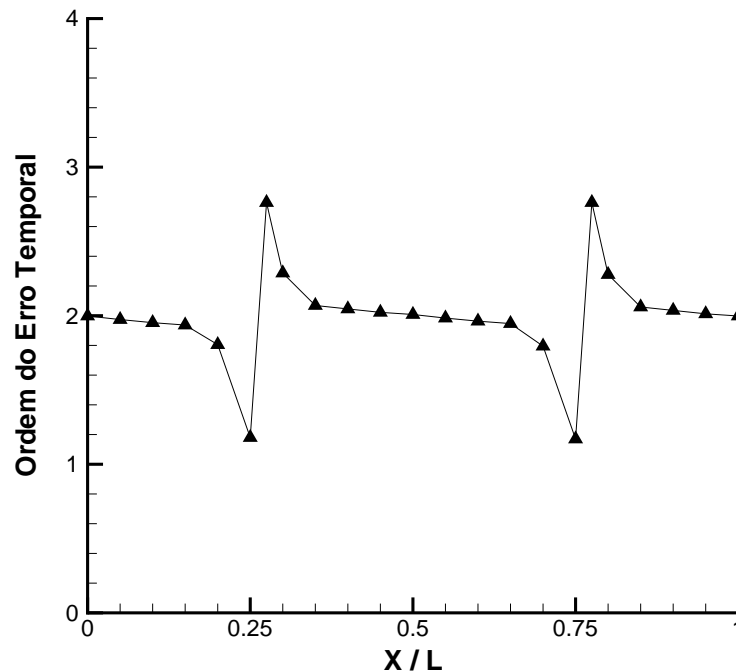


FIG. 4.3: Ordem do Erro Temporal - $N_t = 8$, $N_t = 16$ e $N_t = 32$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

Após a verificação da ordem temporal, foram realizadas comparações entre a solução analítica do problema e as soluções numéricas obtidas. A validação do código computacional e do modelo matemático proposto analisa se estes são capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico que se deseja simular (OBERKAMPF, 2010).

Foram empregadas soluções numéricas de massa específica com $N_t = 8$ e $N_t = 16$. As soluções foram obtidas no 2º passo no tempo para $N_t = 8$ e no 4º passo no tempo para $N_t = 16$. Utilizou-se uma malha espacial com 1602 pontos para garantir que o erro temporal fosse dominante.

As Figuras 4.5 e 4.6 apresentam os resultados das simulações. É possível observar que o erro dominante é dissipativo, devido a redução de amplitude da onda. Também pode-se verificar um erro dispersivo, devido a onda numérica ser ligeiramente mais lenta que a solução teórica.

Os erros calculados entre as soluções numéricas e a solução analítica apresentadas nas Figuras 4.5 e 4.6 são comparados na Figura 4.7. Pode-se concluir que o código computacional e o

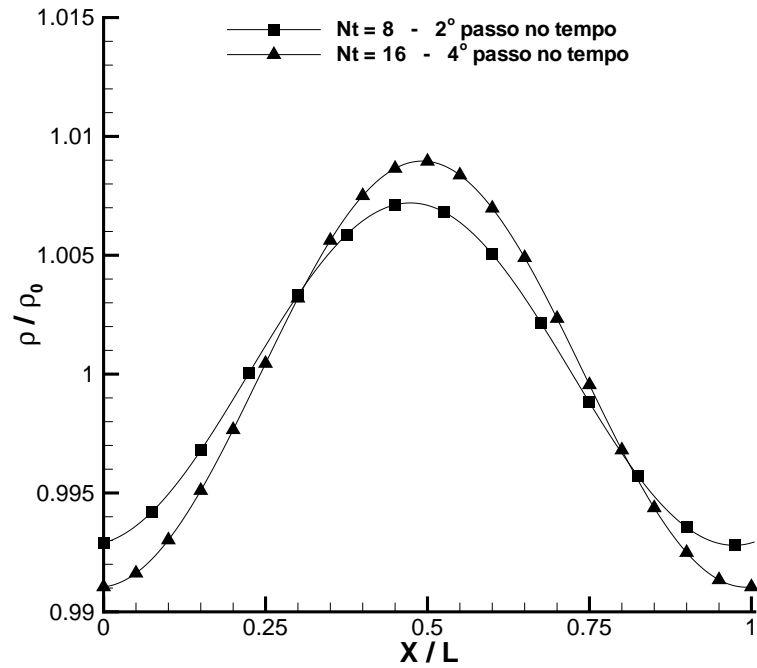


FIG. 4.4: Cruzamento das Soluções Numéricas com $N_t = 8$ e $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

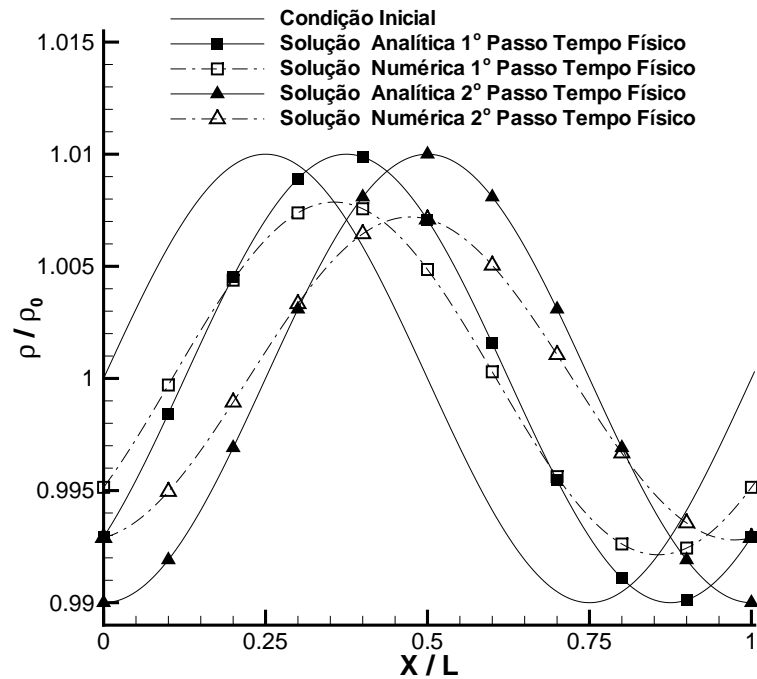


FIG. 4.5: Soluções Transientes de Massa Específica - $N_t = 8$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

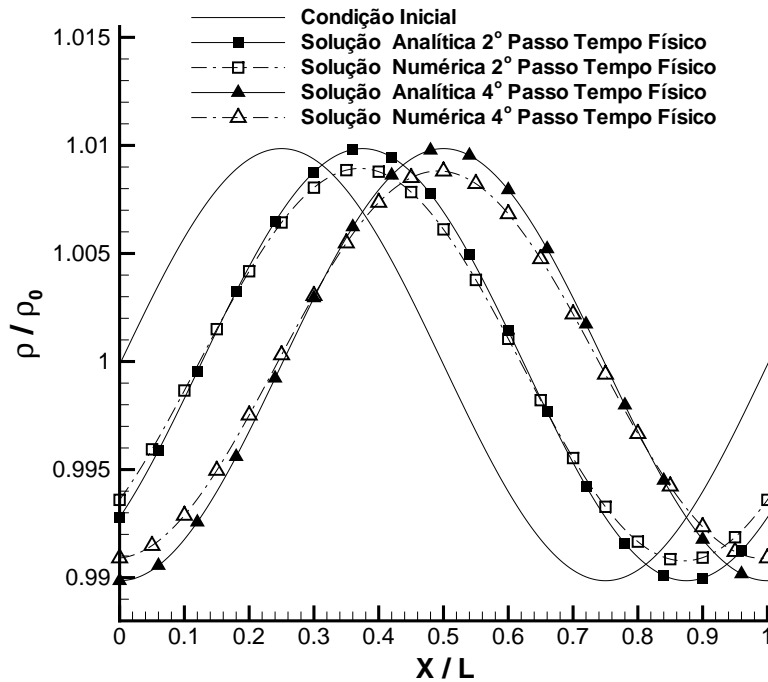


FIG. 4.6: Soluções Transientes de Massa Específica - $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

4.1.3 ANÁLISE DE ORDEM ESPACIAL

Para cálculo da ordem do erro espacial (ϑ), foram empregadas soluções numéricas de massa específica com $N_x = 102$ (ρ_{102}), $N_x = 202$ (ρ_{202}) e com $N_x = 402$ (ρ_{402}). Utilizou-se $N_t = 2048$ para garantir que o erro espacial fosse dominante. As soluções foram obtidas após 10 passos no tempo. A partir da equação (3.5), chega-se à equação usada para cálculo da ordem do erro temporal, como se segue:

$$\vartheta = \log_2 \frac{|\rho_{102} - \rho_{202}|}{|\rho_{202} - \rho_{402}|} \quad (4.5)$$

A Figura 4.8 apresenta a ordem espacial calculada. Pode-se observar que os valores obtidos estão bem próximos de 3, de acordo com o esperado, já que as discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com MDP de 3ª ordem.

Após a verificação da ordem espacial, foram realizadas comparações entre a solução analítica do problema e as soluções numéricas obtidas. Foram empregadas soluções numéricas de massa específica com $N_x = 102$ e $N_x = 202$. Utilizou-se $N_t = 2048$ para garantir que o erro

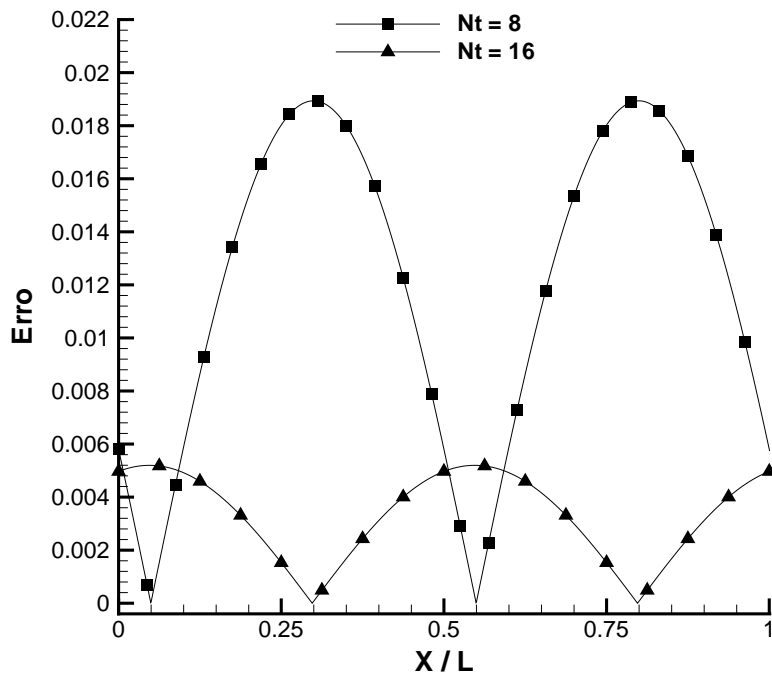


FIG. 4.7: Erros das Soluções Transientes de Massa Específica para $N_t = 8$ e $N_t = 16$ - $N_x = 1602$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

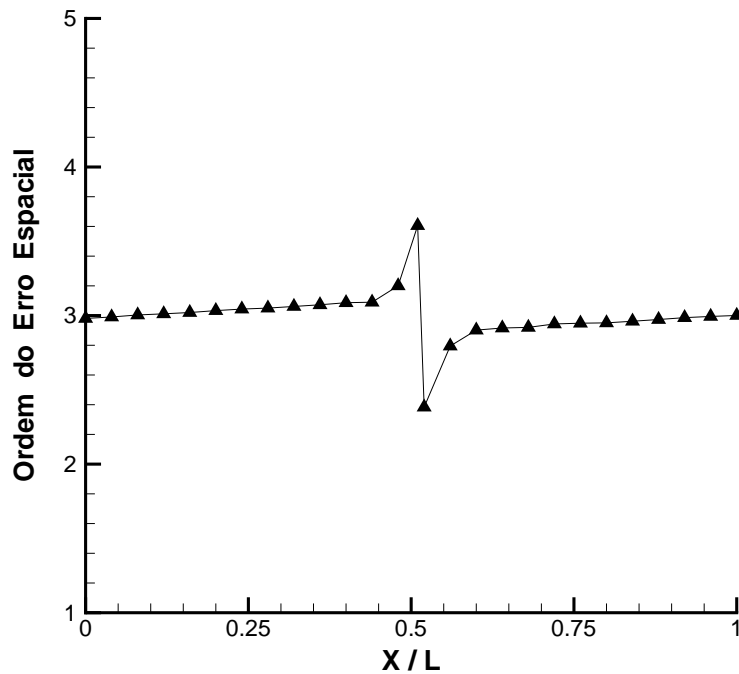


FIG. 4.8: Ordem do Erro Espacial - $N_x = 102$, $N_x = 202$ e $N_x = 402$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

especial fosse dominante. As soluções foram obtidas após 10 passos no tempo. A Figura 4.9 apresenta os resultados das simulações.

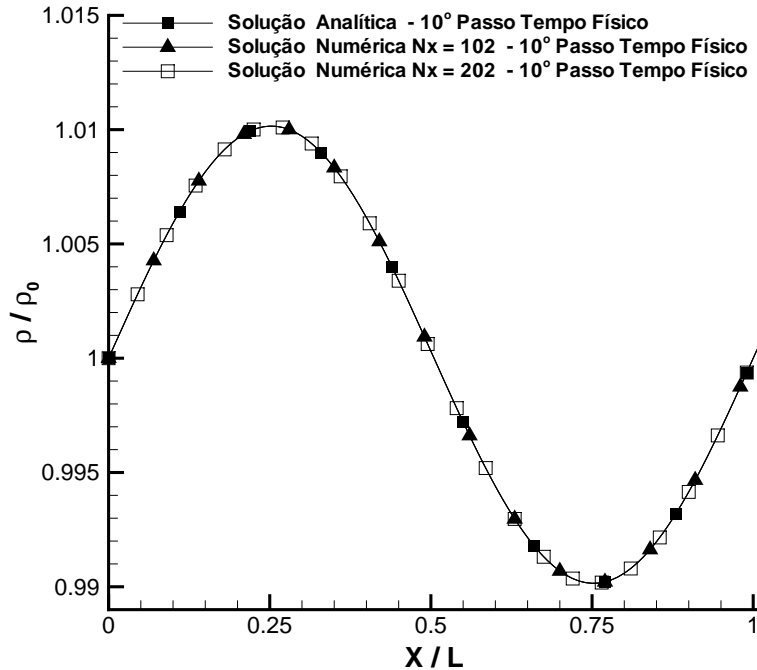


FIG. 4.9: Soluções Transientes de Massa Específica para $N_x = 102$ e $N_x = 202$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

Os erros calculados entre as soluções numéricas e a solução analítica apresentadas na Figura 4.9 são comparados na Figura 4.10. Pode-se concluir que o código computacional e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

4.2 PRIMEIRA ETAPA DE DESENVOLVIMENTO DA NOVA METODOLOGIA

4.2.1 OTIMIZAÇÃO DE V_p

Na primeira etapa do desenvolvimento da nova metodologia, dentre os três critérios de desempenho, sensibilidade assintótica \hat{S}_a , rigidez numérica \hat{R} e sensibilidade transitória \hat{S}_t , somente tratou-se da sensibilidade assintótica \hat{S}_a . Para isso, buscou-se a minimização do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . Dentre os três parâmetros livres (h_p , V_p e δ) da matriz Γ , decidiu-se otimizar o valor da velocidade do som pré-condicionada V_p , buscando minimizar o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ e, em consequência, a minimização da sensibilidade assintótica \hat{S}_a .

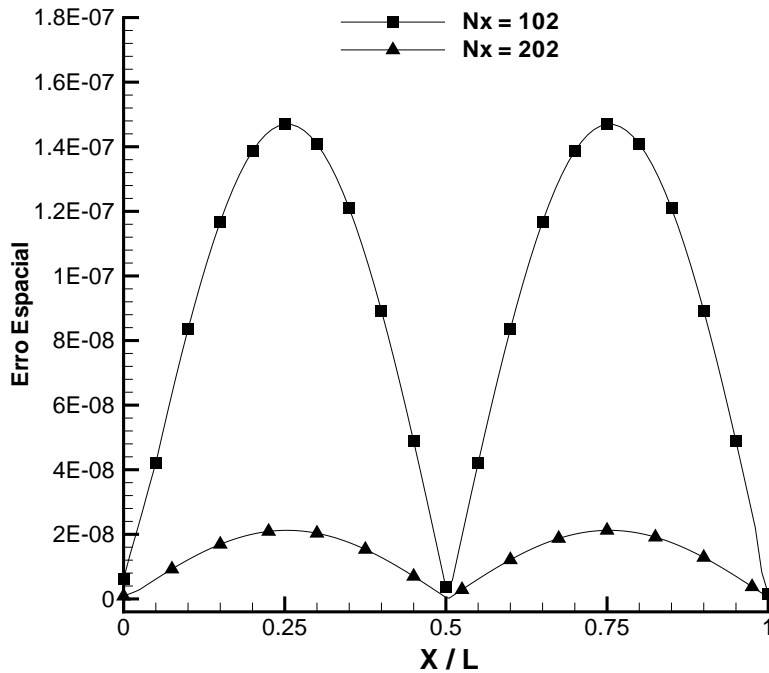


FIG. 4.10: Erros Soluções Transientes de Massa Específica para $N_x = 102$ e $N_x = 202$ - $N_t = 2048$ pontos - DTS com Euler Implícito e BDF de 2ª ordem - MDP de 3ª ordem.

Foi utilizado o método de otimização de Powell, o qual tem sua formulação descrita detalhadamente no APÊNDICE A. O método foi implementado tendo como variável de projeto o parâmetro V_p e como função custo o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . No processo de otimização de V_p , os parâmetros h_p e δ foram ajustados de acordo com o que é usado pelo pré-condicionador clássico de VENKATESWARAN e MERKLE (1999), ou seja:

$$h_p = \frac{\partial h}{\partial p} \quad \text{e} \quad \delta = 0 \quad (4.6)$$

4.2.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Como caso teste, foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente puramente subsônico. Diferentemente do bocal convergente-divergente subsônico-supersônico, o problema do bocal puramente subsônico permite o controle do número de Mach máximo presente no escoamento. Por isso, o bocal subsônico é ideal para ser utilizado como caso teste, uma vez que pretende-se analisar comportamentos de diferentes métodos numéricos, estando os mesmos sujeitos à baixos números de Mach.

O fenômeno físico foi caracterizado como um escoamento quase-unidimensional de um fluido newtoniano, compressível e termicamente perfeito pelo interior de um bocal do tipo convergente-divergente. Isso torna possível obter uma solução analítica para o regime perma-

nente, conforme é descrito em ANDERSON (1995). O escoamento se dá por uma diferença de pressão (ΔP) imposta entre os contornos de entrada e saída, controlada de tal forma ($\Delta P < 1$) que o escoamento seja puramente subsônico (ANDERSON, 1995). O problema foi modelado pelas as equações de Euler quase-unidimensionais apresentas em (2.8).

Para facilitar validações, a função da área transversal $A(x)$ do bocal é a mesma que foi utilizada por ANDERSON (1995), dada por:

$$A(x)/A_g = 1 + 2.2(x/L - 1.5)^2 \quad \text{para } 0 \leq x/L \leq 1.5$$

$$A(x)/A_g = 1 + 0.2223(x/L - 1.5)^2 \quad \text{para } 1.5 \leq x/L \leq 3$$

Para a solução de regime permanente do problema, na marcha no pseudo-tempo foi empregado o método de Euler Explícito. Este método é pouco utilizado devido à sua baixa eficiência. Entretanto, buscou-se um método de estabilidade linear numérica condicional, no qual se consiga trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia. Cada método foi implementado com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência desses métodos.

Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 201 pontos para garantir uma convergência de malha, obtendo uma solução que não evidencie qualquer erro gráfico quando comparada com a solução exata. As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com uso da MDP de 1ª ordem.

Para facilitar comparações com as soluções numéricas obtidas por ANDERSON (1995), utilizou-se as mesmas iniciais empregadas no referido trabalho, a saber:

- razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes $\gamma = C_p/C_v = 1.4$;
- temperatura na entrada $T_0 = 288K$;
- pressão na entrada $P_0 = 10^5 N/m^2$;
- número de Mach na entrada $M_0 = 10^{-1} \text{ a } 10^{-7}$;
- velocidade do som na entrada $C_0 = \sqrt{\gamma RT_0}$;
- velocidade do escoamento na entrada $U_0 = M_0 C_0$;
- condição inicial de temperatura $T/T_0 = 1 - 0.2314 x$;
- condição inicial de densidade $\rho/\rho_0 = 1 - 0.3146 x$;
- condição inicial de velocidade $u/U_0 = (0.1 + 1.09 x) T^{1/2}$.

As condições de contorno na entrada e na saída do domínio ($i = 1$) e ($i = N$) foram definidas como se segue (ANDERSON, 1995):

- pressão na saída $P_s = P_0 * \Delta P$;
- para a pressão hidrodinâmica $p_h|_1 = 0$ e $p_h|_N = P_0(\Delta P - 1)$;
- para a velocidade $\frac{\partial u}{\partial x}|_1 = 0$ e $\frac{\partial u}{\partial x}|_N = 0$;
- para a temperatura $T|_1 = T_0$ e $\frac{\partial T}{\partial x}|_N = 0$.

4.2.3 VALIDAÇÃO

Foram realizadas comparações entre as soluções analíticas de regime permanente do problema, fornecidas por ANDERSON (1995), e as soluções numéricas obtidas, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

As Figuras 4.11 até 4.16 mostram as comparações feitas respectivamente em número de Mach, pressão e temperatura. Pode-se verificar que, em função das propriedades físicas analisadas, o código computacional e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

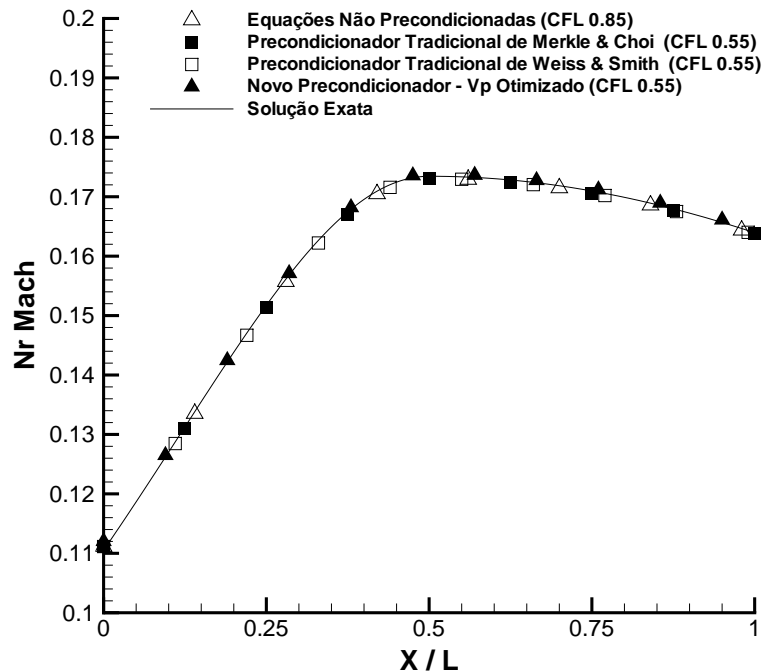


FIG. 4.11: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

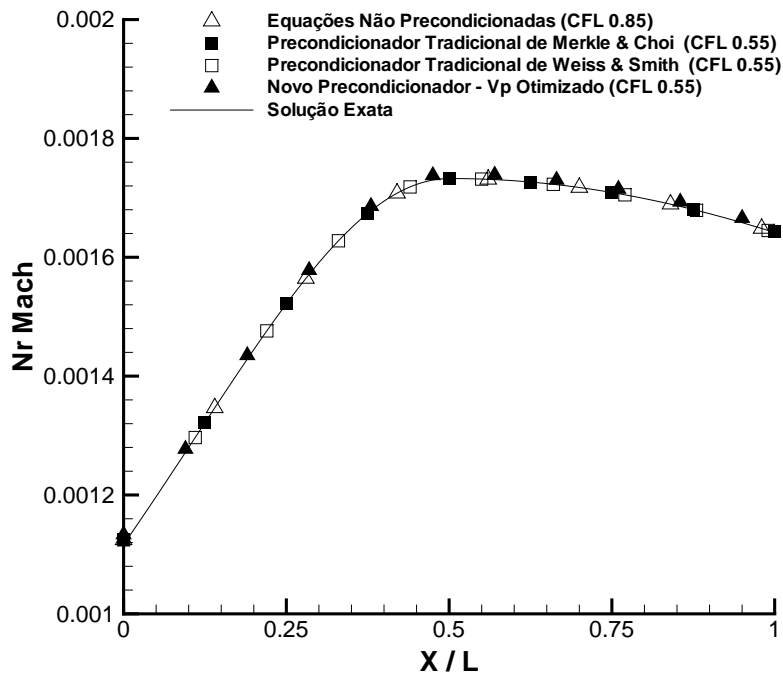


FIG. 4.12: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

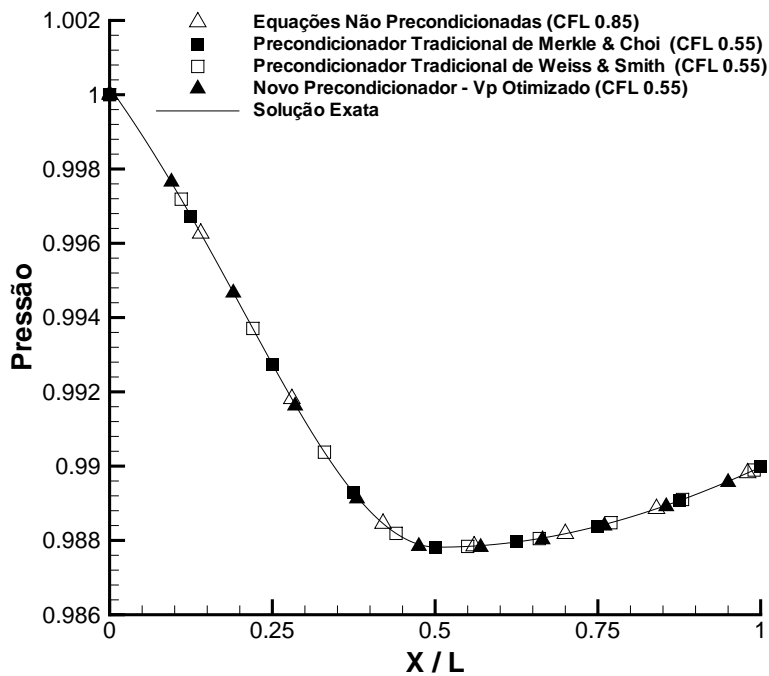


FIG. 4.13: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

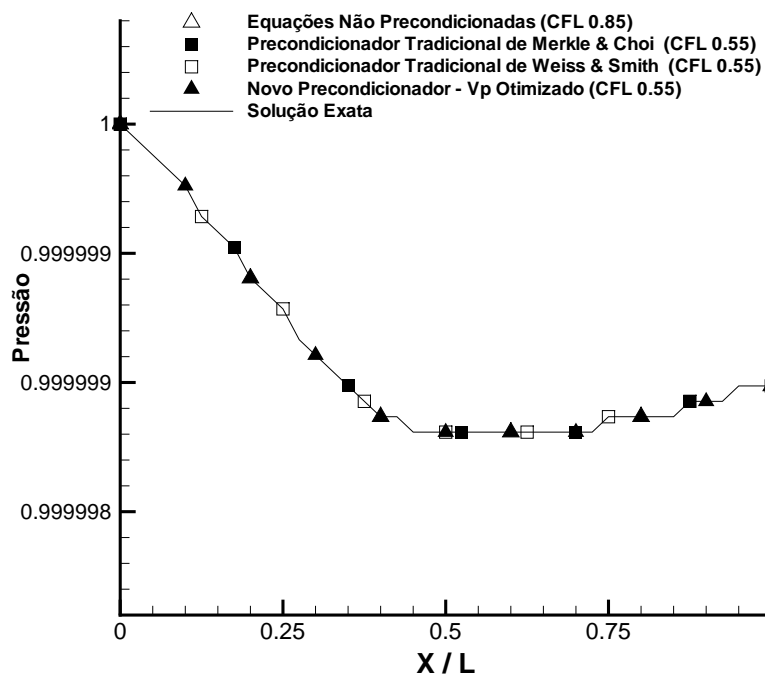


FIG. 4.14: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

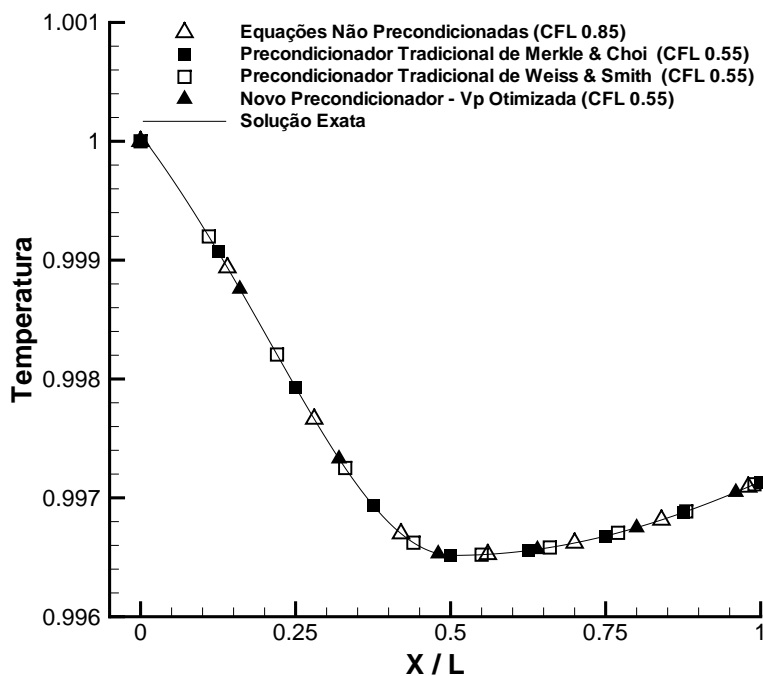


FIG. 4.15: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

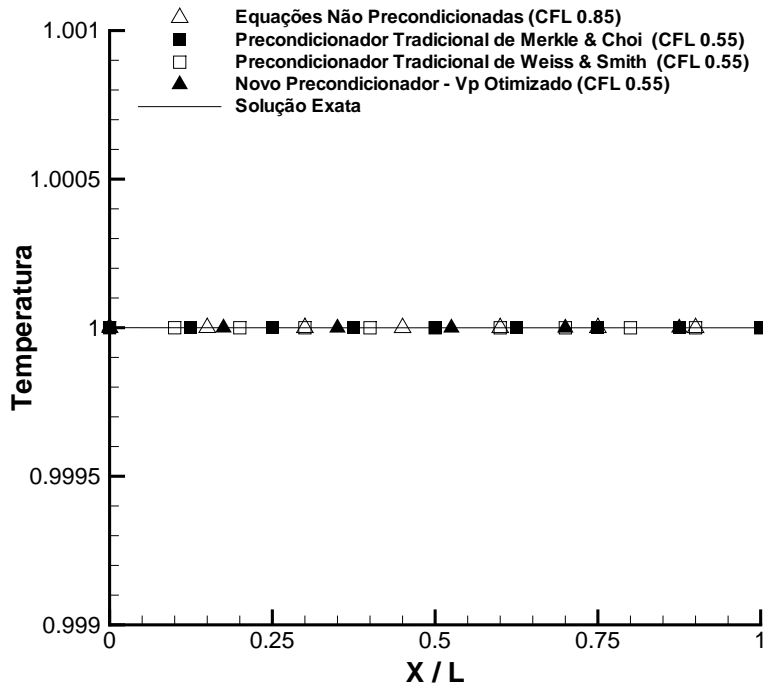


FIG. 4.16: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

4.2.4 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Inicialmente, foram realizadas experimentações numéricas para $M_0 = 10^{-1}$ e $M_0 = 10^{-2}$ com a finalidade de analisar a eficiência da nova metodologia. As Figuras 4.17 a 4.22 apresentam os resultados das simulações realizadas.

A nova metodologia com V_p otimizada foi comparada com um esquema não pré-condicionado e com os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Nas Figuras 4.17 e 4.18, analisa-se o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . Pode-se observar que a nova metodologia com V_p otimizada obteve valores de número de condicionamento da matriz Γ significativamente menores do que os obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), sendo 3 ordens de magnitude menor para $M = 10^{-1}$ e 6 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$. Verifica-se que o esquema não pré-condicionado também possui um número de condicionamento relativamente baixo em relação aos pré-condicionadores clássicos, sendo 2 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-1}$ e 5 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$. Comparando-se com a nova metodologia, o esquema não pré-condicionado possui um número de condicionamento 1 ordem de magnitude maior, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto

para $M_0 = 10^{-2}$. Em função dos resultados obtidos, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento da matriz Γ , o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

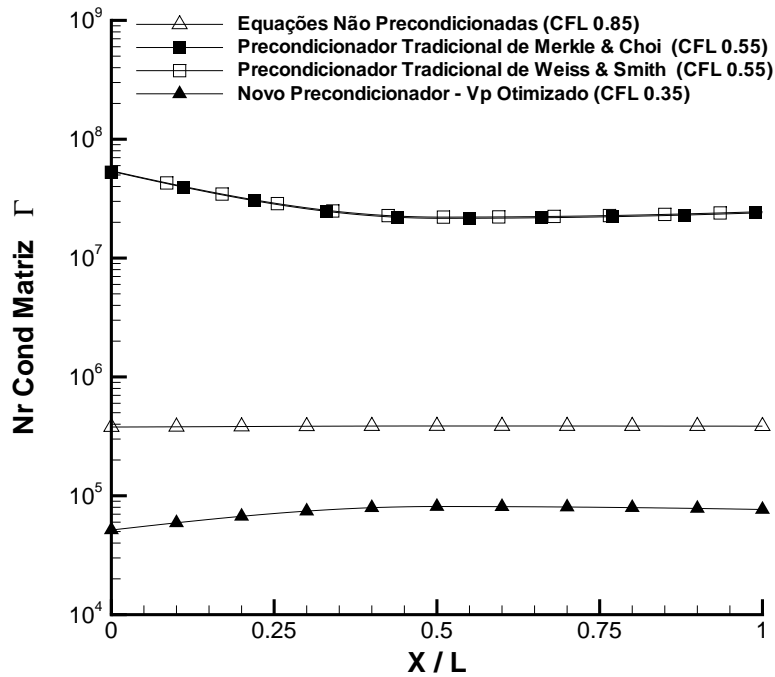


FIG. 4.17: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Nas Figuras 4.19 e 4.20, avalia-se a razão dos autovalores do sistema. Observa-se que a razão dos autovalores obtida pela nova metodologia com V_p otimizada é significativamente maior do que a razão dos métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), sendo 3 vezes maior para $M_0 = 10^{-1}$ e 4 vezes maior para $M_0 = 10^{-2}$. Este resultado não é satisfatório para a nova metodologia, visto que um dos critérios de desempenho, a rigidez numérica \hat{R} , está associada com a minimização da razão de autovalores. Também verifica-se que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores muito elevada, e que a mesma aumenta acentuadamente quando o número de Mach é reduzido de $M_0 = 10^{-1}$ para $M_0 = 10^{-2}$. Em função dos resultados obtidos, conclui-se que o pré-condicionamento clássico reduz significativamente a razão dos autovalores, o que não foi conseguido pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

Nas Figuras 4.21 e 4.22, analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo, sendo ΔQ o vetor de variáveis primitivas apresentado em (2.22). As taxas de convergência dos métodos são inferidas a partir

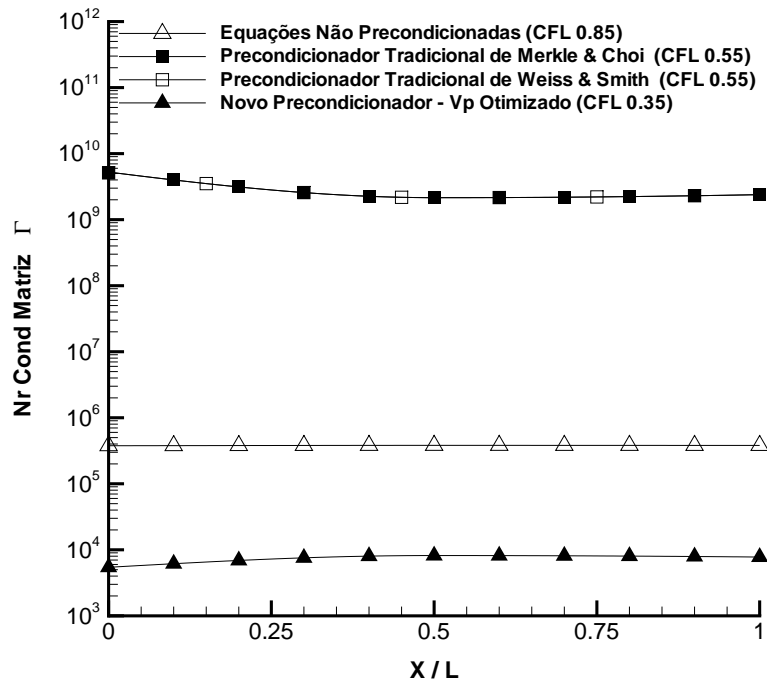


FIG. 4.18: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

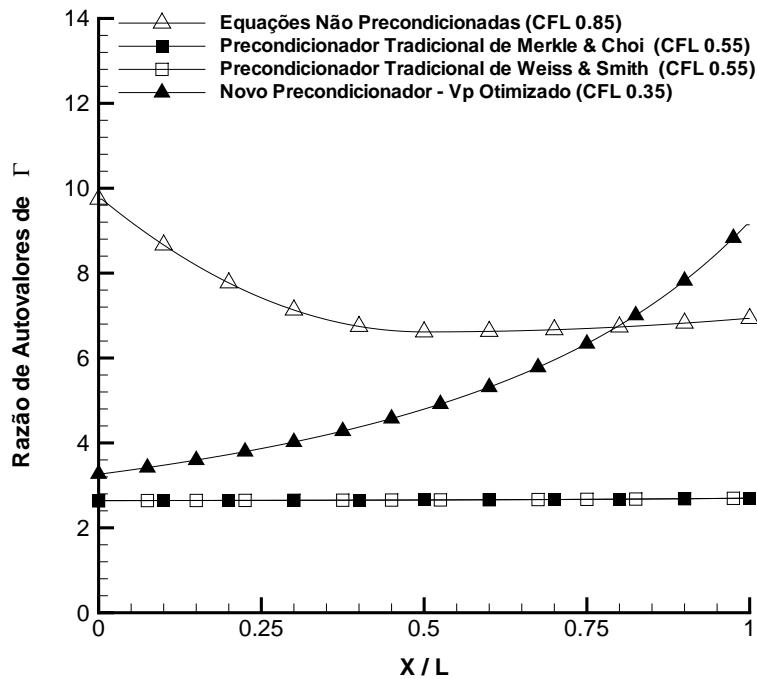


FIG. 4.19: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

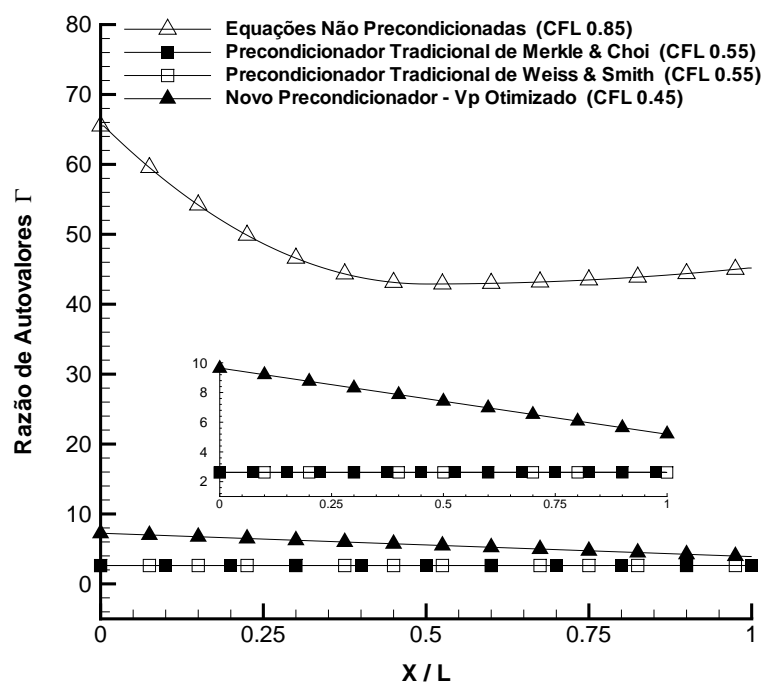


FIG. 4.20: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

destes gráficos. A partir dos resultados obtidos para $M_0 = 10^{-1}$, verifica-se que a nova metodologia com V_p otimizada foi a mais eficiente dentre as testadas. A nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.22, enquanto os métodos clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.10, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 220 por cento. A partir dos resultados com $M_0 = 10^{-1}$, pode-se concluir-se que, em termos de taxa de convergência, o ganho obtido pela nova metodologia com a redução do número de condicionamento da matriz Γ foi superior à perda causada pelo aumento na razão de autovalores. Além disso, pode-se observar a degradação da convergência do esquema não pré-condicionado, que obteve uma taxa de 0.05 devido à elevada razão de autovalores, apesar dos baixos valores de número de condicionamento da matriz Γ . Entretanto, para $M_0 = 10^{-2}$, os métodos clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) passaram a ter uma taxa de convergência maior do que a nova metodologia. Os pré-condicionadores clássicos convergiram com uma taxa de 0.10, enquanto a nova metodologia com V_p otimizada convergiu com uma taxa de 0.07. A partir dos resultados com $M_0 = 10^{-2}$, pode-se concluir-se que, em termos de taxa de convergência, o ganho obtido pela nova metodologia com a redução do número de condicionamento da matriz Γ foi inferior à perda causada pelo aumento na razão de autovalores. A dificuldade de convergência

do esquema não pré-condicionado ainda foi amplificada quando $M_0 = 10^{-2}$.

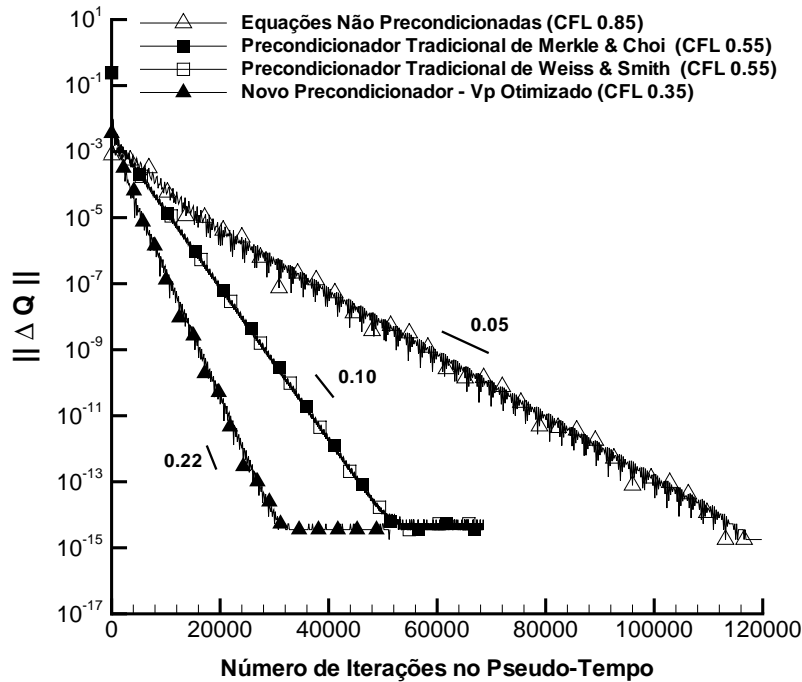


FIG. 4.21: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Os resultados indicam que controlar apenas o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ não é suficiente para garantir um aumento de eficiência computacional. Há necessidade de se tratar, ao mesmo tempo, do número de condicionamento de Γ e da razão entre os autovalores do sistema. Por isso, optou-se pela implementação da segunda etapa de desenvolvimento da nova metodologia, onde se buscaram novos parâmetros de ajuste que pudessem atender aos critérios de desempenho estabelecidos.

4.3 SEGUNDA ETAPA DE DESENVOLVIMENTO DA NOVA METODOLOGIA

4.3.1 SELEÇÃO DOS PARÂMTEROS $H_P - V_P - \delta$

Na segunda etapa do desenvolvimento da nova metodologia, tratou-se dos três critérios de desempenho, sensibilidade assintótica \hat{S}_a , rigidez numérica \hat{R} e sensibilidade transitória \hat{S}_t .

Iniciou-se pelo estudo para minimização do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ e, em conseqüência, a minimização da sensibilidade assintótica \hat{S}_a . A decisão de qual ou quais parâmetros (h_p , V_p e δ) da matriz Γ deveriam ser otimizados foi balizada pelas constatações do estudo de LEE (2005).

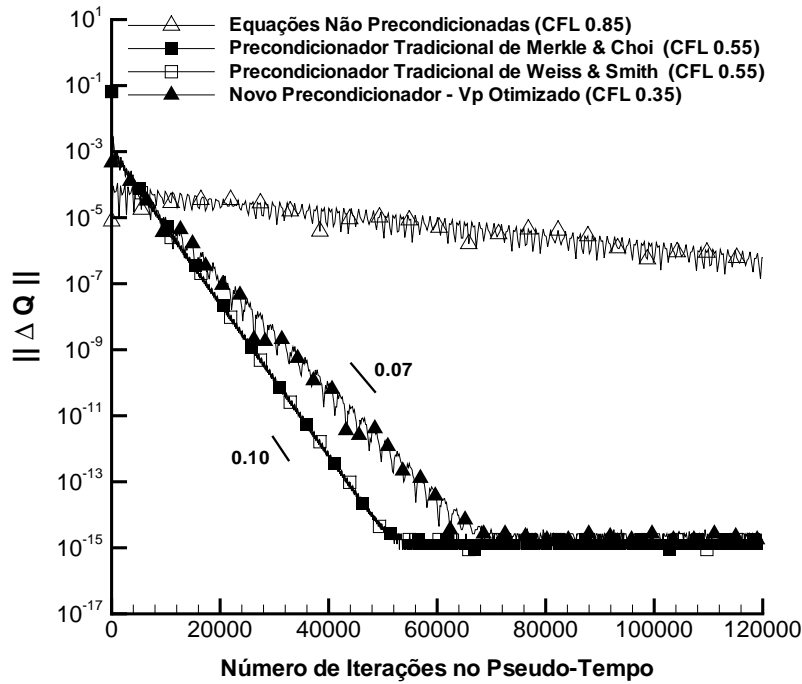


FIG. 4.22: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

O trabalho de LEE (2005) mostrou que a convergência dos métodos pré-condicionados é fortemente dependente das características da matriz pré-condicionadora Γ . O estudo indicou que as dificuldades de convergência para baixo número de Mach são especialmente associadas com a amplificação de erros na equação da energia. Descreveu ainda que, quando o número de Mach é reduzido, a convergência das equações da continuidade e da quantidade de movimento são menos afetadas do que a convergência da equação da energia. A análise de perturbações esclareceu que a magnitude da variação dos termos da equação da energia é muito maior do que das outras equações.

