



ESTUDOS PARA OTIMIZAR O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS EM MALHAS DE VORONOI

João Flávio Vieira de Vasconcellos

IPRJ - UERJ

Cx. P. 97.282 - CEP 28.601-970

Nova Friburgo - Rio de Janeiro - Brasil

Clovis Raimundo Maliska

EMC - UFSC

Cx. P. 476 - CEP 88040-900

Florianópolis - Santa Catarina - Brasil

Resumo. *A função de interpolação e a forma como são calculados os gradientes de pressão representam aspectos fundamentais no método dos volumes finitos. Neste trabalho estes aspectos são analisados considerando-se quatro esquemas de avaliações de gradientes de pressões na solução de problemas de mecânica dos fluidos. A influência da forma da malha, associada ao cálculo do gradiente de pressão e da função de interpolação, recebe atenção especial no trabalho.*

Palavras-chave: Volumes Finitos, Malhas Não-Estruturadas, Diagramas de Voronoi, Função de Interpolação

1. INTRODUÇÃO

Historicamente, o método de volumes finitos clássico tem como grande limitador a geometria. Problemas envolvendo escoamentos em geometrias complexas deixaram de ser analisados por este método devido à dificuldade no mapeamento dessa geometria. Algumas alternativas foram desenvolvidas com o intuito de ampliar a abrangência do método para domínios complexos. Cita-se o uso de coordenadas que se ajustam com a fronteira ou, ainda, a técnica de dividir o domínio em vários subdomínios. Isoladamente ou em conjunto estas técnicas permitiram que o método de volumes finitos fosse usado na simulação de problemas físicos envolvendo geometrias bastante complexas. Mas, mesmo assim, a geometria continuou sendo um limitante do método. A razão é que a causa dessa limitação não foi atacada por essas duas técnicas supracitadas. O uso de um sistema de coordenadas global, que obriga um mapeamento do domínio dispondo os volumes segundo uma linha coordenada, é a causa primária da limitação geométrica. O método de elementos finitos, por exemplo, que faz uso de um sistema de coordenadas local, não apresenta, em princípio, limitações quanto à geometria. Para resolver esta questão de uma vez, atacando a causa, pesquisadores têm proposto variações do método de volumes finitos que usam malhas não-estruturadas e cujas equações diferenciais são discretizadas usando sistemas de coordenadas locais.

Este tipo de metodologia tem crescido na literatura pertinente, porém não é objetivo deste trabalho realizar uma análise sobre estes métodos. Uma revisão bibliográfica pode ser encontrada em Vasconcellos (1999). Neste trabalho trataremos de dois aspectos que surgem nestes métodos. Na solução de problemas envolvendo escoamentos incompressíveis há a necessidade do cálculo do gradiente de pressão e em malhas estruturadas, a determinação desse gradiente é realizada sem maiores dificuldades, pois o sistema de coordenadas está necessariamente alinhado com os pontos em que os valores de pressão estão armazenados. Mas, esta facilidade não é mais encontrada quando se deixa de usar o sistema de coordenadas global. Para resolver esta questão algumas alternativas foram propostas. Quatro delas são analisadas neste trabalho: o método do mínimo resíduo quadrático, *MMRQ*, o método do balanço de forças, *MBF*, o método da média dos gradientes projetados, *MMGP*, e o método da média dos gradientes projetados corrigidos, *MMGPC*. Cada um destes métodos apresentam suas características próprias que serão discutidas na próxima seção.

O outro aspecto tratado neste trabalho é a influência da função de interpolação. Como se sabe os valores das propriedades são calculados nos pontos geradores dos volumes, mas existe a necessidade de se avaliar estas propriedades nas faces. Existem diversas formas de fazê-lo em malhas estruturadas, mas algumas das funções de interpolação usualmente encontradas em malhas estruturadas não possuem, ainda, seu similar para malhas não-estruturadas, como o QUICK (Leonard, 1979). Neste trabalho usou-se uma adaptação do WUDS (Raithby e Torrence, 1974) para malhas de Voronoi desenvolvida por Maliska (1995a). Até onde os autores puderam determinar, não há na literatura um estudo sobre o comportamento desta função de interpolação em malhas não-estruturadas usando volumes finitos.

