EDUARDO HWANG

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS: UMA IMPLEMENTAÇÃO COM O MÉTODO PETROV-GALERKIN

São Paulo 2008

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

EDUARDO HWANG

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS: UMA IMPLEMENTAÇÃO COM O MÉTODO PETROV-GALERKIN

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Mestre em Engenharia.

São Paulo 2008

EDUARDO HWANG

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS: UMA IMPLEMENTAÇÃO COM O MÉTODO PETROV-GALERKIN

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Saltara

São Paulo 2008

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.
São Paulo, de abril de 2008.
Assinatura do autor Educido Ananz
Assinatura do orientador Falio Saltaca

FICHA CATALOGRÁFICA

Hwang, Eduardo Simulação numérica de escoamentos : uma implementação com o método Petrov-Galerkin / E. Hwang. -- ed.rev. -- São Paulo, 2008. p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica. 1. Escoamento (Simulação numérica) 2. Método Petrov-Galerkin I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II. t.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho aos meus pais,

Rong e Helena,

à minha esposa Carolina,

e ao filho que estamos esperando.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Fábio Saltara, por ter acreditado em mim quando eu mais precisei.

Agradeço a todos os colegas do NDF, que de alguma forma me ajudaram a concluir este trabalho, seja tecnicamente, ou apenas pela boa companhia.

Agradeço a minha família e aos meus amigos, pelo apoio e compreensão nos momentos de dificuldade.

"I was curious. Since I'm not a cat, that's not dangerous."

- Insensitive (House, 3rd Season)

RESUMO

O método SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin") é analisado quanto a sua capacidade de estabilizar oscilações numéricas decorrentes de escoamentos convectivo-difusivos, e de manter a consistência nos resultados. Para esta finalidade, é elaborado um programa computacional como uma implementação algorítmica do método, e simulado o escoamento sobre um cilindro fixo a diferentes números de Reynolds. Ao final, é feita uma revelação sobre a solidez do método. Palavras-chave: escoamento, simulação numérica, método Petrov-Galerkin.

ABSTRACT

The "Streamline Upwind Petrov-Galerkin" method (SUPG) is analyzed with regard to its capability to stabilize numerical oscillations caused by convective-diffusive flows, and to maintain consistency in the results. To this aim, a computational program is elaborated as an algorithmic implementation of the method, and simulated the flow around a fixed cylinder at different Reynolds numbers. At the end, a revelation is made on the method's robustness. Keywords: flow, numerical simulation, Petrov-Galerkin method.

SUMÁRIO

RESUMO	
ABSTRACT	
SUMÁRIO	
LISTA DE FIGURAS	
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
3. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	5
3.1 Sistemas Lineares e Problemas Convectivo-Difusivos	6
3.2 Formulação do Método SUPG em Elementos Finitos	8
3.3 Coeficiente de Estabilização SUPG	9
3.4 Acoplamento Pressão-Velocidade no Escoamento Incompressív	el12
3.5 Resolução no Domínio do Tempo, Forma e Resolução das Matri	zes 16
3.6 Montagem de Matrizes	19
3.7 Especificação das Condições de Contorno	20
4. ESTUDO DE CASO – ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO F	IXO 21
4.1 Malha Computacional	21
4.2 Parâmetros Adimensionais	23
4.3 Integração dos Coeficientes Cd e Cl	24
4.4 Resultados	25
5. CONCLUSÃO	47
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	
APÊNDICE 01 – Detalhes da Implementação	55
APÊNDICE 02 – Extensão SUPG para Captura de Descontinuidades	73

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 01 – Função de Forma Petrov-Galerkin/SUPG	7
FIGURA 01A – Escala de Tempo Alfa/CBS	10
FIGURA 02 – Problema do Ponto de Sela	12
FIGURA 03 – Dimensões e discretização da malha	21
FIGURA 04 – Discretização próxima ao cilindro fixo	22
FIGURA 05 – Discretização do início da esteira de vórtices	22
FIGURA 06 – Malha Completa	22
FIGURA 07 – Petrov-Galerkin – Re 200 – Detalhe dos Campos de Vorticid Pressão	ade e 25
FIGURAS FP e FG - Campos de Vorticidade e Pressão, Re 60 a Re 26	9 1E6 a 40
FIGURA P e G – Séries Temporais de CI e Cd, Re 60 a Re 27	1E6 a 41
FIGURA SR01 – Extraída de WILLIAMSON e BROWN (1998) e compleme com resultados das simulações – Strouhal versus Reynolds, Re 40-180	entada 42
FIGURA SR02 – Extraída de WILLIAMSON e BROWN (1998) – Strouhal v Reynolds, Re 0-1200	/ersus 43
FIGURA FGE – Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão, ins iniciais – Padrões de oscilação numérica45	tantes 5 e 46

1. INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos Finitos é um método numérico com inúmeras aplicações em Mecânica Estrutural, Transferência de Calor e Eletromagnetismo.

Sendo elegante e robusto, ganhou popularidade pela possibilidade de simular domínios irregulares, que podem hoje ser facilmente discretizados via Triangulação de Delaunay, em detrimento por exemplo, de métodos como diferenças finitas.

Pela gama de disciplinas que podem ser tratadas através do Método dos Elementos Finitos, é interessante a possibilidade de desenvolver uma implementação integrada sob os diversos aspectos físicos. No entanto, uma fronteira apenas recentemente explorada tem sido a aplicação dos Elementos Finitos a problemas da Dinâmica dos Fluidos.

Muito disso deve-se à dificuldade de estabilização de sistemas de equações em problemas convectivo dominantes.

O Método dos Volumes Finitos é a ferramenta clássica para tratar da Dinâmica dos Fluidos Computacional, e o faz com sucesso, através de funções de interpolação para convecção/difusão no cálculo de fluxos entre células.

O presente trabalho apresenta uma implementação do Método dos Elementos Finitos, com a utilização do método SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin"); uma forma de incluir naturalmente nos Elementos Finitos, a estabilização procurada.

O objetivo é estudar a performance do método nesta implementação, e sua consistência num estudo de caso clássico.

Estrutura da Apresentação

Primeiramente é apresentado o Método dos Elementos Finitos, que é a base teórica na qual serão incorporados os demais métodos de resolução relacionados à Dinâmica dos Fluidos Computacional.

Detalha-se então a formulação matemática SUPG utilizada no simulador, com o tratamento do acoplamento pressão-velocidade através do FSM ("Fractional-Step Method"), e a forma de imposição das condições de contorno.

O estudo de caso é o escoamento sobre cilindro fixo para números de Reynolds selecionados, onde é apresentada a malha computacional empregada, os resultados gráficos, as séries temporais dos coeficientes de sustentação e arrasto e a comparação destes com a experimentação.

Ao final, uma consideração adicional sobre a robustez do método para estabilizar a resolução numérica.

Contribuição

Este trabalho não é apenas uma tentativa de análise do método de Petrov-Galerkin, mas também se destina a ser um guia para todos aqueles que desejam uma breve introdução ao método dos elementos finitos e aos tópicos básicos relacionados da Dinâmica dos Fluidos Computacional.

Além da familiarização do leitor com tópicos como interpolação, matrizes de rigidez e massa, difusão-numérica, acoplamento pressão-velocidade, estabilização (dominância diagonal), integração no tempo e aplicação de condições de contorno; o trabalho e seu código-fonte são uma compilação de técnicas necessárias para montar e resolver eficientemente os problemas de elementos finitos.

São também explicados pontos que representam significativas oportunidades de otimização da velocidade e organização do programa.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O método desenvolvido por BROOKS e HUGHES (1982) é chamado de Petrov-Galerkin, uma denominação que recebem os métodos de elementos finitos, cujas funções de ponderação não coincidem com as funções de forma para os termos da equação. O subtipo "Streamline Upwind" é bastante pesquisado e possui variadas aplicações em problemas convectivo-difusivos.

São exemplos de aplicações: escoamentos compressíveis (BONHAUS, 1998), (LE BEAU; TEZDUYAR, 1991), (CATABRIGA; COUTINHO; TEZDUYAR, 2006), dinâmica costeira (CARBONEL; GALEÃO), escoamentos bifásicos (SILVA; COUTINHO; PARSONS), dispersão de poluentes e contaminantes (VÁSQUEZ; MEYER, 2005), (MURCIA; LACAZ, 2002), (OLIVEIRA; MEYER, 2006), escoamento confinado com separação (TEZDUYAR; KALRO, 1995), estudo de estabilidade de escoamentos viscoplásticos (BAAIJENS; HULSEN; ANDERSON, 2004), eletromagnetismo (DELIÉGE, 2003) e telecomunicações (QUEIROZ et al, 2006).

Na formulação desenvolvida por BROOKS e HUGHES (1982) a função de ponderação é composta pela função de forma, acrescida de um termo convectivo. Este último é modulado por um coeficiente dependente do número de Peclet no elemento discretizado.

Uma vez desenvolvidas algebricamente, as expressões se simplificam para as formas típicas derivadas a partir do método de Galerkin para os elementos finitos, porém acrescidas de um novo termo originado do termo convectivo presente na função peso.

O termo adicional assemelha-se a uma difusão adicional, atuante na direção do escoamento, e age localmente em cada elemento.

Fato este, que estabiliza a resolução numérica iterativa dos sistemas lineares, sem no entanto provocar uma dissolução da solução de problemas convectivodominantes.

A elegância do método SUPG reside na sua relativa simplicidade. No presente trabalho, a implementação é feita sobre elementos finitos lineares

(triângulos), porém há frentes de pesquisa que decompõem o escoamento como problemas auxiliares do tipo Oseen (BRAACK et al., 2007) para alcançar níveis ainda melhores de estabilidade.

Há usos simples e ainda assim bem sucedidos de métodos do tipo SUPG, adaptados especificamente para captar descontinuidades, tais como CAU ("Consistent Approximate Upwind"), (GALEÃO; CARMO, 1988), GLS ("Galerkin Least Squares") (MITTAL et al. 1991), e MLPG ("Meshless Local Petrov-Galerkin") (LIN; ATLURI, 2000), entre outros.

Outro método freqüentemente associado ao SUPG é o PSPG ("Pressure Stabilization Petrov-Galerkin"), cujo foco é estabilizar a resolução do acoplamento pressão-velocidade, encontrado em problemas de escoamento incompressível, quando a ordem de interpolação dos elementos utilizados é a mesma para a pressão e para a velocidade. Esta é uma medida cautelar para evitar a não convergência postulada pela condição de Babuska-Brezzi. Um estudo mais detalhado pode ser encontrado em (MITTAL; TEZDUYAR, 1992) e (TEZDUYAR et al., 1992).

BLASCO, CODINA e HUERTA (1998) empregam o FSM ("Fractional-Step Method") em conjunto com o método SUPG. Em seu artigo, não há indicações de que houvesse sido utilizado o PSPG. Aliás, ao longo do texto, a resolução FSM apresenta justificativas de teor matemático para a satisfação da condição de Babuska-Brezzi. Em (CODINA et al.; 2001) pode ser encontrada uma outra variante de resolução, ainda no método de projeções.

A condição de Babuska-Brezzi é um formalismo matemático da condição prevista por PATANKAR (1980) da incoerência na aproximação do gradiente de pressão, quando a malha computacional comporta o arranjo co-localizado da pressão e da velocidade.

3. MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O método dos Elementos Finitos é um método de resolução de problemas bastante difundido e encontra sua aplicação nas mais diversas áreas da engenharia.

O crescimento exponencial da capacidade de computação, aliado à possibilidade de discretizar domínios bastante complexos, tornou viável a resolução de problemas físicos antes fora de alcance.

Assim como outros métodos, o método dos elementos finitos consiste em discretizar um domínio físico em elementos de formas geométricas simples (ex: triangularização); escrever as equações do problema para cada elemento, e agrupálas de modo a obter um sistema linear que represente o sistema como um todo.

