# Mecânica de Fluidos Computacional I

Prof. Gustavo Carlos Buscaglia

Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica (LMACC)
Departamento de Matemática Aplicada e Estatística
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC)
USP – São Carlos

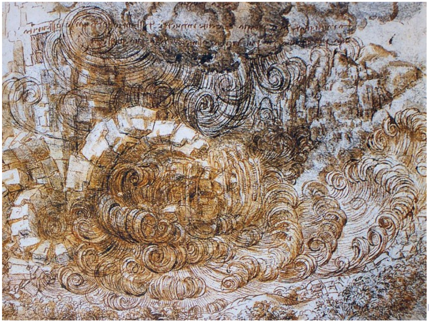
2017

# Mecânica dos Fluidos Computacional

- A Mecânica dos Fluidos é a ciência que estuda o comportamento dos fluidos.
- Este estudo é feito de três formas:
  - **Experimental:** Fenômenos físicos estudados em ambientes controlados.
  - **Teórico:** Obtenção de soluções simplificadas às equações de modelo.
  - **Numérico:** Utilizar o auxílio do computador.
- Neste curso estudaremos a utilização do computador na resolução de vários problemas de mecânica dos fluidos.

# Breve histórico

- Desde os primórdios de nossa civilização, o ser humano se interessa pelo movimento dos fluidos (ventos, rios, clima, etc.)
- **Arquimedes** (287-212 a.C.): planejamento de aquedutos, canais, casas de banho, etc.
- **Leonardo da Vinci** (1452-1519): observou e reportou vários fenômenos, reconhecendo sua forma e estrutura, reportando-os na forma de desenhos e esquemas.



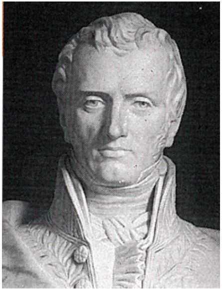
# Breve histórico

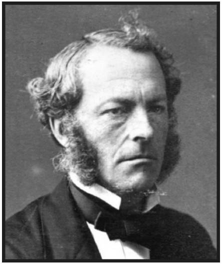

- **Isaac Newton** (1643-1727): Muitas contribuições à mecânica dos fluidos
- Sua segunda lei: $F = m \cdot a$
- Viscosidade: A tensão é proporcional à taxa de deformação.

# Breve histórico

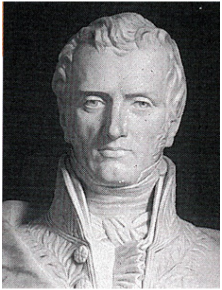
- **Daniel Bernoulli** (1700-1782): Equação de Bernoulli.
- **Leonhard Euler** (1707-1783): Equações de Euler para escoamento invíscido, conservação de quantidade de movimento, conservação de massa, potencial de velocidade.

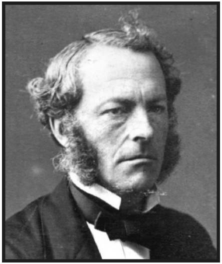
# Breve histórico





- **Claude Louis Marie Henry Navier** (1785-1836)
- **Gabriel Stokes** (1819-1903)
- Introduziram transporte viscoso às equações de Euler, resultando nas equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis





- **Claude Louis Marie Henry Navier** (1785-1836)
- **Gabriel Stokes** (1819-1903)
- Introduziram transporte viscoso às equações de Euler, resultando nas equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = - \nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu (\nabla u + \nabla u^T) \right] + \rho g$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

# Breve histórico

- **Lewis Fry Richardson** (1881-1953): desenvolveu o primeiro método numérico para previsão do tempo (escoamento atmosférico)
- Sua tentativa de calcular a previsão do tempo para um período de 8 horas lhe tomou 6 semanas de cálculos, e foi um fracasso.
- Forecast-factory

# Mecânica dos fluidos computacional

- Soluções numéricas das equações de Navier-Stokes demandam muitos cálculos.
  (em 1953, **M. Kawaguti** calculou a solução de um escoamento em torno de um cilindro, levou 18 meses trabalhando 20 horas por semana).
- A evolução da computação beneficia diretamente a área.
- Hoje, com o advento dos supercomputadores, é possível resolver escoamentos complexos com precisão em tempo factível.

## Objetivo da disciplina

- Mostrar como, utilizando a modelagem matemática e o cálculo numérico, é possível resolver problemas de mecânica de fluidos cuja resolução analítica é impossível.

# Metodologia

- Cada capítulo do curso será resolvido um problema.
- A modelagem física e matemática será desenvolvida pelo professor.
- O professor sugerirá um ou vários tratamentos numéricos, e os explicará detalhadamente.
- Os estudantes, em grupos de 2, implementarão um programa para cada problema.
- Os programas serão testados e comparados.
- Um estudante escolhido aleatoriamente de cada grupo realizará uma apresentação de quinze minutos. Os slides serão considerados como relatório do grupo.
- A nota final será calculada a partir das notas obtidas em cada trabalho, sendo que todos os capítulos devem ser aprovados.

# Capítulos

1. Cálculo de forças e torques em hidrostática. Dinâmica de corpos rígidos flutuantes e seu cálculo numérico.
2. Aproximação numérica de interfaces com tensão superficial. Minimização da energia e aproximação variacional.
3. Modelagem numérica de redes hidráulicas. Origem e tratamento das não-linearidades.
4. Resolução numérica das equações de Navier-Stokes incompressíveis. Convergência em malha a uma solução manufaturada.

# Técnicas numéricas envolvidas em cada capítulo

1. Parametrização de formas. Interpolação. Integração numérica. EDOs numéricas.
2. EDOs numéricas. Minimização de funções.
3. Grafos e sua representação computacional. Resolução de sistemas de equações não lineares.
4. Diferenças finitas. Volumes finitos. Aproximação numérica de EDPs. Cálculo experimental de ordem de convergência.

# Tecnologias relacionadas com cada capítulo

1. Engenharia civil. Forças em represas, em prédios, etc. Engenharia naval. Estabilidade de estruturas flutuantes, navios, etc.
2. Indústria química. Pintura por imersão, por deposição de sprays. Impressão de jato de tinta. Indústria do petróleo. Separação de misturas. Misturas bifásicas.
3. Engenharia hidráulica. Distribuição urbana de água.
4. Microfluídica. Lab on a chip. Incorporando turbulência numérica (que não veremos): Meteorologia, Oceanografia, Indústria automotiva, etc.

# Duração estimada de cada capítulo

1. Cálculo de forças e torques em hidrostática. Dinâmica de corpos rígidos flutuantes e seu cálculo numérico. $\Rightarrow$ **3 semanas**
2. Aproximação numérica de interfaces com tensão superficial. Minimização da energia e aproximação variacional. $\Rightarrow$ **4 semanas**
3. Modelagem numérica de redes hidráulicas. Origem e tratamento das não-linearidades. $\Rightarrow$ **3 semanas**
4. Resolução numéricas das equações de Navier-Stokes incompressíveis. Convergência em malha a uma solução manufaturada. $\Rightarrow$ **4 semanas**

# Observações

- Essa disciplina é direcionada a alunos do BMACC, com menos formação em física e fluidos que alunos de engenharia ou física. Em cada capítulo será feita uma revisão rigorosa mas rápida dos conceitos de mecânica que sejam necessários.
- Se espera que os estudantes tenham familiaridade com o cálculo numérico. Os conceitos usados serão definidos mas não fundamentados teoricamente.
- É necessário saber programar. As aulas conterão exemplos de implementação em Octave.
- Seria conveniente ter acesso a uma notebook por grupo.
- Cada capítulo envolverá 2 ou 3 aulas de trabalho em sala, consultando ao professor e/ou ao PAE.
- Haverá sessões de monitoria em laboratório. Definir dia e horário.

# Simulação numérica de corpos em flutuação

- Navios

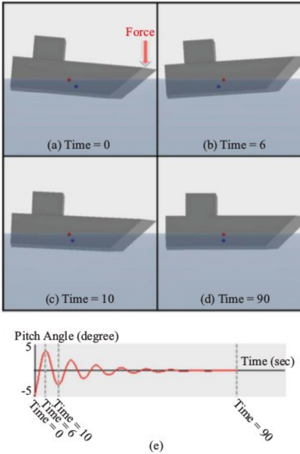



**Fig. 10. (a)-(d) Snapshots of the pitch motion of a ship, (e) the magnitude of the pitch motion at each time step.** [1]

[1] Ueng, J. Marine Sci. and Technol., 2013

# Exemplos

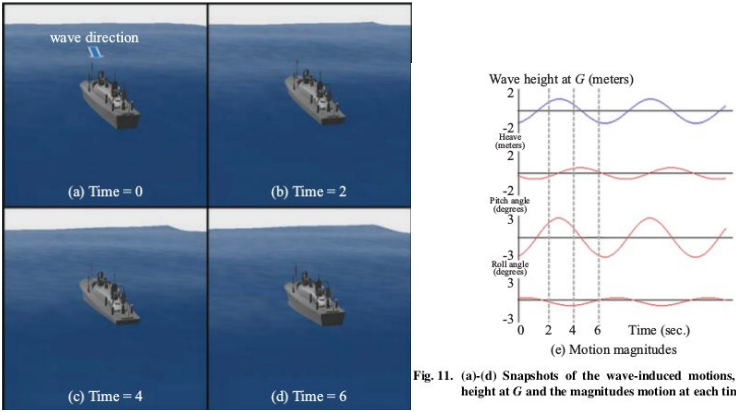
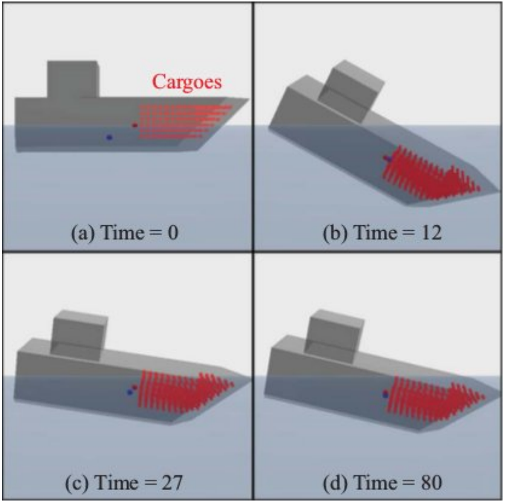



**Fig. 11.** (a)-(d) Snapshots of the wave-induced motions, (e) the wave height at $G$ and the magnitudes motion at each time step.

# Exemplos



- Estruturas

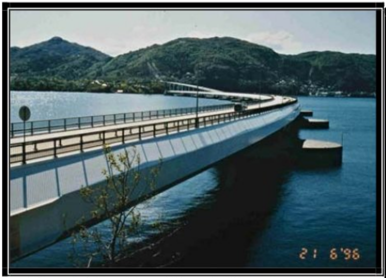


*Fig. 4 Nordhordland Floating Bridge, Norway*

*Fig. 5 West India Quay Footbridge, United Kingdom* [2]

[2] Watanabe et al, CORE Rep. 2004-02

# Exemplos

*Fig. 9. Shirashima Floating Oil Storage Base, Japan (Photo courtesy of Shirashima Oil Storage Co Ltd)*

*Fig. 10 Kamigoto Floating Oil Storage Base, Nagasaki Prefecture, Japan*

# Exemplos

*Fig. 13 Concept Design of a Clean Energy Plant by Floating Structure Association of Japan*

# Exemplos

*Fig. 15 Mega-Float in Tokyo Bay, Japan (Photo courtesy of SRCJ)*

*Fig. 16 Proposed Floating Runway at Tokyo International Airport (Haneda)*

## Exemplos

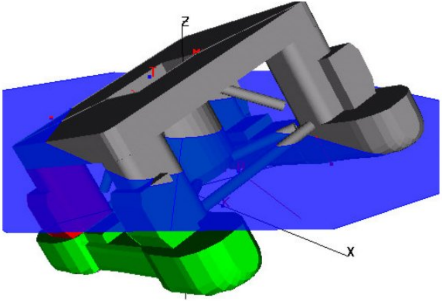



Figure 26- Sstab evaluation of flooding using measured drafts. [3]

[3] Coelho et al, 8th Conf. Stab. Ships and Ocean Vesicles, 2003

# Como flutuam os corpos?

- Equilíbrio dinâmico entre:
  - Peso próprio
  - Forças exercidas pelo líquido
  - Forças exercidas pela atmosfera (vento)
  - Forças externas (âncoras,...)

$$M \frac{d^2\vec{c}}{dt^2} = \sum \vec{F}\,, \qquad \frac{d\vec{L}}{dt} = \sum \vec{T}$$

  onde $\vec{c}$ é a posição do centro de massa, $\vec{F}$ força, $\vec{L}$ momento angular e $\vec{T}$ torque (ambos respeito de $\vec{c}$).
- O corpo *deforma* pelas forças aplicadas.
- Os fluidos *respondem* à presença do corpo.