2. APRESENTAÇÃO DOS MÉTODOS DE CÁLCULO DO GRADIENTE DE UM VETOR

Os métodos que serão apresentados a seguir foram testados na solução de problemas de mecânica dos fluidos usando a metodologia apresentada por Maliska (1995a). Nesta referência há o detalhamento de uma metodologia de volumes finitos que faz uso de um tipo particular de malha: a malha de Voronoi. Esta malha tem a singular característica de ser localmente ortogonal. Esta característica, que irá influenciar os métodos de cálculo de gradientes, faz com que a metodologia de volumes finitos tenha uma formulação mais simples do que as que usam malhas não-estruturadas genéricas. Em contrapartida, a geração de tal malha exige um código computacional mais robusto.

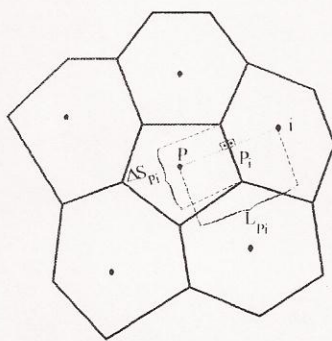


Figura 1 - Malha de Voronoi com 5 pontos geradores

A característica de ortogonalidade pode ser vista na Figura 1 onde há um diagrama de Voronoi com 5 pontos geradores. A face que separa o *i*-ésimo volume do volume *P* é perpendicular à linha que liga os pontos geradores destes volumes. Esta face também é equidistante à estes dois pontos. Conhecido o tipo de malha que será tratado neste trabalho, apresentaremos as equações das metodologias usadas para o cálculo do gradiente. Um detalhamento de cada uma destas metodologias poderá ser encontrado nas seguintes referências: Vasconcellos (1999) e Santos *et alli* (1999).

2.1 MÉTODO DO MÍNIMO RESÍDUO QUADRÁTICO

O método do mínimo resíduo quadrático, desenvolvido por Taniguchi *et alli* (1991), usa um princípio de

minimização para cada um dos volumes de controle do somatório dos quadrados dos resíduos definidos como:

$$R_k = (\nabla P)_p \cdot \vec{n}_k - \frac{\Delta P}{\Delta n} \Big|_k \quad (1)$$

Minimizando R_k por mínimos quadrados chega-se a seguinte expressão para o cálculo do gradiente (Cardoso, 1997)

$$\begin{bmatrix} \sum_i^N e_{xi}^2 g^{pi} & \sum_i^N e_{xi} e_{yi} g^{pi} \\ \sum_i^N e_{xi} e_{yi} g^{pi} & \sum_i^N e_{yi}^2 g^{pi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\Delta P}{\Delta x} \\ \frac{\Delta P}{\Delta y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i^N e_{xi} g^{pi} \nabla P_i \\ \sum_i^N e_{yi} g^{pi} \nabla P_i \end{bmatrix} \quad (2)$$

onde

$$g^{pi} = \frac{\Delta S_{pi}}{L_{pi}} \quad (3a)$$

$$\nabla P_i = \frac{P_i - P_p}{L_{pi}} \quad (3b)$$

com e_{xi} e e_{yi} sendo as componentes do vetor normal à face dos volumes nas direções x e y , respectivamente. A Eq. (2) precisa ser determinada para cada um dos volumes cada vez que for necessário avaliar o gradiente de pressão. A matriz dos coeficientes do sistema linear é função somente da malha, portanto, seu cálculo precisa ser realizado uma única vez, para cada um dos volumes. A única restrição encontrada para este método é a necessidade que um volume finito tenha, no caso bidimensional, no mínimo dois vizinhos para a aplicação desta metodologia.

