

MÉTODO ADAPTATIVO DE REDISTRIBUIÇÃO DE MALHA BASEADO NUMA ESTIMATIVA DE ERRO MEDIDA NAS ARESTAS DOS ELEMENTOS ATRAVÉS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Gustavo Bono

Centro de Mecânica Aplicada e Computacional (CEMACOM)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Osvaldo Aranha, 99 – 3º andar
90035-160 Porto Alegre, Brasil
gbono@genesis.cpegc.ufrgs.br

Armando Miguel Awruch

Centro de Mecânica Aplicada e Computacional (CEMACOM)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Osvaldo Aranha, 99 – 3º andar
90035-160 Porto Alegre, Brasil
amawruch@vortex.ufrgs.br

Resumo. Apresenta-se, neste trabalho, uma técnica adaptativa de elementos finitos baseada somente no movimento de nós, preservando a conectividade original dos elementos. São apresentadas aplicações para simular escoamentos compressíveis com onda de choque. Este método é caracterizado por uma estimativa de erro medida nas arestas dos elementos, e a métrica de Riemann é definida usando o tensor Hessiano, que contém derivadas segunda das variáveis relevantes. Os nós são movimentados mantendo, tanto quanto possível, a suavidade da malha e a ortogonalidade local. O sistema de equações diferenciais é resolvido usando o método de elementos finitos, empregando uma série de Taylor e o clássico método de Bubnov-Galerkin para a discretização do tempo e do espaço, respectivamente. Emprega-se um elemento isoparamétrico hexaédrico de oito nós e as correspondentes matrizes do elemento são obtidas analiticamente empregando integração numérica reduzida. Finalmente, exemplos em duas dimensões para escoamentos transônicos e supersônicos são analisados e os resultados são comparados com os obtidos por outros autores.

Palavras chave: método adaptativo de malha, escoamentos compressíveis, método dos elementos finitos

1. Introdução

Os métodos de adaptação de malha têm importante aplicabilidade em vários problemas físicos nas diversas áreas da engenharia, tais como na mecânica dos sólidos, a dinâmica dos fluidos, combustão, transferência de calor e massa, ciência dos materiais, etc.. Os fenômenos físicos nestas áreas desenvolvem algumas singularidades em determinadas regiões localizadas, podendo-se citar como exemplos: ondas de choques, camada limite, ondas de detonação, etc.

A investigação numérica destes problemas físicos pode levar à necessidade de utilização de malhas extremamente refinadas para solucionar problemas de grandes variações de algumas variáveis localizadas em pequenas regiões do domínio físico. A complexidade da solução deste tipo de problema está no fato de que, inicialmente, se desconhece onde estas regiões estão situadas.

Os métodos adaptativos na mecânica computacional são geralmente baseados em uma idéia simples: quando o erro na solução é muito grande, o tipo de aproximação (tamanho de malha, localização dos nós, ordem de aproximação, etc.) deve ser mudado com a finalidade de diminuir o erro.

Apesar da implementação da adaptação se basear, principalmente, em métodos convencionais, diversos itens ainda precisam ser definidos, como por exemplo: a idéia de tentar reduzir o erro implica que este é conhecido ou pode estimar-se de alguma maneira. Portanto, o primeiro passo em adaptação é gerar uma medida da qualidade da solução, e esta medida pode variar desde examinar *ad hoc* o gradiente da solução, até uma estimativa rigorosa do erro *a posteriori*.

A partir do momento que tem-se a estimativa do erro, necessita-se determinar como fazer para reduzir sistematicamente este erro até o nível desejado. Em geral se pode adotar diferentes estratégias (Oden et al., 1990), das quais as principais são: refinar o tamanho da malha (método de adaptação *h*), incrementar a densidade de nós na malha por realocação dos mesmos (método de adaptação *r*), incrementar localmente a ordem da aproximação (método de adaptação *p*) ou uma combinação destas técnicas (ex.: método de adaptação *h-p*).

Pode-se ressaltar que uma boa implementação da estratégia de adaptação pode levar a um considerável aumento na precisão da aproximação numérica e também a uma diminuição no custo computacional (Li et al., 2002).

Neste trabalho emprega-se o segundo método, ou seja, se realoca continuamente e automaticamente os nós dos elementos no domínio espaço-tempo de maneira a ter uma densidade da malha maior nas regiões de grandes gradientes, enquanto a malha retém a estrutura regular, tornando o processo computacional mais simples.

Em décadas passadas, este método foi um dos menos populares na comunidade de elementos finitos (Cao et al., 1999), devido principalmente ao fato de não existir um procedimento seguro, eficaz e geral para a obtenção do movimento da malha. Não obstante, o método r tem características diferentes dos outros métodos de adaptação; por exemplo, a malha pode mudar continuamente (problemas não estacionários) e, principalmente, possui uma estrutura de dados simples, sendo facilmente implementado.

2. Equações que governam o escoamento de fluidos

As equações fundamentais que governam o escoamento de um fluido viscoso, transiente são dadas pelas equações da continuidade, da quantidade de movimento e da energia. Estas equações são apresentadas em forma conservativa e podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathbf{G}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (1)$$

com:

$$\mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho v_1 \\ \rho v_2 \\ \rho v_3 \\ \rho e \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{F}_i = \begin{Bmatrix} \rho v_i \\ \rho v_1 v_i + p \delta_{i1} \\ \rho v_2 v_i + p \delta_{i2} \\ \rho v_3 v_i + p \delta_{i3} \\ v_i (\rho e + p) \end{Bmatrix}; \quad \mathbf{G}_i = \begin{Bmatrix} 0 \\ -\tau_{i1} \\ -\tau_{i2} \\ -\tau_{i3} \\ -\tau_{ij} v_j - K \frac{\partial u}{\partial x_i} \end{Bmatrix} \quad (2)$$

onde, $i = 1,2,3$, \mathbf{U} é o vetor de variáveis de campo, \mathbf{F}_i é o vetor de variáveis de fluxo e \mathbf{G}_i é o vetor de termos viscosos e de condutibilidade térmica. Nestas expressões, v_i são as componentes do vetor velocidade segundo o eixo x_i ; ρ é a massa específica do fluido; p é a pressão termodinâmica; τ_{ij} são as componentes do tensor de tensões viscosas; e e u são a energia total específica e a energia interna específica, respectivamente; K é a condutibilidade térmica dada por $K = (K_{11} + K_{22} + K_{33})/3$ onde K_{ij} são as componentes do tensor de condutibilidade térmica; δ_{ij} é o delta de Kronecker; Ω é o domínio a ser estudado; e finalmente, x_i e t são as coordenadas espaciais e temporal, respectivamente. Para fluidos Newtonianos as componentes do tensor de tensões são dados pela seguinte expressão:

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right] + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad \text{com } i, j, k = 1,2,3 \quad (3)$$

onde μ é o coeficiente de viscosidade absoluta e λ é o coeficiente de viscosidade volumétrica ($\lambda = -2 \mu/3$ para a hipótese de Stokes).