LEE (2007) mostrou que o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ da matriz pré-condicionadora Γ é proporcional a $1/M^2$, sendo o principal responsável pela amplificação de erros para baixos valores de Mach, aumentando significativamente o número de condicionamento da matriz Γ . A partir dessa constatação, LEE (2007) realizou simulações do problema do escoamento laminar viscoso ao redor de um cilindro circular, sendo considerado que:

$$H\rho_p - (1 - \rho h_p) = 0 \quad (4.7)$$

Assim, a matriz Γ apresentada em (2.20) foi reescrita como:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & \rho_T \\ u\rho_p & \rho & u\rho_T \\ 0 & \rho u & H\rho_T + \rho h_T \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Os resultados das simulações realizadas por LEE (2007) mostraram uma significativa redução na amplificação de erros, com significativo aumento da taxa de convergência dos métodos pré-condicionados empregados nas simulações.

Entretanto, a consideração imposta em (4.7) se mostrou inadequada, uma vez que levou a soluções fisicamente incorretas.

Apesar da inconsistência observada, o trabalho de LEE (2007) serviu para apontar um caminho para uma seleção de parâmetros tendo em vista a minimização do número de condicionamento da matriz Γ e da sensibilidade assintótica \hat{S}_a . A estratégia deveria ser baseada no controle da magnitude do termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ para baixos valores de Mach.

Em função dos resultados do trabalho de LEE (2007), sabíamos que o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ da matriz Γ não poderia se tornar nulo, pois levaria a soluções fisicamente incorretas. Entretanto, analisando o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$, tomando gases perfeitos como referência, notamos que a componente $H\rho_p \sim O(1/M^2)$ e que uma alteração do valor de h_p seria a única maneira de controlar a magnitude deste termo para baixos valores de Mach. Por isso, concluímos que deveríamos utilizar a componente ρh_p para cancelar o efeito causado por $H\rho_p$, ou seja:

$$H\rho_p + \rho h_p = 0 \quad (4.9)$$

Assim, definimos uma expressão analítica para o parâmetro h_p da matriz pré-condicionadora Γ visando minimizar o número de condicionamento da matriz Γ e a sensibilidade assintótica \hat{S}_a , como se segue:

$$h_p = -\frac{H}{\rho} \rho_p \quad (4.10)$$

Assim, a matriz Γ apresentada em (2.20) e (4.8) foi reescrita sendo:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & \rho_T \\ u\rho_p & \rho & u\rho_T \\ -1 & \rho u & H\rho_T + \rho h_T \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Vale lembrar que todos os métodos pré-condicionadores clássicos usam $h_p = \frac{\partial h}{\partial p}$, que para gases perfeitos é sempre igual a zero. Talvez, por essa razão, h_p não tenha sido escolhido anteriormente como um parâmetro adicional de controle.

A nova formulação do parâmetro h_p impõe um cuidado especial. Na expressão de \hat{C}_1 (2.45), utilizado para cálculo dos autovalores do sistema pré-condicionado, existe uma divisão entre h_p e ρ_p . Além disso, de acordo com a equação (2.25), $\rho_P \sim \frac{1}{V_p^2}$, o que gera uma multiplicação entre V_p^2 e h_p . Como o parâmetro h_p pode atingir elevados valores para cancelar $H\rho_p$, podem surgir erros por cancelamento catastrófico na multiplicação entre V_p^2 e h_p quando o número de Mach é reduzido. Por isso, visando evitar a propagação desses erros, a fórmula de ρ_p apresentada em (2.25) foi modificada. Introduziu-se um novo parâmetro \bar{V}_p , como se segue:

$$\rho_P = \frac{1}{V_p^2} + \frac{\delta}{V_p^2} - \delta \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} \right) \quad (4.12)$$

A fórmula modificada de ρ_p apresentada em (4.12) é obtida relacionando h_p com \bar{V}_p da seguinte forma:

$$h_P = \frac{\partial h}{\partial T} / \left(\bar{V}_p^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \quad (4.13)$$

A expressão do novo parâmetro \bar{V}_p é obtida, substituindo-se a equação (4.12) na equação (4.10), e o resultado é substituído em (4.13), chegando a:

$$\bar{V}_p = V_p \sqrt{\rho \frac{\partial h}{\partial T} / \left(-H \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)} \sqrt{\left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} - \delta H \frac{\partial \rho}{\partial T} \right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} - \delta V_p^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)} \quad (4.14)$$

Com isso, o novo parâmetro \bar{V}_p possui dimensão de velocidade e tem magnitude da mesma ordem que V_p .

Após a definição da expressão analítica do parâmetro h_p , selecionado para minimizar o número de condicionamento da matriz Γ e a sensibilidade assintótica \hat{S}_a , o passo seguinte foi o estudo de minimização da razão de autovalores e da rigidez numérica \hat{R} .

Inicialmente investigou-se o impacto da nova formulação de h_p na razão de autovalores. Uma vez que em sistemas cujas matrizes são diagonais, o número de condicionamento é igual à razão dos autovalores, esperava-se que, mesmo em sistemas não diagonais, apesar de serem parâmetros independentes, houvesse uma relação entre o número de condicionamento e a razão de autovalores.

Substituindo a nova formulação de h_p , apresentada em (4.10), e a fórmula modificada de ρ_p , apresentada em (4.12), na expressão do coeficiente adicional \hat{C}_1 , dada em (2.45), usando as relações dos gases perfeitos, chegamos a:

$$\hat{C}_1 \simeq \frac{u}{2} \left(1 + \frac{V_p^2}{c^2} + \frac{H(\delta - 1)(C_p T + V_p^2 \rho)}{C_p T (C_p T + H \rho)} \right) \quad (4.15)$$

Em seguida, o parâmetro livre V_p da matriz pré-condicionadora Γ foi ajustado com base na formulação clássica de pré-condicionadores (VENKATESWARAN e MERKLE, 1999), ou seja,

$V_p = |u|$. Assim, a equação do coeficiente \hat{C}_1 apresentada em (4.15) foi reescrita da seguinte forma:

$$\hat{C}_1 \simeq \frac{u}{2} \left(1 + \frac{u^2}{c^2} + \frac{H(\delta-1)(C_p T + u^2 \rho)}{C_p T (C_p T + H \rho)} \right) \quad (4.16)$$

Por fim, realizou-se uma análise de perturbações na expressão do coeficiente \hat{C}_1 apresentada em (4.16), para baixos números de Mach, chegando a:

$$\hat{C}_1 \simeq \frac{u}{2} \left(1 + \frac{\delta-1}{\delta+1} \right) + O((u/c)^2) \quad (4.17)$$

O coeficiente \hat{C}_2 foi recalculado a partir da relação com o coeficiente \hat{C}_1 , apresentada em (2.46), e com o resultado obtido em (4.17), chegando a:

$$\hat{C}_2 \simeq u \sqrt{1 + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\delta-1}{\delta+1} \right)^2} + O((u/c)^2) \quad (4.18)$$

Analisando as expressões obtidas em (4.17) e (4.18), verifica-se que é possível relacionar o parâmetro livre δ da matriz pré-condicionadora Γ com a razão de autovalores e , com isso, com a rigidez numérica \hat{R} .

Para o caso em que $\delta = 0$ temos que:

$$\hat{C}_1 \simeq O((u/c)^2) \quad \text{e} \quad \hat{C}_2 \simeq u + O((u/c)^2) \quad (4.19)$$

obtendo

$$\hat{\lambda}_1 = u \quad , \quad \hat{\lambda}_2 = -u + O((u/c)^2) \quad \text{e} \quad \hat{\lambda}_3 = u + O((u/c)^2) \quad (4.20)$$

Calculando a rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ pela equação (2.47), chegamos a:

$$\hat{\mathbf{R}}(\delta = 0) \simeq 1 + O((u/c)^2) \quad (4.21)$$

Para o caso em que $\delta = 1$ temos que:

$$\hat{C}_1 \simeq \frac{u}{2} + O((u/c)^2) \quad \text{e} \quad \hat{C}_2 \simeq \frac{u}{2} \sqrt{5} + O((u/c)^2) \quad (4.22)$$

obtendo

$$\hat{\lambda}_1 = u \quad , \quad \hat{\lambda}_2 = u(1 - \sqrt{5}) + O((u/c)^2) \quad \text{e} \quad \hat{\lambda}_3 = u(1 + \sqrt{5}) + O((u/c)^2) \quad (4.23)$$

Calculando a rigidez numérica $\hat{\mathbf{R}}$ pela equação (2.47), chegamos a:

$$\hat{\mathbf{R}}(\delta = 1) \simeq \frac{\sqrt{5} + 1}{\sqrt{5} - 1} + O((u/c)^2) \simeq 2.618 \quad (4.24)$$

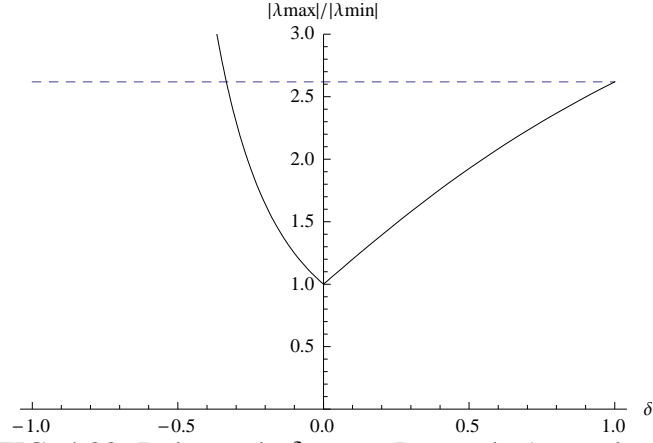


FIG. 4.23: Relação de δ com a Razão de Autovalores

A Figura (4.23) representa graficamente a relação entre o parâmetro δ da matriz Γ e a rigidez numérica \hat{R} . Claramente, pode-se verificar que a seleção $\delta = 0$ é a mais adequada para minimizar a razão de autovalores e a rigidez numérica \hat{R} .

De acordo com o trabalho de LEE (2005), o desacoplamento entre pressão e temperatura é desejável no processo de solução do sistema, uma vez que erros no cálculo da temperatura não seriam propagados para o cálculo da pressão. Além de minimizar a rigidez numérica, a escolha $\delta = 0$ também é adequada por promover esse desacoplamento, uma vez que a matriz pré-condicionadora Γ apresentada em (4.11) passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & 0 \\ u\rho_p & \rho & 0 \\ -1 & \rho u & \rho h_T \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

sendo facilmente identificado que a pressão pode ser calculada sem influência da temperatura, em função dos elementos nulos da matriz Γ e considerando que o vetor de variáveis primitivas \hat{Q} é dado por

$$\hat{Q} = (p_h, u, T)^T \quad (4.26)$$

É importante ressaltar que a formulação analítica do parâmetro h_p , inicialmente desenvolvida para minimização do número de condicionamento da matriz Γ , possibilitou também a minimização da razão de autovalores. Para isso, ajustou-se $V_p = |u|$ e $\delta = 0$.

Em resumo, a formulação da nova metodologia de simulação pode ser definida por:

$$h_P = -\frac{H}{\rho} \rho_p, \quad \rho_P = \frac{1}{V_p^2} + \frac{\delta}{V_p^2} - \delta \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} \right),$$

$$\bar{V}_p = V_p \sqrt{\rho \frac{\partial h}{\partial T} / \left(-H \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)} \sqrt{\left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} - \delta H \frac{\partial \rho}{\partial T} \right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T} - \delta V_p^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)}, \quad (4.27)$$

$$V_p = |u| \quad \text{e} \quad \delta = 0$$

4.3.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Visando manter a consistência na sequência da análise, da mesma forma que na seção anterior, foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente subsônico como caso teste.

Para obtenção da solução de regime permanente, na marcha no pseudo-tempo foi empregado o método de Euler Explícito. Este método é pouco utilizado devido à sua baixa eficiência. Entretanto, buscou-se um método de estabilidade linear numérica condicional, no qual se consiga trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia. Cada método foi implementado com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência desses métodos.

Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 201 pontos para garantir uma convergência de malha, obtendo uma solução que não evidencie qualquer erro gráfico quando comparada com a solução exata. As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com uso da MDP de 1ª ordem.

4.3.3 VALIDAÇÃO

Foram realizadas comparações entre as soluções analíticas de regime permanente do problema, fornecidas por ANDERSON (1995), e as soluções numéricas obtidas, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

As Figuras 4.24 e 4.25 mostram as comparações feitas em número de Mach, enquanto que as Figuras 4.26 e 4.27 mostram as comparações feitas na pressão. Pode-se verificar que, em função das propriedades físicas analisadas, todos os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

Entretanto, conforme é visto nas Figuras 4.28 e 4.29, a nova metodologia com h_p analítico não foi capaz de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado, apresentando erros significativos na solução de temperatura.

Para corrigir os erros encontrados na solução de temperatura, verifica-se a necessidade de modificação da nova metodologia. Contudo, apesar das soluções de temperatura possuírem significativos erros, será realizada uma análise de eficiência computacional da nova metodologia, por considerarmos uma fonte importante de comparações futuras.

4.3.4 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Para verificar a eficiência da nova fórmula de h_p na minimização do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ , implementou-se um método de otimização tendo

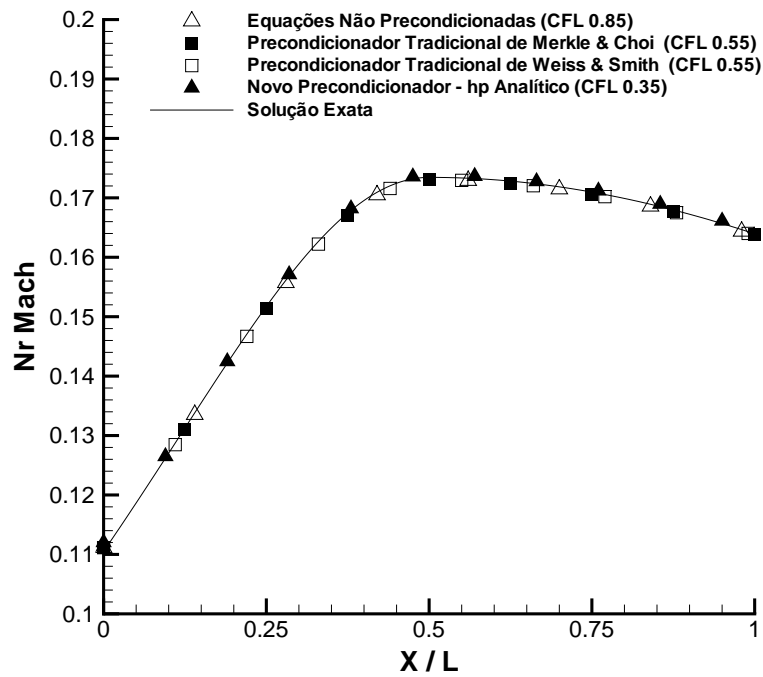


FIG. 4.24: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - Mach 10^{-1} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1^a ordem.

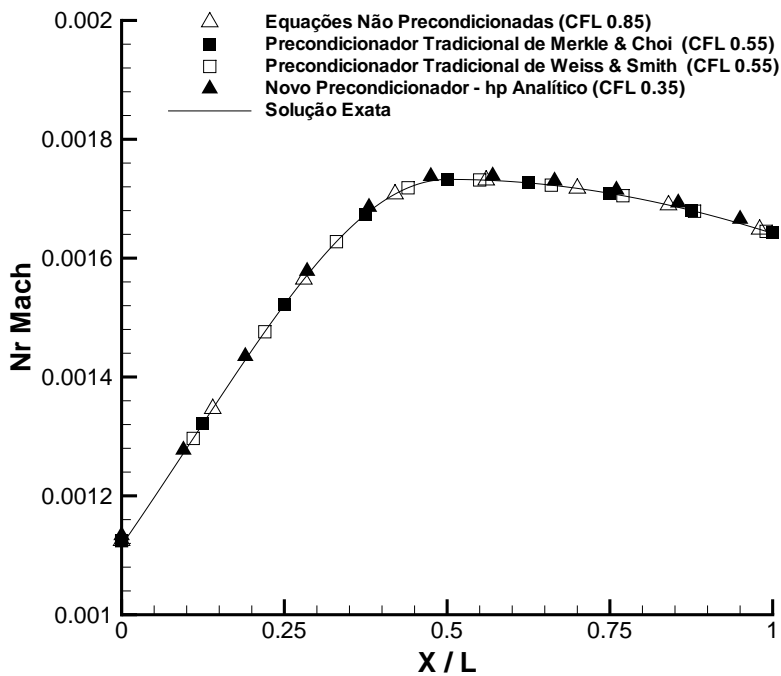


FIG. 4.25: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - Mach 10^{-3} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1^a ordem.

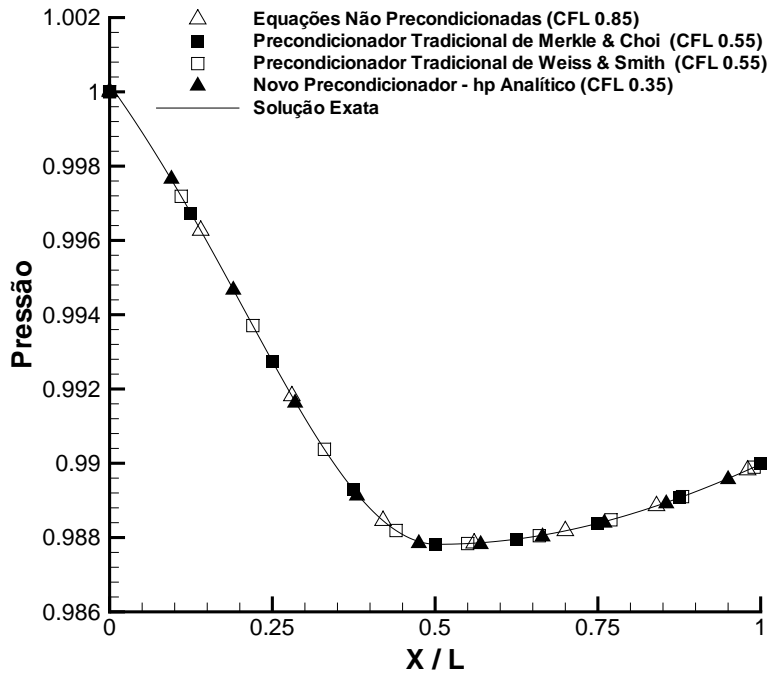


FIG. 4.26: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - Mach 10^{-1} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

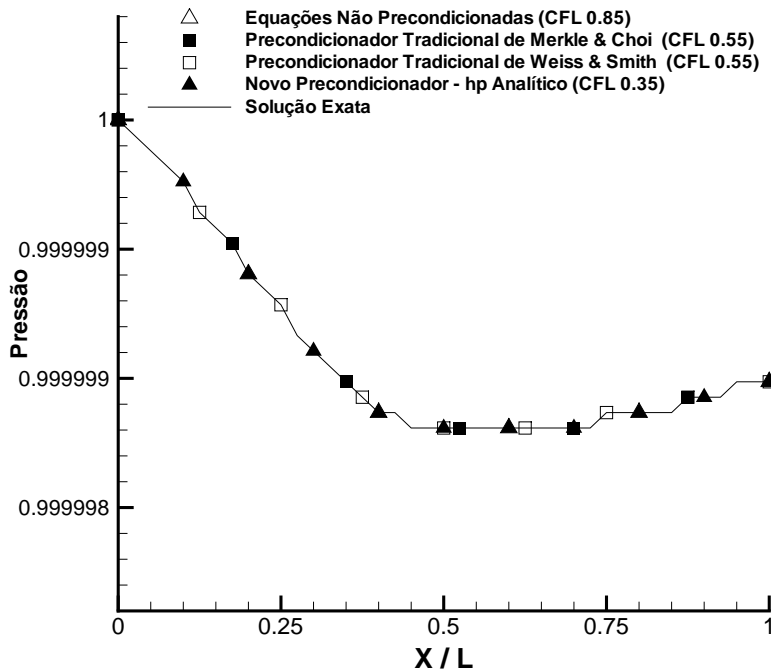


FIG. 4.27: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - Mach 10^{-3} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

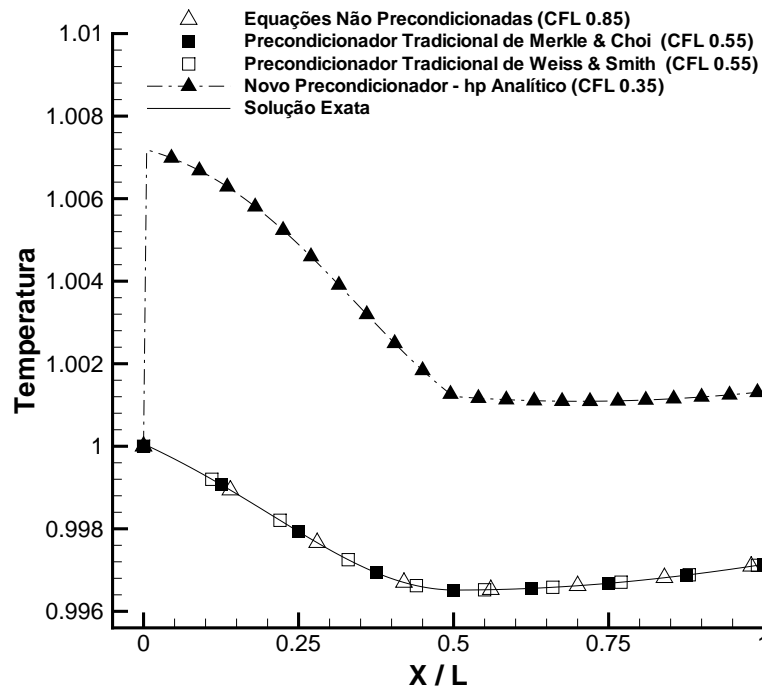


FIG. 4.28: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - Mach 10^{-1} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

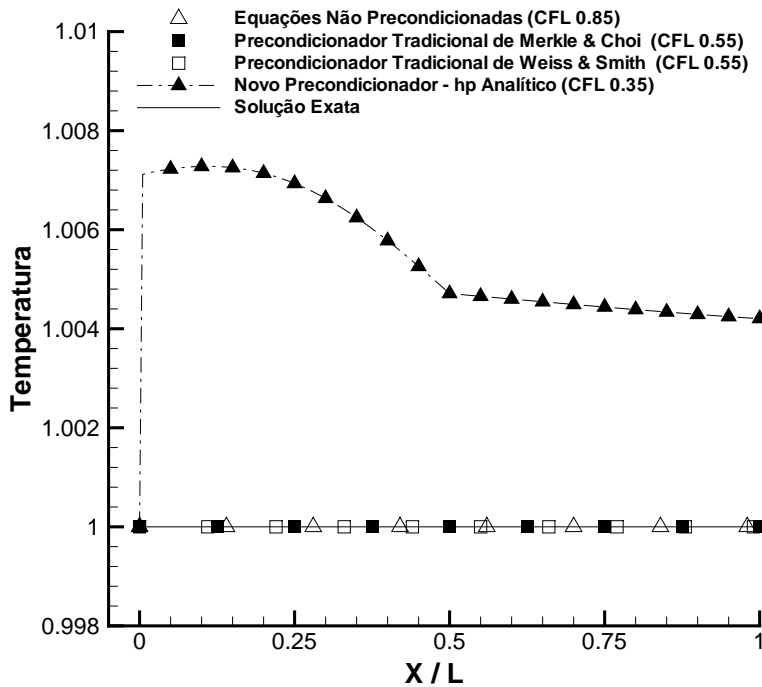


FIG. 4.29: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - Mach 10^{-3} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

como variável de projeto o parâmetro h_p e como função custo o número de condicionamento da matriz Γ . No processo de otimização de h_p , os parâmetros V_p e δ foram ajustados de acordo com a nova metodologia, ou seja:

$$V_p = |u| \quad \text{e} \quad \delta = 0 \quad (4.28)$$

Implementou-se o método de otimização de Powell, o qual tem sua formulação descrita detalhadamente no APÊNDICE A.

Adicionalmente, implementou-se um outro método de otimização, tendo como variável de projeto o parâmetro V_p e como função custo a razão dos autovalores. O objetivo é conseguir separar os efeitos da rigidez numérica e do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência. Para isso, a razão de autovalores foi limitada ao mesmo valor obtido pelo pré-condicionador clássico de VENKATESWARAN e MERKLE (1999), ou seja, aproximadamente 2.6. Assim os resultados obtidos por esse método de otimização de V_p , em comparação com os pré-condicionadores clássicos, somente são devidos ao número de condicionamento da matriz Γ , uma vez que a razão dos autovalores será a mesma. No processo de otimização de V_p , os parâmetros h_p e δ foram ajustados de acordo com a nova metodologia, ou seja:

$$h_p = -\frac{H}{\rho} \rho_p \quad \text{e} \quad \delta = 0 \quad (4.29)$$

Na análise de eficiência da nova metodologia, além da taxa de convergência da solução, avaliou-se a razão de autovalores, relacionada com o critério da Rigidez Numérica \hat{R} , o número de condicionamento da matriz Γ , relacionado com o critério da Sensibilidade Assintótica \hat{S}_a , e o número de condicionamento da matriz autovetores, relacionado com o critério da Sensibilidade Transitória \hat{S}_t .

A nova metodologia foi comparada com um esquema não pré-condicionado, com os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), com o método de otimização de h_p e com o método de otimização de V_p .

Inicialmente, foram realizadas experimentações numéricas para $M_0 = 10^{-1}$ e $M_0 = 10^{-3}$ com a finalidade de analisar a eficiência da nova metodologia. As Figuras ?? a 4.37 apresentam os resultados dessas simulações.

Nas Figuras ?? e ??, analisa-se o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . Verificamos que os resultados obtidos pela nova metodologia com h_p analítico foram significativamente menores do que os obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), sendo 3 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-1}$ e 6 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-3}$. Verifica-se que, quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença entre o número de condicionamento

da matriz Γ obtido pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Observamos ainda que o esquema não pré-condicionado também possui um número de condicionamento relativamente baixo em relação aos pré-condicionadores clássicos, sendo 2 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-1}$ e 4 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$. Comparando-se com a nova metodologia, o esquema não pré-condicionado possui um número de condicionamento 1 ordem de magnitude maior, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$. Em função dos resultados obtidos, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento do sistema, o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

Constata-se ainda a eficiência da nova fórmula de h_p na minimização do número de condicionamento da matriz Γ . A fórmula analítica de h_p obteve resultados semelhantes aos conseguidos pelo método de otimização de h_p , tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

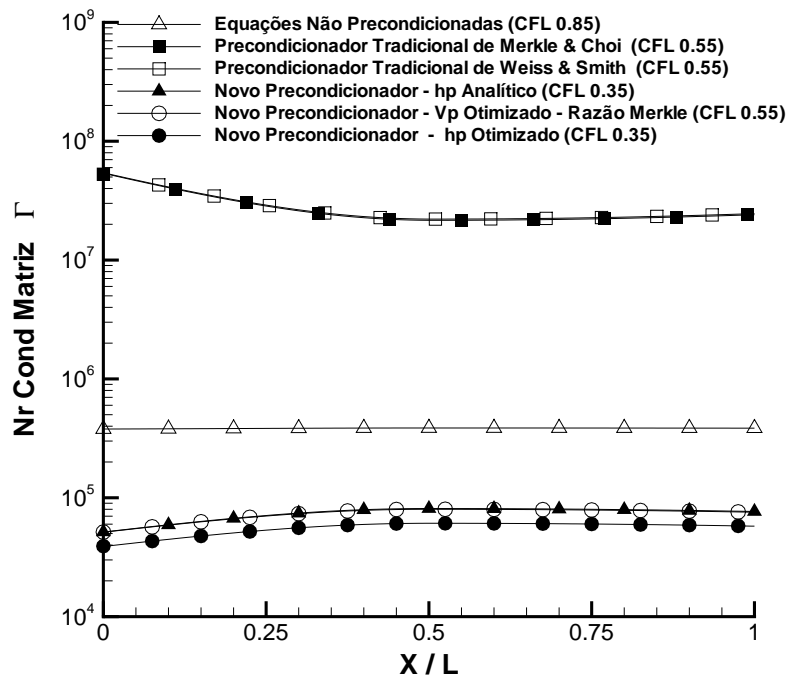


FIG. 4.30: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condicionamento Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Nas Figuras 4.32 e 4.33, avalia-se a razão dos autovalores do sistema. Verifica-se que a nova metodologia com h_p analítico conseguiu minimizar a razão dos autovalores (≈ 1), e com isso, minimizar a rigidez numérica $\hat{R} \approx 1$, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$. Observa-se que os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VEN-

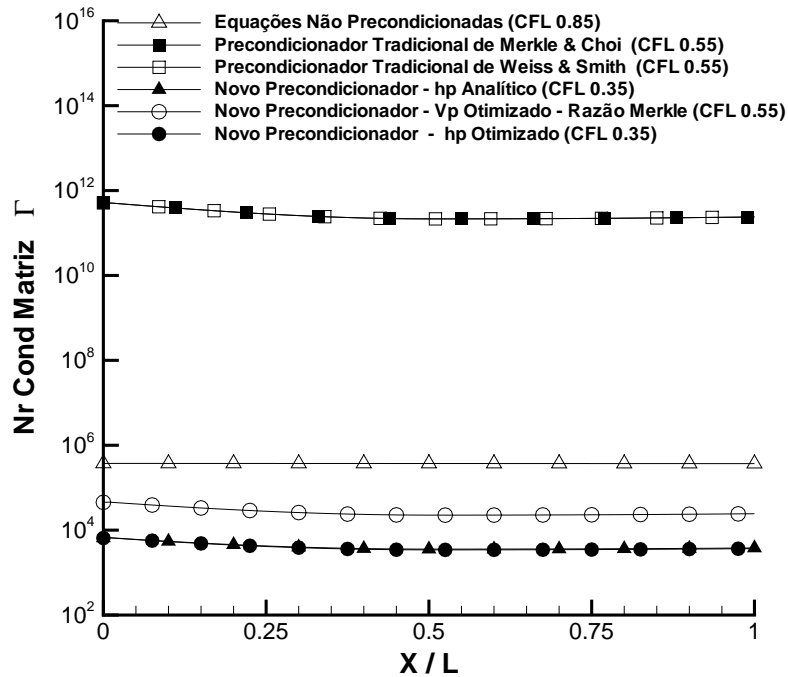


FIG. 4.31: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

KATESWARAN e MERKLE (1999) obtiveram uma razão de autovalores em torno de 2.6, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$. Verifica-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada para $M_0 = 10^{-1}$, e que a mesma cresce acentuadamente quando o número de Mach é reduzido para $M_0 = 10^{-3}$. Em função dos resultados obtidos, conclui-se que apesar do pré-condicionamento clássico reduzir significativamente a razão dos autovalores, a nova metodologia consegue um resultado ainda melhor, minimizando a diferença dos autovalores do sistema.

Verifica-se ainda que o método de otimização de V_p , implementado com o objetivo de separar os efeitos da rigidez numérica e do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência, obteve o resultado esperado, com a mesma razão de autovalores que os métodos clássicos, em torno de 2.6.

Nas Figuras 4.34 e 4.35, avalia-se o número de condicionamento da matriz de autovetores. Verifica-se que tanto a nova metodologia quanto os pré-condicionadores clássicos possuem elevados valores de número de condicionamento da matriz de autovetores em comparação ao obtido pelo esquema não pré-condicionado, sendo 1 ordem de magnitude maior para $M_0 = 10^{-1}$ e 3 ordens de magnitude maior para $M_0 = 10^{-3}$. Comprovou-se o que havia sido constatado no trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996), que os métodos pré-condicionadores possuem

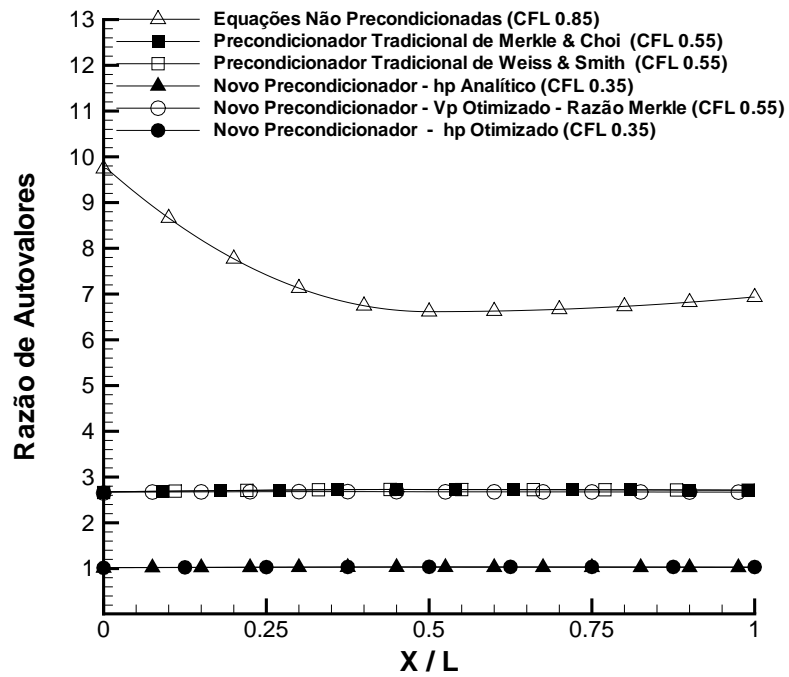


FIG. 4.32: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

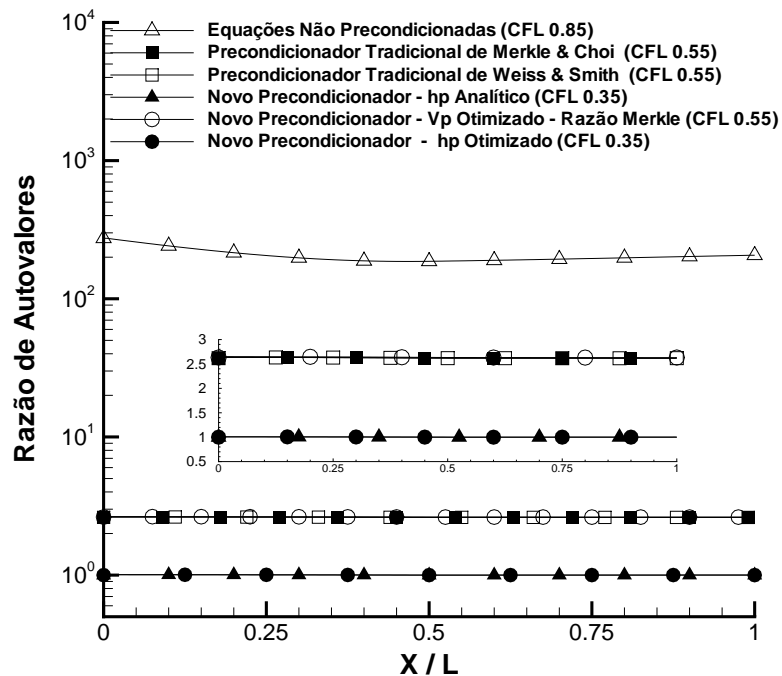


FIG. 4.33: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

autovetores pouco ortogonais para baixos valores de Mach, obtendo por este motivo elevados valores de número de condicionamento da matriz de autovetores.

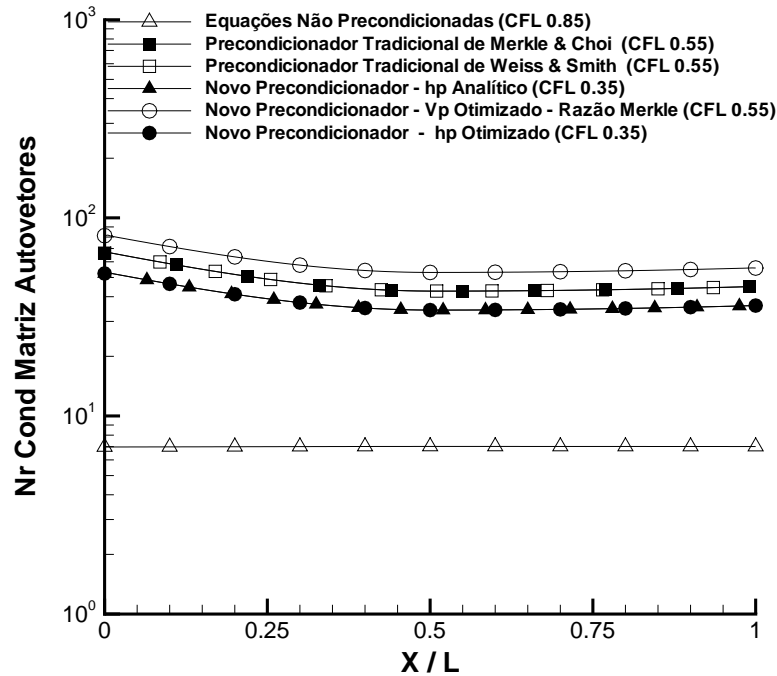


FIG. 4.34: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Nas Figuras 4.36 e 4.37, analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo, sendo ΔQ o vetor de variáveis primitivas apresentado em (2.22). As taxas de convergência dos métodos são inferidas a partir destes gráficos. Os resultados das simulações mostram que, para Mach $M_0 = 10^{-1}$, a nova metodologia com hp analítico foi a mais eficiente dentre as testadas. A nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.24, enquanto os pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.10, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 240 por cento. Para $M_0 = 10^{-3}$, a nova metodologia com hp analítico convergiu com uma taxa de 0.21, enquanto os métodos clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.08, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 270 por cento. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Além disso, pode-se observar a degradação da convergência do esquema não pré-condicionado para Mach $M_0 = 10^{-1}$, com uma taxa de 0.05 devido à elevada razão de autovalores, apesar dos baixos valores de número

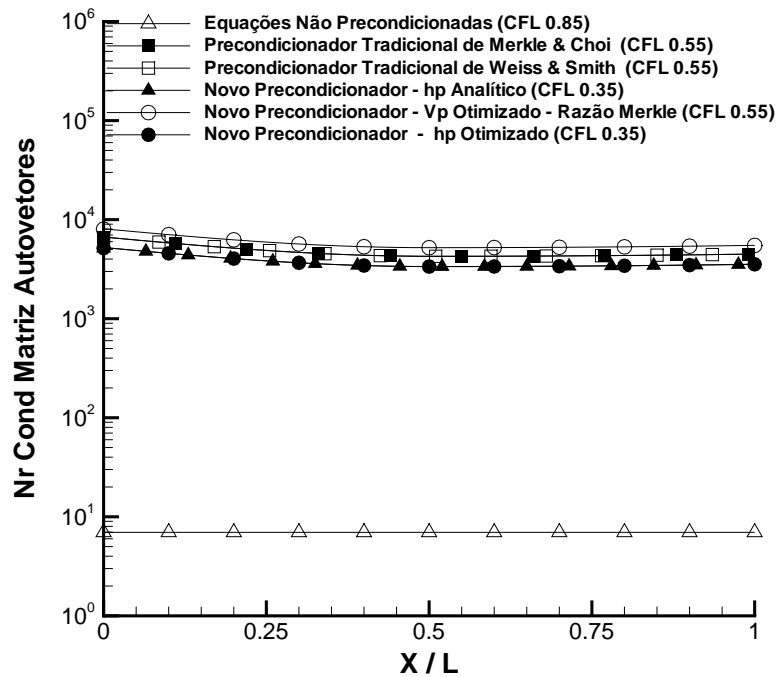


FIG. 4.35: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

de condicionamento da matriz Γ . Para $M_0 = 10^{-3}$, a dificuldade de convergência do esquema não pré-condicionado foi ainda amplificada.

Analisando os resultados obtidos pelo método com hp otimizado pode-se verificar que, para $M_0 = 10^{-1}$, a taxa de convergência obtida foi a mesma da nova metodologia com hp analítico. Para $M_0 = 10^{-3}$, a taxa de convergência obtida foi de 0.22, um pouco superior à taxa de 0.21 obtida pela nova metodologia com hp analítico. Entretanto, essa redução em número de iterações é pouco significativa comparada ao aumento de tempo computacional provocado pelo algoritmo de otimização de Powell. A formulação analítica de hp evita o custo computacional gerado pelo processo de otimização de Powell. O tempo computacional por iteração gasto pelo método com hp otimizado é da ordem de 10^{-2} segundos, enquanto que o custo do método com hp analítico é da ordem de 10^{-3} segundos, ou seja, 1 ordem de magnitude menor.

Observando os resultados obtidos pelo método com V_p otimizada pode-se verificar que, para $M_0 = 10^{-1}$, dos 240 por cento de aumento de taxa de convergência, 30 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 210 por cento foram gerados pela minimização da razão de autovalores. Já para $M_0 = 10^{-3}$, dos 270 por cento de aumento de taxa de convergência, 60 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 210 por cento continuaram sendo gerados pela minimização da razão de

autovalores. Conclui-se que a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos cresce com a redução do número de Mach. Conclui-se ainda que, para $M_0 = 10^{-1}$, a taxa de convergência da nova metodologia é principalmente influenciada pela minimização da razão de autovalores. Entretanto, conforme o número de Mach é reduzido para $M_0 = 10^{-3}$, maior se torna a influência da minimização do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência.

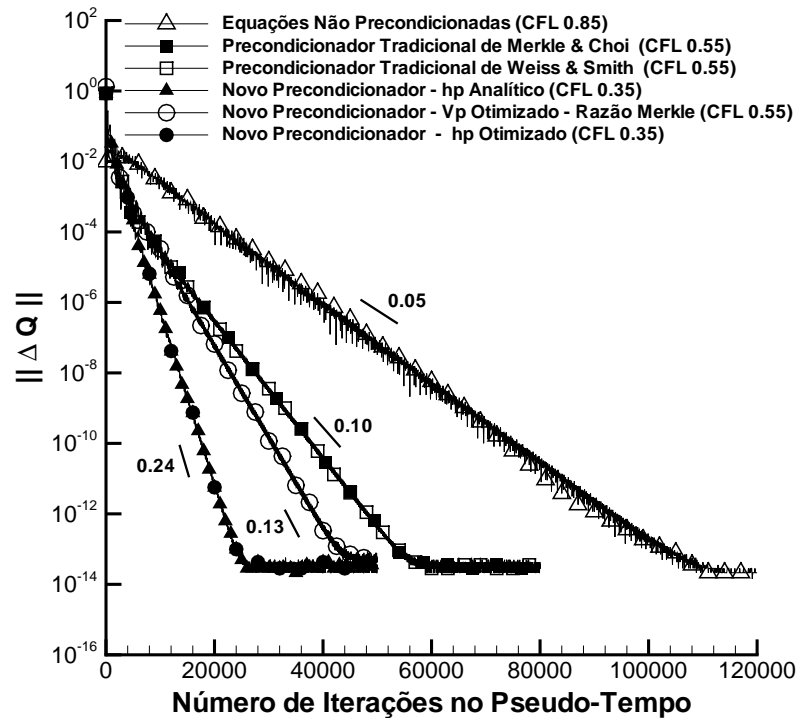


FIG. 4.36: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Uma outra importante análise a ser feita está relacionada com o crescimento do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ no transiente inicial do pseudo-tempo. As Figuras 4.38 e 4.39 mostram a evolução do erro absoluto da solução nos primeiros passos do pseudo tempo. Essas figuras servirão para indicarmos uma primeira forma de crescimento do erro no transiente inicial do pseudo-tempo, dentre outras. A primeira forma de crescimento do erro está relacionada com a posição do primeiro ponto do gráfico. Verifica-se que, para $M_0 = 10^{-1}$, o crescimento do erro do esquema não pré-condicionado é cerca de 10^{-2} enquanto que para todos os métodos pré-condicionados o crescimento é aproximadamente 10^{-1} . Para $M_0 = 10^{-3}$, o crescimento do erro do esquema não pré-condicionado está por volta de 10^{-4} enquanto que para todos os métodos pré-condicionados o crescimento inicial é cerca de 10^{-3} . Sendo assim, fica claro que o crescimento do erro dos métodos pré-condicionados é no mínimo 2 ordens de magnitude

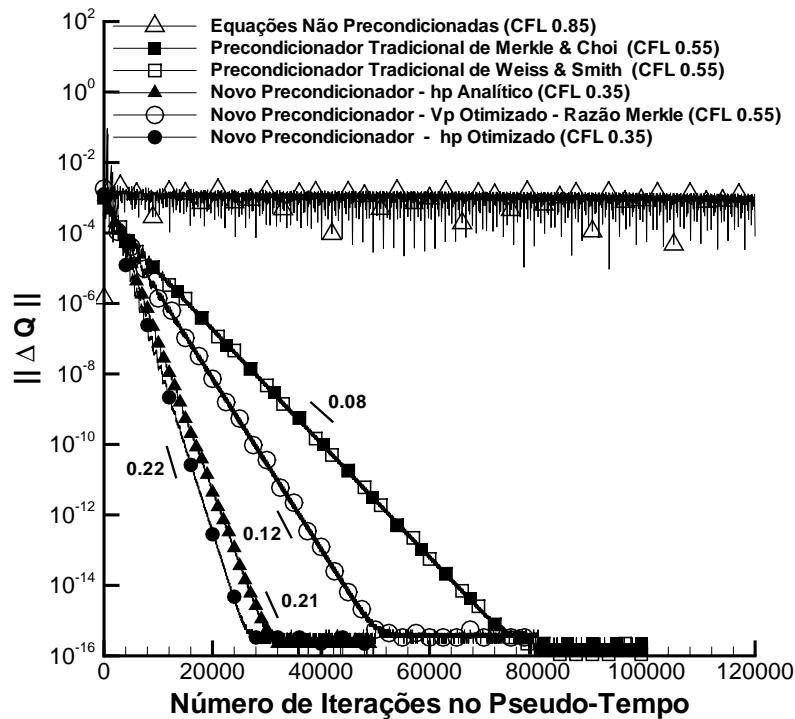


FIG. 4.37: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

maior do que o crescimento do esquema não pré-condicionado. Esses resultados podem ser associados ao que foi apresentado nas Figuras 4.34 e 4.35, onde se avaliou o número de condicionamento da matriz de autovetores. Foi verificado que tanto a nova metodologia quanto os pré-condicionadores clássicos possuem elevados valores de número de condicionamento da matriz de autovetores em comparação ao obtido pelo esquema não pré-condicionado. Dessa forma, há evidências de confirmação do que foi sinalizado por DARMOFAL e SCHMID (1996), que os autovetores dos métodos pré-condicionados são acentuadamente não ortogonais e, por isso, o erro da solução no transiente inicial do pseudo-tempo é amplificado. Especificamente, estamos tratando o transiente inicial do pseudo-tempo apenas como a posição do primeiro ponto do gráfico de erro.