2.2 MÉTODO DO BALANÇO DE FORÇAS

Este método é o único entre os apresentados que se origina de uma base física. Desenvolvido por Jameson e Mavriplis (1986) é de concepção bastante simples e, entre os métodos aqui citados, o que mais aparece na literatura, sendo encontrado inclusive em artigos de elementos finitos. Este método apresenta uma dificuldade maior que os demais que serão aqui apresentados. Na sua formulação é necessário conhecer os valores de P em todas as faces do domínio, inclusive nas fronteiras. Como na fronteira este valor não está disponível, algum tipo de interpolação deve ser feita. Uma boa análise deste artigo pode ser encontrada em Peters (1992). A equação para este método é a seguinte:

$$\vec{\nabla} P = \frac{1}{2V_p} \sum_i^N P_i \vec{n}_i S_{pi} \quad (4)$$

com \vec{n} o vetor normal a face i e V_p , a área do volume P . Na forma como foi deduzida, a Eq. (4) é válida somente para os volumes internos, aqueles cujas faces não pertencem ao contorno. Para os volumes em que pelo menos uma das faces pertençam ao contorno, esta equação não é mais apropriada e uma interpolação deve ser feita. A maneira mais simples é, para estas faces, fazer $P_i = P_p$, e usar a Eq. (4) normalmente. Matematicamente isto implica em impor a condição de contorno de derivada normal nula. Para alguns problemas isto é verdade ou pelo menos é aceitável, mas há situações físicas em que não se pode proceder desta maneira. Uma outra forma de interpolação para a pressão deve ser feita.

2.3 MÉTODO DA MÉDIA DOS GRADIENTES PROJETADOS

Em Maliska (1995a, 1995b) foi proposta uma maneira para a determinação do cálculo do gradiente de um vetor baseado nos valores dos gradientes projetados. Esta formulação não possui o embasamento físico visto no MBF e nem é matematicamente tão consistente como o MMRQ. Apesar disto, alguns trabalhos apresentados na literatura mostram que este método fornece bons resultados na simulação de escoamentos incompressíveis (Vasconcellos, 1999) e (Vasconcellos e Maliska, 1998). Esta metodologia não apresenta nenhuma das restrições apontadas nos métodos anteriores. As equações deste método são as seguintes

$$\frac{\Delta P}{\Delta x} = \frac{\sum_i^N \left(\frac{\Delta P}{\Delta \vec{n}} \cdot \vec{i} \right) L_{P_i}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{i}|} = \frac{\sum_i^N (P_i - P_r) (\vec{n} \cdot \vec{i})}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{i}|} \quad (5a)$$

$$\frac{\Delta P}{\Delta y} = \frac{\sum_i^N \left(\frac{\Delta P}{\Delta \vec{n}} \cdot \vec{j} \right) L_{P_i}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{j}|} = \frac{\sum_i^N (P_i - P_r) (\vec{n} \cdot \vec{j})}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{j}|} \quad (5b)$$

2.4 MÉTODO DA MÉDIA DOS GRADIENTES PROJETADOS CORRIGIDOS

Santos et alli (1999) apresentam uma pequena correção ao MMGP. A necessidade desta correção surgiu da constatação de que o erro na avaliação do gradiente de um vetor só tende a zero, em uma malha cartesiana, quando os eixos coordenados estão alinhados com a malha. Qualquer rotação da malha faz com que surja um erro que não diminui com o refinamento. Santos *et alli* (1999) propuseram uma correção para a situação em que o eixo coordenado é rotacionado em 45°. Para esta situação, e provavelmente somente esta, o erro na avaliação do gradiente usando o MMGPC se cancelaria com o refino da malha. As equações deste método são

$$\frac{\Delta P}{\Delta x} = \frac{\sum_i^N \left(\frac{\Delta P}{\Delta \vec{n}} \cdot \vec{i} \right) \frac{L_{P_i}}{|\vec{n} \cdot \vec{i}|}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{i}|} = \frac{\sum_i^N (P_i - P_r) \frac{(\vec{n} \cdot \vec{i})}{|\vec{n} \cdot \vec{i}|}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{i}|} \quad \forall \vec{n} \cdot \vec{i} \neq 0 \quad (6a)$$

$$\frac{\Delta P}{\Delta y} = \frac{\sum_i^N \left(\frac{\Delta P}{\Delta \vec{n}} \cdot \vec{j} \right) \frac{L_{P_i}}{|\vec{n} \cdot \vec{j}|}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{j}|} = \frac{\sum_i^N (P_i - P_r) \frac{(\vec{n} \cdot \vec{j})}{|\vec{n} \cdot \vec{j}|}}{\sum_i^N L_{P_i} |\vec{n} \cdot \vec{j}|} \quad \forall \vec{n} \cdot \vec{j} \neq 0 \quad (6b)$$