Por exemplo, num problema puramente estrutural estático, o sistema linear é composto de uma matriz de Rigidez, representando o sistema físico; e um vetor de carga, como os esforços impostos a este sistema.

O que difere os elementos finitos de outras técnicas, é a relaxação de equações diferenciais, na forma de uma integral ponderada.

Para tal, há a chamada função peso, que modula o erro de aproximação dentro de um elemento, ou seja, permite priorizar a eliminação do erro de uma região em relação a outra, dentro dos limites de um elemento; e a função de forma, que corresponde à forma funcional, em coordenadas espaciais, da solução esperada.

A resolução do sistema linear permite calcular os parâmetros da função de forma, e assim determinar qual a aproximação (daquela forma funcional) que apresenta erro mínimo quando aplicado àquela equação diferencial.

O método de ponderação mais difundido é método de Galerkin, no qual a função peso e a de forma são a mesma função. Todavia, esta não é a melhor forma de abordar problemas convectivo-difusivos.

3.1 Sistemas Lineares e Problemas Convectivo-Difusivos

Problemas de interesse da Engenharia freqüentemente requerem a montagem de enormes matrizes esparsas, para as quais o escalonamento de Gauss e a decomposição LU são demasiadamente custosos computacionalmente (em velocidade e memória) pela quantidade de preenchimentos adicionais na matriz.

Posto assim, restam os métodos iterativos do Subespaço de Krylov: PCG ("Preconditioned Conjugate Gradient"), GMRes ("Generalized Minimum Residual"), BiCGSTAB("Biconjugate Gradients Stabilized"); e outros baseados no paradigma "Multigrid" (utilização de mais de uma malha para filtrar diferentes freqüências espaciais do erro).

Voltando ao aspecto físico: as equações de transporte de calor e espécies químicas possuem um termo não-linear inerente à convecção, tal como na equação de Navier-Stokes, com o transporte de quantidade de movimento (Eq.1).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \cdot \nabla^2 u$$
(1)
$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial v}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \cdot \nabla^2 v$$

A convecção é problemática quando aproximada como linear (esquema de diferenças centrais), tanto sendo colocada de forma implícita (na matriz de Rigidez), quanto na forma explícita (no vetor de carga).

A presença dela numa malha pouco refinada, prejudica a estabilidade e a convergência, senão inviabilizando a resolução iterativa dos sistemas lineares.

Na busca de estabilizar a resolução por estes métodos, apareceram variadas abordagens do tipo "upwind", que incluem uma difusão artificial na tentativa de melhorar a dominância diagonal das matrizes.

Esta medida provoca uma deterioração da solução, suavizando-a excessivamente nas direções perpendiculares ao escoamento. Este problema vem sendo contornado, dentre outras maneiras, pela formulação denominada SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin").

A diferença básica entre o método tradicional de Galerkin e este método Petrov-Galerkin está em como é são ponderados os valores dos nodos do elemento, dada uma determinada direção de escoamento/convecção (ver Fig.01).



FIGURA 01 – Alteração provocada pelo termo extra no caso unidimensional. A função peso tenderá mais para um dos lados, tanto maior for o número de Peclet/Reynolds do elemento (para a definição do número de Peclet, ver Apêndice 01).

3.2 Formulação do Método SUPG em Elementos Finitos

Iniciando as deduções pelo termo viscoso (Laplaciano) da equação de Navier-Stokes para um escoamento incompressível: o termo viscoso é integrado dentro de cada elemento, ponderado pela função peso w_k.

$$\int \mathbf{w}_{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} (v \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}}) \cdot \mathbf{d} \Omega = \underbrace{\int \mathbf{w}_{k} \cdot v \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \Gamma_{j}}_{Integral \ de \ Contorno} - \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{n}_{k}}{\partial \mathbf{x}_{l}} \cdot v \cdot \delta_{jl} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \Omega}_{Matriz \ de \ Rigidez \ - \ Termo \ Difusivo}} (2)$$

Ao integrar por partes, surge uma integral de contorno (Eq.02).

No interior do domínio, ela pode ser considerada como um erro de discretização da malha, já que para elementos próximos em áreas suficientemente refinadas, o gradiente das propriedades é praticamente nulo.

Para regiões de fronteira, esta integral de contorno é utilizada para expressar condição de contorno de Neumann, ou fluxo prescrito.

Também é obtida a matriz de Rigidez do termo Difusivo. Ela é uma contração (produto) de dois gradientes, e resulta numa matriz simétrica.

$$\boldsymbol{w}_{k} = \boldsymbol{n}_{k} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{v}_{j} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{n}_{k}}{\partial \boldsymbol{x}_{j}}$$
(3)

Para a simplificação do termo convectivo, procede-se expandindo a função peso w_k (Eq.03) dentro da integral (Eq.04). Aparecendo daí o termo convectivo usual, que seria encontrado na formulação de Galerkin pura, e um termo adicional, bastante semelhante ao termo da difusão.

$$\int \mathbf{w}_{k} \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \,\Omega = \underbrace{\int \mathbf{n}_{k} \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{n}_{k}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \,\Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}} \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{v}_{i}}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{j}} \cdot \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i} \cdot \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{v}_{i}} \cdot \mathbf{v}_{i}}$$

Hughes então nos apresenta o termo estabilizante do SUPG, com uma escala de tempo (letra grega alfa) para manter consistência dimensional.

3.3 Coeficiente de Estabilização SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin")

O coeficiente de estabilização SUPG é uma escala de tempo (HUGHES, 1987) e quantifica a difusão adicional para melhorar a dominância diagonal do problema. Seu valor é dependente do número de Peclet no elemento de cálculo e possui uma forma suave com a variação do mesmo (Eq.05).

$$\alpha = \frac{1}{2 \cdot V} \cdot (\coth(Pe) - \frac{1}{Pe})$$
(5)

Pe é o número de Peclet do elemento, V é a velocidade média dentro do elemento, e o comprimento L (minúsculo) é a escala de comprimento do elemento, que pode ser arbitrada para elementos não quadrados.

Trata-se de uma forma análoga à interpolação exponencial dos Volumes Finitos (MALISKA, 1995), porém pelo fato de ser incorporada diretamente na função peso dos elementos finitos, a técnica SUPG mantém sua consistência no problema de minimização do erro integral, e supera seus parentes aproximados nos Volumes Finitos, SUDS e SWUDS ("Skew Weighted Upstream Differencing Schemes") (MALISKA, 1995) que ainda necessitam de um cálculo para determinar a direção exata da interpolação exponencial e computar suas projeções nas faces dos volumes.

No Método dos Volumes Finitos, procedimentos SUDS e SWUDS são considerados caros e rendem instabilidades. Por esta razão, é comum tratar as direções x, y e z como totalmente independentes, com um número de Peclet para cada.



FIGURA 01A – Extraída de ZIENKIEWICZ (2000) – Escala de tempo alfa (CBS), em função do número de Peclet.

SUPG possui similares dentro do próprio Método dos Elementos Finitos. Um deles é o CBS ("Characteristic Based Split Method"), cuja idéia é deformar a malha de cálculo de modo que o termo convectivo seja igual a zero, e no passo de tempo seguinte reiniciar o referencial da malha. Na figura 01A, é mostrada a escala de tempo alfa ótima para CBS.

O caráter exponencial de todos os interpolantes listados nesta seção é originário de uma equação diferencial de primeira ordem, em que a velocidade da derivada convectiva é linearizada. Um lado da equação corresponde à convecção e possui derivada de primeira ordem, o outro lado corresponde à difusão e possui

derivada de segunda ordem. A solução trivial para esta equação convecção-difusão simplificada é uma exponencial do número de Peclet da célula.

As interpolações exponenciais são definidas utilizando apenas componentes dentro de um mesmo volume de cálculo (nodos e faces), e por isso não são capazes de capturar descontinuidades entre elementos.

Para contornar este problema, surgiram outros interpolantes para Volumes Finitos: QUICK ("Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics"), perfil quadrático de interpolação entre células; e MUSCL ("Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws"), um esquema de reconstrução de estados, que considera não apenas valores de volumes finitos vizinhos, mas também seus valores e fluxos em passos de tempo anteriores.

MUSCL é capaz de resolver com sucesso, problemas com severas descontinuidades, por isto é categorizado como alta ordem. A desvantagem de QUICK e MUSCL é que são difíceis de serem implementados em malhas não estruturadas. Aparentemente há um desencontro nas terminologias utilizadas, pois adeptos dos Volumes Finitos conferem o selo "alta ordem" à capacidade de resolver descontinuidades (e nesta óptica os esquemas exponenciais são de baixa ordem).

Já HUGHES (1987) apresenta SUPG sendo de "alta ordem", porém linear.

Do lado dos Elementos Finitos, as frentes de pesquisa se concentram em fortificar métodos Petrov-Galerkin/SUPG com características não-lineares, tornandoos robustos suficientemente para competir com MUSCL (ver Apêndice 02), e formalmente apresentando-os como operadores de captura de descontinuidade.

Variados artigos além dos citados neste trabalho, versam sobre a qualidade de baixíssima dispersão do SUPG em experimentos numéricos, como o da convecção de gradientes em degraus ao longo de malhas de teste (DELIÉGE, 2003).

O SUPG possui tanto sua precisão, quanto sua estabilidade, analizados em diferentes fontes (TEZDUYAR; SATHE, 2003), (TEZDUYAR et al., 1992), (MITTAL et al., 1991), (DELIÉGE, 2003), (CATABRIGA; COUTINHO; ALMEIDA, 1999).

3.4 Acoplamento Pressão-Velocidade no Escoamento Incompressível

Babuska-Brezzi

A condição de Babuska-Brezzi (Eq.05a e 05b) é uma restrição a ser verificada entre os espaços funcionais das possíveis soluções de pressão e velocidade, cujo teste nos informa acerca da estabilidade (ou instabilidade) de diferentes abordagens de interpolação e resolução do acoplamento pressão-velocidade.

$$\inf_{q \in Q_h} \sup_{v \in V_h} \frac{(\nabla \cdot v, q)}{\|v\|_{V_h} \|q\|_{Q_h}} \ge \gamma > 0.$$
(5a)

Condição de Babuska-Brezzi, v e q são soluções de velocidade e pressão.

Sua descrição matemática mais usual é o problema de ponto de sela ("saddle-point problem", "Inf-Sup" ou mínimo dos máximos, Fig.02), no qual se procura o maximo de uma função ao longo de um eixo, e o mínimo desta mesma função num outro eixo:

Sejam Vh e Qh (Eq.05a) os espaços funcionais de todos os campos de velocidade e de pressão, possíveis de se obter dada uma determinada interpolação no método dos elementos finitos, com escala de discretização h.



FIGURA 02 – Problema do Ponto de Sela ("Saddle Point Problem").

Os pareamentos de cada solução dos campos de velocidade e pressão resultarão em diferentes resíduos das equações de Navier-Stokes e da continuidade.

Diferentes métodos de resolução do acoplamento pressão-velocidade visam (dentro de suas limitações) obter o melhor pareamento de soluções para os respectivos campos, correspondendo à busca do máximo desempenho, ou seja: igual ao melhor campo de velocidades para um dado campo de pressão e vice-versa.

Pois bem, para todos os pares de performance ótima, procura-se o par pressão-velocidade que apresentará menores resíduos na resolução dos sistemas de equações; correspondendo ao ponto de mínimo, que se apresenta ao longo da linha de melhores soluções possíveis de se obter.

A verificação da condição de Babuska-Brezzi é um produto bilinear das soluções de pressão e velocidade, em que participa a matriz de rigidez (operador divergência).

Caso o valor deste produto normalizado (dentro dos problemas de máximos e mínimos) seja maior que um valor finito, a condição estabelece um limite máximo para o resíduo combinado dos sistemas lineares.

$$\|u - u_h\|_1 + \|p - p_h\|_0 \le Ch^k \|u\|_{k+1} + Dh^{\ell+1} \|p\|_{\ell+1}$$
(5b)

Estimador de Erro Máximo da Condição de Babuska-Brezzi

Na equação do estimador de erro máximo (Eq.05b), u e p são velocidade e pressão reais, uh e ph são as soluções ótimas nos espaços funcionais do elemento pesquisado (e escala discretização h); k e l são os graus respectivos dos polinômios de interpolação, e C e D são constantes.