A equação de estado pode escrever-se como:

$$p = (\gamma - 1) \rho u \quad (4)$$

onde $\gamma = c_p / c_v$ é a relação entre os coeficientes de calor específico a pressão constante e a volume constante, respectivamente. Convém também expressar as seguintes relações:

$$u = c_v T = e - \frac{1}{2} v_i v_i \quad (5)$$

onde T é a temperatura e $v_i v_i / 2$ é a energia cinética específica.

Para definir totalmente o problema, deve-se adicionar ao sistema de equações, dado pela Eq. (1), as condições iniciais e de contorno para as variáveis.

3. Método de adaptação

A precisão de um esquema numérico pode aumentar notavelmente quando um número fixo de nós da malha é dinamicamente redistribuído apenas para melhorar a região onde acontecem grandes variações na solução. Também, outra vantagem que pode ocorrer é o aumento da eficiência computacional quando se compara a solução da malha adaptada com uma malha refinada.

A estabilidade na maioria dos esquemas numéricos depende da qualidade da malha, em particular da sua suavidade, portanto, o processo de adaptação da malha não teria que resultar numa excessiva e descontrolada distorção da malha inicial. Com o termo suavidade se pretende indicar que a regularidade da malha, ou seja, o tamanho de um elemento com relação a seus vizinhos não tem que variar bruscamente.

O método desenvolvido está baseado num princípio variacional com o objetivo de alcançar o controle efetivo sobre os conflitantes requerimentos de malha regular, ortogonalidade local e adaptação. Neste sentido, procura-se uma boa qualidade da malha para evitar algumas dificuldades, tais como: excessiva distorção da malha adaptada, falta de convergência do algoritmo e excessivo agrupamento dos nós o que conduz ao colapso na malha localizada nas regiões de grandes variações da solução.

O presente método foi desenvolvido a partir do método variacional apresentado por Brackbill et al. (1982), e o que abrange a parte de otimização está baseado nos trabalhos de Carcaillet et al. (1986) e Kennon et al. (1986). A análise de erro esta baseada no trabalho de Ait-Ali-Yahia et al. (1996).

A formulação do método será mostrada para um escoamento bidimensional devido ao fato de poder enxergar mais facilmente o problema, mas o algoritmo foi desenvolvido para problemas tridimensionais.

3.1. Análise

No método variacional de geração da malha empregado por Brackbill et al. (1982) conseguiu-se o controle da qualidade e adaptação da malha fazendo um mapeamento, entre o espaço físico (x, y) e o espaço computacional uniformemente discretizado (ξ, η) . As medidas das propriedades do mapeamento sobre a malha computacional propostas no trabalho foram escritas como integrais, sendo a suavidade global do mapeamento, a medida da ortogonalidade do mapeamento e o controle do volume, respectivamente, dadas por:

$$I_S = \iint \left(\left| \nabla_{xy} \xi \right|^2 + \left| \nabla_{xy} \eta \right|^2 \right) dx dy; \quad I_O = \iint \left(\nabla_{xy} \xi \right) \cdot \left(\nabla_{xy} \eta \right) J^3 dx dy; \quad (6)$$

$$I_V = \iint w(\xi, \eta) J dx dy \quad (7)$$

onde w é uma função de monitoração, ∇_{xy} é o operador gradiente e J a matriz jacobiana, respectivamente.

Este problema variacional se resolve empregando a equação de Euler-Lagrange do cálculo variacional, onde a função custo total a ser minimizada fica:

$$I = I(\xi, \eta) = I_S + \lambda_O I_O + \lambda_V I_V \quad (8)$$

onde, λ_O e λ_V são os multiplicadores de Lagrange.

A fim de melhorar a eficiência computacional e a confiabilidade, Carcaillet et al. (1986) e Kennon et al. (1986) adotaram uma formulação mais heurística para o problema de adaptação local. O método desenvolvido difere do método variacional já que em vez de usar diferenças finitas diretas para a representação das derivadas parciais em (6), utilizam-se outras aproximações para avaliar a suavidade local, ortogonalidade e controle de volume da malha.

Considera-se o problema local para a otimização de uma malha computacional a qual está descrita por quatro elementos vizinhos no caso bidimensional (ou oito elementos no caso tridimensional). Utiliza-se uma célula tipo que é definida por todos os elementos que concorrem ao nó $P_{ij} = P(x_{ij}, y_{ij})$ que é o centro da célula, conforme Fig. 1.

Considera-se que os pontos da malha unem-se por segmentos de linha reta, os quais ficam definidos por vetores posição, r , que unem o ponto P_{ij} com os vizinhos imediatos.

A célula tipo é suave se existem mudanças mínimas de área (ou volume no caso tridimensional) de uma célula elementar à outra vizinha. A medida que quantifica a suavidade local da malha, $SM_{i,j}$, é formada pela soma dos quadrados das diferenças de áreas de um elemento para o próximo:

$$SM_{i,j} = (A_1 - A_2)^2 + (A_2 - A_3)^2 + (A_3 - A_4)^2 + (A_4 - A_1)^2 \quad (9)$$

onde A_k é uma medida da área dos k elementos.

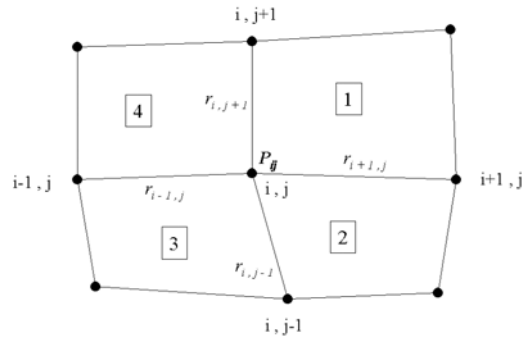


Figura 1. Célula tipo definida para o caso bidimensional.