3. ANÁLISE DAS METODOLOGIAS PARA O CÁLCULO DE GRADIENTE

Antes de analisarmos o comportamento destas quatro metodologias na solução de problemas físicos, será efetuada uma análise do comportamento dos gradientes em função do tipo de malha utilizada. Para isto escolheu-se um domínio, um quadrado de lado unitário, que foi mapeado com quatro malhas distintas, como apresentado na Figura 2. Todas as malhas apresentadas nesta figura são malhas de Voronoi, apesar de diferirem uma das outras. Neste domínio mapeado pelos quatro tipos de malhas apresentados determinou-se o gradiente de uma função pré-selecionada usando as formulações apresentadas. A função escolhida foi

$$P(x, y) = [x(1-x)y(1-y)]^2 \quad (7)$$

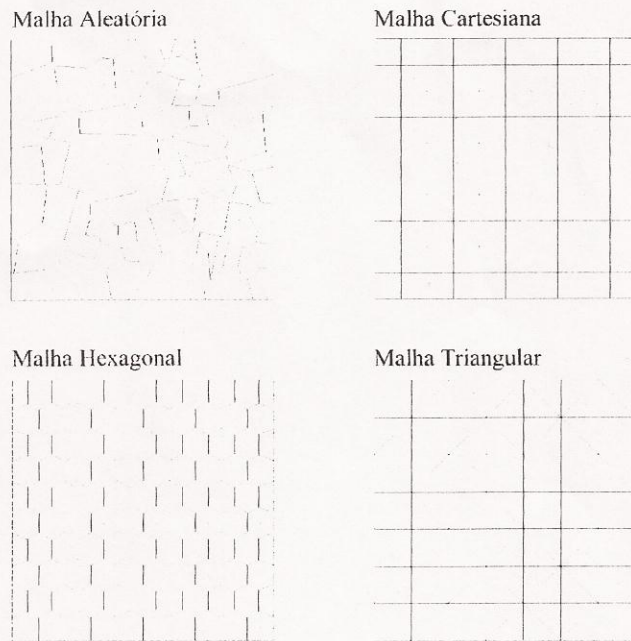


Figura 2 - Malhas usadas na avaliação do gradiente

Justifica-se a escolha desta função pelo fato dela possuir derivada nula em todos os pontos do contorno do domínio. Esta característica particular beneficia o MBF. A escolha uma função sem esta propriedade tornaria os resultados do MBF piores dos que os que serão apresentados a seguir.

O primeiro resultado, apresentado na Figura 3, refere-se ao erro no cálculo do gradiente em função do número de volumes, usando malhas cartesianas. Para este tipo de malha o MBF apresentou melhor resultados. Os outros três métodos se comportam exatamente da mesma maneira neste tipo de malha. Outra constatação é que o erro na avaliação do gradiente sempre diminui com o refino da malha. ε e h foram definidos como

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\sum_i^{NV} \left(\frac{\Delta P}{\Delta x}_i - \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{x_i, y_i} \right)^2 + \left(\frac{\Delta P}{\Delta y}_i - \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{x_i, y_i} \right)^2}{\sum_i^{NV} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{x_i, y_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{x_i, y_i} \right)^2}} \quad (8a)$$

$$h = \sqrt{\frac{1}{NV}} \quad (8b)$$

onde NV é o número de volumes usados na malha.