Nas aplicações de elementos finitos, isto resulta na possibilidade (ou não) de utilização de diferentes combinações de interpoladores para a pressão e para a velocidade. Respeitando a consistência física da análise de Patankar, tipicamente

tem-se: apenas arranjos em que a velocidade possui interpolador de ordem superior à pressão são (ou pelo menos deveriam ser) estáveis.

O FSM ("Fractional-Step Method") pode ser visto como um método de resolução em linha, tratando uma dimensão independente por vez, com propriedades de convergência superiores a métodos como o de Compressibilidade Artificial; este segundo como um problema de otimização com multiplicadores de Lagrange, que possui a desvantagem de lidar com um número que tende a zero e é divisor de expressões.

Há motivos intuitivos, porém nem um pouco rigorosos, mas que permitem aceitar a não ocorrência de instabilidades previstas pela condição de Babuska-Brezzi.

O primeiro é que a malha computacional empregada é bastante refinada nas regiões com altos gradientes. Sabe-se que esta medida reduz o erro de discretização, e também a incoerência na aproximação dos gradientes de pressão prevista por PATANKAR (1980).

O segundo motivo é que a malha é não-estruturada, e não-uniforme quanto à forma e ao tamanho dos elementos; e acrescente-se o fato do problema em análise possuir separação de escoamento e evoluir no tempo. As chances de aparecer um padrão persistente do tipo xadrez, na pressão e na velocidade são bastante remotas.

Por último, mas não menos importante, deve ser considerada a natureza do FSM ("Fractional-Step Method"). Sendo uma técnica de projeção no espaço de divergência nulo, pode executada em passos distintos sem efetuar iterações, ao contrário de SIMPLE, SIMPLEC, PRIME e outros.

O procedimento de acumular os resíduos de continuidade na equação de Navier-Stokes, e resolver uma equação de Poisson, não implica em nenhum outro cálculo iterativo a partir do campo de velocidades atualizado. Eventuais imprecisões são transportadas para o passo de tempo seguinte, sem provocar uma ciclagem instável entre atualizações dos campos de pressão e velocidade.

$$\rho \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{t}}{\partial t} = -\rho \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \mu \cdot \frac{\partial^{2} \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}^{2}}$$

$$\rho \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{t+\Delta t}}{\partial t} = -\rho \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \mu \cdot \frac{\partial^{2} \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}^{2}} - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}_{i}}$$
(6)

As duas fórmulas anteriores (Eq.06) são obtidas a partir da equação de Navier-Stokes: a primeira escrita para o instante de tempo atual, desprezando-se o gradiente de pressão; e a segunda para o próximo passo de tempo.

Pode-se derivá-las em relação a x_i; resultando a soma numa fórmula com uma sub-expressão da equação de continuidade (divergência do campo de velocidades igual a zero). Após a simplificação (retirada da sub-expressão que vale zero), obtém-se a equação de Poisson a seguir (Eq.07 e 08):

$$\frac{\partial^{2} \boldsymbol{p}}{\partial \boldsymbol{x}_{i}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_{i}} \left(\underbrace{-\rho \cdot \boldsymbol{v}_{j} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_{i}}{\partial \boldsymbol{x}_{j}} + \mu \cdot \frac{\partial^{2} \boldsymbol{v}_{i}}{\partial \boldsymbol{x}_{j}^{2}}}_{\boldsymbol{d} \boldsymbol{v}_{i} + \boldsymbol{v}_{i}^{\prime}} \right)$$
(7)

Que também pode ser escrita como:

$$\nabla^{2} p = -2 \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$
(8)

Esta última equação é utilizada em conjunto com as condições de contorno, para determinar o campo de pressão do próximo passo de tempo. O campo de velocidades previamente calculado recebe uma correção deste novo campo de pressão para satisfazer a equação de continuidade (Eq.09).

$$\boldsymbol{v}_{i}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{v}_{i}^{t} + \Delta \, \boldsymbol{v}_{i}^{\star} - \frac{\partial \, \boldsymbol{p}}{\partial \, \boldsymbol{x}_{i}} \tag{9}$$

3.5 Resolução no Domínio do Tempo, Forma e Resolução das Matrizes

SIQUEIRA (1999), cuja implementação FSM inspirou o presente trabalho, tratou o termo convectivo explicitamente, adotando o método de Adams-Bashforth.

O tratamento explícito do termo convectivo tem suas vantagens; a principal sendo o fato de as matrizes permanecerem simétricas. Isto permite a utilização do método dos Gradientes Conjugados, de excelente convergência em pouquíssimas iterações, quando associado a algum pré-condicionador.

Inicialmente, esta foi a mesma metodologia aqui adotada, porém limitações significativas quanto ao passo de tempo utilizado, deixaram a desejar.

BOGAERTS, DEGREZ e RAZAFINDRAKOTO (1998) detalharam melhor as duas outras possibilidades: implícita e semi-implícita, ao detalhe da composição de matrizes, que varia de um esquema de integração para outro.

A implementação computacional deste trabalho foi então realizada de forma semi-implícita com o esquema de Crank-Nicholson, para os termos difusivo e convectivo, obtendo precisão de segunda ordem com relação ao tempo.

Para avançar o campo de velocidades no tempo, inclui-se a matriz de Massa a seguir (Eq.10):

$$\boldsymbol{M} = \int \boldsymbol{w}_{k} \cdot \boldsymbol{w}_{i} \cdot \boldsymbol{d} \ \Omega = \int \boldsymbol{n}_{k} \cdot \boldsymbol{n}_{i} \cdot \boldsymbol{d} \ \Omega$$
(10)

A parte convectiva da função peso é desprezada nesta integral, e utiliza-se a mesma matriz de Massa decorrente da formulação de Galerkin pura (Eq.11).

$$\frac{M}{\Delta t} \cdot \Delta \mathbf{v}_i = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_i$$
(11)

Pelo fato de o simulador utilizar o FSM ("Fractional-Step Method"), os campos de velocidade e de pressão são calculados independentemente. Assim, numa primeira rodada, os campos de velocidade são resolvidos sem o termo de gradiente de pressão.

A matriz de massa multiplicada pela variação da velocidade é a derivada parcial da velocidade com relação ao tempo. Enquanto que a matriz de Rigidez multiplicada pela velocidade atual corresponde agora aos termos de convecção e difusão no lado direito da equação.

O esquema selecionado para a integração no tempo é semi-implicito (Eq.12), do tipo Crank-Nicholson (theta igual a ¹/₂).

$$\boldsymbol{v}_{i} = \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{v}_{i}^{t+\Delta t} + (\boldsymbol{1} - \boldsymbol{\theta}) \cdot \boldsymbol{v}_{i}^{t}$$
$$\boldsymbol{v}_{i} = \boldsymbol{\theta} \cdot \Delta \boldsymbol{v}_{i} + \boldsymbol{v}_{i}^{t}$$
(12)

De posse destas expressões (Eq.12), com a equação de Navier-Stokes (Eq.11), forma-se a matriz Composta de Rigidez e Massa (Eq.13).

Primeiramente, a matriz de Rigidez é obtida somando-se as contribuições dos termos difusivo e convectivo. Após, é formada uma matriz Composta com as matrizes de Massa (consistente, não colapsada sobre a diagonal) e de Rigidez.

- -

$$\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \cdot \Delta \mathbf{v}_{i} = -\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\theta} \cdot \Delta \mathbf{v}_{i} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{i}^{t}$$

$$(\mathbf{M})_{i} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{i}^{t}$$

$$(\mathbf{M})_{i} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{i}^{t}$$

$$(\mathbf{M})_{i} = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{i}^{t}$$

Se o valor de theta for alternativamente igual a um (Eq.12), tem-se o avanço totalmente implícito, e para theta igual a zero, recupera-se o esquema explícito.

O vetor de carga é composto somente pelo produto da matriz de Rigidez e dos vetores velocidade x e y, devidamente descarregados quanto às condições de contorno impostas, na resolução de seus sistemas lineares respectivos (Eq.13).

Uma vez montadas as matrizes, que não possuem mais forma simétrica devido ao termo convectivo incorporado, é necessário buscar alternativas ao Gradiente Conjugado Pré-condicionado ("PCG"). As opções mais comuns são variações do PCG, como o GMRes ("Generalized Minimum Residual") e BiCGSTAB ("Biconjugate Gradients Stabilized").

O método CG ou PCG, é construído e classicamente interpretado como um problema de minimização de uma forma quadrática. A rápida convergência se deve à chamada minimização em linha, ou seja, os resíduos retirados do vetor solução são linearmente independentes a cada iteração. O grande artifício para assegurar esta independência é exatamente a qualidade de simetria da matriz.

O GMRes realiza custosas ortogonalizações sucessivas para a retirada de cada vetor resíduo em cada iteração do algoritmo, mas que garantem a minimização do resíduo. Já o BiCGSTAB, implementado neste trabalho, realiza uma contração da matriz sobre ela mesma, na tentativa de obter uma forma quasi-bilinear, recuperando a vantagem de uma matriz simétrica. Ambos estes dois últimos métodos possuem ampla aceitação e são bastante robustos.

O pré-condicionador DS ("Diagonal Scaling"), de fácil implementação e performance satisfatória foi associado ao BiCGSTAB neste trabalho.

3.6 Montagem de Matrizes

A montagem das matrizes é efetuada de acordo com o método de Rigidez Global ("Direct Stiffness Method"). A contribuição da matriz local de cada elemento é montada sobre a matriz global, considerando a numeração global dos nodos.

Esta montagem requer um mapeamento preciso e uma reordenação dos elementos da matriz, para que possa ser armazenada de um modo tratável para realizar as operações básicas como multiplicação de vetor por matriz.

A ordenação das matrizes (mapeamento mais reordenação) requer tempo computacional comparável ao da resolução das mesmas.

Para contornar este inconveniente, utiliza-se a estratégia de montar um vetor de permutação: dado que a topologia da matriz é a mesma em todos os instantes de tempo da simulação, o vetor de permutação é um mapeamento direto, realizado uma única vez e válido sempre.

As reordenações a cada nova formação de matriz, para novos instantes de tempo, processam-se a um custo muito baixo, proporcional ao número de posições da matriz.

O esquema de armazenamento adotado é o CRS ("Compressed Row Storage"). Após a reordenação descrita, uma rotina varre as cadeias de armazenamento CRS, juntando os valores pertencentes às posições sobrepostas na matriz global (ver Apêndice 01 para maiores detalhes).

3.7 Especificação das Condições de Contorno

A presença do campo ao longe é expressa na forma de uma condição de Dirichlet para as velocidades x e y, e para a pressão.

Para a parede do cilindro é imposta condição de velocidade nula, como condição de Dirichlet; juntamente com a condição de Neumann, du e dv (variações de velocidade) iguais a zero perpendicularmente à superfície do cilindro.

Esta segunda parte da condição de contorno é efetuada descarregando o vetor de carga e a matriz composta (rigidez e massa) na resolução de du e dv.

No sistema linear da equação de Poisson (Eq.07 e 08), também é realizado o descarregamento (pressão fixada pela condição de Dirichlet ao longe) do vetor de carga da pressão.

A condição ao longe, mas de jusante do cilindro, é realizada sem efetuar operação alguma. Pois o domínio computacional é extenso o suficiente para acomodar a esteira de vórtices até que dispersão da vorticidade resulte em gradientes mínimos entre elementos vizinhos.

4. ESTUDO DE CASO – ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO FIXO

O escoamento ao redor de um cilindro fixo é o problema tradicional para avaliar a robustez de um simulador de escoamento incompressível variável no tempo.