A célula tipo é ortogonal se as linhas de coordenadas curvilíneas $\xi = i = \text{constante}$ e $\eta = j = \text{constante}$ interceptam P_{ij} num ângulo reto, conforme Fig. 1. Portanto, a quantidade que resulta em uma medida da ortogonalidade local da célula tipo é determinada pelo produto escalar dos vetores posição que estão associados ao nó central:

$$ORT_{i,j} = (r_{i+1,j} \cdot r_{i,j+1})^2 + (r_{i,j-1} \cdot r_{i+1,j})^2 + (r_{i-1,j} \cdot r_{i,j-1})^2 + (r_{i,j+1} \cdot r_{i-1,j})^2 \quad (10)$$

O funcional de controle do volume para a célula tipo é escrito pela fórmula geral:

$$VOC_{i,j} = A_{ij} \cdot W_{i,j} \quad (11)$$

Nesta equação A_{ij} é a área da célula tipo (ou volume para o caso tridimensional) e $W_{i,j}$ é de uma função de ponderação (ou função de monitoração) apropriadamente escolhida, que adquire somente valores positivos, e avaliada em P_{ij} . Facilmente pode-se observar na Eq. (11) que minimizar a soma de todas as células tipo do funcional do volume de controle farão que a célula tipo diminua sua área (ou volume no caso tridimensional) quando $W_{i,j}$ é grande e aumenta quando $W_{i,j}$ é pequeno.

A função objetivo global, F , obtém-se por uma combinação linear ponderada das medidas da qualidade local da malha e do funcional de controle de volume local para cada célula tipo, de maneira que sobre todas as células tipo ficará:

$$F = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \left[\alpha \cdot \frac{ORT_{i,j}}{ORT_{\max}} + (1-\alpha) \frac{SM_{i,j}}{SM_{\max}} + \beta \cdot VOC_{i,j} \right], \quad \text{com } 0 \leq \alpha \leq 1 \text{ e } 0 \leq \beta \leq 1 \quad (12)$$

onde, α e β são parâmetros de ponderação que permitem controlar a suavidade da malha e ortogonalidade local no caso de otimização estática (ou seja com $\beta = 0$) ou de adaptação (ou seja com $\beta \neq 0$).

Sendo:

$$ORT_{\max} = \max_{i,j} [ORT_{i,j}] \quad \text{e} \quad SM_{\max} = \max_{i,j} [SM_{i,j}]$$

normaliza-se $SM_{i,j}$ e $ORT_{i,j}$ por seu valor máximo para assegurar que cada medida seja do mesmo ordem de magnitude na expressão de F em Eq. (12).

A função objetivo global pode-se rescrever como função do vetor T contendo as coordenadas físicas de todos os nós da malha e ordenados naturalmente:

$$T = \left\{ (x_{ij}, y_{ij}) : 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n \right\} \quad (13)$$

onde, m e n são a quantidade de nós na direção i e j , respectivamente. Desta forma, pode-se escrever que na expressão (12), $F = F(T)$. A minimização sem restrições da função $F(T)$, de $2 \times m \times n$ variáveis, realiza-se usando o método de gradiente conjugado de Fletcher-Reeves (Press et al., 1992).

Empregou-se para caso tridimensional a medida de suavidade e ortogonalidade proposta por Kennon et al. (1986). A medida de suavidade local está dada pela distância relativa entre o nó da malha e seus vizinhos e é apresentada pela seguinte expressão:

$$SM_{i,j,k} = (r_{i+1,j,k} \cdot r_{i+1,j,k}) + (r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j-1,k}) + (r_{i-1,j,k} \cdot r_{i-1,j,k}) + (r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j+1,k}) + (r_{i,j,k+1} \cdot r_{i,j,k+1}) + (r_{i,j,k-1} \cdot r_{i,j,k-1}) \quad (14)$$

enquanto que a medida de ortogonalidade local fica:

$$ORT_{i,j,k} = (r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j+1,k})^2 + (r_{i,j-1,k} \cdot r_{i+1,j,k})^2 + (r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j-1,k})^2 + (r_{i,j+1,k} \cdot r_{i-1,j,k})^2 + (r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j,k-1})^2 + (r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j,k-1})^2 + (r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j,k-1})^2 + (r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j,k-1})^2 + (r_{i+1,j,k} \cdot r_{i,j,k+1})^2 + (r_{i,j-1,k} \cdot r_{i,j,k+1})^2 + (r_{i-1,j,k} \cdot r_{i,j,k+1})^2 + (r_{i,j+1,k} \cdot r_{i,j,k+1})^2 \quad (15)$$

3.2. Função de peso ou de monitoração

O objetivo final do processo de adaptação é prever as características da malha ótima. Esta pode ser definida como a malha na qual o número de graus de liberdade requeridos para atingir um nível específico de precisão é mínimo. Portanto, a escolha da função de peso W_{ij} , do funcional de controle de volume é muito importante já que este tem que indicar as regiões onde deve-se fazer a adaptação da malha. Ou seja, desta escolha dependerá a maior ou menor eficiência do método.

A obtenção da malha ótima é extremamente difícil devido a diversos fatores, como por exemplo:

- o conceito de ótimo está intimamente ligado com a precisão, não tendo uma única definição. Por isso, para definir o ótimo de uma malha necessita-se estabelecer uma norma ou a uma medida de erro.
- as estimativas de erro produzidas são baseadas na solução computacional e portanto dependerão da mesma.

Em vista destas observações e limitações, desenvolveu-se uma estratégia heurística de adaptação, empregando o critério de erro. Estima-se o erro direcional para o esquema de movimento de malha baseado nos trabalhos de Ait-Ali-Yahia et al. (1996, 1997).

As estimativas exatas do erro são frequentemente difíceis de obter para problemas complexos e/ou custosas de avaliar. Portanto, aceita-se uma estimativa menos precisa, mas computacionalmente simples a fim de melhorar a adaptação. Uma vez que a estimativa de erro somente serve como um indicativo do erro relativo entre malhas sucessivas, esta não deve levar mais que uma porcentagem pequena do tempo total da solução.