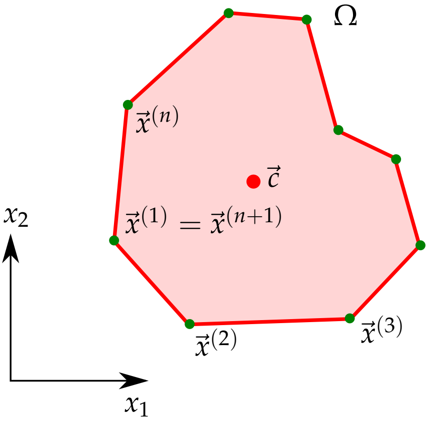
# Descrição geométrica do corpo

- Existem diversas maneiras: Primitivas, interpolatórias com/sem malha, etc.
- Consideraremos a seguinte:
  - A superfície $\mathcal{S}$ do corpo é a união disjunta de um conjunto de patches, cada um deles sendo a imagem de um símplice $M$ por uma transformação $\vec{\varphi} : M \to \mathbb{R}^d$.

$$\mathcal{S} = \cup_K \, \vec{\varphi}_K(M)$$

  - A geometria de cada patch é definida por um conjunto de nós.

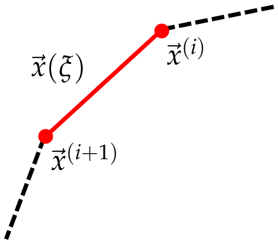
# Representação linear por partes em 2D




Lista de pontos:

$$
\begin{array}{cc}
x_1^{(1)} & x_2^{(1)} \\
x_1^{(2)} & x_2^{(2)} \\
\vdots & \vdots \\
x_1^{(n)} & x_2^{(n)} \\
x_1^{(n+1)} & x_2^{(n+1)}
\end{array}
$$

# Representação linear por partes em 2D

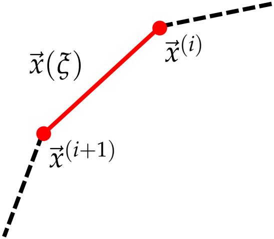



$$\vec{x}(\xi) = \vec{\varphi}_{K=i}(\xi) = \frac{1-\xi}{2}\,\vec{x}^{(i)} + \frac{1+\xi}{2}\,\vec{x}^{(i+1)},$$

$$\xi \in M = [-1, 1]$$

A imagem de $\vec{\varphi}_i$ é o segmento reto de $\vec{x}^{(i)}$ a $\vec{x}^{(i+1)}$.

# Representação linear por partes em 2D




- Cálculo do Jacobiano (comprimento de arco):

$$ds = |d\vec{x}| = \left\| \frac{d\vec{x}}{d\xi} \right\| d\xi = \left\| \frac{\vec{x}^{(i+1)} - \vec{x}^{(i)}}{2} \right\| d\xi$$

- Cálculo da normal (anti-horária):

$$\vec{d} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{x}^{(i+1)} - \vec{x}^{(i)}\,, \qquad \check{n} = \frac{(d_2, -d_1)}{\|\vec{d}\|}$$

Ambos constantes em cada patch.

Seja $f$ uma função definida em $\mathbb{R}^d$, então

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{S}} f(\vec{x})\, d\mathcal{S} &= \sum_K \int_{\vec{\varphi}_K(M)} f(\vec{x})\, d\mathcal{S} \\ &= \sum_K \int_M f(\underbrace{\vec{\varphi}_K(\vec{\xi})}_{\vec{x}(\vec{\xi})}) \underbrace{\frac{d\mathcal{S}}{dM}}_{\text{Jacobiano de } \vec{\varphi}_K} dM\,.\end{aligned}$$

- A integral de curva/superfície transformou-se numa soma de integrais sobre um único símplice $M$.
- Em 1D, certamente escolhemos $M = [-1, 1]$.

# Exercício

- Dados três pontos arbitrários em 3D, com coordenadas $\vec{x}^{(1)}$, $\vec{x}^{(2)}$ e $\vec{x}^{(3)}$, determinar uma transformação $\vec{\varphi} : M \to \mathbb{R}^3$ que transforme o triângulo unitário $M$ (com vértices $(0,0)$, $(1,0)$ e $(0,1)$) no triângulo plano definido pelos três pontos.
- Quanto vale o Jacobiano dessa transformação?

Nos cálculos, vão aparecer **muitas** integrais da forma

$$\int_{\mathcal{S}} f(\vec{x})\, ds = \sum_K \int_{-1}^{1} \underbrace{f(\vec{\varphi}_K(\xi))\, \frac{ds}{d\xi}}_{g(\xi)}\, d\xi\,.$$

## Quadratura de Gauss-Legendre

Existe uma quadratura

$$\int_{-1}^{1} g(\xi)\, d\xi \simeq \sum_{k=1}^{N} A_k\, g(\xi_k)$$

que integra exatamente polinômios de grau $2N-1$. Se esperamos que a função a integrar seja aproximável por um polinômio desse grau, escolhemos:

| $N = 2$ | |
|---|---|
| $\xi_1 = -1/\sqrt{3}$ | $A_1 = 1$ |
| $\xi_2 = \quad 1/\sqrt{3}$ | $A_2 = 1$ |

| $N = 3$ | |
|---|---|
| $\xi_1 = -\sqrt{3/5}$ | $A_1 = 5/9$ |
| $\xi_2 = 0$ | $A_2 = 8/9$ |
| $\xi_3 = \quad \sqrt{3/5}$ | $A_3 = 5/9$ |

# Integração em $\mathcal{S}$, numérica

$$
\begin{aligned}
\int_{\mathcal{S}} f(\vec{x})\, ds &= \sum_K \int_{-1}^{1} \underbrace{f(\vec{\varphi}_K(\xi))\, \frac{ds}{d\xi}}_{g(\xi)}\, d\xi\, . \\
&\simeq \sum_K \sum_{k=1}^{N} A_k\, \underbrace{f(\vec{\varphi}_K(\xi_k))}_{f(\vec{x}_k)}\, \frac{ds}{d\xi}
\end{aligned}
$$

A seguir, alguns exemplos de cálculos de integrais sobre superfícies "numéricas".

# Cálculo do volume (2D) encerrado em $\mathcal{S}$

$$
\begin{aligned}
V &= \int_\Omega 1 \, dx \, dy \\
&= \int_\Omega \frac{1}{2} \, div \, \vec{x} \, dx \, dy \\
&= \oint_\mathcal{S} \frac{1}{2} \, \vec{x} \cdot \vec{n} \, ds \\
&= \sum_K \sum_{k=1}^{N} A_k \, \frac{1}{2} \, \vec{x}_k \cdot \vec{n}_k \, \frac{ds}{d\xi}(\xi_k)
\end{aligned}
$$

Indeed, if the geometrical interpolation is $\mathbb{P}_1$, then for each $K$ we have that $\vec{x}(\xi)$ is $\mathbb{P}_1$ while $\vec{n}$ and $ds/d\xi$ are constant in each segment (in fact, $ds/d\xi = \ell_K/2$).
The integrand is thus $\mathbb{P}_1$, so that $N = 1$ suffices to compute the volume to roundoff error.

# Cálculo do centro de massa de um polígono homogêneo

$$\vec{c} = \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \oint_{\partial\Omega} (\vec{x} \cdot \vec{n})\, x_1 \, ds \\ \oint_{\partial\Omega} (\vec{x} \cdot \vec{n})\, x_2 \, ds \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} \int_{-1}^{1} (\vec{x}(\xi) \cdot \vec{n}^{(i)})\, x_1(\xi) \frac{\ell_i}{2} \, d\xi \\ \sum_{i=1}^{n} \int_{-1}^{1} (\vec{x}(\xi) \cdot \vec{n}^{(i)})\, x_2(\xi) \frac{\ell_i}{2} \, d\xi \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} A_k \, \vec{x}_k \cdot \vec{n}^{(i)} \; x_{1k} \frac{\ell_i}{2} \\ \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} A_k \, \vec{x}_k \cdot \vec{n}^{(i)} \; x_{2k} \frac{\ell_i}{2} \end{bmatrix}$$

# Cálculo do empuxo hidrostático

- A força de pressão por unidade de área que um meio fluido faz sobre um corpo que ocupa um domínio $\Omega$ é dada por

$$\vec{f}_P = -p, \vec{n} \; .$$

A força total é obtida por integração em $\mathcal{S}$,

$$\vec{F}_P = \int_{\mathcal{S}} -p \, \vec{n} \, d\mathcal{S} \; .$$

- Se o fluido está imóvel (estático), a única força é a de pressão. Se não, devem ser consideradas também as forças *viscosas*.

- Considerando a superfície libre do fluido num instante $t$ como sendo

$$x_2 = Z(t, x_1)\ , \qquad (\ x_3 = Z(t, x_1, x_2)\ \text{ em 3D}),$$

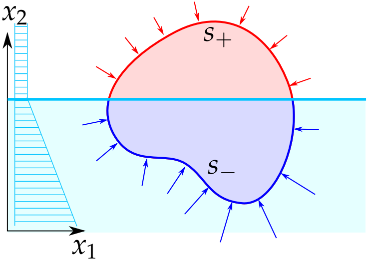
a aproximação de pressão hidrostática é

$$p(t, x_1, x_2) = p_{atm}(t, x_1) + \rho_L\, g\, \max(0, Z(t, x_1) - x_2)$$

- Em geral se toma $p_{atm}$ independente de $\vec{x}$.
- Caso estático: $Z(t, x_1) = \text{constante}$.
- Enchimento/esvaziamento quasestático: $Z(t, x_1) = h(t)$.
- Onda de celeridade $v$:

$$Z(t, x_1) = h(x - v\,t)\ , \quad \text{e.g.;} \quad Z(t, x_1) = h_0 + a\,\sin(k\,(x_1 - v\,t))\ .$$

# Caso estático




$$\vec{F}_A = \int_{s_+} -p_{atm}\vec{n}\, ds = -p_{atm}\int_{s_+} \vec{n}\, ds$$

$$\begin{aligned}\vec{F}_L &= \int_{s_-} -p(\vec{x})\vec{n}\, ds \\ &= \int_{s_-} -\left[p_{atm} + \rho_L g(z - x_2)\right]\vec{n}\, ds \\ &= -p_{atm}\int_{s_-} \vec{n}\, ds - \rho_L g\int_{s_-} (z - x_2)\vec{n}\, ds\end{aligned}$$

$$\vec{F} = \vec{F}_A + \vec{F}_L = -p_{atm}\int_{s_+} \vec{n}\, ds - p_{atm}\int_{s_-} \vec{n}\, ds - \rho_L g\int_{s_-} (z - x_2)\vec{n}\, ds$$

$$= \cancelto{0}{-p_{atm}\oint_{s_+\cup s_-} \vec{n}\, ds} - \rho_L g\int_{s_-} (z - x_2)\vec{n}\, ds$$

- Como $p_{atm}$ não tem influência no balanço de forças, pode-se definir $p_{atm} = 0$.
- *Princípio de Arquimedes:* No caso estático o empuxo é igual ao peso do líquido deslocado, e de sentido contrário.
- Se $Z$ ou $p_{atm}$ dependem de $x_1$, o empuxo tem componente horizontal.