Uma segunda forma de crescimento do erro da solução no transiente inicial do pseudo-tempo pode ser visualizada pela Figura 4.40. Implementou-se a nova metodologia para diferentes CFL, com $M_0 = 10^{-3}$. Analisa-se o comportamento da norma do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$. Através dos resultados verifica-se que, quanto maior é o CFL, maior é o crescimento do erro da solução em uma determinada região do transiente inicial do pseudo-tempo. Esse crescimento do erro é provocado por algumas perturbações que possuem módulo do ganho maior que 1 ($|G| > 1$). A medida que o CFL aumenta, o número de perturbações com $|G| > 1$

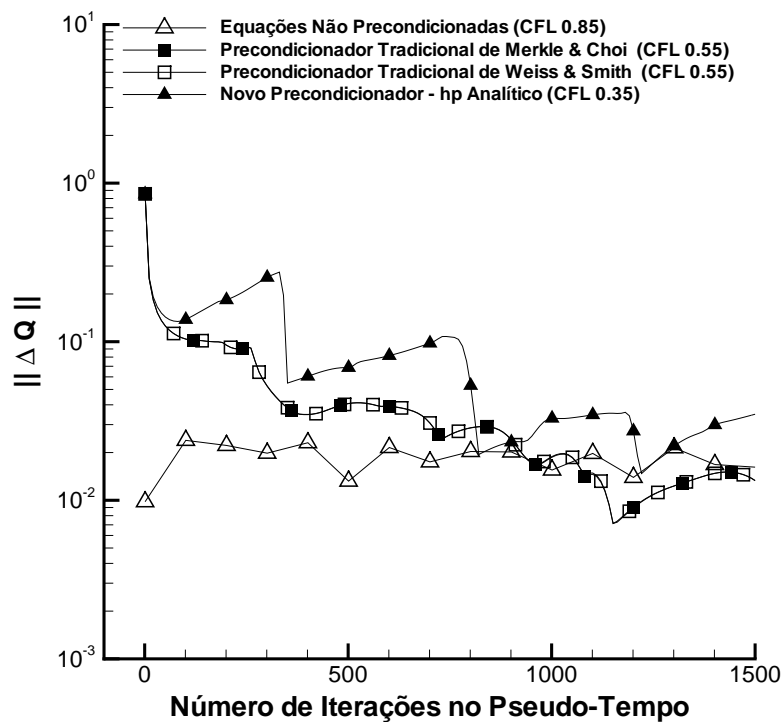


FIG. 4.38: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Transiente Inicial do Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

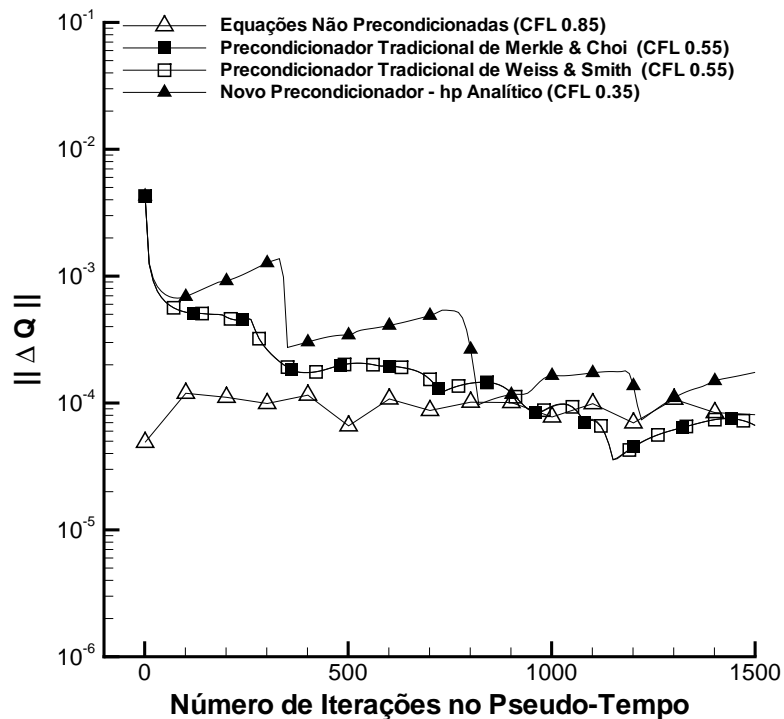


FIG. 4.39: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Transiente Inicial do Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

aumenta, até que o método numérico se torne instável.

Cabia ainda investigar a relação entre o crescimento inicial visualizado na Figura 4.40 e número de condicionamento da matriz de autovetores. A Figura 4.41 mostra a variação do número de condicionamento da matriz de autovetores, para os diferentes CFL, no instante do pseudo-tempo em que cada método passa pela região de instabilidade. Pode-se verificar que a variação do CFL não altera a ordem dos valores de número de condicionamento da matriz de autovetores. As oscilações verificadas na figura são relacionadas com o CFL instável. O resultados indicam que o número de condicionamento da matriz de autovetores não está relacionado com essa segunda forma de crescimento do erro da solução no transiente inicial do pseudo-tempo.

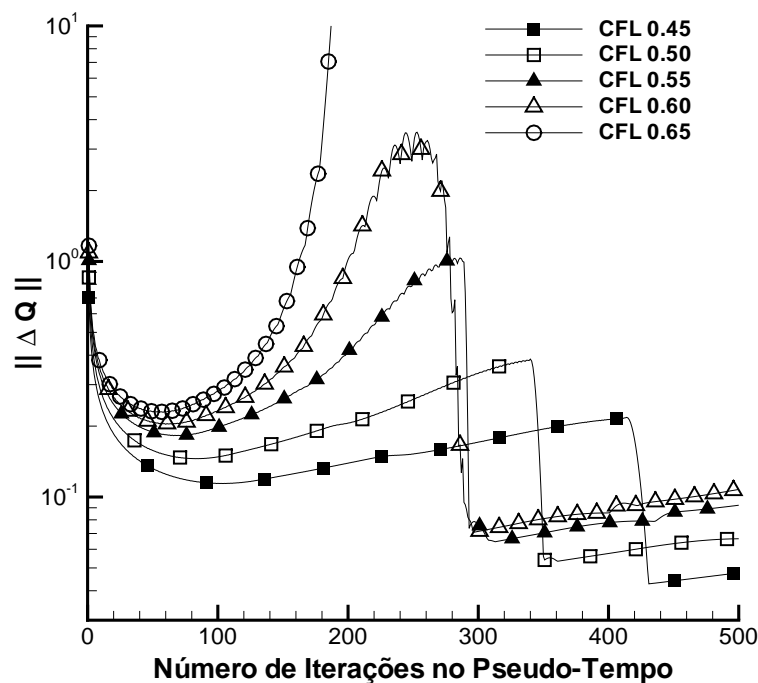


FIG. 4.40: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Como já foi visto, o trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996) sugeriu que os autovetores fossem escolhidos com a finalidade de minimização da não ortogonalidade dos mesmos para baixas velocidades de escoamento. Isso seria um possível caminho para evitar a amplificação de erros no transiente inicial do pseudo-tempo, evitando a primeira forma de crescimento do erro. Baseado no estudo de DARMOFAL e SCHMID (1996), foram realizadas simulações da nova metodologia usando diferentes autovetores, com $M_0 = 10^{-1}$. A Figura 4.42 apresenta os resultados obtidos de número de condicionamento da matriz de autovetores, para três diferentes autovetores. Na Figura, as três variantes da nova metodologia com os diferentes autovetores

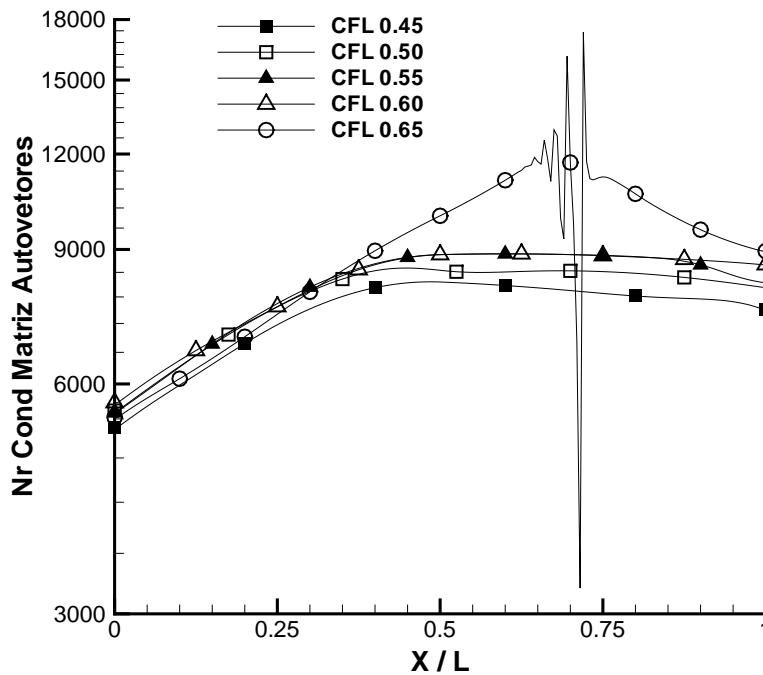


FIG. 4.41: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

são chamadas de novo pré-condicionador 1, 2 e 3. Os resultados mostram que, independentemente da escolha, os autovetores selecionados possuem sempre elevada não ortogonalidade para baixo número de Mach. Os valores obtidos de número de condicionamento da matriz de autovetores sempre são elevados comparando-se que o esquema não pré-condicionado. Dessa forma, verificam-se indícios de que o sugerido por DARMOFAL e SCHMID (1996) não consegue resolver o problema da amplificação de erros no transiente inicial da solução.

DARMOFAL e SCHMID (1996) também sugeriu que os parâmetros da matriz pré-condicionadora Γ fossem selecionados com a finalidade de redução do número de condicionamento da matriz de autovetores. Entretanto, existem evidências de que qualquer nova seleção dos parâmetros (h_p , V_p e δ), que não seja a adotada pela nova metodologia, prejudicaria a razão dos autovalores. Isto ocorreria porque a seleção proposta na nova metodologia é ótima, conseguindo minimizar a razão dos autovalores (≈ 1). Fica fácil verificar que não é compensatório prejudicar o ajuste da razão dos autovalores em prol de uma redução do número de condicionamento da matriz de autovetores. Basta analisarmos o esquema não pré-condicionado, o qual consegue um baixo número de condicionamento da matriz de autovetores, ao mesmo tempo que tem uma razão de autovalores elevada. Como já foi verificado nas análises de custo computacional, o esquema não pré-condicionado sofre com a degradação de sua taxa de convergência

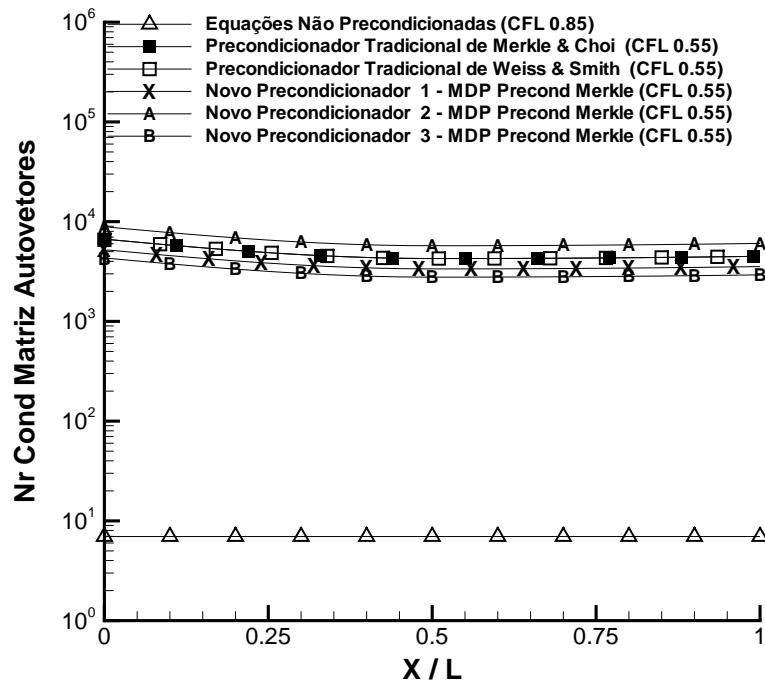


FIG. 4.42: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz de Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

quando o número de Mach é reduzido. Sendo assim, novamente verificam-se indícios de que o sugerido por DARMOFAL e SCHMID (1996) não consegue resolver o problema da amplificação de erros no transiente inicial da solução.

As Figuras 4.43 e 4.44 apresentam resultados obtidos para o número de condicionamento da matriz de autovetores em função da variação do parâmetro δ , para $M_0 = 10^{-1}$ e $M_0 = 10^{-3}$. Constata-se que a seleção $\delta = 0$ é bastante adequada, pois é a que gera o menor número de condicionamento da matriz de autovetores. Apesar disso, verifica-se que a seleção $\delta = 0$ não conseguiu reduzir a não ortogonalidade dos autovetores dos métodos pré-condicionados a valores da mesma ordem dos obtidos pelo esquema não pré-condicionado.

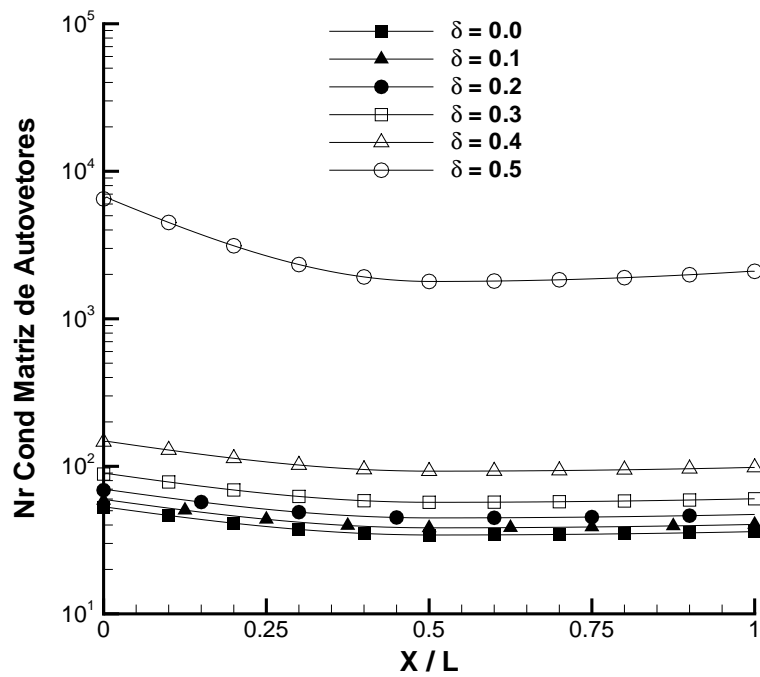


FIG. 4.43: Bocal Convergente-Divergente Subsônico, Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

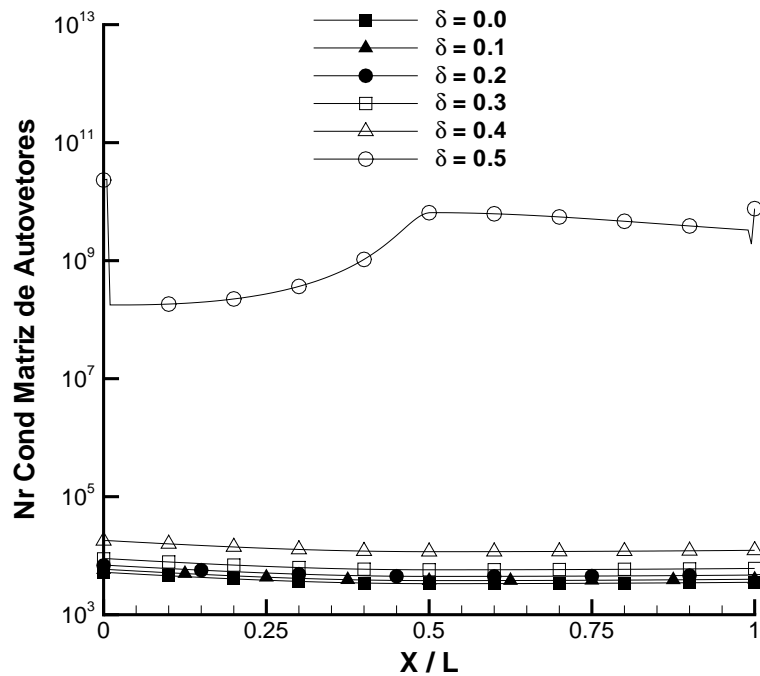


FIG. 4.44: Bocal Convergente-Divergente Subsônico, Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

4.4 TERCEIRA ETAPA DE DESENVOLVIMENTO DA NOVA METODOLOGIA

4.4.1 CORREÇÃO DA DISSIPACÃO ARTIFICIAL

A terceira fase de desenvolvimento da nova metodologia buscava corrigir os erros encontrados na solução da temperatura. A pesquisa se balizou na premissa de que, como todas as formulações foram escritas em forma incremental ou residual, a contribuição implícita influenciaria somente na taxa de convergência do método numérico (TANNEHILL et al., 1997). Assim, certamente a fonte geradora do erro na solução de temperatura estaria no lado explícito do sistema de equações.

Verificou-se que o erro na solução de temperatura estava vinculado à baixa dissipação na variável pressão hidrodinâmica. Constatou-se que a contribuição da pressão hidrodinâmica na dissipação é eliminada quando utilizamos a formulação analítica de h_p é empregada.

O entendimento do problema começa pelo conhecimento do esquema usado para a discretização espacial dos fluxos convectivos, o método da Matriz de Dissipação Pré-condicionada (MDP). Nesse método, emprega-se uma aproximação centrada com dissipação matricial pré-condicionada. Mudanças na matriz pré-condicionadora alteram a dissipação artificial.

A matriz pré-condicionadora Γ não modificada pela nova metodologia é dada por:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_p & 0 & 0 & \rho_T \\ u\rho_p & \rho & 0 & u\rho_T \\ v\rho_p & 0 & \rho & v\rho_T \\ H\rho_p - (1 - \rho h_p) & \rho u & \rho v & H\rho_T + \rho h_T \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

Como já foi visto, o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ da matriz Γ é proporcional a $1/M^2$. Quando a matriz Γ é multiplicada pela forma incremental do vetor de variáveis primitivas $\hat{Q} = (p_h, u, v, T)^T$, o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ é multiplicado pelo incremento da pressão hidrodinâmica p_h . Além disso, a pressão hidrodinâmica é proporcional a M^2 . Sendo assim, estaremos multiplicando um fator da ordem de $1/M^2$ por outro da ordem de M^2 , gerando uma dissipação da ordem de 1. Assim sempre haverá dissipação, independente do número de Mach que esteja sendo simulado.

Quando a formulação analítica de h_p é empregada, o termo $H\rho_p - (1 - \rho h_p)$ se torna igual a -1. Dessa forma, quando a matriz Γ é multiplicada pelo vetor de variáveis primitivas $\hat{Q} = (p_h, u, v, T)^T$, estaremos multiplicando um fator da ordem de 1 por outro da ordem de M^2 , gerando uma dissipação da ordem de M^2 . Assim, quando o número de Mach é reduzido, a dissipação é eliminada, causando erros na solução.

Após descobrirmos a fonte do problema, ajustou-se o método da Matriz de Dissipação

Pré-condicionada (MDP) usando o esquema de pré-condicionamento clássico de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) no cálculo da dissipação. Foram implementadas duas matrizes pré-condicionadoras. Para o lado explícito, a matriz com pré-condicionador clássico garante a acurácia da solução. Para o lado implícito, a matriz com a nova metodologia de pré-condicionamento busca o aumento da eficiência computacional do método numérico, que é o foco deste trabalho de Tese.

É importante esclarecer que a implementação de duas matrizes pré-condicionadoras não gera qualquer aumento de custo computacional, tratando-se apenas de uma questão de implementação do código computacional para correção da dissipação.

4.4.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Para manter a consistência na sequência da análise, da mesma forma que na seção anterior, foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente subsônico como caso teste.

Os resultados apresentados foram obtidos a partir da solução de regime permanente. Na marcha no pseudo-tempo foi empregado o método de Euler Explícito. Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 201. As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com uso da MDP de 1ª ordem.

Para facilitar o entendimento, chamaremos de “nova metodologia com h_p analítico” a metodologia proposta na seção anterior, com h_p analítico, porém sem correção no esquema da dissipação, pois utiliza somente uma matriz pré-condicionadora. Por outro lado, chamaremos de “nova metodologia com dissipação de Merkle” a metodologia proposta nesta seção, com h_p analítico, porém com correção no esquema da dissipação, pois utiliza duas matrizes pré-condicionadoras.

4.4.3 VALIDAÇÃO

Foram realizadas comparações entre as soluções analíticas de regime permanente do problema, fornecidas por ANDERSON (1995), e as soluções numéricas obtidas, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$. A validação do código computacional e do modelo matemático proposto analisa se estes são capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico que se deseja simular (OBERKAMPF, 2010).

As Figuras 4.45 e 4.46 mostram as comparações feitas em número de Mach, enquanto que as Figuras 4.47 e 4.48 mostram as comparações feitas na pressão. Compara-se a nova metodologia com h_p analítico com a nova metodologia com dissipação de Merkle. Pode-se verificar que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma

aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

As Figuras 4.49 e 4.50 mostram as comparações feitas na temperatura. Compara-se a nova metodologia com h_p analítico com a nova metodologia com dissipação de Merkle. Pode-se verificar que, após implementação da nova metodologia com dissipação de Merkle, os erros na solução de temperatura foram corrigidos.

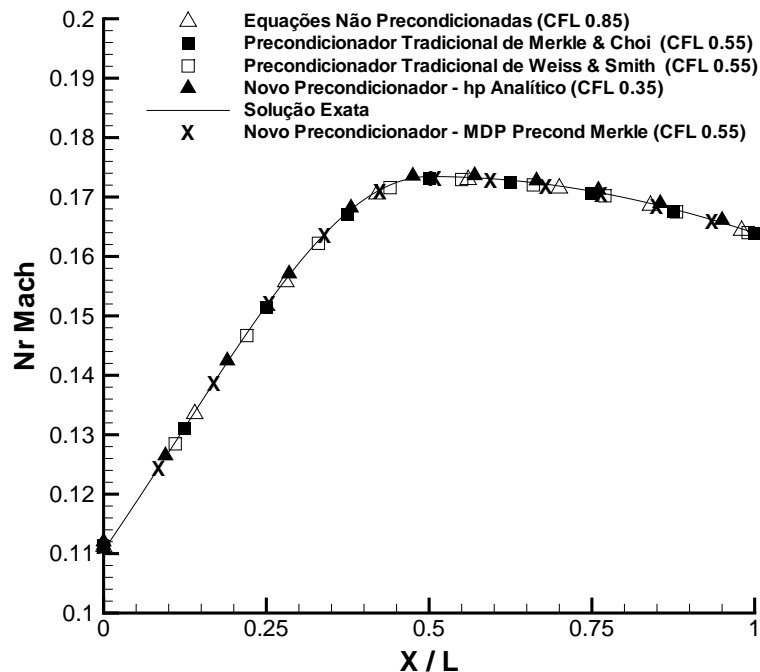


FIG. 4.45: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Foram realizadas validações para $M = 10^{-2}$ até $M = 10^{-7}$. Os resultados são apresentados no APENDICE B. Para velocidades de escoamento menores do que $M = 10^{-7}$, o erro absoluto da solução fica da mesma ordem da precisão de máquina, dificultando análises.

4.4.4 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Inicialmente, foram realizadas experimentações numéricas para $M_0 = 10^{-1}$ e $M_0 = 10^{-3}$ com a finalidade de analisar a eficiência da nova metodologia com correção da dissipação. As Figuras 4.51 a 4.58 apresentam os resultados dessas simulações.

Na análise de eficiência da nova metodologia com correção da dissipação, além da taxa de convergência da solução, avaliou-se a razão de autovalores, relacionada com o critério da Rigidez Numérica \hat{R} , o número de condicionamento da matriz Γ , relacionado com o critério da

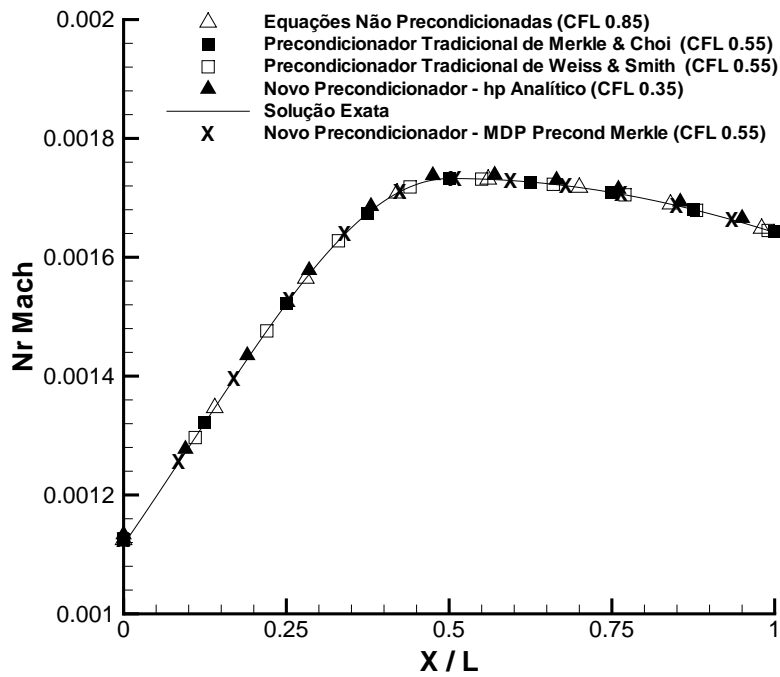


FIG. 4.46: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

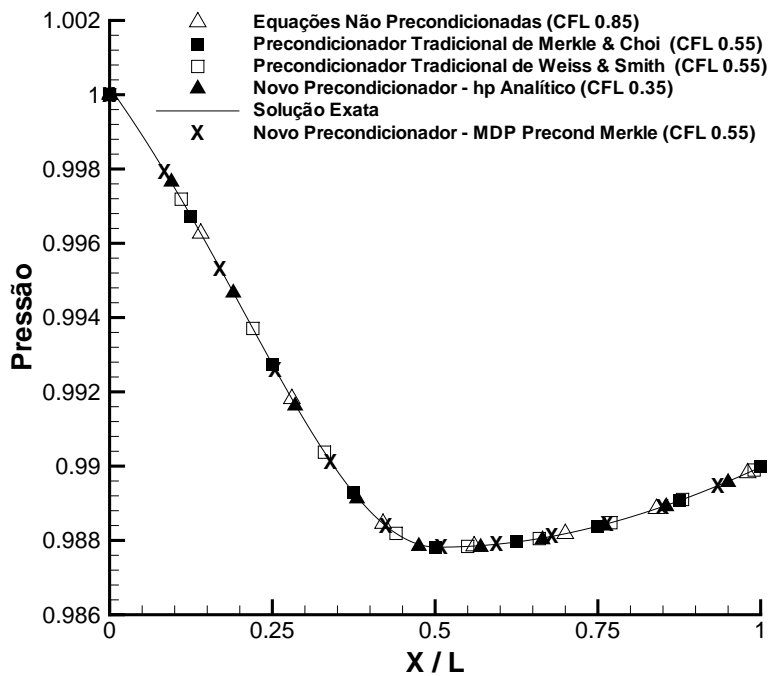


FIG. 4.47: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

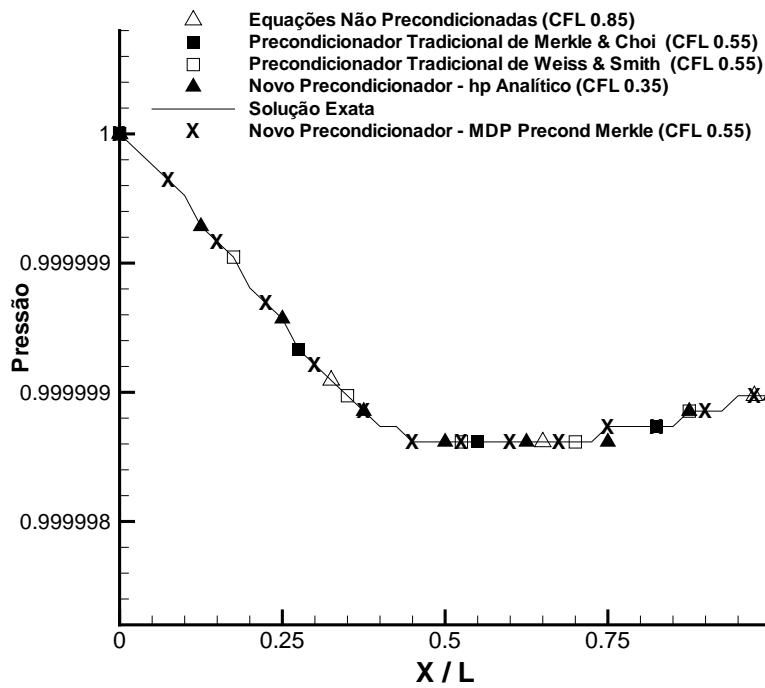


FIG. 4.48: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

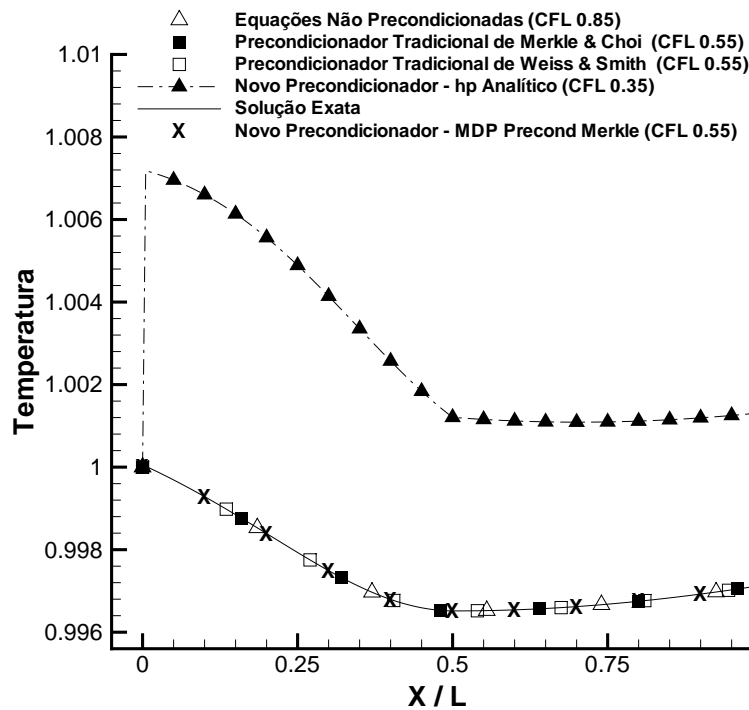


FIG. 4.49: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

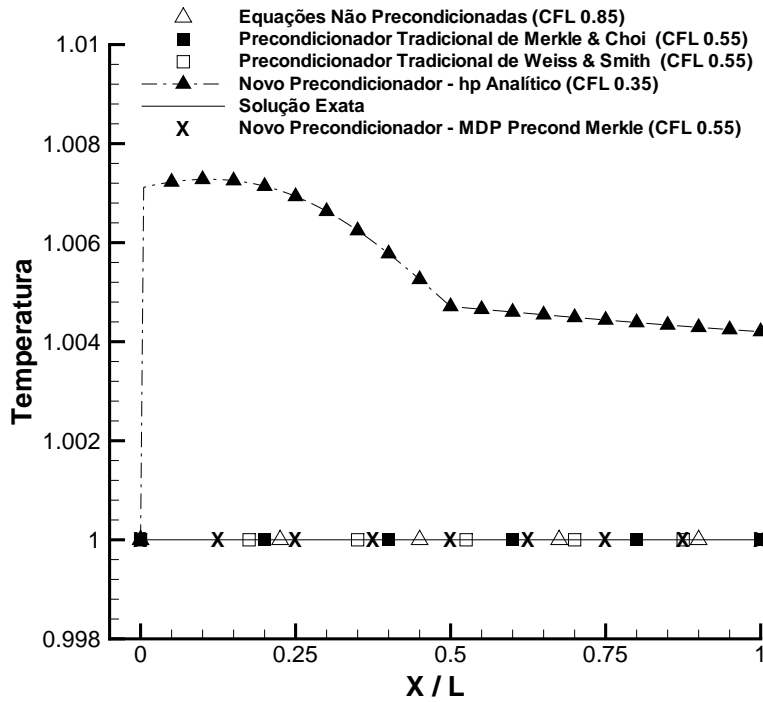


FIG. 4.50: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Sensibilidade Assintótica \hat{S}_a , e o número de condicionamento da matriz autovetores, relacionado com o critério da Sensibilidade Transitória \hat{S}_t .

A nova metodologia com correção da dissipação foi comparada com a nova metodologia sem correção da dissipação, além de um esquema não pré-condicionado e com os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Nas Figuras 4.51 e 4.52, analisa-se o número de condicionamento da matriz Γ . Verifica-se que a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve os mesmos valores da nova metodologia com h_p analítico, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

Nas Figuras 4.53 e 4.54, avalia-se a razão dos autovalores do sistema. Observa-se que a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve os mesmos valores da nova metodologia com h_p analítico, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

Nas Figuras 4.55 e 4.56, avalia-se o número de condicionamento da matriz de autovetores. Verifica-se que a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve os mesmos valores da nova metodologia com h_p analítico, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

Nas Figuras 4.57 e 4.58, analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo. As taxas de convergência dos

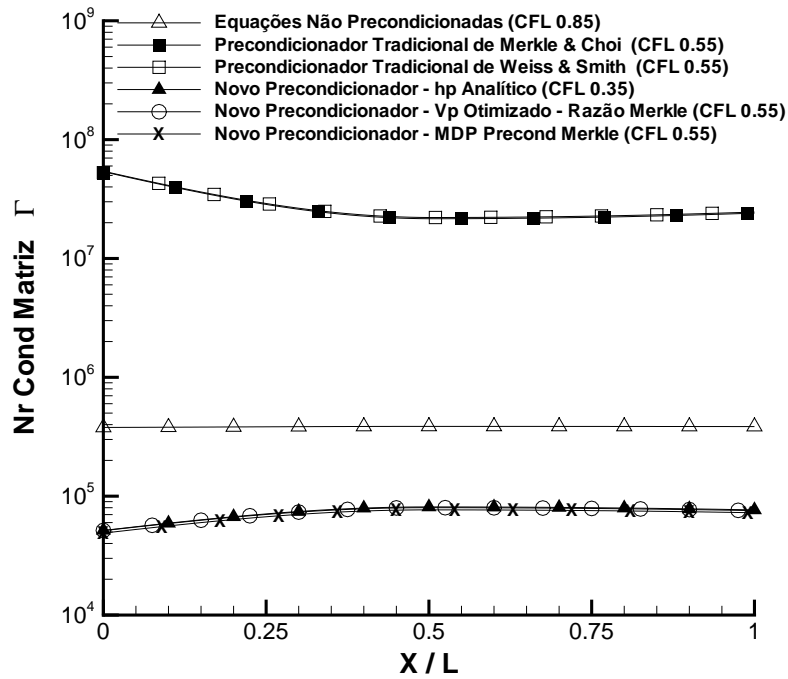


FIG. 4.51: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

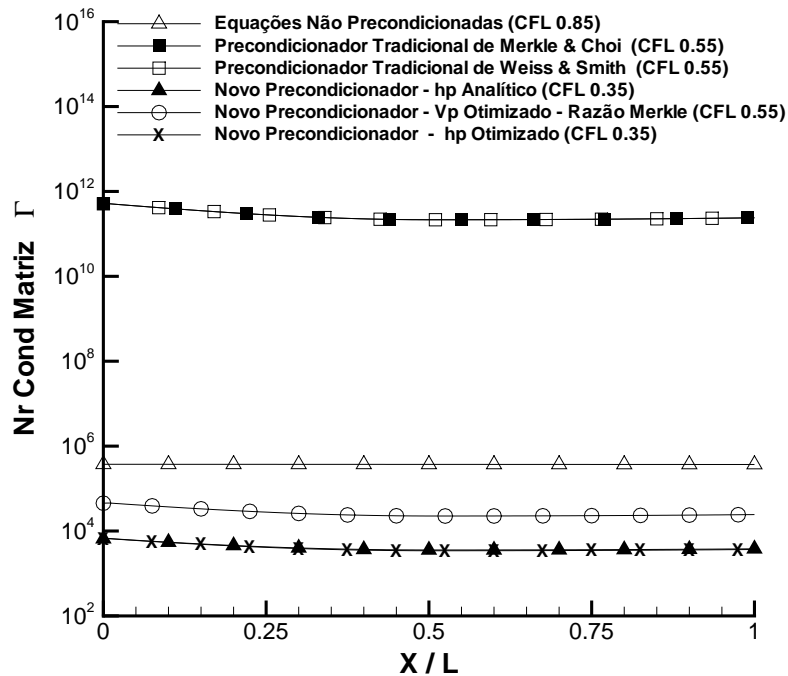


FIG. 4.52: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

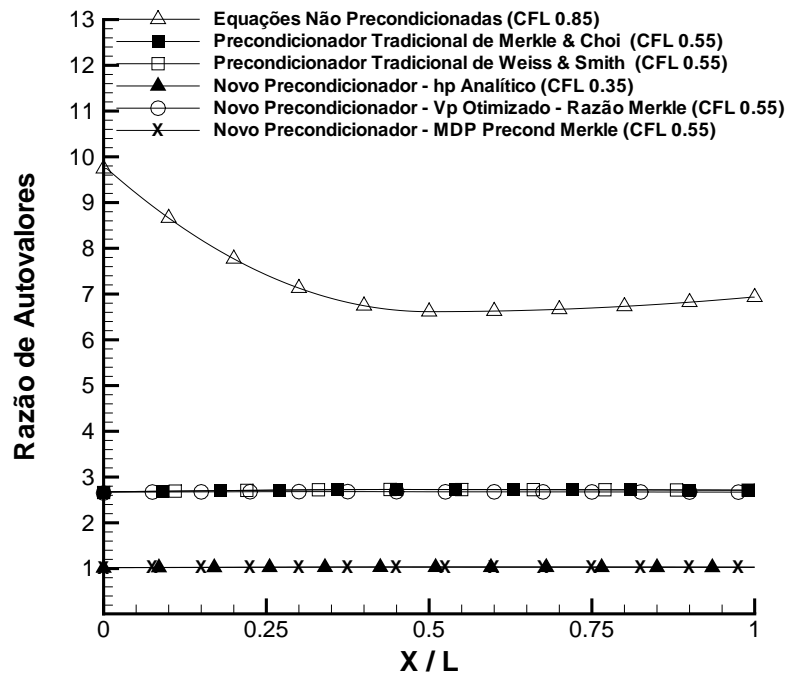


FIG. 4.53: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

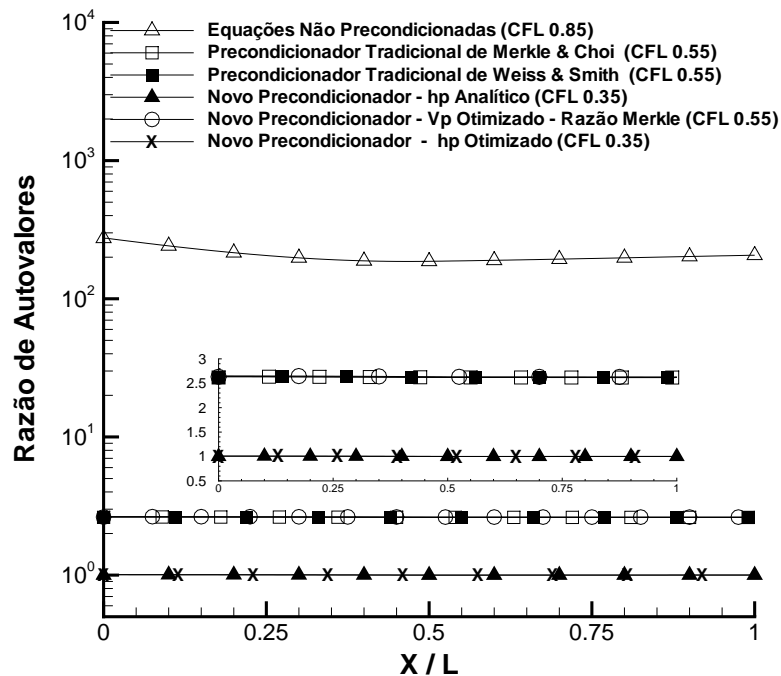


FIG. 4.54: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

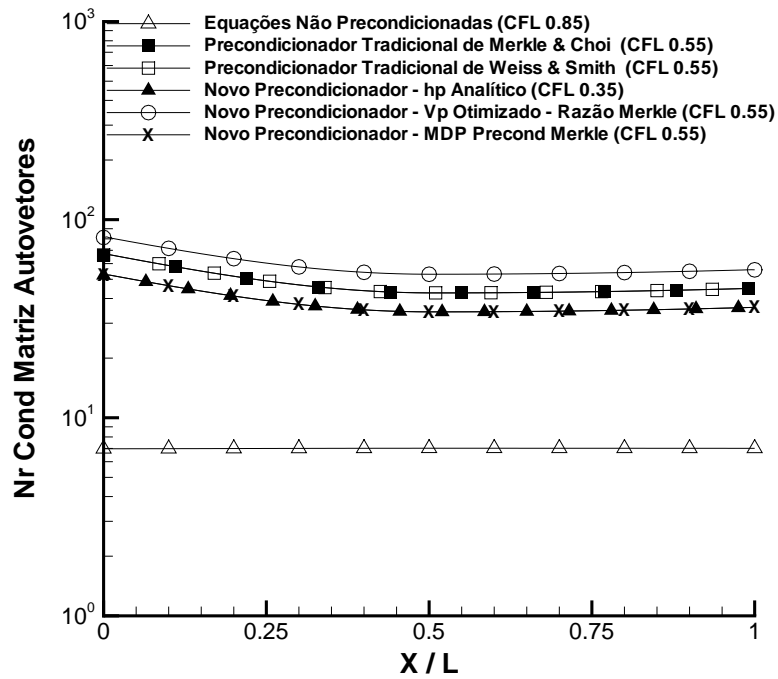


FIG. 4.55: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

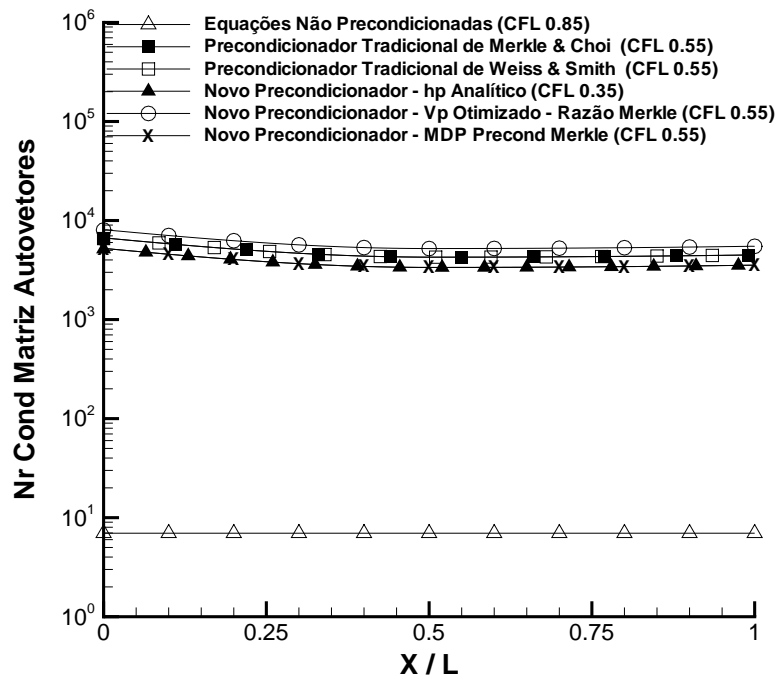


FIG. 4.56: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

métodos são inferidas a partir destes gráficos. Conforme o esperado, observa-se que a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve os mesmos valores da nova metodologia com h_p analítico, tanto para $M_0 = 10^{-1}$ quanto para $M_0 = 10^{-3}$.

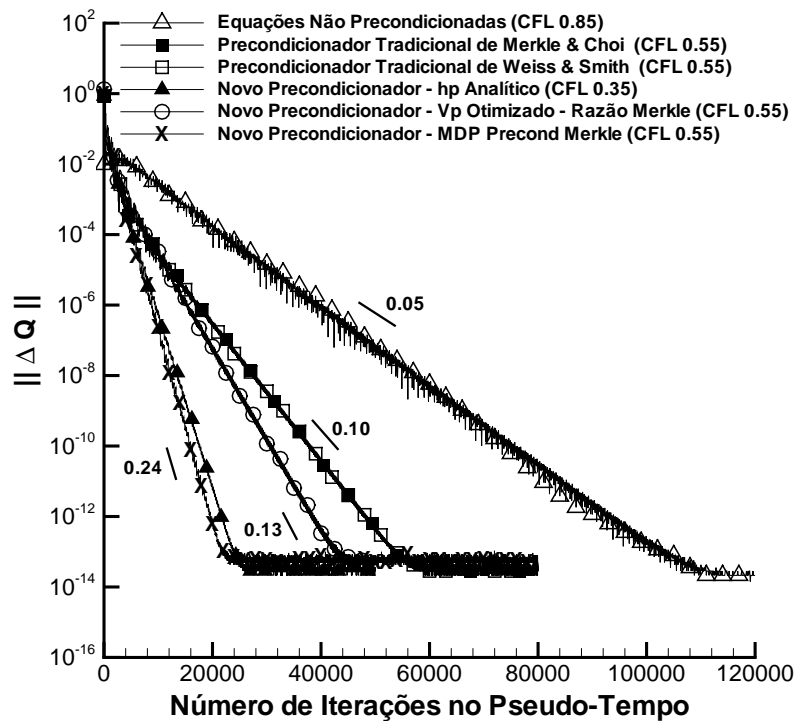


FIG. 4.57: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-1}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Foram realizadas simulações para $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$. Os resultados são apresentados no APENDICE B. Para velocidades de escoamento menores do que $M_0 = 10^{-7}$, o erro absoluto da solução fica da mesma ordem da precisão de máquina, dificultando análises.