Os pontos de separação não possuem posição fixa sobre a superfície do cilindro, o que resulta num complexo padrão de separação, recirculação e cisalhamento na porção posterior do cilindro.

A evolução da esteira de vórtices, se reproduzida de modo realístico, é um bom indicativo da precisão espacial e da qualidade de integração no tempo.

4.1 Malha Computacional

A malha computacional utilizada (Fig.03, 04, 05 e 06) possui 172.998 elementos e 86.850 nodos. As condições de contorno perfazem 702 nodos, dos quais: 388 estabelecem a condição de escoamento ao longe, de escoamento não perturbado; 194 estão na região de saída da malha, após a esteira; e 120 estão sobre a superfície do cilindro.



FIGURA 03 – Dimensões e discretização da malha

A distribuição é realizada de forma a concentrar maior número de elementos sobre a superfície do cilindro e sobre a esteira de vórtices, para melhor resolução dos campos de pressão e vorticidade.



FIGURA 04 – Discretização próxima ao cilindro fixo



FIGURA 05 – Discretização do início da esteira de vórtices



FIGURA 06 – Malha Completa

4.2 Parâmetros Adimensionais

Os dois números adimensionais de interesse são: número Reynolds (Eq.14), que mede a razão das forças de inércia sobre as forças viscosas; e o de Strouhal (Eq.15), a freqüência adimensional de emissão de vórtices.

Os números de Reynolds selecionados vão Re 60 até Re 180~200, limite em que o escoamento se torna tridimensional.

$$Re = \frac{\rho U_{\infty} D}{\mu}$$
(14)

$$St = \frac{fD}{U_{\infty}}$$
(15)

São captados os coeficientes Cd (de Arrasto) e Cl (de Sustentação) para cada Número de Reynolds, de cujas séries temporais calcula-se o número de Strouhal.

Os valores obtidos do Número de Strouhal são comparados a seguir com os apresentados em WILLIAMSON e BROWN (1998).

4.3 Integração dos Coeficientes Cd e Cl

A cada passo de tempo, são levantados a pressão e a tensão de cisalhamento na superfície do cilindro (Eq.16).

$$\tau = -\mu \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{y}}\right)$$
(16)

A integração segue com a pressão sendo multiplicada pelos vetores normais em cada face e a tensão de cisalhamento pelos vetores tangentes, fornecendo assim os coeficientes (Eq.17) de arrasto (Cd) e sustentação (Cl).

$$C_{d} = \frac{F_{x}}{\frac{1}{2} \cdot \rho U^{2} D} \qquad C_{i} = \frac{F_{y}}{\frac{1}{2} \cdot \rho U^{2} D} \qquad (17)$$

Foram utilizados passos de UD/T = 0.1, ou aproximadamente 50 divisões para um período de emissão de vórtices igual a 10 e diâmetro do cilindro igual a 2.

A configuração utilizada: Intel Celeron M 430, 1.73GHz, 1GByte RAM.

O tempo médio aproximado: para um passo de tempo, varia de pouco menos de um segundo até dois segundos. O número médio de iterações de sistema linear é algo entre 3 e 20, tendendo mais para 20 quando aumentado o número de Reynolds.
4.4 Resultados



FIGURA 07 – Petrov-Galerkin – Re 200 – Detalhe dos Campos de Vorticidade e Pressão

As figuras FP e FG (Re 60 a 1E6) apresentam os campos de vorticidade e pressão, utilizando os métodos de Petrov-Galerkin e Galerkin, respectivamente. As intensidades das tonalidades são normalizadas com relação aos maiores valores encontrados no campo de escoamento (contraste). A ferramenta de visualização foi desenvolvida em biblioteca gráfica aberta "OpenGL", utilizando estrutura de classes e objetos semelhante à definida para o programa de simulação.



FIGURA FP60 – Petrov-Galerkin – Re 60 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG60 – Galerkin – Re 60 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Nas figuras FP60 e FP60, percebe-se uma diferença entre as linhas amarelas nos campos de pressão: em FP60, estas linhas nitidamente ligam as regiões de baixa pressão (e alta velocidade) dos vórtices; em FG60, o padrão é mais rebuscado e possui maior altura entre vórtices ao final da esteira. O método de Petrov-Galerkin utiliza uma adição de difusão, que embora colocado na direção da linha do escoamento, dispersa mais rapidamente a quantidade de movimento, e provoca a suavização apontada.



FIGURA P60 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 60.



FIGURA G60 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 60.

As figuras P60 e G60 apresentam CI e Cd (coeficientes de Arrasto e Sustentação) utilizando os métodos de ponderação de Petrov-Galerkin e Galerkin. Possível notar que a série obtida com Petrov-Galerkin é mais suave (decorrente da difusão adicionada na direção da linha de corrente) e também a amplitude de CI é ligeiramente reduzida em relação a Galerkin. A quantidade de ruído presente nos sinais obtidos com Galerkin é relacionada a oscilações numéricas, não presentes no escoamento real.



FIGURA FP80 – Petrov-Galerkin – Re 80 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG80 – Galerkin – Re 80 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Comparando-se as figuras FP80 e FG80 (azul, vorticidade), fica destacado o esmaecimento dos vórtices mais antigos no método Petrov-Galerkin, devido à maior difusão de quantidade de movimento. Na FG80, os arcos que ligam os vórtices horários e anti-horários sobresaem-se mais que na FP80.



FIGURA P80 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 80.



FIGURA G80 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 80.

Há concordância das figuras P60, G60 para P80 e G80, com aumento de amplitudes de CI e da freqüência de emissão de vórtices. Os aspectos das figuras obtidos com cada método mantém-se inalterados. Apesar da difusão adicionada pelo método de Petrov-Galerkin, a regularidade verificada em suas séries temporais é consistente com o "Vortex Shedding" (Emissão de Vórtices), que possui freqüência e amplitude bem definidos.



FIGURA FP100 – Petrov-Galerkin – Re 100 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG100 – Galerkin – Re 100 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Entre as figuras FP e FG100, há indicações de que os vórtices consecutivos estão mais densamente agrupados na aplicação do método de Galerkin, resultando numa maior freqüência de emissão que para Petrov-Galerkin. Isto será verificado a seguir, na plotagem dos números de Strouhal versus número de Reynolds.



FIGURA P100 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 100.



FIGURA G100 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 100.

Nas figuras P60-100 e G60-100, a oscilação de CI inicia-se num instante de tempo mais próximo da origem para o método de Galerkin, do que para o de Petrov-Galerkin. Este atraso de fase é relacionado ao amortecimento / difusão adicionada nas figuras P, para estabilização dos sistemas lineares. SIQUEIRA (1999) utilizou o método de Galerkin na faixa Re 100-200, obtendo curvas muito mais suaves de CI e Cd. No entanto, realizava passos de tempo muito menores (avanço explícito no tempo da parte convectiva), para manter os sistemas lineares simétricos (permitindo a aplicação do método dos gradientes conjugados clássico).



FIGURA FP120 – Petrov-Galerkin – Re 120 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG120 – Galerkin – Re 120 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Na FP120 as linhas que conectam dois vórtices consecutivos estão mais borradas, enquanto que na FG120, aparecem bem delineadas duas camadas cisalhantes ("shear layers"), devido à maior troca de quantidade de movimento por difusão ocasionado por Petrov-Galerkin. Sem maiores detalhes, os dois campos de escoamento são igualmente factíveis, porém, aquele que mais se aproxima da realidade será efetivamente indicado na curva de Strouhal versus Reynolds, e pela análise das séries temporais.



FIGURA P120 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 120.



FIGURA G120 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 120.

O espaçamento bastante regular nas figuras P60-120 indica que a freqüência de emissão de vórtices pode ser calculada com boa precisão, através da média dos períodos de CI, que corresponde à emissão alternada de vórtices nas laterais posteriores do cilindro. A freqüência de Cd (Arrasto) é exatamente o dobro da freqüência de CI. A figura G120 apresenta mesmo o comportamento das figuras G60-100 anteriores.



FIGURA FP140 – Petrov-Galerkin – Re 140 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG140 – Galerkin – Re 140 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Das figuras de escoamento apresentadas até o momento, FP e FG (de Re 60 até 140), as bordas dos vórtices estão mais pronunciadas e a velocidade emissão é maior (maior compactação de vórtices nas figuras); estes dois fatos diretamente relacionados ao aumento do transporte por convecção frente à difusão.



FIGURA P140 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 140.



FIGURA G140 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 140.

O aparente espaçamento entre picos na figura G140, comparado ao da figura P140, indica maior freqüência de oscilação no método Galerkin. As figuras G mostradas até o momento, apresentam alguns pontos do coeficiente CI (Sustentação) com valores (impróprios) bastante elevados, chegando ao ponto de ultrapassar a curva do Cd (coeficiente de Arrasto).



FIGURA FP160 – Petrov-Galerkin – Re 160 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG160 – Galerkin – Re 160 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

As linhas duplicadas (FG160, vorticidade), azuis e roxas ocorrem como a mistura física entre das vorticidades das duas camadas cisalhantes (que se desprendem dos pontos de separação de escoamento, e se deslocam sobre a superfície do cilindro). Ainda nos campos de vorticidade, há junto aos cilindros, bordas pontiagudas, que correspondem à interação alternada das camadas cisalhantes cortando uma à outra, causando o desprendimento de vórtices.



FIGURA P160 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 160.



FIGURA G160 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 160.

O mesmo padrão das figuras anteriores ocorre com as bandas do coeficiente Cd (Arrasto); uniforme nas situações onde foi aplicado Petrov-Galerkin e irregular Galerkin.

A despeito do ruído presente nos resultados pelo método de Galerkin, as bandas de variação de CI e Cd (filtrados os pontos "errantes") são bem definidas quanto às suas amplitudes.



FIGURA FP180 – Petrov-Galerkin – Re 180 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG180 – Galerkin – Re 180 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

Em todas as figuras das séries FP e FG, o ponto de estagnação (indicado em vermelho à frente dos cilindros, campo de pressão) é mais avermelhado nas figuras FP, em outras palavras: utilizar Petrov-Galerkin resulta em menores gradientes de pressão na esteira (quando normalizados em relação à pressão de estagnação), e aplicando Galerkin, os mesmos gradientes de pressão demoram mais a serem dissipados, podendo apresentar níveis altos na esteira (este último não necessariamente sendo mais realístico que o primeiro).



FIGURA P180 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 180.



FIGURA G180 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 180.

Nas figuras P60-180 e G60-180, do início da simulação até o instante em que a emissão de vórtices estabiliza sua amplitude de CI (coeficiente de Sustentação), Petrov-Galerkin requer mais passos de tempo e aumenta a amplitude mais gradualmente que Galerkin.



FIGURA FP200 – Petrov-Galerkin – Re 200– Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA FG200 – Galerkin – Re 200– Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).

A figura FG200 (vorticidade) apresenta linhas fantasmas, possivelmente indicação de oscilações numéricas em regiões de altos gradientes; ou uma alta definição na interação de "shear layers". Esta segunda possibilidade sendo um pouco otimista demais, visto que o mesmo não ocorre nas figuras anteriores. Para a malha computacional empregada e passo de tempo utilizado, o método de Galerkin está no limite de utilização (número de Reynolds 200).



FIGURA P200 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 200.



FIGURA G200 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Galerkin – Re 200.

Os mesmos comportamentos das figuras anteriores mantém-se nas figuras P200 e G200. Entre os números de Reynolds 180 e 200, ocorre uma transição do escoamento bidimensional para tridimensional, de modo que estes resultados (da modelagem e implementação 2D) já não são mais válidos.



FIGURA SR01 – Extraída de WILLIAMSON e BROWN (1998) e complementada com resultados das simulações – Strouhal versus Reynolds, Re 40-180.