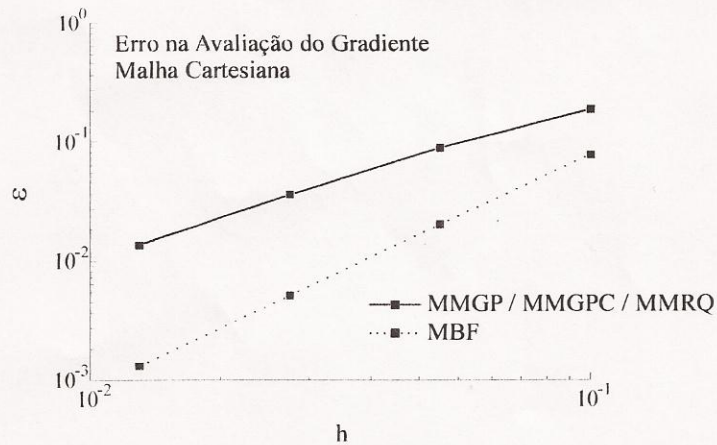


Figura 3 - Erro na avaliação do gradiente em malhas cartesianas

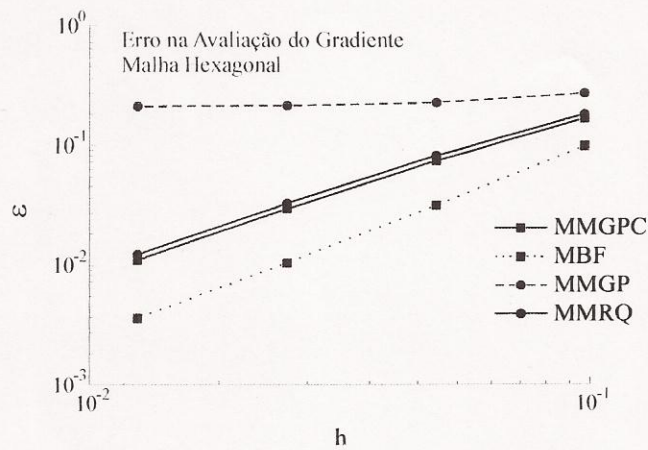


Figura 4 - Erro na avaliação do gradiente em malhas hexagonais

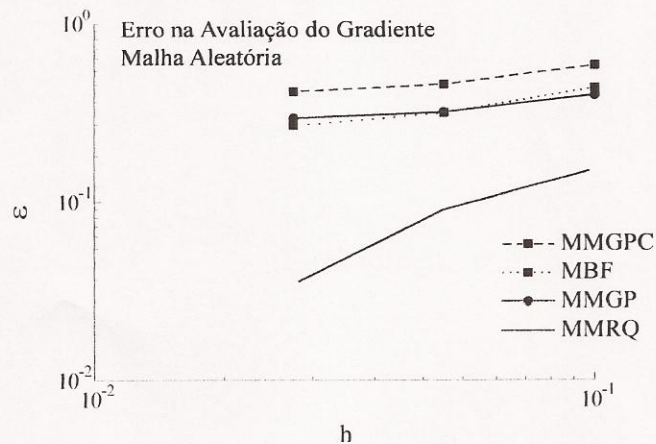


Figura 5 - Erro na avaliação do gradiente em malhas aleatória

Na Figura 4 é apresentado o comportamento do erro em uma malha hexagonal. Neste tipo de malha vê-se que o erro na avaliação do gradiente usando o MMGP não é sensível ao aumento do número de volumes no mapeamento do domínio. Novamente o MBF foi o que apresentou o menor erro para a mesma quantidade de volumes. Na Figura 5 é apresentado o comportamento dos métodos na avaliação do gradiente usando uma malha aleatória. O MMRQ é o único que se comporta como esperado. Existem poucos pontos

na curva devido à dificuldade do gerador de malhas utilizado em construir uma malha com mais de 2.000 volumes aleatórios. Em malhas triangulares, como visto na Figura 6, o comportamento é ainda mais irregular. Com exceção do MMRQ, os resultados mostram que com o refino de malha não há redução do erro para os demais métodos. A avaliação do gradiente, para estes métodos e nesta malha é bastante deficiente.