## Exercício

- Programe uma função que, a partir da matriz de coordenadas `coor` de um polígono e da função $Z(t, x_1)$, calcule o empuxo do líquido sobre o corpo.
- Grafique as componentes horizontal e vertical do empuxo como função do tempo.
- Considere $Z(t, x_1) = t$, e outra função que represente uma onda que passa pela posição do corpo.

A partir dos conceitos desenvolvidos, uma formulação razoável seria:

- Seja $x_j^i$ a componente $j$ do vetor de coordenadas do nó $i$, com $i = 1, \ldots, N$. Isto poderia ser uma matriz `coor(1:n,1:2)` em que cada linha é o vetor (linha) posição de um nó. Por exemplo,

  ```
  n=4; coor=[0 0;1 0;1 2;0 2];
  coor=[coor;[coor(1,:)]];
  ```

  constroi o retângulo $(0,1) \times (0,2)$

- A regra de quadratura poderia ser

```
N=3; xi=[-sqrt(3/5),0,sqrt(3/5)];A=[5/9,8/9,5/9];
```

- Pesos interpolatórios $(1-\xi)/2$ e $(1+\xi)/2$):

```
pint=[(1-xi)/2;(1+xi)/2];
```

- Imagens dos pontos de quadratura no segmento (“patch”) $i$

```
for k=1:N
 x(1,k)=pint(1,k)*coor(i,1)+pint(2,k)*coor(i+1,1);
 x(2,k)=pint(1,k)*coor(i,2)+pint(2,k)*coor(i+1,2);
endfor
```

- Os Jacobianos e vetores normais:

```
d=[coor(2:n+1,:)-coor(1:n,:)];ll=norm(d,"rows");jac=ll/2;

normal=[d(:,2)./ll,-d(:,1)./ll]
```

- Integral da função $f = 1$ (perímetro):

```
perim=0;
for i=1:n
 perim=perim+A*ones(N,1)*jac(i);
endfor
```

- Integral de função arbitrária:

```
f=@(x) x(1)*x(2);
res=0;
for i=1:n
 for k=1:N
  x=pint(1,k)*coor(i,:)'+pint(2,k)*coor(i+1,:)';
  res=res+A(k)*f(x)*jac(i);
 endfor
endfor
```

- Integral da normal ($= 0$):

```
res=[0;0];
for i=1:n
 for k=1:N
  res=res+A(k)*normal(i,:)'*jac(i);
 endfor
endfor
```

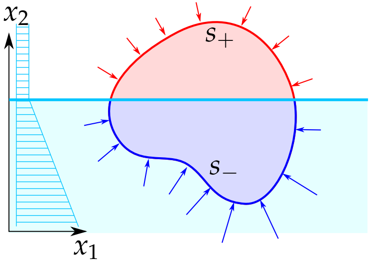
- Integral de $\frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{n}$ (=volume):

```
res=0;
for i=1:n
 for k=1:N
  x=pint(1,k)*coor(i,:)'+pint(2,k)*coor(i+1,:)';
  res=res+A(k)*1/2*normal(i,1:2)*x*jac(i);
 endfor
endfor
```

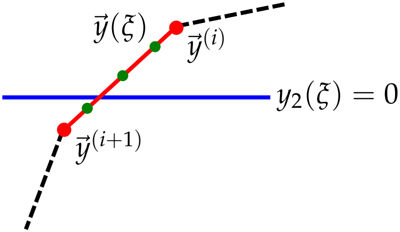
- Empuxo:

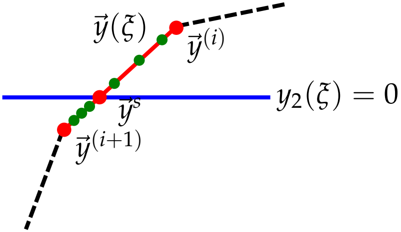
```
Z=@(t,x1) 1.5;
p=@(t,x) max(0,Z(t,x(1))-x(2));
t=0;
res=[0;0];
for i=1:n
 for k=1:N
  x=pint(1,k)*coor(i,:)'+pint(2,k)*coor(i+1,:)';
  res=res+A(k)*normal(i,1:2)'*(-p(t,x))*jac(i);
 endfor
endfor
```

# Erros de integração

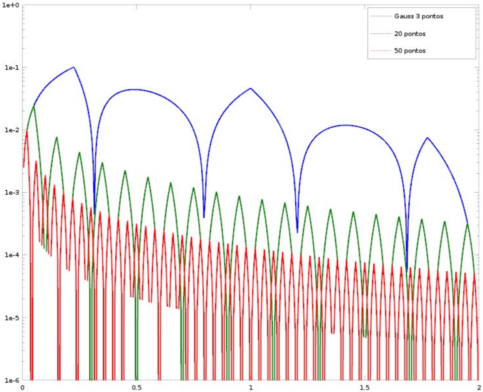



- A função $p(t, \vec{x})$ **não é um polinômio** ao longo das arestas cortadas pela superfície libre. Isto, no caso de corpos com arestas muito compridas, requer uma integração especial.



- Consideremos o quadrilátero defido pelos pontos $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,2)$ e $(0,2)$. Seu empuxo (Arquimedes) é, em função da altura da água, $E(z) = \rho\, g\, z\,(1 + z/2)$.
- Na figura se compara o **erro relativo** de usar quadratura de Gauss de 3 pontos, com o de quadraturas de 20 e 50 pontos.



# Cálculo do torque de pressão

- O **torque** é a quantidade que governa as rotações, assim como a **força** governa as translações.
- É uma quantidade **vetorial** (pseudo), mas em 2D é escalar.

$$\vec{T}_P = \int_{\mathcal{S}} (\vec{x} - \vec{c}) \times (-p(\vec{x})\, \vec{n})\, d\mathcal{S}$$

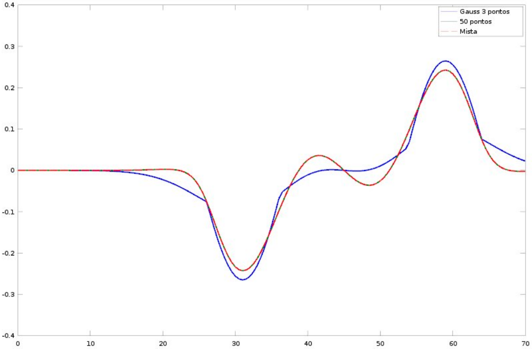
- O torque é medido **respeito de um centro de rotação**, nesse caso $\vec{c}$.
- Quando o centro de rotação coincide com o centro de massa, a dinâmica rotacional é dada por $I\,\omega'(t) = T$.

- Torque:

```
Z=@(t,x1) 1.+exp(-(x1-0.1*t+3)^2/0.16);
p=@(t,x) max(0,Z(t,x(1))-x(2));
t=0; res=0;
for i=1:n
 for k=1:N
  x=pint(1,k)*coor(i,:)'+pint(2,k)*coor(i+1,:)';
  ff=(x(1)-cg(1))*normal(i,2)-(x(2)-cg(2))*normal(i,1);
  res=res+A(k)*ff*(-p(t,x))*jac(i);
 endfor
endfor
```

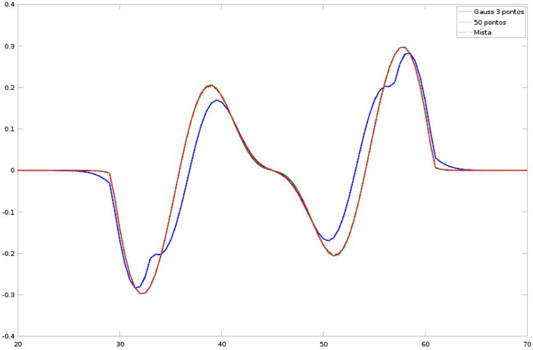
# Erro de integração

- Consideremos o quadrilátero defido pelos pontos $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,2)$ e $(0,2)$. Calculamos o torque respeito de $\vec{c}$ quando passa a onda
$$Z(t,x_1) = 1 + \exp\left(-\left(x_1 + 3 - 0.1\,t\right)^2\right) \ .$$



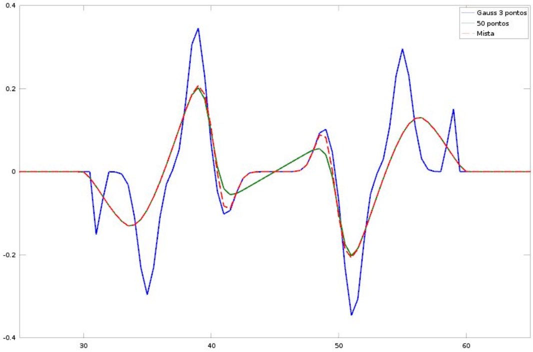
Onda mais ingreme,

$$Z(t, x_1) = 1 + \exp\left(-\frac{(x_1 + 3 - 0.1\,t)^2}{0.4^2}\right) .$$



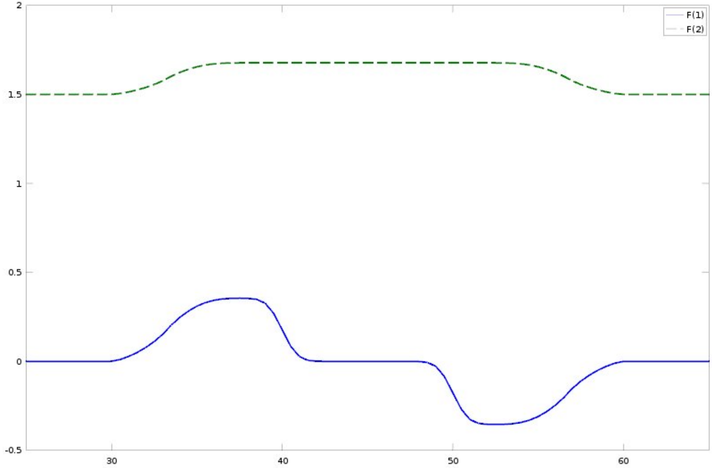
Onda ainda mais ingreme,

$$Z(t, x_1) = 1 + \exp\left(-\frac{(x_1 + 3 - 0.1\,t)^2}{0.1^2}\right) .$$




O método misto também dá resultado errado, porque a integração de 3 pontos não consegue capturar a onda.

Complementemos vendo o empuxo para essa última onda.