Re	Williamson	Petrov-Galerkin	Galerkin
	& Brown		
	St	St	St
60	0.135	0.161	0.161
80	0.153	0.184	0.185
100	0.165	0.189	0.200
120	0.174	0.185	0.217
140	0.180	0.195	0.208
160	0.186	0.197	0.217
180	0.191	0.199	0.217

TABELA SR01 – Comparação de Strouhal versus Reynolds

A despeito da performance razoável do método Petrov-Galerkin na tabela SR01, a figura SR01 aponta que o algoritmo implementado não está isento de problemas.

Provavelmente existe um erro independente da função de forma utilizada, levando ambos os métodos, Galerkin e Petrov-Galerkin, a se distanciarem da curva experimental.

Esta falha faz com que a as simulações se processem a números de Reynolds superiores aos especificados, resultando em números de Strouhal mais elevados; esteiras de vórtices mais densas e estreitas e coeficiente de arrasto médio abaixo do valor correto (aproximadamente ~1.25 para Re 200).

Por outro lado, as séries de figuras P, G, FP e FG indicam claros benefícios na aplicação de estabilizações do tipo SUPG, ao manter a estabilidade numérica do algoritmo, preservando a solução física (ainda que ligeiramente suavizada).

Uma característica aproveitável é que a freqüência de "Vortex Shedding" não depende significativamente do número de Reynolds a partir de aproximadamente Re 1000 (ver Fig.SR02).

Junto ao fato da curva azul turquesa (Fig.SR01) se aproximar da curva experimental, isto abre a possibilidade de estender a implementação para três dimensões, continuando a estabilizar a convecção através de Petrov-Galerkin, e eventualmente calibrar / dosar a difusão direcional para um considerável domínio de problemas de engenharia.

No trabalho de SIQUEIRA (1999), o método de Galerkin havia sido aplicado com grande sucesso, acertando o número de Strouhal e o coeficiente de arrasto médio (Cd) para Re 200 e Re 100.



FIGURA SR02 – Extraída de WILLIAMSON e BROWN (1998) – Strouhal versus Reynolds, Re 0-1200.



FIGURA FP1E6 – Petrov-Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão – Tempo Adimensional 100 (ou tempo dimensional 200).



FIGURA P1E6 – Séries Temporais de CI e Cd (tempo dimensional), utilizando método de Petrov-Galerkin – Re 1E6.

Apesar do número de Reynolds bastante elevado (1E6), e a implementação se encontrar distante de seu domínio de validade; esta simulação (P1E6) foi realizada com o propósito de avaliar a robustez do método Petrov-Galerkin, que adiciona difusão ao escoamento na direção das linhas de corrente, para estabilizar a perda de dominância diagonal ocasionada pela convecção predominar sobre a difusão.

Neste caso, já não é mais possível simular utilizando-se o método de Galerkin (ver figuras FGE01 a 04), devido à amplificação de ruídos e instabilidade numérica

resultante, que requeririam um número proibitivo de células de cálculo para manter baixo o número de Peclet localmente a cada elemento.

Além do método Petrov-Galerkin viabilizar a simulação, ainda apresenta a emissão de vórtices com amplitude apreciável e freqüência regular. Mostrando que continua reproduzindo a física envolvida, sem descaracterizá-la pelo uso de difusão adicional.



FIGURA FGE01 – Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão, instantes iniciais – Padrões de oscilação numérica – tempo 0.1 adimensional .



FIGURA FGE02 – Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão, instantes iniciais – Padrões de oscilação numérica – tempo 0.2 adimensional .

Nas figuras FGE01 a 04, foram amplificados por contraste, as oscilações numéricas existentes, que em mais alguns passos de tempo inviabilizarão a simulação a alto número de Reynolds para o método de Galerkin na malha apresentada. Para FGE01, o campo de pressão ainda é suave, pois é o passo inicial da simulação, quando as condições de contorno impõem um alto gradiente de pressão.



FIGURA FGE03 – Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão, instantes iniciais – Padrões de oscilação numérica – tempo 0.3 adimensional .



FIGURA FGE04 – Galerkin – Re 1E6 – Campos de Vorticidade e Pressão, instantes iniciais – Padrões de oscilação numérica – tempo 0.4 adimensional .

De FGE02 em diante, com a sucessão de trocas de informação entre os campos de velocidade e pressão (pelo FSM – "Fractional-Step Method" no acoplamento pressão-velocidade), as oscilações tornam a aparecer com granularidade crescente nos campos de vorticidade e de pressão, revelando a forma como se propagam os erros numéricos.

5. CONCLUSÃO

O método Petrov-Galerkin, englobando SUPG ("Streamline Upwind Petrov-Galerkin") e suas variantes, deve ampliar a gama de problemas tratáveis pelo Método dos Elementos Finitos, permitindo-o tratar de problemas convectivo-difusivos com qualidade similar ao Método de Volumes Finitos.

Finalmente, há extensões relativamente simples do método SUPG (ver Apêndice 02), que permitem simular ondas de choque em escoamentos compressíveis, abrangendo um universo ainda maior de problemas.

Trabalhos Futuros

O trabalho aqui iniciado está longe de ser concluído. O problema no códigofonte deve ser investigado. Desta maneira, o programa poderá futuramente vir a ser estendido a três dimensões com elementos tetraédricos. De onde será viável proceder com estudos em modelos de turbulência e escoamentos compressíveis.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AVILEZ-VALENTE, P.; SEABRA-SANTOS, F.J. A Petrov-Galerkin Finite Element Method for a Fully Dispersive Weakly Nonlinear Water Wave Model. In: **WAVES '01**, San Francisco, CA.

BAAIJENS, F.P.T; HULSEN, M.A.; ANDERSON, P.D. The Use of Mixed Finite Element Methods for the Viscoelastic Fluid Flow Analysis. In: **Encyclopedia Of Computational Mechanics**. Ed: Stein, E.; Borst, R.; Hugues, T.J.R., v.3, Fluids, p.481-498. John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, 2004.

BARRET, R.; BERRY, M.; CHAN, T.F.; DEMMEL, J.; DONATO, J.; DONGARRA, J.; EIJKHOUT, V.; POZO, R.; ROMINE, C.; VAN DER VORST, H.. **Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods**, SIAM, 1994, Philadelphia, PA.

BERRONE, S.; BELLAVIA, S. A hybrid Newton-Krylov method for stabilized FEM discretization of Navier-Stokes equations. In: **22 nd IFIP TC7 Conference on System Modeling and Optimization**, 2005, Turin, Italy.

BLASCO, J.; CODINA, R.; HUERTA, A. A Fractional-Step Method for the Incompressible Navier-Stokes Equations Related to a Predictor-Multicorrector Algorithm. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 28: 1391-1419, 1998.

BOCHEV, P.B.; GUNZBURGER, M.D.; SHADID, J.N. **Stability of the SUPG Finite Element Method for Transient Advection-Diffusion Problems**. Pré-impressão submetida a Elsevier Science, 2004.

BOGAERTS, S; DEGREZ, G.; RAZAFINDRAKOTO, E. Upwind residual distribution schemes for incompressible flows. In: **ECCOMAS 98**. John Wiley & Sons, Ltd. 1998.

BONHAUS, D.L. **Higher Order Accurate Finite Element Method for Viscous Compressible Flows**. 1998. 78 p. Dissertação - Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, VA, 1998. BRAACK, M.; BURMAN, E.; JOHN, V.; LUBER, G. Stabilized finite element methods for the generalized Oseen problem. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg**. v196, p.853-866, 2007

BROOKS, A.N. A Petrov-Galerkin Finite Element Formulation for Convection **Dominated Flows**. 1981. 120 p, Tese (Doutorado) - California Institute of Technology, Pasadena, California, 1981.

BROOKS, A.; HUGHES, T.J.R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin methods for advection dominated flows. In: **Proc. 3rd Int. Conf. on Finite Element Methods in Fluid Flows**, Banff, Canada, p.283-292, 1980.

BROOKS, A.; HUGHES, T.J.R. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flow with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations, **Comp. Meths. Appl. Mech. Engng**, v.32, p.199-259, 1982.

CARBONEL, H.C.A.A.; GALEÃO, A.C.N. A Space-Time Petrov Galerkin Model of the Upper Coastal Ocean Hydrodynamics in Limited Area Domain. Laboratório Nacional de Computação Científica.

CATABRIGA, L.; COUTINHO, A.L.G.A.; ALMEIDA, R.C. Uma Comparação de Formulações Estabilizadas de Elementos Finitos para a Equação de Euler, 1999. In: **Computational Methods in Engineering '99**. Ed: PIMENTA, P.M.; BRASIL, R.M.L.R.F.; ALMEIDA N., E.S.. 1999.

CATABRIGA, L.; COUTINHO, A.L.G.A.; TEZDUYAR, T.E. Compressible flow SUPG stabilization parameters computed from degree-of-freedom submatrices. **Comput.Mech**, v.38, p.334-343, 2006. DOI 10.1007/s00466-006-0033-1.

CODINA, R.; BLASCO, J; BUSCAGLIA, G.C.; HUERTA, A. Implementation of a stabilized finite element formulation for the incompressible Navier-Stokes equations based on a pressure gradient projection. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, no.37, p.419-444, 2001

DELIÉGE, G. Flexible Implementation of the Finite Element Method Applied to **3D Coupled Problems Considering Convective Effects**. 2003. 208 p., Tese (Doutorado) - Katholieke Universiteit Leuven, Faculteit Toegepaste Wetenschappen, Departement Elektrotechniek, 2003.

ELIAS, R.N.; COUTINHO, A.L.G.A.; MARTINS, M.A.D. Inexact Newton-Type Methods for the Non-Linear Problems Arising from the SUPG/PSPG Solution of Steady Incompressible Navier-Stokes Equations. **ABCM**, v.XXVI, n.3, 2004.

ELIAS, R.N.; PARAIZO, P.; COUTINHO, A.L.G.A. Simulação do Escoamento de Correntes Gravitacionais pelo Método dos Elementos Finitos Estabilizados Baseados em Arestas. In: **CMNE/CILAMCE 2007**, APMTAC, Portugal.

FIGUEROA, C.A.; COLOMINAS, I.; MOSQUEIRA, G.; NAVARRINA, F.; CASTELEIRO, M. A Stabilized Finite Element Approach for Advective-Diffusive Transport Problems. In: **Computational Methods in Engineering**. Ed: PIMENTA, P.M.; BRASIL, R.; ALMEIDA, E. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil. ISBN: 85-901027-1-8. http://caminos.udc.es/gmni.

GALEÃO, A.C.; CARMO, E.G.D., A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.68, p.83-95, 1988.

HUGHES, T.J.R. Multiscale Phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods, **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, v.127, p.387-401.

HUGHES, T.J.R. Recent Progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations. **Finite Elements in Fluids** – v.7. Ed: GALLAGER, R.H.; GLOWINSKI, R.; GRESHO, P.M.; ODEN, J.T.; ZIENKIEWICZ, O.C., John Wiley & Sons Ltd, 1987.

HUGHES, T.J.R.; BROOKS, A. A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion. In: **Finite Element Methods for Convection Dominated Flows**. Ed: HUGHES, T.J.R. ASME, New York, 1979.

HUGHES, T.J.R; FRANCA, L.P.; MALLET, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VI. Convergence Analysis of the Generalized SUPG formulation for linear time-dependent multi-dimensional advective-diffusive systems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.63, p.97-112, 1987.

HUGHES, T.J.R.; SCOVAZZI, G.; FRANCA, L.P. Multiscale and stabilized methods. In: STEIN, E.; DE BORST, R.; HUGHES, T.J.R. **Encyclopedia of Computational Mechanics**, p.5-59, John Wiley & Sons, Chichester. LE BEAU, G.J.; TEZDUYAR, T.E. Finite Element Computation of Compressible Flows with the SUPG Formulation. Advances in Finite Element Analysis in Fluid Dynamics, FED-Vol. 123, ASME 1991.

LIN, H; ATLURI, S.N. Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) Method for Convection-Diffusion Problems. In: **CMES**, v.1,n.2, p.45-60, 2000.