Em função dos resultados obtidos pela nova metodologia, conseguindo um relevante aumento de taxa de convergência em relação aos pré-condicionadores clássicos, obtendo soluções fisicamente corretas, comprovou-se o que foi descrito por (TANNEHILL et al., 1997). A contribuição implícita influi somente na taxa de convergência do método numérico, enquanto que a contribuição explícita controla a acurácia da solução.

Como já foi visto, os resultados das simulações realizadas por LEE (2007) mostraram uma significativa redução na amplificação de erros, com significativo aumento da taxa de convergência dos métodos pré-condicionados empregados nas simulações. Entretanto, a consideração imposta no trabalho, $H\rho_p - (1 - \rho h_p) = 0$, se mostrou inadequada, uma vez que levou a soluções fisicamente incorretas. LEE (2007) não mostrou os motivos que o levaram a obter soluções fisicamente incorretas, tampouco como resolver esse problema de acurácia das soluções.

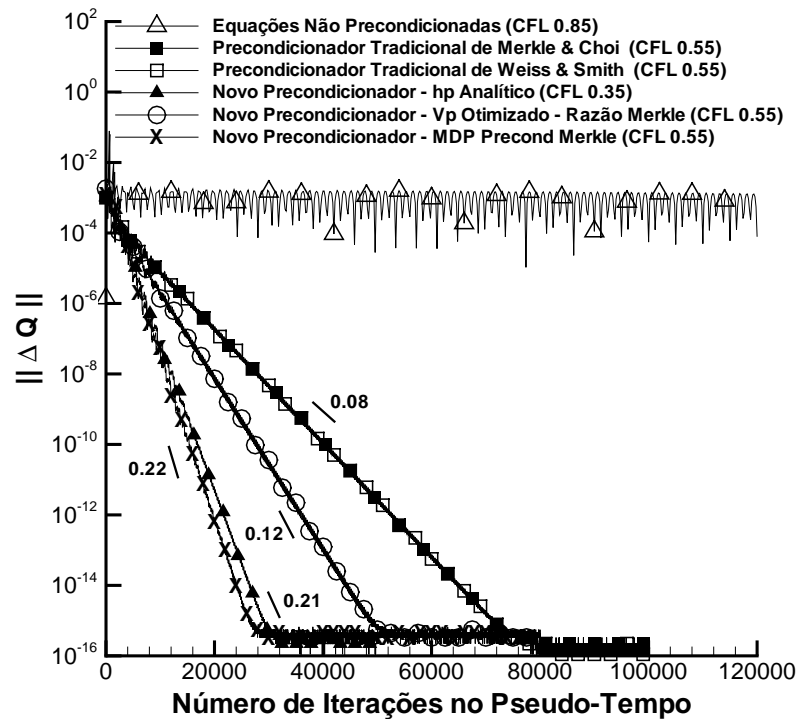


FIG. 4.58: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

Por isso, a obtenção de soluções acuradas pela correção da dissipação da nova metodologia, com implementação de uma segunda matriz pré-condicionadora, mantendo o aumento de taxa de convergência conseguido, representa um passo adiante ao trabalho de LEE (2007).

4.5 ADVECÇÃO NÃO VISCOSA DE UMA ONDA TÉRMICA

4.5.1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O problema da advecção não viscosa de uma onda térmica é um problema com solução de regime permanente e, além disso, permite o controle do número de Mach, podendo-se impor baixas velocidades ao escoamento. Por isso, o problema é ideal para ser utilizado como caso teste, uma vez que pretende-se analisar comportamentos de diferentes métodos numéricos estando os mesmos sujeitos à baixos números de Mach. Além disso, a advecção não viscosa será utilizada como estágio intermediário para implementação da advecção viscosa, que irá possibilitar análises a respeito da influência da viscosidade na nova metodologia de pré-condicionamento. Por fim, diferentemente do problema do difusor, na advecção da onda térmica o método de Euler Implícito mostrou ter estabilidade numérica condicional. Por isso, se conseguiu trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia.

O fenômeno físico foi caracterizado como um escoamento unidimensional e não viscoso de um fluido newtoniano, compressível e termicamente perfeito. A sua particularidade está na condição de contorno de entrada da temperatura que induz uma onda térmica pelo domínio e será abordada na sequência desta seção. O problema foi modelado pelas equações de Euler unidimensionais.

A Figura 4.59 ilustra a função da temperatura de entrada (T_1) para um caso particular considerando-se $T_0 = 300K$ e $T_s = 100K$:

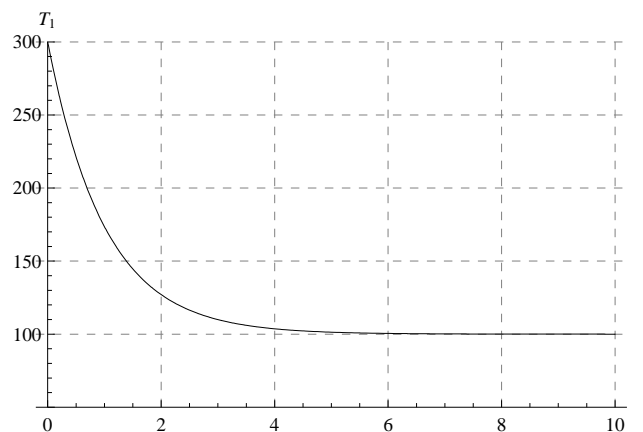


FIG. 4.59: Função da Temperatura de Entrada

Em regime permanente, a solução de temperatura converge para T_s , enquanto que pressão e velocidade permanecem constantes.

Para obtenção da solução de regime permanente, para marcha no pseudo-tempo, utilizou-se o método Euler Implícito, o qual mostrou ter estabilidade numérica condicional para este problema. Por isso, se conseguiu trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia. Apesar do uso de um método implícito, cada método foi implementado com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência desses métodos.

As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram feitas com uso da MDP de 3ª ordem. Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 101 pontos.

O problema permitirá avaliar o comportamento da nova metodologia perante ao uso de discretizações espaciais de 3ª ordem e de um método de marcha implícito.

Como condição inicial, para os pontos do domínio espacial considerou-se:

- pressão total constante $p_0 = 10^5 N/m^2$;
- temperatura constante $T_0 = 300K$;
- razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes $\gamma = C_p/C_v = 1.4$;
- velocidade do som na entrada $c_0 = \sqrt{\gamma RT_0}$;
- número de Mach $M_0 = 10^{-1} a 10^{-5}$;
- velocidade do escoamento $U_0 = M_0 C_0$.

As condições de contorno na entrada e na saída do domínio ($i = 1$) e ($i = N$) foram definidas da seguinte forma:

- para a pressão hidrodinâmica $\frac{\partial p_h}{\partial x} \Big|_1 = 0$ e $p_h|_N = p_0$;
- para a velocidade $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_1 = 0$ e $u|_N = U_0$;
- para a temperatura $\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_N = 0$.

A condição de contorno da temperatura na entrada do domínio para a seção varia conforme a função exponencial temporal descrita abaixo:

$$T_1(\tau) = e^{-\tau}(T_0 - T_s) + T_s, \text{ com } T_0 > T_s \quad (4.31)$$

4.5.2 VALIDAÇÃO

A Figura 4.60 mostra a evolução da solução de temperatura da nova metodologia no pseudo-tempo. As variáveis pressão e velocidade permanecem constantes. Pode-se observar que a temperatura convergiu para $T/T_0 \approx 0.33$.

Como já foi visto, em regime permanente, a solução analítica de temperatura do problema converge para T_s , enquanto que pressão e velocidade permanecem constantes. Dessa forma, considerando que nas simulações adotou-se $T_0 = 300K$ e $T_s = 100K$, pode-se afirmar que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

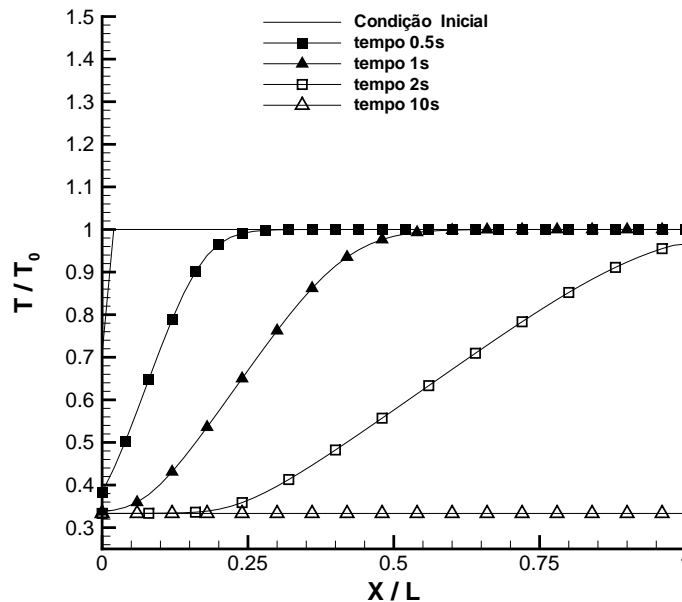


FIG. 4.60: Advecção Não Viscosa de Onda Térmica, Evolução da Solução de Temperatura no Pseudo-Tempo - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.

4.5.3 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Foram realizadas experimentações numéricas para $M = 10^{-2}$ e $M = 10^{-4}$ com a finalidade de verificar possíveis diferenças de comportamento em relação aos resultados obtidos no problema do bocal subsônico. As experimentações com $M = 10^{-5}$ ou menores não são apresentadas, haja visto terem resultados análogos aos obtidos em $M = 10^{-4}$. As Figuras 4.61 a 4.68 apresentam os resultados das simulações realizadas.

Na análise de eficiência da nova metodologia com correção da dissipação, além da taxa de convergência da solução, avaliou-se a razão de autovalores, relacionada com o critério da Ri-

gidez Numérica \hat{R} , o número de condicionamento da matriz Γ , relacionado com o critério da Sensibilidade Assintótica \hat{S}_a , e o número de condicionamento da matriz autovetores, relacionado com o critério da Sensibilidade Transitória \hat{S}_t .

A nova metodologia com dissipação de Merkle foi comparada com um esquema não pré-condicionado e com os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Nas Figuras 4.61 e 4.62, analisa-se o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . Verifica-se que os resultados obtidos pela nova metodologia foram significativamente menores do que os obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), sendo 3 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$ e 5 ordens de magnitude menor para $M = 10^{-4}$. Verifica-se ainda que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença entre o número de condicionamento da matriz Γ obtido pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Observa-se que o esquema não pré-condicionado também possui um número de condicionamento relativamente baixo em relação aos pré-condicionadores clássicos, sendo 2 ordens de magnitude menor para $M = 10^{-2}$ e 4 ordens de magnitude menor para $M = 10^{-4}$. Entretanto, comparando-se com a nova metodologia, o esquema não pré-condicionado possui um número de condicionamento 1 ordem de magnitude maior. Dessa forma, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento do sistema, o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

Nas Figuras 4.63 e 4.64, avalia-se a razão dos autovalores do sistema. Verifica-se que a nova metodologia conseguiu minimizar a razão dos autovalores, e com isso, minimizar a rigidez numérica $\hat{R} \approx 1$, tanto para $M = 10^{-2}$ quanto para $M = 10^{-4}$. Observa-se que os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obtiveram uma razão de autovalores em torno de 2.6, tanto para $M = 10^{-2}$ quanto para $M = 10^{-4}$. Constata-se que método de otimização de V_p , que será usado para separar os efeitos da rigidez numérica e do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência, obteve o resultado esperado, com razão de autovalores em torno de 2.6. Verifica-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada para $M = 10^{-2}$, e que a mesma cresce acentuadamente quando o número de Mach é reduzido para $M = 10^{-4}$. Dessa forma, conclui-se que apesar do pré-condicionamento clássico reduzir significativamente a razão dos autovalores, a nova metodologia consegue um resultado ainda melhor, minimizando a disparidade dos autovalores do sistema.

Nas Figuras 4.65 e 4.66, avalia-se o número de condicionamento da matriz de autovetores. Verifica-se que tanto a nova metodologia quanto os pré-condicionadores clássicos de

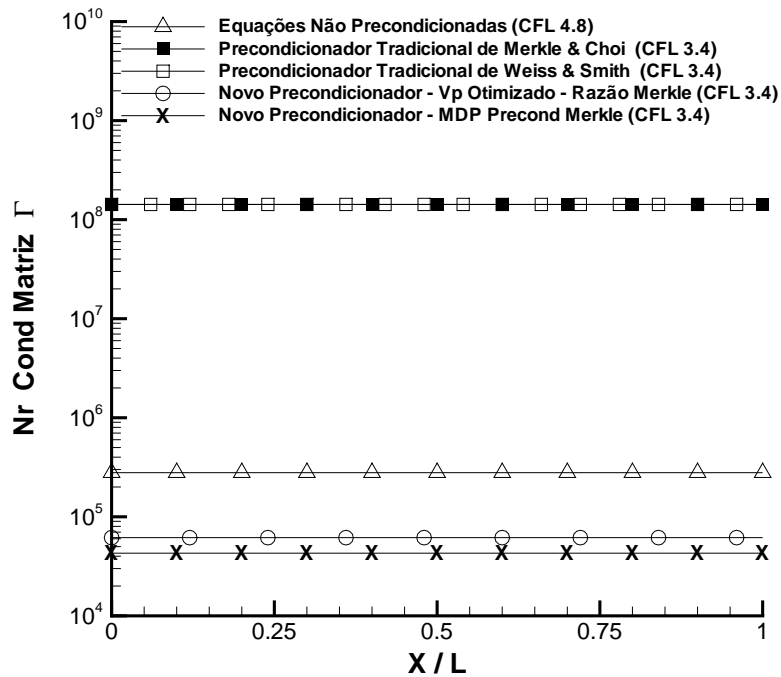


FIG. 4.61: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Γ - Mach 10^{-2} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.

WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) possuem maiores valores de número de condicionamento da matriz de autovetores em comparação ao esquema não pré-condicionado, sendo duas vezes maior para $M = 10^{-2}$ e 1 ordem de magnitude maior para $M = 10^{-4}$. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença entre o número de condicionamento da matriz de autovetores obtido pelo esquema não pré-condicionado e pelos métodos pré-condicionadores. Comprovou-se o que havia sido constatado no trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996), que os métodos pré-condicionadores possuem autovetores pouco ortogonais para baixos valores de Mach, obtendo por este motivo elevados valores de número de condicionamento da matriz de autovetores.

Nas Figuras 4.67 e 4.68, analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo. As taxas de convergência dos métodos são inferidas a partir destes gráficos. Os resultados das simulações mostram que, para Mach $M = 10^{-2}$, a nova metodologia foi a mais eficiente dentre as testadas. A nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.22, enquanto os pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.11, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 100 por cento. Para $M = 10^{-4}$, a nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.20, enquanto os métodos clássicos de WEISS e SMITH

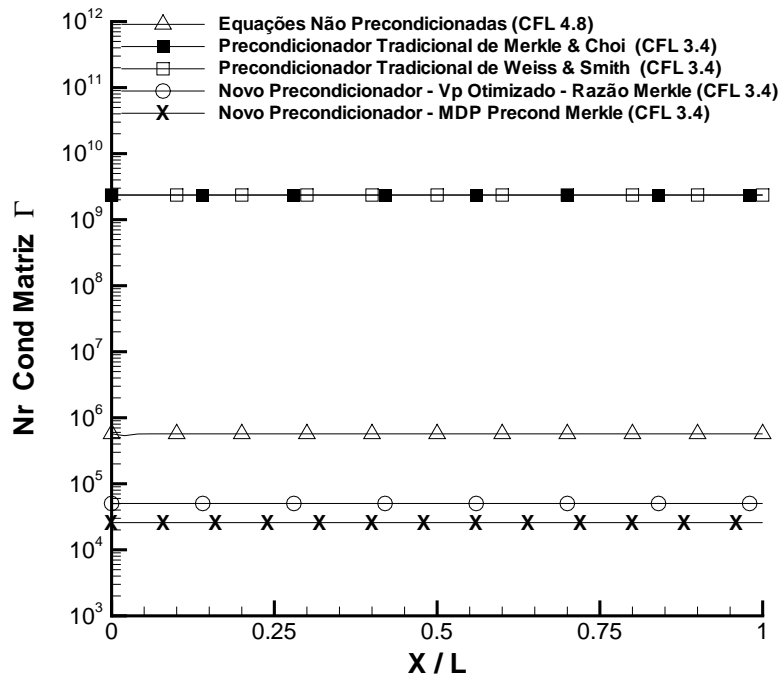


FIG. 4.62: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condiç Matriz Γ - Mach 10^{-4} - Nx = 101 pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.

(1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.06, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 230 por cento. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Além disso, pode-se observar a degradação da convergência do esquema não pré-condicionado devido à elevada razão de autovalores, apesar dos baixos valores de número de condicionamento da matriz Γ .

Quanto ao método com V_p otimizada, pode-se verificar facilmente que, para $M = 10^{-2}$, dos 100 por cento de aumento de taxa de convergência, 10 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 90 por cento foram gerados pela minimização da razão de autovalores. Já para $M = 10^{-4}$, dos 230 por cento de aumento de taxa de convergência, 80 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 150 por cento continuaram sendo gerados pela minimização da razão de autovalores. Conclui-se que a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos cresce com a redução do número de Mach. Além disso, verifica-se que quanto menor é o número de Mach, maior é a influência da minimização do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência.

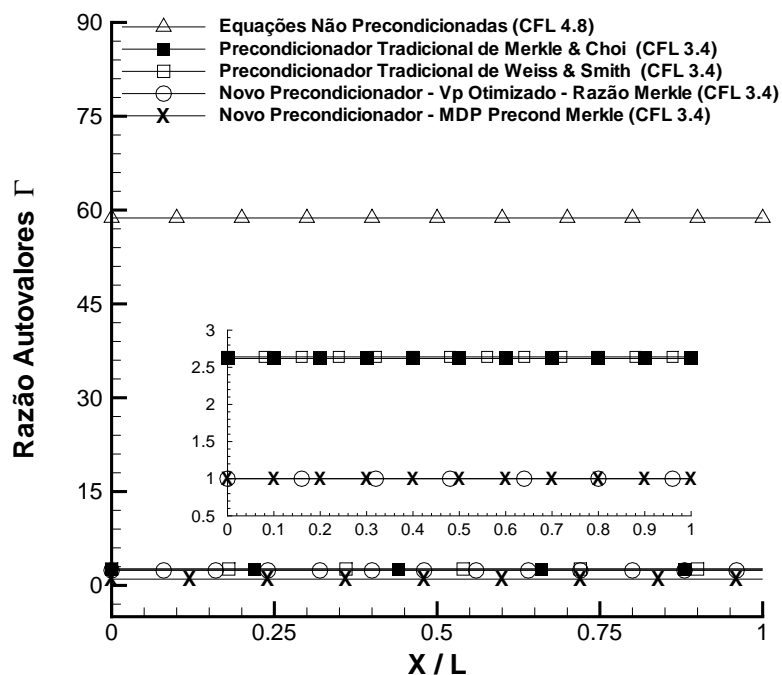


FIG. 4.63: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - Mach 10^{-2} - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.

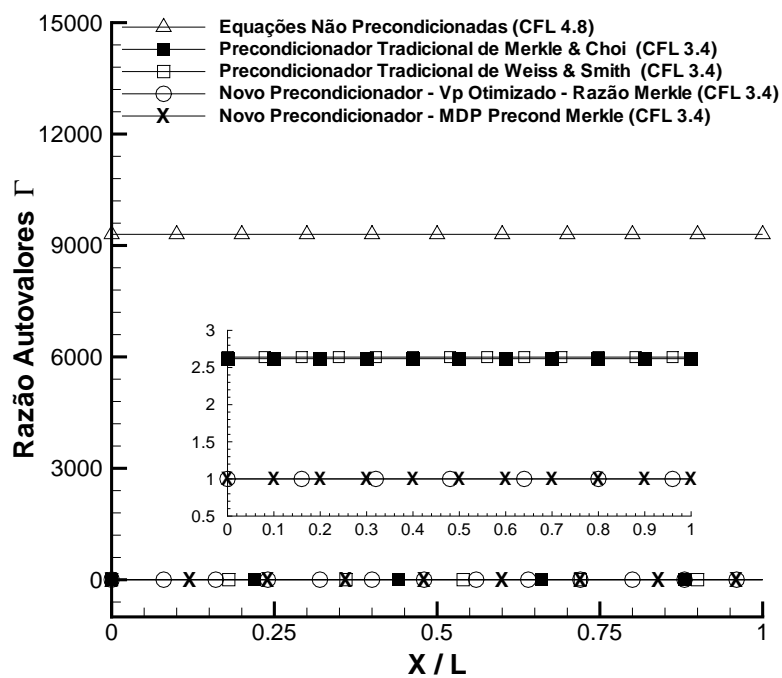


FIG. 4.64: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - Mach 10^{-4} - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem.

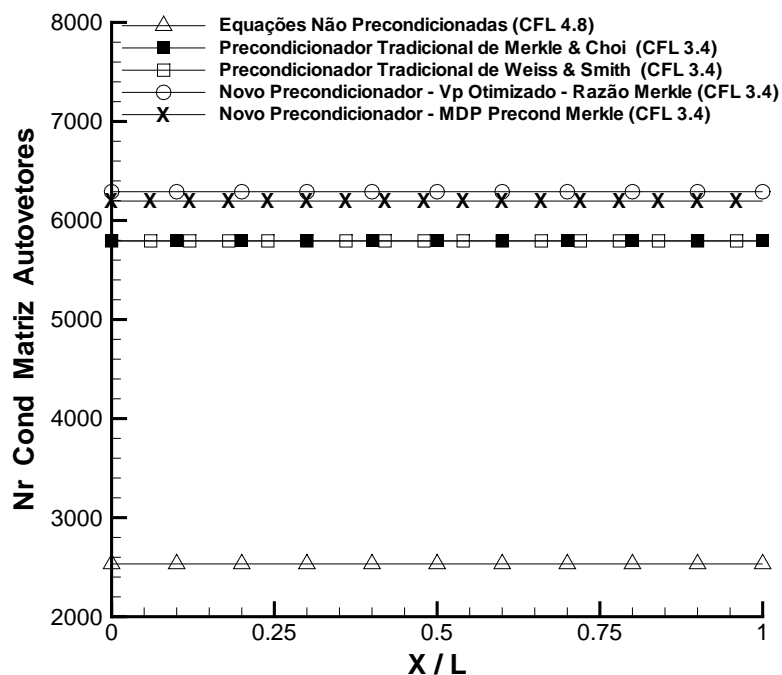


FIG. 4.65: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Autovetores - Mach 10^{-2} - $N_x = 101$ pontos - Euler Explícito - MDP de 3^a ordem.

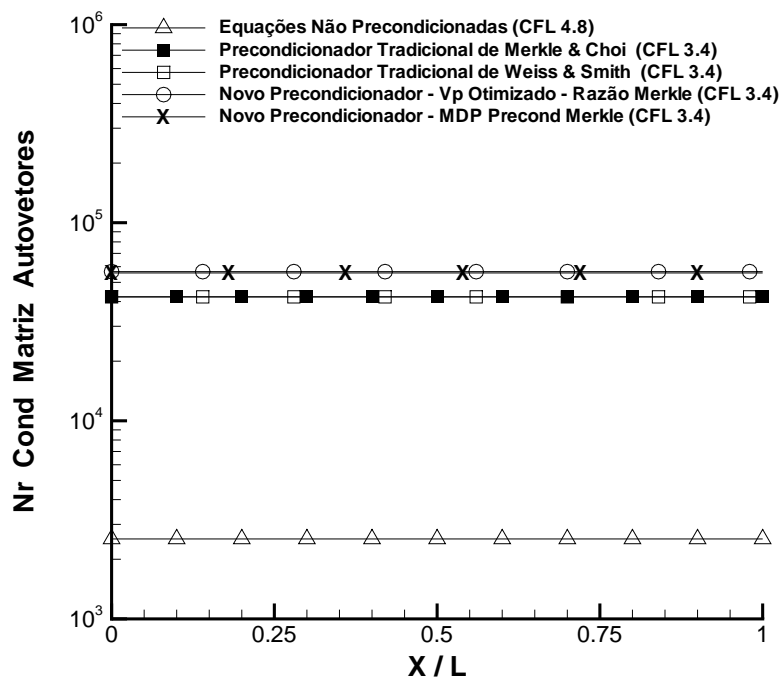


FIG. 4.66: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Autovetores - Mach 10^{-4} - $N_x = 101$ pontos - Euler Explícito - MDP de 3^a ordem.

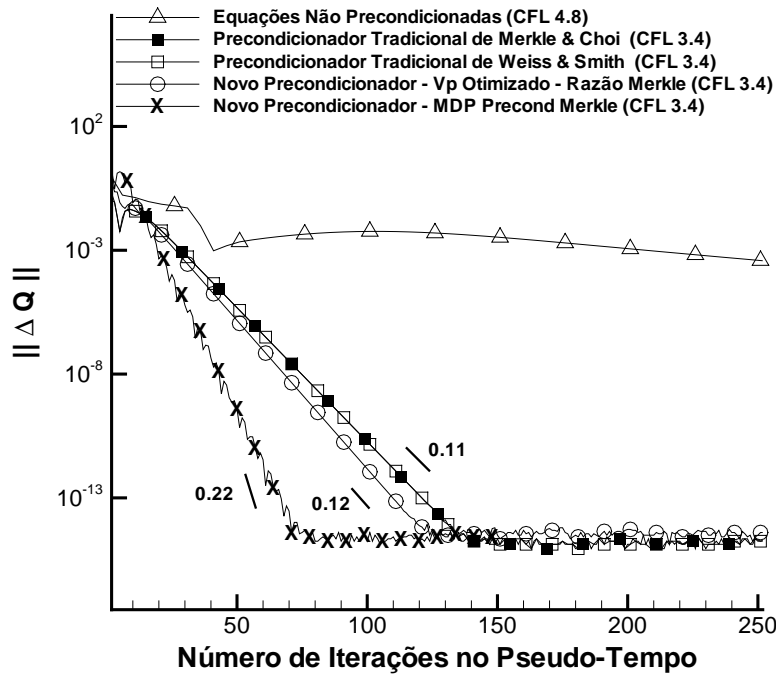


FIG. 4.67: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - Mach 10^{-2} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

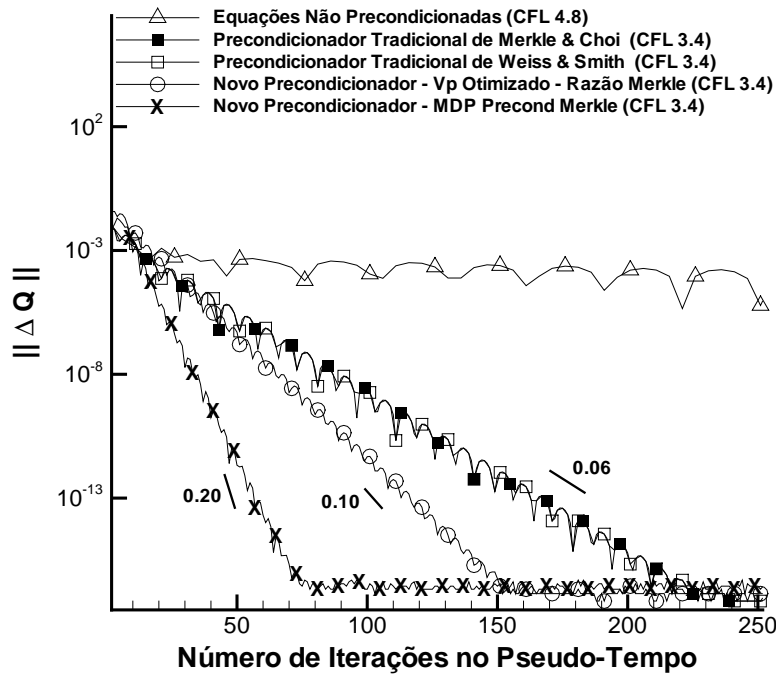


FIG. 4.68: Advecção Não Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - Mach 10^{-4} - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

4.6 ADVECCÃO VISCOSA DE UMA ONDA TÉRMICA

4.6.1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Com a finalidade de avaliar a influência da viscosidade sobre a taxa de convergência dos métodos numéricos, introduziu-se uma contribuição viscosa no problema da advecção de uma onda térmica. Para manter a consistência na sequência da análise, as condições iniciais e de contorno não foram modificadas em relação ao caso não viscoso. Entretanto, o problema foi modelado pelas equações de Navier-Stokes unidimensionais.

Da mesma forma que o caso não viscoso, em regime permanente, a solução de temperatura converge para T_s , enquanto que pressão e velocidade permanecem constantes.

Para obtenção da solução de regime permanente, para marcha no pseudo-tempo, utilizou-se o método Euler Implícito, o qual mostrou ter estabilidade numérica condicional para este problema. Por isso, se conseguiu trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia. Apesar do uso de um método implícito, cada método foi implementado com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência desses métodos.

As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram feitas com uso da MDP de 3ª ordem. Para os fluxos viscosos, foram utilizadas aproximações centradas de 2ª ordem. Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 101 pontos.

4.6.2 VALIDAÇÃO

A Figura 4.60 mostra a evolução da solução de temperatura da nova metodologia no pseudo-tempo, tanto para o caso não viscoso quanto para o caso viscoso. As variáveis pressão e velocidade permanecem constantes. Pode-se observar que a temperatura convergiu para $T/T_0 \approx 0.33$.

Como já foi visto, em regime permanente, a solução analítica de temperatura do problema converge para T_s , enquanto que pressão e velocidade permanecem constantes. Dessa forma, considerando que nas simulações adotou-se $T_0 = 300K$ e $T_s = 100K$, pode-se afirmar que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

4.6.3 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Foram realizadas experimentações numéricas para $M_0 = 10^{-2}$ e $M_0 = 10^{-4}$ com a finalidade de verificar possíveis diferenças de comportamento em relação aos resultados obtidos no problema do bocal subsônico. As experimentações com $M_0 = 10^{-4}$ ou menores não são

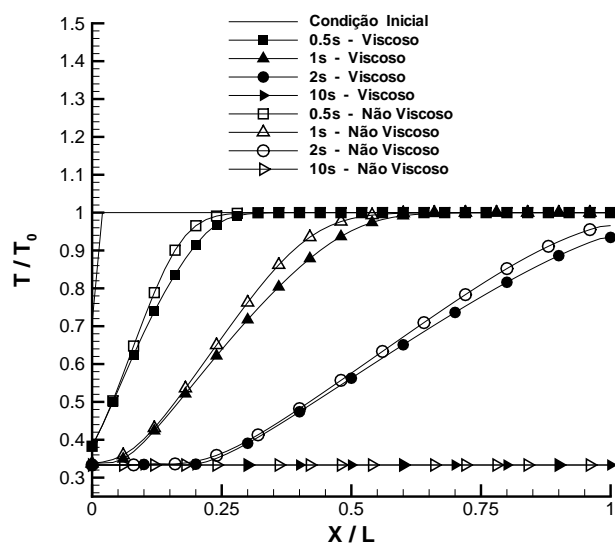


FIG. 4.69: Advecção Viscosa de Onda Térmica, Evolução da Solução de Temperatura no Pseudo-Tempo - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

apresentadas, haja visto terem resultados análogos aos obtidos em $M_0 = 10^{-5}$. As Figuras 4.70 a 4.77 apresentam os resultados das simulações realizadas.

Na análise de eficiência da nova metodologia com dissipação de Merkle, além da taxa de convergência da solução, avaliou-se a razão de autovalores, relacionada com o critério da Rigidez Numérica \hat{R} , o número de condicionamento da matriz Γ , relacionado com o critério da Sensibilidade Assintótica \hat{S}_a , e o número de condicionamento da matriz autovetores, relacionado com o critério da Sensibilidade Transitória \hat{S}_t .

A nova metodologia com dissipação de Merkle foi comparada com um esquema não pré-condicionado e com os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Nas Figuras 4.70 e Figura 4.71, analisa-se o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ . Verificamos que os resultados obtidos pela nova metodologia foram significativamente menores do que os obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999), sendo 3 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$ e 5 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-4}$. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença entre o número de condicionamento da matriz Γ obtido pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Observamos ainda que o esquema não pré-condicionado também possui um número de condicionamento relativamente baixo em relação aos pré-condicionadores clássicos, sendo 2 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-2}$ e 4 ordens de magnitude menor para $M_0 = 10^{-4}$. En-

tretanto, comparando-se com a nova metodologia, o esquema não pré-condicionado possui um número de condicionamento 1 ordem de magnitude maior. Dessa forma, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento do sistema, o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

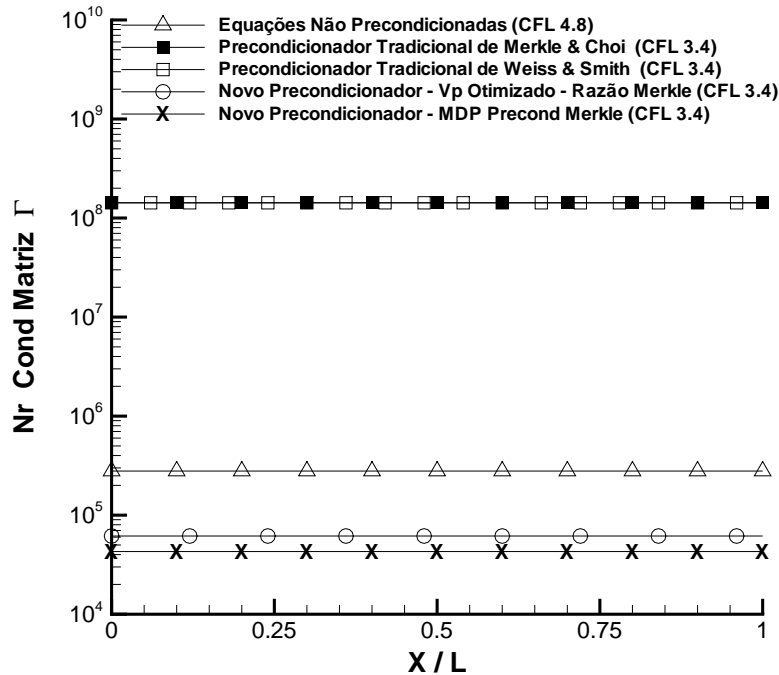


FIG. 4.70: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Condicionamento Γ - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

Nas Figuras 4.72 e 4.73, avalia-se a razão dos autovalores do sistema. Verifica-se que a nova metodologia conseguiu minimizar a razão dos autovalores, e com isso, minimizar a rigidez numérica $\hat{R} \approx 1$, tanto para $M_0 = 10^{-2}$ quanto para $M_0 = 10^{-4}$. Observa-se que os métodos pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obtiveram uma razão de autovalores em torno de 2.6, tanto para $M_0 = 10^{-2}$ quanto para $M_0 = 10^{-4}$. Constata-se que método de otimização de V_p , que será usado para separar os efeitos da rigidez numérica e do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência, obteve o resultado esperado, com razão de autovalores em torno de 2.6. Verifica-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada para $M_0 = 10^{-2}$, e que a mesma cresce acentuadamente quando o número de Mach é reduzido para $M_0 = 10^{-4}$. Dessa forma, conclui-se que apesar do pré-condicionamento clássico reduzir significativamente a razão dos autovalores, a nova metodologia consegue um resultado ainda melhor, minimizando a disparidade dos autovalores do sistema.

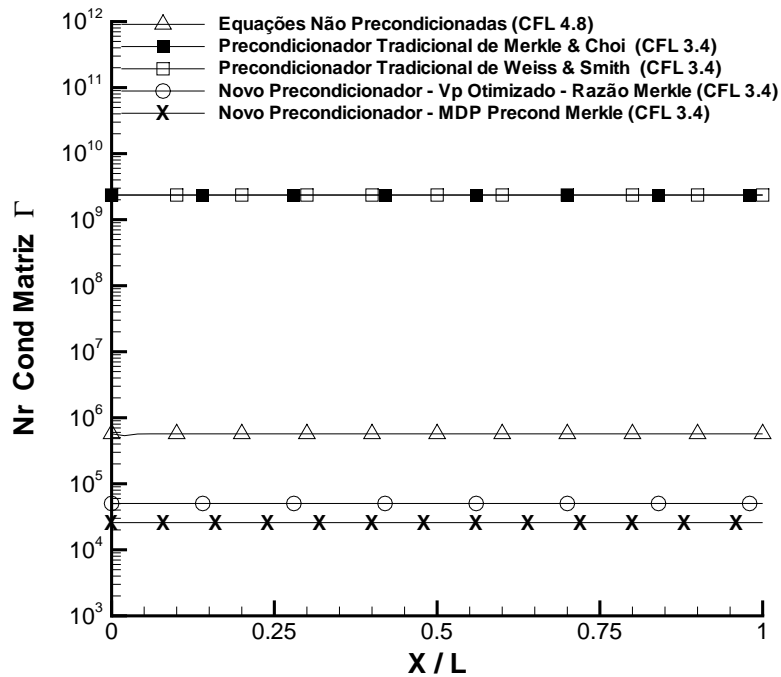


FIG. 4.71: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

Nas Figuras 4.74 e 4.75, avalia-se o número de condicionamento da matriz de autovetores. Verifica-se que tanto a nova metodologia quanto os pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) possuem maiores valores de número de condicionamento da matriz de autovetores em comparação ao esquema não pré-condicionado, sendo duas vezes maior para $M_0 = 10^{-2}$ e 1 ordem de magnitude maior para $M_0 = 10^{-4}$. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença entre o número de condicionamento da matriz de autovetores obtido pelo esquema não pré-condicionado e pelos métodos pré-condicionadores. Comprovou-se o que havia sido constatado no trabalho de DARMOFAL e SCHMID (1996), que os métodos pré-condicionadores possuem autovetores pouco ortogonais para baixos valores de Mach, obtendo por este motivo elevados valores de número de condicionamento da matriz de autovetores.

Nas Figuras 4.76 e 4.77, analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo. As taxas de convergência dos métodos são inferidas a partir destes gráficos. Os resultados das simulações mostram que, para Mach $M_0 = 10^{-2}$, a nova metodologia foi a mais eficiente dentre as testadas. A nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.21, enquanto os pré-condicionadores clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de

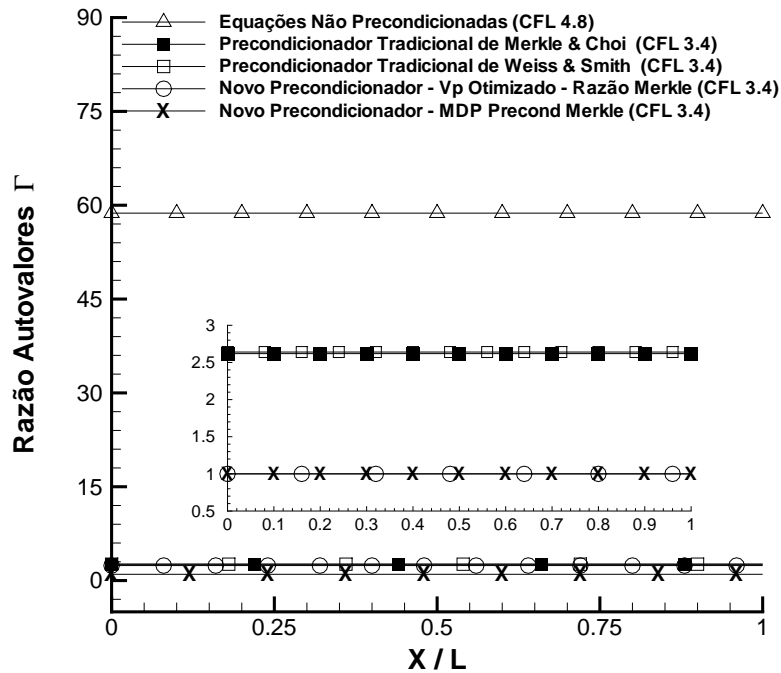


FIG. 4.72: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

0.11, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 90 por cento. Para $M_0 = 10^{-4}$, a nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.19, enquanto os métodos clássicos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.06, ou seja, um aumento da taxa de convergência de cerca de 220 por cento. Verifica-se que quanto menor é a velocidade do escoamento, maior é a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos. Além disso, pode-se observar a degradação da convergência do esquema não pré-condicionado devido à elevada razão de autovalores, apesar dos baixos valores de número de condicionamento da matriz Γ .

Quanto ao método com V_p otimizada, pode-se verificar facilmente que, para $M_0 = 10^{-2}$, dos 90 por cento de aumento de taxa de convergência, 10 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 80 por cento foram gerados pela minimização da razão de autovalores. Já para $M_0 = 10^{-4}$, dos 220 por cento de aumento de taxa de convergência, 80 por cento foram gerados pela minimização do número de condicionamento da matriz Γ e 140 por cento continuaram sendo gerados pela minimização da razão de autovalores. Conclui-se que a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos cresce com a redução do número de Mach. Além disso, verifica-se que quanto menor é o número de Mach, maior é a influência da minimização do número de

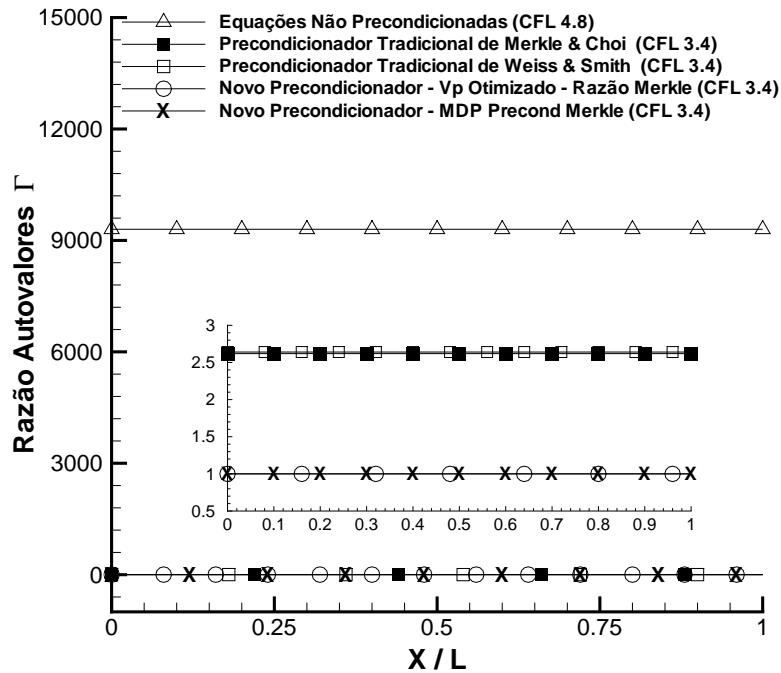


FIG. 4.73: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência.

Nas Figuras 4.78 e 4.79, avalia-se a influência do número de Reynolds na taxa de convergência dos métodos numéricos pré-condicionados, sendo $M_0 = 10^{-3}$. A Figura 4.78 refere-se ao método de VENKATESWARAN e MERKLE (1999), enquanto que a Figura 4.79 está relacionada com a nova metodologia. Analisando-se os resultados obtidos, pode-se concluir que o aumento do número de Reynolds provoca um aumento da taxa de convergência do método pré-condicionador utilizado.

Na Figura 4.80, avalia-se o efeito da viscosidade na taxa de convergência dos métodos pré-condicionados. Analisando-se os resultados obtidos, pode-se concluir que a introdução da viscosidade diminui a taxa de convergência do método pré-condicionador utilizado.