## Definição (Corpo rígido)

*Um corpo $\Omega$ é dito rígido se, quando submetido a um movimento, as distâncias entre seus pontos não variam.*

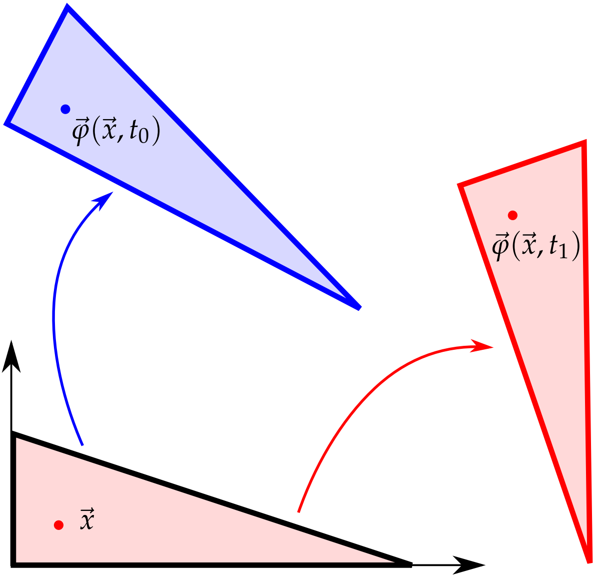
Para conseguir descrever o movimento de corpos rígidos, usaremos uma transformação

$$\vec{\varphi} : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2$$

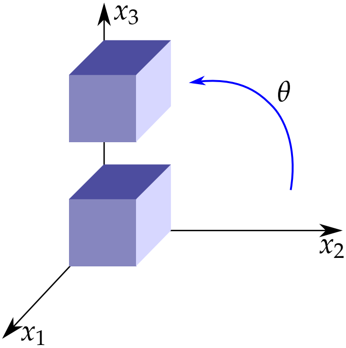
$$\vec{x} \mapsto \vec{\varphi}(\vec{x}, t)$$

onde $\vec{x}$ é tomado em uma configuração de referência de $\Omega$ e $\vec{\varphi}(\vec{x}, t)$ é a posição ocupada no tempo $t$ pela partícula do corpo que na configuração de referência está no ponto $\vec{x}$.

# Corpo rígido



# Exemplo




Rotação em torno do eixo $x_1$ de um cubo deslocado em $x_3 = 2$, por um ângulo $\theta(t)$. A configuração de referência do cubo permanece na origem.

$$\vec{\varphi}(\vec{x}, t) =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta(t) & -\operatorname{sen}\theta(t) \\ 0 & \operatorname{sen}\theta(t) & \cos\theta(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 + 2 \end{bmatrix}$$

### Teorema (Representação do movimento)

*Uma transformação* $\vec{x} \mapsto \vec{\psi}(\vec{x})$ *satisfaz*

$$\|\vec{x} - \vec{y}\| = \|\vec{\psi}(\vec{x}) - \vec{\psi}(\vec{y})\|$$

*se e somente se existe uma matriz ortogonal* $Q \in \mathbb{R}^{d \times d}$ *e um vetor* $\vec{b} \in \mathbb{R}^d$ *tais que*

$$\vec{\psi}(\vec{x}) = Q \cdot \vec{x} + \vec{b}$$

## Teorema (Representação do movimento)

*Uma transformação* $\vec{x} \mapsto \vec{\psi}(\vec{x})$ *satisfaz*

$$\|\vec{x} - \vec{y}\| = \|\vec{\psi}(\vec{x}) - \vec{\psi}(\vec{y})\|$$

*se e somente se existe uma matriz ortogonal* $Q \in \mathbb{R}^{d \times d}$ *e um vetor* $\vec{b} \in \mathbb{R}^d$ *tais que*

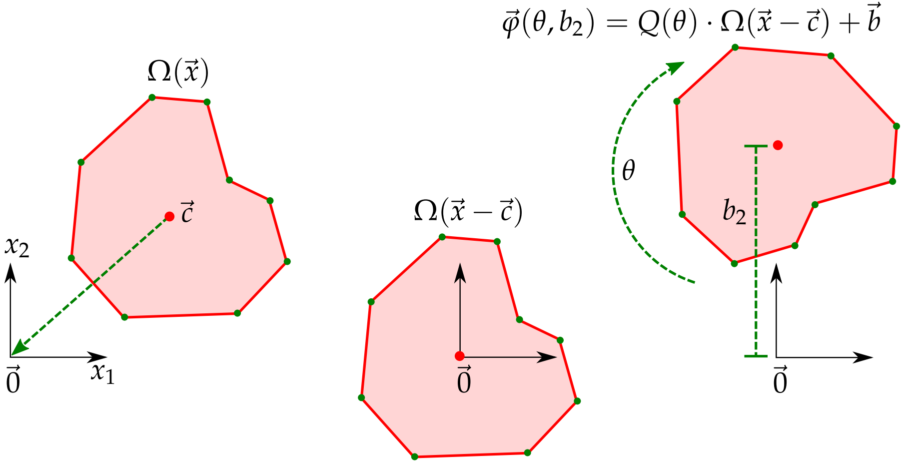
$$\vec{\psi}(\vec{x}) = Q \cdot \vec{x} + \vec{b}$$

## Definição (Movimento rígido)

*São transformações da forma*

$$\vec{\varphi}(\vec{x}, t) = Q(t) \cdot \vec{x} + \vec{b}(t)$$

# Movimentos rígidos




Transformação rígida que rota o corpo um ângulo $\theta$ e leva o centro $\vec{c}$ à posição $\vec{b} = (0, b_2)$.

## Transformação das coordenadas dos nós

Lembremos que

$$\vec{\varphi}(\vec{x}) = Q_\theta\,(\vec{x} - \vec{c}) + \vec{b}$$

onde $\vec{x}$ pertence à configuração de referência (`coor0`).

```
n=4; coor0=[1 0;2 0;3 2;0 2];
coor0=[coor0;[coor0(1,:)]];
cg=[1.5;0.5];
theta=60*(2*pi/360);b=[0;0];
qq=[cos(theta) -sin(theta);sin(theta) cos(theta)];
for i=1:n+1
 coor(i,:)=(qq*(coor0(i,:)'-cg)+b)';
endfor
```

Assim, podemos estudar empuxo e torque em diversas posições do corpo.

Consideramos um corpo bidimensional homogêneo cuja geometria é dada por um vetor de coordenadas `coor0(n,2)` e cuja densidade é `rho` (a densidade da água é 1, assim como a gravidade). O centro de massa está sempre em $x_1 = 0$, mas o corpo pode rotacionar e movimentar verticalmente. A superfície livre é horizontal ($x_2 = 0$).

1. Programe um código que, para cada valor de `rho`, construa um gráfico do torque $T$ como função do ângulo `theta`. A posição vertical para cada ângulo deve ser tal que o empuxo equilibre ao peso.
2. Identifique assim as posições de equilíbrio para cada `rho` e analise sua estabilidade.

## Dinâmica de uma partícula pontual

- Partícula de massa $m$, posição $\vec{x}$, força aplicada total $\vec{F}$.
- Momento linear: $\vec{p} = m\,\vec{v} = m\,\dfrac{d\vec{x}}{dt}$.
- Segunda lei de Newton: $m\,\dfrac{d^2\vec{x}}{dt} = \dfrac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$.
- Energia cinética: $K = \dfrac{m}{2}\,\|\vec{v}\|^2$.

## Momentos angulares

- Momento de uma força (torque) em $\vec{x}$ respeito de $\vec{0}$:

$$\vec{T} = \vec{x} \times \vec{F}$$

- Momento respeito de um eixo pela origem de direção $\check{e}$: $T_{\check{e}} = \check{e} \cdot \vec{T}$.
- **Momento angular respeito de $\vec{0}$:**

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \vec{x} \times (m\vec{v})$$

- Conservação do momento angular:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \underbrace{\frac{d\vec{x}}{dt} \times \vec{p}}_{=0} + \vec{x} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{x} \times \vec{F} = \vec{T}$$

que é simplesmente uma re-escrita de $F = m\,a$.

## Várias partículas

- Partícula $k$, massa $m_k$, posição $\vec{x}^k$, momento $\vec{p}^k = m_k \vec{v}^k$.
- Força (externa + inter-partículas):

$$\vec{F}^k = \vec{F}_e^k + \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \to k}$$

- Força total, momento linear total:

$$\vec{F} = \sum_k \left( \vec{F}_e^k + \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \to k} \right) = \sum_k \vec{F}_e^k \,, \qquad \vec{p} = \sum_k \vec{p}^k$$

- Conservação do momento linear (segunda lei para várias partículas):

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \sum_k \frac{d\vec{p}^k}{dt} = \sum_k \left( \vec{F}_e^k + \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \to k} \right) = \vec{F}$$

## Centro de massa

- Massa total: $M = \sum_k m_k$.
- Centro de massa:

$$\vec{c} = \frac{1}{M} \sum_k m_k \, \vec{x}^k \qquad \rightarrow \frac{1}{M} \int_\Omega \rho \, \vec{x} \, d\Omega$$

- Então,

$$\vec{p} = M \frac{d\vec{c}}{dt} \,, \qquad M \frac{d^2\vec{c}}{dt^2} = \vec{F}$$

o centro de massa se comporta como uma partícula pontual.

## Momento angular de várias partículas

- Momento angular total, torque total:

$$\vec{L} = \sum_k \vec{L}^k = \sum_k \vec{x}^k \times \vec{p}^k \,, \qquad \vec{T} = \sum_k \vec{x}^k \times \vec{F}_e^k$$

- Conservação do momento angular:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \sum_k \frac{d\vec{L}^k}{dt} = \sum_k \vec{x}^k \times \left( \vec{F}_e^k + \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \to k} \right) =$$

$$= \sum_k \vec{x}^k \times \vec{F}_e^k + \underbrace{\sum_k \left( \vec{x}^k \times \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \to k} \right)}_{=0\ !} = \vec{T}$$

- Essa equação é agora **independente da conservação do momento linear**.

# Equações dinâmicas de corpo rígido

- Um conjunto de partículas deve satisfazer as 6 EDOs (3 em 2D)

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{p}}{dt} &= \vec{F} \\ \frac{d\vec{L}}{dt} &= \vec{T} \end{aligned}$$

- Se o conjunto é rígido, ele tem coincidentemente 6 graus de liberdade apenas (3 em 2D).
- **Felizmente**, as 6 EDOs **determinam totalmente** os 6 graus de liberdade! As equações dinâmicas são um sistema fechado.
- Apenas devemos trabalhar um pouco mais para levar à forma final...

## Momento angular de corpo rígido

- Movimento rígido:

$$\vec{x}^k(t) = \vec{\varphi}(\vec{X}^k, t) = Q(t)\vec{X}^k + \vec{b}(t), \qquad \vec{X}^k = Q(t)^T(\vec{x}^k(t) - \vec{b}(t))$$

- Velocidade:

$$\vec{v}^k(t) = \frac{dQ}{dt}(t)\vec{X}^k = \frac{dQ}{dt}(t)\,Q(t)^T(\vec{x}^k(t) - \vec{b}(t))$$

- $Q(t)Q(t)^T = \mathbb{I} \;\Rightarrow\; \frac{dQ}{dt}\,Q^T$ é antissimétrica.

$$0 = \frac{d}{dt}(Q\,Q^T) = \frac{dQ}{dt}Q^T + Q\frac{dQ^T}{dt} = \frac{dQ}{dt}Q^T + \left(\frac{dQ}{dt}Q^T\right)^T$$

- Produto com matrizes antissimétricas é equivalente a produto vetorial por (pseudo)vetor.

$$A(\vec{\omega})\,\vec{z} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \check{\mathbf{i}} & \check{\mathbf{j}} & \check{\mathbf{k}} \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 \\ z_1 & z_2 & z_3 \end{vmatrix} = \vec{\omega} \times \vec{z}$$

- No caso 2D, simplesmente tomar $\vec{\omega} = \omega\,\check{\mathbf{k}}$, e $A = \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$
- $\vec{v}^k(t) = \vec{\omega}(t) \times (\vec{x}^k(t) - \vec{b}(t)) = \vec{\omega}(t) \times \vec{x}^k(t) + \vec{V}(t)$
  Onde $\vec{V}$ é a velocidade da partícula atualmente em $\vec{0}$.
- Notar que, sendo $A(\vec{\omega}) = \frac{dQ}{dt} Q^T$,

$$\frac{dQ}{dt} = A(\vec{\omega})\,Q$$

Em 2D isto é simplesmente $\frac{d\theta}{dt} = \omega$.