Considera-se um problema unidimensional no qual a solução da variável ρ é aproximada por ρ_h , usando uma função de interpolação linear. O erro local E_e define-se, sobre um elemento e , como:

$$E_e(\xi) = \rho(\xi) - \rho_h(\xi) \quad (16)$$

Se a solução exata é uma função linear, então o erro seria nulo devido ao tipo de função de interpolação empregada. Uma alternativa para estimar uma aproximação quadrática a partir de elementos finitos lineares é empregada. Assume-se que os valores nodais das aproximações lineares e quadráticas coincidem, ou seja, o valor nodal do erro é nulo. Portanto, uma solução quadrática pode-se construir em cada elemento, uma vez que o valor da segunda derivada é conhecido. Expandindo a solução ρ desde a extremidade do elemento e e considerando que o erro nodal é zero, o erro E_e de um elemento com interpolação quadrática sobre um elemento com interpolação linear pode-se escrever como:

$$E_e = \frac{1}{2} \xi (h_e - \xi) \left. \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e \quad (17)$$

onde, h_e representa o comprimento do elemento e ξ é a coordenada local do elemento. Esta solução aproximada é exata para os nós. O erro total sobre o elemento no intervalo $[0, h_e]$ determina-se através da raiz média quadrática (*rms*) e é definido por Peraire et al. (1987), como sendo:

$$E_e^{rms} = \left\{ \int_0^{h_e} \frac{E_e^2}{h_e} d\xi \right\}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{120}} h_e^2 \left. \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e \quad (18)$$

Desta maneira, o erro de interpolação deste problema unidimensional é proporcional ao produto da derivada segunda e ao quadrado do comprimento característico do elemento h_e .

Portanto, a malha ótima é definida como a malha na qual a *rms* é equidistribuída sobre todo o elemento, isto é,

$$h_e^2 \left| \frac{d^2 \rho_h}{dx^2} \right|_e = C \quad (19)$$

onde, C denota uma tolerância especificada pelo usuário (constante e positiva).

A metodologia mostrada acima é estendida para o caso de elementos multidimensionais, devido a que o contorno de cada elemento bidimensional (ou tridimensional) pode ser considerado como um elemento unidimensional. A segunda derivada de ρ_h é agora considerada com relação a uma direção definida pelo vetor unitário \mathbf{V} , como segue:

$$\frac{\partial^2 \rho_h}{\partial \mathbf{V}^2} = \mathbf{V}^T \mathbf{H} \mathbf{V} \quad (20)$$

onde, \mathbf{H} representa a matriz Hessiana de ρ_h .

Uma vez que ρ_h é linear, a derivada segunda não pode representar-se. Portanto, para restaurar uma estimativa contínua da derivada segunda emprega-se uma formulação fraca (Ait-Ali-Yahia et al., 1996), porém combinada com uma massa discreta ou diagonalizada, obtêm-se os valores nodais, seguintes:

$$\left. \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x_j^2} \right|_I = \frac{\left[-\int_{\Omega_I} \left(\frac{\partial \phi^T}{\partial x_j} \phi \right) d\Omega \right] \left(\frac{\partial \rho_h}{\partial x_i} \right) + \left[\int_{\Gamma_I} \phi^T \phi n_j d\Gamma \right] \left(\frac{\partial \rho_h}{\partial x_i} \right)}{\left[\int_{\Omega_I} \phi^T \phi d\Omega \right]} \quad \text{com } I = 1, \dots, Nnos \text{ e } ij = 1, 2, 3 \quad (21)$$

onde, $Nnos$ é o número total de nós da malha, ϕ é um vetor contendo as funções de forma, Ω_I é a área (ou volume no caso tridimensional) dos elementos que compartilham o nó I , sendo Γ_I os contornos desses elementos. As derivadas $\partial \rho_h / \partial x_i$ são os valores nodais da derivada primeira nos elementos considerados, e obtidos através de um processo de suavização baseado no método dos mínimos quadrados.

A matriz \mathbf{H} pode-se diagonalizar da seguinte maneira:

$$\mathbf{H} = \mathbf{R}(\alpha) \mathbf{A} \mathbf{R}^T(\alpha) \quad (22)$$

onde, \mathbf{A} é a matriz diagonal dos valores próprios de \mathbf{H} , e \mathbf{R} é a matriz dos vetores próprios. A transformação $|\mathbf{A}|$ é o valor absoluto das derivadas segundas na direções dos eixos obtidos por uma rotação de um ângulo α com respeito aos eixos originais x_1 e x_2 , fazendo corresponder o menor autovalor λ_1 com o eixo x_I . Esta rotação se operacionaliza através da matriz de rotação $\mathbf{R}(\alpha)$, e elimina as derivadas segundas cruzadas.

Devido a que o erro deve ser positivo, a segunda derivada de ρ_h em qualquer direção é limitada por:

$$\left| \frac{\partial^2 \rho_h}{\partial x^2} \right| = |\mathbf{V}^T \mathbf{H} \mathbf{V}| \leq \mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V} \quad (23)$$

onde, a matriz Hessiana modificada $\bar{\mathbf{H}}$ é uma matriz simétrica e positiva definida, que foi obtida considerando os valores absolutos dos autovalores da matriz Hessiana \mathbf{H} , ou seja, que $\bar{\mathbf{H}}$ vem dada por:

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{R}(\alpha) |\mathbf{A}| \mathbf{R}^T(\alpha) = \mathbf{S}(\alpha) \mathbf{S}^T(\alpha) \quad (24)$$

onde, $\mathbf{S}(\alpha) = \mathbf{R} / \sqrt{|\mathbf{A}|}$, conforme Strange (1988). A transformação \mathbf{S} de um círculo de raio unitário seria uma elipse, girada em um ângulo α e cujos eixo maior e eixo menor são os recíprocos da raiz quadrada dos autovalores $|\lambda_1|$ e $|\lambda_2|$, respetivamente. Então, pode-se obter um movimento direcional da malha mapeando uma malha uniforme através da transformação $\mathbf{S}(\alpha)$. No caso tridimensional, a esfera de raio unitário transforma-se em um elipsoide.

O critério de adaptação unidimensional dado na Eq. (19) pode ser reescrito para um problema bidimensional ou tridimensional como:

$$h_e^2 \mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V} = C \quad (25)$$

No método desenvolvido, o erro é equidistribuído sobre o contorno do elemento, onde $h_e = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|$ representa a medida Euclidian do comprimento de um elemento de extremidades $[x_i, x_j]$ e $\mathbf{V} = (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)/h_e$ é o vetor de base unitário. O termo $\mathbf{V}^T \bar{\mathbf{H}} \mathbf{V}$ na Eq. (25) é definido como a métrica de Riemann.