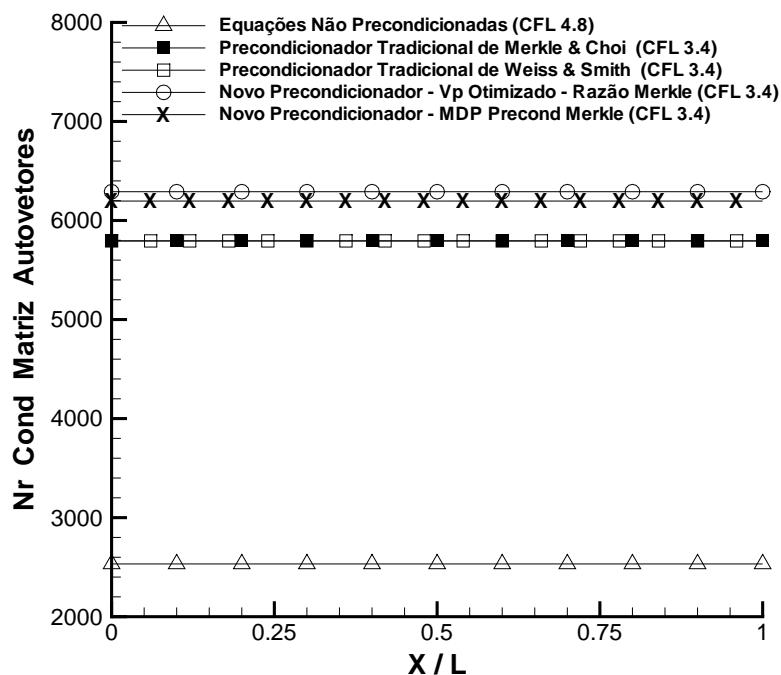


FIG. 4.74: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

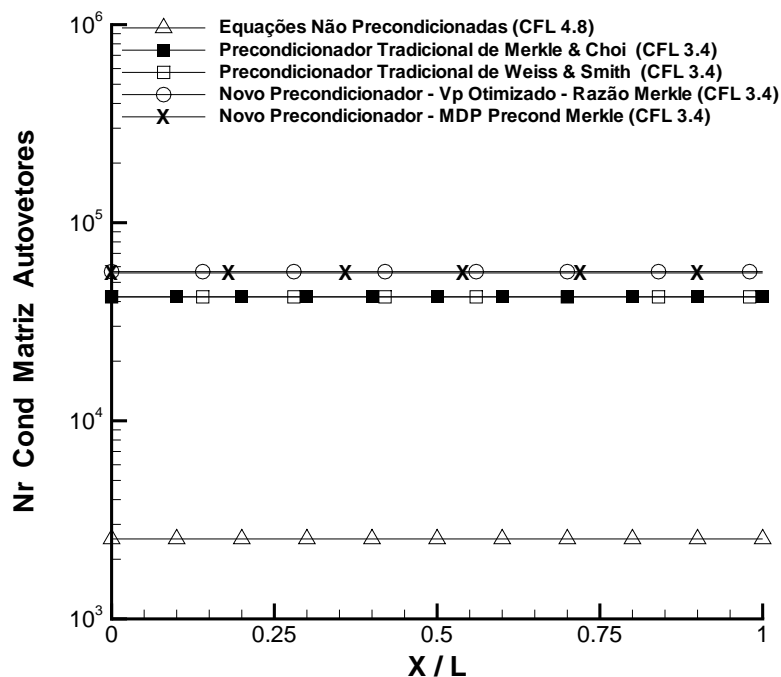


FIG. 4.75: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

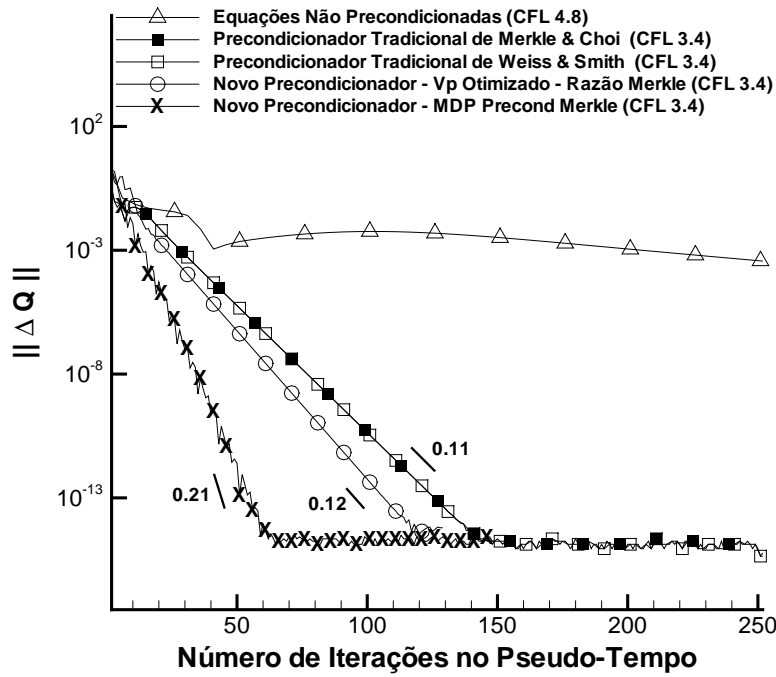


FIG. 4.76: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

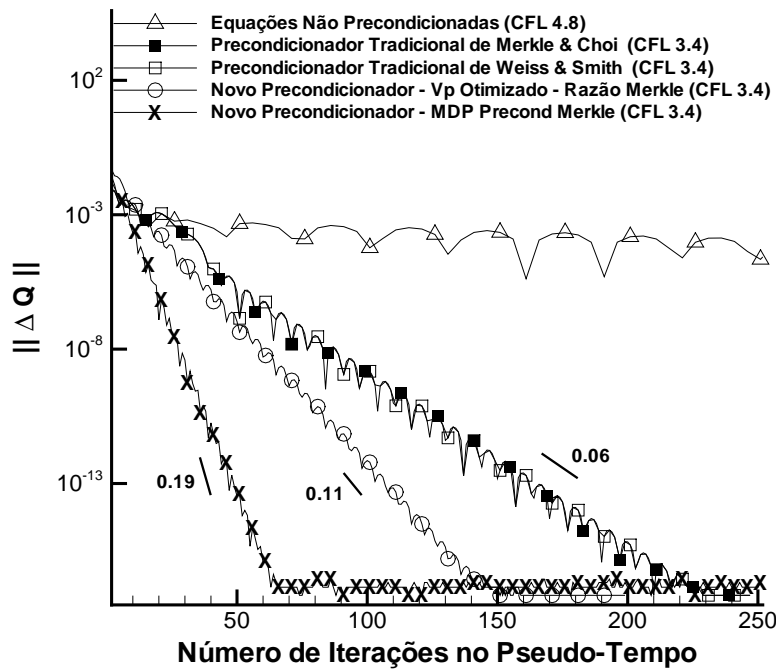


FIG. 4.77: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 101$ pontos - Euler Implícito - MDP de 3ª ordem - Centrada de 2ª ordem.

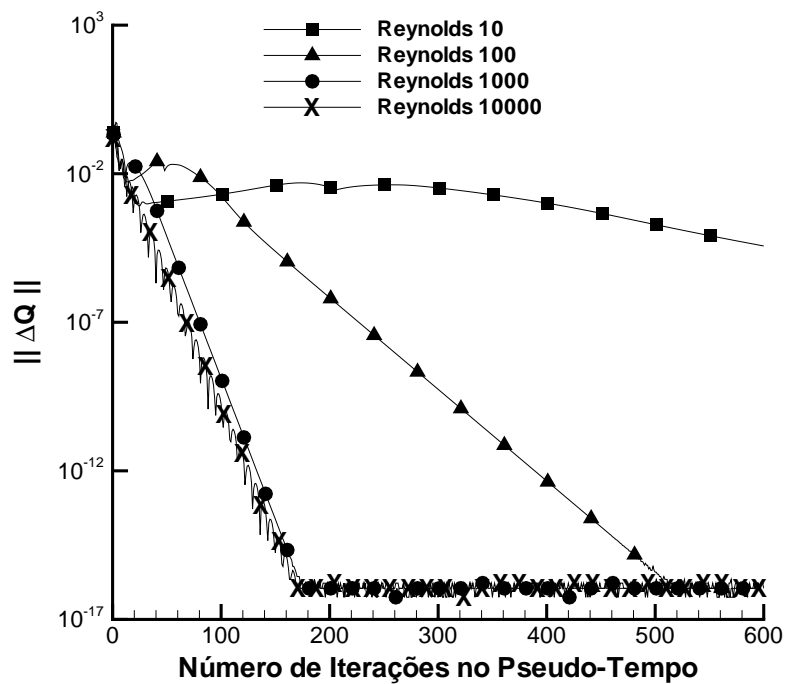


FIG. 4.78: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Efeito da Viscosidade na Convergência do Método de Merkle - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3ª ordem - Centrada 2ª ordem.

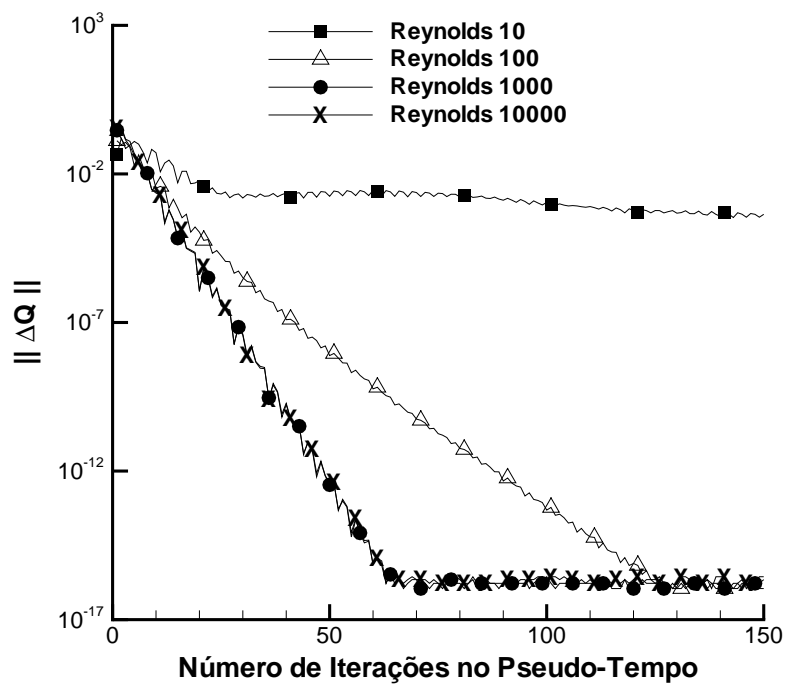


FIG. 4.79: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Efeito da Viscosidade na Convergência da Nova Metodologia - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3ª ordem - Centrada 2ª ordem.

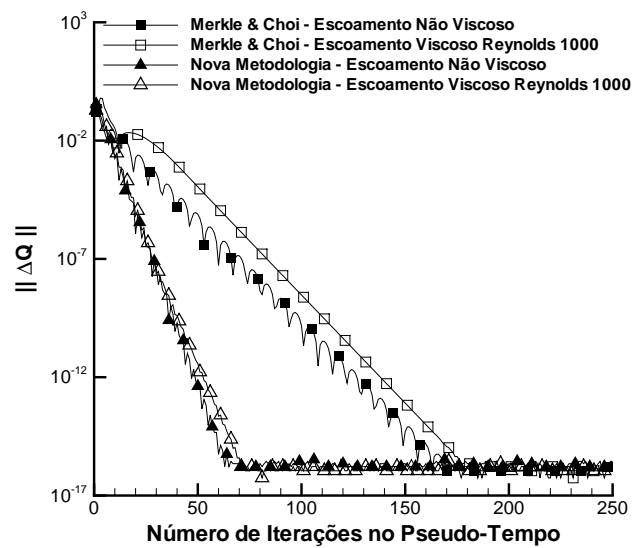


FIG. 4.80: Advecção Viscosa de uma Onda Térmica - Compara Efeitos da Viscosidade - $M_0 = 10^{-3}$ - $N_x = 101$ - Euler Implícito - MDP 3^a ordem - Centrada 2^a ordem.

4.7 PROBLEMA DO PONTO DE ESTAGNAÇÃO BIDIMENSIONAL

4.8 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O fenômeno físico foi caracterizado como um escoamento de regime permanente, bidimensional, isotérmico e não viscoso de um fluido newtoniano, compressível e termicamente perfeito. Trata-se de um problema bidimensional com um ponto de estagnação, no qual a velocidade local fica estagnada, ou seja, vai para zero. A pressão atinge elevados valores.

O problema é considerado bastante adequado para avaliação da nova metodologia, haja visto apresentar conhecidas dificuldades de convergência devido ao baixo número de Mach no ponto de estagnação. O problema do ponto de estagnação bidimensional permitirá avaliar os comportamentos dos diferentes métodos numéricos que serão comparados, estando os mesmos sujeitos à baixas velocidades de escoamento. Além disso, trata-se de um problema com solução de regime permanente, que possibilita o emprego de métodos pré-condicionados.

O fenômeno somente foi simulado para a condição de $M_0 = 10^{-3}$, uma vez que o problema do ponto de estagnação bidimensional já cobre todas as faixas de velocidade abaixo do valor adotado para M_0 .

Sendo u e v as velocidades nas direções x e y , as equações de Navier-Stokes bidimensionais apresentadas em (2.1) são resolvidas considerando o que se segue:

- razão entre os calores específicos a pressão e volume constantes $\gamma = C_p/C_v = 1.4$;
- entrada do escoamento no ponto $(x, y) = \left(\frac{L_x}{2}, L_y \right)$;
- temperatura na entrada $T_0 = 300K$;
- pressão na entrada $P_0 = 10^5 N/m^2$;
- número de Mach na entrada $M_0 = 10^{-3}$;
- velocidade do som na entrada $C_0 = \sqrt{\gamma R T_0}$;
- velocidade do escoamento na entrada $U_0 = M_0 C_0$;
- massa específica na entrada $\rho_0 = \frac{P_0}{R T_0}$;
- velocidades na parede $u_{(x,0)} = 0$ e $v_{(x,0)} = 0$;
- velocidades fora da parede $u_{(x,y)} = a x$ e $v_{(x,y)} = -a y$, sendo $a = U_0$;
- pressão hidrodinâmica dada pela equação de Bernoulli $p_h = -0.5 \rho_0 (u^2 + v^2)$.

Para obtenção da solução numérica de regime permanente, para marcha no pseudo-tempo, utilizou-se o método Euler Implícito, o qual mostrou ter estabilidade numérica condicional para este problema. Por isso, se conseguiu trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência da nova metodologia. Apesar do uso de um método implícito, cada método foi implementado com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência desses métodos.

As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram feitas com uso da MDP de 1ª ordem. Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 51 pontos tanto na direção x quanto na direção y .

A nova metodologia sofre uma modificação no caso bidimensional. A fórmula de cálculo da velocidade do som pré-condicionada V_p é reescrita sendo:

$$V_p = \sqrt{u^2 + v^2} \quad (4.32)$$

Foram definidas as seguintes condições iniciais para o domínio (x,y) , adotando a notação (i,j) :

- pressão hidrodinâmica $p_{h(i,j)} = -0.5 \rho_0 (u_{(i,j)}^2 + v_{(i,j)}^2)$;
- velocidades $u_{(i,j)} = a x$ e $v_{(i,j)} = -a y$, sendo $a = U_0$;
- temperatura $T_{(i,j)} = T_0$.

As condições de contorno na entrada e na saída do domínio em x , ($i = 1$) e ($i = N_x$), foram definidas como se segue:

- pressão hidrodinâmica na entrada $p_{h(1,j)} = -0.5 \rho_{0(1,j)} (u_{(1,j)}^2 + v_{(1,j)}^2)$;
- pressão hidrodinâmica na saída $p_{h(N_x,j)} = -0.5 \rho_{0(N_x,j)} (u_{(N_x,j)}^2 + v_{(N_x,j)}^2)$;
- velocidade u $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(1,j)} = a$ e $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(N_x,j)} = a$;
- velocidade v $\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{(1,j)} = 0$ e $\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{(N_x,j)} = 0$;
- temperatura $\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{(1,j)} = 0$ e $\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{(N_x,j)} = 0$.

As condições de contorno na entrada e na saída do domínio em y , ($j = 1$) e ($j = N_y$) foram definidas como se segue:

- pressão hidrodinâmica na entrada $p_{h(i,1)} = -0.5 \rho_{0(i,1)} (u_{(i,1)}^2 + v_{(i,1)}^2)$;

- pressão hidrodinâmica na saída $p_{h(i, Ny)} = -0.5 \rho_{0(i, Ny)} (u_{(i, Ny)}^2 + v_{(i, Ny)}^2)$;
- velocidade u $\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{(i, 1)} = 0$ e $\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{(i, Ny)} = 0$;
- velocidade v $\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{(i, 1)} = -a$ e $\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{(i, Ny)} = -a$;
- temperatura $\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{(1, j)} = 0$ e $\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{(i, Ny)} = 0$.

4.8.1 VALIDAÇÃO

As Figuras (4.81) a (4.84) mostram as soluções exatas do problema ponto de estagnação bidimensional.

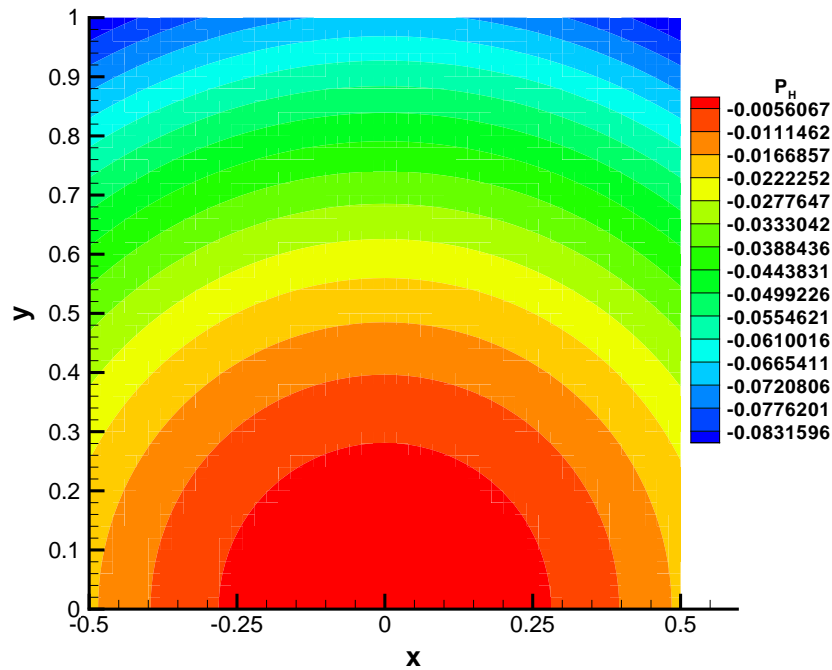


FIG. 4.81: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Pressão Hidrodinâmica p_h

Como já foi feito, para facilitar o entendimento, chamaremos de “nova metodologia com h_p analítico” a metodologia proposta na seção anterior, com h_p analítico, porém sem correção no esquema da dissipação, pois utiliza somente uma matriz pré-condicionadora. Por outro lado, chamaremos de “nova metodologia com dissipação de Merkle” a metodologia proposta nesta seção, com h_p analítico, porém com correção no esquema da dissipação, pois utiliza duas matrizes pré-condicionadoras.

Nas Figuras 4.85 a 4.88 são apresentados os erros das soluções de pressão hidrodinâmica obtidas pelos métodos numéricos avaliados. Verifica-se que o esquema não pré-condicionado

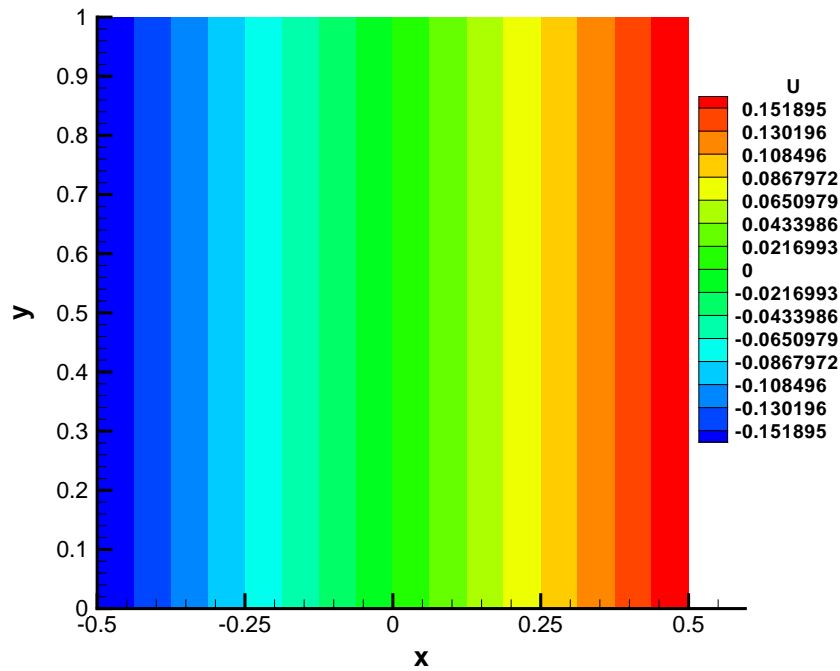


FIG. 4.82: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Velocidade u

obteve erros máximos da ordem de 10^{-5} . O método pré-condicionado de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . A nova metodologia com hp analítico obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . Por fim, a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . Em função dos resultados, pode-se concluir que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

Nas Figuras 4.89 e 4.92 são apresentadas as soluções de velocidade v obtidas pelos métodos numéricos avaliados. Verifica-se que o esquema não pré-condicionado obteve erros máximos da ordem de 10^{-6} . O método pré-condicionado de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . A nova metodologia com hp analítico obteve erros máximos da ordem de 10^{-2} . Por fim, a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . Em função dos resultados, pode-se concluir que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

Nas Figuras 4.93 e 4.96 são apresentadas as soluções de velocidade u obtidas pelos métodos numéricos avaliados. Verifica-se que o esquema não pré-condicionado obteve erros máximos da ordem de 10^{-6} . O método pré-condicionado de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . A nova metodologia com hp analítico obteve erros

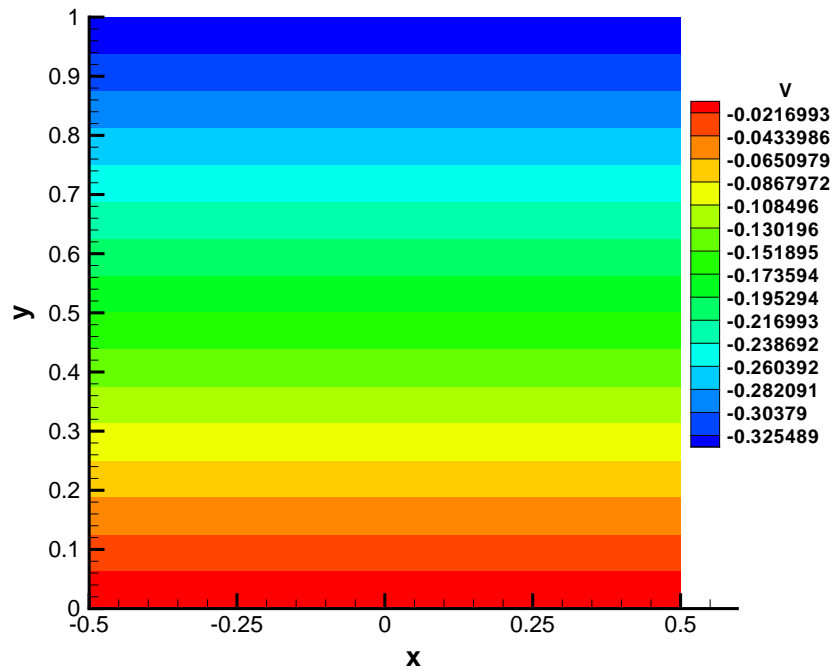


FIG. 4.83: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Velocidade v

máximos da ordem de 10^{-2} . Por fim, a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve erros máximos da ordem de 10^{-3} . Em função dos resultados, pode-se concluir que os métodos numéricos e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado.

Nas Figuras 4.97 e ?? são apresentadas as soluções de temperatura pelos métodos numéricos avaliados. Verifica-se que o esquema não pré-condicionado obteve erros máximos da ordem de 10^{-4} . O método pré-condicionado de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obteve erros máximos da ordem de 10^{-5} . A nova metodologia com hp analítico obteve erros máximos da ordem de 10^1 . Por fim, a nova metodologia com dissipação de Merkle obteve erros máximos da ordem de 10^{-5} . A partir dos erros máximos das soluções de temperatura, pode-se concluir que a nova metodologia com hp analítico obteve resultados fisicamente incorretos. Por outro lado, a nova metodologia com com dissipação de Merkle, juntamente com o pré-condicionador clássico e com o esquema não pré-condicionado, obtiveram soluções acuradas de temperatura.

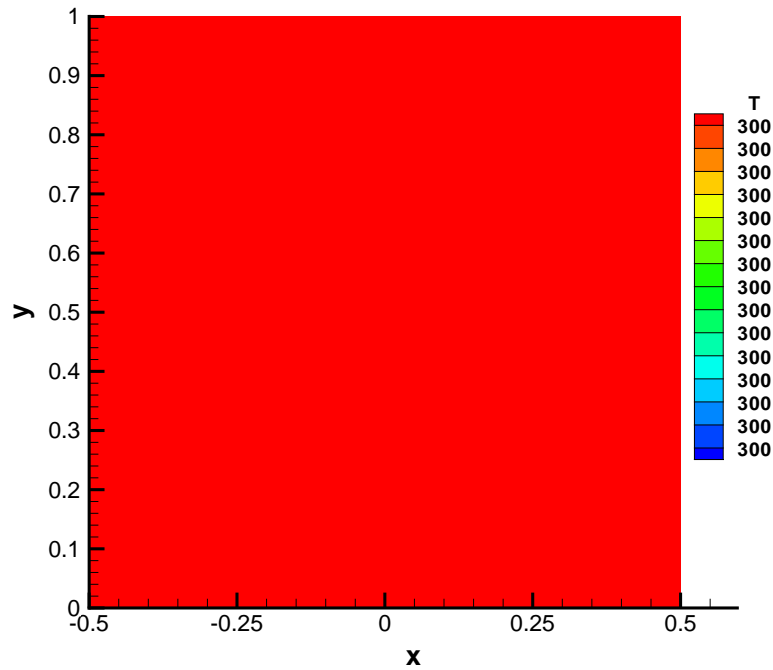


FIG. 4.84: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Exata de Temperatura

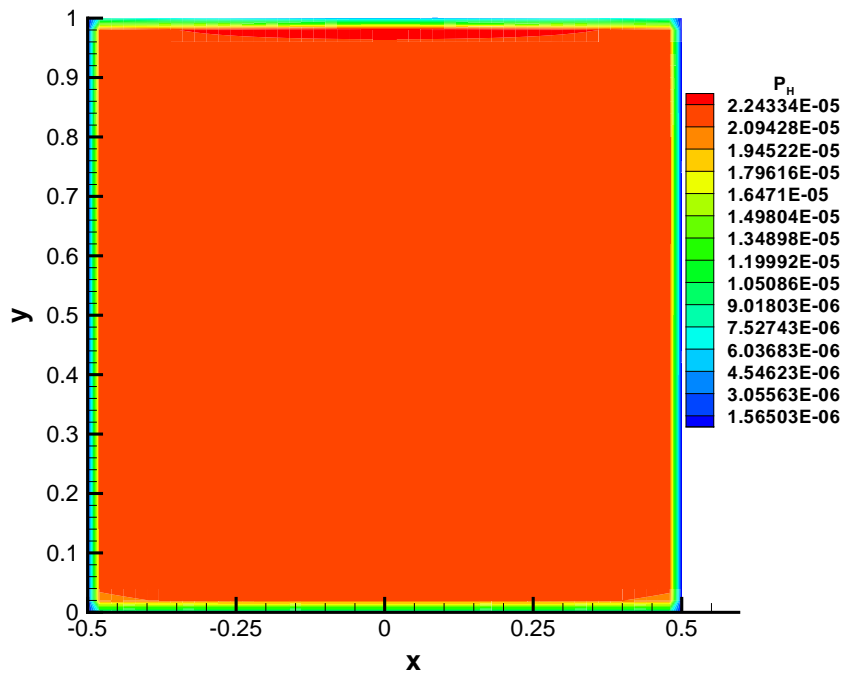


FIG. 4.85: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

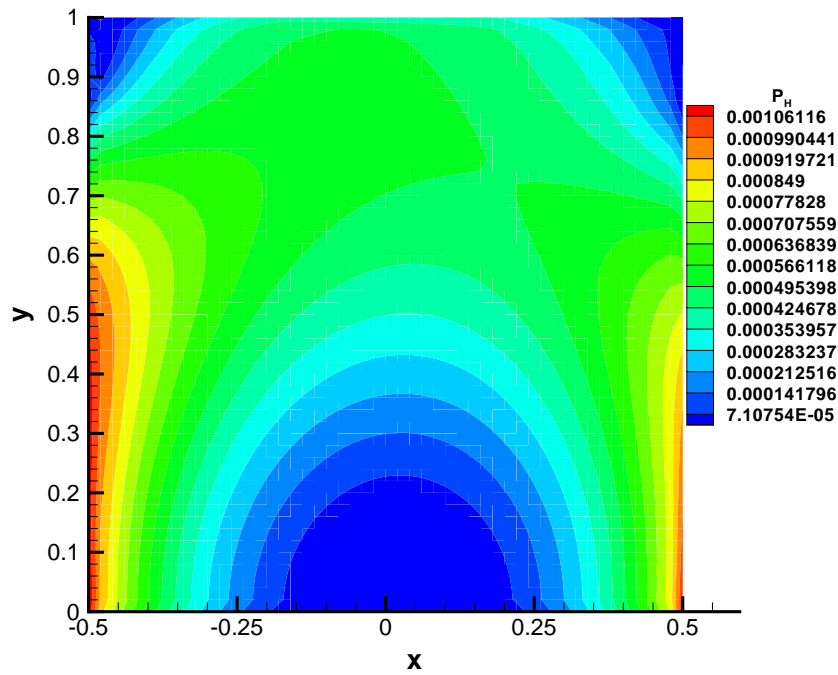


FIG. 4.86: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

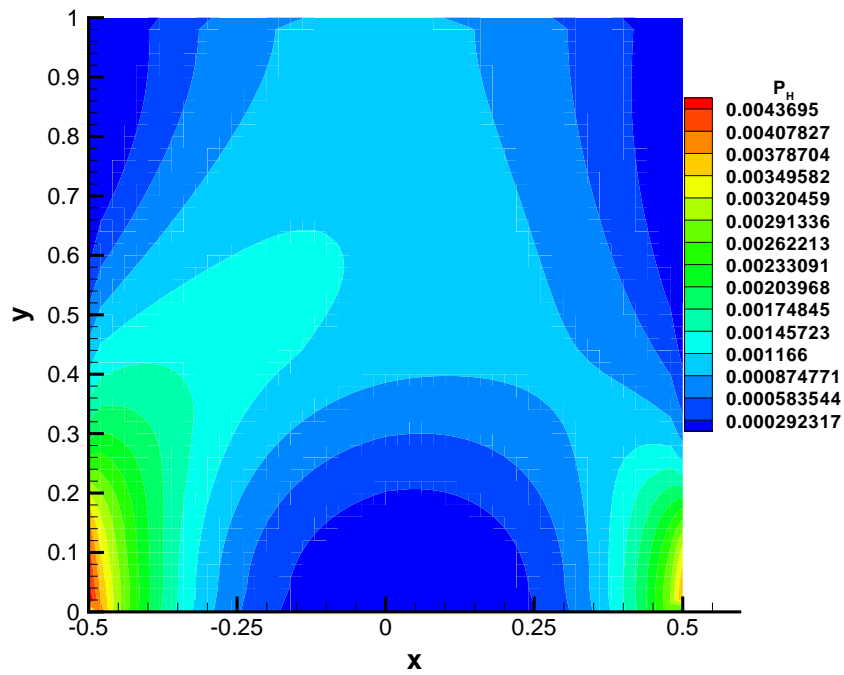


FIG. 4.87: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Nova Metodologia Sem Correção da Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

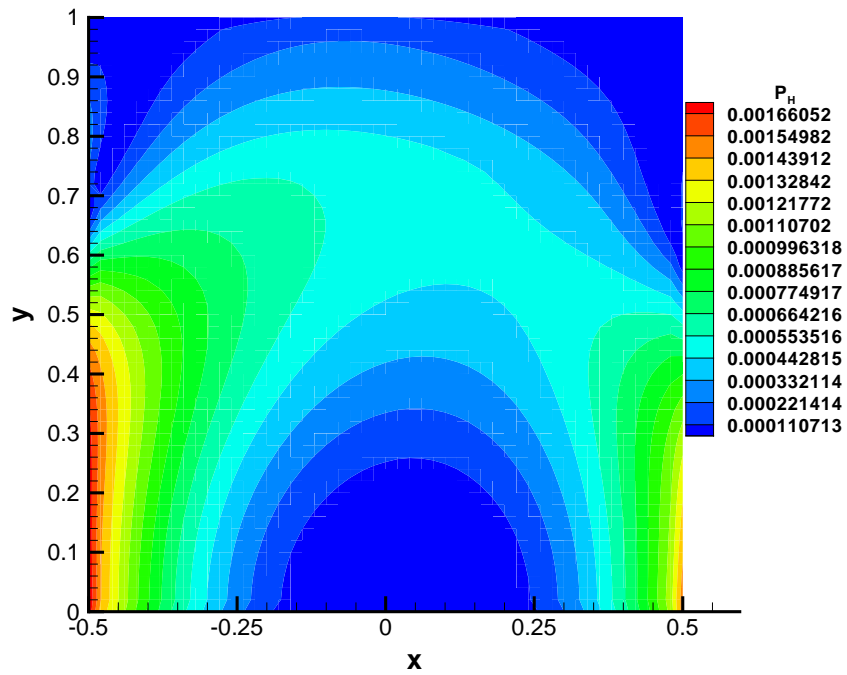


FIG. 4.88: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Pressão - Nova Metodologia Com Correção da Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

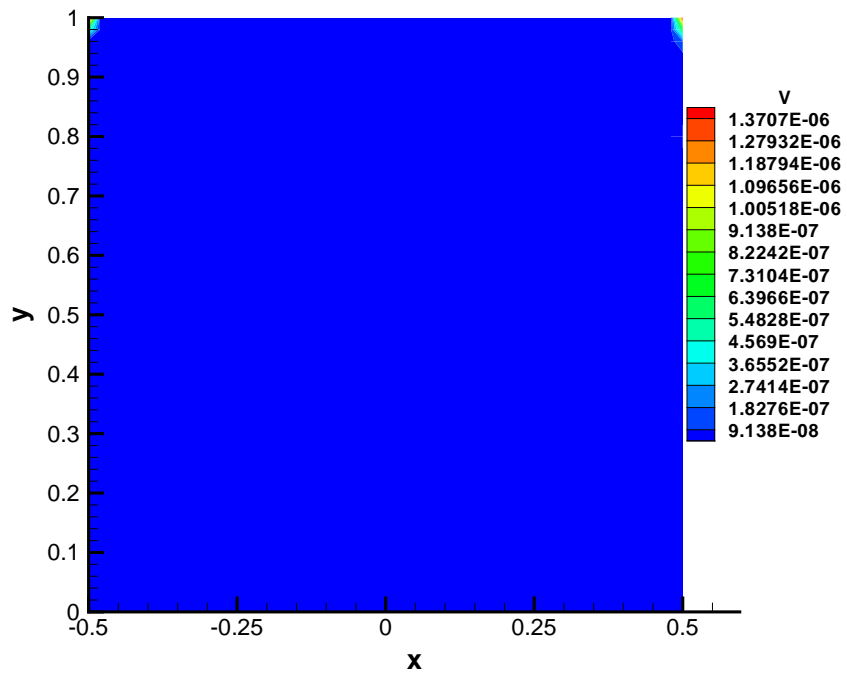


FIG. 4.89: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

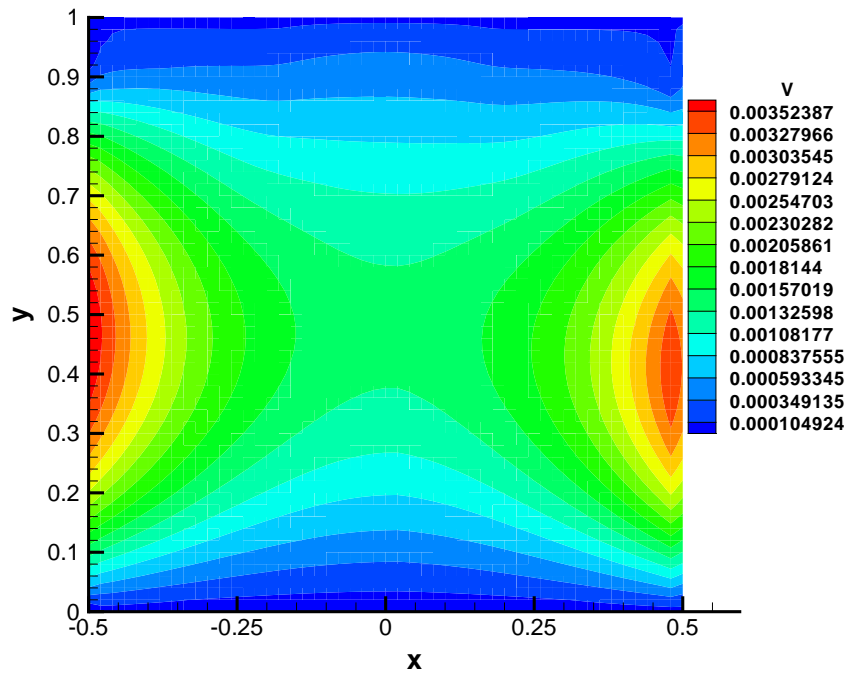


FIG. 4.90: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Método de Merkle
 - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

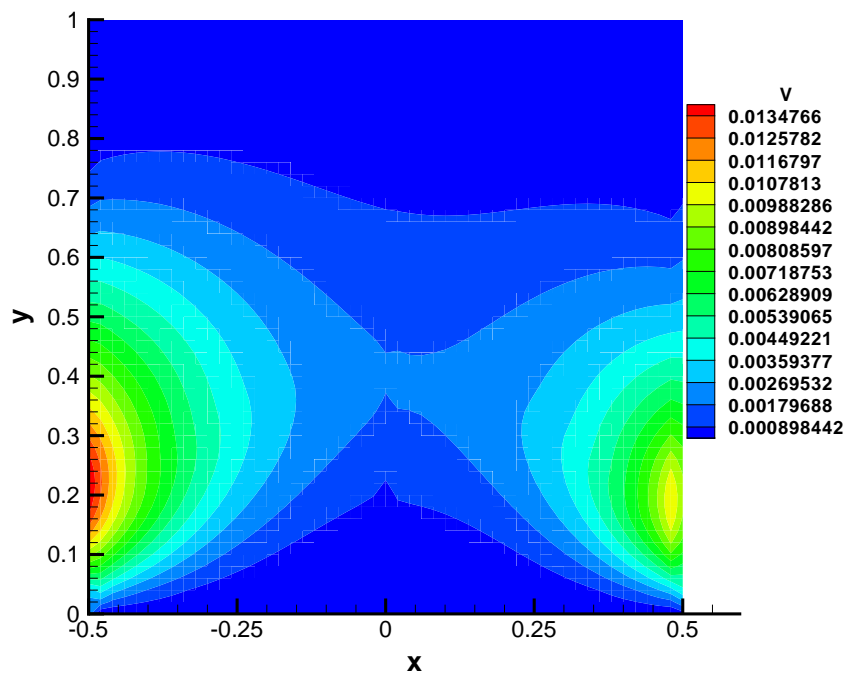


FIG. 4.91: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Nova Metodologia
 Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

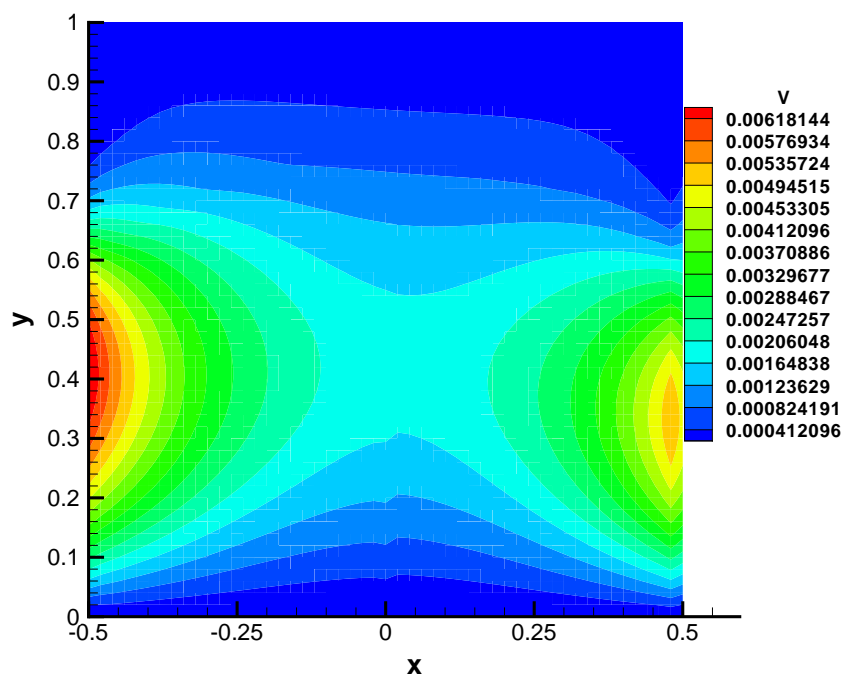


FIG. 4.92: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade v - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1^a ordem.

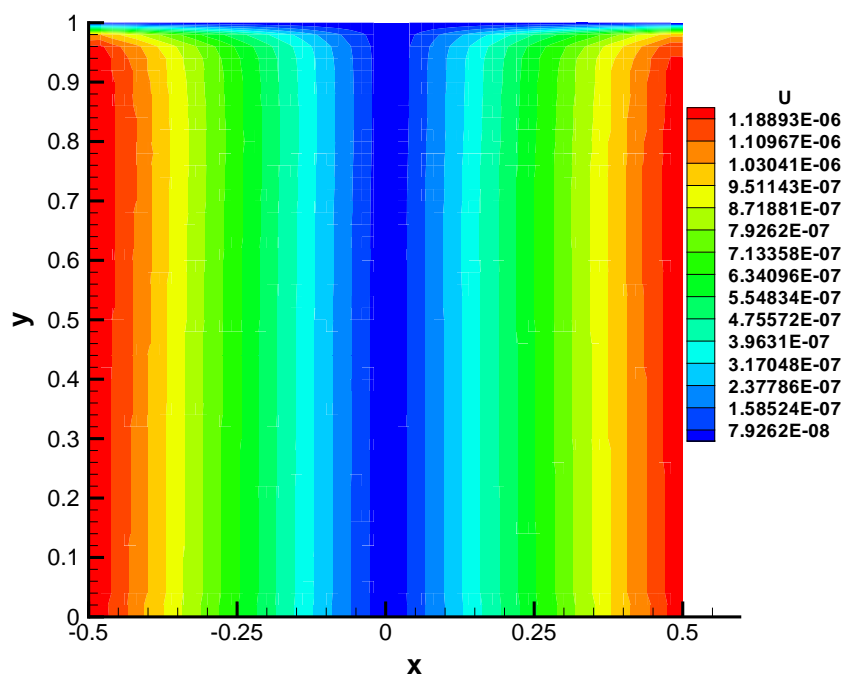


FIG. 4.93: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1^a ordem.

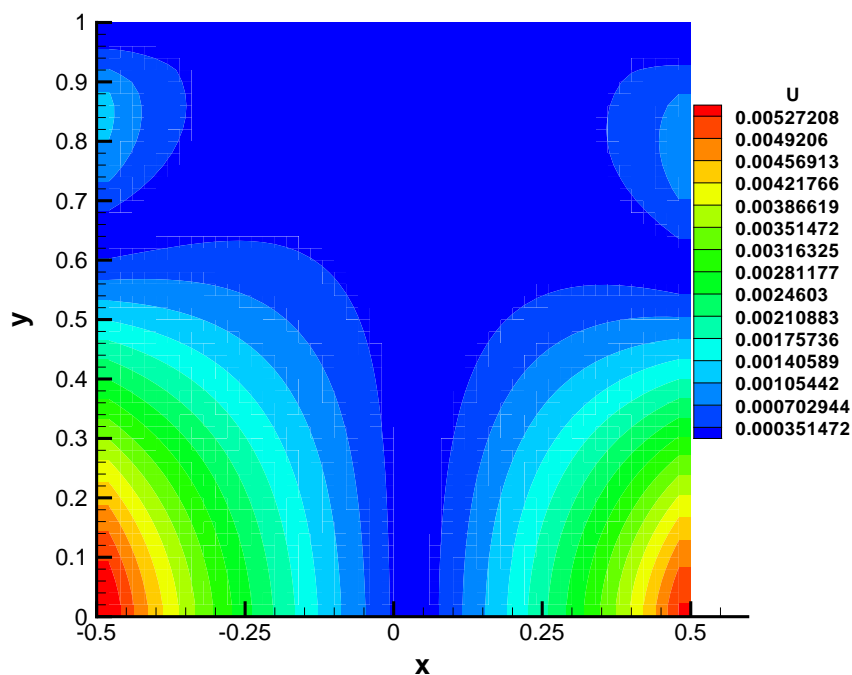


FIG. 4.94: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Método de Merkle
 - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

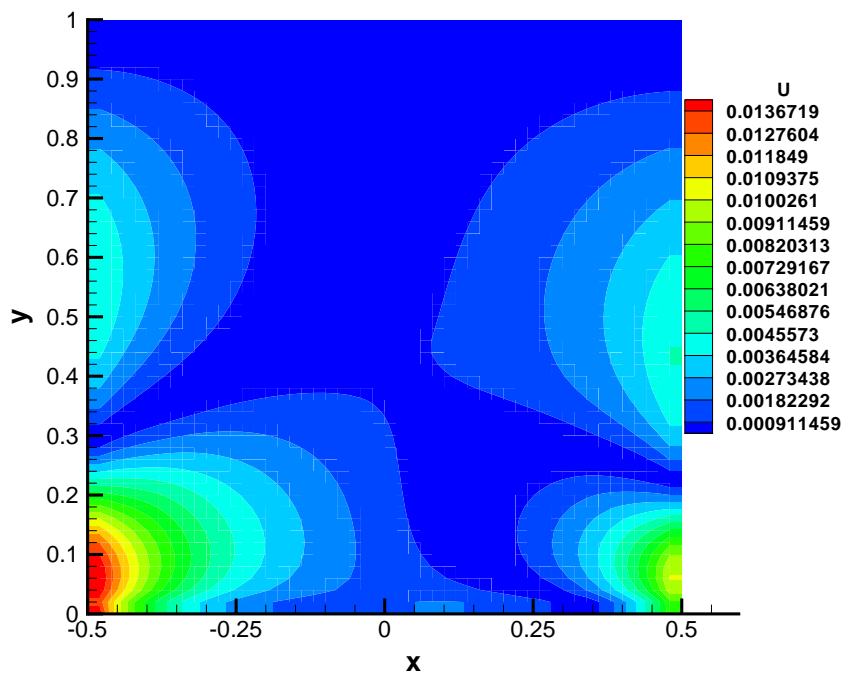


FIG. 4.95: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Nova Metodologia
 Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

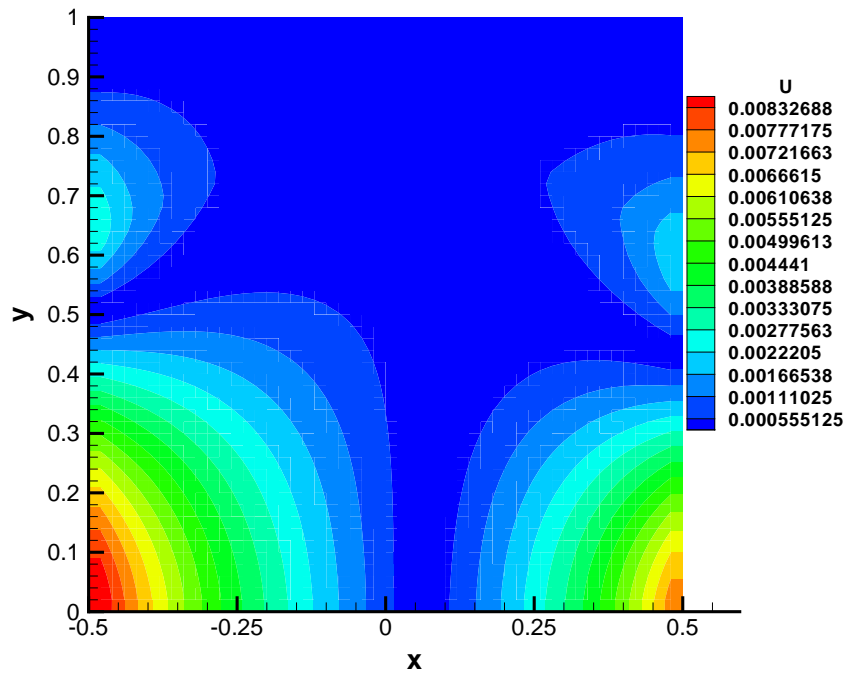


FIG. 4.96: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Velocidade u - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

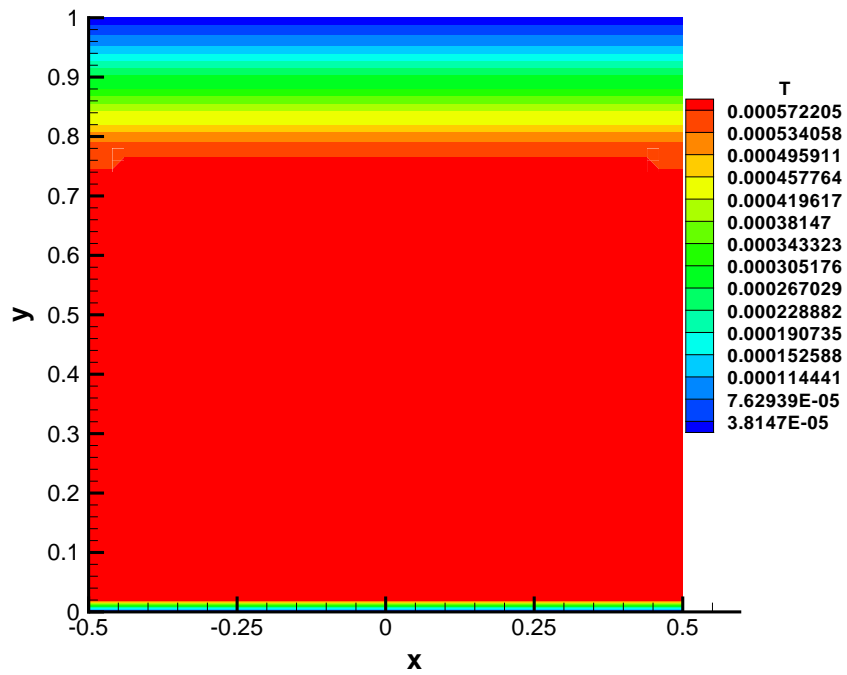


FIG. 4.97: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Temperatura - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

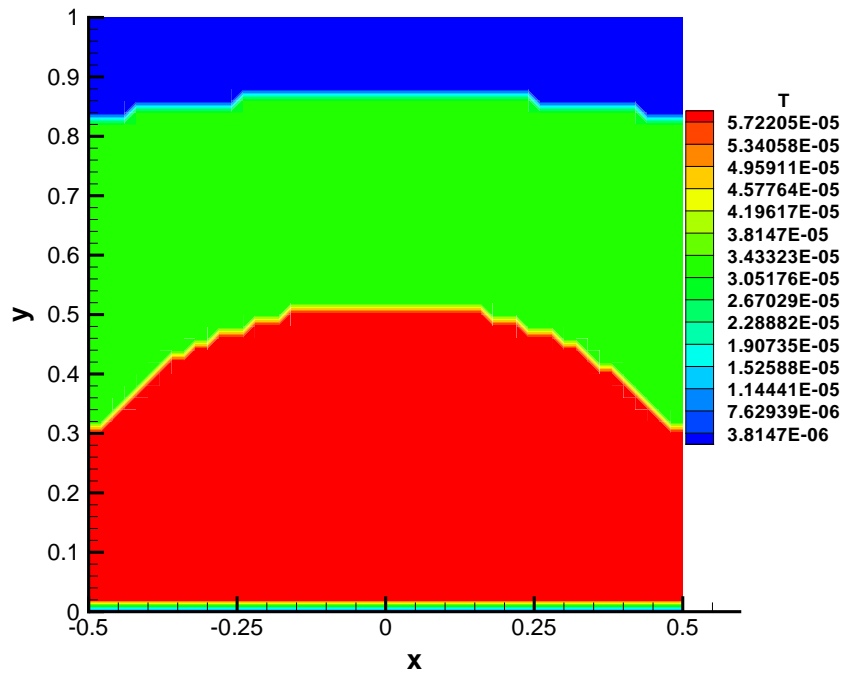


FIG. 4.98: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução de Temperatura - Método de Merkle
 - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

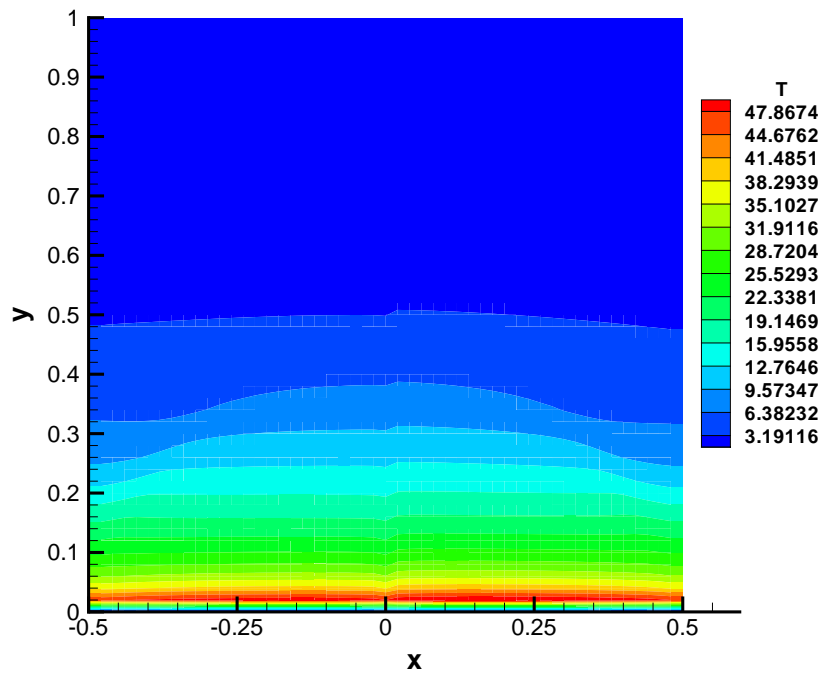


FIG. 4.99: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Temperatura - Nova Metodologia
 Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.