- Substituindo,

$$\vec{L} = \sum_k \vec{x}^k \times m_k \vec{V} + \sum_k m_k \vec{x}^k \times (\vec{\omega} \times \vec{x}^k)$$

o primeiro termo é zero se tomamos momentos respeito de $\vec{c}(t)$.

- Utilizando $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\, \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\, \vec{c}$,

$$\vec{L} = \underbrace{\left[ \sum_k m_k \left( \|\vec{x}^k\|^2 \, \mathbb{I} - \vec{x}^k (\vec{x}^k)^T \right) \right]}_{\mathcal{J}} \vec{\omega} \;\rightarrow\; \left[ \int_\Omega \rho (\|\vec{x}\|^2 \, \mathbb{I} - \vec{x}\, \vec{x}^T) \, d\Omega \right] \vec{\omega}$$

- $\mathcal{J}$ é o **tensor (matriz) de inércia angular**.
- $\vec{T} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d}{dt} (\mathcal{J}\, \vec{\omega}) = \mathcal{J}\, \frac{d\vec{\omega}}{dt} + \underbrace{\vec{\omega} \times (\mathcal{J}\, \vec{\omega})}_{0 \text{ em 2D}}$ $\quad \left( \frac{d\mathcal{J}}{dt} = 0 \text{ em 2D} \right)$

# Equações finais em 2D

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \vec{c} \\ \theta \\ \vec{p} \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{V} \\ \omega \\ \vec{F} \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M}\vec{p} \\ \\ \frac{1}{\mathcal{J}}L \\ \\ \vec{F} \\ \\ T \end{pmatrix}$$

- $\mathcal{J} = \int_{\Omega^0} \rho(x_1^2 + x_2^2)\, d\Omega^0$, pre-calculado, independente do tempo.
- Forças totais = Peso + Empuxo + "Amortecimento" ($= -\beta\vec{V}$, onde $\beta$ poderia ser matriz diagonal)
- Torque total = Torque líquido + "Amortecimento" ($= -\gamma\omega$)

## Projeto: Parte II - Dinâmica

Consideramos o mesmo corpo da Parte I. A posição inicial é dada por $\vec{c}(0)$ e $\theta(0)$, a velocidade inicial é nula. Pede-se um código que resolva a dinâmica com a superfície dada por uma função $Z(x_1, t)$ arbitrária.

1. Calculamos resposta a perturbações nos equilíbrios calculados na parte I, com $Z(x_1, t) = 0$. Ajustar $\beta$ e $\gamma$ para que o sistema seja levemente amortecido.
2. Calculamos resposta a uma onda cuja frequência seja menor/parecida/maior que as frequências de oscilação do sistema (ponto anterior).

# Equações finais em 3D

- No caso 2D a orientação era um ângulo $\theta(t)$. **Em 3D ela é dada pela matriz $Q(t)$.**
- No caso 2D o tensor $\mathcal{J}$ é um número constante. Em 3D é uma matriz **que varia com a orientação**. Se $\mathcal{J}_0$ é o momento de inércia na posição de referência,

$$\mathcal{J}(t) = Q(t)\,\mathcal{J}_0\,Q(t)^T\,, \qquad \mathcal{J}^{-1} = Q\,\mathcal{J}_0^{-1}\,Q^T$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \vec{c} \\ Q \\ \vec{p} \\ \vec{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{V} \\ A(\vec{\omega})\,Q \\ \vec{F} \\ \vec{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M}\vec{p} \\ A(Q\,\mathcal{J}_0^{-1}\,Q^T\,\vec{L})\,Q \\ \vec{F} \\ \vec{T} \end{pmatrix}$$

# Observações

- Os graus de liberdade de rotação são 3, **porém estamos representando as rotações com uma matriz ortogonal (9 incógnitas!)**.
- O sistema depende fortemente de $Q(t)$ ser ortogonal para todo $t$.
- **Exercício:** Prove que, se $Q$ satisfaz $dQ/dt = A(t)Q(t)$ com $A(t)$ antissimétrica, e $Q(0)$ é ortogonal, então $Q(t)$ é ortogonal $\forall\, t$.
- Quando se utiliza resolução numérica, a matriz $Q$ perde ortogonalidade por erro de aproximação!
- **Exercício:** Provar que a aproximação de Euler $Q_{n+1} = Q_n + \Delta t\, A_n\, Q_n$ faz que $Q_{n+1}$ não seja ortogonal, de fato
$$Q_{n+1} Q_{n+1}^T = \mathbb{I} - (\Delta t\, A_n)^2 \,.$$
- Ambas dificuldades acima levam a preferir os **quatérnions**.

- Quatérnions são uma melhor representação das rotações do que matrizes.
- Um quatérnion é um par escalar-vetor $q = [s, \vec{v}]$ cuja multiplicação é definida como

$$[s, \vec{v}][r, \vec{u}] = [s\,r - \vec{v} \cdot \vec{u}, s\,\vec{u} + r\,\vec{v} + \vec{v} \times \vec{u}]$$

- Conjugação: $q^* = [s, -\vec{v}]$. Também: $(p\,q)^* = q^*\,p^*$.
- Norma: $\|q\|^2 = q\,q^* = s^2 + \|\vec{v}\|^2$.
- Inversa: $q^{-1} = q^* / \|q\|^2$.

- Uma rotação de ângulo $\theta$ em torno de uma direção unitária $\vec{u}$ é representada pelo quatérnion unitário

$$q_{(\theta,\vec{u})} = [\cos(\frac{\theta}{2}), \sin(\frac{\theta}{2})\,\vec{u}]\,, \quad \|q\| = \cos^2(\frac{\theta}{2}) + \sin^2(\frac{\theta}{2})\,\|\vec{u}\|^2 = 1$$

- Rotação de vetores: $x = [0, \vec{x}] \;\Rightarrow\; q\,x\,q^* = [0, Q_{\theta,\vec{u}}\,\vec{x}]$
- Composição de rotações:

$$[0,\vec{y}] = [0, Q(q)Q(p)\vec{x}] \;\;\Rightarrow\;\; [0,\vec{y}] = q\,p\,[0,\vec{x}]\,p^*\,q^*$$

Isto é, $Q(q\,p) = Q(q)Q(p)$.

- A matriz associada a um quatérnion unitário $q = [s, \vec{v}]$ é

$$Q(q) = \begin{pmatrix} 1 - 2\,v_2^2 - 2\,v_3^2 & 2\,v_1\,v_2 - 2\,s\,v_3 & 2\,v_1\,v_3 + 2\,s\,v_2 \\ 2\,v_1\,v_2 + 2\,s\,v_3 & 1 - 2\,v_1^2 - 2\,v_3^2 & 2\,v_2\,v_3 - 2\,s\,v_1 \\ 2\,v_1\,v_3 - 2\,s\,v_2 & 2\,v_2\,v_3 + 2\,s\,v_1 & 1 - 2\,v_1^2 - 2\,v_2^2 \end{pmatrix}$$

- Em termos de quatérnions, a equação $Q'(t) = A(\vec{\omega}(t))\,Q(t)$ se reescreve

$$\frac{dq}{dt} = \frac{1}{2}\,[0, \vec{\omega}(t)]\,q(t)$$

## Equações 3D com quatérnions

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \vec{c} \\ q \\ \vec{p} \\ \vec{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{V} \\ \frac{1}{2}\,[0,\vec{\omega}]\,q \\ \vec{F} \\ \vec{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M}\vec{p} \\ \\ \frac{1}{2}\,[0, Q(q)\,\mathcal{J}_0^{-1}\,Q(q)^T\,\vec{L}]\,q \\ \\ \vec{F} \\ \\ \vec{T} \end{pmatrix}$$

- Representam a mesma física com menos incógnitas (13 em vez de 18).
- Sempre que $q$ se mantenha unitário, não há problema de $Q(q)$ deixar de ser matriz ortogonal (conveniência numérica).

O sistema é assim transformado em

$$y'(t) = f(t, y(t)) \;, \qquad \text{onde } y = (\vec{c}, q, \vec{p}, \vec{L})^T$$

## Algoritmo para avaliar $f(t, y)$

1. Normalizar $q$.
2. Calcular $\vec{V} = \vec{p}/M$.
3. De $q$, calcular $Q(q)$ (fórmula matriz associada).
4. Calcular $\mathcal{J}^{-1} = Q(q)\mathcal{J}_0^{-1}Q(q)^T$. Notar que $\mathcal{J}_0^{-1}$ foi pre-calculado no começo.
5. Calcular $\vec{\omega} = \mathcal{J}^{-1}\vec{L}$.
6. Calcular $\vec{F}$ e $\vec{T}$, funções de $t$ e $y$.
7. $f(t, y) = (\vec{V}, \frac{1}{2}[0, \vec{\omega}]q, \vec{F}, \vec{T})^T$.


- D. Baraff. An introduction to physically based modeling. SIGGRAPH'97 Course Notes.
- M. Mason. Mechanics of Manipulation, 2010. Course Notes.

Equações finais da dinâmica 2D $\Longrightarrow$ $\boxed{\frac{dy}{dt}(t) = f(t, y(t))}$ onde

$$y = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \theta \\ p_1 \\ p_2 \\ L \end{pmatrix}, \quad f(t,y) = \begin{pmatrix} p_1/M \\ p_2/M \\ L/\mathcal{J} \\ F_1^h(t, \vec{X}(\vec{c},\theta)) - \beta_1 p_1/M \\ F_2^h(t, \vec{X}(\vec{c},\theta)) - \beta_2 p_2/M - M g \\ T^h(t, \vec{X}(\vec{c},\theta)) - \gamma L/\mathcal{J} \end{pmatrix},$$

$(F_1^h, F_2^h)$ o empuxo, $\vec{X}(\vec{c},\theta)$ as posições dos vértices do polígono ($\vec{X} = \vec{c} + Q(\theta)(\vec{X}^{ref} - \vec{c}^{ref})$), $T^h$ o torque hidrostático.

## Solução numérica de $y' = f(t, y)$

- Seja $Y(t)$ a solução exata de $Y'(t) = f(t, Y(t)),\ \ Y(0) = Y^0$.
- Métodos numéricos são receitas para calcular um conjunto de vetores $y^0, y^1, \ldots$, que aproximam sistematicamente $Y(0)$, $Y(t_1)$, $Y(t_2), \ldots$, para uma sequência de tempos $t_1, t_2, \ldots$
- **Exemplo mais simples:** Método de Euler com passo fixo definido pelo usuário.

$$y^0 = Y^0\,, \quad t_k = k\,\Delta t\,, \quad y^{k+1} = y^k + \Delta t\, f(t_k, y^k)$$

É um método explícito porque não requer inverter $f$, como é na versão implícita $y^{k+1} = y^k + \Delta t\, f(t_{k+1}, y^{k+1})$.

- Nos métodos explícitos, o custo computacional está na avaliação da função $f$. Para o método de Euler: 1 avaliação por passo.
- Esses métodos se tornam instáveis se $\Delta t > c/J_f$, com $c \simeq 2$ e $J_f$ o maior autovalor em módulo da matriz Jacobiana de $f$.
- Por $J_f$ depender de $y$ o limite de estabilidade pode apenas ser *adivinhado*.
- Métodos Runge-Kutta constituem bons compromissos entre custo (número de avaliações de $f$) e precisão ($\|y^k - Y(t_k)\|$).
- A **precisão** é usualmente avaliada pela **ordem do método**: $\|y^k - Y(t_k)\| \leq C\,\Delta t^p$.