Portanto, uma malha ótima é definida como aquela na qual o comprimento de todos os contornos na métrica definida é igual a \sqrt{C} . O princípio de equidistribuição é aplicado para um comprimento d na métrica de Riemann, lembrando que $\bar{\mathbf{H}}$ é função das coordenadas espaciais, e que então é necessário integrar ao longo do comprimento do lado. A estimativa baseada no erro é computada avaliando numericamente a seguinte fórmula para cada contorno da malha:

$$d^2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T \bar{\mathbf{H}}_m (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (26)$$

sendo $\bar{\mathbf{H}}_m$ o valor médio, obtido através dos valores de $\bar{\mathbf{H}}$ nos extremos do contorno considerado.

Esta estimativa do erro baseado no contorno do elemento é calculada em cada nó somando os valores de d^2 que concorrem a esse nó e é válido para toda a célula tipo; como as mesmas tem diferentes tamanhos, toma-se o valor de d^2 por unidade de volume. Tem que se notar que o escalar $d(x_i, x_j)$ representa o erro na direção do contorno do elemento em que é determinado.

Finalmente, neste trabalho, o funcional VOC a ser minimizado na função F , Eq. (12), é definido como d^2 por unidade de volume em lugar da Eq. (11).

4. Resultados numéricos

Para todos os casos investigados em este trabalho, a massa específica é a variável empregada para a estimativa do erro. A adaptação sempre inicia-se quando o resíduo tem pouca variação, e uma vez concluído o processo de adaptação, continua-se aplicando o MEF até atingir a convergência final.

As novas coordenadas da malha obtêm-se depois de aplicar um coeficiente de relaxação (θ_x, θ_y e θ_z) nos incrementos Δx , Δy e Δz , para cada uma das direções. Os coeficientes de relaxação variam em um intervalo de 0 a 1 de maneira de evitar excessivos deslocamento dos nós. Os incrementos são determinados pela diferença das coordenadas novas e antigas, nas três direções.

Convém mencionar que cada vez que a malha é adaptada, é introduzida na Eq. (1) uma formulação Arbitrária Lagrangeana-Euleriana (ALE) calculando-se a componente da velocidade com que os nós da malha se movem, ou seja, $w_1 = \Delta x / \Delta t$, $w_2 = \Delta y / \Delta t$ e $w_3 = \Delta z / \Delta t$.

Vale salientar que a malha de elementos finitos sempre é formada por elementos hexaédricos de 8 nós, com apenas uma camada de elementos na direção z , por tratar-se de problemas bidimensionais. Portanto, considerou-se $\theta_z = 0$ em todos os exemplos.

4.1. Função de monitoração analítica

Neste exemplo, analisa-se como influenciam os parâmetros de controle da função objetivo global, sobre uma cavidade quadrada de paredes fixas e lados igual a 1 unidade. A malha de elementos finitos é formada por 882 nós e 400 elementos (20 x 20 x 1). Todos os elementos têm as mesmas dimensões.

A função analítica que se impõe é dada por:

$$F(x, y) = 1000 \exp\{-20[(x^2 - 0.2) + (y^2 - 0.2)]\} + 800 \exp\{-50[(x^2 - 0.6) + (y^2 - 0.7)]\} + 800 \exp\{-50[(x^2 - 0.8) + (y^2 - 0.2)]\} \quad (27)$$

onde, x e y são as coordenadas espaciais.

Na Fig. 2 mostram-se a malha inicial e as malhas para diferentes valores do parâmetro α (0 e 0,5) com β fixo ($\beta = 1$). Pode-se concluir que considerando o coeficiente α diferente de zero, o termo de controle de volume passa a ter uma maior importância em comparação com os termos de controle de qualidade da malha, onde a maior concentração da malha surge para o caso em que $\alpha = 0,5$, Fig. 2, caso (B). Deve-se notar que para este exemplo o efeito da

ortogonalidade e suavização não podem ser corretamente analisados devido ao fato de que a malha inicial é igualmente espaçada e ortogonal.

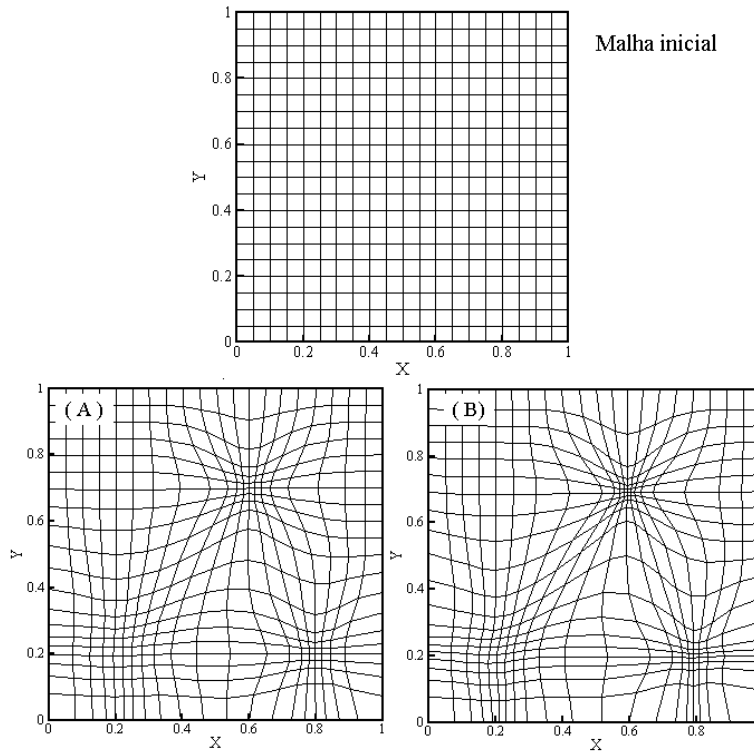


Figura 2. Variação da malha em função do parâmetro α com $\beta = 1$. Caso (A): $\alpha = 0$ e caso (B): $\alpha = 0,50$.

