



ANÁLISE DA ACURÁCIA DE APROXIMAÇÃO DO LAPLACIANO EM VOLUMES FINITOS USANDO DIAGRAMAS DE VORONOI

Luciano Amaury dos Santos, João Flávio Vieira de Vasconcelos e Clovis Raimundo Maliska

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica - UFSC
88040-900 - Florianópolis - Brasil



RESUMO: Usando diagramas de Voronoi, juntamente com o Método de Volumes Finitos, a solução numérica de um problema de condução de calor é comparada com a sua solução analítica. O objetivo é o de se analisar a influência da malha na precisão da aproximação do Laplaciano. Uma análise sobre a origem dos erros é apresentada, à luz de trabalhos que tratam de acurácia de Volumes Finitos, revelando situações onde a aproximação do Laplaciano é feita de maneira localmente inconsistente e investigando suas consequências.

INTRODUÇÃO

A aplicação de malhas não-estruturadas, no âmbito do método de Volumes Finitos, tem aparecido na literatura em quantidades crescentes. Cita-se os trabalhos de Taniguchi e Kobayashi (1991), Taniguchi *et alii* (1991) e Marcondes *et alii* (1994) e o livro de Maliska (1995), como exemplos.

É provável que no futuro muitos dos usuários que atualmente empregam o Método de Volumes Finitos usando malhas regulares passem a adotar malhas não-estruturadas em seus algoritmos. As razões são claras. Malhas não-estruturadas oferecem uma grande flexibilidade na discretização de domínios irregulares. Outra grande vantagem é a facilidade de refinamento local, habilidade que torna o programa computacional mais rápido e mais econômico no uso dos recursos computacionais.

Os trabalhos supracitados fazem uso de um tipo específico de malha não-estruturada. Trata-se de malhas que são geradas através de um diagrama de Voronoi.

que une os centros destes volumes. Além disso, esta linha é dividida ao meio pela interface, contribuindo para a precisão de derivadas numéricas, ao longo da normal da interface. Estas características são válidas para todos os volumes do domínio.

Mais ainda, esta ortogonalidade local a torna especialmente interessante quando se deseja obter numericamente uma derivada normal à essas fronteiras. Esta situação surge quando utilizamos o teorema da divergência para obter aproximações de algumas formas simplificadas da equação da energia e da equação de Navier-Stokes, onde aparecem termos envolvendo o operador Laplaciano.

Procura-se neste trabalho fazer uma análise sobre a influência do tipo de malha de Voronoi na precisão do cálculo do Laplaciano. Pretende-se, com isto, provocar discussões mais profundas sobre as aproximações utilizadas nas soluções numéricas por Volumes Finitos.

CARACTERÍSTICAS DO DIAGRAMA DE VORONOI

O diagrama de Voronoi é a discretização de uma geometria onde cada volume discreto gerado é representado por um ponto gerador. A definição de um Volume de Voronoi para o espaço \mathbb{R}^2 é:

Dado um conjunto de n pontos p e uma região do espaço \mathbb{R}^2 , o volume de Voronoi para o gerador i é o conjunto de pontos $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ que obedecem a:

$$d[(x, y) - p_i] \leq d[(x, y) - p_j] \quad \forall 1 \leq j \leq n \text{ e } i \neq j \quad (1)$$

onde $d[(x, y) - p_i]$ representa a distância de (x, y) ao i -ésimo ponto gerador.

A Fig. 1 apresenta um exemplo de um diagrama de Voronoi. Pode-se observar que:

- O segmento de reta \overline{AB} é ortogonal ao segmento de reta $\overline{I2}$;
- A reta que passa por $\overline{I2}$ passa no ponto médio de \overline{AB} ;

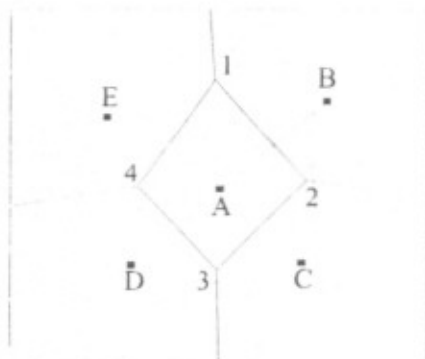


Figura 1 - Exemplo de diagrama de Voronoi

A escolha deste tipo de malha é motivada por uma característica singular que ela apresenta e que a torna especialmente indicada para problemas envolvendo Mecânica dos Fluidos ou Transferência de Calor. Malhas de Voronoi são localmente ortogonais, ou seja, a interface entre dois volumes é ortogonal à linha

• Qualquer ponto escolhido dentro do polígono $\overline{1234}$ está mais próximo do ponto A do que dos outros pontos geradores dados.