# Métodos de Runge-Kutta e Tabela de Butcher

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t \ (b_1 \, k_1 + b_2 \, k_2 + \ldots + b_s \, k_s)$$

onde

$$\begin{array}{lcl} k_1 & = & f(t_n, y^n) \\ k_2 & = & f(t_n + c_2 \, \Delta t, y^n + \Delta t \, (a_{21} \, k_1)) \\ k_3 & = & f(t_n + c_3 \, \Delta t, y^n + \Delta t \, (a_{31} \, k_1 + a_{32} \, k_2)) \\ \ldots & & \ldots \end{array}$$

$$\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\ \ldots & & \ldots & & & \\ \hline & b_1 & b_2 & \ldots & \ldots & b_s \end{array}$$

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t \; (b_1 \, k_1 + b_2 \, k_2 + \ldots + b_s \, k_s)$$

onde

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(t_n, y^n) \\
k_2 &= f(t_n + c_2 \, \Delta t, y^n + \Delta t \, (a_{21} \, k_1)) \\
k_3 &= f(t_n + c_3 \, \Delta t, y^n + \Delta t \, (a_{31} \, k_1 + a_{32} \, k_2)) \\
\ldots & \quad \ldots
\end{aligned}$$

```
K(:,1)=f(y(:,n),time(n)); ## ydot=f(y,t), notar inversão de ordem
for m=2:nstage
 tt=time(n)+c(m)*dt;
 yy=y(:,n)+dt*K(:,1:m-1)*a(m,1:m-1)';
 K(:,m)=f(yy,tt);
endfor
ynew=y(:,n)+dt*K(:,1:nstage)*b';
time(n+1)=time(n)+dt;
dtime(n+1)=dt;
y(:,n+1)=ynew;
```

# Runge-Kutta ordem 2

$$
\begin{aligned}
y^{n+1} &= y^n + \Delta t \left( \frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2 \right) \\
k_1 &= f(t_n, y^n) \\
k_2 &= f(t_n + \Delta t, y^n + \Delta t\, k_1)
\end{aligned}
$$

Tabela de Butcher

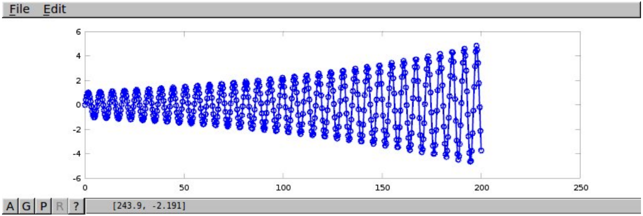
$$
\begin{array}{c|cc}
0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}
$$

```
function [y time]=rk2(f,y0,t0,dt,nt)
time(1)=t0; y(:,1)=y0;
nstage=2;a=[0 0;1 0];c=[0; 1];b=[0.5 0.5];
for n=1:nt
 K(:,1)=feval(f,y(:,n),time(n));
 for m=2:nstage
  tt=time(n)+c(m)*dt;
  yy=y(:,n)+dt*K(:,1:m-1)*a(m,1:m-1)';
  K(:,m)=feval(f,yy,tt);
 endfor
 y(:,n+1)=y(:,n)+dt*K(:,1:nstage)*b';
 time(n+1)=time(n)+dt;
endfor
```

```
function f = foscil(y,t)
ome=1.;
f(1)=y(2);
f(2)=-ome*ome*y(1);
end
```

- Resolvemos $x' = v$, $v' = -x$ com $x(0) = 0$, $v(0) = 1$. A solução exata é $x(t) = \sin t$, $v(t) = \cos t$.
- Matriz jacobiana $= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, então $J_f = 1$ (autovalores $\pm i$), limite de estabilidade $\Delta t < 2$.

```
> [y time]=rk2("foscil",[0;1],0,0.4,500);
> plot(time,y(1,:),"-o","linewidth",2)
```




- A pouca precisão leva a comportamento errado.

# Runge-Kutta de ordem 4

- Tabela de Butcher:

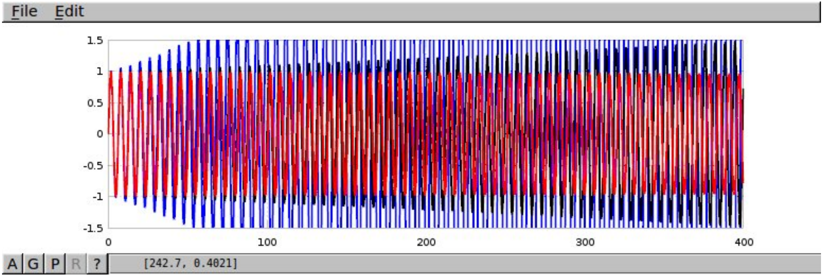
$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{2}{6} & \frac{2}{6} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

- **Mesmo código do slide anterior, com**

```
nstage=4;
a=[0 0 0 0;1/2 0 0 0;0 1/2 0 0;0 0 1 0];
c=[0; 1/2; 1/2; 1];
b=[1/6 2/6 2/6 1/6];
```

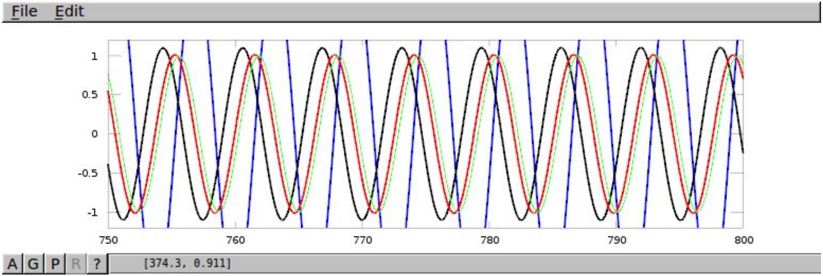
Comparamos RK2 com $\Delta t = 0.4$ e $0.2$, e RK4 com $\Delta t = 0.4$.

```
>[y1 time1]=rk2("foscil",[0;1],0,0.4,1000);
>[y2 time2]=rk2("foscil",[0;1],0,0.2,2000);
>[y4 time4]=rk4("foscil",[0;1],0,0.4,1000);
> plot(time1,y1(1,:),"-b","linewidth",2,...
time2,y2(1,:),"-k","linewidth",2,...
time4,y4(1,:),"-r","linewidth",2)
> axis([0 400 -1.5 1.5])
```



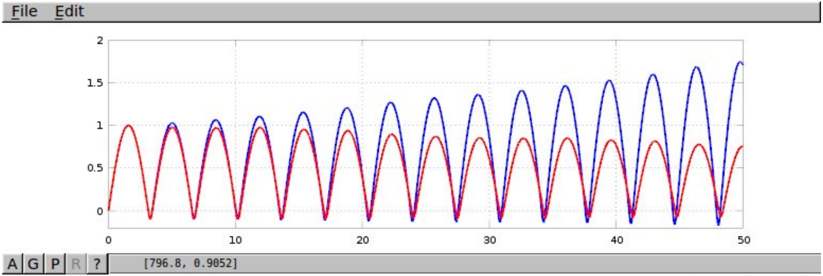
Qual é o $\Delta t$ tal que a $t = 800$ a amplitude continua sendo $\simeq 1$ com RK2?

```
>[y1 time1]=rk2("foscil",[0;1],0,0.2,4000);
>[y2 time2]=rk2("foscil",[0;1],0,0.1,8000);
>[y4 time4]=rk2("foscil",[0;1],0,0.05,16000);
>plot(time1,y1(1,:),"-b","linewidth",2,time2,y2(1,:),"-k",...
"linewidth",2,time4,y4(1,:),"-r","linewidth",2,...
time1,sin(time1),"-g","linewidth",1)
> axis([750 800 -1.2 1.2])
```

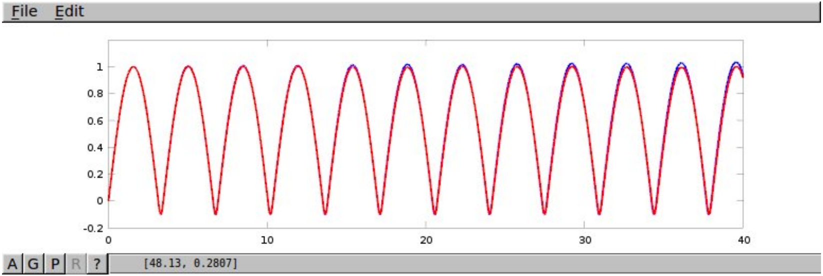


# Massa-mola com parede

```
function f = foscilw(y,t)
ome=1.;f(1)=y(2);
if (y(1)>0)  f(2)=-ome*ome*y(1);
else  f(2)=-100*ome*ome*y(1);
endif
end
>[y1 time1]=rk2("foscilw",[0;1],0,0.1,500);
>[y2 time2]=rk4("foscilw",[0;1],0,0.2,250);
>plot(time1,y1(1,:),"-b","linewidth",2,time2,y2(1,:),"-r",...
"linewidth",2)
> axis([0 50 -.2 2])
```



```
>[y1 time1]=rk2("foscilw",[0;1],0,0.02,2000);
>[y2 time2]=rk4("foscilw",[0;1],0,0.04,1000);
>plot(time1,y1(1,:),"-b","linewidth",2,time2,y2(1,:),"-r",...
"linewidth",2)
> axis([0 40 -.2 1.2])
```



# Ajuste automático de passo

**Ideia geral:** Em cada passo de tempo,

- Calcular $y^{n+1}$ com **dois** métodos de diferente ordem. Exemplo: RK2$\rightarrow y^{n+1}$, RK4$\rightarrow z^{n+1}$.
- Estimar o erro como a diferença desses resultados.

$$e = \|y^{n+1} - z^{n+1}\|$$

- Se (erro > tolerância) reduzir $\Delta t$ e voltar a 1.
- Predizer um $\Delta t$ adequado para próximos passos. Vamos supor que o esquema de menor ordem é de ordem $p$, o "passo ideal" $\Delta t_*$ daria erro igual a tolerância.

$$e \simeq C\,\Delta t^{p+1}, \quad \epsilon \simeq C\,\Delta t_*^{p+1} \quad \Rightarrow \quad \Delta t_* \simeq \Delta t \, \left(\frac{\epsilon}{e}\right)^{\frac{1}{p+1}}$$

$$\Delta t \;\longleftarrow\; \max\left(0.5\Delta t, \min\left(2\Delta t, 0.9\Delta t_*\right)\right)$$

# Embedded Runge-Kutta methods (ERKM)

- Para ajustar automaticamente $\Delta t$ são precisos **2 métodos** de diferente ordem.
- Em geral, esses dois métodos requerem avaliações **em pontos diferentes**.
- ERKM consegue construir os dois métodos **maximizando o número de pontos comuns**.
- São **pares otimizados de métodos RK**. Os mais utilizados são os de **Fehlberg**, de **Dormand-Prince**, entre outros. Matlab e Octave utilizam ERKM.