O efeito do parâmetro β é pouco significativo quando se tem valores maiores que 1. Enquanto que valores do parâmetro α diferentes de 0,5 também afetam pouco o resultado final da malha uma vez que partiu-se de uma malha uniforme e com ortogonalidade. Portanto, para todos os exemplos serão tomado $\alpha = 0,5$ e $\beta = 1$.

4.2. Escoamento sobre uma rampa

Analisa-se o escoamento supersônico ($M = 3$), estacionário e não difusivo, através de uma rampa de 16° cuja geometria é mostrada esquematicamente na Fig. 3.

A malha é formada por 2322 nós e 1092 elementos. O processo de adaptação foi constituído de 8 adaptações, as quais se fazem a cada 900 iterações. Define-se a malha inicial como malha (A) e a malha final como malha (I), sendo cada adaptação intermediária definida pela seqüência das letras. Este procedimento será utilizado em todos os exemplos. Para os coeficientes de relaxação empregou-se $\theta_x = 0,12$ e $\theta_y = 1,0$.

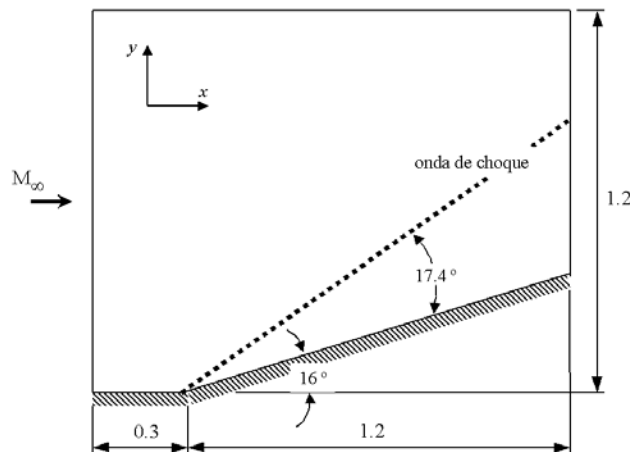


Figura 3. Esquema do escoamento supersônico sobre uma rampa.

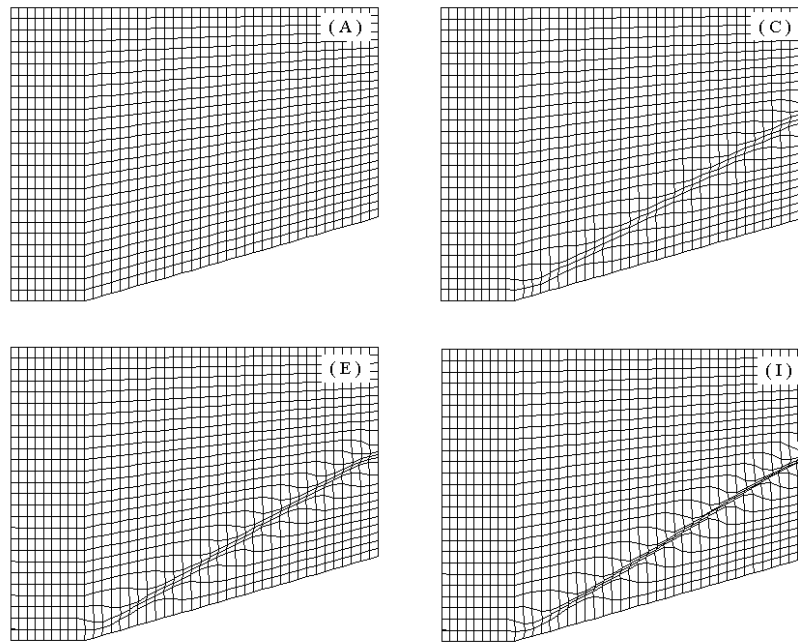


Figura 4. Evolução da malha para alguns ciclos. Malha (A) ou malha inicial, malha (C) depois de duas adaptações, malha (E) depois de quatro adaptações e malha (I) ou malha final, depois de oito adaptações.

Na Fig. 4 mostra-se a evolução da malha para alguns ciclos, podendo observar que o processo de adaptação da malha faz com que os elementos se concentrem ao longo da linha onde a onda de choque aparece, mostrada pela linha tracejada da Fig. 3.

O gráfico de distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0,60$ e $0 \leq x \leq 1,20$ é apresentado na Fig. 5. Note-se que com a malha (I) são capturados altos gradientes de massa específica, entretanto, com a malha sem adaptação (malha A) é capturado um gradiente menos acentuado. A origem do sistema de eixos coordenados, localiza-se no início da rampa.

Finalmente, mostra-se a variação de resíduo, na Fig. 6. O processo de adaptação iniciou-se quando o resíduo começa a ter pouca variação, ou seja, para o passo de tempo igual a 8000. Os picos no resíduo são devido à nova malha obtida depois de cada adaptação. Uma vez concluída a última adaptação, adaptação (I), deixa-se finalmente convergir.

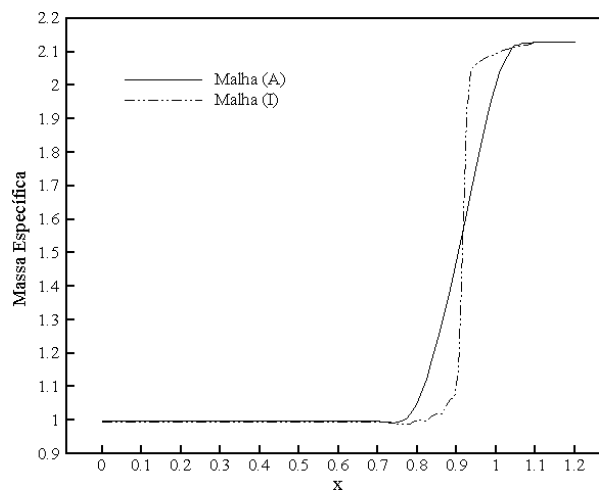


Figura 5. Distribuição da massa específica ao longo da linha $y = 0,60$ e $0 \leq x \leq 1,20$ para a malha inicial (Malha A) e para a malha final (Malha I).

