

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

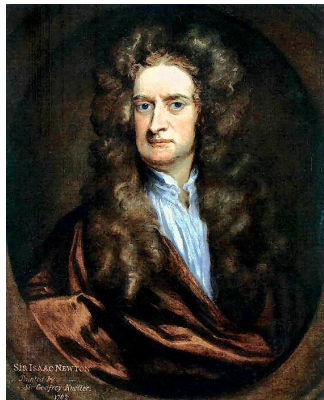
- A Mecânica dos Fluidos é a ciência que estuda o comportamento dos fluidos.
- Este estudo é feito de três formas:
 - **Experimental:** Fenômenos físicos estudados em ambientes controlados.
 - **Teórico:** Obtenção de soluções simplificadas às equações de modelo.
 - **Numérico:** Utilizar o auxílio do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

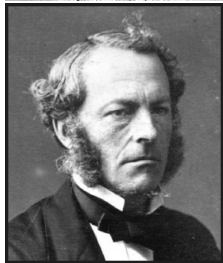


- **Isaac Newton** (1643-1727): Muitas contribuições à mecânica dos fluidos
- Sua segunda lei: $F = m \cdot a$
- Viscosidade: A tensão é proporcional à taxa de deformação.

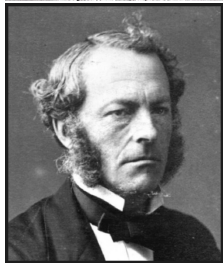


- **Daniel Bernoulli** (1700-1782): Equação de Bernoulli.
- **Leonhard Euler** (1707-1783): Equações de Euler para escoamento invíscido, conservação de quantidade de movimento, conservação de massa, potencial de velocidade.

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

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = \\ - \nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla u + \nabla u^T)] + \rho g \\ \nabla \cdot u = 0\end{aligned}$$

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.

- 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.

- 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**

- 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

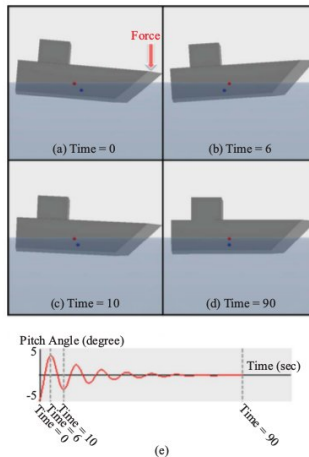


Fig. 10. (a)-(d) Snapshots of the pitch motion of a ship, (e) the magnitude of the pitch motion at each time step.

1

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

Exemplos

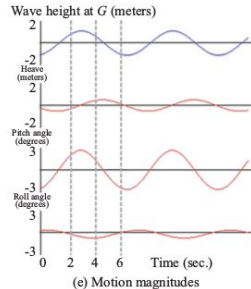
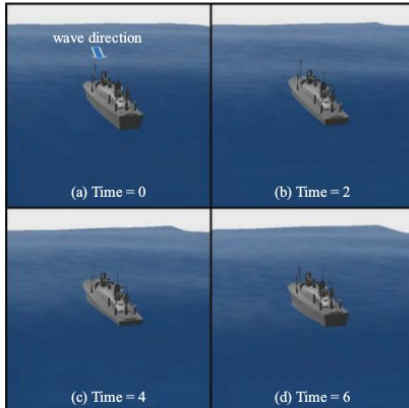
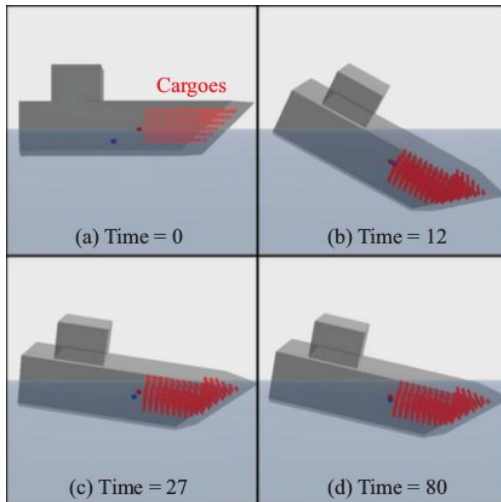


Fig. 11. (a)-(d) Snapshots of the wave-induced motions, (e) the wave height at G and the magnitudes motion at each time step.

Exemplos



■ Estruturas



*Fig. 4 Nordhordland Floating Bridge,
Norway*



*Fig. 5 West India Quay Footbridge,
United Kingdom*

2

²Watanabe 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



*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

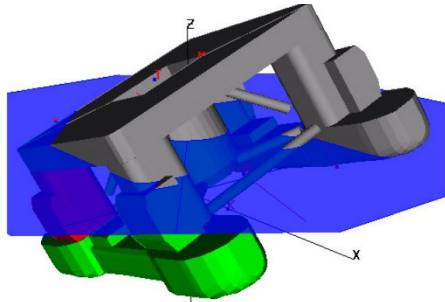


Figure 26- Sstab evaluation of flooding using measured drafts.

3

Como flutuam os corpos?

■ Equilíbrio dinâmico entre:

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

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

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.

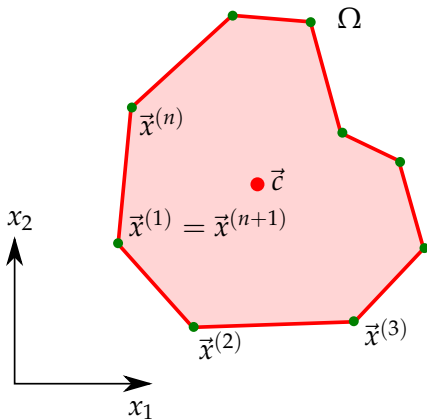
Descrição geométrica do corpo

- 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 símlice M por uma transformação $\vec{\phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^d$.

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

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

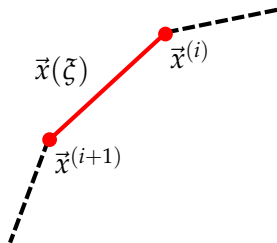
Representação linear por partes em 2D



Lista de pontos:

$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$
$x_1^{(2)}$	$x_2^{(2)}$
$\vdots$	$\vdots$
$x_1^{(n)}$	$x_2^{(n)}$
$x_1^{(n+1)}$	$x_2^{(n+1)}$

Representação linear por partes em 2D

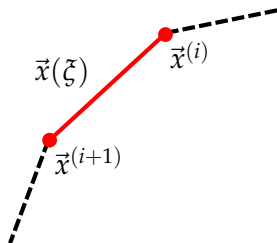


$$\vec{x}(\xi) = \vec{\varphi}_{K=i}(\xi) = \frac{1-\xi}{2} \vec{x}^{(i)} + \frac{1+\xi}{2} \vec{x}^{(i+1)},$$

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

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):

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

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 $M = [-1, 1]$.

- Dados três pontos arbitrários em 3D, com coordenadas $\vec{x}^{(1)}$, $\vec{x}^{(2)}$ e $\vec{x}^{(3)}$, determinar uma transformação $\vec{\varphi} : M \rightarrow \mathbb{R}^3$ 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?

Integração em $\mathcal{S}$, caso 1D

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

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

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:

$N = 2$	$N = 3$
$\xi_1 = -1/\sqrt{3} \quad A_1 = 1$	$\xi_1 = -\sqrt{3/5} \quad A_1 = 5/9$
$\xi_2 = 1/\sqrt{3} \quad A_2 = 1$	$\xi_2 = 0 \quad A_2 = 8/9$
	$\xi_3 = \sqrt{3/5} \quad A_3 = 5/9$

Integração em $\mathcal{S}$, numérica

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

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

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

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

Indeed, if the geometrical interpolation is $\mathbb{P}_1$, then for each K we have that $\vec{x}(\zeta)$ is $\mathbb{P}_1$ while $\vec{n}$ and $ds/d\zeta$ are constant in each segment (in fact, $ds/d\zeta = \ell_K/2$).

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

$$\begin{aligned}
 \vec{c} &= \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \oint_{\partial\Omega} (\vec{x} \cdot \vec{n}) x_1 ds \\ \oint_{\partial\Omega} (\vec{x} \cdot \vec{n}) x_2 ds \end{bmatrix} \\
 &= \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \int_{-1}^1 (\vec{x}(\xi) \cdot \vec{n}^{(i)}) x_1(\xi) \frac{\ell_i}{2} d\xi \\ \sum_{i=1}^n \int_{-1}^1 (\vec{x}(\xi) \cdot \vec{n}^{(i)}) x_2(\xi) \frac{\ell_i}{2} d\xi \end{bmatrix} \\
 &= \frac{1}{3V} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^N A_k \vec{x}_k \cdot \vec{n}^{(i)} x_{1k} \frac{\ell_i}{2} \\ \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^N A_k \vec{x}_k \cdot \vec{n}^{(i)} x_{2k} \frac{\ell_i}{2} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Cálculo do empuxo hidrostático

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

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

A força total é obtida por integração em S ,

$$\vec{F}_p = \int_S -p \vec{n} dS.$$

- 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 livre do fluido num instante t como sendo

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

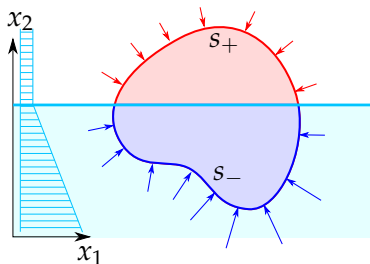
a aproximação de pressão hidrostática é

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

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

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

Caso estático



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

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

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \vec{F}_A + \vec{F}_L = -p_{atm} \int_{S_+} \vec{n} \, ds - p_{atm} \int_{S_-} \vec{n} \, ds - \rho_L g \int_{S_-} (z - x_2) \vec{n} \, ds \\ &= -p_{atm} \oint_{S_+ \cup S_-} \vec{n} \, ds - \rho_L g \int_{S_-} (z - x_2) \vec{n} \, ds \end{aligned}$$

A red arrow points from the term $-p_{atm} \oint_{S_+ \cup S_-} \vec{n} \, ds$ to a red '0', indicating that this term is zero due to the divergence theorem applied to a closed surface in a constant pressure field.

- 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.

- 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 $i = 1, \dots, N$. 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

$N=3$; $\mathbf{x}_i = [-\sqrt{3/5}, 0, \sqrt{3/5}]$; $\mathbf{A} = [5/9, 8/9, 5/9]$;

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

$\mathbf{pint} = [(1-x_i)/2; (1+x_i)/2]$;

- Imagens dos pontos de quadratura no segmento ("patch") i

for $k=1:N$

$\mathbf{x}(1,k) = \mathbf{pint}(1,k) * \mathbf{coor}(i,1) + \mathbf{pint}(2,k) * \mathbf{coor}(i+1,1)$;

$\mathbf{x}(2,k) = \mathbf{pint}(1,k) * \mathbf{coor}(i,2) + \mathbf{pint}(2,k) * \mathbf{coor}(i+1,2)$;

endfor

- Os Jacobianos e vetores normais:

$\mathbf{d} = [\mathbf{coor}(2:n+1,:) - \mathbf{coor}(1:n,:)]$; $ll = \text{norm}(\mathbf{d}, "rows")$; $\mathbf{jac} = ll/2$;

$\mathbf{normal} = [\mathbf{d}(:,2) ./ ll, -\mathbf{d}(:,1) ./ ll]$

■ 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
```

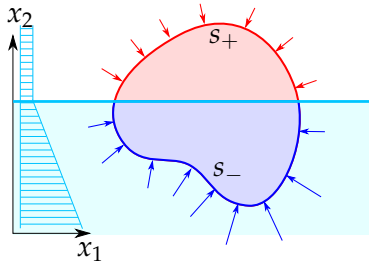
■ Integral de $\frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{n}$ (=volume):

```
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
```

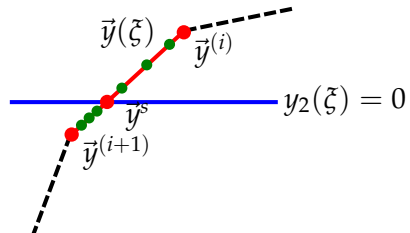
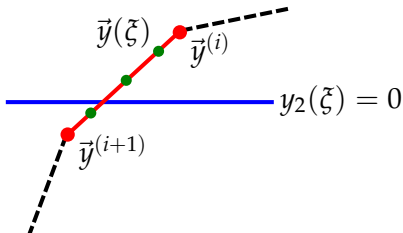
■ Empuxo:

```
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
```

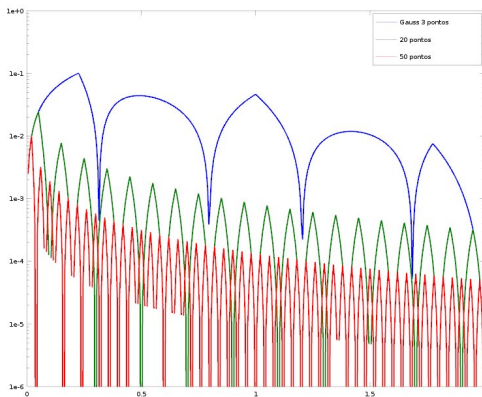
Erros de integração



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



- Consideremos o quadrilátero definido 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.

$$\vec{T}_P = \int_S (\vec{x} - \vec{c}) \times (-p(\vec{x}) \vec{n}) dS$$

- 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 $I \omega'(t) = T$.

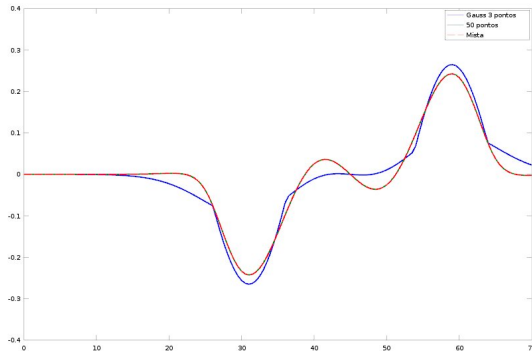
■ Torque:

```
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

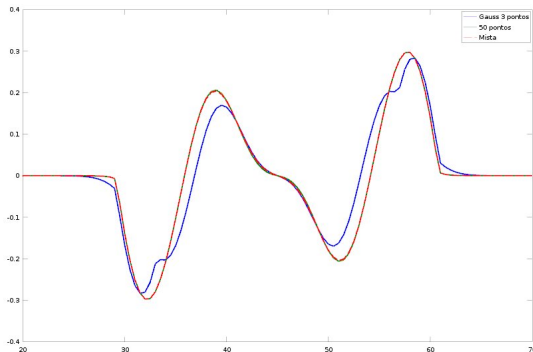
- Consideremos o quadrilátero definido pelos pontos $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,2)$ e $(0,2)$. Calculamos o torque respeito de $\vec{c}$ quando passa a onda

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



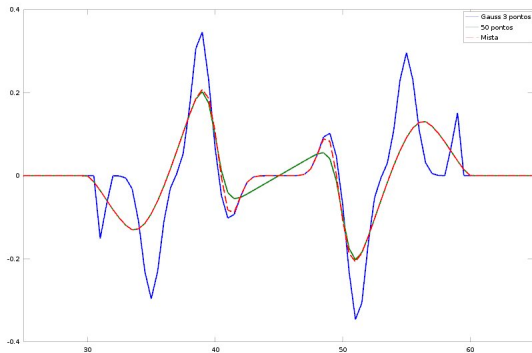
Onda mais ingreme,

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



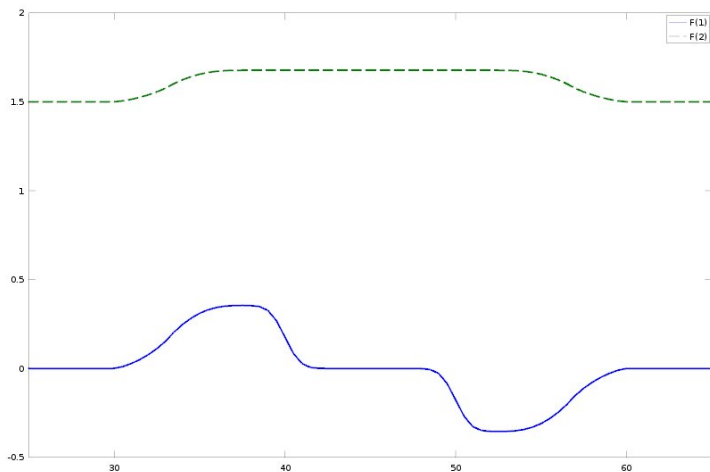
Onda ainda mais ingreme,

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



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)

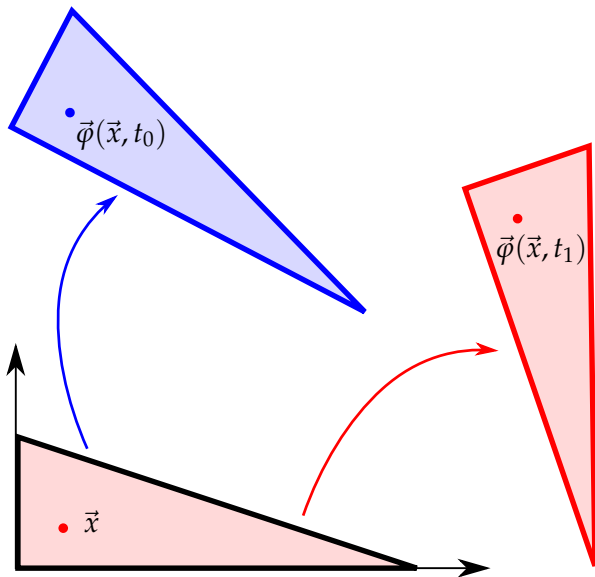
Um corpo Ω é dito rígido se, quando submetido a um movimento, as distâncias entre seus pontos não variam.

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

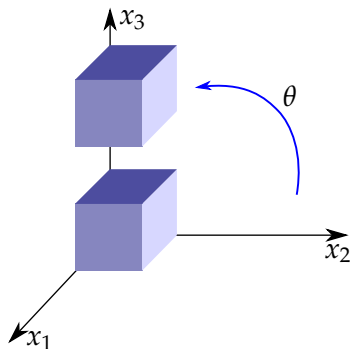
$$\vec{\varphi} : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$$
$$\vec{x} \mapsto \vec{\varphi}(\vec{x}, t)$$

onde $\vec{x}$ é tomado em uma configuração de referência de Ω 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.

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

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

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

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

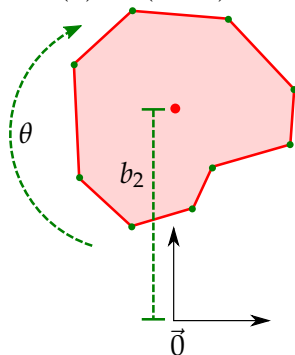
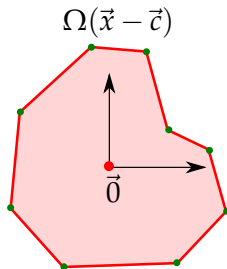
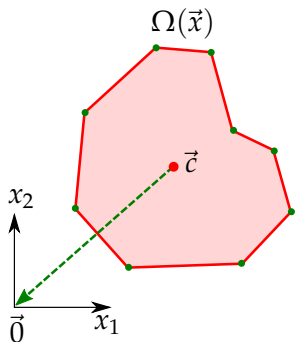
Definição (Movimento rígido)

São transformações da forma

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

Movimentos rígidos

$$\vec{\varphi}(\theta, b_2) = Q(\theta) \cdot \Omega(\vec{x} - \vec{c}) + \vec{b}$$



Transformação rígida que rota o corpo um ângulo θ 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.

Projeto: Parte I - Estática

Consideramos um corpo bidimensional homogêneo cuja geometria é dada por um vetor de coordenadas $\text{coor0}(n, 2)$ e cuja densidade é ρ (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 ρ , construa um gráfico do torque T como função do ângulo θ . A posição vertical para cada ângulo deve ser tal que o empuxo equilibre ao peso.
- 2 Identifique assim as posições de equilíbrio para cada ρ e analise sua estabilidade.

Dinâmica de uma partícula pontual

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

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 $F = ma$.

Várias partículas

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

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

- Força total, momento linear total:

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

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

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

Centro de massa

■ Massa total: $M = \sum_k m_k$.

■ Centro de massa:

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

■ Então,

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

o centro de massa se comporta como uma partícula pontual.

Momento angular de várias partículas

- Momento angular total, torque total:

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

- Conservação do momento angular:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{L}}{dt} &= \sum_k \frac{d\vec{L}^k}{dt} = \sum_k \vec{x}^k \times \left(\vec{F}_e^k + \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \rightarrow k} \right) = \\ &= \sum_k \vec{x}^k \times \vec{F}_e^k + \underbrace{\sum_k \left(\vec{x}^k \times \sum_{j \neq k} \vec{F}^{j \rightarrow k} \right)}_{=0!} = \vec{T} \end{aligned}$$

- 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:

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

■ 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 β 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 β e γ para que o sistema seja levemente amortecido.
- 2 Calculamos resposta a uma onda cuja frequência seja menor/parecida/menor 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,

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

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

- 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 θ 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, $Q(qp) = Q(q)Q(p)$.

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

$$Q(q) = \begin{pmatrix} 1 - 2v_2^2 - 2v_3^2 & 2v_1v_2 - 2sv_3 & 2v_1v_3 + 2sv_2 \\ 2v_1v_2 + 2sv_3 & 1 - 2v_1^2 - 2v_3^2 & 2v_2v_3 - 2sv_1 \\ 2v_1v_3 - 2sv_2 & 2v_2v_3 + 2sv_1 & 1 - 2v_1^2 - 2v_2^2 \end{pmatrix}$$

- 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

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

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 $\Rightarrow \boxed{\frac{dy}{dt}(t) = f(t, y(t))}$ onde

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

(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 $y^0, y^1, \dots$, que aproximam sistematicamente $Y(0), Y(t_1), Y(t_2), \dots$, para uma sequência de tempos $t_1, t_2, \dots$.
- **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

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

onde

$$k_1 = f(t_n, y^n)$$

$$k_2 = f(t_n + c_2 \Delta t, y^n + \Delta t (a_{21} k_1))$$

$$k_3 = f(t_n + c_3 \Delta t, y^n + \Delta t (a_{31} k_1 + a_{32} k_2))$$

...

0					
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
...		...			
		b_1	b_2	...	b_s

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

onde

$$k_1 = f(t_n, y^n)$$

$$k_2 = f(t_n + c_2 \Delta t, y^n + \Delta t (a_{21} k_1))$$

$$k_3 = f(t_n + c_3 \Delta t, y^n + \Delta t (a_{31} k_1 + a_{32} k_2))$$

$$\dots \quad \dots$$

```
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

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t \left(\frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2 \right)$$

$$k_1 = f(t_n, y^n)$$

$$k_2 = f(t_n + \Delta t, y^n + \Delta t k_1)$$

Tabela de Butcher

0	0	0
1	1	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

```
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.;
```

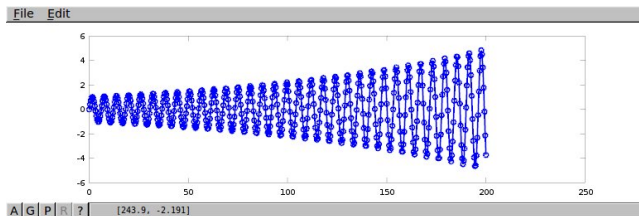
```
    f(1)=y(2);
```

```
    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:

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
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$

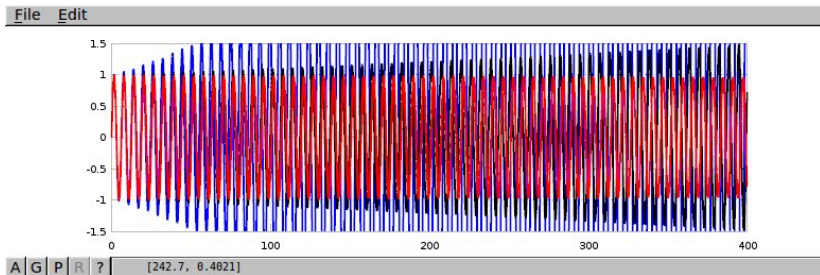
■ Mesmo código do slide anterior, com

```
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];
```

Comparação

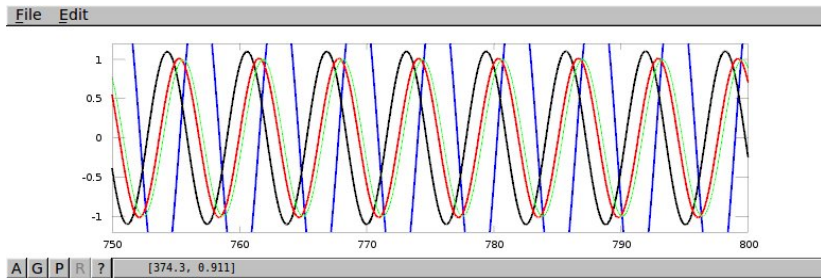
Comparamos RK2 com $\Delta t = 0.4$ e 0.2 , e RK4 com $\Delta t = 0.4$.

```
>[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])
```



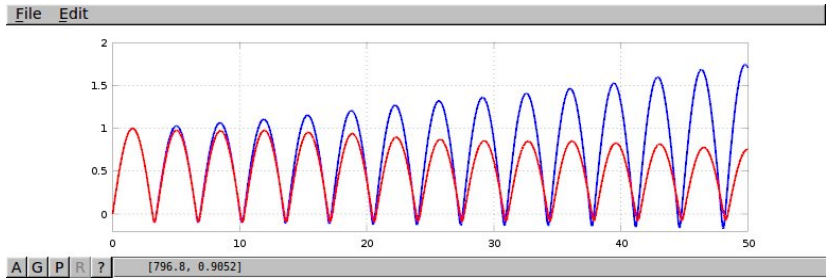
Qual é o Δt tal que a $t = 800$ a amplitude continua sendo $\simeq 1$ com RK2?

```
>[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])
```

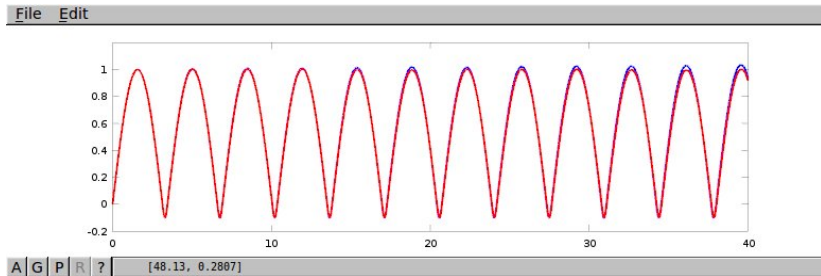


Massa-mola com parede

```
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 Δt e voltar a 1.
- Predizer um Δt adequado para próximos passos. Vamos supor que o esquema de menor ordem é de ordem p , o “passo ideal” Δt_* daria erro igual a tolerância.

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

$$\Delta t \leftarrow \max(0.5\Delta t, \min(2\Delta t, 0.9\Delta t_*))$$

Embedded Runge-Kutta methods (ERKM)

- Para ajustar automaticamente Δt 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

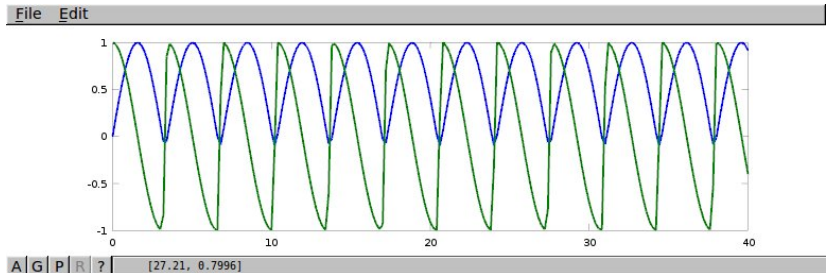
0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	0	0	0	0	0	0
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$	0	0	0	0	0
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$	0	0	0	0
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{5360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$	0	0	0
1	$\frac{9017}{3168}$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

Há 2 vetores b , o primeiro é de ordem 4, o segundo de ordem 5.

Utilizando lsode (Octave)

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

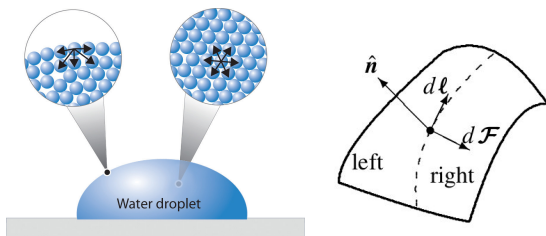
```
T=[0:0.2:40];  
[X, istate, MSG]=lsode("foscilw",[0 1],T);  
plot(T,X,"linewidth",2)
```



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*

$$\vec{dF} = \gamma \vec{d\ell} \times \vec{n} = \gamma d\ell \vec{v}$$

- A força de tensão superficial é equilibrada pelas forças dos fluidos adjacentes. O resultado é equivalente a uma força (por unidade de área) valendo $\gamma \kappa \mathbf{n}$.
- 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)

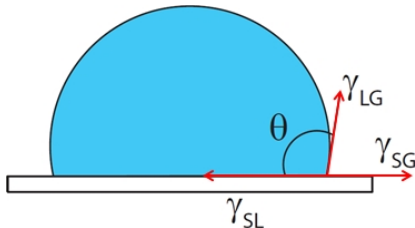
$$E = \int_{\mathcal{S}} \gamma d\mathcal{S} + \int_{\Omega} \rho g z d\Omega$$

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

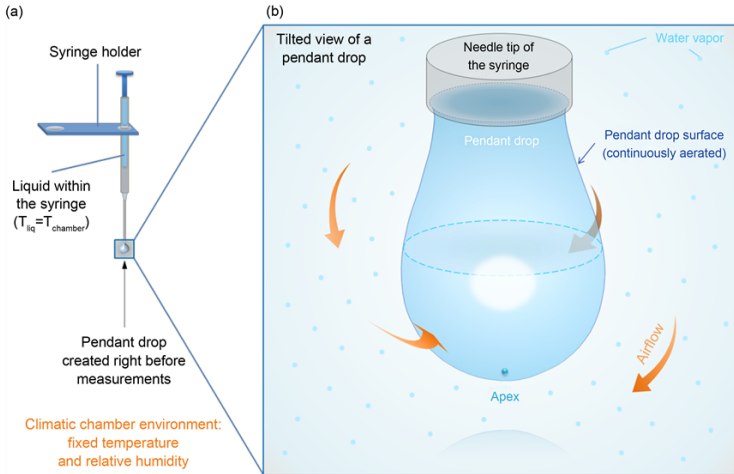
$$\cos(\theta) = \frac{\gamma_{SL} - \gamma_{SG}}{\gamma}$$

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

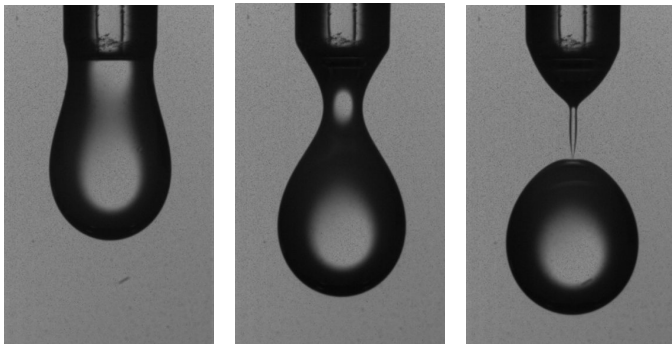
$$E = \int_{S_{LG}} \gamma dS + \int_{S_{SG}} \gamma_{SG} dS + \int_{S_{SL}} \gamma_{SL} dS + \int_{\Omega} \rho g z d\Omega$$



Problema a estudar



Tomado de Portuguez et al (2017)



Tomado de B. Lautrup (2010)

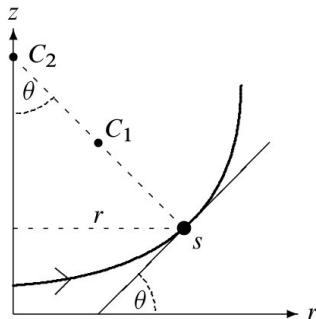
Primeira parte: Equações diferenciais da superfície

- 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

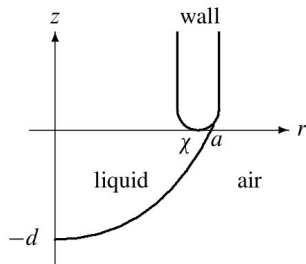
$$\kappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} = \frac{d\theta}{ds} + \frac{\sin \theta}{r}$$



Tomado de B. Lautrup (2010)

Cálculo de Δp e condições de contorno

- Não conhecemos o valor de d , mas **mesmo conhecendo**, isto não seria suficiente para calcular p_{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 χ 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:

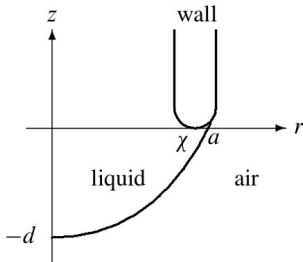
- 1 $r(0) = z(0) = \theta(0) = 0$
- 2 $\exists L > 0$ tal que $r(L) = a$.
- 3 Para $0 < s < L$,

$$r'(s) = \cos \theta(s)$$

$$z'(s) = \sin \theta(s)$$

$$\theta'(s) = \frac{p_0 - \rho g z(s)}{\gamma} - \frac{\sin \theta(s)}{r(s)}$$

Dados: a, p_0, ρ, g, γ .



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 χ 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 raio 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 água a 20°C , com a igual a 0.1 mm e 1 mm.

- Usamos a como escala de comprimento: Definimos

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

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

- 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 chapéus.

O número B

■ $B = \rho g a^2 / \gamma.$

■ Água a 20°C: $\rho = 998 \text{ kg/m}^3, \gamma = 0.072 \text{ N/m}.$

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

■ Mercúrio: $\rho = 13456 \text{ kg/m}^3, \gamma = 0.337 \text{ N/m}.$

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

O termo $\sin \theta / r$

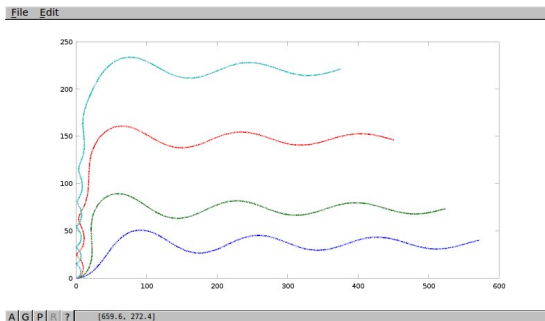
- Não está definido para $r = 0$ (corresponde a $s = 0$).
- $\lim_{s \rightarrow 0} \sin \theta(s) / r(s) = \lim_{s \rightarrow 0} (\theta' \cos \theta) / r' = \theta'(0)$
- Substituindo na equação de θ'

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

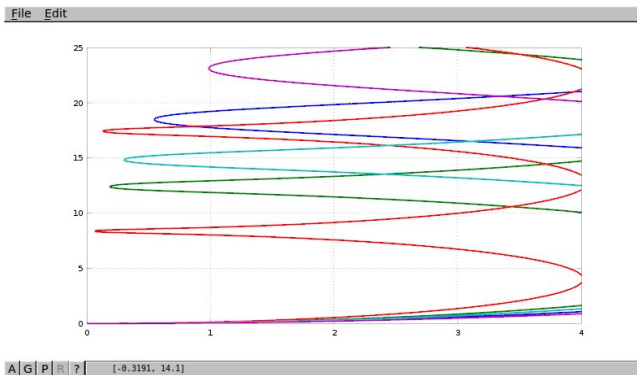
```
function f = fsurf(y,t)
global A, global B, global epsr
f(1)=cos(y(3));
f(2)=sin(y(3));
if (y(1)>epsr)
    f(3)=A-B*y(2)-sin(y(3))/y(1);
else
    f(3)=(A-B*y(2))/2;
end
```

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

```
>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)
```



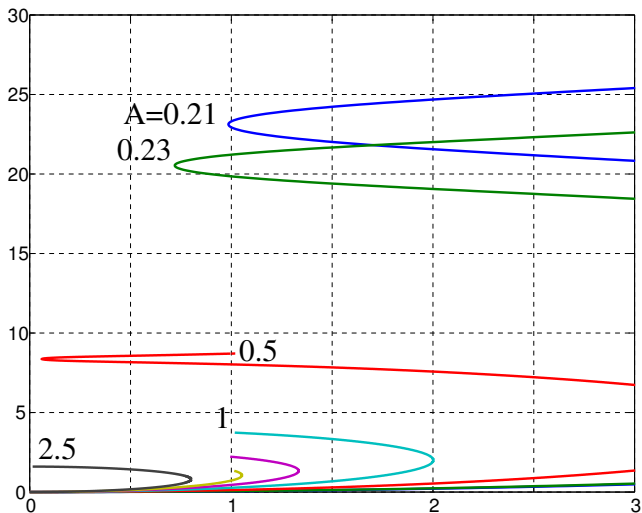
Formas para $A = 0.05, 0.1, 0.2$ e 0.3



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 **decrecente** 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
```

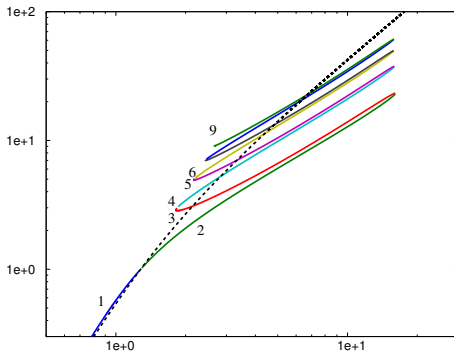
- Rodamos o código com $A = A^* = 0.21$, obtendo $z^* = 22.9$, $V^* = 4153$, $S^* = 1257$. Notar que o volume corresponde ao uma gota de raio $b^* = (3V^*/4\pi)^{1/3} \simeq 10a$. Isto é, a gota que cai de nossa agulha de 0.1 mm é 10 vezes maior que o orifício de saída (raio 1 mm).

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

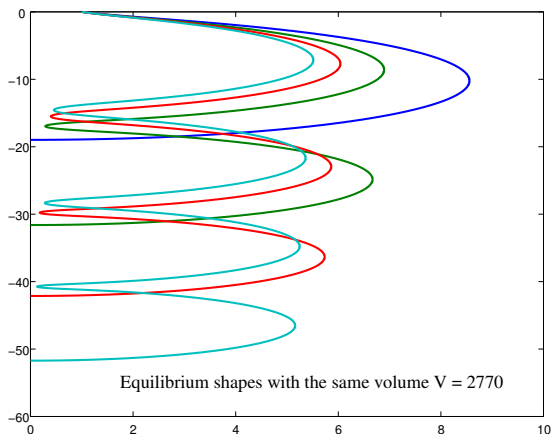
```
global A, global B, global epsr
B=1.36e-03;epsr=1.0e-06;
kk=[];zz=[];
for A=[0.21:0.005:2]
    k0=0;zz0=[];
    [z0 tz0 k0 zz0]=rk4st("fsurf",[0;0;0;0;0],...
                          0,0.005/A,30000);
    kk=[kk k0]; zz=[zz zz0];
endfor
```

■ 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 $V^{1/3} - d$) 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. Construído 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 κ 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).

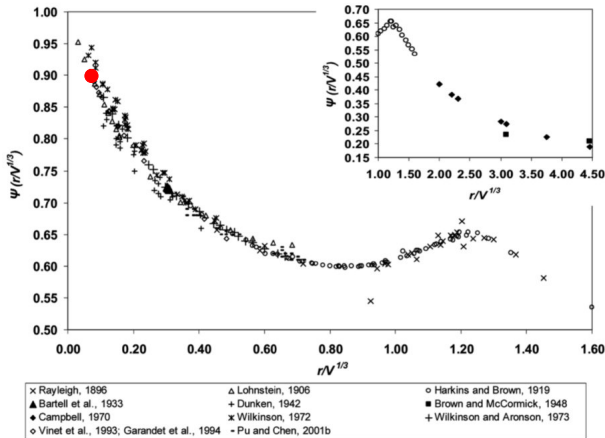


Figure 4. Drop weight correction factors, $\Psi(r/V^{1/3})$. Note: the data of Lohnstein (1906) were collected from Vacek and Nekovar (1973). The data of Rayleigh (1896) were collected from Harkins and Brown (1919). The data of Dunken (1942) were collected from Vacek and Nekovar (1973) and Wilkinson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

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

Segunda parte: Enfoque variacional

- O enfoque “Equação Diferencial” não é aplicável no caso 3D. Não existe “método do tiro” em 2D.
- Não permite, por exemplo, calcular gotas pendentes de orifícios não circulares. Ou considerar qualquer outro fenômeno que quebre a simetria de revolução em torno de z (por exemplo, gravidade inclinada respecto de z).
- Nessa parte nos propomos resolver o mesmo problema, mas com um enfoque variacional, extensível ao caso 3D.
- **Segunda parte do projeto:** Calcular as gotas da primeira parte (com volumes $V^*/3$, $2V^*/3$ e V^* pelo método variacional e comparar.

Enfoque variacional

- Selecionar um **conjunto admissível de formas** W_n , de dimensão finita n , tal que
 - toda forma admissível tenha energia finita,
 - a energia seja uma função contínua em W_n , e
 - para cada forma exata possível, exista uma forma do conjunto admissível que a aproxime razoavelmente.
- A **aproximação numérica** S_n da forma exata S se **define** como o elemento $S_n \in W_n$ **que minimiza a energia sobre** W_n (a minimização pode ser local ou global, e como veremos podem ser incorporadas restrições).

Primeiro passo: Parametrização

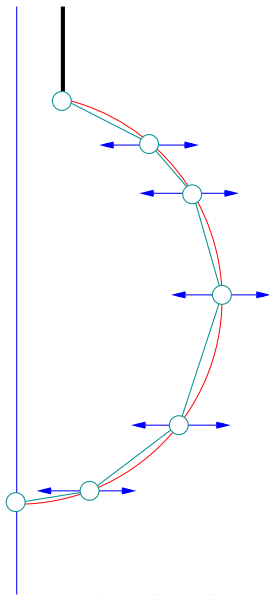
Como poderíamos gerar um conjunto de “formas de gotas” que estejam definidas por um **conjunto finito de graus de liberdade** (i.e., de números)?

Em outras palavras... **como podemos parametrizar um conjunto de formas útil para modelar a gota?**

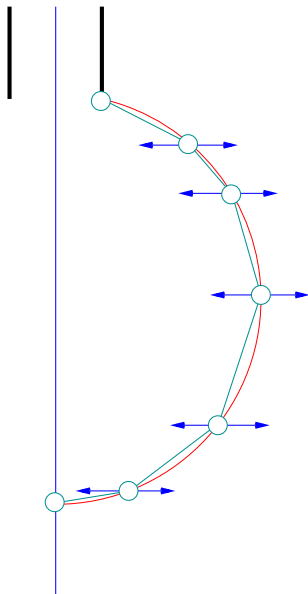
Exercício: Quais as vantagens e desvantagens da seguinte proposta?

- Se da uma forma inicial (e.g., esférica), discretizada com $n + 2$ pontos.
- Se fixa $r_0 = 1, z_0 = 0$.
- Se fixa $r_{n+1} = 0$.
- Congelando o valor de z de cada ponto, o grau de liberdade é **a sua coordenada r** .
- A forma, e por tanto a energia, o volume, a área superficial, etc., são assim funções das variáveis $r_1, \dots, r_n$.
- **Problema final: (Clássico de otimização)**

$$\underline{r}^* = \arg \min_{\underline{r} > 0} E(\underline{r})$$



- A parametrização está limitada a formas que são gráficos $r = r(z)$.
- A discretização fixa Δz e não Δs . As partes da superfície mais paralelas a $\hat{r}$ ficam pouco discretizadas.
- Apenas aproxima superfícies altura ($z(r=0)$) igual à da forma inicial.
- Não permitiria aproximar, por exemplo, o processo de crescimento de uma gota pendente.

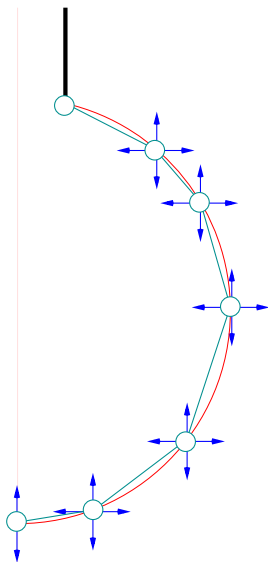


Exercício: Quais as vantagens e desvantagens da seguinte proposta?

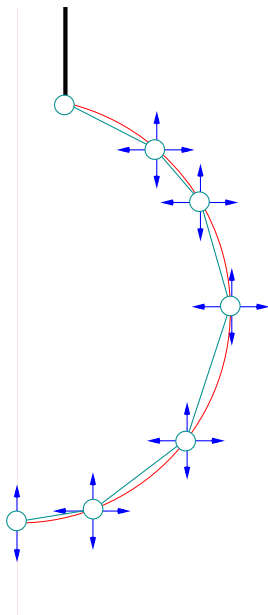
- Se da uma forma inicial (e.g., esférica), discretizada com $n + 2$ pontos.
- Se fixa $r_0 = 1, z_0 = 0$.
- Se fixa $r_{n+1} = 0$.
- Com apenas essa exceção, os graus de liberdade são **as coordenadas r e z de cada ponto de discretização**.
- A forma, e por tanto a energia, o volume, a área superficial, etc., são assim funções das variáveis $y_1 = r_1, \dots, y_n = r_n, y_{n+1} = z_1, \dots, y_{2n+1} = z_{n+1}$.
- **Problema final:** (Clássico de otimização)

$$\underline{y}^* = \arg \min_{\underline{y}} E(\underline{y})$$

Parametrização B



- Essa parameterização é bastante utilizada. Se estende facilmente a 3D: triangulações da superfície.
- Outras interpolações são possíveis, com ou sem malha (splines, RBF, etc.).
- Note: Uma forma é apenas mudada por deslocamentos **normais** de seus pontos. Deslocamentos **tangenciais** são irrelevantes. Isto se manifesta num mal condicionamento do problema de otimização discreto.
- Métodos para manter a qualidade da distribuição dos pontos são necessários em geral.

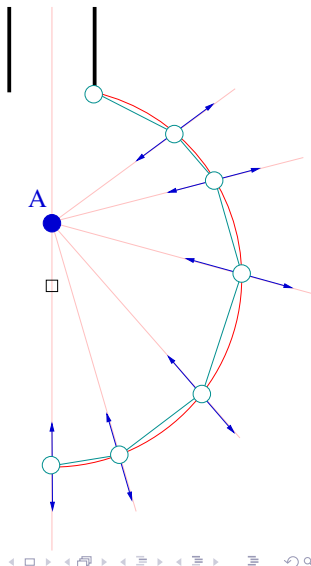


Exercício: Quais as vantagens e desvantagens da seguinte proposta?

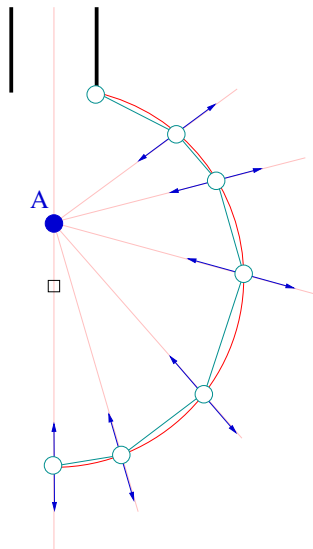
- Se da uma forma inicial (e.g., esférica), discretizada com $n + 1$ pontos.
- Se fixa o contorno, $r_0 = 1, z_0 = 0$.
- Se escolhe uma direção de movimento para cada nó, por exemplo a que o une com um ponto arbitrário A .
- Os graus de liberdade $\underline{y}$ são o **deslocamento de cada ponto na direção permitida**.
- A forma, e por tanto a energia, o volume, a área superficial, etc., são assim funções das variáveis $y_1, \dots, y_n$.
- **Problema final:** (Clássico de otimização)

$$\underline{y}^* = \arg \min_{\underline{y}} E(\underline{y})$$

Parametrização C Spines

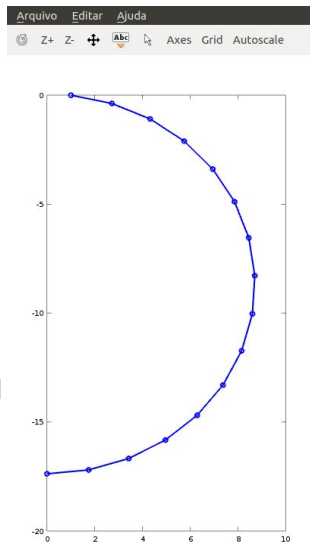


- A parametrização A é um caso particular de Spines (horizontais).
- A parametrização falha quando a superfície fica paralela à espinha.
- Permite aproximar o processo de crescimento de uma gota, com melhor condicionamento que a parametrização B por não conter movimentos quase-tangenciais.



Geração dos pontos iniciais

```
vol0=2770; n=15;  
R0=(3*vol0/4/pi)^(1/3);  
D0=sqrt(R0*R0-1); th0=asin(1/R0);  
dth=(pi-th0)/n;  
  
coor0=[1 0];  
for i=1:n  
    the=th0+i*dth;  
    coor0=[coor0; [R0*sin(the), -D0+R0*cos(the)]]  
endfor  
  
hh=plot(coor0(:,1),coor0(:,2),"-o");  
set(hh,"linewidth",2);
```



Parametrização

Para cada y fornece as coordenadas nodais $\underline{x}(y)$.

```
y=2*[0;rand(15,1)-0.5]; yd=diag(y);
```

```
AA=[0 -D0/2];
```

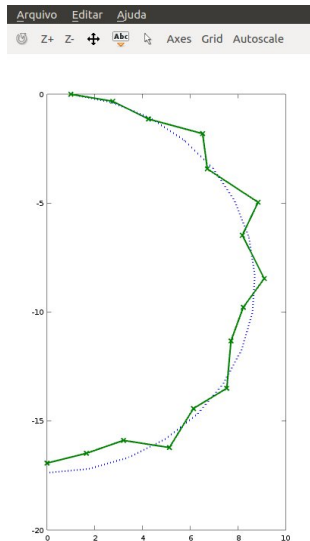
```
for i=1:n+1
```

```
    vec0(i,:)=(coor0(i,:)-AA)/...  
                norm(coor0(i,:)-AA);
```

```
endfor
```

```
coor=coor0+yd*vec0;
```

```
hh=plot(coor0(:,1),coor0(:,2),...  
        coor(:,1),coor(:,2),"-x");  
set(hh,"linewidth",2);
```



Segundo passo: Função energia

■ Energia potencial

$$\begin{aligned} E_p &= \int_{\Omega} \rho g z \, d\Omega = \int_{\Omega} \operatorname{div} \left(0, 0, \frac{\rho g z^2}{2} \right) \, d\Omega = \\ &= \int_S \frac{\rho g z^2}{2} n_z \, dS = \int_C \frac{\rho g z^2}{2} n_z 2\pi r \, ds = \pi \rho g \int_C z^2 r n_z \, ds \end{aligned}$$

■ Energia superficial

$$E_s = \int_S \gamma \, dS = 2\pi \gamma \int_C r \, ds$$

Adimensionalização:

$$\begin{aligned} E &= \pi \rho g \int_C z^2 r n_z ds + 2\pi \gamma \int_C r ds \\ &= \pi \rho g a^4 \int_{\hat{C}} \hat{z}^2 \hat{r} n_z d\hat{s} + 2\pi \gamma a^2 \int_{\hat{C}} \hat{r} d\hat{s} \end{aligned}$$

As integrais são adimensionais, então os fatores tem unidades de energia. Definimos

$$\hat{E} = \frac{E}{\pi a^2 \gamma}.$$

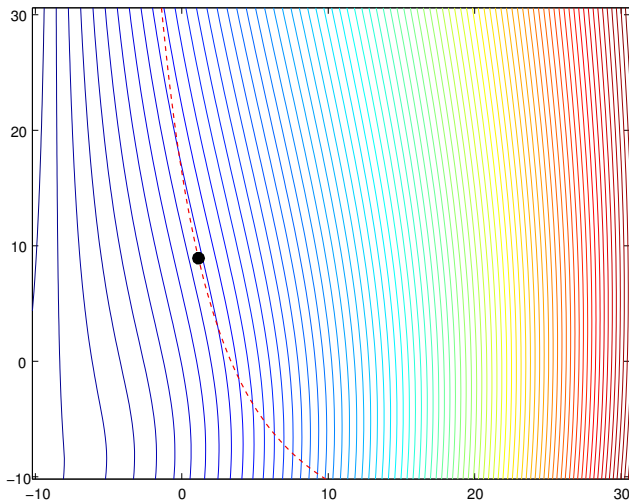
Assim,

$$\hat{E} = B \int_{\hat{C}} \hat{z}^2 \hat{r} n_z d\hat{s} + 2 \int_{\hat{C}} \hat{r} d\hat{s}$$

Agora podemos utilizar a integração numérica do Capítulo 1!

```
d=[coor(2:n+1,:)-coor(1:n,:)];l1=norm(d,"rows");jac=l1/2;
normal=-[d(:,2)./l1,-d(:,1)./l1]
N=3; xi=[-sqrt(3/5),0,sqrt(3/5)];A=[5/9,8/9,5/9];
energia=0; volume=0;
for i=1:n
    for k=1:N
        x=pint(1,k)*coor(i,:)'+pint(2,k)*coor(i+1,:);
        energia=energia+A(k)*(B*x(2)^2*x(1)*normal(i,2)+2*x(1))*jac(i);
        volume=volume+A(k)*2*pi/3*normal(i,1:2)*x*x(1)*jac(i);
    endfor
endfor
```

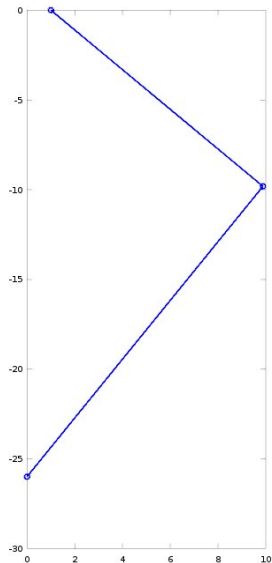
Dessa maneira construímos as funções `energy(coor)` e `volume(coor)`.



Gota pendente com 2 graus de liberdade: Contornos de energia no plano $y_1 - y_2$. Em traços vermelhos a linha de volume $V = 2770$. O mínimo é indicado por um ponto preto ($y_1 = 1.35, y_2 = 8.62$).

Apenas dois graus de liberdade:

```
>>[area Epot Esup rmax d]=calcula(coor)
area = 1041.1
Epot = -13.349
Esup = 331.39
rmax = 9.8831
d = 25.988
```



Terceiro passo: Otimização

■ Função objetivo: Energia E

```
function ee = fenergy(y)
global coor0, global vec0, global B
yd=diag(y);
coor=coor0+yd*vec0; ee=energy(coor);
```

■ Restrições: Volume: $V = V_0$; e fixar nodo 1: $y_1 = 0$.

```
function vv = frestr(y)
global coor0, global vec0, global vol0,
yd=diag(y);
coor=coor0+yd*vec0;
vv(1)=volume(coor)-vol0; vv(2)=y(1);
```

■ A função sqp (Sequential Quadratic Programming)

$[X, OBJ, INFO, ITER, NF, LAMBDA] = \text{sqp}(X0, PHI, G, H, LB, UB, \dots, \text{MAXITER}, \text{TOL})$

resolve

$$\min_x \varphi(x)$$

sujeito a

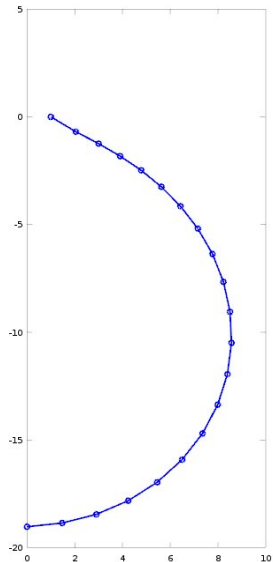
$$G(x) = 0, \quad H(x) \geq 0, \quad LB \leq x \leq UB$$

- Uso no problema proposto (ver dropvariat2.m)

```
##otimizacao
[yopt eopt info iter]=sqp(y0,@fenergy,@frestr,[],...
                        -15,100,200);
coor=coor0+diag(yopt)*vec0;
energy(coor)
eopt
volume(coor)
plot(coor(:,1),coor(:,2),"-o","linewidth",2)
```

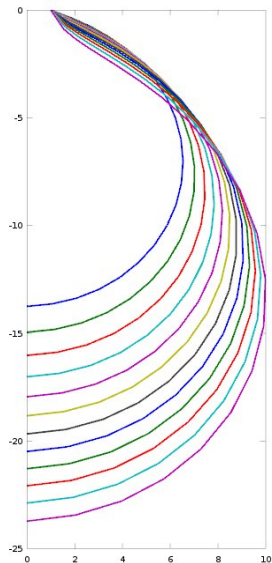
Mínimo com 20 graus de liberdade:

```
>>vol0=2770; y0=zeros(n+1,1);
>>[yopt eopt info iter]=sqp(y0,...
    @fenergy,@frestr,[],-15,100,200);
##coordenadas do otimo
>>coor=coor0+diag(yopt)*vec0;
>>energy(coor)
    ans = 291.76
>>eopt
    eopt = 291.76
>>volume(coor)
    ans = 2770.0
>>rmax=max(coor(1,:))
    rmax = 8.5647
>>d=-min(coor(:,2))
    d = 19.028
```



Crescimento quase-estático: dropvariat3.m

```
dvol=300;coru=[];yoptu=[];
for kk=1:12
    volu(kk)=900+kk*dvol;
    vol0=volu(kk);
    [yopt eopt info iter]=sqp...
    (y0,@fenergy,@frestr,[],-5,15,550);
    yoptu=[yoptu yopt];
    y0=yopt;
    coor=coor0+diag(yopt)*vec0;
    coru=[coru coor];
endfor
```

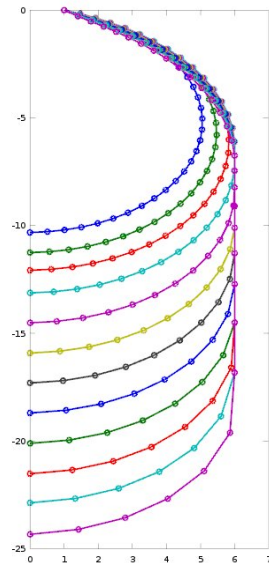


Com restrição de desigualdade:

$$r_i \leq 6, \quad \forall i$$

```
function vv = frestr2(y)
global coor0, global vec0,
yd=diag(y);
coor=coor0+yd*vec0;
vv(1)=6-max(coor(:,1));
end
```

```
[yopt eopt info iter]=sqp...
(y0,@fenergy,@frestr,@frestr2,-5,15,550);
```



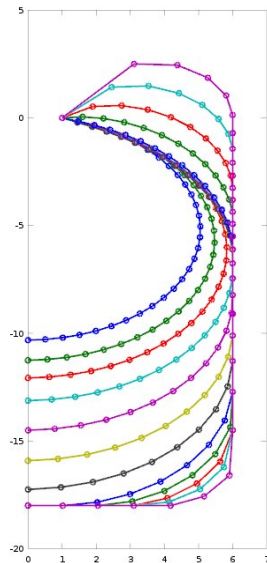
Mais restrições:

$$r_i \leq 6, \quad \forall i$$

$$z_i \geq -18, \quad \forall i$$

```
function vv = frestr2(y)
global coor0, global vec0,
yd=diag(y);
coor=coor0+yd*vec0;
vv(1)=6-max(coor(:,1));
vv(2)=min(coor(:,2))+18;
end

[yopt eopt info iter]=sqp...
(y0,@fenergy,@frestr,@frestr2,-5,15,550);
```



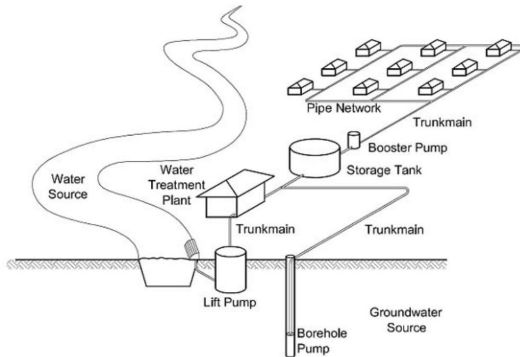
Conclusões da segunda parte

- O **enfoque variacional** permite calcular a forma da gota com bastante flexibilidade.
- A parametrização pelo **método das espinhas** evita o mal condicionamento do problema que acontece quando se deixam os nós totalmente livres.
- O método de **Sequential Quadratic Programming** (função sqp de Octave) permite determinar o mínimo do problema discreto resultante.

Cálculo numérico de redes hidráulicas

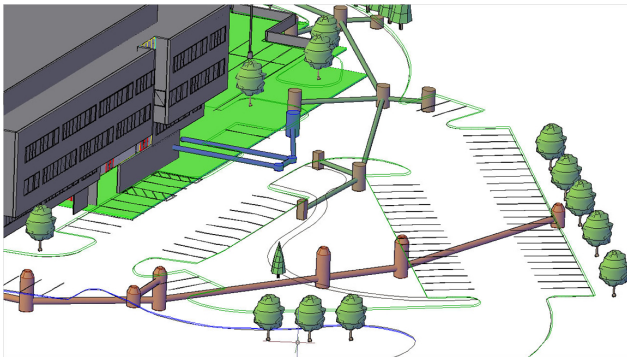
Redes hidráulicas

- A distribuição de fluidos é fundamental na sociedade: Água potável, gas, saneamento, etc.

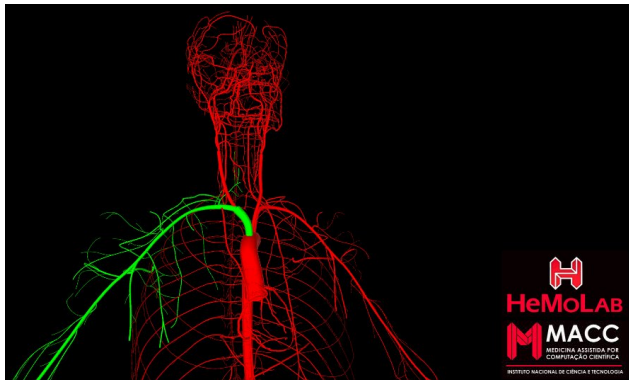


De “Pumps, pipes and storage”, Ministry of Health, New Zealand (2010)

- Também nas indústrias química, do petróleo, nuclear, de alimentos, etc.

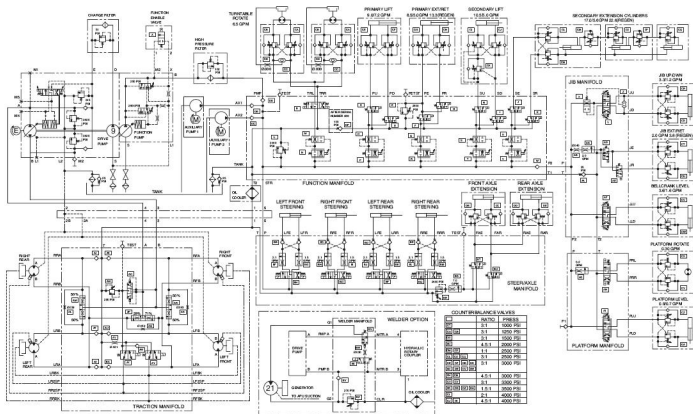


- Também no corpo humano.



Projeto ADAN (LNCC, Petrópolis, INCT-MACC)

- O cálculo numérico é necessário porque, em geral... são bastante complexos.



Componentes individuais

- **Altura hidráulica H (Head) [m]:** É uma das principais variáveis hidráulicas (escoamento incompressível, densidade constante). Está definida como

$$H = \frac{p + \rho g z + \frac{1}{2} \rho u^2}{\rho g} = \frac{p}{\rho g} + z + \frac{u^2}{2g},$$

onde p é a pressão, z a elevação geométrica respeito de uma referência, u a velocidade média.

- **Vazão volumétrica Q [m³/s]:** A segunda principal variável hidráulica. É o volume de líquido que atravessa uma seção transversal do conduto por unidade de tempo. Sendo A a área transversal, se define

$$u = \frac{Q}{A}.$$

- **Reservatórios:** Fontes ou sumidouros de líquido cuja altura hidráulica é dado. Em geral a vazão que é extraída/injetada neles é incógnita.
- **Componentes passivas localizadas:** São as válvulas, cotovelos, contrações, etc. São caracterizadas por

$$H^- - H^+ = K \frac{|u|u}{2g}, \quad \leftarrow \text{não linear}$$

onde H^- é o valor de H no lado por onde **entra fluido** quando u é **positiva**. K é uma constante adimensional não negativa.

- **Condutos:** São os canos, considerados uniformes nas análises. Se caracterizam pela lei

$$H^- - H^+ = f \frac{L}{D} \frac{|u|u}{2g}, \quad \leftarrow \text{não linear}$$

onde L é o comprimento, D o diâmetro (hidráulico), e f um fator adimensional de atrito.

- **Não linearidades:** Ainda, tanto K como f podem não ser constantes. Por análise dimensional se prova que, para uma geometria dada, apenas podem depender do **número de Reynolds**

$$\text{Re} = \frac{\rho u D}{\mu} = \frac{u D}{\nu}$$

e da **rugosidade adimensional** ϵ/D , suposta uniforme.

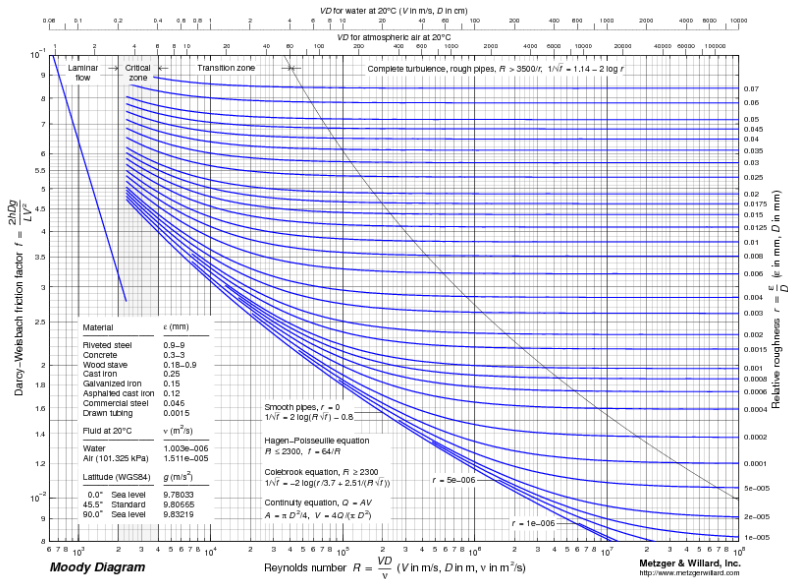


Diagrama de Moody, expressando f como função de Re e de ϵ/D .

■ Expressões analíticas para f :

■ Colebrook-White

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log_{10} \left(\frac{2.51}{\text{Re} \sqrt{f}} + \frac{\epsilon}{3.7 D} \right) \quad \leftarrow \text{implícita}$$

■ Haaland

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1.8 \log_{10} \left[\frac{6.9}{\text{Re}} + \left(\frac{\epsilon}{3.7 D} \right)^{1.11} \right] \quad \leftarrow \text{explícita}$$

■ Sousa-Cunha-Marques, Churchill, etc.

■ Em outras variáveis, Hazen-Williams, Manning, etc.

- Exercício: Comparar as leis de Colebrook-White no intervalo $10^4 \leq \text{Re} \leq 10^6$, para ϵ/D igual a 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} e 10^{-2} . Ver quando são mais próximas (Re alto ou baixo? ϵ/D alto ou baixo?).

- **Bombas (componentes ativos):** Tem sua característica dada por

$$H^- - H^+ = -\mathcal{G}(Q) ,$$

que muitas vezes é aproximado por um polinômio quadrático

$$H^- - H^+ = -\mathcal{H}^0 + \alpha Q + \beta Q^2 ,$$

onde $\mathcal{H}^0$, α e β surgem de interpolar um polinômio quadrático a partir de três vazões medidas dentro do rango de funcionamento.

As expressões anteriores, que dão ΔH como uma função de Q e parâmetros da válvula, conduto ou bomba, expressam a **conservação de momento** em cada componente i como

$$(\Delta H)_i = -\mathcal{G}_i(Q_i) .$$

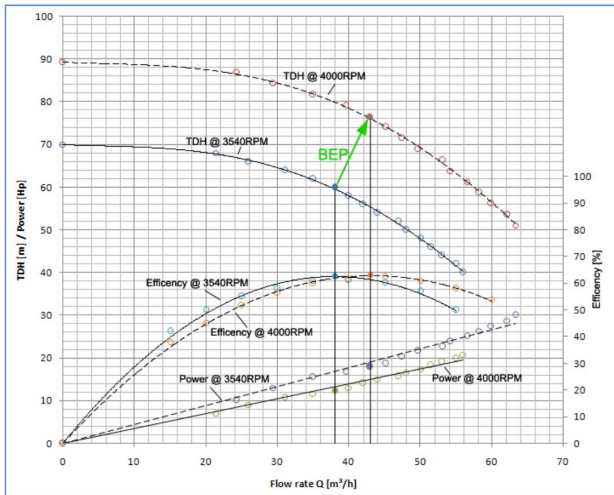
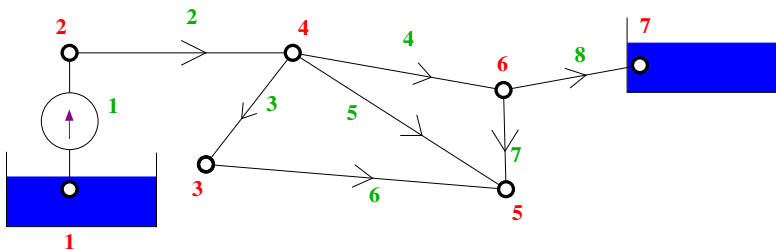


Figure 19 - approximate pump characteristic curve (Goulds pumps – model 3196 at different RPMs)

Curva característica $\mathcal{G}(Q)$, dentre outras, para duas velocidades de rotação.
Tomado de C. Allerstorfer.

- Dessa maneira, a rede se mapeia num **grafo orientado**.
- A **orientação** de cada aresta **define** o sentido **positivo** da vazão, e por isto é **indispensável**.
- Com as numerações da figura, o grafo pode ser escrito matricialmente a través da **matriz de conectividade** C ou, equivalentemente, pela **matriz de incidências** A :

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ 4 & 3 \\ 4 & 6 \\ 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 6 & 5 \\ 6 & 7 \end{pmatrix} \Leftrightarrow A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$



$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ 4 & 3 \\ 4 & 6 \\ 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 6 & 5 \\ 6 & 7 \end{pmatrix} \Leftrightarrow A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

- Seja h o vetor (coluna) que contém as alturas hidráulicas em cada nó.

$$h = (h_1, h_2, h_3, h_4, h_5, h_6, h_7)^T$$

- Calculemos o produto Ah :

$$Ah = \begin{pmatrix} h_1 - h_2 \\ h_2 - h_4 \\ h_4 - h_3 \\ h_4 - h_6 \\ h_4 - h_5 \\ h_3 - h_5 \\ h_6 - h_5 \\ h_6 - h_7 \end{pmatrix}$$

Ah é um vetor que, para cada aresta, contém a diferença de altura hidráulica entre os nós de entrada e de saída (origem e ponta da flecha).

- Definamos o vetor de vazões da rede, $q = (q_1, \dots, q_8)^T$, e o vetor $g(q)$ dado por

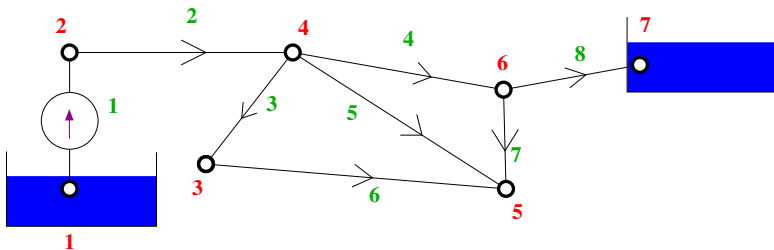
$$g_i(q) = \mathcal{G}_i(q_i) .$$

- A **equação de momento** se escreve, assim,

$$A h + G(q) = 0 \quad \leftarrow \quad \text{cons. de momento}$$

- O produto $A h$ se programa facilmente com a matriz de conectividade:

```
for i=1:m ## m: nro. de arestas
    Ah(i)=h(co(i,1))-h(co(i,2));
endfor
```



■ Calculando o produto $A^T q$ se obtém

$$A^T q = \begin{pmatrix} q_1 \\ -q_1 + q_2 \\ -q_3 + q_6 \\ -q_2 + q_3 + q_4 + q_5 \\ -q_5 - q_6 - q_7 \\ -q_4 + q_7 + q_8 \\ -q_8 \end{pmatrix}$$

- A **equação de massa** se escreve, portanto,

$$A^T q = c \quad \leftarrow \text{cons. de massa}$$

onde c é o vetor de **vazões entrantes** (positivas entrando desde o exterior da rede) em cada nó.

- O produto $A^T q$ se programa facilmente com a matriz de conectividade:

```
ATq=zeros(n,1); ## n: nro de nos
for i=1:m ## m: nro. de arestas
    i1=co(i,1); i2=co(i,2);
    ATq(i1)=ATq(i1)+q(i);
    ATq(i2)=ATq(i2)-q(i);
endfor
```

Sistema de equações e incógnitas

- Se não houver nenhum reservatório (apenas vazões nodais c impostas), o sistema acabaria nas equações de momento e massa.
- A solução não seria única.
- **Mostrar que**
 - se (h, q) é solução de (cons. de momento)-(cons. de massa), então $(h + \alpha \mathbf{1}, q)$ também é solução, onde $\alpha \in \mathbb{R}$ é arbitrário e $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$;
 - se $c^T \mathbf{1} = \sum_{i=1}^m c_i$ é distinto de zero, o sistema não admite nenhuma solução.
- As observações do exercício surgem naturalmente da análise física do problema.

- **Havendo nr reservatórios**, a situação é diferente. Em particular, do vetor c haverá nr componentes que serão **incógnitas**.
- Seja $\{I^R(r)\}_{r=1}^{nr}$ um vetor que contém os índices de nó que correspondem aos reservatórios, e $\{H^R(r)\}_{r=1}^{nr}$ um vetor que contém os valores impostos de h . Na rede da figura seria

$$I^R = \begin{pmatrix} 1 \\ 7 \end{pmatrix}, \quad H^R = \begin{pmatrix} 200 \\ 210 \end{pmatrix}.$$

Definindo a matriz auxiliar **de injeção** $D \in \mathbb{R}^{n \times nr}$, cuja coluna r é a coluna $I^R(r)$ da matriz identidade $\mathbb{I} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, se cumpre no nosso caso que

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow D^T h = \begin{pmatrix} h(I^R(1)) \\ \vdots \\ h(I^R(nr)) \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_7 \end{pmatrix}.$$

- Assim, as **equações de imposição de H** nos reservatórios se escrevem matematicamente,

$$D^T h = H^R, \quad \text{no caso, } \begin{pmatrix} h_1 \\ h_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1^R \\ H_2^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 200 \\ 210 \end{pmatrix}$$

- Decompomos o vetor $c = c^L + c^R$, onde $c_{IR(i)}^R = c(I^R(i))$ nos nós que são reservatórios e zero nos outros (e viceversa). Se as vazões dos reservatórios (**incógnitas**) são um vetor $v^R = (v_1^R, \dots, v_{nr}^R)^T$, se cumpre que as equações de **conservação da massa** se escrevem

$$A^T q - D v^R = c^L.$$

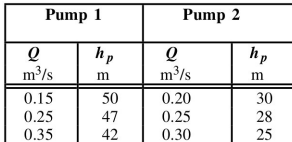
- **Exercício: Mostrar que os produtos $D^T h$ e $D v^R$ podem programarse de maneira simples e compacta.**

- O sistema total a resolver é: Achar $(q, h, v^R) \in \mathbb{R}^{m+n+nr}$ tais que

$$\begin{aligned} G(q) + Ah &= 0 && \leftarrow m \text{ eqs} \\ A^T q - Dv^R &= c^L && \leftarrow n \text{ eqs} \\ D^T h &= H^R && \leftarrow nr \text{ eqs} \end{aligned}$$

- Os dados são as vazões de saída no nós livres c^L , e as alturas impostas nos reservatórios, H^R .

■ Resolver a rede hidráulica da figura. Em particular calcular a vazão neta do reservatório auxiliar conectado aos condutos 14 e 16.



Implementação

- Levamos o problema à forma: **Determinar** $x^* \in \mathbb{R}^{m+n+nr}$ tal que

$$f(x^*) = 0, \text{ onde } x \in \begin{pmatrix} q \\ h \\ v^R \end{pmatrix} \text{ e } f(x) = \begin{pmatrix} G(q) + Ah \\ A^T q - Dv^R - c^L \\ D^T h - H^R \end{pmatrix}$$

- Utilizaremos para isto a função `fsolve`:

Function File: `fsolve (FCN, X0, OPTIONS)`

`[X, FVEC, INFO, OUTPUT, FJAC] = fsolve (FCN, ...)`

-----Exemplo-----

```
function y = f (x)
```

```
    y(1,1) = -2*x(1)^2 + 3*x(1)*x(2)    + 4*sin(x(2)) - 6;
```

```
    y(2,1) =  3*x(1)^2 - 2*x(1)*x(2)^2 + 3*cos(x(1)) + 4;
```

```
endfunction
```

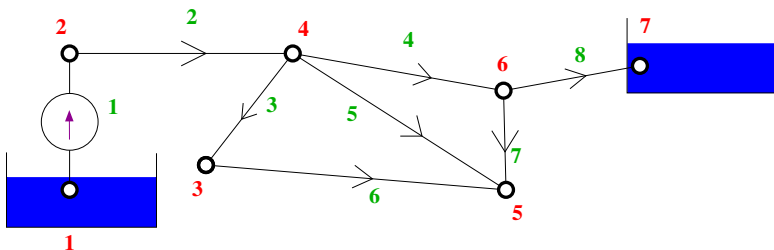
```
[x, fval, info] = fsolve (@f, [1; 2])
```

```
x = 0.57983 2.54621 ** fval = -5.7184e-10 5.5460e-10
```

```
info = 1
```

■ Precisamos programar o resíduo. $f(x) = \begin{pmatrix} G(q) + Ah \\ A^T q - Dv^R - c^L \\ -D^T h + H^R \end{pmatrix}$

```
function fx = fhidr(x)
global m n nr co Ir Hr cL
q=x(1:m); h=x(m+1:m+n); vR=x(m+n+1:m+n+nr);
fx=zeros(m+n+nr,1); fx(m+1:m+n)=-cL; ## inic. fx
dh=deltah(q); ## funcao G(q)
for i=1:m
    n1=co(i,1); n2=co(i,2); ## co==conectividade
    fx(i)=dh(i)+h(n1)-h(n2); ## eq. de momento
    fx(m+n1)=fx(m+n1)+q(i); ## eq. de massa
    fx(m+n2)=fx(m+n2)-q(i); ## eq. de massa
endfor
for i=1:nr
    fx(m+Ir(i))=fx(m+Ir(i))-vR(i); ## eq. de massa
    fx(m+n+i)=-h(Ir(i))+Hr(i); ## eq. impos. Hr
endfor
endfunction
```

```

global m n nr co Ir Hr cL rho mu grav
m=8;n=7;nr=2;co=[1 2;2 4;4 3;4 6;4 5;3 5;6 5;6 7];
Ir=[1 7];Hr=[200 210];cL=-[0 0 1e-4 1e-4 1e-4 1e-4 0];
rho=1000;mu=1e-3;grav=9.8;

```

- Só nos resta programar a função $G(q)$ (Δh), que vale para cada aresta relacionando Δh e q !

- Com isto, já podemos calcular a rede. Por exemplo, se $f = 64/\text{Re}$, obtemos

```
q=0.0001*ones(m,1);  
h=[200*ones(n-1,1);210];  
vR=0*ones(nr,1);  
x0=[q;h;vR];  
res=fhidr(x0)
```

```
>>res=    10.01000  -0.00001  -0.00001  -0.00002  -0.00002  
        -0.00029  -0.00012  -10.00042  
         0.00010   0.00000   0.00010   0.00030  -0.00020  
         0.00020  -0.00010  
         0.00000   0.00000
```

onde as primeiras 8 componentes são desbalanços de momento, os seguintes 7 desbalanços de massa, e os últimos 2 erros na altura hidráulica dos reservatórios.

- Finalmente, podemos utilizar `fsolve` para resolver.

```
[x fv info]=fsolve(@fhidr,x0)
```

```
x =  
    2.6909e-03    2.6909e-03    1.1433e-04    2.1655e-03    3.1100e-04  
    1.4333e-05   -2.2534e-04    2.2909e-03  
    2.0000e+02    2.1001e+02    2.1001e+02    2.1001e+02    2.1001e+02  
    2.1001e+02    2.1000e+02  
    2.6909e-03   -2.2909e-03  
fv =  
    0.0000e+00   -4.2064e-12    0.0000e+00    1.7906e-12    2.8422e-13  
    5.6843e-14   -5.6210e-04    3.4390e-12  
   -9.7925e-16   -9.7752e-16   -1.0582e-15   -1.6505e-15   -1.3780e-16  
   -1.3592e-15   -9.2894e-16  
    0.0000e+00    0.0000e+00  
info = 1
```

- Notar que os valores numéricos do exemplo não são realistas.
- Testar o método acima com valores mais realistas e com uma expressão correta para o fator de fricção f .
- Discutir possíveis problemas de convergência.

Problema: formulação final

Para a rede já apresentada, calcular a evolução da altura do tanque de armazenamento como função do tempo, ao longo de um dia inteiro (24 horas). Para isto, se tem o dado do diâmetro do tanque, 20 m, se conhece a altura inicial, 200 m, as 00 horas (meianoite), e se sabe que os fatores de pico das diversas faixas horárias são:

0-3	3-6	6-9	9-12	12-19	19-22	22-24
0.5	0.2	1.0	1.4	1.1	1.6	1.1

Prepare uma apresentação, de 10 minutos, mostrando como apresentaria seu resultado para o engenheiro que pediu o cálculo. Deveria ser algo objetivo, que dê confiança nos cálculos, e que convença de que o resultado é lógico e você sabe do que está falando.

Generalizando matematicamente o problema anterior, podemos formular como: **Determinar $H^R(t)$ que satisfaz**

$$S(H^R(t)) \frac{dH^R}{dt} = -v^R(t)$$

onde, para cada t , v^R deve satisfazer o seguinte problema linear

$$\begin{aligned} G(q) + A h &= 0 \\ A^T q - D v^R &= c^L(t) \\ -D^T h + H^R &= 0 \end{aligned}$$

com $c^L(t)$ uma função de demanda conhecida e $S(H^R)$ é a área da superfície do/s reservatório/s como função da altura de água.

O sistema anterior é uma **equação algébrica-diferencial** (DAE).

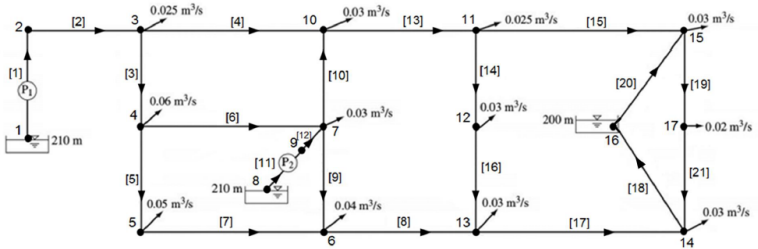
Exercício conceitual: Se houvesse válvulas que se abrem e fecham durante o dia, ou se as bombas não funcionassem tempo todo, como se incorporaria isto à formulação matemática?

Conclusões sobre cálculo de redes hidráulicas

- Utilizando grafos orientados, e em particular a matriz de incidência A e a matriz de injeção D , é possível escrever as equações físicas de massa e momento para redes hidráulicas como um **sistema de equações algébrico-diferencial não linear**.
- A implementação eficiente (dos produtos matriz-vetor) utiliza, por outro lado, a matriz de conectividade $co(1:m, 1:2)$ e o vetor identificador de reservatórios $Ir(1:nr)$.
- É possível resolver o sub-sistema algébrico com a função `fsolve` de Octave, sem necessidade de programar o Jacobiano.

Discussão do projeto

- Começamos numerando os componentes e gerando o grafo orientado.



Ver em `hldr2.m`:

```
m=21;n=17;nr=3;  
co=[1 2; 2 3; 3 4; 3 10; 4 5; 4 7; 5 6; 6 13; 7 6; 7 10; 8 9; 9 7;  
    10 11; 11 12; 11 15; 12 13; 13 14; 14 16; 15 17; 16 15; 17 14];  
Ir=[1 8 16];Hr=[210 210 200];
```

■ Função `deltah.m` nesse caso (`deltah2.m`)

```
function g = deltah(q)
global m n rho mu grav
Di=[0,0.4,0.3,0.3,0.25,0.3,0.3,0.25,0.25,0.3,0,...
    0.35,0.3,0.25,0.2,0.25,0.2,0.25,0.2,0.25,0.2];
L=1000*[0,3.5,1.5,2,1.5,2,3,1.5,1.5,1.5,0,0.5,1.8,...
    1.5,2.2,1.5,2.2,1,1.5,1,1.5];
eps=2e-4*ones(1,m);rho=997;mu=0.890e-3;grav=9.80665;
qb1 = [0.15 0.25 0.35]; % [m^3/s] vazoes da bomba 1
hb1 = [50 47 42]; % [m] alturas da bomba 1
b1 = polyfit(qb1,hb1,2); % curva da bomba 1
qb2 = [0.20 0.25 0.30]; % [m^3/s] vazoes da bomba 2
hb2 = [30 28 25]; % [m] alturas da bomba 2
b2 = polyfit(qb2,hb2,2); % curva da bomba 2
for i=1:m
    if (i!=1 && i!=11)
        u=q(i)/(pi*Di(i)*Di(i)/4); Re=abs(u)*Di(i)*rho/mu;
        if (Re < 100) Re=100; endif
        ff=friction(Re,eps(i)/Di(i));
        g(i)=-ff*L(i)/Di(i)*abs(u)*u/(2*grav);
    elseif (i==1)
        g(i)=polyval(b1,q(i));
    elseif (i==11)
        g(i)=polyval(b2,q(i));
    endif
endfor
```

- Notar como foram usadas as funções `polyfit` e `polyval` para interpolar o comportamento das bombas.
- A função `fhidr` não muda em nada.
- Resolvemos assim o caso estacionário (arquivo `hidr2.m`), obtendo

```
>cL=-[0 0 0.025 0.06 0.05 0.04 0.03 0 0 0.03...
      0.025 0.03 0.03 0.03 0.03 0 0.02];
>q=0*ones(m,1);h=0*ones(n,1);vR=0*ones(nr,1);
>x0=[q;h;vR];
>[x fval info]=fsolve(@fhidr,x0);
>q=x(1:m), h=x(m+1:m+n), vR=x(m+n+1:m+n+nr)
q = 1.95e-01 1.95e-01 8.88e-02 8.16e-02 6.73e-02 -3.85e-02 1.73e-02
     5.23e-02 7.50e-02 5.50e-02 1.98e-01 1.98e-01 1.06e-01 4.18e-02
     3.98e-02 1.18e-02 3.42e-02 -5.59e-03 1.01e-02 3.87e-04 -9.80e-03
h = 210.00 258.88 240.09 232.54 221.30 220.64 234.53 210.00 240.04
     231.56 218.60 214.16 213.77 199.93 200.00 200.00 199.08
vR= 0.195 0.198 0.00598
```

Na condição nominal de funcionamento, portanto, o tanque está ingressando 5.98 litros de água por segundo à rede, e por tanto seu nível descendo com velocidade $5.98 \times 10^{-3} / (\pi 10^2) [m/s] = 6.85 \text{ cm/h}$.

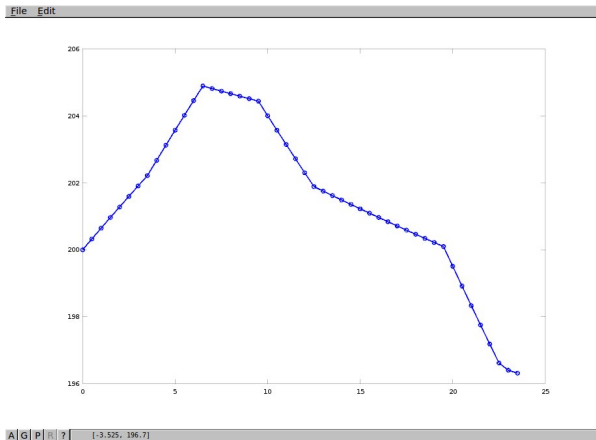
- Para o caso transiente implementamos um esquema de Euler explícito,

$$H^{n+1} = H^n - \Delta t \frac{v^n}{S^n}$$

sendo H e v altura e vazão do tanque, e S sua área horizontal. A implementação pode ser achada em `hidr3.m`. O avanço no tempo é dado por

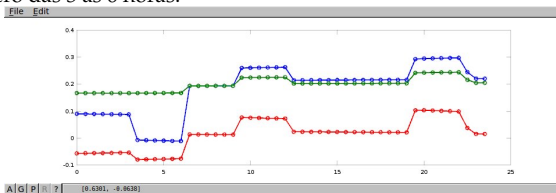
```
for i=1:nt
    if (timeh > horas(k)) k=k+1; endif
    cL=cL0*pf(k);
    [x fval info]=fsolve(@fhidr2,x0);
    tempos=[tempos timeh];
    q=[q x(1:m)];h=[h x(m+1:m+n)];vR=[vR x(m+n+1:m+n+nr)];
    hR=[hR Hr(3)];
    Reynolds=[Reynolds Rey];ffactor=[ffactor ff];
    Hr(3)=Hr(3)-dt*x(m+n+3)/(pi*100);
    timeh=timeh+dth; x0=x;
endfor
plot(tempos,hR,"linewidth",2,"-o")
```

- O resultado $H(t)$ obtido utilizando $\Delta t = 0.5$ hora é o da figura. $H_{\max} = 204.89$, $H_{\min} = 196.32$.

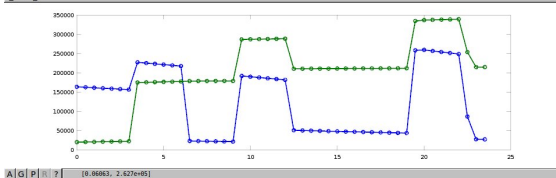
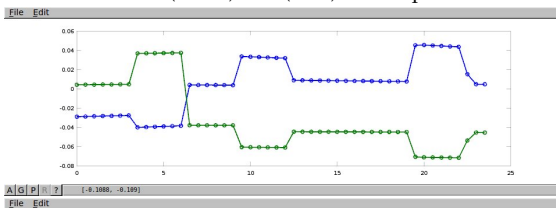


- O nível desce 3.68 m a cada 24 hs. Certamente as bombas não satisfazem a demanda.
- Notar que a perda total de nível é maior que a que corresponde a 24 hs com demanda constante, que seria $6.85 \text{ cm/h} \times 24 \text{ h} = 1.64 \text{ m}$. Efeito não linear.

- Vazões dos reservatórios vs. tempo. 1: verde, 2: azul, 3: vermelho. Note que a vazão pela bomba 2 é $\simeq$ zero das 3 às 6 horas.



- Vazão [m^3/s] e Re em conduto 6 (verde) e 20 (azul) vs. tempo.



Equações de Navier-Stokes incompressíveis

Princípios de conservação

Eles são **conservação de**

$$\text{massa, } \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d\Omega + \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} d\partial\Omega = 0 ,$$

$$\text{momento, } \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} d\Omega + \int_{\partial\Omega} (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{\hat{n}} d\partial\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} d\Omega ,$$

$$\text{energia, } \frac{d}{dt} \int_{\Omega} E d\Omega + \int_{\partial\Omega} (E \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{\hat{n}} d\partial\Omega = \int_{\Omega} (\mathbf{f} \cdot \mathbf{u} + Q) d\Omega ,$$

o quarto princípio, **conservação do momento angular**, é automaticamente satisfeito se o **tensor de tensões** $\boldsymbol{\sigma}$ é simétrico. Acima, E é a **energia total**, i.e. $E = \rho (e + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}/2)$, e $\mathbf{q}$ é o **fluxo de calor**.

Os **fluxos** de massa, momento e energia estão em **vermelho** nas equações.

Exercício: Demonstre que, em 2D, e para uma superfície $\mathcal{S}$ vertical

- O fluxo neto de massa por $\mathcal{S}$ é

$$J = \int_{\mathcal{S}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{\check{n}} dS = \pm \int_{\mathcal{S}} \rho u_1 dy$$

sendo “+” quando $\mathbf{\check{n}}$ aponta no sentido de $+x_1$.

- O fluxo neto de momento horizontal é

$$J = \int_{\mathcal{S}} (\rho u_1 \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\check{e}}_1) \cdot \mathbf{\check{n}} dS = \pm \int_{\mathcal{S}} (\rho u_1^2 - \sigma_{11}) dy$$

- O fluxo neto de momento vertical é

$$J = \int_{\mathcal{S}} (\rho u_2 \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\check{e}}_2) \cdot \mathbf{\check{n}} dS = \pm \int_{\mathcal{S}} (\rho u_1 u_2 - \sigma_{12}) dy$$

Calcule esses fluxos quando $\mathcal{S}$ é horizontal.

Um **fluido Newtoniano** é definido pela **lei constitutiva**

$$\boldsymbol{\sigma} = -p \mathbb{I} + \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right) + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbb{I} .$$

Estudaremos o tratamento numérico de **escoamentos incompressíveis**, caracterizados por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 .$$

Se ρ é constante, a equação acima também representa a **conservação da massa**.

Eqs. Navier-Stokes incompressíveis (forma conservativa):

$$\begin{aligned}\rho \partial_t \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[p \mathbb{I} - \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \right] &= \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0\end{aligned}$$

Eqs. Navier-Stokes incompressíveis (forma integral):

$$\begin{aligned}\rho \frac{d}{dt} \int_V \mathbf{u} dV + \int_S \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{\hat{n}} dS &= \int_V \mathbf{f} dV \\ \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} dS &= 0\end{aligned}$$

onde $\boldsymbol{\zeta}$ é o **tensor fluxo de momento**

$$\boldsymbol{\zeta} = p \mathbb{I} - \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = -\boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}.$$

São necessárias **condições**

- **iniciais**, o campo de velocidade a $t = 0$, o de pressão não,
- e **de contorno**, uma condição na direção normal ao contorno (velocidade ou força), e outra na direção tangencial (velocidade ou força).

As principais **dificuldades no tratamento numérico** são:

- **Acoplamento velocidade-pressão**,
na equação de massa, que seria a “equação da pressão”, não aparece a variável p ,
- **Não-linearidade do termo convectivo**,
é o único termo não linear, ele da origem a instabilidades, turbulência, etc.,
- **Camadas limites quando Re é alto**,
aparecem grandes gradientes de velocidade, requerindo malhas muito finas perto das paredes.

O método de volumes finitos

Metodologia básica:

- Defina os **graus de liberdade** da sua **solução numérica**. Quais são as **incógnitas** de velocidade e de pressão?
- Defina um conjunto de **volumes finitos**, com número igual ao de incógnitas.
- Defina umas regras de cálculo dos **fluxos discretos** a partir das incógnitas. Esse passo normalmente envolve interpolação das variáveis.
- Construa o **sistema de equações** exigindo que a solução numérica satisfaça exatamente o **balanço** provindo do princípio de conservação.

Vejamos ela explicitamente para a conservação da massa ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$).

A conservação exata da massa é, para um retângulo,

$$(u_E^* - u_W^*) h_y + (v_N^* - v_S^*) h_x = 0 .$$

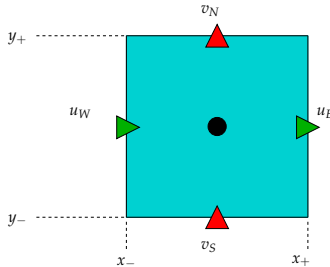
onde u_E^* , u_W^* , v_N^* e v_S^* são as médias por aresta, como mostrado na figura, i.e.,

$$u_E^* = \frac{1}{h_y} \int_E \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds = \frac{1}{h_y} \int_{y_-}^{y_+} u(x_E, y) \, dy$$

$$u_W^* = -\frac{1}{h_y} \int_W \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds = \frac{1}{h_y} \int_{y_-}^{y_+} u(x_W, y) \, dy$$

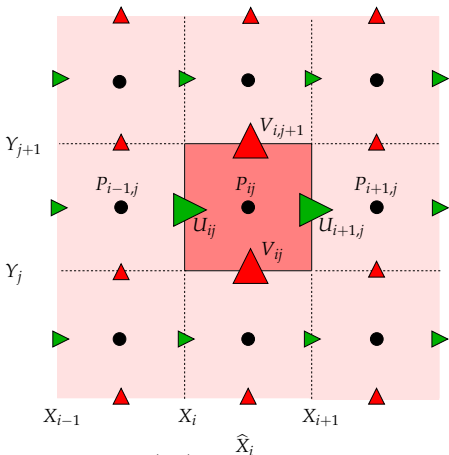
$$v_N^* = \frac{1}{h_x} \int_N \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds = \frac{1}{h_x} \int_{x_-}^{x_+} v(x, y_N) \, dx$$

$$v_S^* = -\frac{1}{h_x} \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds = \frac{1}{h_x} \int_{x_-}^{x_+} v(x, y_S) \, dx$$



Discretização MAC (Marker-and-Cell):

- u nas faces verticais,
- v nas faces horizontais,
- p no centro da célula.
- Em rosa escuro o **Volume Finito de Massa** numerado (i, j) .



Equação discreta de incompressibilidade para VF (i, j) :

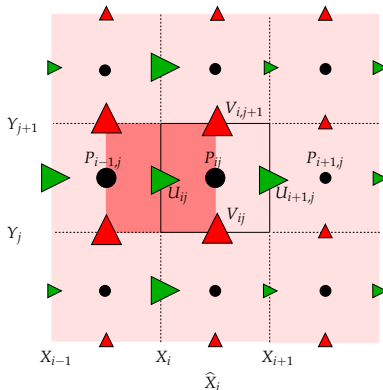
$$(U_{i+1,j} - U_{ij}) (Y_{j+1} - Y_j) + (V_{i,j+1} - V_{ij}) (X_{i+1} - X_i) = 0 \quad (1)$$

Pela **definição das incógnitas** não foi necessário interpolar.

A **conservação do momento** na direção x se escreve

$$\int_V \rho \frac{\partial u}{\partial t} dV + \int_{\partial V} (\rho u (u n_x + v n_y) + p n_x) dS - \int_{\partial V} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} n_x + \mu \frac{\partial v}{\partial x} n_y + \mu \frac{\partial u}{\partial y} n_y \right) dS = \int_V f_x dV$$

O **volume finito de momento em x** é definido como



Exercício: Mostrar que

- A integral do termo de pressão acaba sendo discretizada como

$$\int_{\partial V} p n_x dS \simeq (p_E - p_W) h_y = (P_{ij} - P_{i-1,j}) (Y_{j+1} - Y_j) .$$

- A integral do termo de inércia acaba sendo discretizada como

$$(IX) = \rho \left(u_E^2 h_y - u_W^2 h_y + u_N v_N h_x - u_S v_S h_x \right) ,$$

complementada com a **interpolação centrada**:

$$\begin{aligned} u_E &= \frac{u_{EE} + u_P}{2} = \frac{U_{i+1,j} + U_{ij}}{2} , & u_W &= \frac{u_{WW} + u_P}{2} = \frac{U_{i-1,j} + U_{ij}}{2} , \\ u_N &= \frac{u_{NN} + u_P}{2} = \frac{U_{ij+1} + U_{ij}}{2} , & u_S &= \frac{u_{SS} + u_P}{2} = \frac{U_{i,j-1} + U_{ij}}{2} , \\ v_N &= \frac{v_{NE} + v_{NW}}{2} = \frac{V_{i,j+1} + V_{i-1,j+1}}{2} , & v_S &= \frac{v_{SE} + v_{SW}}{2} = \frac{V_{ij} + V_{i-1,j}}{2} . \end{aligned}$$

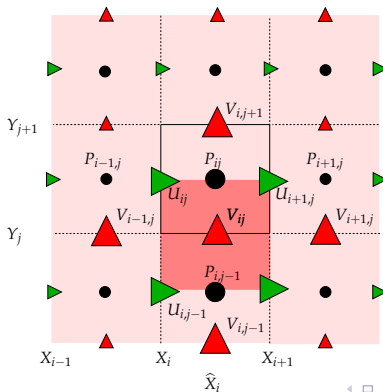
- A integral do termo viscoso na face norte é

$$\begin{aligned} - \left(\int_N \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \mathbf{\hat{n}} dS \right)_x &= - \int_N \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dS \\ &\simeq - \mu_N \left(\frac{U_{ij+1} - U_{ij}}{\hat{Y}_{j+1} - \hat{Y}_j} + \frac{V_{ij+1} - V_{i-1,j+1}}{\hat{X}_i - \hat{X}_{i-1}} \right) (\hat{X}_i - \hat{X}_{i-1}) \end{aligned}$$

A conservação do momento na direção y se escreve

$$\int_V \rho \frac{\partial v}{\partial t} dV + \int_{\partial V} (\rho v (u n_x + v n_y) + p n_y) dS - \int_{\partial V} \left(2\mu \frac{\partial v}{\partial y} n_y + \mu \frac{\partial v}{\partial x} n_x + \mu \frac{\partial u}{\partial y} n_x \right) dS = \int_V f_y dV$$

O volume finito de momento em y é definido como



- Aproxima o **problema de Stokes**:

$$-\nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \nabla p = \mathbf{f}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega.$$

Notar que p está definido a menos de uma constante.

- O domínio Ω é retangular. N_x células (de pressão, ou massa) na direção x , N_y células na direção y .
- Isto leva a vetor de incógnitas

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ p \end{pmatrix}, \quad u \in \mathbb{R}^{(N_x+1) \times N_y}, v \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_y+1)}, p \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}.$$

- O problema é linear em $\mathbf{f}$. Pode se escrever como

$$\begin{pmatrix} A_{\mathbf{u}\mathbf{u}} & A_{\mathbf{u}p} \\ A_{p\mathbf{u}} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int \mathbf{f} \\ 0 \end{pmatrix}$$

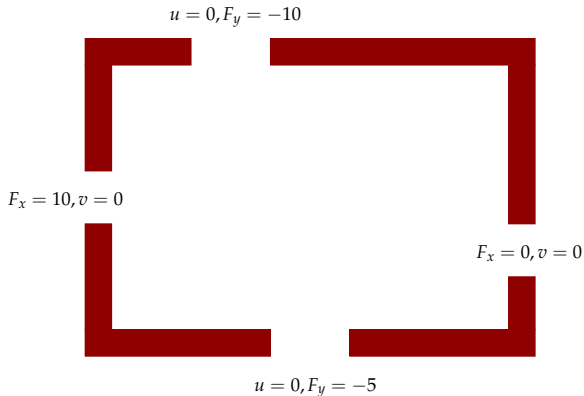
- Se existe Z , subespaço de $\mathbb{R}^{N_x \times N_y}$ tal que

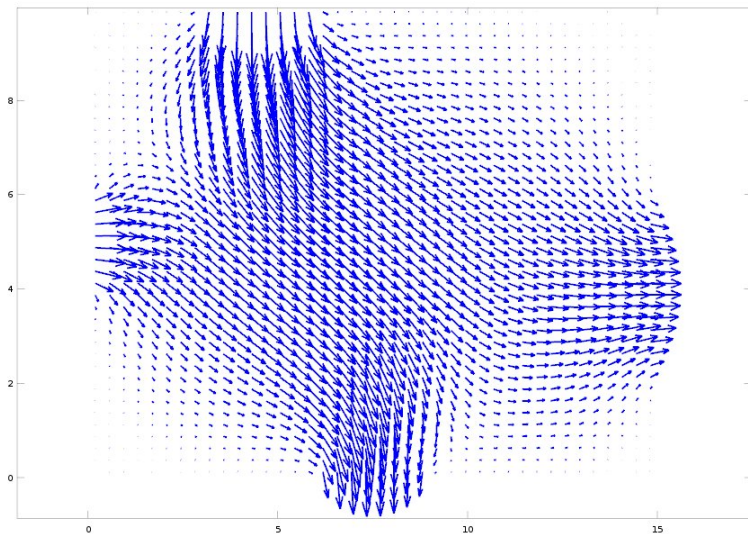
$$\bar{p} \in Z \Rightarrow A_{\mathbf{u}p}\bar{p} = 0,$$

então $\bar{p}$ é um **modo espúrio de pressão**. Infinitas soluções, definida a menos de um elemento de Z .

- Que Z é composto apenas pelas constantes é uma **propriedade da escolha de incógnitas discretas**. Na escolha MAC isto é garantido.

Um exemplo (com condições de contorno não homogêneas)





Campo de velocidade

Verificação e Validação

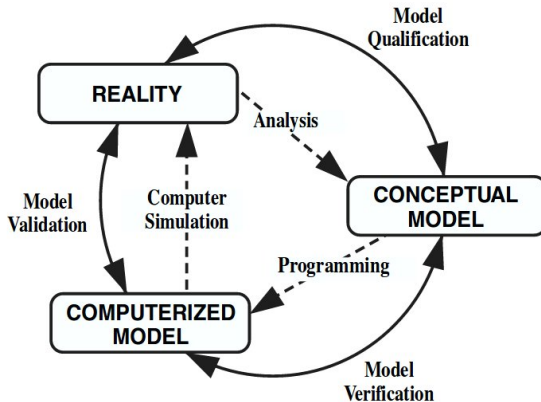


Figure 1
Phases of Modeling and Simulation and the Role of V&V [297]

Schlesinger, S. *Simulation*, 1979.

Verificação e validação de software: O processo que garante que um dado software (de CFD, no caso)

- resolve as equações certas (**validação**), no sentido de que modela com precisão escoamentos reais; e
- resolve bem essas equações (**verificação**), no sentido de que as diferenças entre a solução exata e a numérica são insignificantes.

Método de soluções manufaturadas:

- É um método de **verificação**. Utiliza soluções sem sentido físico em geral. **A solução exata a ser aproximada é escolhida pelo usuário.**
- Seja $\mathcal{D}$ o operador diferencial (linear ou não linear do problema), sendo a equação genérica $\mathcal{D}\phi = f$.
- **Escolhemos** uma solução exata ϕ e **calculamos** o correspondente f .
- O método numérico resolve $\mathcal{D}_h \phi_h = f$, por tanto o **erro** é simplesmente $\phi - \phi_h$.
- Se **verifica** o código checando que $\|\phi - \phi_h\|$ tenda a zero com a ordem prevista pela teoria.

Ordem empírica de convergência

Se h é um indicativo do tamanho da malha, e ϕ_h é a solução obtida com o código, o **comportamento assintótico** do erro é em geral da forma

$$\|\phi - \phi_h\| \simeq C(\phi) h^p, \text{ para } h \rightarrow 0.$$

Fazendo dois cálculos manufaturados, com malhas de tamanhos h e rh ($r < 1$), e medindo $e_h = \|\phi - \phi_h\|$ e $e_{rh} = \|\phi - \phi_{rh}\|$ obtemos

$$e_h \simeq C(\phi) h^p, \quad e_{rh} \simeq C(\phi) (rh)^p \Rightarrow p \simeq \frac{\log \frac{e_{rh}}{e_h}}{\log r}.$$

Podem calcularse mais pontos (r^2h , etc.) e ajustar uma reta num gráfico $\log e_h$ vs. $\log h$. A solução exata escolhida deve ter escalas $\gg h$ para estar no regime assintótico.

Solução manufaturada incompressível

Seja ψ uma **função corrente** arbitrária no domínio, $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$. Então, definindo

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x},$$

obtemos um campo $\mathbf{u} = (u, v)^T$ satisfazendo $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

Exemplo: Seja, no domínio $\Omega = (0, \pi/4) \times (0, \pi)$,

$$\psi(x, y) = \sin^q(4x) \sin^q y \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} u = q \sin^q(4x) \sin^{q-1} y \cos y \\ v = -4q \sin^{q-1}(4x) \cos(4x) \sin^q y \end{cases}$$

Se $q > 1$ então $\mathbf{u} = 0$ em todo $\partial\Omega$. Vamos tomar $q = 2$.

Ainda podemos tomar p arbitrário. Seja $p = x^2 + y^2$.

- Se μ é constante se cumpre que

$$-\nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) = -\mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \end{pmatrix}.$$

- A força é, assim,

$$f_x = -\mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial p}{\partial x}, \quad f_y = -\mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial p}{\partial y},$$

- Deve-se resolver o problema numericamente com essa força volumétrica, e comparar as (u_h, v_h, p_h) obtidas com as (u, v, p) exatas do slide anterior.
- A comparação é feita nas normas

$$\|\phi - \phi^h\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j} |\phi(x_i, y_j) - \phi_{i,j}^h|^2 \Delta x_i \Delta y_j}, \quad e$$

$$\|\phi - \phi^h\|_\infty = \max_{i,j} |\phi(x_i, y_j) - \phi_{i,j}^h|.$$

Ordem teórica de convergência

- A ordem teórica, ou formal, de convergência é a **ordem de consistência** do método.
- O método pode ser escrito como

$$\sum_{\sigma \in \partial K} F_{K,\sigma}(\phi^h) = \int_K f \, dK$$

O erro de consistência dos fluxos discretos é

$$e_\sigma = \frac{1}{|\sigma|} F_{K,\sigma}(\bar{\phi}) - J(\phi)$$

onde $\bar{\phi}$ é o vetor de valores nodais de uma solução exata, e $J(\phi)$ o fluxo médio exato por σ .

- A ordem de e_σ é a ordem teórica do método.

Exemplo: Conservação da massa.

■ Fluxo exato

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{h_y} \int_E u \, dy$$

■ Fluxo discreto da solução exata

$$F_{K,\sigma}(u) = h_y u(C), \quad C = \text{ponto médio}$$

■ Erro (assumimos $y_C = 0$)

$$\begin{aligned} e_\sigma &= u(C) - \frac{1}{h_y} \int_E u \, dy \\ &= u(C) - \frac{1}{h_y} \int_{-\frac{h_y}{2}}^{\frac{h_y}{2}} \left(u(C) + y u_y(C) + \frac{y^2}{2} u_{yy}(C) + \dots \right) dy \\ &= \frac{h_y^2}{8} u_{yy}(C) + \text{TOS}. \end{aligned}$$

■ Notar que se C não estivesse no centro seria de primeira ordem.

- Calcular usando desenvolvimento de Taylor a ordem teórica de convergência da equação de momento.
- Verificar a convergência empírica do código `codemac.m` pelo método das soluções manufaturadas. Notar que deve ser imposto um valor de pressão para eliminar indeterminação da solução.
- Testar malhas uniformes e malhas não uniformes. A ordem se mantém?
- Testar uma solução exata menos regular, por exemplo colocando $1 < q < 2$ na solução exata discutida antes. A ordem se mantém?

Redigir um relatório explicando a implementação das medidas de erro no código e os resultados obtidos.

Métodos acoplados e desacoplados para escoamentos incompressíveis

- Nos pontos anteriores, mostramos como
 - discretizar os fluxos das equações de Navier-Stokes incompressíveis, e
 - implementar construindo matrizes $A_{\mathbf{u}\mathbf{u}}$, $A_{\mathbf{u}p}$, $A_{p\mathbf{u}}$ e vetor $\mathbf{r}$ tais que

$$\begin{pmatrix} A_{\mathbf{u}\mathbf{u}} & A_{\mathbf{u}p} \\ A_{p\mathbf{u}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} \\ 0 \end{pmatrix}$$

aproxime a solução do problema de Stokes

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \left(\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \right) + \nabla p &= \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned}$$

no caso, com $\mathbf{u} = 0$ no contorno.

- Os métodos **acoplados** resolvem todas as incógnitas de uma vez. Eles se estendem às equações de Navier-Stokes transientes com facilidade, sempre seguindo os princípios de conservação.

Se M é a matriz diagonal que contém os tamanhos das células de momento (vezes ρ), e $\mathbf{C}(\mathbf{u})$ é o vetor (não linear) de fluxos convectivos de momento,

$$\mathbf{C}(\mathbf{u}) = \sum_{\sigma \in \partial K_{ij}} F_{\sigma}^{\text{conv}}(\mathbf{u}) \simeq \int_{\partial K_{ij}} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{\hat{n}}) \rho \mathbf{u} dS ,$$

a Equação Diferencial-Algébrica do sistema é

$$\begin{aligned} M \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \mathbf{C}(\mathbf{u}) + A_{\mathbf{uu}} \mathbf{u} + A_{\mathbf{up}} p &= \mathbf{r} \\ A_{p\mathbf{u}} \mathbf{u} &= 0 \end{aligned}$$

Notar que, abusando da notação, $\mathbf{u}$ e p aqui não são os campos mas os **vetores incógnita** de velocidade e pressão.

- Uma discretização totalmente implícita de segunda ordem no tempo, por exemplo, seria

$$M \frac{3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} + \mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1}) + A_{\mathbf{uu}} \mathbf{u}^{n+1} + A_{\mathbf{up}} p^{n+1} = \mathbf{r}^{n+1}$$

$$A_{p\mathbf{u}} \mathbf{u}^{n+1} = 0$$

- Ela pode ser linearizada substituindo $\mathbf{C}(\mathbf{u}^{n+1})$ por uma linearização do tipo

$$\int_{\partial K_{ij}} (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{\check{n}}) \rho \mathbf{u}^{n+1} dS \simeq \int_{\partial K_{ij}} ((2\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}) \cdot \mathbf{\check{n}}) \rho \mathbf{u}^{n+1} dS ,$$

que preserva a ordem 2 temporal do método.

- Outras estratégias são possíveis, mas a necessidade de resolver um sistema linear com todas as incógnitas continua. Métodos desacoplados são estratégias para resolver velocidade e pressão separadamente.

Compressibilidade artificial

- Se se adiciona $\varepsilon \frac{\partial p}{\partial t}$ na equação da massa (efeito compressível, com ε pequeno),

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)) + \nabla p &= \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0,\end{aligned}$$

a EDA resulta muda para

$$\begin{aligned}M \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \mathbf{C}(\mathbf{u}) + A_{\mathbf{uu}} \mathbf{u} + A_{\mathbf{up}} p &= \mathbf{r} \\ \varepsilon M \frac{dp}{dt} + A_{p\mathbf{u}} \mathbf{u} &= 0\end{aligned}$$

- Com essa modificação, agora é possível experimentar muitas discretizações temporais, até a totalmente explícita

$$\begin{aligned}M \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{C}(\mathbf{u}^n) + A_{\mathbf{uu}} \mathbf{u}^n + A_{\mathbf{up}} p^n &= \mathbf{r}^n \\ \varepsilon M \frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} + A_{p\mathbf{u}} \mathbf{u}^n &= 0\end{aligned}$$

mas a compressibilidade introduz uma “velocidade numérica do som” que tende a $+\infty$ quando $\varepsilon \rightarrow 0$ e reduz severamente o Δt de estabilidade.

Método de projeção de Chorin

- Sem modificar o sistema original, A. Chorin propôs, em 1967, um método cujas variantes continuam sendo bastante populares. Vamos descrever a variante mais simples e do ponto de vista algébrico, por simplicidade.
- Já que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ para todo tempo, certamente $\nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = 0$. A EDA pode por tanto ser re-escrita como

$$\begin{aligned} M \frac{d\mathbf{u}}{dt} + A_{\mathbf{u}p} p &= \mathbf{r} - \mathbf{C}(\mathbf{u}) - A_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \mathbf{u} \\ A_{p\mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= 0 \end{aligned}$$

e interpretada como "determinar $d\mathbf{u}/dt$ e p tais que $A_{p\mathbf{u}} d\mathbf{u}/dt = 0$, cumprindo também a equação de momento".

- Esse é um típico **problema misto**, no qual a pressão p é o **multiplicador de Lagrange** da restrição $A_{p\mathbf{u}} d\mathbf{u}/dt = 0$.
- Como regra geral, os multiplicadores de Lagrange **não podem** ser tratados de maneira **explícita** no tempo (atrasados).

- O seguinte passo é substituir du/dt da equação de momento, para obter uma equação que liga p e $\mathbf{u}$,

$$\underbrace{(A_{pu}M^{-1}A_{up})}_L p = A_{pu} \underbrace{M^{-1}((\mathbf{r} - \mathbf{C}(\mathbf{u}) - A_{uu}\mathbf{u}))}_{\mathbf{v}^*}$$

- Sendo que a matriz A_{pu} discretiza o operador $\text{div} = \nabla \cdot$ e a matriz A_{up} discretiza $\text{grad} = \nabla$, é fácil ver que Lp aproxima o laplaciano da pressão,

$$Lp \simeq \nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla p = \frac{1}{\rho} \nabla^2 p.$$

- Com ajuda do campo auxiliar $\hat{\mathbf{u}}^{n+1}$ definido como

$$\hat{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{v}^*(\mathbf{u}^n)$$

e substituindo nas expressões anteriores resulta o método **desacoplado**

$$\begin{aligned} M \frac{\hat{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= \mathbf{r}^n - \mathbf{C}(\mathbf{u}^n) - A_{uu} \mathbf{u}^n \\ L p^{n+1} &= \frac{1}{\Delta t} A_{pu} \hat{\mathbf{u}}^{n+1} \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \hat{\mathbf{u}}^{n+1} - \Delta t M^{-1} A_{up} p^{n+1} \end{aligned}$$

Notas finais desse capítulo

- Além dos métodos **acoplado** (linearizado ou não), de **compressibilidade artificial** e de **projeção** existem vários outros métodos de discretização das equações de Navier-Stokes.
- Os códigos Fluent e OpenFOAM, entre outros, constroem uma **equação algébrica para a pressão** a partir da equação de momento **já discretizada**. O resto é parecido com o método de Chorin, tecnicismos à parte. Os métodos são chamados de SIMPLE, SIMPLER, PISO, etc.
- Existem métodos que permitem utilizar **malhas colocadas** (mesmos nós para $\mathbf{u}$ e p), mas é necessário usar **interpolações especiais** para evitar oscilações espúrias da pressão.
- Com a velocidade discreta calculada, é possível **transportar** quantidades físicas como temperatura, concentração de solutos, etc., para aproximar **problemas multifísica**.