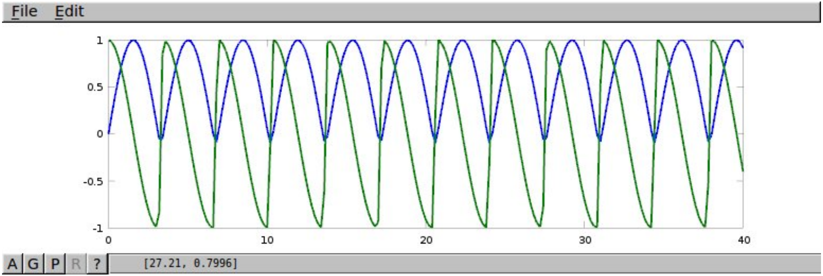
# Método de Dormand-Prince

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{3}{10} & \frac{3}{40} & \frac{9}{40} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{4}{5} & \frac{44}{45} & -\frac{56}{15} & \frac{32}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{8}{9} & \frac{19372}{6561} & -\frac{5360}{2187} & \frac{64448}{6561} & -\frac{212}{729} & 0 & 0 & 0 \\
1 & \frac{9017}{3168} & -\frac{355}{33} & \frac{46732}{5247} & \frac{49}{176} & -\frac{5103}{18656} & 0 & 0 \\
1 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \\
\hline
 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \\
 & \frac{5179}{57600} & 0 & \frac{7571}{16695} & \frac{393}{640} & -\frac{92097}{339200} & \frac{187}{2100} & \frac{1}{40}
\end{array}
$$

Há 2 vetores $\mathfrak{b}$, o primeiro é de ordem 4, o segundo de ordem 5.

- A função `lsode` implementa as melhoras discutidas.
- Se especifica a função e os tempos em que se deseja a solução, $\Delta t$ é automático.

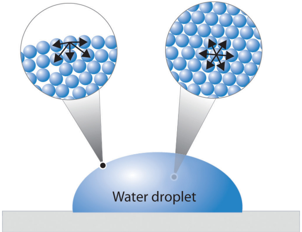
```
T=[0:0.2:40];
[X, istate, MSG]=lsode("foscilw",[0 1],T);
plot(T,X,"linewidth",2)
```

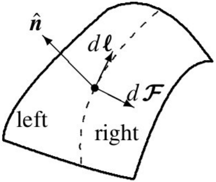


# Interfaces e tensão superficial

# Interfaces e tensão superficial

- As moléculas em uma superfície fluida estão menos *ligadas* que aquelas no seio do líquido.
- É necessária uma energia adicional para fazer crescer a área da interface.
- Essa *energia por unidade de superfície* $dE = \gamma dS$




pode ser vista também como uma *força*, ou *tensão superficial*

$$\vec{dF} = \gamma\,\vec{d\ell} \times \check{\mathbf{n}} \;=\; \gamma\, d\ell\, \check{\boldsymbol{\nu}}$$

- A força de tensão superficial é equilibrada pelas forças dos fluidos adjacentes. O resultado é equivalente a uma força (por unidade de área) valendo $\gamma\,\kappa\,\check{\mathbf{n}}$.
- Se considerarmos apenas as forças de pressão (e.g., caso hidrostático), o balanço de forças normais na interface é

$$p_{\text{interior}} - p_{\text{exterior}} = \gamma\,\kappa$$

onde $\kappa = 1/R_1 + 1/R_2$ é a **curvatura média** da interface.
- A mesma equação é obtida **minimizando a energia total** (gravitacional + capilar)

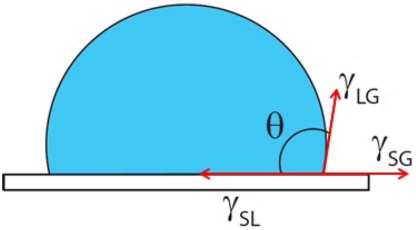
$$E = \int_{\mathcal{S}} \gamma\, d\mathcal{S} \; + \int_{\Omega} \rho\, g\, z\, d\Omega$$

- Na presença de uma superfície sólida, aparece um **ângulo de contato**, que é uma propriedade dos materiais envolvidos.

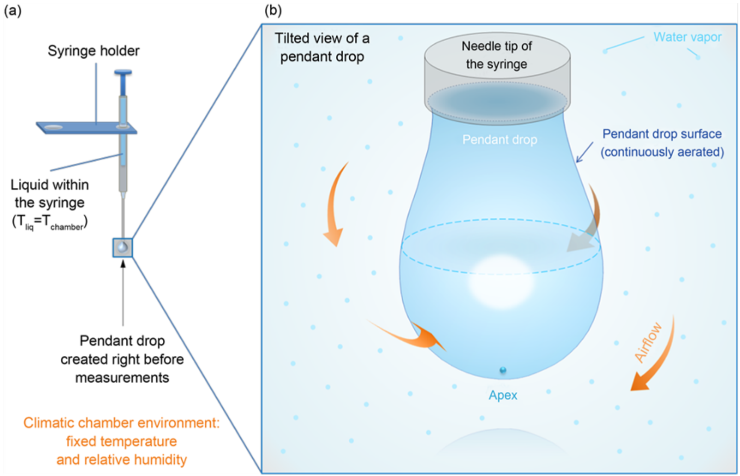
$$\cos(\theta) = \frac{\gamma_{SL} - \gamma_{SG}}{\gamma}$$

- Essa equação também se deduz da minimização da energia, agora considerando também a energia das interfaces sólidas.

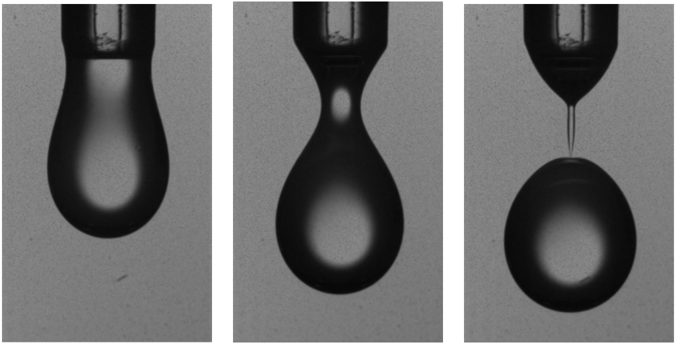
$$E = \int_{\mathcal{S}_{LG}} \gamma \, d\mathcal{S} + \int_{\mathcal{S}_{SG}} \gamma_{SG} \, d\mathcal{S} + \int_{\mathcal{S}_{SL}} \gamma_{SL} \, d\mathcal{S} + \int_{\Omega} \rho \, g \, z \, d\Omega$$



# Problema a estudar




Tomado de Portuguez et al (2017)



Tomado de B. Lautrup (2010)

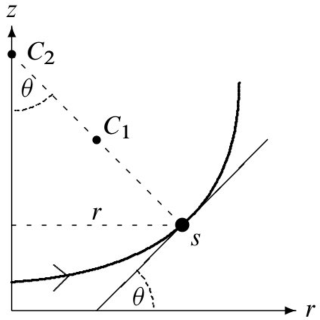
# Primeira parte: Equações diferenciais da superfície

- Uma superfície com simetria de revolução pode ser descrita com duas funções $r(s)$ e $z(s)$, onde $s$ é a coordenada de arco.

$$\frac{dr}{ds} = \cos\theta \ , \quad \frac{dz}{ds} = \sin\theta$$

- A curvatura média é dada por

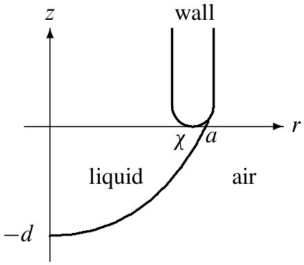
$$\kappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \frac{d\theta}{ds} + \frac{\sin\theta}{r}$$




Tomado de B. Lautrup (2010)

# Cálculo de $\Delta p$ e condições de contorno

- Não conhecemos o valor de $d$, mas mesmo conhecendo, isto não seria suficiente para calcular $p_{\text{int}}$. De fato, $p_{\text{int}}(s=0) = p(z=0) + \rho\, g\, d$, e $p(z=0)$ é desconhecido.
- Então, vamos deslocar os eixos levando à origem ($r = z = 0$) à ponta da gota.
- Também, vamos tomar $p_{\text{ext}} = 0$ e $p_{\text{int}}(s=0)$ será um parâmetro livre $p_0$.
- Em qualquer $s \neq 0$ será (hidrostática) $p_{\text{int}}(s) = p_0 - \rho\, g\, z(s)$.
- A interface pode chegar no extremo da agulha com qualquer ângulo, como explicado ao lado.




A liquid drop hanging from a tube with strongly exaggerated wall thickness. Any true contact angle can be accommodated by the 180° turn at the end of the tube's material. The apparent contact angle $\chi$ between the liquid surface and the horizontal can in principle take any value.

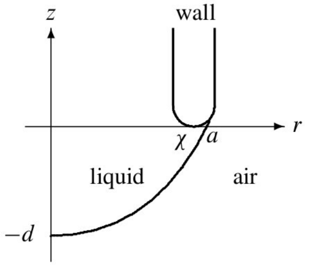
# Forma matemática da gota

Uma forma parametrizada $(r(s), z(s), \theta(s))$ satisfaz o equilíbrio mecânico de uma gota pendente se:

1. $r(0) = z(0) = \theta(0) = 0$
2. $\exists L > 0$ tal que $r(L) = a$.
3. Para $0 < s < L$,

$$\begin{aligned} r'(s) &= \cos\theta(s) \\ z'(s) &= \sin\theta(s) \\ \theta'(s) &= \frac{p_0 - \rho\, g\, z(s)}{\gamma} - \frac{\sin\theta(s)}{r(s)} \end{aligned}$$

Dados: $a$, $p_0$, $\rho$,$g$, $\gamma$.




A liquid drop hanging from a tube with strongly exaggerated wall thickness. Any true contact angle can be accommodated by the 180° turn at the end of the tube's material. The apparent contact angle $\chi$ between the liquid surface and the horizontal can in principle take any value.

# Projeto - Gota pendente hidrostática

Se deseja calcular a forma exata de gotas de um certo líquido que pendem de uma agulha de ráio $a$ e espessura desprezível. Em especial se deseja um código numérico que permita calcular:

1. O volume máximo $V_{\max}$ que uma gota em equilíbrio pode ter.
2. A curva $d$ vs. $V$, da altura vertical da gota em função do volume.
3. A forma exata das gotas de volumes $V_{\max}/3$, $2V_{\max}/3$ e $V_{\max}$.

Mostrar os resultados para agua a 20°C, com $a$ igual a 0.1 mm e 1 mm.

# Adimensionalização

- Usamos $a$ como escala de comprimento: Definimos

$$\hat{r} = \frac{r}{a},\ \hat{z} = \frac{z}{a},\ \hat{s} = \frac{s}{a} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\hat{r}}{d\hat{s}} = \frac{dr}{ds},\ \text{etc.},$$

e também $\quad \hat{\theta}(\hat{s}) = \theta(a\,\hat{s}) \ \Rightarrow\ \frac{d\hat{\theta}}{d\hat{s}}(\hat{s}) = \frac{d\theta}{ds}(a\,\hat{s})\,a$

- Substituindo nas equações, $\hat{r}(0) = \hat{z}(0) = \hat{\theta}(0) = 0$, $\hat{r}(\hat{L}) = 1$,

$$\frac{d\hat{r}}{d\hat{s}}(\hat{s}) = \cos\hat{\theta}(\hat{s}),\ \frac{d\hat{z}}{d\hat{s}}(\hat{s}) = \sin\hat{\theta}(\hat{s}),$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{d\hat{s}} = \underbrace{\frac{p_0 a}{\gamma}}_{A} - \underbrace{\frac{\rho g a^2}{\gamma}}_{B}\,\hat{z} - \frac{\sin\hat{\theta}}{\hat{r}}$$

- $A$ e $B$ são os números adimensionais do problema, já podemos retirar os chapeus.