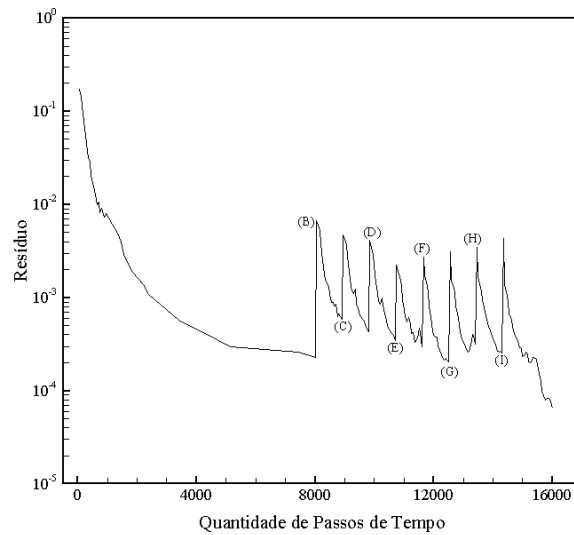


Figura 6. Resíduo para o problema da rampa.

4.3. Escoamento sobre um aerofólio

Este exemplo consiste na passagem de um escoamento transônico ($M = 0.8$) compressível, não difusivo, sobre um aerofólio NACA 0012 com o ângulo de ataque da corrente-livre igual a $\alpha = 1,25^\circ$. A malha possui 9940 nós e 4800 elementos.

O processo de adaptação foi constituído de 4 adaptações, as quais se fazem a cada 300 iterações, empregando-se $\theta_x = 0,20$ e $\theta_y = 0,01$ para os coeficiente de relaxação.

Na Fig. 7, mostram-se a malha inicial e a malha obtida depois de 4 adaptações, Malha (E). A distribuição do número de Mach para a malha inicial (Malha A) e malha final (Malha E) é apresentada na Fig. 8. Convém mencionar que no processo de adaptação, os nós sobre o contorno do aerofólio foram deixados livres, ou seja, os mesmo podem-se deslocar.

A malha empregada e a distribuição do número de Mach obtida por Baumann et al. (1992) é mostrada na Fig. 9. Deve salientar que neste trabalho se fez um refinamento na região onde está localizada a onda de choque. Note-se que os resultados são bastantes similares aos obtidos com a malha E (observe-se Fig. 8), porém sem as complexidades associadas com o refinamento.

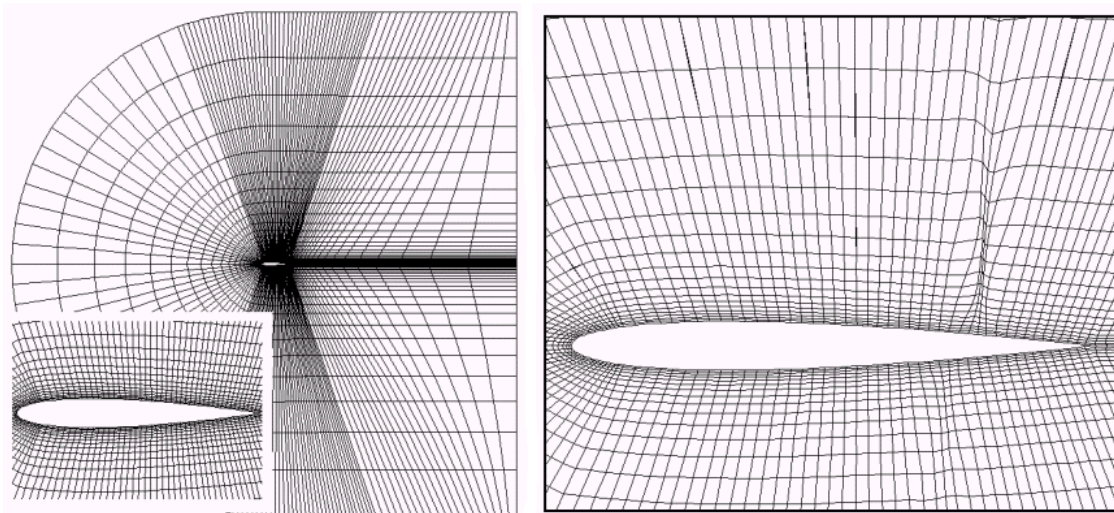


Figura 7. Malha inicial e detalhe da malha final (Malha E).

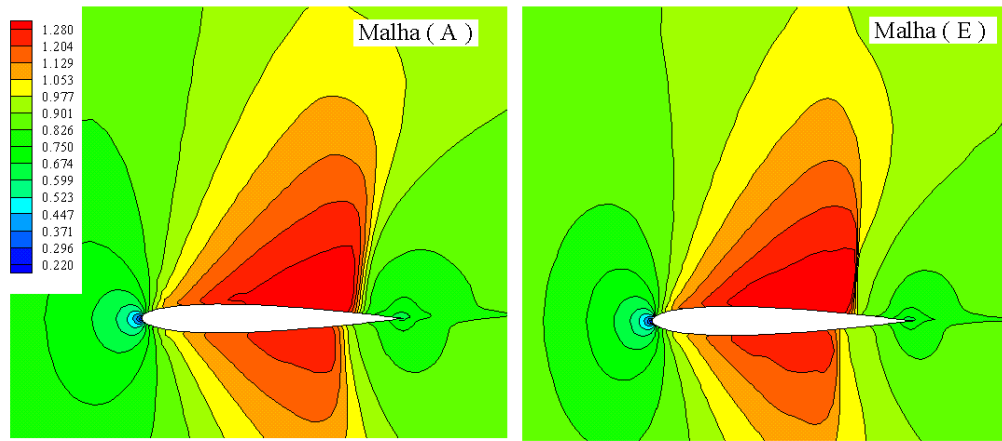


Figura 8. Distribuição de número de Mach na malha inicial, Malha (A) e na malha final, Malha (E).