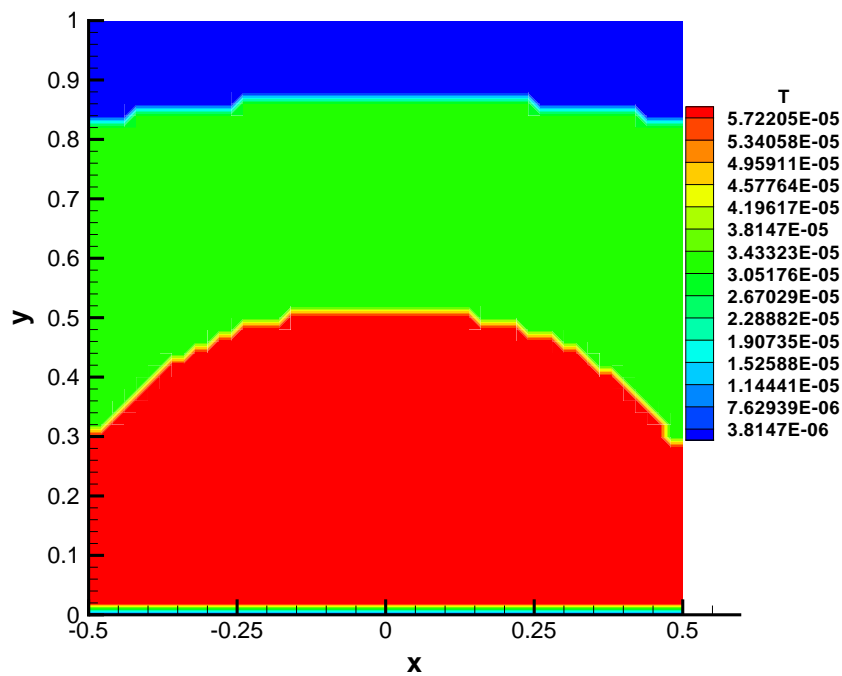


FIG. 4.100: Ponto de Estagnação Bidimensional - Solução Temperatura - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.

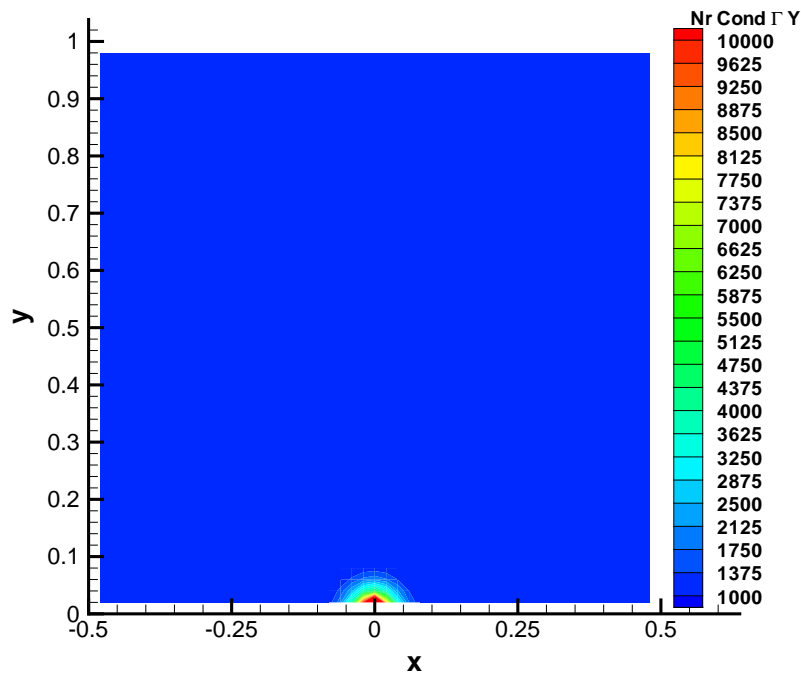


FIG. 4.101: Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

4.8.2 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

A nova metodologia com dissipação de Merkle foi comparada com a nova metodologia com hp analítico, além de um esquema não pré-condicionado e com os métodos pré-condicionadores clássicos de VENKATESWARAN e MERKLE (1999).

Nas Figuras 4.101 e 4.104 são apresentados os resultados de número de condicionamento da matriz Γ na direção x . Verifica-se que o esquema não pré-condicionado obteve valores significativamente baixos, da ordem de 10^3 , chegando a ordem de 10^4 próximo ao ponto de estagnação. O método pré-condicionado de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) obteve elevados valores, da ordem de 10^6 . A nova metodologia com hp analítico obteve valores significativamente baixos, da ordem de 10^3 . Por fim, a nova metodologia com dissipação de Merkle também obteve valores significativamente baixos, da ordem de 10^3 . Dessa forma, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento do sistema, o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

Todos os métodos apresentaram comportamento análogo no cálculo do número de condicionamento da matriz Γ na direção y . Para evitar repetições desnecessárias, esses resultados não serão apresentados.

Nas Figuras 4.105 e 4.108 avalia-se a razão de autovalores na direção x . Verifica-se que a

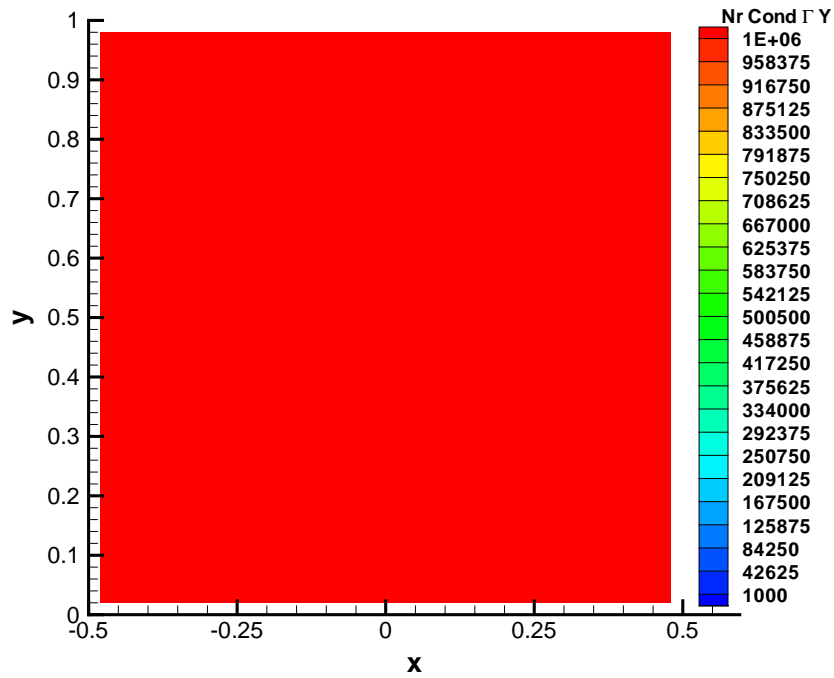


FIG. 4.102: Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

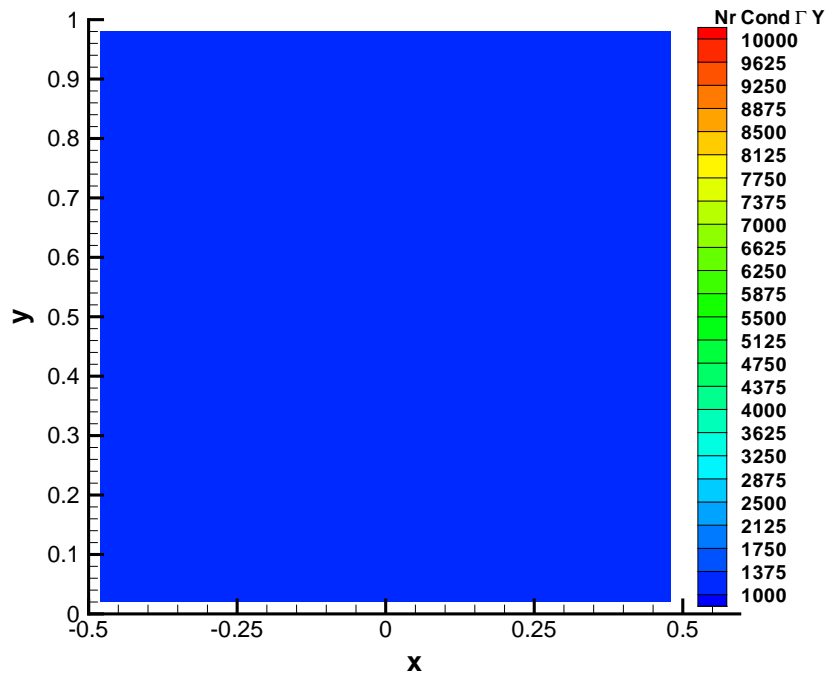


FIG. 4.103: Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

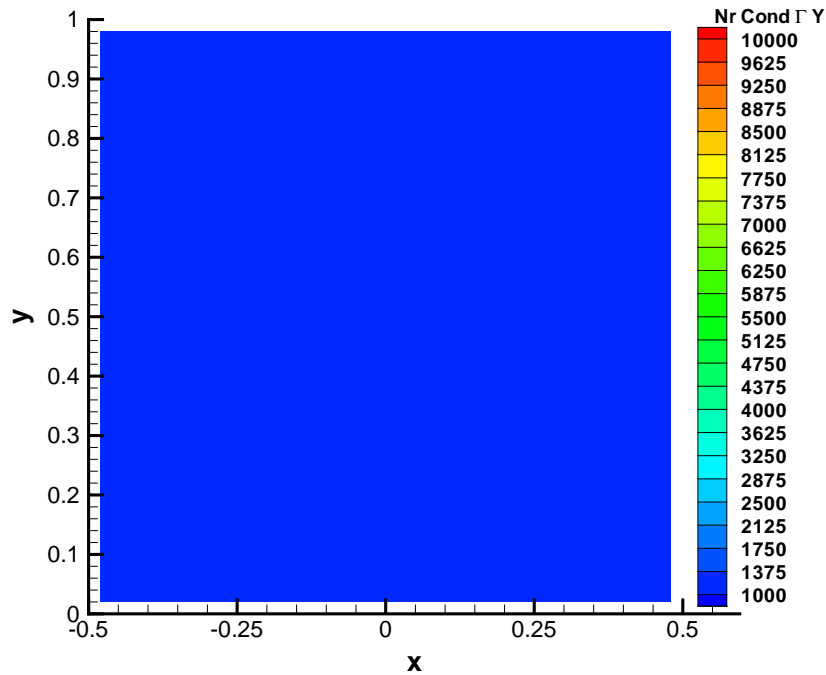


FIG. 4.104: Ponto de Estagnação Bidimensional - Nr Cond Matriz Γ em X - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

nova metodologia com hp analítico não conseguiu minimizar a razão dos autovalores (≈ 1), obtendo valores por volta de 2 próximo à parede ($y = 0$), e por volta de 20 na entrada do escoamento ($y = L_y$). Esses resultados não desejados foram provocados pela seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Na direção x , o menor autovalor é $\lambda_1 = u$, enquanto que o maior autovalor é $\lambda_3 \approx V_p$. Próximo à parede temos que a velocidade na direção y é $v = 0$. Então $\lambda_3 \approx V_p = u$, fazendo com que a razão de autovalores fique pequena. Na entrada do escoamento a velocidade na direção x é $u = 0$. A razão fica com valores elevados porque teremos $\lambda_1 = u \approx 0$ e $\lambda_3 \approx V_p = v > 0$. No parte central do domínio, as duas velocidades u e v são diferente de zero, fazendo com que V_p seja uma combinação dessas velocidades. Por isso, a razão de autovalores assume valores intermediários. Também é interessante verificar que, próximo ao ponto de estagnação, onde tanto u quanto v tendem para zero, a razão de autovalores tem o seu menor valor. O comportamento da nova metodologia com dissipação de Merkle é análogo. Observa-se que o método pré-condicionador clássico de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) também não conseguiu atingir o resultado esperado, que seria em torno de 2.6. Esses resultados indesejados obtidos pelo método de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) foram provocados pela seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Comparando os resultados obtidos pela nova metodologia e pelo pré-condicionador clássico verifica-se que a nova metodologia,

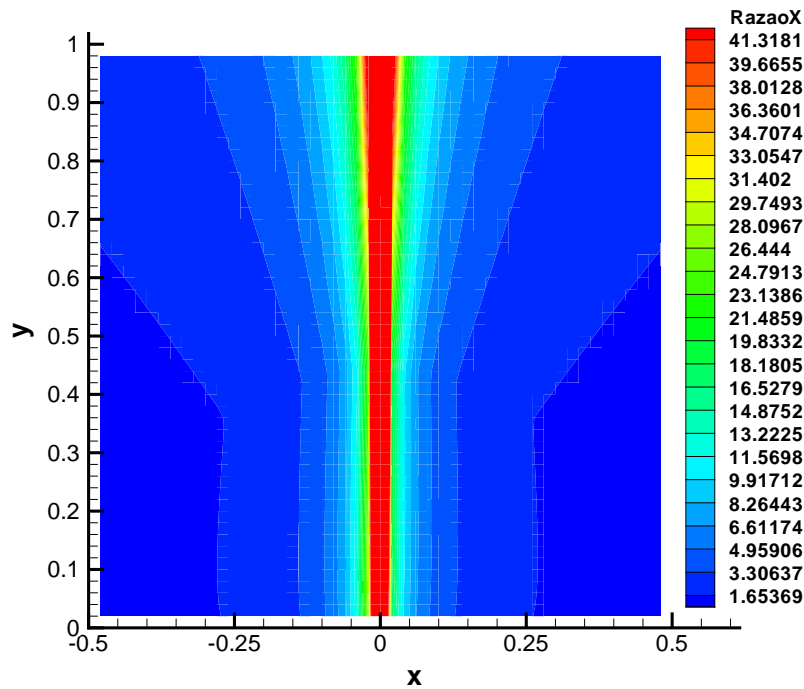


FIG. 4.105: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em X - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

mesmo sofrendo os efeitos da seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$, ainda conseguiu obter uma razão de autovalores 50 por cento menor do que a razão obtida pelo pré-condicionador clássico. Essa diferença de razão de autovalores é fruto da formulação analítica de hp combinada com $\delta = 0$. Verifica-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada, principalmente na região central do domínio em x .

Nas Figuras 4.110 e ?? são apresentados os resultados de razão de autovalores na direção y . Verifica-se que a nova metodologia com hp analítico não conseguiu minimizar a razão dos autovalores (≈ 1), obtendo valores por volta de 2 na entrada do escoamento ($y = L_y$), e por volta de 20 próximo à parede ($y = 0$). Esses resultados não desejados foram provocados pela seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Na direção y , o menor autovalor é $\lambda_1 = v$, enquanto que o maior autovalor é $\lambda_3 \approx V_p$. Na entrada do escoamento temos que a velocidade na direção x é $u = 0$. Então $\lambda_3 \approx V_p = v$, fazendo com que a razão de autovalores fique pequena. Próximo à parede a velocidade na direção y é $v = 0$. A razão fica com valores elevados porque teremos $\lambda_1 = v \approx 0$ e $\lambda_3 \approx V_p = u > 0$. No parte central do domínio, as duas velocidades u e v são diferente de zero, fazendo com que V_p seja uma combinação dessas velocidades. Por isso, a razão de autovalores assume valores intermediários. Também é interessante verificar que, próximo ao ponto de estagnação, onde tanto u quanto v tendem para zero, a razão de autovalores

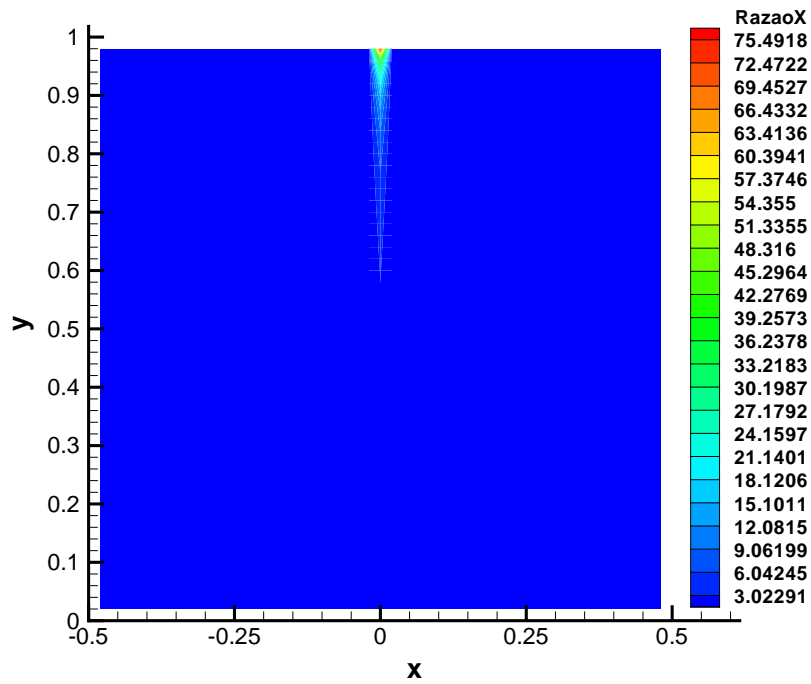


FIG. 4.106: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em X - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

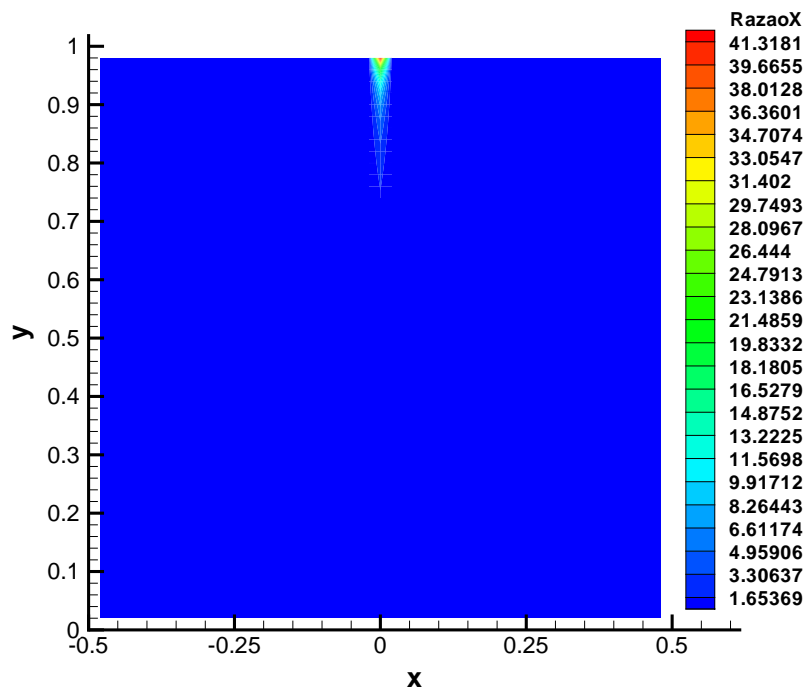


FIG. 4.107: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em X - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.

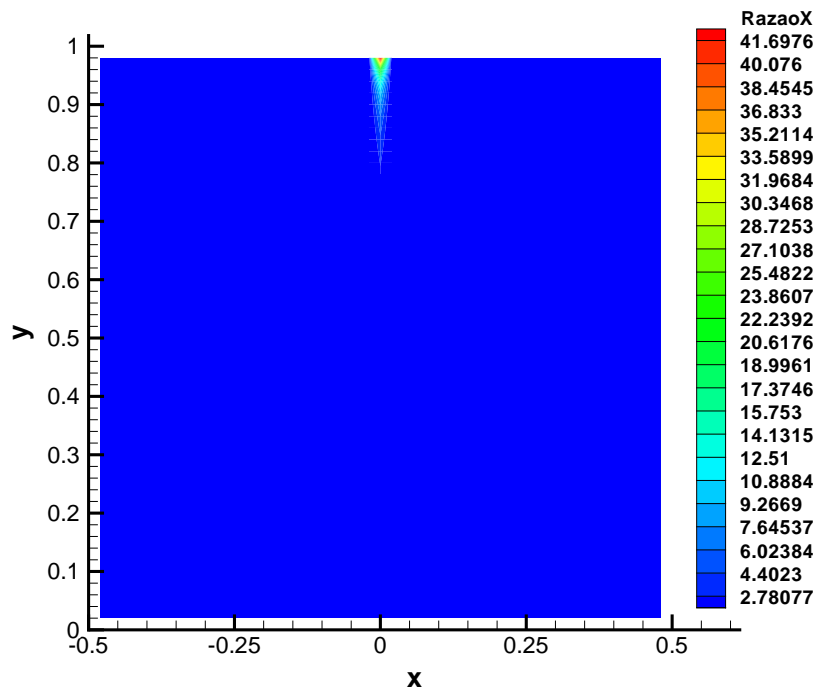


FIG. 4.108: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em X - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1ª ordem.

tem o seu menor valor. O comportamento da nova metodologia com dissipação de Merkle é análogo. Observa-se que o método pré-condicionador clássico de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) também não conseguiu atingir o resultado esperado, que seria em torno de 2.6. Esses resultados indesejados obtidos pelo método de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) foram provocados pela seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Comparando os resultados obtidos pela nova metodologia e pelo pré-condicionador clássico verifica-se que a nova metodologia, mesmo sofrendo os efeitos da seleção $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$, ainda conseguiu obter uma razão de autovalores 50 por cento menor do que a razão obtida pelo pré-condicionador clássico. Essa diferença de razão de autovalores é fruto da fórmula analítica de hp combinada com $\delta = 0$. Verifica-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada, por volta de 10^4 .

Na Figura 4.113 analisa-se o comportamento da norma infinita do erro absoluto da solução $\|\Delta Q\|_\infty$ ao longo das iterações no pseudo-tempo. A taxa de convergência dos métodos é inferida a partir deste gráfico. Os resultados das simulações mostram que, a nova metodologia com dissipação de Merkle foi a mais eficiente dentre as testadas. A nova metodologia convergiu com uma taxa de 0.20, enquanto os pré-condicionadores clássicos de VENKATESWARAN e MERKLE (1999) convergiram com uma taxa de 0.11, ou seja, um aumento da taxa de convergência

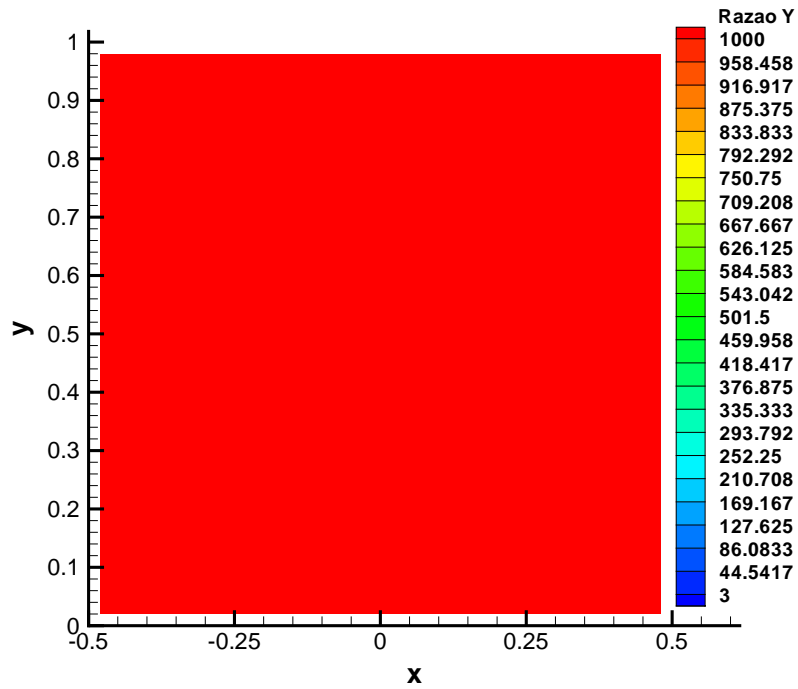


FIG. 4.109: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em Y - Esquema Não Pré-condicionado - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

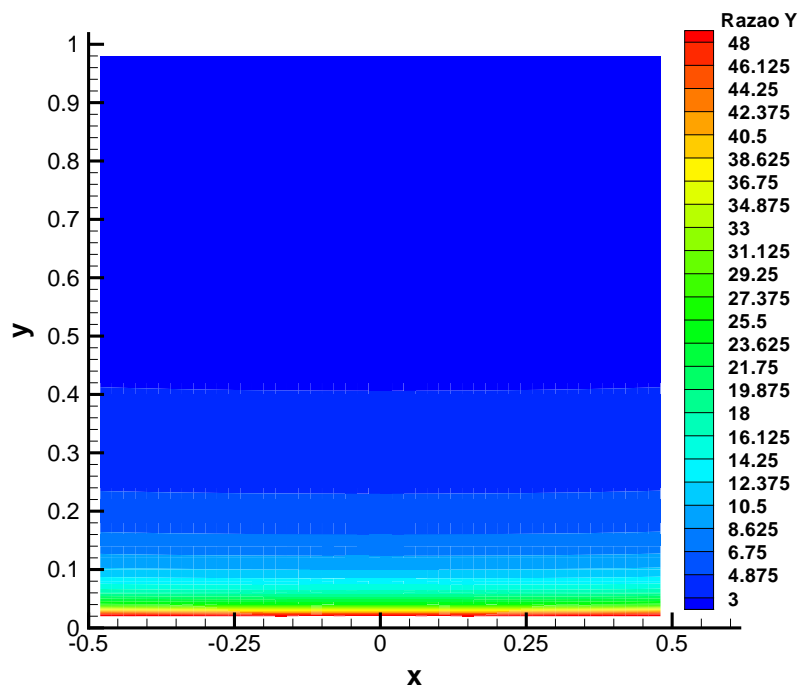


FIG. 4.110: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão de Autovalores em Y - Método de Merkle - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

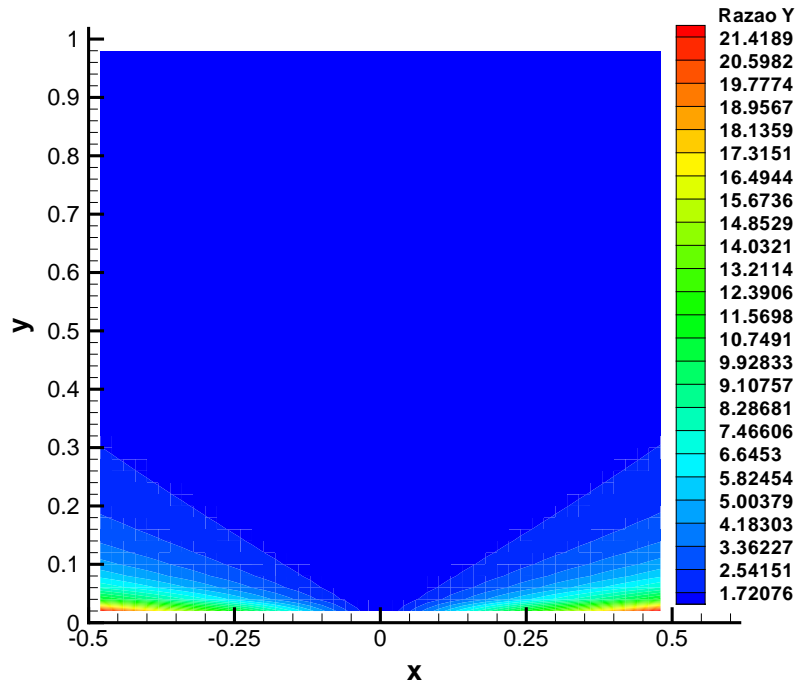


FIG. 4.111: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em Y - Nova Metodologia Sem Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1^a ordem.

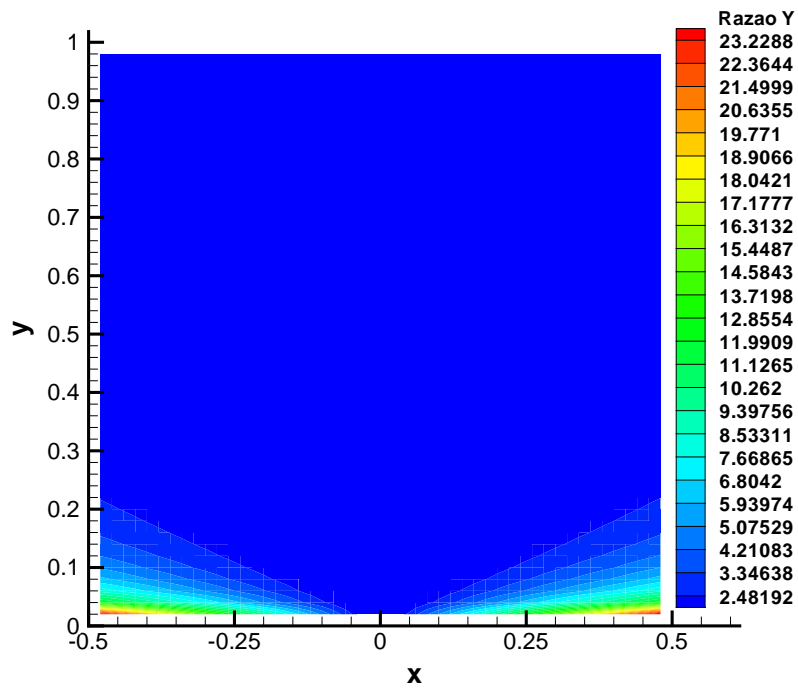


FIG. 4.112: Ponto de Estagnação Bidimensional - Razão Autovalores em Y - Nova Metodologia Com Correção Dissipação - $N_x = 51$ - $N_y = 51$ - Euler Implícito - MDP 1^a ordem.

de cerca de 80 por cento. O método com hp analítico sem a dissipação de Merkle também obteve uma taxa de convergência de 0.20. Entretanto, a nova metodologia com hp analítico chegou a soluções de temperatura fisicamente incorretas. Verificou-se claramente a dificuldade de convergência do esquema não pré-condicionado.

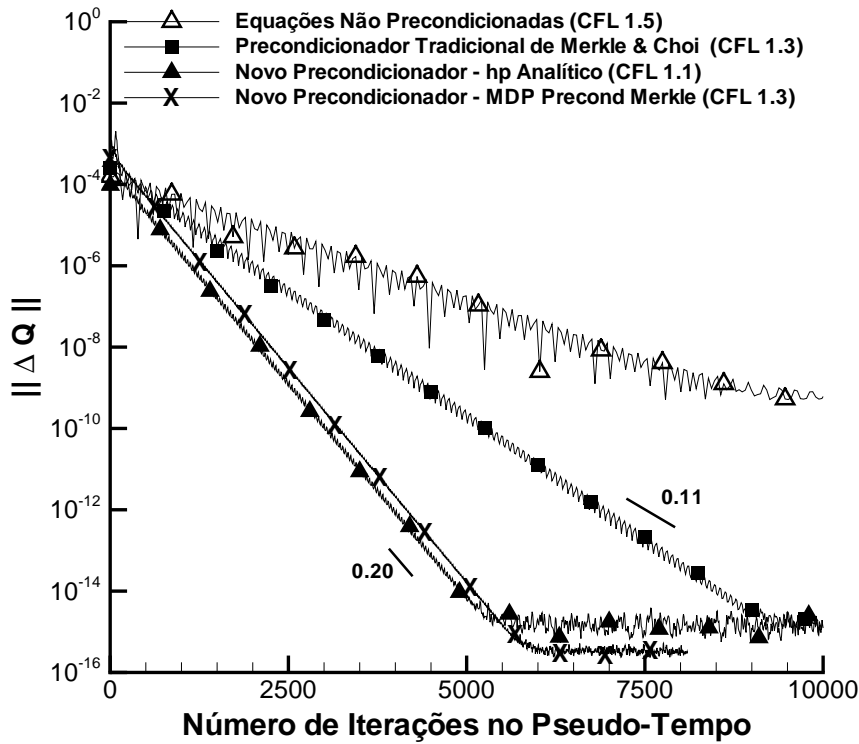


FIG. 4.113: Ponto de Estagnação Bidimensional - Erro Absoluto da Solução - $N_x = 51$ pontos - $N_y = 51$ pontos - Euler Implícito - MDP de 1ª ordem.

É evidente o elevado ganho em taxa de convergência obtido pela nova metodologia no problema bidimensional, cerca de 80 por cento em relação aos pré-condicionadores clássicos. Porém, verifica-se que a nova metodologia obteve melhores resultados nos problemas unidimensionais, atingindo um aumento de taxa de convergência de cerca de 230 por cento em relação aos pré-condicionadores clássicos. Isto está relacionado com o fato da mesma não ter conseguido minimizar a razão dos autovalores. Um possível caminho para se conseguir minimizar a razão de autovalores em simulações bidimensionais é modificar a seleção da velocidade do som pré-condicionada $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Poderíamos ter uma separação do tipo $V_{px} = |u|$ e $V_{py} = |v|$. Assim, teríamos os menores autovalores dados por $\lambda_1 x = u$ e $\lambda_1 y = v$, e os maiores autovalores dados por $\lambda_3 x \approx V_{px} = |u|$ e $\lambda_3 y \approx V_{py} = |v|$, o que minimizaria as razões de autovalores nas direções x e y . Mas isso só é possível se conseguirmos resolver o problema bidimensional como se fosse unidimensional, podendo desacoplar os autovalores da direção x dos autovalores

da direção y . O método de solução de sistemas pentadiagonais por relaxação das diagonais que foi usado neste trabalho de Tese não se mostrou eficiente para isso. Contudo, podem ser empregados métodos conhecidos como passo fracionado "Fractional Step"(YANENKO, 1971).

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

5.1 CONCLUSÕES E CONTRIBUIÇÕES

Este trabalho apresenta o estudo, a implementação e a análise de métodos numéricos classicamente utilizados para simulação de escoamentos compressíveis com baixo número de Mach. O foco principal deste trabalho foi o aumento da eficiência computacional desses métodos, refletido no aumento da taxa de convergência.

Como contribuição, foi definida uma nova metodologia para desenvolvimento de pré-condicionadores, baseada em uma seleção ótima de parâmetros da matriz pré-condicionadora. Esses parâmetros foram escolhidos a partir de critérios de desempenho estabelecidos para minimizar a razão de autovalores e a amplificação de erros, condições fundamentais para o aumento da taxa de convergência do método numérico proposto.

Também entende-se como contribuição, a análise realizada neste trabalho que culminou com a definição dos critérios de desempenho. Esta análise poderá ser utilizada pela comunidade científica para desenvolvimento de outras metodologias de pré-condicionamento. A formulação teórica está completa e tem condições adequadas para guiar futuros estudos a respeito do assunto.

A nova metodologia de pré-condicionamento foi testada em diferentes problemas, unidimensionais e bidimensionais, não viscosos e viscosos. Foram empregados métodos de marcha no tempo explícitos e implícitos. Foram utilizados esquemas de discretização espacial de 1ª e 3ª ordem. A nova metodologia foi capaz de simular o problema do ponto de estagnação bidimensional que apresenta conhecidas dificuldades de convergência. Face aos resultados obtidos, conclui-se que a nova metodologia de simulação computacional parece muito promissora. Em todas essas situações a nova metodologia se mostrou eficiente e robusta, conseguindo um relevante aumento de taxa de convergência em relação aos pré-condicionadores clássicos, obtendo soluções fisicamente corretas. Entretanto, apesar dos inúmeros testes realizados, ainda são necessários outros para consolidação do valor agregado pela metodologia.

Como foi visto, os resultados das simulações realizadas por LEE (2007) mostraram uma significativa redução na amplificação de erros, com significativo aumento da taxa de convergência dos métodos pré-condicionados. Entretanto, o estudo chegou a soluções fisicamente incorretas. LEE (2007) não mostrou os motivos que o levaram a obter soluções fisicamente incorretas, tampouco como resolver esse problema de acurácia das soluções. Essas questões foram respon-

didadas neste trabalho de Tese. A obtenção de soluções acuradas pela correção da dissipação da nova metodologia, com implementação de uma segunda matriz pré-condicionadora, mantendo o aumento de taxa de convergência conseguido, representa um passo adiante ao trabalho de LEE (2007), o que também é uma importante contribuição desta Tese.

Como casos testes, foram selecionados os problemas da onda entrópica periódica, do bocal convergente-divergente puramente subsônico, das advecções não viscosa e viscosa de uma onda térmica, além do ponto de estagnação bidimensional.

Para verificação de ordem de precisão do código computacional, utilizou-se o problema da onda entrópica periódica. Os resultados da análise de ordem mostraram que as discretizações temporais e espaciais geraram resultados numéricos com a mesma ordem teórica para as quais foram projetadas.

Para análise de eficiência computacional, a nova metodologia foi comparada com métodos pré-condicionadores clássicos. Além da taxa de convergência, avaliou-se a razão de autovalores, o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ e o número de condicionamento da matriz de autovetores.

Para marcha no pseudo tempo, foram usados esquemas com estabilidade numérica condicional, nos quais se consegue trabalhar com um CFL ótimo, permitindo uma avaliação adequada da eficiência das metodologias comparadas. Todos os métodos avaliados foram implementados com o seu CFL ótimo, garantindo assim que as comparações fossem realmente realizadas com a máxima eficiência de cada método.

A primeira etapa de desenvolvimento da nova metodologia consistiu da otimização da velocidade do som pré-condicionada V_p , buscando a redução do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ e, em consequência, a minimização da sensibilidade assintótica \hat{S}_a . Como caso teste, foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente subsônico. A partir dos resultados das simulações, pôde-se concluir que a otimização de V_p conseguiu atingir o objetivo desejado, uma vez que o número de condicionamento da matriz Γ foi reduzido em relação aos valores obtidos pelos métodos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999). Em contrapartida, a razão entre os autovalores obtida pela nova metodologia foi relativamente maior do que a razão de autovalores dos métodos pré-condicionadores clássicos. Para $M = 10^{-1}$, a nova metodologia com otimização de V_p obteve uma taxa de convergência maior do que os demais métodos. O ganho em eficiência obtido pela nova metodologia com a redução do número de condicionamento da matriz Γ foi superior à perda de eficiência causada pelo aumento na razão de autovalores. Entretanto, a partir de $M = 10^{-2}$, os métodos de WEISS e SMITH (1995) e VENKATESWARAN e MERKLE (1999) passaram a ser mais eficientes. Concluiu-se que, com $M = 10^{-2}$, o ganho em eficiência conseguido pela nova

metodologia com a redução do número de condicionamento da matriz Γ foi inferior à perda causada pelo aumento na razão de autovalores. Esses resultados indicaram que o controle do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ não é suficiente para garantir um aumento de eficiência computacional, havendo necessidade, ao mesmo tempo, de tratamento da razão de autovalores. Quanto ao esquema não pré-condicionado, verificou-se uma degradação de convergência para $M = 10^{-1}$, devido à elevada razão de autovalores, apesar dos baixos valores de número de condicionamento da matriz Γ . A dificuldade de convergência do esquema não pré-condicionado ainda foi amplificada para $M = 10^{-2}$.

Na segunda etapa do desenvolvimento da nova metodologia, foram selecionadas expressões para os parâmetros h_p , V_p e δ para atender aos critérios de desempenho estabelecidos. Como caso teste, também foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente subsônico. A partir dos resultados das simulações, pôde-se verificar que os resultados de número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ obtidos pela nova metodologia com h_p analítico foram significativamente menores do que os obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos. Observamos ainda que o esquema não pré-condicionado também possui um número de condicionamento relativamente baixo em relação aos pré-condicionadores clássicos. Dessa forma, conclui-se que o pré-condicionamento clássico afeta acentuadamente o número de condicionamento do sistema, o que é corrigido e otimizado pela nova metodologia de pré-condicionamento proposta.

Verifica-se que a nova metodologia com h_p analítico conseguiu minimizar a razão dos autovalores, e com isso, minimizar a rigidez numérica $\hat{R} \approx 1$. Observa-se que os métodos pré-condicionadores clássicos obtiveram uma razão de autovalores em torno de 2.6. Consta-se ainda que o esquema não pré-condicionado possui uma razão dos autovalores elevada, e que a mesma cresce acentuadamente quando o número de Mach é reduzido. Dessa forma, conclui-se que apesar do pré-condicionamento clássico reduzir significativamente a razão dos autovalores, a nova metodologia consegue um resultado ainda melhor, minimizando a disparidade dos autovalores do sistema.

A nova metodologia h_p analítico foi sempre a mais eficiente dentre as demais testadas, obtendo excelentes resultados que atingem um aumento de até 270 por cento em relação a taxa de convergência dos métodos pré-condicionadores clássicos. A formulação analítica de h_p conseguiu atingir o objetivo desejado, uma vez que o número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ foi reduzido em relação aos valores obtidos pelos métodos pré-condicionadores clássicos. O emprego de h_p otimizado via método de Powell gerou uma taxa de convergência semelhante à taxa obtida pelo método com h_p analítico. Para $M = 10^{-3}$, a taxa de convergência obtida pelo método com h_p otimizado foi um pouco maior do que com

h_p analítico. Entretanto, essa redução em número de iterações é pouco significativa comparada ao aumento de tempo computacional provocado pelo algoritmo de otimização de Powell. A formulação analítica de h_p evita o custo computacional gerado pelo processo de otimização de Powell. O tempo computacional por iteração gasto pelo método com h_p otimizado é da ordem de 10^{-2} segundos, enquanto que o custo do método com h_p analítico é da ordem de 10^{-3} segundos.

Através do método com V_p otimizada observou-se que a diferença de taxa de convergência obtida pela nova metodologia e pelos pré-condicionadores clássicos cresce com a redução do número de Mach. Além disso, verifica-se que quanto menor é o número de Mach, maior é a influência da minimização do número de condicionamento da matriz Γ na taxa de convergência.