O número $B$

- $B = \rho\, g\, a^2 / \gamma$.
- Agua a 20°C: $\rho = 998$ kg/m$^3$, $\gamma = 0.072$ N/m.

$$\Rightarrow \quad B(a = 0.1mm) = 1.36 \times 10^{-3}, \quad B(a = 1mm) = 1.36 \times 10^{-1}$$

- Mercúrio: $\rho = 13456$ kg/m$^3$, $\gamma = 0.337$ N/m.

$$\Rightarrow \quad B(a = 0.1mm) = 3.91 \times 10^{-3}, \quad B(a = 1mm) = 3.91 \times 10^{-1}$$

## O termo $\sin\theta/r$

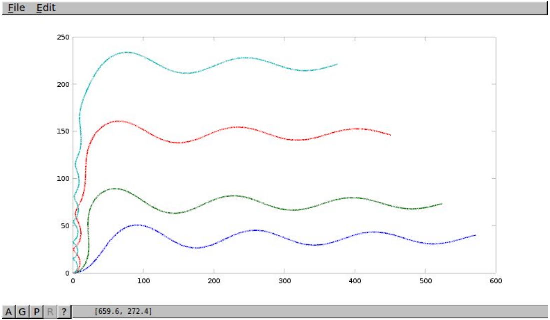
- Não está definido para $r = 0$ (corresponde a $s = 0$).
- $\lim_{s\to 0} \sin\theta(s)/r(s) = \lim_{s\to 0}(\theta' \cos\theta)/r' = \theta'(0)$
- Substituindo na equação de $\theta'$

$$\theta'(0) = A - B\,z(0) - \theta'(0) \quad \Rightarrow \quad \theta'(0) = \frac{A - B\,z(0)}{2}$$

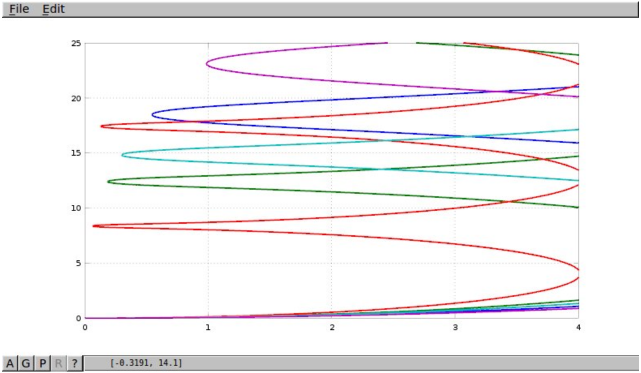
```
function f = fsurf(y,t)
global A, global B, global epsr
f(1)=cos(y(3));
f(2)=sin(y(3));
if (y(1)>epsr)
 f(3)=A-B*y(2)-sin(y(3))/y(1);
else
 f(3)=(A-B*y(2))/2;
end
```

## $B = 1.36 \times 10^{-}3$

```
>global A, global B, global epsr
>A=0.05; B=0.00136; epsr=1e-5;
>[y0 time0]=rk4("fsurf",[0;0;0],0,0.03,20000);
>plot(y0(1,:),y0(2,:),"linewidth",2)
```



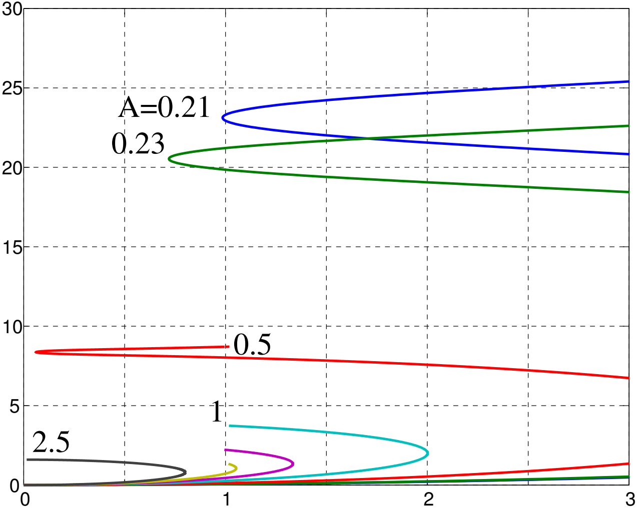

Formas para $A = 0.05, 0.1, 0.2$ e $0.3$




Formas para $A = 0.21$ (roxo), 0.25, 0.3, 0.35 e 0.5 (vermelho). **Zoom**

Observações:

- Para $A \leq A*$ (=0.21, de fato) a forma passa por $r = 1$ apenas uma vez, com $z \simeq 0$. Essas são gotas com volume bem pequeno.
- Para $A > A*$ temos 3 (ou mais) pontos com $r = 1$. Considerando os pontos com $z > 1$ temos gotas maiores.




Formas (eixos $r - z$) para $A = 0.21, 0.23, 0.5, 1.0, 1.5, 1.9$ e $2.5$.

- O valor de $z$ na interseção com $r = 1$ é a altura $d$ da gota.
- Se observa intuitivamente que o volume máximo (adimensional) corresponde a $A = A^*$.
- O volume é uma função monótona **crescente** de $A$ **para a primeira interseção**.
- O volume é uma função monótona **decrescente** de $A$ **para a segunda e terceira interseções**.
- Existe uma transição suave da forma no volume $V = V^+ \simeq \frac{2}{3}\pi$, correspondente a uma hemiesfera de raio 1 (dimensionalmente $a$). O valor de $A$ para essa configuração é $A^+ \simeq 2$.
- Quando $V = V^+$ a curvatura é máxima ($\kappa \simeq 2/a$), assim como a pressão interna $p_0 \simeq 2\gamma/a$.

- Para calcular o volume, integramos a equação

$$\frac{dV}{ds}(s) = \pi\, r(s)^2\, \frac{dz}{ds}(s)\ ,$$

isto é, acrescentamos na função `fsurf.m`,

```
f(4)=pi*y(1)^2*f(2);
```

- Também calculamos a superfície, utilizando

$$\frac{dS}{ds}(s) = 2\pi\, r(s)\ .$$

```
f(5)=2*pi*y(1);
```

- Modificamos o Runge-Kutta para que armazene as interseções com $r = 1$:

```
if ((y(1,n+1)-1)*(y(1,n)-1)<0)
 kk=kk+1;
 zz((kk-1)*nd+1:kk*nd)=y(:,n+1);
endif
```

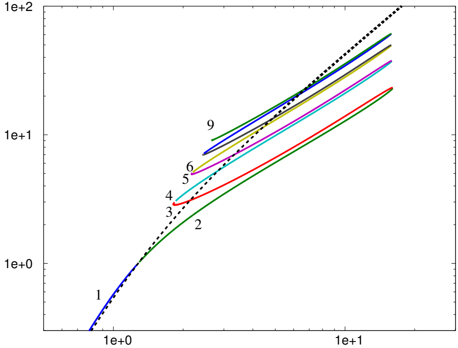
- Rodamos o código com $A = A^* = 0.21$, obtendo $z^* = 22.9$, $V^* = 4153$, $S^* = 1257$. Notar que o volume corresponde ao uma gota de raio $b^* = (3V^*/4\pi)^{\frac{1}{3}} \simeq 10\,a$. Isto é, a gota que cai de nossa agulha de 0.1 mm é 10 vezes maior que o orifício de saida (raio 1 mm).

- Criamos um pequeno código que percorre valores de $A$ em sequência desde 0.21 até 2 (`graficogota3.m`):

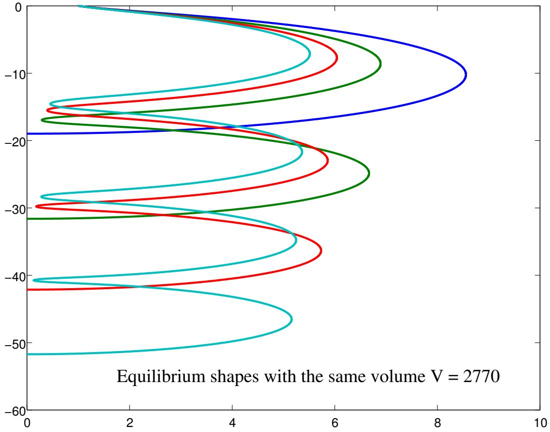
```
global A, global B, global epsr
B=1.36e-03;epsr=1.0e-06;
kk=[];zz=[];
for A=[0.21:0.005:2]
 k0=0;zz0=[];
  [z0 tz0 k0 zz0]=rk4st("fsurf",[0;0;0;0;0],...
                           0,0.005/A,30000);
 kk=[kk k0]; zz=[zz zz0];
endfor
```

- Desenhamos

```
hh=loglog(zz(4,:).^(1/3),zz(2,:),zz(9,:).^(1/3),zz(7,:))
set(hh,"linewidth",2)
axis([1e-1 30 3e-1 1e2])
```




Formas (eixos $V^{\frac{1}{3}} - d$) para $0.21 \leq A \leq 2$. Cada cor é uma interseção diferente (azul: 1ra, verde: 2da, vermelho: 3ra, etc). Em traço o que corresponde a um casquete esférico ($V = \pi * d * (3 + d^2)/6$).




Várias formas (com 2, 4, 6 e 8 interseções) com $V = 2V^*/3 \simeq 2770$. Os valores correspondentes de $A$ são 0.238, 0.303, 0.351 e 0.390. Construido com `graficogota4.m`.

# Conclusões dessa primeira parte

- Em equilíbrio estático, uma interface com tensão superficial satisfaz a equação

$$\kappa(\vec{x}) = \frac{\Delta p(\vec{x})}{\gamma},$$

onde $\kappa$ é a curvatura média.

- Essa equação de aparência inocente comporta uma **grande complexidade**. No caso mais simples, em que a superfície é apenas uma curva em 2D (e.g., axissimétrico), as incógnitas são $r(s) - z(s)$ e suas equações resultam fortemente não lineares e com domínio $(0, L)$ a priori desconhecido, com condições de contorno tanto em $s = 0$ quanto em $s = L$.

- Pela simplicidade do problema em 2D, e apoiados nos resultados numéricos, foi possível entender o desprendimento de uma gota crescendo quase-estaticamente como uma **catástrofe matemática**. Existe um volume $V^*$ tal que para qualquer $V > V^*$ não há solução $\mathcal{S}(V)$ "próxima" de $\mathcal{S}(V^*)$.
- $V^*$ (adimensionalizado por $a^3$) é função de $B = \rho\, g\, a^2/\gamma$.
- A **lei de Tate** estabelece $V^* B/(2\pi a^3) = \Psi(a/(V^*)^{1/3}) \simeq 1$.
- No caso estudado ($B = 1.36 \times 10^{-3}$, $V^* = 4153$) obtivemos $\Psi = 0.899$, sendo que $a/(V^*)^{1/3} = 0.062$. O acordo com dados experimentais é bastante bom (slide seguinte).

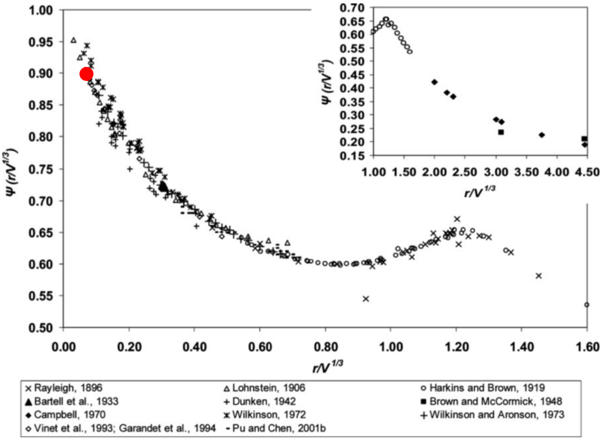



**Figure 4.** Drop weight correction factors, $\Psi(r/V^{1/3})$. Note: the data of Lohnstein (1906) were collected from Vacek and Nekovar (1973). The data of Rayleigh (1896) were collected from Harkins and Brown (1919). The data of Dunken (1942) were collected from Vacek and Nekovar (1973) and Wilkinson and Aronson (1973).

Tomado de Lee et al, Chem. Eng. Comm., 2008.