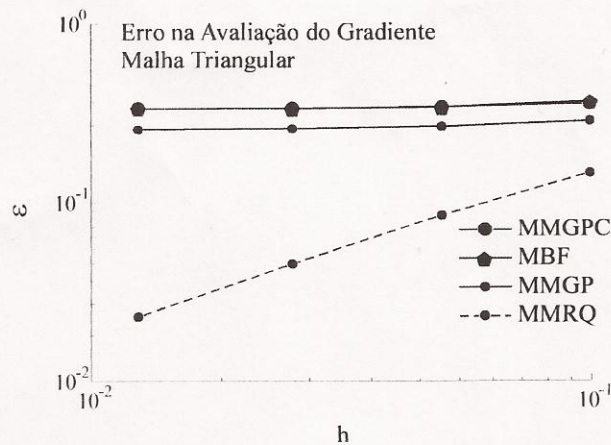


Figura 6 - Erro na avaliação do gradiente em malhas triangulares

Destes resultados se conclui que o único método que se comporta satisfatoriamente nas malhas testadas é o MMRQ. Isto é justificado pelo embasamento matemático que há por trás de sua concepção e que não é encontrado em nenhum dos outros métodos. Os resultados apresentados estão intrinsecamente ligados à função escolhida, apresentada na Eq. (7). Em princípio, outras funções, ou mesmo outras malhas, poderiam levar a conclusões diversas a estas apresentadas. Na elaboração deste trabalho testou-se algumas outras funções que geraram resultados pouco diferentes destes já vistos.

4. COMPORTAMENTO DA FUNÇÃO DE INTERPOLAÇÃO

Um outro aspecto do método de volumes finitos em malhas não-estruturadas que merece atenção especial é a função de interpolação. Neste caso, a possibilidade de se ter volumes com um número maior de faces que no caso das malhas estruturadas pode contribuir para a minimização dos erros oriundos da difusão numérica. Este efeito já foi apontado no trabalho de Maliska e Maliska Jr. (1994). Naquele trabalho, resolvendo uma equação de difusão, eles apontam como causa dos melhores resultados obtidos no domínio que foi mapeado com malhas hexagonais justamente o fato deste tipo volume possui mais faces. A função de interpolação é definida como

$$\phi_{p_i} = (1 + \alpha_i)\phi_{p_i} + (1 - \alpha_i)\phi_i \quad (8)$$

onde α_i é função do número de Peclet da malha (Maliska, 1995a). Neste trabalho se propõe a confirmar esta suposição através da solução de equações que procuram simular problemas físicos de mecânica dos fluidos. Esta idéia, apresentada por Mishev (1998), baseia-se na solução de uma equação, Eq. (9). Através da seleção de valores de a e b pode-se simular problemas semelhantes aos encontrados na mecânica dos fluidos. O valor de P analítico usado é o mesmo já definido pela Eq. (7).

$$\vec{q} = -a\nabla P + \vec{b}P \quad (9)$$

$$\nabla \cdot \vec{q} = f$$

O procedimento da análise é o seguinte: dados a e b é determinado o valor de f , por meio da Eq. (9). Resolve-se esta equação numericamente e obtém-se o valor de P numérico. Este valor é comparado com o

valor analítico e o cálculo do erro é efetuado. Observe-se que ao usar este procedimento pode-se simular um problema de mecânica dos fluidos sem incluir erros de outras fontes como o do acoplamento pressão-velocidade.

O primeiro problema investigado é o da difusão pura, $a=1$ e $b=0$. Os resultados podem ser apreciados na Figura 7. O uso de malha aleatória fornece um maior erro enquanto malha hexagonal o menor. Malha triangular apresenta o segundo pior desempenho. O desempenho ruim das malhas aleatórias pode estar associado ao mapeamento do domínio. Enquanto nos outros tipos de malhas existe uma distribuição homogênea dos volumes, isto não ocorre nas malhas aleatórias. Eventualmente em uma região havia mais volumes em detrimento de outra.