Ainda na segunda etapa de desenvolvimento da nova metodologia, foram realizadas comparações entre as soluções analíticas de regime permanente do problema. A validação do código computacional e do modelo matemático proposto analisou se estes eram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado. Através das comparações das soluções de pressão e temperatura, concluiu-se que o código computacional e o modelo matemático proposto foram capazes de reproduzir de forma aceitável o comportamento do fenômeno físico simulado. Entretanto, a nova metodologia com h_p analítico apresentou erros na solução de temperatura. Por isso, para corrigir os erros encontrados na solução de temperatura, verificou-se a necessidade de modificação da nova metodologia.

A terceira fase de desenvolvimento da nova metodologia buscava corrigir os erros encontrados na solução da temperatura. A pesquisa se balizou na premissa de que, como todas as formulações foram escritas em forma incremental ou residual, a contribuição implícita influenciaria somente na taxa de convergência do método numérico (TANNEHILL et al., 1997). Assim, certamente a fonte geradora do erro na solução de temperatura estaria no lado explícito do sistema de equações. Verificou-se que o erro na solução de temperatura estava vinculado à baixa dissipação na variável pressão hidrodinâmica. Constatou-se que a contribuição da pressão hidrodinâmica na dissipação é eliminada quando utilizamos a formulação analítica de h_p empregada. Após descobrir a fonte do problema, ajustou-se o MDP usando o esquema de pré-condicionamento clássico no cálculo da dissipação. Foram implementadas duas matrizes pré-condicionadoras, uma para o lado explícito, com pré-condicionador clássico, e outra para o lado implícito, com a nova metodologia de pré-condicionamento. Foi observado que a implementação de duas matrizes pré-condicionadoras não gera qualquer aumento de custo computacional, tratando-se apenas de uma questão de adaptação do código computacional para correção da dissipação. Além disso, o foco do trabalho é a eficiência computacional de métodos numéricos, que é relacionada com o lado implícito do sistema de equações.

Em função dos resultados obtidos pela nova metodologia com correção da dissipação, conseguindo aumentar a taxa de convergência e chegando a soluções fisicamente corretas, comprovou-se numericamente que a contribuição implícita influi somente na taxa de convergência do método numérico, enquanto que o lado explícito está relacionado com a acurácia da solução.

Dando continuidade à pesquisa, foram realizadas simulações em outros casos testes com a finalidade de verificar possíveis diferenças de comportamento em relação aos resultados obtidos no problema do difusor.

O problema da advecção não viscosa permitiu concluir que a nova metodologia também é eficiente mesmo estando sujeita ao uso de discretizações espaciais de 3ª ordem e de um método de marcha implícito.

Com a finalidade de avaliar a influência da viscosidade sobre a taxa de convergência dos métodos numéricos, introduziu-se uma contribuição viscosa no problema da advecção de uma onda térmica. A partir dos resultados das simulações, concluiu-se que, da mesma forma que no caso não viscoso, o emprego de um método de marcha implícito e o aumento de ordem espacial não afetaram o desempenho da nova metodologia, que se manteve como a mais eficiente dentre os demais métodos avaliados. Além disso, a nova metodologia se mostrou eficiente mesmo com a introdução da viscosidade. A validação mostrou que foram obtidas soluções acuradas, tanto para o caso não viscoso quanto para o caso viscoso.

O problema do escoamento bidimensional contra uma parede também foi usado como caso teste por ser considerado bastante adequado para avaliação da nova metodologia, haja visto apresentar conhecidas dificuldades de convergência devido ao baixo número de Mach nas regiões de estagnação. A partir dos resultados das simulações, verificou-se que a nova metodologia se manteve como a mais eficiente dentre as demais métodos avaliados. Entretanto que a nova metodologia não conseguiu repetir o desempenho conseguido nos problemas unidimensionais. O motivo estava relacionado com o fato da mesma não ter conseguido minimizar a razão dos autovalores. Apontou-se um possível caminho para se conseguir minimizar a razão de autovalores, modificando a seleção da velocidade do som pré-condicionada $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$.

5.2 COMENTÁRIOS FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

Acredita-se que este trabalho representa um grande passo na capacidade de simular, com eficiência, escoamentos compressíveis com baixo número de Mach. Para tanto, deve-se haver continuidade da pesquisa. Neste contexto, entende-se como trabalhos futuros o que se segue:

- um possível caminho para se conseguir minimizar a razão de autovalores em simu-

lações bidimensionais é modificar a seleção da velocidade do som pré-condicionada $V_p = \sqrt{u^2 + v^2}$. Pode-se ter uma separação do tipo $V_p x = |u|$ e $V_p y = |v|$. Entretanto, isso só é possível se conseguirmos resolver o problema bidimensional como se fosse unidimensional, podendo desacoplar os autovalores da direção x dos autovalores da direção y . O método de solução de sistemas pentadiagonais por relaxação das diagonais que foi usado neste trabalho de Tese não se mostrou eficiente para isso. Contudo, podem ser empregados métodos conhecidos como passo fracionado "Fractional Step"(YANENKO, 1971);

- implementação da técnica DTS com a nova matriz pré-condicionadora, uma vez que a simulação transiente realizada no presente trabalho para solução do problema da onda entrópica periódica utilizou um esquema de pré-condicionamento clássico.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACOCELLA, E. C. Áreas de conhecimento tecnológico de interesse do Exército Brasileiro. Curso de Política Estratégia e Altos Estudos Militares, Escola de Comando e Estado-Maior do Exército, Rio de Janeiro, 2004.
- ADES, R., PELLANDA, P. C. e JR, I. B. Engenharia de defesa: O mais novo programa de pós-graduação do instituto militar de engenharia. Revista Militar de Ciencia e Tecnologia, Quadrimestre 1:94–109, 2010.
- ALVES, L. S. B. Review of numerical methods for the compressible flow equations at low mach numbers. Em XII Encontro de Modelagem Computacional, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, Dezembro 2009.
- ALVES, L. S. B. Dual time stepping with high order physical-time integration: Preconditioned implicit runge-kutta methods. Submitted to Journal of Computational Physics, 2010.
- ANDERSON, J. D. Computation Fluid Dynamics: The Basics with applications. McGrall-Hill, 1995.
- BAZARAA, M. S. Nonlinear Programming: Theory and Applicattions. New York: Wiley, 1993.
- BEAM, R. M. e WARMING, R. F. An implicit finite-difference algorithm for hyperbolic system in conservation-law form. Journal of Computational Physics, 22(1):87–110, 1976.
- BORGES, J. I., PELLANDA, P. C. e RONZANI, E. R. Proposta do programa de pós-graduação em engenharia de defesa - pged. Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2006.
- BRASIL. Ministério da Defesa: Ministério da Defesa: Política de Defesa Nacional. Decreto nº 5.484, Brasilia, 2005.
- BRASIL. Ministério da Defesa: Estratégia Nacional de Defesa. 2ª Ed. Decreto nº 6.703, Brasilia, 2008.
- BRILEY, W. R., MCDONALD, H. e SHAMROTH, S. J. A low mach number euler formulation and application to time iterative lbi schemes. AIAA Journal, 21(10):1467–1469, 1983.
- BUELOW, P. E. O., VENKATESWARAN, S. e MERKLE, C. L. Effect of grid aspect ratio on convergence. AIAA Journal, 32(12):2402–2408, 1994.
- BUELOW, P. E. O., VENKATESWARAN, S. e MERKLE, C. L. Stability and convergence analysis of implicit upwind schemes. Computers and Fluids, 30:961–988, 2001.
- CHAPRA, S. C. e CANALE, R. P. Métodos Numéricos para Engenheiros. 5a Edição - Mc Graw Hill, São Paulo, 2008.
- CHOI, D. L. e MERKLE, C. L. Application of time-iterative schemes to incompressible flow. Em AIAA Conference Paper, 1518-1524, 1985.

- CHOI, Y. H. e MERKLE, C. L. The application of preconditioning in viscous flows. Journal of Computational Physics, 105:207–223, 1993.
- CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. Journal of Computational Physics, 2:12–26, 1967.
- DAHLQUIST, G. A special stability problem for linear multistep methods. BIT Numerical Mathematics, 3:27–43, 1963.
- DARMOFAL, D. L. e SCHMID, P. J. The importance of eigenvectors for local preconditioners of the Euler equations. Journal of Computational Physics, 127:346–362, 1996.
- EHLE, B. L. High order a-stable methods for the numerical solution of systems of odes. BIT Numerical Mathematics, 8:276–278, 1968.
- FEDKIW, R. P., MERRIMAN, B. e OSHER, S. High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry. Journal of Computational Physics, 132:175–190, 1997.
- FOX, R. L. Optimization Methods for Engineering Design. Addison-Wesley, Califónia, 1971.
- FREITAS, S. R. Métodos Numéricos. Departamento de Computação e Estatística Centro de Ciências Exatas e Tecnologia Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, 2000.
- GOLUB, G. H. e LOAN, C. F. V. Matrix Computations. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3rd edition, 1996.
- GREENBERG, M. D., editor. Advanced Engineering Mathematics. Prentice Hall, New Jersey, 2nd edition, 1998.
- GRENIER, N., VILA, J. P. e VILLEDIEU, P. A compressible model for low mach two-phase flow. ONERA - MULTIMAT, 2011.
- HARLOW, F. H. e AMSDEN, A. A. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. Journal of Computational Physics, 8(2):197–213, 1971.
- HUTTON, D. V. Fundamentals of Finite Element Analysis. McGraw-Hill, Washington, 1rd edition edition, 2004.
- KARKI, K. C. e PATANKAR, S. V. Pressure-based calculation procedure for viscous flows at all speeds in arbitrary configurations. AIAA Journal, 27(9):1167–1174, 1989.
- KESHTIBAN, I. J., BELBLIDIA, F. e WEBSTER, M. F. Compressible flow solvers for low Mach number flows: A review. Department of computer science at university of wales, swansea, u.k., Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2004.
- KNUPP, K. S. P. Verification of computer codes in computational science. CRC Press LLC, 2000.
- LEE, D. e LEER, B. V. Progress in local preconditioning of the euler and navier-stokes equations. AIAA Journal, 3328-CP, 1993.
- LEE, S.-H. Convergence characteristics of preconditioned Euler equations. Journal of Computational Physics, 228(1):266–288, 2005.

- LEE, S.-H. Cancellation problem of preconditioning method at low Mach numbers. Journal of Computational Physics, 225(2):1199–1210, 2007.
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1st edition, 1995.
- MATOS, A. R. F. Optimização de asas laminares para aeronaves. Instituto Superior Técnico - Universidade Técnica de Lisboa, 2009.
- MERKLE, C. L. e ATHAVALE, M. A time accurate unsteady incompressible algorithm based on artificial compressibility. Em AIAA Conference Paper, 87-1137, 1987.
- MERKLE, C. L. e CHOI, Y. H. Computation of low-speed flow with heat addition. AIAA Journal, 25:831–838, 1987.
- MERKLE, C. L. e CHOI, Y. H. Computation of low speed compressible flows with time-marching methods. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 25:293–311, 1988.
- MOINIER, P. e GILES, M. B. Stability analysis of preconditioned approximations of the euler equations on unstructured meshes. Journal of Computational Physics, 178:498–519, 2002.
- OBERKAMPF, W. L. Verification and Validation in Scientific Computing. Cambridge University Press, New York, 2010.
- PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flows. Hemisphere Publishing Co. New York, 1980.
- PELLANDA, P. C. A pós-graduação em engenharia de defesa no contexto do sistema de ciência e tecnologia do exército brasileiro. Dissertação de Mestrado em Ciências Militares, Escola de Comando e Estado-Maior do Exército, Rio de Janeiro, 2008.
- POINSOT, T. J. e LELE, S. K. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. Journal of Computational Physics, 101:104–129, 1992.
- PULLIAN, T. H. Artificial dissipation models for the euler equations. Number 85, pág. 0438, Nevada, December 1986.
- RIZZI, A. e ERIKSSON, L. E. A jet in cross flow. Journal of Fluid Mechanics, 153:275, 1985.
- ROE, P. L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. Journal of Computational Physics, 43:357–372, 1981.
- SALVADOR, N. M. C. Simulação numérica do escoamento em um motor foguete com reação química. Tese de Doutorado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - São José do Campos, 2005. INPE-12251-TDI/979.
- SCHWER, D. A. Numerical Study of Unsteadiness in Non-Reacting and Reacting Mixing Layers. Tese de Doutorado, Pennsylvania State University, 1999.
- SESTERHENN, J., MÜLLER, B. e THOMANN, H. On the cancellation problem in calculating compressible low Mach number flows. Journal of Computational Physics, 151(2):597–615, 1999.

- SHUEN, J. S., CHEN, K. H. e CHOI, Y. H. A time accurate algorithm for chemical non-equilibrium flows at all speeds. AIAA Technical Paper, págs. 92–3639, 1992.
- SHUEN, J. S., CHEN, K. H. e CHOI, Y. H. A coupled implicit method for chemical non-equilibrium flows at all speeds. Journal of Computational Physics, 106:306–318, 1993.
- SHUKLA, R. K. e ZHONG, X. Derivation of high-order compact finite difference schemes for non-uniform grid using polynomial interpolation. Journal of Computational Physics, 204: 404–429, 2005.
- SHUKLA, R., TATINENI, M. e ZHONG, X. Very high-order compact finite difference schemes on non-uniform grids for incompressible navier-stokes equations. Journal of Computational Physics, 224(2), 2007.
- STOER, J. e BULIRSCH, R. Introduction to Numerical Analysis. Springer – Verlag, New York, 2nd edition, 1993.
- TANNEHILL, J. C., ANDERSON, D. A. e PLETCHER, R. H. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Taylot & Francis, Philadelphia, 1997.
- TEIXEIRA, R. S. e ALVES, L. S. B. A study of initial and boundary conditions for spatially developing planar mixing layers. International Journal of Computational Fluid Dynamics (aceito para publicação), 2011.
- TURKEL, E. Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. Journal of Computational Physics, 72(2):277–298, 1987.
- TURKEL, E., FITERMAN, A. e VAN LEER, B. Preconditioning and the limit to the incompressible flow equations. Technical report 93-42, ICASE, 1993.
- TURKEL, E., VATSA, V. N. e RADESPIEL, R. Preconditioning methods for low-speed flows. Em AIAA Conference Paper, 96-2460, 1996.
- VAN DORSSELAER, J., KRAAIJEVANGER, J. e SPIJKER, M. Linear stability analysis in the numerical solution of initial value problems. Acta Numerica, págs. 199–237, 1993.
- VAN LEER, B., LEE, W. T. e ROE, P. Characteristic time-stepping or local preconditioning of the euler equations. AIAA Journal, (91-1552), 1991.
- VENKATESWARAN, S. e MERKLE, C. L. Analysis of Preconditioning Methods for the Euler and Navier-Stokes Equations. Von Karman Institute Lecture Series, 1999.
- WEISS, J. M. e SMITH, W. A. Preconditioning applied to variable and constant density flows. AIAA Journal, 33(11):2050–2057, 1995.
- WELCH, J. E., HARLOW, F. H. e SHANNON, J. P. A computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluidflow problems involving free surfaces. Los Alamos Scientific Laboratory, Tec. Report LA-3425, 1966.
- WOLF, W. R. Simulação de escoamentos aerodinâmicos compressíveis utilizando esquemas não oscilatórios de alta ordem de precisão em malhas não estruturadas. Tese de Doutorado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica - São José do Campos, 2006.
- YANENKO, N. N. The Method of Fractional Steps. Springer – Verlag, New York/Berlin, 1971.

7 APÊNDICE A

7.1 PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO SEM RESTRIÇÃO

Os problemas de otimização a serem resolvidos neste trabalho enquadram-se na seguinte classe:

$$\min_{\bar{x} \in \mathfrak{R}} F(\bar{x}) \quad (7.1)$$

não estando sujeito à restrições

onde F é a função objetivo ou função custo e \bar{x} é o vetor de variáveis do projeto de otimização.

A partir de um valor inicial \bar{x}_0 fornecido pelo usuário, o método de otimização determina uma direção \bar{S} a seguir que reduza a o valor da função objetivo. Uma vez definida essa direção, o método decide o quanto deve andar nessa direção. Essa incumbência cabe à rotina de busca unidimensional. Os valores de \bar{x}_0 e \bar{S} são utilizados pela rotina de busca unidimensional para encontrar um valor ótimo de α^* tal que:

$$F(\bar{x}_0 + \alpha^* \bar{S}) < F(\bar{x}_0) \quad (7.2)$$

A família de métodos de otimização a serem empregados em problemas sem restrição é dividida em três classes de acordo com as informações da função objetivo que são utilizadas: métodos de ordem zero, de primeira ordem e de segunda ordem. Nos métodos de ordem zero somente o valor da função objetivo é utilizado. São usados quando a função não é diferenciável ou quando a função é altamente não-linear, sendo difícil obter as derivadas de forma precisa. Entre um dos mais importantes métodos temos o método das direções conjugadas de Powell FOX (1971). Nos métodos de primeira ordem são usados os valores da função objetivo e de suas derivadas (gradientes) em relação às variáveis de projeto. Entre os métodos mais clássicos existentes temos o método "Steepest Descent" e o método dos gradientes conjugados. Já nos métodos de segunda ordem são utilizados os valores da função objetivo, de suas derivadas e também da matriz Hessiana. Entre os métodos existentes, destacam-se os métodos de Newton e Quasi-Newton BAZARAA (1993). A rapidez na convergência do resultado aumenta do primeiro para o último método.

Neste estudo, em função de dificuldades de diferenciação das funções custos, tais como o uso de uma norma infinita L_∞ para cálculo do número de condicionamento, foi usado o método de otimização de Powell, em conjunto com uma rotina de busca unidimensional via aproximação quadrática.

7.2 MÉTODO DE POWELL

Neste método parte-se de uma base vetorial \bar{S} para o espaço de otimização a ser pesquisado. Normalmente a base adotada é a canônica. Após a escolha da base, minimiza-se unidimensionalmente cada uma destas direções, de acordo com a equação (7.2), sempre partindo do projeto \bar{x} obtido na busca anterior. Ao completar esse primeiro ciclo, determina-se uma direção conjugada, formada pelo ponto final deste processo \bar{x} e pelo ponto inicial \bar{x}_0 . Esta direção conjugada irá substituir uma das direções do conjunto anterior, em geral a mais antiga. O processo será repetido minimizando-se unidimensionalmente cada uma das direções desse novo conjunto, completando-se assim o segundo ciclo, onde será calculada uma nova direção conjugada, formada pelos pontos inicial e final do referido ciclo. Novamente, a direção conjugada irá substituir uma das existentes no conjunto inicial e este processo será repetido até que seja atendido o critério de parada proposto. A Figura 1 ilustra o processo de minimização através do método de Powell para um caso bidimensional, onde as direções 1 e 2 formam a base inicial, e a representa a direção conjugada gerada, calculada no final do primeiro ciclo.

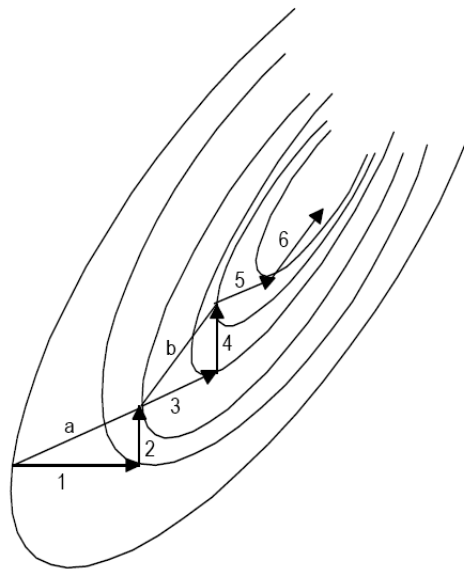


FIG. 7.1: Processo de Busca do Método de Powell

A Figura 2 apresenta o algoritmo do Método de Powell. A matriz A contém em suas colunas as direções iniciais de busca, J é o contador das direções minimizadas dentro de cada ciclo, L é o contador do número de ciclos executados, \bar{S} é a direção a ser pesquisada na busca unidimensional, \bar{x}_0 é o projeto inicial e α^* é o passo ótimo calculado na busca unidimensional.

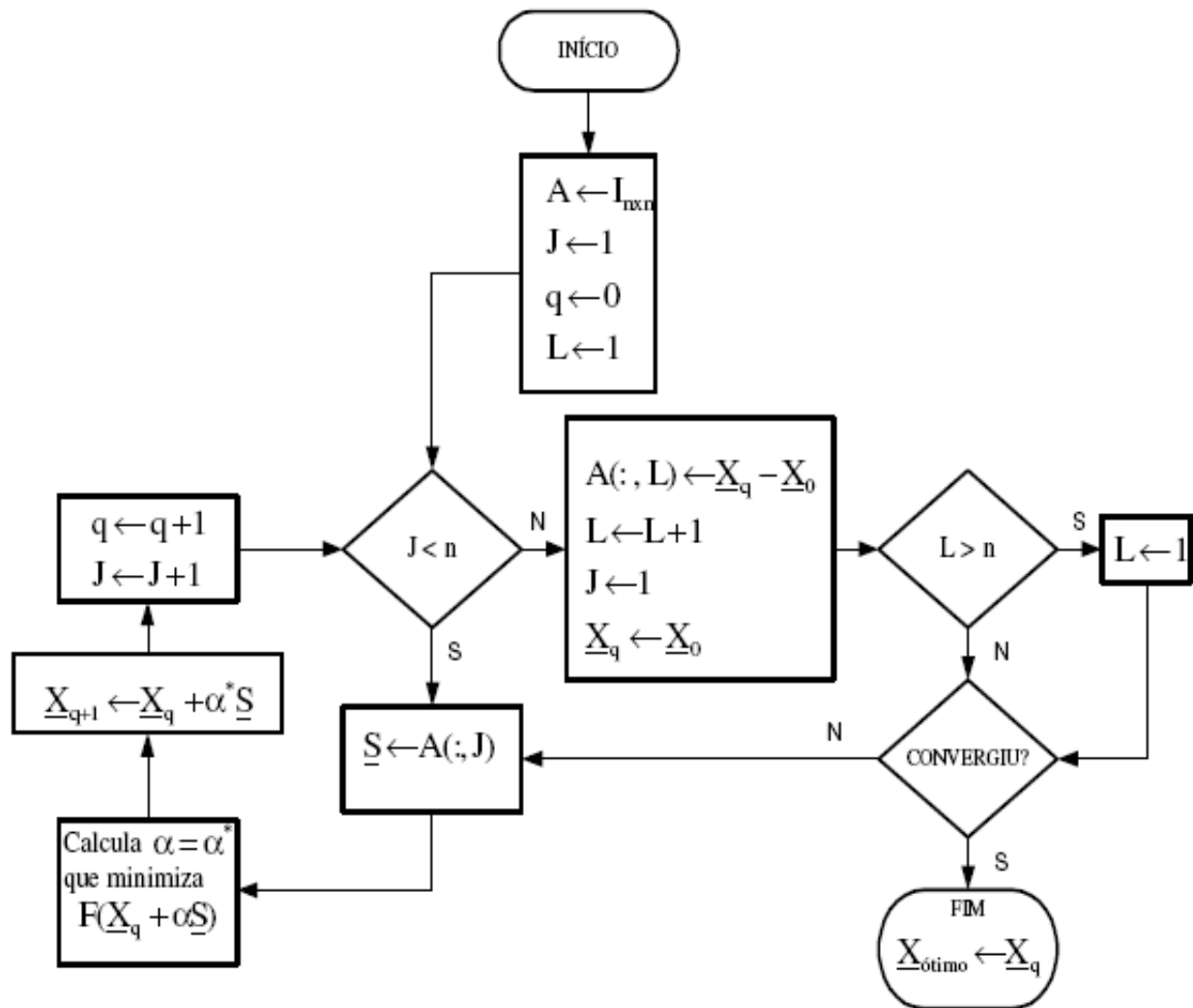


FIG. 7.2: Algoritmo do Método de Powell

7.3 BUSCA UNIDIMENSIONAL POR APROXIMAÇÃO QUADRÁTICA

O problema de minimizar F está reduzido a uma seqüência de buscas unidimensionais. Em princípio, o cálculo de α^* só é possível por meio de algum processo numérico. O método de busca unidimensional via aproximação quadrática consiste em ajustar a função $H(\alpha)$, observando somente três pontos (α_1, α_2 e α_3). Seja:

$$H(\alpha) := a + b\alpha + c\alpha^2 \quad (7.3)$$

a função quadrática $H(\alpha)$ possuirá um mínimo se $c > 0$. Neste caso, o mínimo da função estará localizado em

$$\begin{aligned} \frac{dH}{d\alpha} &= b + 2c\alpha = 0 \\ \alpha &= \alpha^* = \frac{-b}{2c} \end{aligned} \quad (7.4)$$

Os valores dos parâmetros a , b e c podem ser calculados atribuindo-se valores a $F(\alpha)$ em três pontos distintos a_1 , a_2 e a_3 e resolvendo as seguintes equações:

$$\begin{aligned} f_1 &= a + b\alpha_1 + c\alpha_1^2 \\ f_2 &= a + b\alpha_2 + c\alpha_2^2 \\ f_3 &= a + b\alpha_3 + c\alpha_3^2 \end{aligned} \quad (7.5)$$

Para simplificar os cálculos, escolhe-se $a_1 = 0$, $a_2 = t$ e $a_3 = 2t$. Assim temos:

$$\begin{aligned} F(0) &= f_1 = H(0) \\ F(t) &= f_2 = H(t) \\ F(2t) &= f_3 = H(2t) \end{aligned} \quad (7.6)$$

chegando a

$$\begin{aligned} f_1 &= a \\ f_2 &= a + bt + ct^2 \\ f_3 &= a + 2bt + 4ct^2 \end{aligned} \quad (7.7)$$

Resolvendo o sistema de equações apresentado em (7.7) obtemos que:

$$\begin{aligned} a &= f_1 \\ b &= \frac{4f_2 - 3f_1 - f_3}{2t} \\ c &= \frac{f_3 + f_1 - 2f_2}{2t^2} \\ \alpha^* &= \frac{4f_2 - 3f_1 - f_3}{4f_2 - 2f_3 - 2f_1} t \end{aligned} \quad (7.8)$$

Para que haja mínimo em $H(\alpha)$, ou seja, $c > 0$, devemos ter que:

$$f_2 < f_3 + f_1 \quad (7.9)$$

A Figura 3 apresenta o algoritmo do método de busca unidimensional via aproximação quadrática, como se segue:

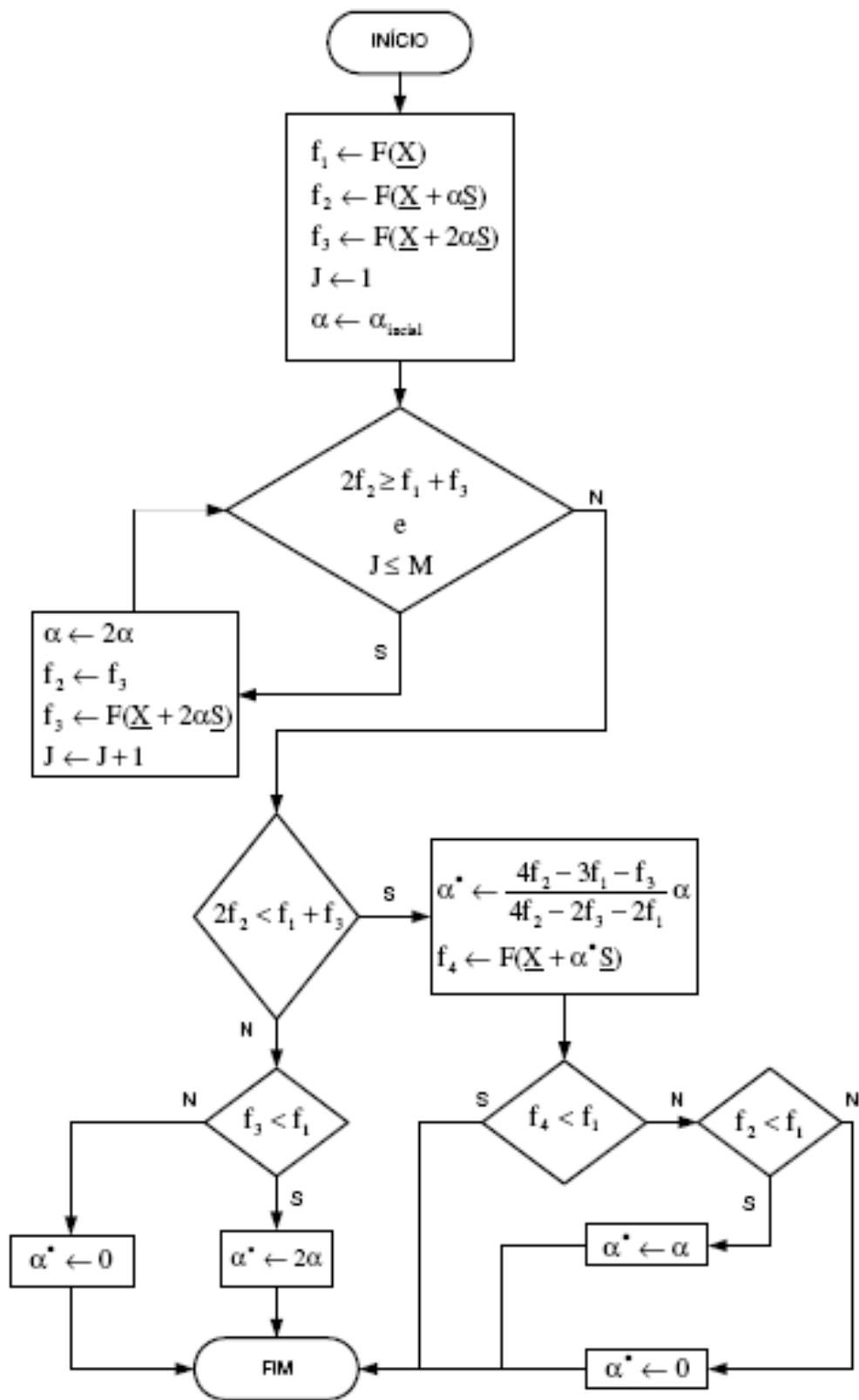


FIG. 7.3: Algoritmo do Método de Busca Unidimensional via Aproximação Quadrática

8 APÊNDICE B

8.1 ANÁLISE DE EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL

Foram realizadas simulações de $M_0 = 10^{-1}$ até $M_0 = 10^{-7}$. Para $M_0 < 10^{-7}$, o erro absoluto da solução fica da mesma ordem da precisão de máquina, dificultando análises.

Como caso teste, foi utilizado o problema do bocal convergente-divergente subsônico. Para obtenção da solução de regime permanente, na marcha no pseudo-tempo foi empregado o método de Euler Explícito. Em todas as simulações utilizou-se uma malha espacial com 201 pontos. As discretizações espaciais dos fluxos não viscosos foram realizadas com MDP de 1ª ordem.

8.1.1 NÚMERO DE CONDICIONAMENTO DA MATRIZ Γ

Nas Figuras 8.1 a 8.5, são apresentados os resultados obtidos do número de condicionamento da matriz pré-condicionadora Γ de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

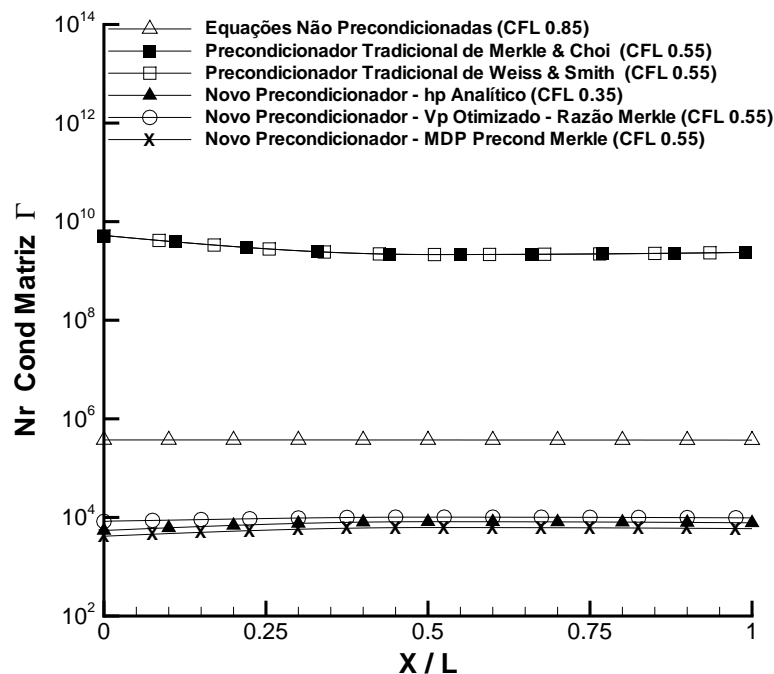


FIG. 8.1: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

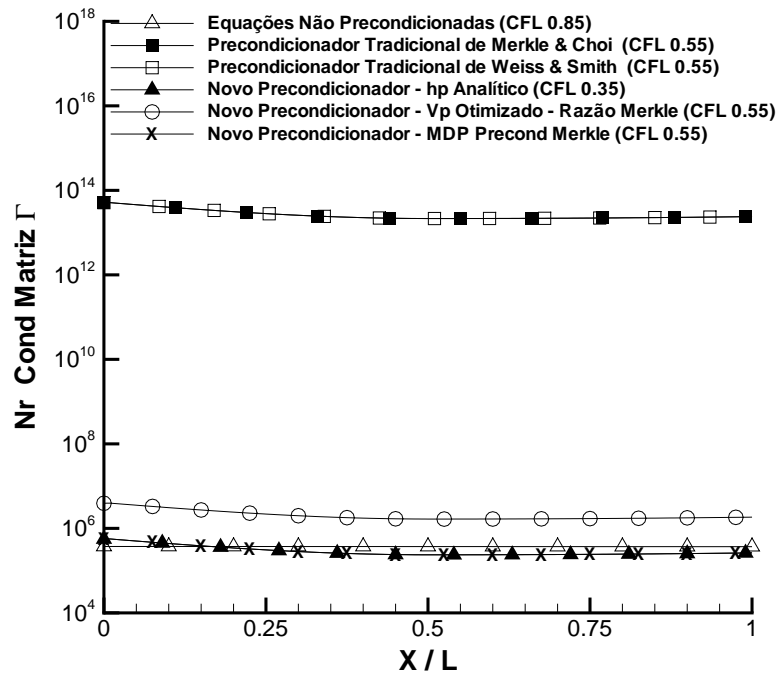


FIG. 8.2: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

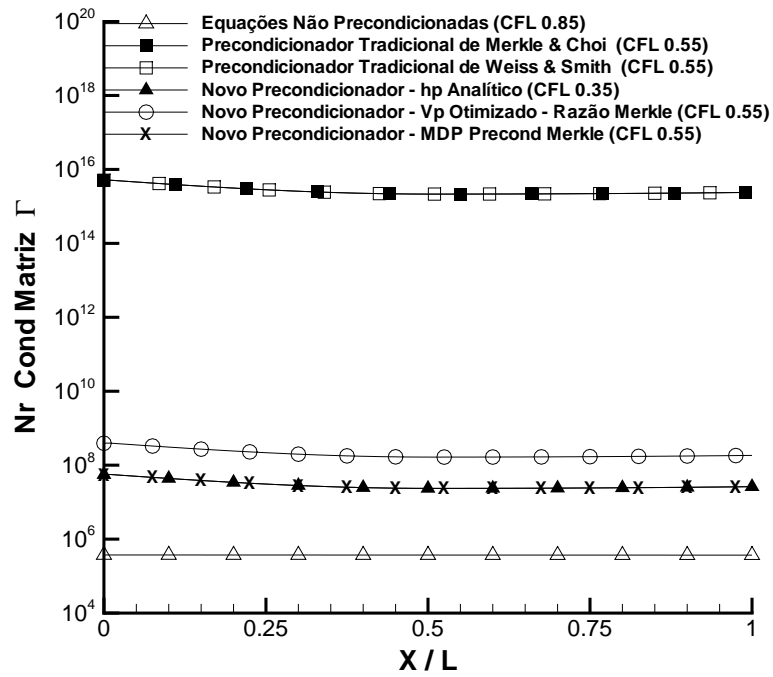


FIG. 8.3: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

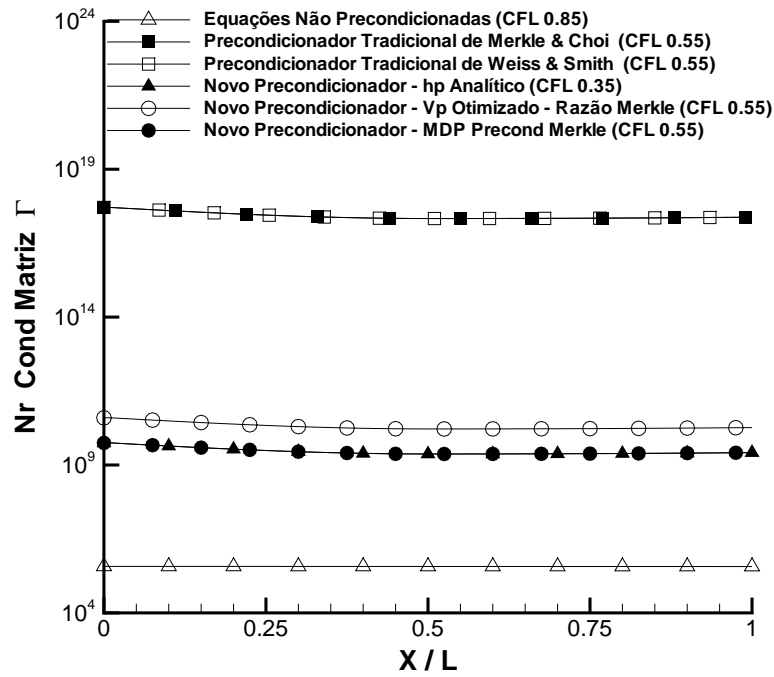


FIG. 8.4: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

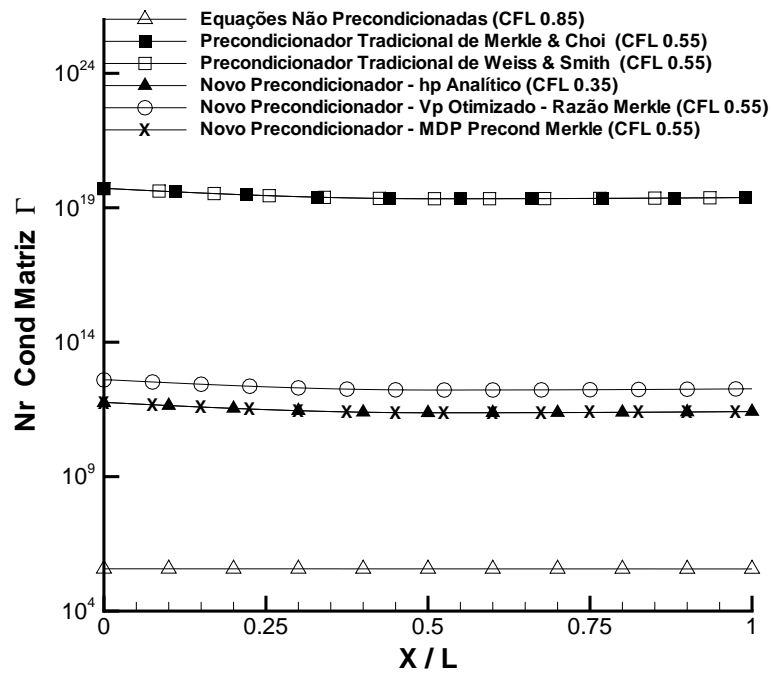


FIG. 8.5: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Γ - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.1.2 RAZÃO DE AUTOVALORES

Nas Figuras 8.6 a 8.10, são apresentados os resultados obtidos da razão dos autovalores do sistema de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

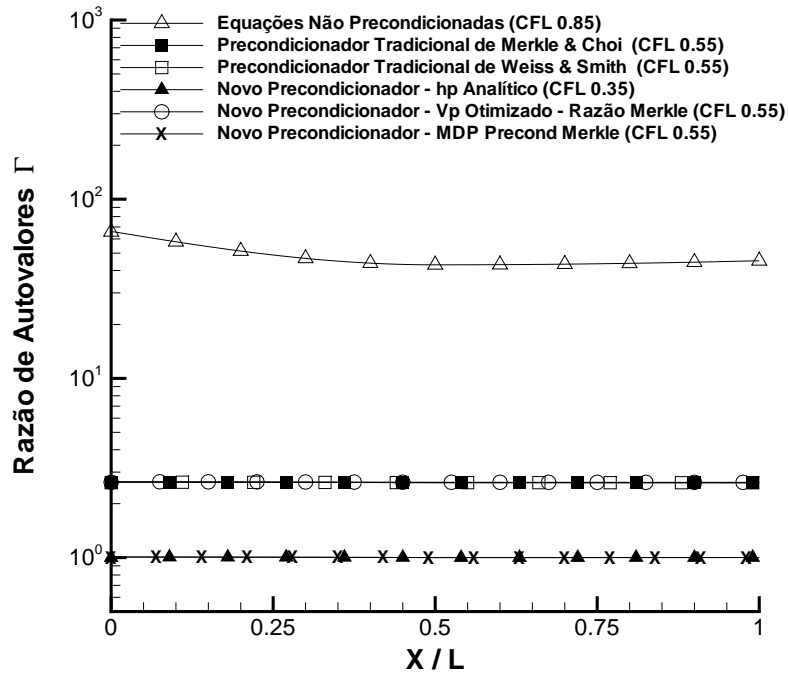


FIG. 8.6: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

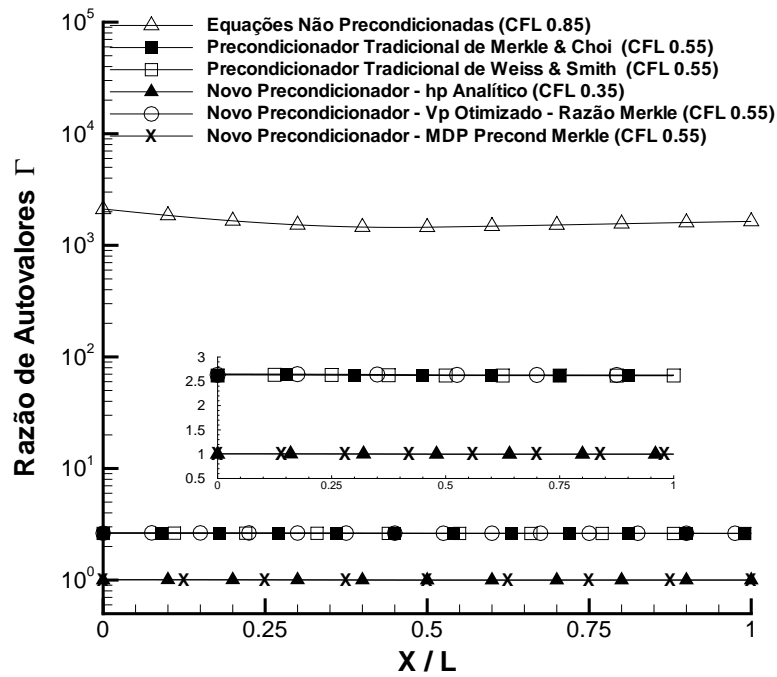


FIG. 8.7: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

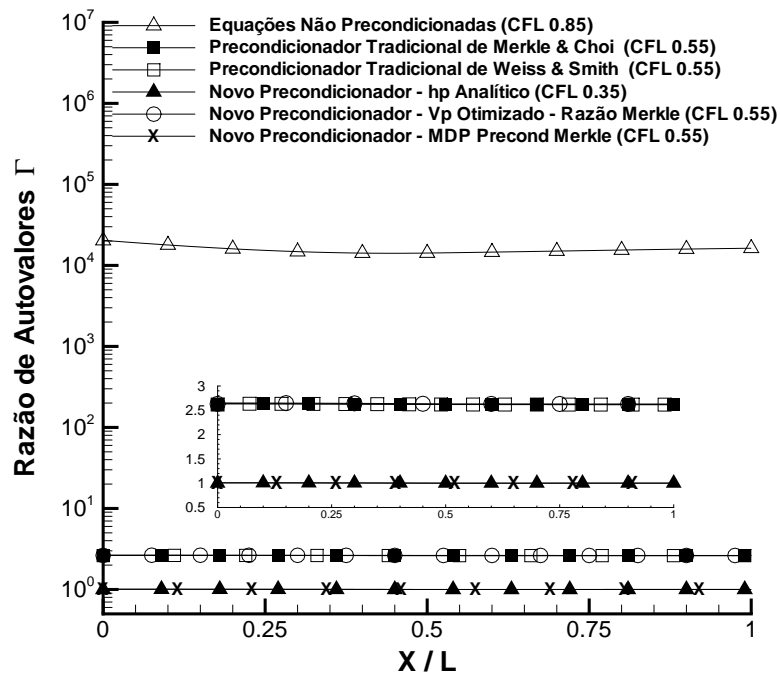


FIG. 8.8: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

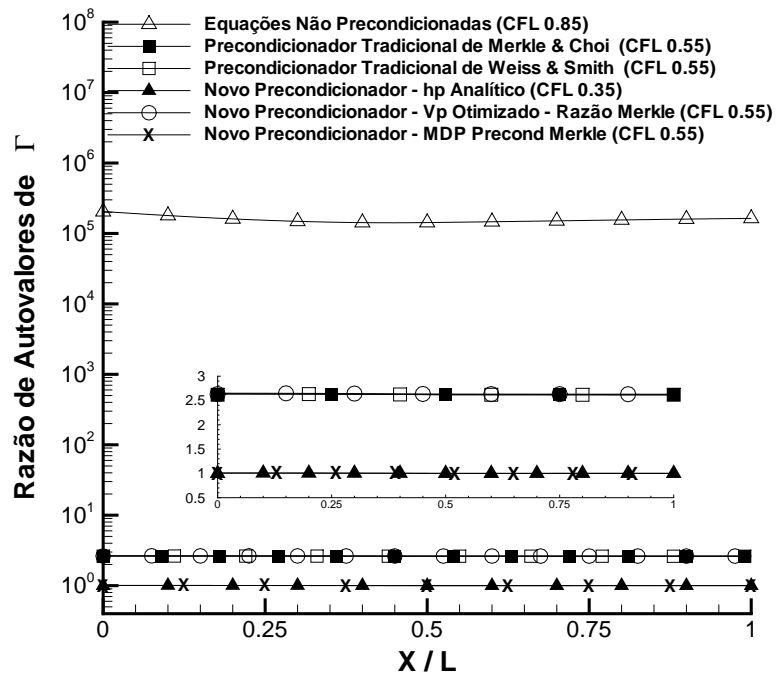


FIG. 8.9: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

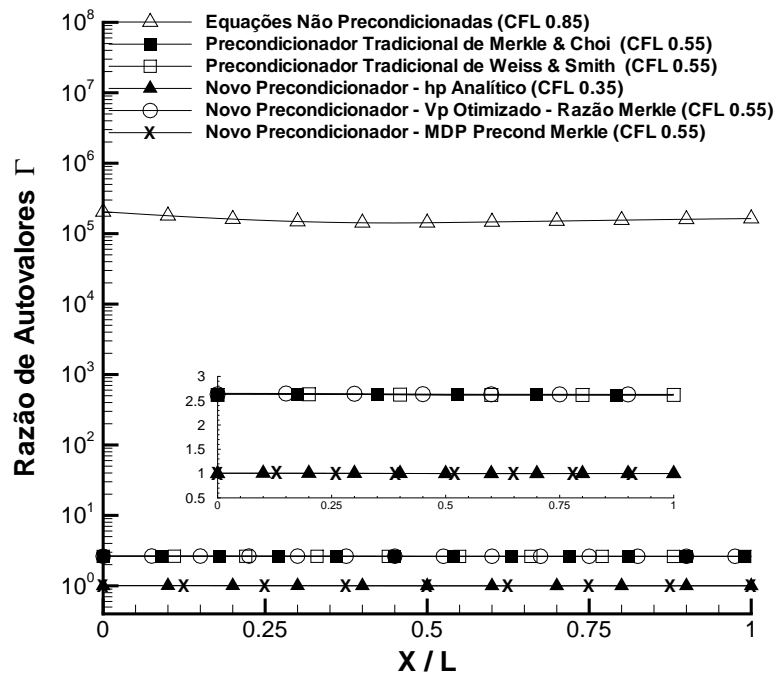


FIG. 8.10: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Razão de Autovalores - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.1.3 NÚMERO DE CONDICIONAMENTO DA MATRIZ DE AUTOVETORES