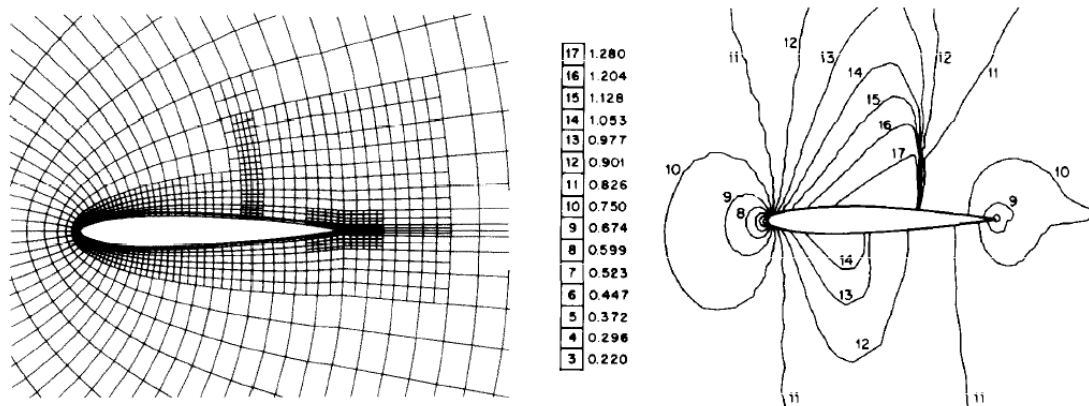


Figura 9. Malha e distribuição do número de Mach, segundo Baumann et al. (1992).

5. Conclusões

No presente trabalho descreve-se a adaptação de malhas, via movimento dos nós (método r) em escoamentos de fluidos compressíveis não difusivos, fazendo uso da estimativa de erro *a posteriori* e da métrica de Riemann definida por meio do tensor Hessiano. O movimento da malha foi feito mantendo no máximo possível a suavidade e ortogonalidade local.

Inicialmente, apresenta-se um problema teórico, onde é prescrita uma função de monitoração, a fim de estudar o efeito dos parâmetros de controle da função objetivo global. Neste exemplo, conclui-se que os parâmetro de controle de ortogonalidade e de suavização, α , potencializam o termo de controle de volume quando os mesmos são diferentes de zero devido ao fato que mais elementos são concentrados em regiões de grande erro.

Assim, o problema do canal com um obstáculo em rampa tem mostrado que a implementação do método de adaptação melhora notavelmente os resultados nas regiões com fortes gradientes em comparação com os resultados obtidos no caso da malha fixa.

Para escoamentos em regime transônico, a utilização de adaptação da malha também é vantajosa, porém poderia concentrar mais elementos na onda de choque que está no intradós do aerofólio. Provavelmente isto pode acontecer devido ao fato de que a intensidade de ambas ondas de choque serem bem diferentes e, portanto, os erros associados a estas também são bem diferentes.

Mais estudos devem ser realizados em relação à obtenção das derivadas da variável de interesse nos nós, já que a extrapolação atual parece apresentar algumas imprecisões nos valores das derivadas nos contornos, como no exemplo do aerofólio.

6. Referências

Ait-Ali-Yahia, D.; Habashi, W. G. e Tam, A., 1996. "A Directionally Adaptive Methodology Using na Edge-Based Error Estimate on Quadrilateral Grids ", International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 23, pp. 673-690.

- Ait-Ali-Yahia, D. e Habashi, W. G., 1997. "Finite Element Adaptive Method for Hypersonic Thermochemical Nonequilibrium Flows", AIAA J., Vol.35, No 8, pp. 1294-1302.
- Baumann, C. E.; Storti, M. A. e Idelsohn, C., 1992. "A Petrov-Galerkin Technique for the Solution of Transonic and Supersonic Flows", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 95, pp. 49-70.
- Brackbill, J. U. e Saltzman, J. S., 1982. "Adaptive Zoning for Singular Problems in Two Dimensions", Journal of Comput. Phys., Vol. 46, pp. 342-368.
- Carcaillet, R., Dulikravich, G. S. e Kennon, S. R., 1986. "Generation of Solution-Adaptive Computational Grids Using Optimization", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 57, pp. 279-295.
- Cao, W.; Huang, W. e Russell, R. D., 1999. "A r -Adaptive Finite Element Method Based upon Moving Mesh PDEs", Journal of Comput. Phys., Vol. 149, pp. 221-244.
- Kennon, S. R. e Dulikravich, G. S., 1986. "Generation of Computational Grids Using Optimization", AIAA J., Vol. 24, pp. 1069-1073.
- Li, R.; Tang, T. e Zhang, P., 2002. "A Moving Mesh Finite Element Algorithm for Singular Problems in Two and Three Space Dimensions", Journal of Comput. Phys., Vol. 177, pp. 365-393.
- Oden, J. T.; Bass, J. M.; Huang, C. Y. e Berry, C. W., 1990. "Recent Results on Smart Algorithms and Adaptive Methods for Two- and Three-Dimensional Problems in Computational Fluid Mechanics", Computer & Structures, Vol. 35, No 4, pp. 381-396.
- Peraire, J., Vahdati, M., Morgan, K. e Zienkiewicz, O. C., 1987. "Adaptive Remeshing for Compressible Flow Computations", Journal of Comput. Phys., Vol.72, pp. 449-466.
- Press, W. H.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T. e Flannery, B. P., 1992. "Numerical Recipes in Fortran 77 – The Art of Scientific Computing", Second Edition, Cambridge University Press, New York, USA.
- Strang, G., 1988. "Linear Algebra and Its Applications", Harcourt Brace & Company, New York.

ADAPTATIVE MESH REDISTRIBUTION METHOD USING AND EDGE-BASED ERROR ESTIMATE ON THE FINITE ELEMENT METHO

Gustavo Bono
Centro de Mecânica Aplicada e Computacional (CEMACOM)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Osvaldo Aranha, 99 – 3º andar
90035-160 Porto Alegre, Brasil
gbono@genesis.cpgec.ufrgs.br

Armando Miguel Awruch
Centro de Mecânica Aplicada e Computacional (CEMACOM)
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Osvaldo Aranha, 99 – 3º andar
90035-160 Porto Alegre, Brasil
amawruch@vortex.ufrgs.br

Abstract

An adaptive finite element technique based only in nodes motion, preserving the original element connectivity, is described in this work. Applications to simulate high compressible flows with strong shocks are also presented. This method is characterized by an edge-based estimate, and the Riemannian metric is defined using the Hessian tensor, which contains second derivatives of a relevant variable. The nodes are moved keeping, as much as possible, mesh smoothness, local orthogonality and cell volume control. The system of partial differential equations is solved using the finite element method, employing a Taylor series and the classical Bubnov-Galerkin methods for time and space discretization, respectively. An isoparametric eight node hexahedral element is used and the corresponding element matrices are obtained analytically employing reduced numerical integration. Examples for two-dimensional transonic and supersonic flows are investigated and results are compared with those obtained by other authors.

Keywords: adaptive mesh method, high compressible flows, finite element method.