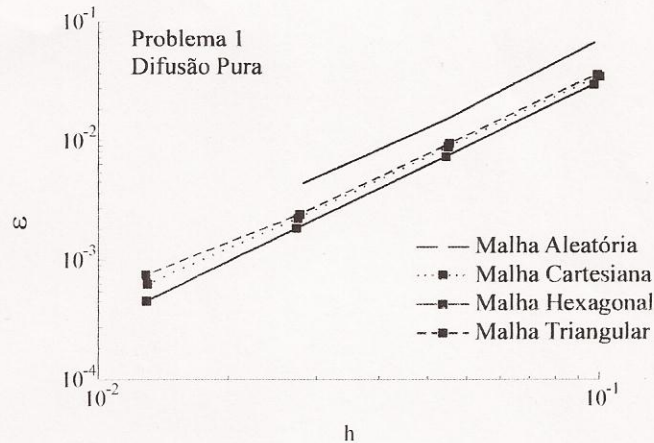


Figura 7 - Erro na avaliação de u em um problema de difusão pura

O erro na comparação de um outro problema físico, difusão dominante, é apresentado na Figura 8. Aos valores de a e b usados na análise podem ser vistos na Eq. (10). As curvas deste gráfico repetem o comportamento já visto na Figura 7.

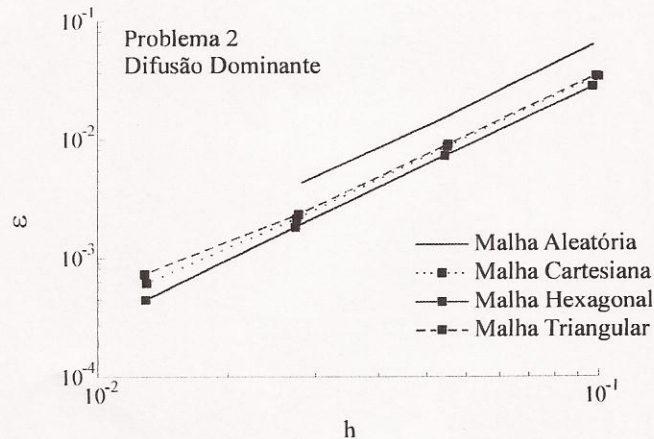


Figura 8 - Erro na avaliação de u em um problema de difusão dominante

$$a = 1 + x^2 + y^3$$

$$\vec{b} = [(x+1)y]\vec{i} + [x + \text{sen}(x)]\vec{j} \quad (10)$$

O erro na comparação do terceiro problema, convecção dominante, é apresentado na Figura 9. Para obter estas curvas usou-se os valores de a e b descritos na Eq. (11). Neste gráfico o comportamento do erro

difere dos dois anteriormente vistos. Malha aleatória apresenta um pior desempenho, mas malha hexagonal não mais fornece os melhores resultados. Mas, com o aumento no número de volumes, o erro associado a cada uma das malhas são praticamente iguais. Aparentemente o erro está convergindo para um valor independentemente da malha.

$$a = 10^{-3}$$

$$\vec{b} = \left[(1 + x \cos(15^\circ)) \cos(15^\circ) \right] \vec{i} + \left[(1 + y \sin(15^\circ)) \sin(15^\circ) \right] \vec{j} \quad (11)$$