LUBE, G. Stabilized FEM for Incompressible Flow: Critical Review and New Trends. In: **European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD 2006**, TU Delft, The Netherlands, 2006.

LUBE, G.; MATTHIES B., G. On Streamline-Diffusion Methods for the Inf-Sup Stable Discretisations of the Generalised Oseen Problem. In: **Mini-Workshop on Variational Multiscale Methods and Stabilized Finite Elements**, EPFL Lausanne, 2007.

MALISKA, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 424p ,1995.

MENEGHINI, J.R.; SALTARA, F.; SIQUIERA, C.L.R., FERRARI JR., J.A. Numerical Simulation of Flow interference between Two Circular Cylinders in Tandem and Sideby-Side Arrangements. 2001. **Journal of Fluids and Structures**, v.15, p.327-350, 2001. DOI: 10.1006/jfls.2000.0343, disponível online em http://idealibrary.com

MITTAL,S.; KUMAR,V. Flow Induced Vibrations of a Light Circular Cylinder At Reynolds Numbers 10³ to 10⁴. **Journal of Sound and Vibration**, v.245, no.5, p.923-946, 2001. Academic Press, 2001.

MITTAL, S.; RAGHUVANSHI, A. Suppression of Vortex Shedding Using Control Cylinder. In: **THE SEVENTH ASIAN CONGRESS OF FLUID MECHANICS**, 1997 Chennai (Madras).

MITTAL, S.; RATNER, A.; HASTREITER, D.; TEZDUYAR, T.E. Space-Time Finite Element Computation of Incompressible Flows with Emphasis on Flows Involving Oscillating Cylinders. **International Video Journal of Engineering Research**, v.#, p.83-96, 1991, John Wiley & Sons, Ltd, 1991.

MITTAL, S.; TEZDUYAR, T.E. Notes on the stabilized space-time finite-element formulation of unsteady incompressible flows. **Computer Physics**

Communications, no.73, p.93-112, 1992. North Holland. Elsevier Science Publishers B.V., 1992.

MURCIA, S.R.D; LACAZ, T.M.V.S. Modelo de Poluição Atmosférica: Solução Numérica e Instabilidades Associadas. **Rev. Mat. Estat.**, São Paulo, v.20, p.79-102, 2002.

OLIVEIRA, R.F.; MEYER, J.F.C.A. A Elaboração de Cenários de Acidentes com Derrame de Óleo na Região do Terminal de Angra dos Reis, RJ: Modelagem, Análise e Simulação Computacional. **TEMA Tend. Mat. Apl. Comput.**, v.7, no.1, p.101-108, 2006.

PATANKAR, S.V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Taylor and Francis, 1980.

OSAWA, Y.; TEZDUYAR, T. A Multi-Domain Methods for 3D Computation of Wake Flow Behind a Circular Cylinder. **Computational Fluid Dynamics Journal**, v.8, no.2, p.296-308, 1999.

QUEIROZ, D.A.; NATTI, P.L.; ROMEIRO, N.M.L.; NATTI, E.R.T. Um Desenvolvimento Numérico nas Equações Dinâmicas de Sólitons em Fibras Ópticas. **Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas**, Londrina, v.27, no.2, p.121-128, 2006.

SILVA, A.S.S.; COUTINHO, A.L.G.A.; PARSONS, L.D. **Simulação de Escoamentos Bifásicos Imiscíveis pelo Método dos Elementos Finitos**.

SIQUEIRA, C. Simulação Numérica do Escoamento ao Redor de Cilindros: Aplicação a Problemas Bi e Tridimensionais. 1999. 203p. Tese (Doutorado) -Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999.

SCHEWCHUK, J.R. An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain, Ed.1 1/4. 1994. School of Computer Science, **Carnegie Mellon University**, Pittsburg, PA 15213. 1994.

SOUZA, D.A.F.; COUTINHO, A.L.G.A.; MARTINS, M.A.D.; ALVES, J.L.D. Técnicas Computacionais para Solução de problemas de Transporte Tridimensionais de Grande porte. **2º Congresso brasileiro de P&D em Petróleo e Gás**. TEZDUYAR, T.E.; KALRO,V. Parallel Finite Element Computation of 3D Incompressible Flows on MPPs. In: **Solution techniques for Large-Scale CFD Problems**. Ed: HABASHI, W.G. Wiley& Sons, 1995.

TEZDUYAR, T.E.; MITTAL, S.; RAY, S.E.; SHIH, R. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.95, p.221-242, 1992. North-Holland. Elsevier Science Publishers B.V. 1992.

TEZDUYAR, T.E.; SATHE, S. Stabilization Parameters in SUPG and PSPG Formulations. 2003. Journal of Computational and Applied Mechanics, v.4, no.1, p.71-88, 2003.

VÁSQUEZ, J.C.; MEYER, J.F.C.A. Descarga de Água de Produção em operações offshore: Modelagem Matemática, Aproximação Numérica e Simulação Computacional. **BIOMATEMÁTICA**, v.15, p.119-136, 2005. IMECC-UNICAMP, ISSN 1679-365X.

VELLANDO, P.; PUERTAS, J.; BONILLO; FE, J. On the Resolution of the Viscous Incompressible Flow for Various SUPG Finite Element Formulations. In: **European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering**, **ECCOMAS 2000**, Barcelona, 2000.

WANG, X. Numerical Evaluation for Various Upwinding Schemes. **Proceedings of FEDSM98. 1998 ASME Fluids Engineering Division**, 1998, Washington, D.C., USA.

WHITING, C.H. **Stabilized Finite Element Methods for Fluid Dynamics Using a Hierarchical Basis**. 1999. 134p. Tese (Doutorado) - Graduate Faculty of Renssealaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 1999.

WILLIAMSON, C.H.K.; BROWN, G.L. A series in 1/Re to Represent the Strouhal-Reynolds Number Relationship of the Cylinder Wake. 1998. **Journal of Fluids and Structures**, v.12, p.1073-1085. Article No.fl980184. 1998.

ZIENKIEWICZ, O. C. The Finite Element Method, 5th ed., vol.3, 2000.

APÊNDICES

Apêndice 01 – Detalhes da Implementação

Programação

A implementação computacional desenvolvida neste trabalho foi realizada na linguagem C++. Uma linguagem imperativa de alta performance e versatilidade, com relação a: alocação de memória, grau de controle e orientação a objetos.

Orientação a Objetos

A orientação a objetos é um paradigma na construção de algoritmos complexos, que permite ao programador e aos usuários do código uma organização mais transparente, com facilidade na manutenção do programa e na reutilização do código.

Definição das Classes

As classes foram definidas de modo a encapsular o máximo de informações e operações correlatas, separando convenientemente o que é pertinente ao campo de escoamento (malha, condições de contorno, e campos de propriedades), e à operacionalidade do algoritmo (matrizes esparsas, ordenação e resolução de sistemas lineares).

Portanto foram definidas as três classes básicas,

a) estrutura de malha computacional, condições de contorno e campos de pressão e velocidade;

b) estrutura de matriz esparsa e suas rotinas de manipulação;

c) estrutura auxiliar para resolução de sistemas lineares esparsos;

Estrutura de Malha Computacional

No item a) estrutura de malha computacional, estão concentradas todas as informações referentes aos nós da malha, conectividade dos elementos, lista dos elementos de fronteira, gradientes das funções de forma, números de Peclet, velocidades x e y, pressão e vorticidade.

As principais operações deste objeto são:

- leitura dos pontos e elementos da malha computacional;

- montagem das matrizes de rigidez e massa, utilizando Crank-Nicholson nos termos de difusão e convecção (Petrov-Galerkin com termo convectivo implícito);

- montagem da matriz de rigidez para a pressão (Galerkin);

-aplicação das condições de contorno de Dirichlet nos elementos de fronteira (modificando a matriz);

- montagem dos vetores de carga para pressão e velocidade;

- **atualização dos campos** de pressão e velocidade e cálculo da vorticidade, na forma requerida pelo FSM;

Nodos e Elementos

Cada nodo (ou nó) da malha computacional possui suas coordenadas x e y. O elemento finito (triangular nesta implementação) é definido como grupos de 3 nodos, e possui faces comuns com outros 3 elementos. Na formulação de volumes finitos, os fluxos são computados nas faces, enquanto que nos elementos finitos o problema é escrito na forma de uma equação integral com base nos valores nodais da propriedade.

Número de Peclet e Cálculo de Matrizes

O número de Peclet é um número adimensional utilizado na Transferência de Calor, que é razão da influência da convecção sobre a difusão de calor. Na disciplina de Dinâmica dos Fluidos Computacional, o nome é utilizado com o mesmo significado, porém relativo aos elementos discretos:

$$Pe = \frac{Uh}{2k}$$

Número de Peclet – U é a velocidade ao longe, h é o espaçamento de malha (dimensão da célula de cálculo) e k, a difusividade da propriedade em questão (quantidade de movimento, calor, espécies químicas) na simulação computacional.

Em problemas variáveis no tempo, o balanço entre difusão e convecção varia tanto em magnitude quanto em direção. Desta forma, faz-se necessário o recálculo do número de Peclet das células computacionais e também das matrizes em que figura.

Função de Forma, Gradiente da Função de Forma & Indexação Indireta

Dados os valores nodais de uma propriedade para um determinado elemento, a função de forma (função das coordenadas espaciais) descreve a variação desta propriedade dentro do elemento em questão.

O Gradiente da Função de Forma é extensivamente usado nesta implementação, em razão de várias expressões serem produtos deste gradiente com algum vetor ou com ele mesmo.

O Gradiente da Função de Forma é computado para cada elemento, dependendo das coordenadas espaciais de seus nodos. Apresentar uma matriz gradiente para cada elemento implica num gerenciamento indireto de memória que muitos compiladores podem não suportar. Por este motivo, nesta implementação, estas matrizes gradiente (uma por elemento) foram agrupadas numa cadeia linear, e o acesso a seus elementos passa por uma indexação indireta, por exemplo:

Gradiente da função de forma ni na direção j = grad [i j], onde:

Índice i j = fórmula dos índices i e j (endereçamento indireto);

Grad [] = cadeia numérica linear (vetor).



FIGURA GR – Mapeamento do Gradiente da Função de Forma. Forma compacta (vetor condensado) à esquerda, forma expandida à direita (sucessivas matrizes locais para todos elementos). Índices locais i e j variam respectivamente de 1 a 3, e de 1 e 2. Índice i j (compactado), varia de 1 a 24.

Condições de Contorno

São especificações nos contornos do domínio computacional, que definem o campo do problema. Condições do tipo Dirichlet estabelecem valores das propriedades do escoamento, e condições do tipo Neumann estabelecem fluxos prescritos destas propriedades.

As condições são prescritas em objetos dos tipos a) e b): nos valores atuais dos campos de pressão e velocidade; e nas variáveis com valor prescrito, tornando determinados os sistemas lineares do problema.

Equações Elípticas, Parabólicas e Hiperbólicas

As equações parciais diferenciais podem ser classificadas de maneira análogas às seções cônicas (elipse, parábola e hipérbole). Tal que os tipos de equações obtidos nesta classificação possuam diferentes comportamentos com relação à variação no tempo e na velocidade de propagação de informação, tanto no domínio computacional, quanto na realidade física. Sejam as expressões abaixo:

$$\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{xx} + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{xy} + \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{yy} + \dots = \mathbf{0}$$
$$\delta = \mathbf{B}^2 - \mathbf{4} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$$

Para **equações elípticas**, o discriminante delta é menor do que zero. Isto significa que o problema está determinado pela condições de contorno e possui solução independente do tempo, e.g. **Equação de Laplace**:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} = 0$$

Comportamento elíptico pode ser tipicamente encontrado em escoamentos com recirculação interna, entre outros.