Nas Figuras 8.11 a 8.15, são apresentados os resultados obtidos do número de condicionamento da matriz de autovetores de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

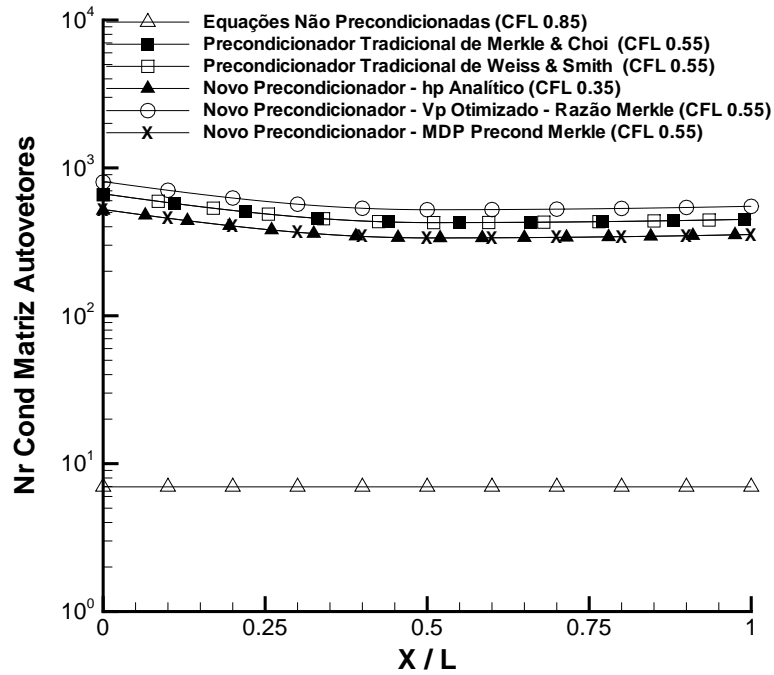


FIG. 8.11: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Condiç Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

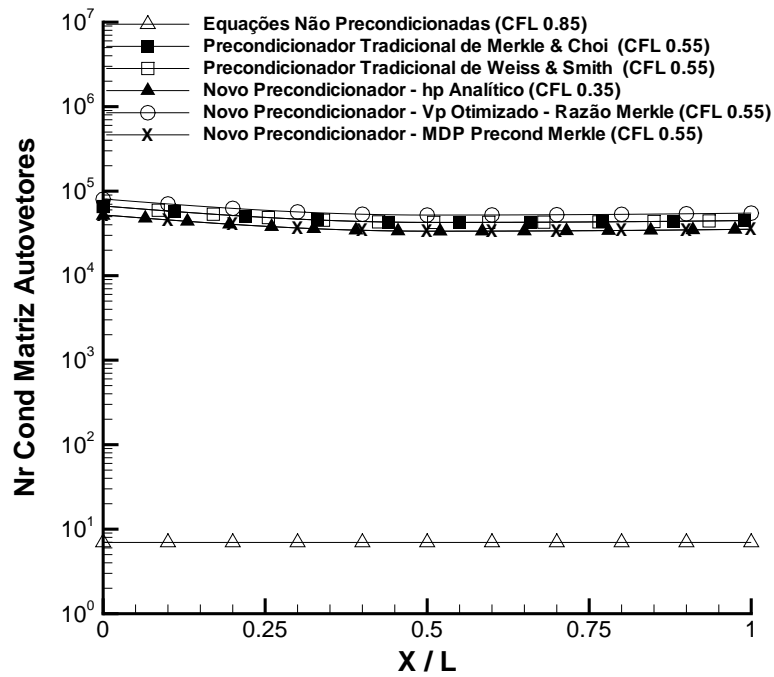


FIG. 8.12: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

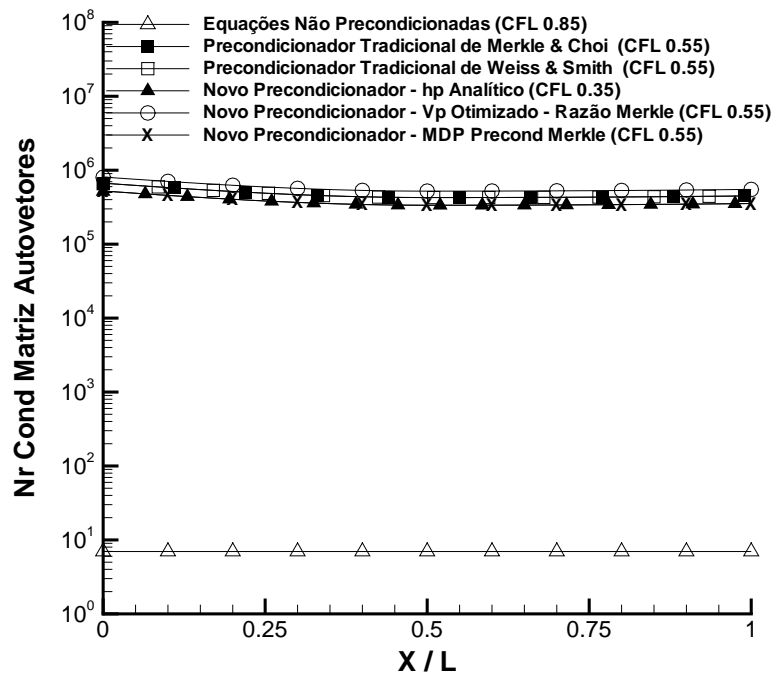


FIG. 8.13: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

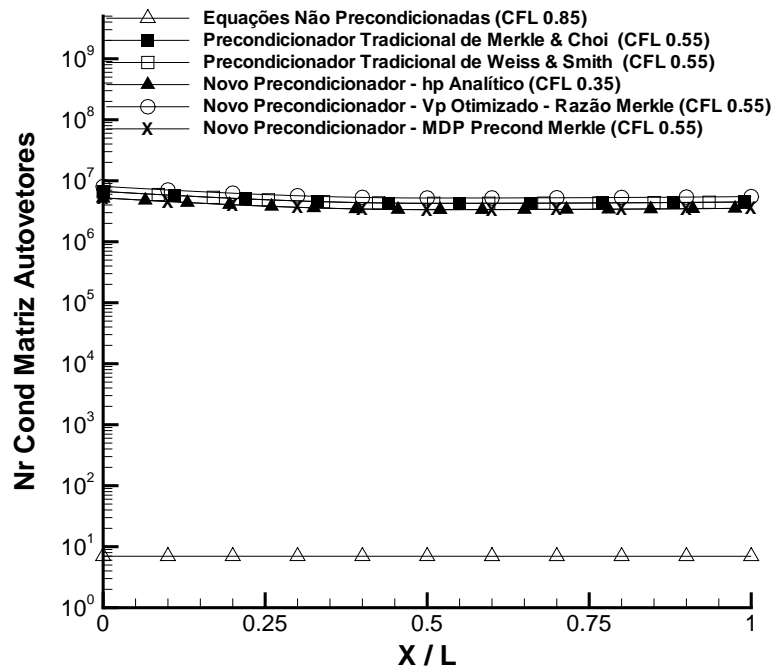


FIG. 8.14: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

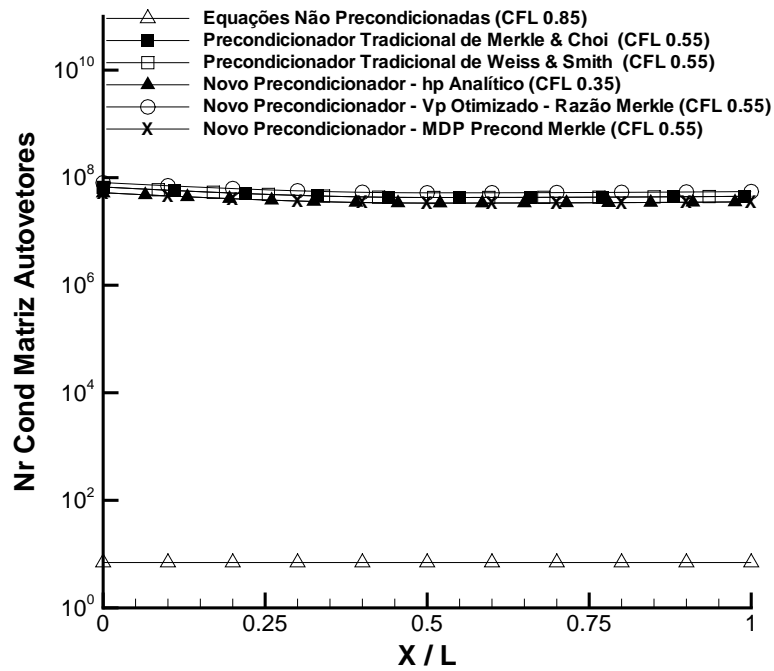


FIG. 8.15: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Nr Cond Matriz Autovetores - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.1.4 ERRO ABSOLUTO DA SOLUÇÃO

Nas Figuras 8.16 a 8.20, são apresentados os resultados obtidos do comportamento do erro absoluto da solução de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$

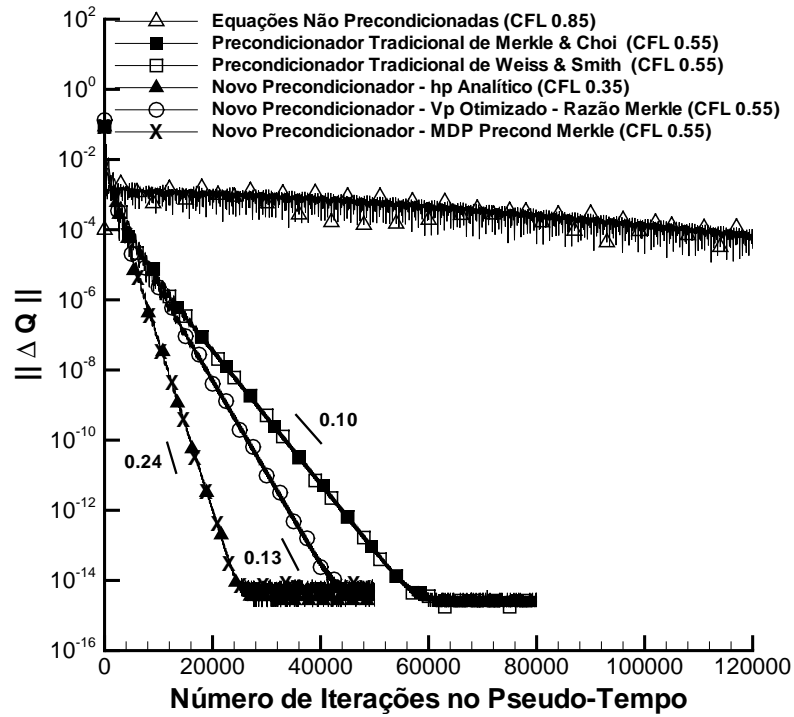


FIG. 8.16: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-2}$
- $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

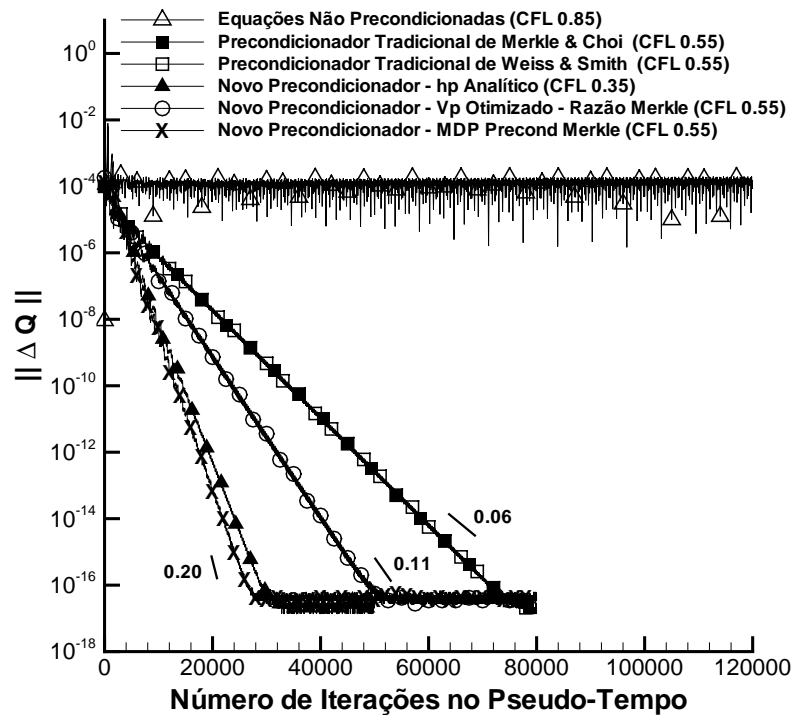


FIG. 8.17: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-4}$
 - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

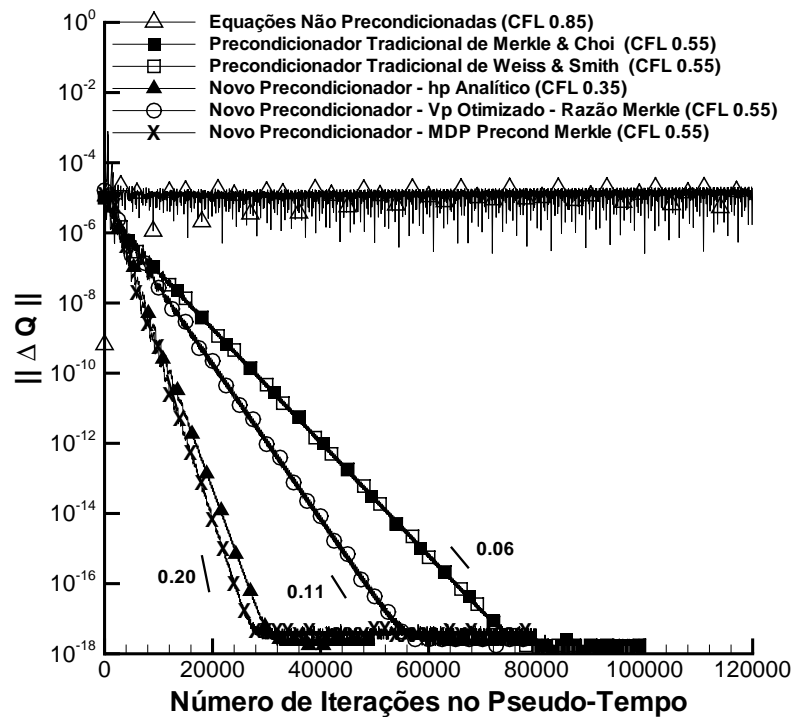


FIG. 8.18: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-5}$
 - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

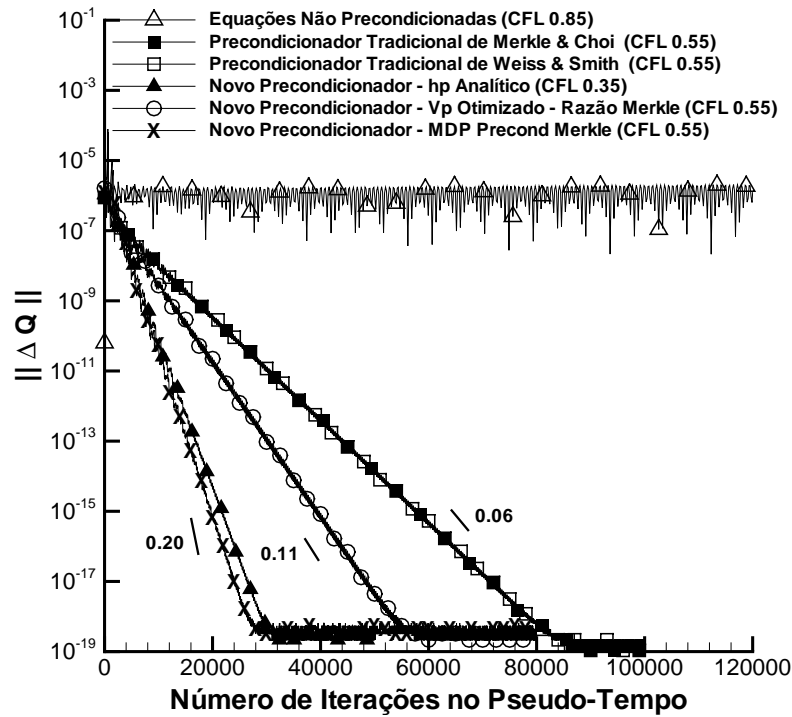


FIG. 8.19: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-6}$
 - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

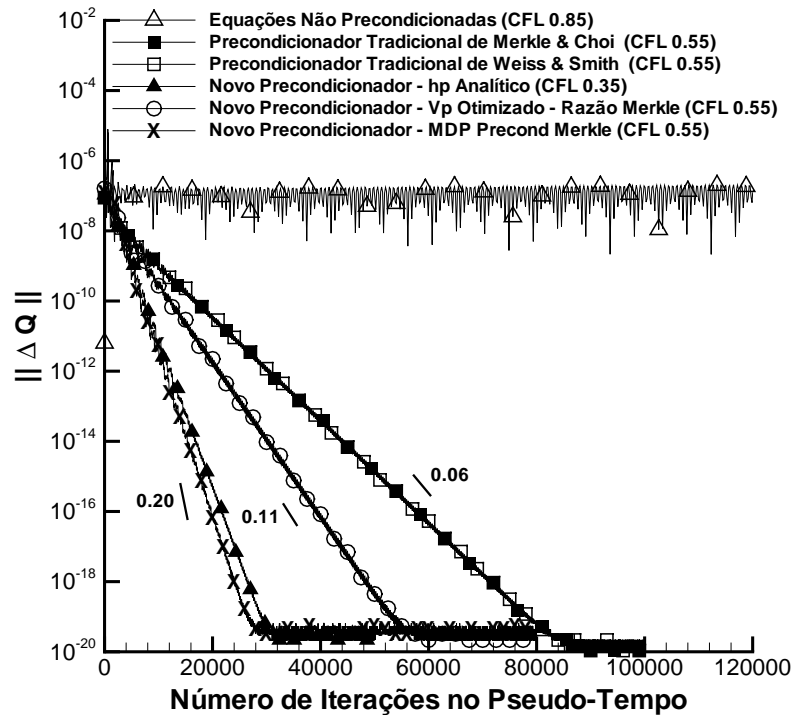


FIG. 8.20: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Erro Absoluto da Solução - $M_0 = 10^{-7}$
 - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.2 VALIDAÇÃO

Foram realizadas comparações entre as soluções analíticas de regime permanente do problema, fornecidas por ANDERSON (1995), e as soluções numéricas obtidas, para $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$. Compararam-se soluções de número de Mach, pressão e temperatura.

8.2.1 SOLUÇÃO DE NÚMERO DE MACH

Nas Figuras 8.21 a 8.25, são apresentados os resultados obtidos da solução de número de Mach de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

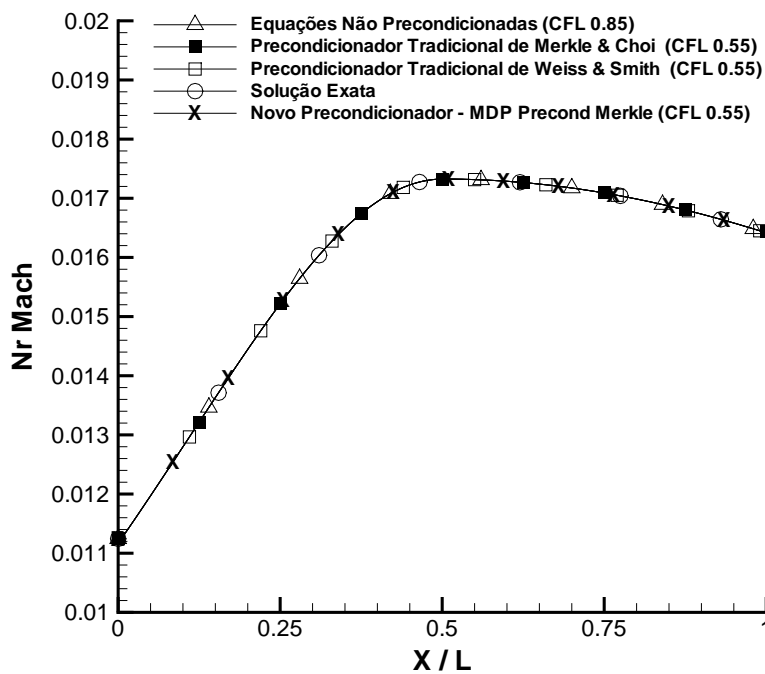


FIG. 8.21: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

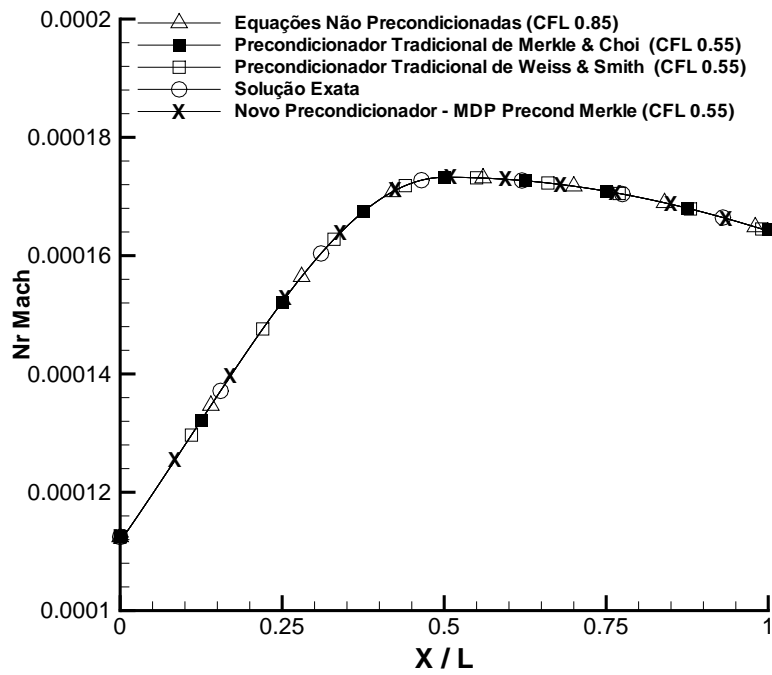


FIG. 8.22: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.2.2 SOLUÇÃO DE PRESSÃO

Nas Figuras 8.26 a 8.30, são apresentados os resultados obtidos da solução de pressão de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

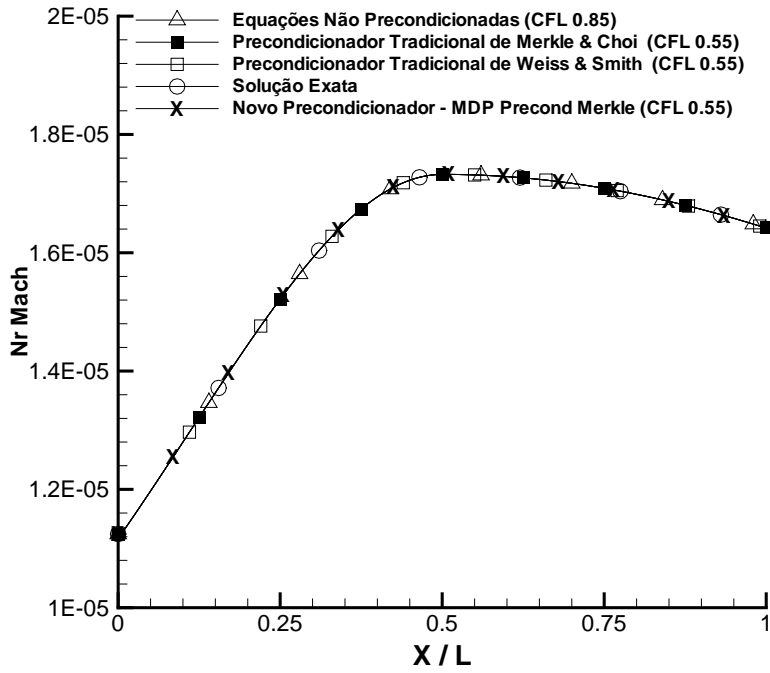


FIG. 8.23: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

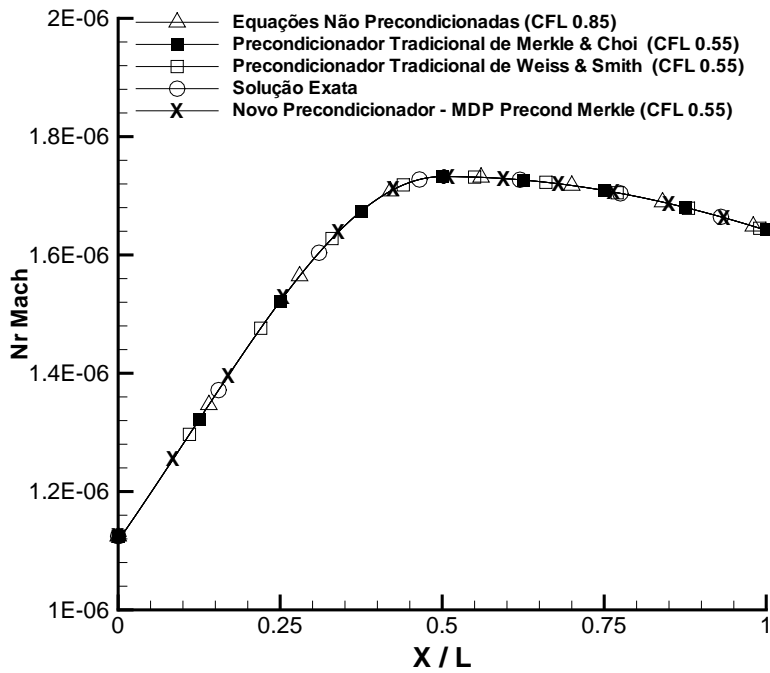


FIG. 8.24: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

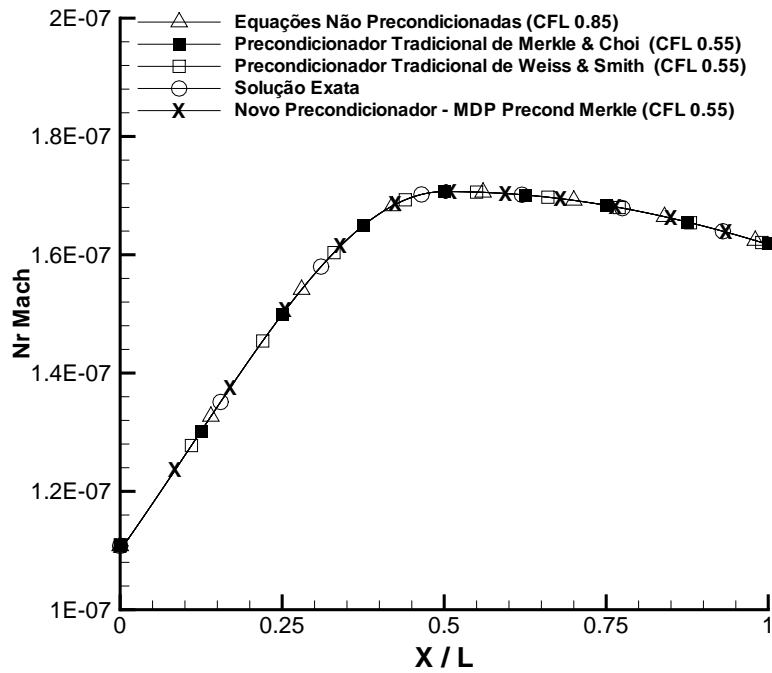


FIG. 8.25: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Nr Mach - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

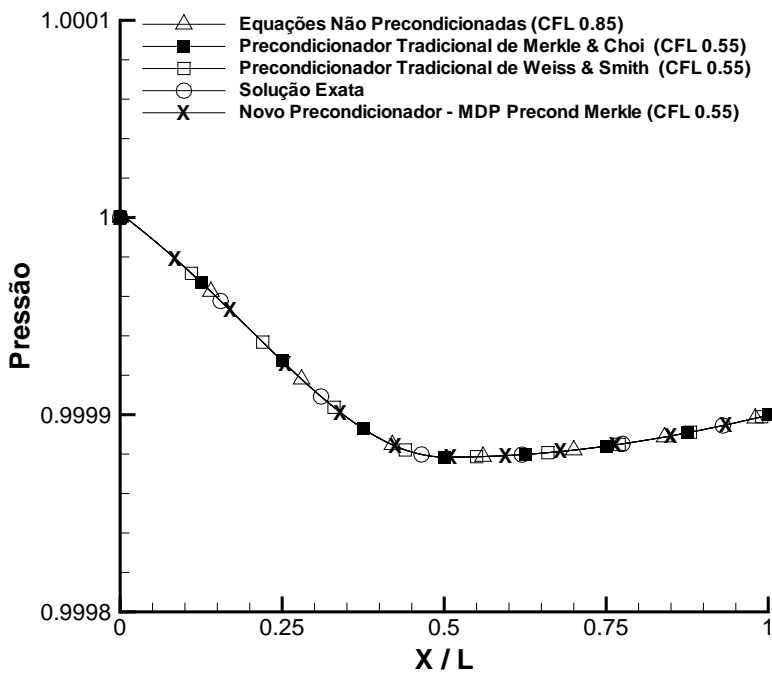


FIG. 8.26: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

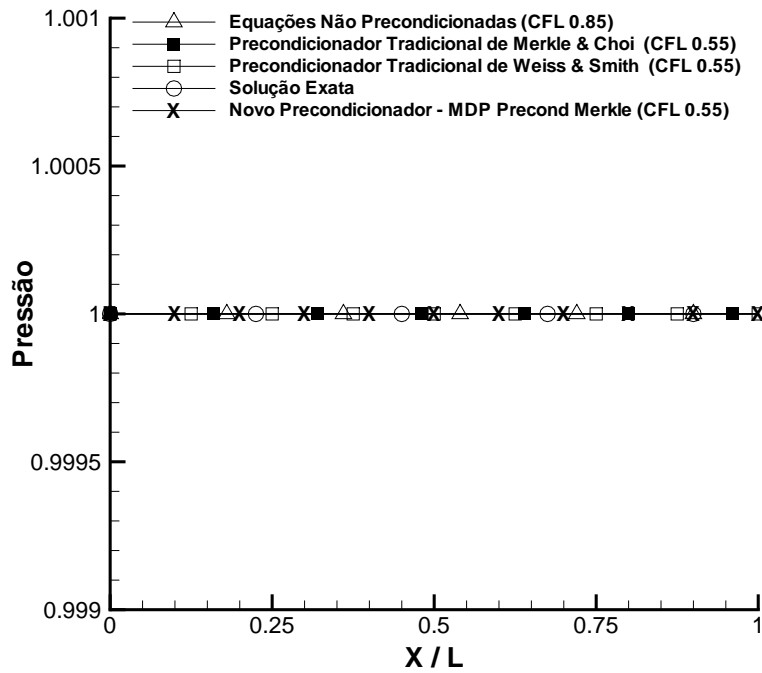


FIG. 8.27: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

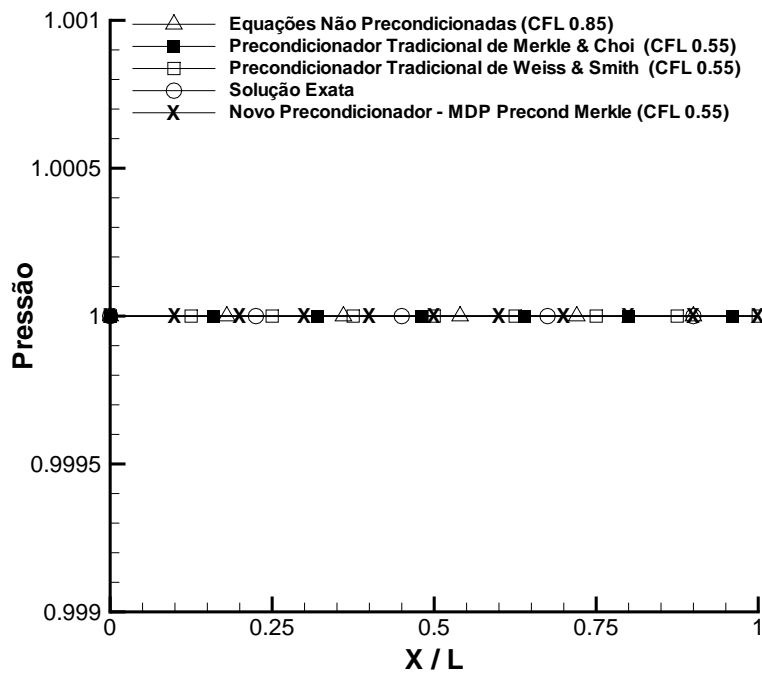


FIG. 8.28: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

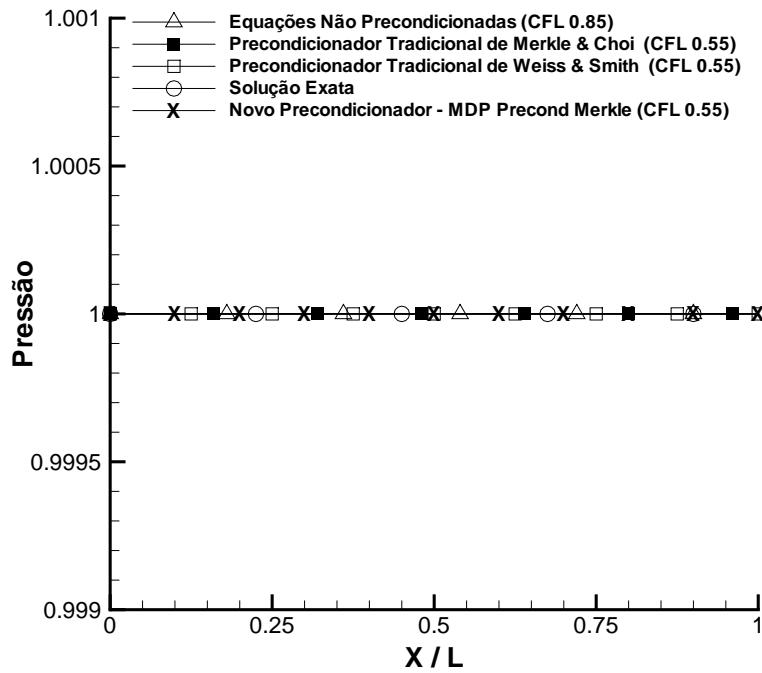


FIG. 8.29: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

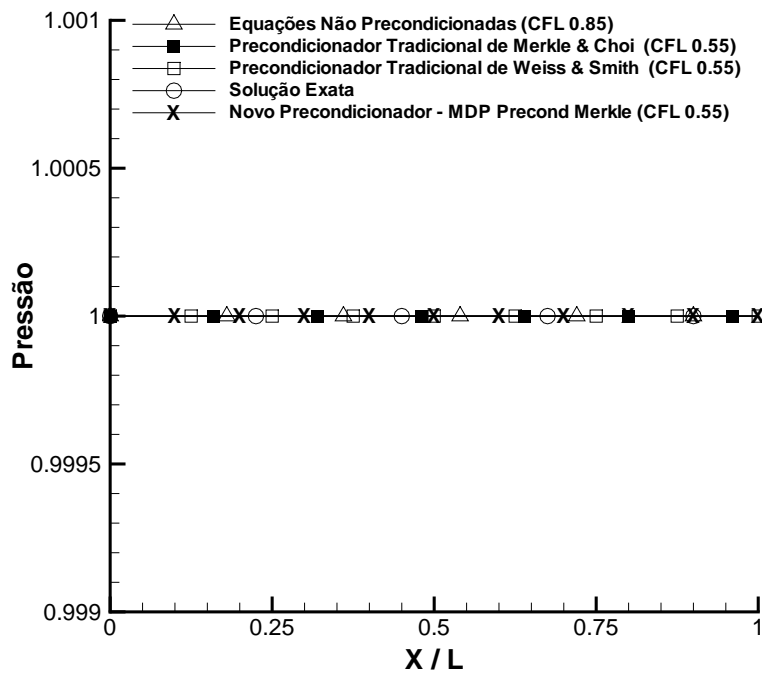


FIG. 8.30: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Pressão - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

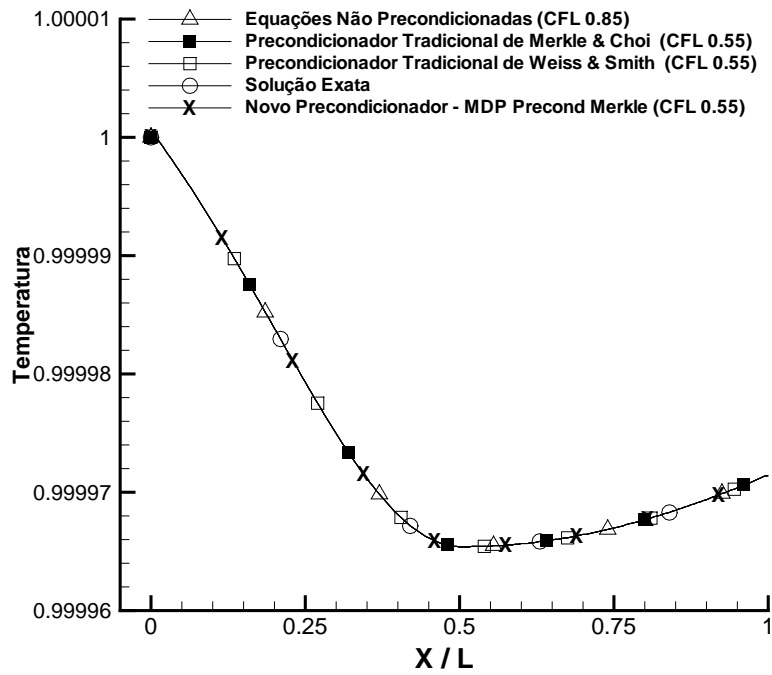


FIG. 8.31: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-2}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

8.2.3 SOLUÇÃO DE TEMPERATURA

Nas Figuras 8.31 a 8.35, são apresentados os resultados obtidos da solução de temperatura de $M_0 = 10^{-2}$ até $M_0 = 10^{-7}$.

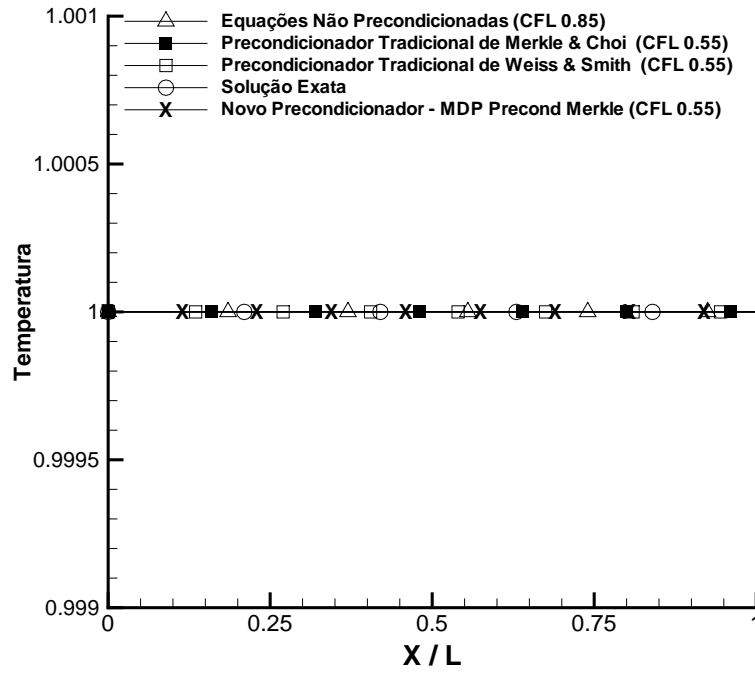


FIG. 8.32: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-4}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

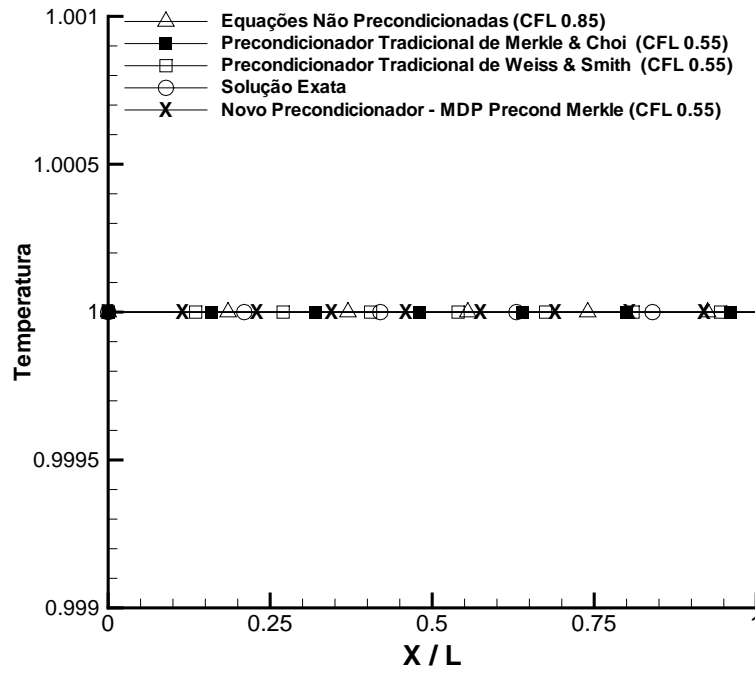


FIG. 8.33: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-5}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

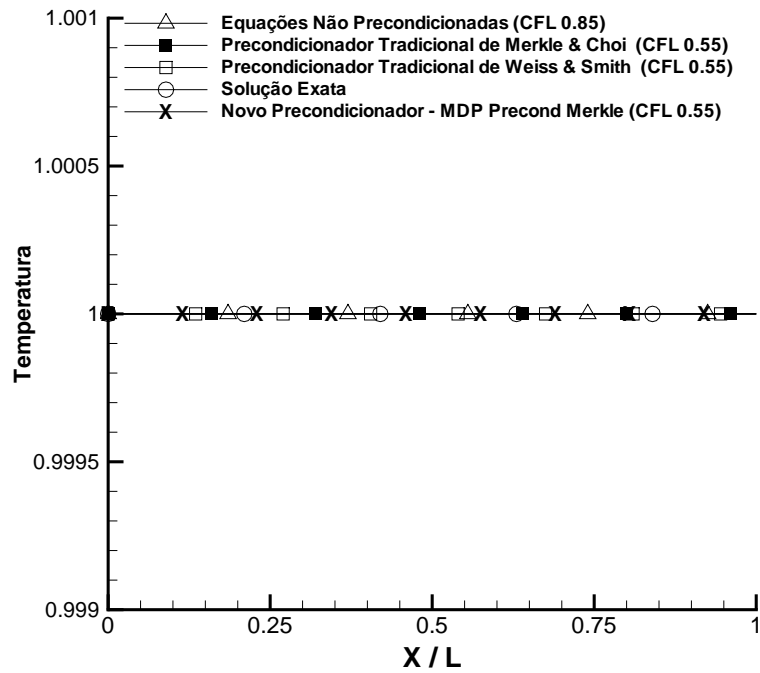


FIG. 8.34: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-6}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.

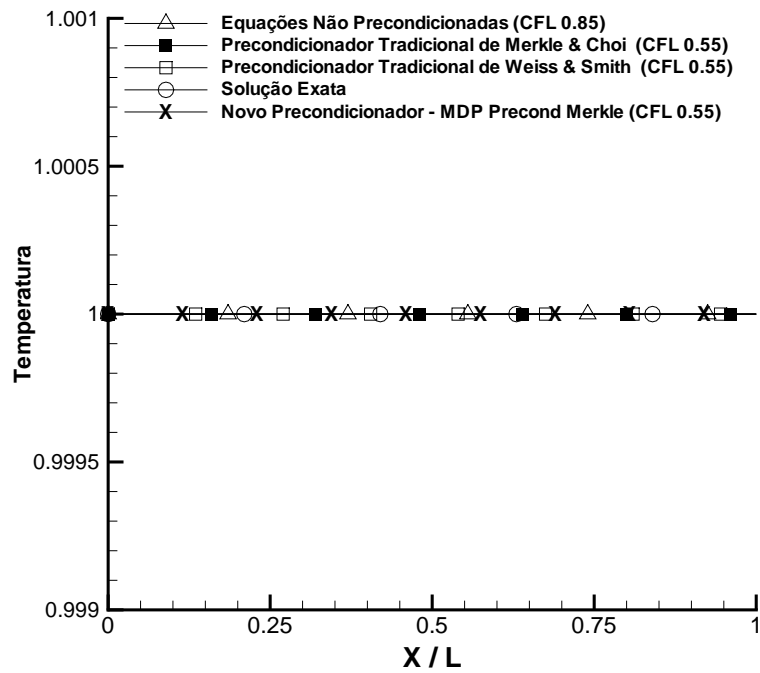


FIG. 8.35: Bocal Convergente-Divergente Subsônico - Solução de Temperatura - $M_0 = 10^{-7}$ - $N_x = 201$ pontos - Euler Explícito - MDP de 1ª ordem.