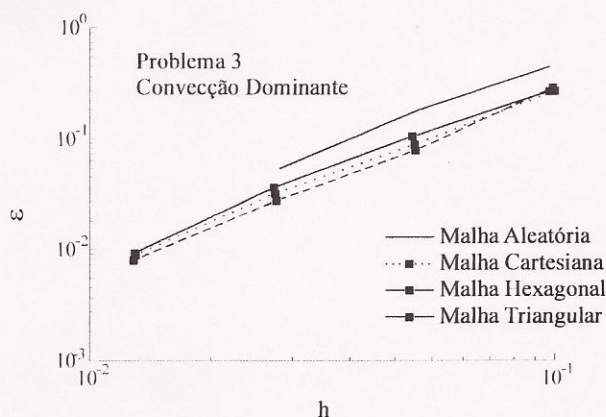


Figura 8 - Erro na avaliação de u em um problema de convecção dominante

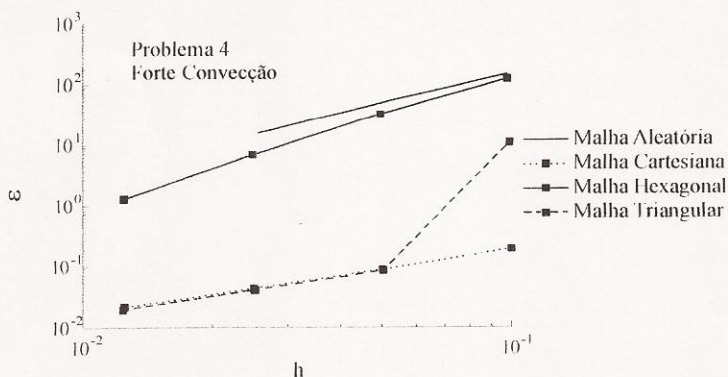


Figura 9 - Erro na avaliação de u em um problema de convecção dominante

Por fim, um problema de forte convecção é analisado. Os resultados são apresentados na Figura 10 e as constantes a e b estão na Eq. (12).

$$a = 10^{-5} \quad \vec{b} = \vec{i} \quad (12)$$

Antes de dar a interpretação dos resultados é importante notar que a escolha dos valores de a e b determinou o alinhamento deste escoamento com o eixo x de coordenadas. Esta é a razão porque malhas cartesianas apresentam um bom resultado. Para este escoamento e para esta malha a função de interpolação desempenha o seu papel bastante bem. O que já não ocorre com as malhas hexagonais.

Na Figura 2 observa-se que duas das três faces da malha triangular estão alinhadas da mesma forma que as faces da malha triangular. Para estas faces a função de interpolação se comporta da mesma maneira que a malha cartesiana. Observa-se, igualmente, que o primeiro ponto da curva da malha triangular está fora do

valor esperado. Com o aumento do número de volumes o erro diminui substancialmente, confirmando a hipótese de que este erro está associado ao erro elevado nos volumes do contorno. Quando a quantidade destes volumes diminui em relação ao número total, o erro diminui significativamente.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Cardoso, Fabian Correa, 1997, *Algoritmo para a Simulação Numérica das Equações do Movimento pelo Método dos Volumes Finitos Usando Diagrama de Voronoi*, Dissertação de Mestrado, UFSC.

Jameson, A. e Mavriplis, D. J., 1986, "Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on a Regular Triangular Mesh", *AIAA Journal*, Vol. 24, p.611-618.

Leonard, B. P., 1979, "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", *Comput. Methods Applied Mech. Eng.*, Vol. 19, p. 59-98.

Maliska, C. R., 1995a, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Livros Técnicos e Científicos Editora.

Maliska, C. R., 1995b, *Comunicação pessoal sobre o cálculo do gradiente de pressão*.

Maliska, C. R. e Maliska Jr., C. R., 1994, "A Finite Volume Method Using Voronoi Grids for the Solution of Miscible Displacement in Porous Media", *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*, Vol 16, Nº 4, p. 415-422.

Mishev, Ilya D., 1998, "Finite Volume Methods on Voronoi Meshes", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 14, Nº 2, p. 193-212.

Santos, L. A., Vasconcellos, J. F. V., Maliska, C. R. e Silva, A. F. C., 1999, "Discussão de Aproximações para o Gradiente de Pressão no Método de Volumes Finitos em Diagramas de Voronoi", *Publicado no COBEM 1999*.

Peters, Sergio, 1992, *Análise de Artigo para Submissão à Comissão Examinadora do Concurso para Professor na Área de Cálculo Numérico*, Departamento de Informática e Estatística, UFSC.

Raithby, G. D. e Torrence, K. E., 1974, "Upstream-Weighted Differencing Schemes and Their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow", *Computers & Fluids*, Vol. 2, p. 191-206.

Taniguchi, N., Arakawa, C. e Kobayashi, T., 1991, "Construction of a Flow-Simulating Method with Finite Volume Based on a Voronoi Diagram", *JSME International Journal*, Série II, Vol. 34, Nº 1, p. 18-23.

Vasconcellos, J. F. V., 1999, *Um Método de Volumes Finitos Usando Malhas Não-Estruturadas para o Estudo de Escoamentos com Frentes Livres*, Tese de Doutorado, EMC/UFSC.

Vasconcellos, J. F. V. e Maliska, C. R., 1998, "Solução Numérica de Escoamentos Incompressíveis Usando Malhas de Voronoi", *Anais do VII ENCIT*, p. 890-895.