Para equações parabólicas, o discriminante delta é igual a zero, ou seja, a equação pode ser transformada numa forma assemelhada da equação de transferência de calor, em que o comportamento no domínio de interesse depende tanto das condições de contorno quanto do campo inicial de propriedades. Alterações que ocorrem nos pontos do domínio propagam-se nas direções do problema, influenciando o campo como um todo, e.g. Equação de Transferência de Calor:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \mathbf{x}_i^2} = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{t}}$$

Os problemas de engenharia a baixas velocidades (quando comparadas à velocidade da propagação da informação – luz e som) são problemas parabólicos, cuja resolução permite o projeto robusto de máquinas considerando eventos transientes de seu funcionamento.

Equações hiperbólicas possuem discriminante delta maior que zero. Em contraste com a equação de transferência de calor, as velocidades de escoamento impostas ao problema (por meio de condições de contorno) impedem que determinados efeitos se propaguem na direção oposta à velocidade imposta, ou seja, nem toda informação é capaz de chegar a todos os pontos do domínio, e.g. Equação de Propagação de Ondas:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

Problemas hiperbólicos são problemas de propagação de ondas e perfis de ondas de choque, onde é necessário cautela na definição das condições de contorno.

As fronteiras de saída do problema devem estar descarregadas de condições, para que efetivamente desenvolva-se o campo de interação entre a informação forçada para dentro do sistema (à montante, entrada) e a informação na saída (à jusante), que se propaga em direção à região de entrada.

Na presente implementação, o tipo de problema tratado é o escoamento incompressível variável no tempo.

Relação entre Escoamentos Compressíveis / Incompressíveis (Acoplamento Pressão-Velocidade)

Escoamentos incompressíveis são aqueles nos quais a massa específica do fluido não varia de forma sensível na região de interesse. Seu estudo requer a resolução combinada das equações de quantidade de movimento, continuidade e eventualmente de energia. Por não existir uma equação evolutiva para a pressão, recai-se no acoplamento pressão-velocidade; em que a velocidade é resolvida nas equações de quantidade de movimento, e a continuidade satisfeita através do campo de pressão (em conjunto com a velocidade calculada). Este acoplamento pode ser resolvido de modo iterativo ou direto (ver item FSM adiante).

Escoamentos compressíveis são aqueles nos quais a massa específica do fluido possui variação apreciável na região de interesse. Isto pode ocorrer devido a altas velocidades ou temperaturas, no qual o fluido é estressado quanto ao seu estado físico.

Este tipo de problema em geral requer a resolução das equações de quantidade de movimento, continuidade, energia e estado termodinâmico do fluido.

De posse desta equação (adicional) de estado, é possível utilizá-la agora como equação evolutiva para o campo de pressões, evitando o acoplamento pressão-
velocidade e permitindo um avanço explícito no tempo (sem resolução de sistemas lineares, mas observados limites de estabilidade para o passo de tempo).

Resolução FSM – "Fractional-Step Method"

O FSM consiste na resolução dos sistemas lineares da velocidade (nas direções x e y, em problemas bidimensionais, e em x, y e z para tridimensionais), e subseqüentemente o cálculo do resíduo da equação de continuidade, que será o vetor de carga para resolver uma equação de Poisson para o campo de Pressão (problema elíptico – abaixo, **Equação de Poisson**).

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x_i^2} = f$$

Do campo de pressão obtido, são calculadas correções a serem adicionadas ao campo de Velocidades, assegurando a satisfação da equação de continuidade dentro do limite de tolerância especificado no início do programa.

FSM não é iterativo como outros métodos de resolução do Acoplamento Pressão-Velocidade: SIMPLE, SIMPLEC, PRIME, etc; que requerem novos passes no campo de velocidades e de pressão até que a equação de continuidade seja satisfeita.

Esta característica de independência dos sistemas lineares é semelhante à chamada Minimização em Linha, também presente nos Gradientes Conjugados (será explicado mais adiante).

FSM também é mais robusto que o método de Compressibilidade Artificial (análogo ao Método dos Multiplicadores de Lagrange em problemas de minimização/maximização), pois para um escoamento incompressível, a presença da compressibilidade representa um divisor tendendo a zero (nas equações).

Desta maneira, FSM prevalece como principal alternativa para escoamentos incompressíveis, pela velocidade e estabilidade.

Métodos Explícito, Totalmente Implícito, Semi-Implícito e Dominância Diagonal de Problemas Convectivo-Difusivos

A resolução de problemas difusivos-convectivos pode ser abordada de forma explícita, sem a resolução de sistemas lineares (a princípio), dependendo apenas dos valores calculados no passado.

Porém, o avanço no tempo fica condicionado a passos de tempo muito reduzidos, limitados por exemplo, pelo números adimensionais de Fourier (Difusão) e de Peclet (Convecção/Difusão), cuja restrição dosa um passo de tempo consistente com a propagação da informação na malha computacional.

$$Fo = \frac{\alpha \cdot t}{r^2}$$

Número de Fourier – alpha é a difusividade, r a escala espacial (espaçamento das células), e t (passo de tempo), ver também o item referente a Número de Peclet e Cálculo de Matrizes.

Para efetuar o avanço no tempo a passos maiores, a aproximação temporal das equações deve contar com termos de ordem superior, que conferem maior precisão numérica. Isto envolve os valores dos passos de tempo futuros (totalmente implícito); presente e passado (semi-implícito, diferenças para trás), ou presente e futuro (semi-implícito, diferenças para frente).

Nas discretizações implícitas (total e semi), é necessário resolver sistemas lineares, cujas diagonais de matrizes relacionam-se ao termo difusivo. Para os métodos iterativos discutidos adiante, a dominância da diagonal sobre os demais valores nas respectivas linhas propicia estabilidade numérica.

Isto limita severamente o estudo de problemas convectivo dominantes, pois a magnitude que deveria estar presente sobre a diagonal encontra-se dispersa ao longo das linhas.

Este fato é também o grande propulsor de estudos envolvendo métodos de Petrov-Galerkin em Elementos Finitos e esquemas de interpolação em Volumes Finitos, visando estabilizar a solução iterativa dos sistemas sem comprometer a solução de escoamento através de difusão adicional.

Notação indicial nas expressões

A utilização da notação indicial na montagem das matrizes requer destreza, mas recompensa pela segurança de que se escrita corretamente a expressão compacta, todas as expressões de uma dada equação estarão corretas e também descritas por esta fórmula.

A principal peça para montagem das matrizes é o gradiente das funções de forma. No presente caso, uma matriz $3x^2$ (3=número de nodos por elemento triangular, e 2=número de direções (x,y)).

Os núcleos das matrizes de rigidez são formados pelos produtos deste gradiente com ele mesmo (difusão + convecção na direção da linha de corrente = petrov-galerkin) ou com o vetor velocidade (termo usual de convecção).

Para duas dimensões:									
– k e i – 3 nodos – variando de 1 a 3; – j e l – 2 direções – variando de 1 a 2;									
Para t	todos os elem	entos triangulares:							
acc = 0; (variável de acumulação de somatórios)									
	laço em k	(k e i - laços externos do produto tensorial)							
	laço em i								
		laço + (j e l - laços internos do produto tensorial)							
		laço em l acc = acc + expressão em (i, j, k, l); final l							
		final j							
	final i								
	final k								
posição de matriz (k,i) = acc;									

FIGURA – Laços For aninhados e níveis hierárquicos para os índices no cálculo de expressões indiciais.

Exemplo de expressão indicial:

$$\int \mathbf{w}_{k} \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \Omega = \underbrace{\int \mathbf{n}_{k} \cdot \mathbf{v}_{j} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \cdot \mathbf{d} \Omega}_{\text{Termo Convectivo Usual}} + \underbrace{\int \frac{\partial \mathbf{n}_{k}}{\partial \mathbf{x}_{l}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{l} \cdot \mathbf{v}_{j}) \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \mathbf{d} \Omega}_{\frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{l}} \cdot (\alpha \cdot \mathbf{v}_{l} \cdot \mathbf{v}_{j})}$$

Este estilo de programação recorre a laços de repetição (for) aninhados nos índices k, l, i e j.

Fica patente nesta demonstração simplificada, que a extensão de duas a três dimensões é bastante direta. Bastando para isso, atualizar as dimensões do gradiente da função de forma para 4x3 (elemento tetraédrico a 3 dimensões no espaço).

Estrutura de Matriz Esparsa

O item b) estrutura de matriz esparsa, é composto pela matriz esparsa no formato CRS ("Compressed Storage Row"), também freqüentemente chamada por CSR ("Compressed Sparse Row").

A definição desta classe / tipo de objeto tem a função de separar o código da manipulação de matrizes esparsas (por vezes bastante intrincado) do que possui representação física no programa.

O item a) estrutura de malha computacional, interfaceia com objetos do tipo b) em dois momentos: quando são criadas as matrizes de rigidez e combinada (rigidez + massa); e quando são passadas as condições de contorno para que o sistema linear seja determinado.

Uma vez ordenada a matriz, é possível sobrepor os elementos de igual endereçamento (linha e coluna iguais) e realizar eficientemente a extração dos limites (ponteiros) das linhas; e deste modo efetuar as operações básicas da álgebra linear, utilizadas na resolução dos sistemas lineares.

Otimização de Operações

O principal diferencial desta classe de objetos para outras em programas escritos por alunos de pós-graduação é a otimização da velocidade. A tarefa de ordenar uma matriz nem sempre recebe a devida atenção, e possui via de regra, praticamente o mesmo custo que resolver um sistema linear através de um método iterativo da família Krylov; correspondente ao núcleo mais pesado do programa, e também onde geralmente são concentrados os maiores esforços de otimização.

Na implementação apresentada neste trabalho, a operação de ordenação é realizada apenas uma única vez no início do programa (e ainda utilizando um algoritmo extremamente rápido).

A tática implementada é ordenar uma única vez, guardando um vetor de permutação que mapeia a posição dos elementos já reordenados. Logo, o custo de uma nova ordenação para a matriz é apenas de ordem N.

Esta alavancagem se deve ao fato de as matrizes resultantes manterem sempre a mesma topologia e conectividade (apesar de se alterarem para diferentes passos de tempo).

Fluxograma do Programa (itens enquadrados em vermelho são computados apenas uma vez na execução do programa)

Leitura das dimensões do problema
Alocação Dinâmica de Memória
Laço principal do programa
Aplicação da condição de contorno sobre os campos de Pressão e Velocidade
Cálculo do número de Peclet e da escala de tempo SUPG para cada elemento
Cálculo das Matrizes K e MK (Convecção e Difusão - Campo de Velocidade)
Determinação do vetor de permutação (ordenação rápida)
Ordenação utilizando o vetor de permutação
Cálculo de fx e fy, Vetores de Carga (Velocidade X e Y)
Aplicação da condição de contorno sobre a Matriz MK e os Vetores de Carga fx e fy
Resolução de Sistemas Lineares para Campo de Velocidades X e Y
Cálculo da Matriz P, da Equação de Poisson para a Pressão
Ordenação utilizando o vetor de permutação
Cálculo do Vetor de Carga fp, com os resíduos da equação de continuidade
Aplicação da condição de contorno sobre Vetor de Carga fp
Resolução de Sistema Linear para Pressão
Atualização dos Campos de Velocidade com novo Campo de Pressão, Cálculo da Vorticidade
Avança para próximo instante de tempo

Formato CRS ("Compressed Row Storage")

Neste objeto, as rotinas transformam a matriz esparsa de linha, coluna e valor, no formato CRS (ponteiro de início de linha, coluna, elemento), através de ordenação, sobreposição e endereçamento por ponteiros de linha.



FIGURA CRS 01 – Exemplo de Armazenamento de Matriz Genérica, no formato expandido armazena-se as três linhas inferiores. No formato CRS, apenas (ponteiro de linha, coluna e valor do elemento).

Para matrizes esparsas de grandes dimensões, a economia de memória é brutal em relação a matrizes densas repletas de zeros, sendo para problemas práticos, a diferença entre armazenar algo como 100.000 posições ou 10¹⁰ posições.