Existem na literatura apresentadas diversas maneiras de se obter um diagrama de Voronoi. O algoritmo usado no presente trabalho pode ser encontrado em Maliska Jr. (1993).

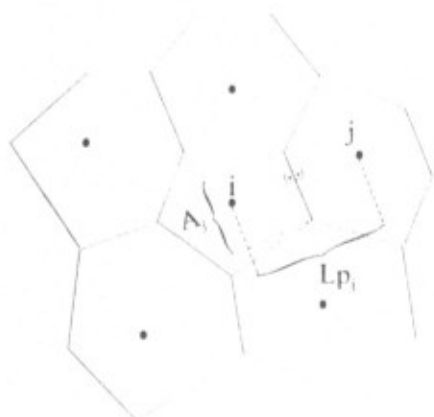


Figura 2- Volume de controle de integração

ANÁLISE DE UM PROBLEMA DE CONDUÇÃO

A análise da acurácia da aproximação do Laplaciano foi feita através do estudo de um problema de condução de calor.

A equação que governa o problema de condução é dada por

$$-K\nabla^2 T = S \quad (2)$$

onde K representa a condutividade térmica e S a geração de energia.

A equação anterior pode ser integrada em um volume de Voronoi, como o apresentado na Fig. 2. Utilizando-se o Teorema da divergência e as seguintes aproximações:

$$\int_{A_i} -K \left(\frac{\partial T}{\partial n_j} \right) dA \cong A_j K \frac{(T_i - T_j)}{Lp_j} \quad (3)$$

$$\int_{V_i} S dV \cong S_i V_i \quad (4)$$

obtem-se a seguinte equação:

$$\sum_j^{nb} \frac{A_j}{V_i} K \frac{(T_i - T_j)}{Lp_j} = S_i \quad (5)$$

onde nb representa o número de vizinhos e as demais variáveis estão detalhadas na Fig. 2.

Uma equação como esta é obtida para cada um dos volumes finitos do domínio e então um sistema de equações lineares deve ser resolvido para se obter o valor da temperatura em cada um dos centros dos volumes de Voronoi.

Usando-se série de Taylor, pode-se expressar os valores de T_j com sendo:

$$T_j = T_i + a(x_j - x_i) + b(y_j - y_i) + c(x_j - x_i)(y_j - y_i) + d(x_j - x_i)^2 + e(y_j - y_i)^2 + O(x_j - x_i)^3 + \dots \quad (6)$$

onde "a", "b", "c", "d" e "e" representam os coeficientes de Taylor.

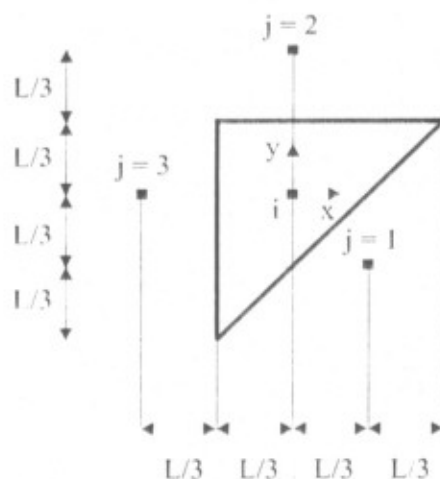


Figura 3 - Volume de controle usado na primeira análise

Sem perda de generalidade, pode-se localizar a origem do sistema de coordenadas no centro do volume i, para facilitar a análise que se segue, obtendo:

$$T_j = T_i + ax_j + by_j + cx_j y_j + dx_j^2 + ey_j^2 + O(x^3, x^2 y, xy^2, y^3) \quad (7)$$

A Fig. 3 representa um volume de controle que será usado para fazer a análise de consistência neste trabalho. Uma malha contendo volumes como este pode ser vista na Fig. 4. Da Fig. 3 pode-se obter todas as informações necessárias para elaborar a Tab. 1.

Tabela 1 - Características Geométricas da malha da Fig. 3.

j	x_j	y_j	A_j	Lp_j
1	L/3	-L/3	$\sqrt{2} L$	$\sqrt{2} L/3$
2	0	2L/3	L	2L/3
3	-2L/3	0	L	2L/3

Considerando o volume "i", Fig. 3, construiu-se a Tab. 2., fazendo uso da Eq. (7).

Substituindo os valores de $T_j - T_i$ na Eq. (5) e lembrando que para todos os volumes da malha em questão $V_i = L^2/2$, tem-se então:

$$2K(d + e) + O(L) = S, \quad \frac{2}{3} Kc \quad (8)$$

Tabela 2 - Valores das temperaturas usando série de Taylor

j	$T_j - T_i$
1	$\frac{L}{3}(a - b) + \frac{L^2}{9}(d + e - c) + O(L^3)$
2	$\frac{2}{3}bL + \frac{4}{9}cL^2 + O(L^3)$
3	$-\frac{2}{3}aL + \frac{4}{9}dL^2 + O(L^3)$

Mas, substituindo a Eq. (7) na Eq. (2), em x, teremos:

$$-2K(d + e) = S \quad (9)$$

Comparando-se as duas equações anteriores pode-se observar a presença do termo $2/3 Kc$ que não irá desaparecer quando $L \rightarrow 0$. Note-se, também, que "c" é uma derivada cujo valor tenderá a um valor não-nulo com a diminuição do valor de L. Logo, em tal volume sempre irá existir um erro independente do refinamento da malha.

Outros trabalhos que tratam sobre acurácia de Volumes Finitos utilizam procedimentos semelhantes ao mostrado aqui. Arts (1984), Turkel (1985), Turkel e colaboradores (1985) e Rossow e colaboradores (1988) trabalharam sobre malhas estruturadas. Roe (1987) discutiu aproximações semelhantes à aqui utilizada, mas não ficou restrito às malhas de Voronoi. Nos trabalhos supracitados foram discutidas basicamente as equações de Euler.

EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

De posse da análise anteriormente apresentada, implementou-se um programa desenvolvido para a solução do problema de condução.

O problema escolhido para realizar esta análise foi o de condução de calor bidimensional em um quadrado de lado unitário. Não há geração de calor e a temperatura é prescrita em toda a fronteira do domínio, sendo que para todas as fronteiras foi prescrito temperatura nula, com exceção da face superior onde prescreveu-se a seguinte condição de contorno

$$T(x, y = 1) = \text{sen}\left(\pi \frac{x}{L}\right) \quad (10)$$

Este problema foi especificamente escolhido por ser bidimensional e por possuir uma solução analítica relativamente simples,

$$T(x, y) = \frac{\text{senh}\left(\pi \frac{y}{L}\right) \text{sen}\left(\pi \frac{x}{L}\right)}{\text{senh}(\pi)} \quad (11)$$



Figura 4 - Malha triangular 1

No estudo realizado usou-se quatro tipos de malhas distintas. A primeira, uma malha cartesiana escolhida por levar a uma aproximação reconhecidamente consistente e duas malhas triangulares distintas, representadas nas Figs. 4 e 5. A aproximação (5) sobre ambas as malhas triangulares é inconsistente, segundo a análise previamente realizada. Por último, uma malha contendo volumes gerados de forma aleatória foi analisada. Uma malha contendo pontos gerados de maneira aleatório pode ser vista na Fig. 6.

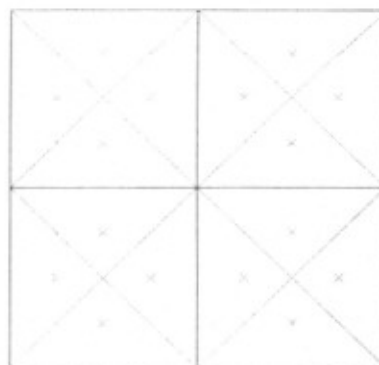


Figura 5 - Malha triangular 2

Para o cálculo do erro de cada malha, primeiramente avaliou-se o erro que cada um dos volumes através da Eq. (12). A seguir determinou-se o erro associado à malha usando-se a Eq. (13).

$$\text{Erro}_i = 100(T_{\text{analítico}} - T_{\text{numérico}}) \quad (12)$$

$$\text{Erro}\% = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\text{Erro}_i)^2}{N}} \quad (13)$$



Figura 6 - Malha aleatória

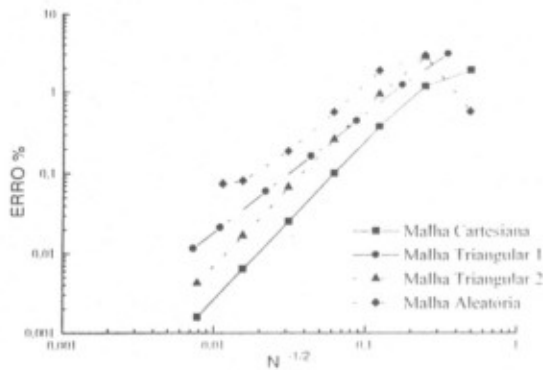


Figura 7 - Resultados obtidos

O algoritmo usado para a solução do sistema de equações lineares formado quando se resolve-se a Eq. (5) é escrita para todos os volumes do domínio, está descrito em (Pozo *et alii*, 1995).

Os resultados para cada uma das malhas citadas são apresentados na Fig. 7.

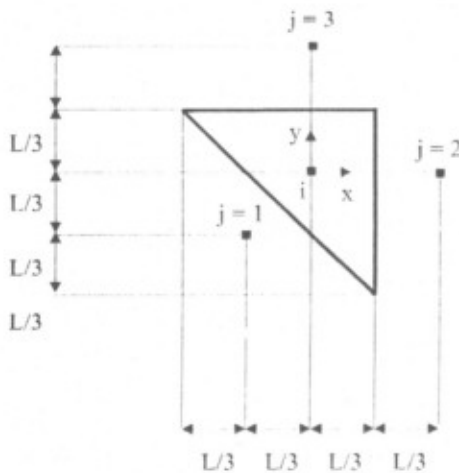


Figura 8 - Volume de controle usado na segunda análise

Tabela 3- Características geométricas da malha da Fig. 8.

J	x_j	y_j	A_j	Lp_j
1	-L/3	-L/3	$\sqrt{2} L$	$\sqrt{2} L/3$
2	2L/3	0	L	2L/3
3	0	2L/3	L	2L/3

Analisando a figura 7, claramente se vê que, apesar do resultado da análise anterior, em todos os casos apresentados, e em alguns outros que não estão aqui presentes, a discretização discutida se mostrou sempre eficaz.

Para entender o acontecido, fez-se a mesma análise no volume apresentado na Fig. 8, de onde pode-se obter os dados para a elaboração da Tab. 3.

Usando-se a Eq. (7), e os dados da tabela anterior, determina-se os valores de $T_j - T_i$ para o novo volume escolhido.

Substituindo os valores de $T_j - T_i$ na Eq. (5) obtém-se:

$$2K(d + e) + O(L) = S_i + \frac{2}{3} Kc \quad (14)$$

Assim, pode-se observar que o erro independente de malha continua presente na aproximação sobre este segundo volume analisado, mas com sinal oposto ao que aparecia naquela feita sobre o volume da figura 3.

Como nas malhas triangulares analisadas ambas os volumes aparecem lado a lado, e como ambos possuem as mesmas dimensões, é natural se esperar que o erro da aproximação sobre cada um deles seja semelhante, mas com o sinal invertido. Na média os efeitos desses erros se cancelam. Certamente uma explicação para a malha aleatória teria de ser mais sofisticada.

Para diagramas de Voronoi sobre polígonos regulares uma análise similar mostra a ausência de termos de erro independente da malha. Excelentes resultados podem ser encontrados na literatura usando malhas híbridas de Voronoi, resultantes da combinação de tipos distintos de malhas de Voronoi regulares (Marcondes, 1996) e (Palagi, 1992).

Tabela 4- Valores das temperaturas usando série de Taylor

j	$T_j - T_i$
1	$\frac{L}{3}(b - a) + \frac{L^2}{9}(c + d + e) + O(L^3)$
2	$\frac{2}{3}aL + \frac{4}{9}dL^2 + O(L^3)$
3	$-\frac{2}{3}bL + \frac{4}{9}eL^2 + O(L^3)$

A partir de gráficos, como o mostrado na Fig. 7, pode-se avaliar a ordem do erro de truncamento presente na aproximação da equação diferencial. Considerando-se que o erro de truncamento ϵ_1 é proporcional à potência n-ésima do tamanho dos volumes de controle

$$\epsilon_1 = C(\Delta x)^n \quad (15)$$

sendo n a ordem da aproximação. Tem-se, então, que n é o coeficiente angular das curvas mostradas da Fig. 7 (na escala log-log). Estas curvas devem tender a retas para $\Delta x = N^{-1/2}$ suficientemente pequenos, permitindo, desta forma, a

determinação inequívoca de n . Para as curvas apresentadas na Fig. 7, os valores de n são os seguintes:

Tabela 5 - Ordem dos resultados apresentados na Fig. 7

Tipo de Malha:	n
Cartesiana	1.9988
Triangular 1	1.4835
Triangular 2	1.9974

De fato esses valores não são uma medida absoluta da acurácia da discretização discutida. A medida de erro utilizada aqui é uma das que estão presentes na literatura.

Poder-se-ia ter tomado, por exemplo, o erro máximo no conjunto de pontos da malha. Por esta medida o comportamento da malha aleatória mostrou-se ainda mais irregular. Os valores de n se alteraram levemente para as demais malhas.

Poder-se-ia, ainda, realizar uma avaliação mais precisa da norma da função resíduo fazendo-se uma integral dessa função sobre o domínio.

De qualquer forma esses resultados já constituem um ponto de partida para outras discussões.

CONCLUSÕES

Inferimos desta experiência que o desaparecimento dos erros parece ter uma forte ligação com a regularidade da malha. Esta parece ser uma característica de várias aproximações localmente inconsistentes, revelada já no clássico exemplo do método de DuFort-Frankel (Richmeyer e Morton, 1967) e mais claramente na interessante discussão da discretização de bloco centrado para a equação de Laplace sobre malha irregular feita por Aziz e Settari (1979).

Sobre os resultados obtidos com a malha aleatória deve-se tomar um certo cuidado ao interpretá-lo. Como os pontos geradores foram distribuídos de forma aleatória no domínio, não há nenhuma garantia que exista uma homogeneidade na sua distribuição. Não há uma relação clara entre o número de pontos e um Δx como existe para as outras malhas. Mas certamente o resultado apresentado reforça a tese de que malhas regulares favorecem o desaparecimento de erros.

Aparentemente o uso de diagramas de Voronoi evita o problema (solução incorreta e independente de malha) encontrado por Bruschke e Advani (1994) na utilização de aproximações semelhantes às que levaram à equação (5) em malhas mais genéricas. Pode-se dizer que o objetivo principal deste trabalho é levar aos leitores a dúvida dos autores sobre as condições necessárias (sobre a forma das equações que se pretende aproximar e sobre a geometria da malha) para a validade deste tipo de aproximação.

O estudo aqui é, ainda, um tanto inconclusivo. Percebe-se, por enquanto, claros sinais que uma certa regularidade da malha é desejável, por favorecer um comportamento monótono da convergência dos resultados com o refinamento da malha. Esta é uma característica importante para a realização de uma boa avaliação dos erros de uma solução numérica (Roache, 1993).

Este estudo sugere a realização de um trabalho matematicamente mais profundo e mais interessante do que este. Ao longo deste trabalho a análise da acurácia de uma metodologia mostrou-se mais complexa do que a obtenção de uma expressão para o erro de truncamento local de uma aproximação para a equação diferencial de interesse, utilizando séries de Taylor tão simplesmente.

Um caminho, diferente do seguido neste trabalho, foi mostrado por Palagi (1992), que em apêndice da sua tese, trabalhou

sobre as semelhanças entre o CVFEM (*Control Volume Finite Element Method*) e o tipo de aproximações discutido aqui (que aquele autor utilizou no seu trabalho, com a denominação de CVFD, *Control Volume Finite Difference*), para justificar a confiança neste tipo de método, quando a discretização do domínio é feita por diagramas de Voronoi.

AGRADECIMENTOS

Os dois primeiros autores agradecem ao CNPq, pelo suporte financeiro. Os autores agradecem também as discussões motivadoras realizadas com os professores Antonio Fábio C. da Silva, Francisco Marcondes e Luis Antônio Seola.

REFERÊNCIAS

- Arts, T., 1984, *On the Consistency of Four Different Control Surfaces Used for Finite Area Blade-to-Blade Flow Calculations*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 4, pag. 1083-1095.
- Aziz, K. e Settari, A., 1979, *Petroleum Reservoir Simulation*, Elsevier Applied Science Publishers.
- Bruschke, M. V. e Advani, G., 1994, *A Numerical Approach to Model Non-Isothermal Viscous Flow Through Fibrous Media with Free Surfaces*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 19, pag. 575-603.
- Maliska, C. R., 1995, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro.
- Maliska Jr., C. R., 1993, *Um Robusto Gerador de Diagramas de Voronoi para Discretização de Domínios Irregulares*, XIV Congresso Ibero Latino-americano sobre Métodos Computacionais para Engenharia, pag. 753-762, São Paulo.
- Marcondes, Francisco, Zambaldi, M. C. e Maliska, C. R., 1994, *Simulação Numérica de Reservatórios de Petróleo Utilizando Malhas de Voronoi*, V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, pag. 335-338, São Paulo.
- Marcondes, Francisco, 1996, *Solução Numérica Usando Métodos Adaptativos-Implicitos e Malhas de Voronoi de Problemas de Reservatório de Petróleo*, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina.
- Palagi, C., 1992, *Generation and Application of Voronoi Grid to Model Flow in Heterogeneous Reservoir*, Ph. D. Dissertation, Stanford University, Stanford.
- Richmeyer, R. D. e Morton, K. W., 1967, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Interscience Publishers.
- Roe, P. L., 1987, *Error Estimates for Cell Vertex Solutions of the Compressible Euler Equations*, ICASE Report, nº87-6, EUA.
- Pozo, R., Remington, K. A. e Lumsdaine, A., 1995, *SparseLib++ - Sparse Matrix Class Library - Reference Guide*, disponível via anonymous ftp em gams.nist.gov: ftp/pub/pozo/src.

Roache, P. J., 1993, A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies, *FED-ASME*, Vol. 158, pag. 109-120.

Rossow, C., Kroll, N., Radespiel, R. e Scherr, S., 1988, Investigation of the Accuracy of Finite Volume Methods for 2- and 3-Dimensional Flows, *AGARD Conference Proceedings*, Vol. 2, n° 437, França.

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, pag. 18—23.

Taniguchi, N. e Kobayashi, T., 1991, Finite Volume Method on the Unstructured Grid System, *Computers & Fluids*, Vol. 19, n° 34, pag. 287—295.

Turkel, Eli, 1985, Accuracy of Schemes with Nonuniform Meshes for Compressible Fluid Flows, *ICASE Report*, n° 85-43, EUA.

Turkel, E., Yaniv, S. e Landau, U., Accuracy of Schemes for Euler Equations with Non-Uniform Meshes, *ICASE Report*, n° 85-59, EUA.

ABSTRACT

In this paper numerical solutions of a heat conduction problem, obtained using Finite Volume approach and Voronoi grids are compared with analytical solution. The purpose of this comparison is to analyze the grid influence on the numerical errors. An analysis of the source of this errors is also made.