Para um número muito reduzido de elementos por linha, o formato CRS não parece ser tão mais vantajoso que o formato primitivo (com três cadeias longas de igual comprimento, ver figura CRS 01). Todavia, o apontamento de onde começam e terminam as linhas é um ponto relevante para mapear as operações do produto de vetor por matriz, por este motivo continua sendo utilizado o CRS.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
4	0.04	0.02			0.40			0.70	0.47
1	0.84	0.63			0.10			0.72	0.47
2	0.55		0.14				0.77		
3			0.44	0.69	0.47		0.28	0.82	
4		0.28						0.72	0.62
5						0.01	0.81		0.46
6		0.10		0.45		0.82		0.73	0.28
7					0.99			0.31	0.91
8			0.68	0.73			0.06		
9	0.41			0.89				0.14	

FIGURA CRS 02 – Exemplo de Matriz Genérica

Ordenação Heapsort (utilizado para obter o vetor permutação)

O algoritmo de ordenação selecionado e implementado é o Heapsort, de custo computacional N.log N (no pior caso), e que realiza a ordenação sem necessitar de espaço adicional para efetuar trocas de elementos.

O funcionamento deste método é baseado num mapeamento de uma árvore binária sobre uma cadeia linear (vetor). São realizadas sucessivas seleções do n-ésimo maior elemento, com as trocas entre níveis efetuadas em tempo log N.



FIGURA Heapsort – Aspecto binário ("binary unfolding") do mapeamento das posições do vetor sobre a Árvore.

Um algoritmo igualmente eficiente, porém paralelizável, é o Mergesort. A desvantagem neste caso é a necessidade de espaço para efetuar as trocas de posição dos elementos.

Heapsort é utilizado para uma matriz esparsa no formato bruto (linha, coluna, elemento) em duas passadas: numa primeira varredura, todos os elementos da matriz são ordenados por linha; numa segunda passada, cada linha é individualmente ordenada pela coluna.

Ao final, tem-se a matriz completamente ordenada e também um vetor de permutação, cuja informação permite ordenar tudo sem realizar todas as trocas intermediárias novamente.

Estrutura auxiliar para Resolução de Sistemas Lineares Esparsos

O item c) estrutura auxiliar, é uma classe desenhada para conter o código do **BiCGSTAB** ("Biconjugated Gradients Stabilized") e seus vetores auxiliares, que são alocados no início do programa, utilizados para resolver todos os sistemas lineares, e somente após isto são devolvidos à memória livre do computador.

Estão listados a seguir, conceitos importantes de métodos iterativos da Álgebra Linear, responsáveis pela resolução de vastos sistemas lineares em muitos códigos acadêmicos e comerciais.

"Steepest Descent" ou "Descida mais Íngreme"

Algoritmo que aproxima a solução do sistema A.x = b, adicionando repetidas vezes o vetor resíduo r = b - A.x ao vetor x. Possui convergência lenta, pois as direções de descida das iterações são bastante semelhantes.

Minimização em Linha

Minimização de uma função, cuja busca é orientada por sucessivas direções de busca. A convergência é melhor tanto quanto mais ortogonais forem estas direções.

Subespaço de Krylov

Dado um sistema linear A.x = b, e seu resíduo inicial r = b - A.x.

O Subespaço de Krylov corresponde ao espaço vetorial do vetor r multiplicado pelas potências da matriz A.

Autovalores, Autovetores e "Condition Number"

A multiplicação de um vetor por uma matriz pode ser interpretada como: uma operação de rotação em N dimensões; uma mudança de vetores de base; ou a decomposição do vetor em N vetores de base, com o escalamento (ampliação ou redução) desigual nestas direções.

No terceiro caso, os vetores de base são os Autovetores da matriz, e os fatores de escala são os Autovalores (valores próprios) da matriz.

Os métodos iterativos baseados no Subespaço de Krylov são montados através de somas e projeções de vetores, e de produtos de vetores por matrizes. O número denominado "Condition Number" é a razão entre o maior e o menor autovalor de

uma matriz. Se este número for alto, o número de iterações necessárias para chegar na convergência (especificada uma tolerância) será também alto.

Matrizes com "Condition Number" alto são mal condicionadas, e matrizes cujo menor autovalor "tende a zero" são singulares. Nestes casos, as operações em aritmética de ponto flutuante (com número finito de dígitos) são inadequados para resolver estes problemas, devido à amplificação de erros infinitesimais cumulativos nas operações.

Precondicionamento

Há situações, nas quais a matriz do problema não é a mais adequada para dar entrada nos métodos iterativos a seguir descritos. O "Condition Number" elevado pode condenar a matriz a um número de iterações impraticável ou anti-econômico.

A solução reside em encontrar uma inversa aproximada da matriz do problema, capaz de anular amplificações (escalamentos) e rotações do vetor da direção de minimização de resíduo.

Trata-se na realidade de adequar a escala e ângulo dos sucessivos vetores de busca à escala do vetor solução real, o que também pode ser interpretado como um chute inicial mais próximo da verdadeira solução.

Na implementação deste programa foi utilizado o DS "Diagonal Scaling", que divide todos os coeficientes de uma dada linha (inclusive a posição correspondente do vetor de carga) de modo que o maior elemento (valor sobre a diagonal) seja igual a uma determinada escala.

Há outros métodos um pouco mais sofisticados (e consideravelmente mais custosos de implementar), como fatorações incompletas de Cholesky e LU, relaxação de Jacobi e Gauss; que aproximam melhor a inversa da matriz do sistema.

BLAS – "Basic Linear Algebra Subprograms" & LAPACK "Linear Algebra Package"

Bibliotecas contendo rotinas de algebra linear, de baixo (BLAS) e de alto nível (LAPACK) otimizadas para várias arquiteturas, elaboradas originalmente em linguagem Fortran 77.

Não foram utilizadas neste trabalho por representarem um problema adicional de interfaceamento, dado que o conteúdo necessário pôde ser facilmente reproduzido em C++.

Além disso, uma eventual utilização poderia ir contra a definição de classes e objetos modulares, não aproveitando a alocação dinâmica de memória planejada.

CG – "Conjugate Gradients" ou "Gradientes Conjugados"

Método numérico iterativo, que consiste em ortogonalizar o vetor de resíduo inicial, decompondo-o nos vetores de base do Subespaço de Krylov. É utilizado apenas em problemas de matriz simétrica.

A ortogonalização é bastante rápida, pois os vetores (graças à simetria da matriz A) são ortogonais para um produto escalar definido com base na própria matriz A.

```
Compute r^{(0)} = b - Ax^{(0)} for some initial guess x^{(0)}

for i = 1, 2, ...

solve Mz^{(i-1)} = r^{(i-1)}

\rho_{i-1} = r^{(i-1)^T} z^{(i-1)}

if i = 1

p^{(1)} = z^{(0)}

else

\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}

p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}

endif

q^{(i)} = Ap^{(i)}

\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)^T} q^{(i)}

x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}

r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}

check convergence; continue if necessary

end
```

FIGURA CG – Algoritmo dos Gradientes Conjugados, extraído de "Templates for Solution of Linear Systems".

O produto definido é bilinear e simétrico: <p1,A.p2> = <p2,A.p1>;

Se p1 e p2 pertencem ao Subespaço de Krylov:

- se **p1** diferente de **p2**, produto igual a zero;

- se **p1** igual a **p2**, produto diferente de zero;

A aplicação das iterações recai numa seqüência de vetores resíduo ortogonais:

- r1 menos projeção sobre p1 = r2;
- r2 menos projeção sobre p2 = r3; <já ortogonal a p1>
- r3 menos projeção sobre p3 = r4; <já ortogonal a p1, p2>
- r4 menos projeção sobre p4 = r5; <já ortogonal a p1, p2, p3>

A cada iteração, o vetor solução x é combinado ao vetor p (calculado na iteração corrente e modulado por um escalar alfa) de modo a minimizar o erro nesta direção de procura.

GMRes – "Generalized Minimum Residual"

O GMRes é o conceitualmente, o método mais primitivo (e robusto) dos espaços de Krylov, aplicável a matrizes não-simétricas. Para um número elevado de iterações, o ideal é reiniciá-lo, já que a cada iteração o vetor resíduo precisa ser ortogonalizado ao número crescente de vetores de base.

A aplicação das iterações recai numa seqüência de vetores resíduo ortogonais:

- r1 menos projeção sobre p1 = r2;
- r2 menos projeção sobre p1, p2 = r3;
- r3 menos projeção sobre p1, p2, p3 = r4;
- r4 menos projeção sobre p1, p2, p3, p4 = r5;

BiCGSTAB - "Biconjugated Gradients Stabilized"

O BICGSTAB é uma sofisticação do método dos Gradientes Conjugados, que computa uma dupla contração da matriz A. Aproximando uma forma equivalentesimétrica do sistema linear, e assim recuperando a propriedade da minimização em linha para problemas não-simétricos.

```
Compute r^{(0)} = b - Ax^{(0)} for some initial guess x^{(0)}
Choose \tilde{r} (for example, \tilde{r} = r^{(0)})
for i = 1, 2, ...
      \rho_{i-1}=\tilde{r}^T\,r^{(i-1)}
      if \rho_{i-1} = 0 method fails
      if i = 1
         p^{(i)} = r^{(i-1)}
      else
          \beta_{i-1} = (\rho_{i-1}/\rho_{i-2})(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})
          p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})
      endif
      solve M\hat{p} = p^{(i)}
      v^{(i)} = A\hat{p}
      \alpha_i = \rho_{i-1} / \tilde{r}^T v^{(i)}
      s = r^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}
      check norm of s; if small enough: set x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} and stop
      solve M\hat{s} = s
      t = A\hat{s}
      \omega_i = t^T s / t^T t
      x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i \hat{s}
      r^{(i)} = s - \omega_i t
      check convergence; continue if necessary
      for continuation it is necessary that \omega_i \neq 0
end
```

FIGURA BiCGSTAB – Algoritmo dos Gradientes BiConjugados Estabilizados, extraído de "Templates for Solution of Linear Systems".

Apêndice 02 – Extensão SUPG para Captura de Descontinuidades

Escoamentos que apresentam frentes de choque, decorrentes de propagação de ondas na resolução de problemas hiperbólicos; ou expressiva separação de escoamento, apresentam descontinuidades, que podem ser estacionárias ou que se propagam na malha computacional.

Hughes propôs uma alteração em seu método SUPG, tornando-o não-linear, e apto a estabilizar a resolução numérica sem eliminar as descontinuidades (que são reais).



FIGURA – SUPG e Descontinuidades

Na nova função de forma SUPG, além dos termos linear e convectivo-linear, aparece agora um terceiro termo (Eq.01), o convectivo não-linear: definido como uma convecção existente apenas no sentido da projeção do gradiente do termo linear (Eq.02).

$$\boldsymbol{w}_{k} = \boldsymbol{n}_{k} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{v}_{l} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{n}_{k}}{\partial \boldsymbol{x}_{l}} + \boldsymbol{\alpha}_{2} \cdot \boldsymbol{v}_{2l} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{n}_{k}}{\partial \boldsymbol{x}_{l}}$$

(1)

$$\mathbf{v}_{2l} = \frac{\mathbf{v}_{l} \cdot \nabla \mathbf{n}_{k}}{\left\| \nabla \mathbf{n}_{k} \right\|^{2}} \cdot \left\| \nabla \mathbf{n}_{k} = \mathbf{v}_{l} \right\| \frac{\partial \mathbf{n}_{k}}{\partial \mathbf{x}_{l}}$$
(2)

Na simulação de problemas hiperbólicos, aparecem descontinuidades de fluxo entre elementos, relacionadas à propagação e passagem das linhas caracterísitcas do problema (C+ e C-) pelas faces entre elementos adjacentes.

Observação: Linhas características são linhas nas quais a equação diferencial parcial pode ser simplificada para um sistema de equações diferenciais ordinárias, que transportam as descontinuidades como frentes de onda portadoras de informação produzida no campo de escoamento.

Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo