

MÉTODOS TIPO-*NEWTON* INEXATOS PARA A SOLUÇÃO DE PROBLEMAS
NÃO-LINEARES RESULTANTES DA FORMULAÇÃO SUPG/PSPG DAS
EQUAÇÕES DE *NAVIER-STOKES* INCOMPRESSÍVEIS
EM REGIME PERMANENTE

Renato Nascimento Elias

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Nelson Francisco Favilla Ebecken, D.Sc.

Prof. Renato Simões Silva, D.Sc.

Dr. Marcos André Duarte Martins, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MAIO DE 2003

ELIAS, RENATO NASCIMENTO

Métodos Tipo-*Newton* Inexatos para a Solução de Problemas Não-Lineares Resultantes da Formulação SUPG/PSPG das Equações de *Navier-Stokes* Incompressíveis em Regime Permanente [Rio de Janeiro] 2003.

XIV, 108, p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M. Sc., Engenharia Civil, 2003).

Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE.

1. Elementos Finitos
2. Métodos tipo-*Newton* Inexatos
3. Métodos de *Krylov*

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

A Elizandra minha esposa e a Jorge meu pai (in memoriam)

Agradecimentos

Gostaria de oferecer meus sinceros votos de agradecimento:

- Ao Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, que durante o desenvolvimento desse trabalho, demonstrou que além de ser um grande orientador é também um excelente amigo. Pela dedicação, apoio, incentivo e disponibilidade, pelas broncas e “puxões de orelha” nos momentos corretos. Enfim, a todas as qualidades desse profissional que me serviram como exemplo de um pesquisador incansável e plenamente empenhado em seu trabalho;
- Ao Prof. Luiz Landau, que foi o principal responsável por tornar possível a realização desse trabalho. Pelo empenho em garantir um curso de excelente infra-estrutura e qualidade e pela compreensão das necessidades de cada pessoa que compõe sua equipe no Laboratório de Métodos Computacionais em Engenharia;
- Ao “guru” Marcos André Duarte Martins, que além de um excelente amigo, foi sumariamente eleito por mim, como um co-orientador. Uma pessoa sempre disponível, que além do meu agradecimento, merece minhas sinceras desculpas pelos momentos que lhe “roubei”, seja no seu trabalho, seja na sua casa ou em qualquer lugar em que eu pudesse localizá-lo;
- À minha esposa Elizandra, pelo incentivo, paciência, apoio e compreensão nos momentos de ausência. Ao meu pai, meu maior ídolo e que certamente está muito feliz no céu por ver seu filho vencer mais essa importante etapa na vida. A minha mãe e minhas irmãs, que mesmo na ausência sempre apoiaram e se orgulharam de minhas conquistas;
- Ao Prof. Tayfun E. Tezduyar pela prestatividade, material técnico e pronto esclarecimento sem nem mesmo me conhecer;

- Aos amigos da MTL Engenharia, em especial, Marcelo Mendes, Marcos França e Wyler Mansur, pela compreensão, apoio profissional e recursos computacionais;
- Aos amigos de longa data, Anderson de Lima Mendonça e Papa Matar Ndiaye pelo companheirismo e pelos momentos de discussões infundáveis, regadas à muito café e pão de forma, que ajudaram a formar o meu perfil de aluno que busca sempre um “algo mais” em tudo que aprende;
- À Prof^a Ana Lucia dos Santos Barbosa (DTQ/IT/UFRuralRJ) que me ensinou a gostar de pesquisa ainda na graduação e ao professor André de Almeida (DTQ/IT/UFRuralRJ), “o Mestre”, que além de um amigo, conseguiu me tornar um apaixonado pela área de mecânica dos fluidos com suas aulas “viajantes” e muitas vezes filosóficas;
- Aos funcionários do Laboratório de Métodos Computacionais em Engenharia (LAMCE) e Núcleo de Atendimento em Computação de Alto Desempenho (NACAD), em especial à Mônica, Sérgio e Magda (LAMCE) e Mara, Albino e Myrian (NACAD);
- Ao Prof. Fernando Ribeiro por tornar disponível o visualizador de sua autoria, *View 3D*. “..., Talvez ele nem tenha noção do quanto o programa dele é utilizado na COPPE, ...”;
- Ao Prof. José Luis Drummond Alves e a Dra. Rosana Lomba (CENPES/PETROBRAS), coordenadores do projeto CTPetro 793 [1] “..., onde tudo isso começou, ...”;
- Ao CNPq e a ANP/PRH02 pelo apoio financeiro indispensável à realização deste trabalho;
- Finalizando, eu gostaria de agradecer à todos aqueles que direta ou indiretamente contribuíram para que esse trabalho fosse possível.

Resumo da Tese apresentada a COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

MÉTODOS TIPO-*NEWTON* INEXATOS PARA A SOLUÇÃO DE PROBLEMAS
NÃO-LINEARES RESULTANTES DA FORMULAÇÃO SUPG/PSPG DAS
EQUAÇÕES DE *NAVIER-STOKES* INCOMPRESSÍVEIS
EM REGIME PERMANENTE

Renato Nascimento Elias

Maio/2003

Orientador: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Programa: Engenharia Civil

A solução por elementos finitos das equações de *Navier-Stokes* incompressíveis em regime permanente envolve o tratamento de termos não-lineares inerentes ao aspecto convectivo da equação de conservação da quantidade de movimento. Diversos são os métodos de tratamento destas não-linearidades. Neste trabalho é apresentada a formulação estabilizada SUPG/PSPG de elementos finitos associada às estratégias de solução não-linear baseadas nos métodos tipo-*Newton* inexato globalizados. Os sistemas de equações lineares originados pelas iterações do método de *Newton* são resolvidos por solucionadores iterativos de *Krylov* descritos pelos algoritmos GMRES, TFQMR e BiCGSTAB, providos de três técnicas simples de pré-condicionamento. Ao final são apresentados os resultados dos testes de validação e comparativos de desempenho entre as diferentes técnicas de solução lineares e não-lineares. Os resultados mostraram que os métodos tipo-*Newton* inexato são expressivamente mais eficientes que os métodos tipo-*Newton* convencionais.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

INEXACT NEWTON-TYPE METHODS FOR NON-LINEAR PROBLEMS
ARISING FROM THE SUPG/PSPG SOLUTION OF STEADY
INCOMPRESSIBLE NAVIER-STOKES EQUATIONS

Renato Nascimento Elias

May/2003

Advisor: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Department: Civil Engineering

The finite element discretization of the incompressible steady-state Navier-Stokes equations yields a non-linear problem, due to the convective terms in the momentum equations. Several methods may be used to solve this non-linear problem. In this work we study Inexact Newton-type methods with backtracking, associated to the SUPG/PSPG stabilized finite element formulation. The resulting systems of equations are solved iteratively by Krylov-Space methods such as GMRES, TFQMR and BiCGSTAB, with three different preconditioners. Numerical experiments are shown to validate our approach. Performance of the iterative solvers and of the nonlinear strategies are assessed also by numerical tests. We concluded that the Inexact Newton-type are more efficient than conventional Newton-Type methods.

Índice Analítico

Capítulo 1.....	1
Introdução	1
1.1. Objetivos.....	4
1.2. Organização do Texto.....	5
1.3. Recursos Computacionais	6
Capítulo 2.....	7
Equações Governantes	7
2.1. Equações de Navier-Stokes	7
2.2. Equações Constitutivas	8
Capítulo 3.....	13
Formulação de Elementos Finitos	13
3.1. Forma Variacional das Equações de Navier-Stokes	13
3.1.1. Derivadas das Matrizes Não-lineares	15
3.2. Parâmetros de Estabilização.....	15
3.3. Elementos Triangulares.....	16
3.4. Matrizes de Elemento.....	20
3.4.1. Derivada da Matriz de Convecção.....	20
3.4.2. Derivada da Matriz de Convecção SUPG	22
3.4.3. Derivada da Matriz de Convecção PSPG.....	25
3.4.4. Matriz Viscosa	26
3.4.5. Matriz de Pressão	27
3.4.6. Matriz de Pressão Transposta.....	27
3.4.7. Matriz de Pressão SUPG.....	28
3.4.8. Matriz de Pressão PSPG	28
3.5. Resíduo	29
Capítulo 4.....	31
Solução do Problema Não-Linear	31
4.1. Métodos de tipo-Newton	31

4.1.1. Métodos de IS e <i>Newton</i> Convencional	33
4.1.2. Métodos de IS e <i>Newton</i> Inexato	35
4.1.3. Métodos de IS e <i>Newton</i> Inexato Globalmente Convergente	39
Capítulo 5	44
Solução do Problema Linear	44
5.1. Método GMRES	45
5.2. Método BiCGSTAB	49
5.3. Método TFQMR	50
5.4. Pré-condicionadores	52
5.4.1. Pré-condicionador Diagonal	53
5.4.2. Pré-condicionador Bloco-Diagonal Nodal	54
5.5. Produto Matriz-Vetor Elemento-por-Elemento (EBE)	55
Capítulo 6	57
Testes de Desempenho Numérico	57
6.1. Problemas Analisados	57
6.1.1. Escoamento no Interior de uma Cavidade Quadrada	58
6.1.2. Escoamento com Alargamento de Canal	70
6.1.3. Escoamento ao Redor de um Cilindro Circular	81
6.1.4. Escoamento Rotacional em um Anular Excêntrico	91
Capítulo 7	100
Conclusões	100
Trabalhos Futuros	102
Referências	103

Índice de Figuras

Figura 2.1 - Representação da reologia dos fluidos considerados	11
Figura 2.2 – Modelo de <i>Bingham</i> “bi-viscoso”	12
Figura 3.1 - Elemento Triangular Linear Isoparamétrico	18
Figura 4.1 – Ilustração do método de <i>Newton</i> Convencional	35
Figura 5.1 - Pré-condicionador Bloco-Diagonal Nodal	54
Figura 6.1 – escoamento no Interior de uma Cavidade Quadrada (a) Descrição do modelo e (b) Malha de elementos finitos.....	59
Figura 6.2 – Perfis de velocidade no centro da cavidade.....	60
Figura 6.3 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 100.....	63
Figura 6.4 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 500.....	63
Figura 6.5 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 1000.....	64
Figura 6.6 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de <i>Reynolds</i> 100.....	68
Figura 6.7 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de <i>Reynolds</i> 500.....	69
Figura 6.8 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de <i>Reynolds</i> 1000.....	70
Figura 6.9 – Escoamento com Alargamento de Canal (a) Descrição do modelo e (b) Malha de elementos finitos.....	71
Figura 6.10 – Escoamento com alargamento de canal, linhas de corrente para diversos número de <i>Reynolds</i>	72
Figura 6.11 – Comprimentos característicos para o escoamento com alargamento de canal.....	73
Figura 6.12 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, <i>Reynolds</i> 100.....	76

Figura 6.13 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, <i>Reynolds</i> 500.	76
Figura 6.14 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, <i>Reynolds</i> 1000.	76
Figura 6.15 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de <i>Reynolds</i> 100.....	79
Figura 6.16 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de <i>Reynolds</i> 500.....	80
Figura 6.17 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de <i>Reynolds</i> 1000.....	81
Figura 6.18 – Escoamento ao Redor de um Cilindro Circular – (a) Descrição do modelo e (b) malha de elementos finitos.....	82
Figura 6.19– Escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para <i>Reynolds</i> 100.	84
Figura 6.20– Escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para <i>Reynolds</i> 500.	85
Figura 6.21– Escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para <i>Reynolds</i> 1000.	86
Figura 6.22 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 100.	88
Figura 6.23 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 500.	88
Figura 6.24 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, <i>Reynolds</i> 1000.	89
Figura 6.25 – Escoamento Rotacional no Interior de um Anular Excêntrico (a) descrição do modelo e (b) malha de elementos finitos.....	92
Figura 6.26 – Escoamento laminar no interior de uma seção reta tubular. Comparação entre os resultados obtidos no código proposto (símbolos) e no <i>FLOTTRAN</i> (linha)	93
Figura 6.27 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método de Iterações Sucessivas (ISI).	94
Figura 6.28 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método de <i>Newton</i> Inexato (NI).....	95
Figura 6.29 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método misto (5ISI+NI).....	95

Figura 6.30 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido <i>Newtoniano</i> da Tabela 6.15.	97
Figura 6.31 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido de <i>Bingham</i> da Tabela 6.15.	97
Figura 6.32 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido Pseudo-Plástico da Tabela 6.15.	98
Figura 6.33 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido Dilatante da Tabela 6.15.	98

Índice de Tabelas

Tabela 6.1 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), $Re = 100, 500$ e 1000	61
Tabela 6.2 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$, $Re = 100, 500$ e 1000	62
Tabela 6.3 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. ISI-0.1.	65
Tabela 6.4 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$	66
Tabela 6.5 – Desempenho de pré-condicionadores. IS5+NI, GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$, $Re 100, 500$ e 1000	67
Tabela 6.6 – Comprimentos característicos obtidos por GRIEBEL <i>et al</i> [21].	73
Tabela 6.7 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000	74
Tabela 6.8 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $\eta_{max} = 0,1$; $Re = 100, 500$ e 1000	75
Tabela 6.9 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. ISI-0.1.	77
Tabela 6.10 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), pré-condicionador bloco-diagonal, $\eta_{max} = 0,1$	78
Tabela 6.11 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000	86
Tabela 6.12 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000	87
Tabela 6.13 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. 5IS+NI, ($\eta_{max} = 0,1$)	90

Tabela 6.14 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $\eta_{max} = 0,1$	91
Tabela 6.15 – Reologia dos Fluidos considerados.	92
Tabela 6.16 – Comparativo de desempenho entre o algoritmo implementado e o <i>FLOTRAN</i>	96

Capítulo 1

Introdução

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) tem se tornado uma grande fonte de pesquisas desde o advento do computador. Nos anos 70, o Método das Diferenças Finitas (MDF) foi universalmente utilizado como método numérico na modelagem de processos envolvendo o escoamento de fluidos. A modernização dos computadores, associada ao advento do Método dos Elementos Finitos (MEF), permitiu que análises altamente complexas de problemas de engenharia fossem possíveis. Atualmente, os métodos numéricos são aplicados à uma vasta gama de problemas físicos, dentre os quais, destaca-se a dinâmica dos fluidos como um dos principais e mais antigos ramos de pesquisa e desenvolvimento [23].

A aplicação de elementos finitos em escoamentos incompressíveis envolve duas fontes potenciais de instabilidades associadas com a formulação clássica do problema de *Galerkin*. Uma das fontes deve-se a presença de termos de convecção na equação governante, o que pode resultar em oscilações nos resultados, principalmente no campo de velocidade. Tais oscilações tornam-se mais pronunciadas em escoamentos dominados por altos números de *Reynolds*. A outra fonte de instabilidades origina-se do uso de combinações impróprias de funções de interpolação para representar os campos de velocidade e pressão. Tais instabilidades também ocorrem em outras versões clássicas de técnicas de discretização, tal como nos métodos de diferenças e volumes finitos [49].

No desenvolvimento de aproximações de elementos finitos computacionalmente convenientes, numerosas metodologias, conhecidas como métodos estabilizados, têm sido desenvolvidas, dessas, as mais proeminentes são: a SUPG (*Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin*) (BROOKS e HUGHES [7]), a GLS (*Galerkin/Least-Square*) (HUGHES *et al* [26]) e a PSPG (*Pressure-Stabilizing/Petrov-Galerkin*) (HUGHES *et al* [25]). Tais metodologias possuem como característica comum, a modificação da forma variacional do problema padrão de *Galerkin*, adicionando estabilidade ao método sem comprometer sua consistência.

TEZDUYAR em [49] apresentou a formulação SUPG/PSPG. Nesta técnica, a estabilização é alcançada pela adição de dois termos à formulação padrão de *Galerkin*. O primeiro refere-se ao termo da popularmente conhecida formulação SUPG (BROOKS e HUGHES [7]), que foi utilizada com sucesso durante a última década para problemas compressíveis e incompressíveis. Este termo previne, sem introduzir uma excessiva dissipação numérica, as oscilações causadas pelos termos convectivos. Nas aplicações em escoamentos incompressíveis com alto número de *Reynolds*, elementos com velocidade bilinear e pressão constante foram utilizados por BROOKS e HUGHES [7]. O segundo termo é uma generalização do termo de *Petrov-Galerkin* proposto para escoamentos de *Stokes* em [25]. Em vez de utilizar funções de interpolação diferentes para velocidade e pressão, com esta parcela de estabilização pôde-se utilizar funções de mesma ordem, sem gerar oscilações no campo de pressão. Este termo, também conhecido como PSPG, para números de *Reynolds* próximos de zero se reduz ao que foi proposto em [25].

A formulação estabilizada de elementos finitos quando aplicada às equações de *Navier-Stokes*, resulta em um sistema acoplado de equações não-lineares. O termo convectivo, presente na equação de conservação da quantidade de movimento, associado à não-linearidade do material apresentada em problemas com fluidos não-*Newtonianos*, tornam a escolha dos algoritmos de solução um assunto de suma importância, especialmente com respeito às propriedades de convergência. A busca por um método de solução não-linear ideal, pode muitas vezes ser uma tarefa difícil, dada a existência de diversas técnicas e suas variantes. Em [32], [36] e [16] podem ser encontradas revisões detalhadas de alguns desses métodos.

O método de *Newton* representa um algoritmo clássico na solução de grandes sistemas de equações não-lineares. Este método é particularmente eficiente por apresentar uma rápida convergência quando fornecidas boas aproximações iniciais e requer a solução de uma série de sistemas lineares (equações de *Newton*) por iteração [12]. Entretanto, computar a solução exata de um sistema de equações lineares por iteração do método de *Newton*, pode ser extremamente caro do ponto de vista computacional, principalmente, utilizando um método direto tal como o método de *Gauss* associado a um grande número de incógnitas. Tal esforço, não se justifica quando a solução aproximada do método de *Newton* está longe da solução desejada. Segundo ORTEGA *et al* [32] e SHERMAN [40], é razoável utilizar um método iterativo e resolver as equações de *Newton* somente de uma forma aproximada. A introdução destes métodos iterativos dá origem ao método conhecido como método de *Newton-Iterativo* ou *Newton Truncado*, o qual se baseia no balanço entre a precisão com que as equações de *Newton* são resolvidas e o esforço computacional requerido por iteração. Diversos métodos iterativos foram desenvolvidos nas últimas duas décadas e são descritos com detalhes em [4]. Destes, os métodos iterativos de *Krylov* apresentam-se como os de maior aplicabilidade e sucesso.

Uma importante questão a respeito dos métodos de *Newton-Iterativos* refere-se à determinação do nível de precisão requerida na solução das equações de *Newton*. DEMBO *et al* em [12] descrevem o método de *Newton Inexato* de controle do nível de precisão, baseado na geração de uma seqüência de tolerâncias utilizando o resíduo relativo do método não-linear. EISENSTAT e WALKER em [13] discutem em detalhes, diversas escolhas para estas seqüências de tolerâncias, analisando suas propriedades de convergência e performance.

A fragilidade quanto a qualidade da aproximação inicial dos métodos de *Newton* é abordada por EISENSTAT e WALKER em [13] com a discussão dos métodos de *Newton Inexatos* globalmente convergentes. Além disso, esses autores apresentam o algoritmo de retrocesso (*backtracking*) como alternativa de prover robustez aos métodos de *Newton*. Neste algoritmo, os passos de solução do método são encurtados quando necessário, até que se obtenha um passo satisfatório. Exemplos de aplicações dos métodos de *Newton Inexatos*, com mecanismo de retrocesso, para a solução das equações de *Navier-Stokes* são obtidos nos trabalhos de SHADID *et al* [38] e PERNICE e WALKER [35].

A maior parte das pesquisas relacionadas à dinâmica dos fluidos computacional concentra-se na solução do escoamento de fluidos *Newtonianos* compressíveis e incompressíveis. Tais fluidos apresentam como principal característica a viscosidade constante, independentemente do gradiente de velocidade do escoamento, em outras palavras, a tensão em um fluido *Newtoniano* é proporcional a sua taxa de deformação [5], [11], [17]. Entretanto, existe uma ampla categoria de fluidos para os quais a viscosidade depende da taxa de deformação. Tais fluidos são classificados como não-*Newtonianos*. Soluções exatas para o escoamento de fluidos não-*Newtonianos* são praticamente impossíveis tornando a solução aproximada, via métodos numéricos evidente para a maioria dos problemas envolvendo o escoamento desses fluidos [23]. Exemplos de trabalhos na área de simulação do escoamento de fluidos não-*Newtonianos* podem ser vistos em [6], [34], [41].

Neste trabalho foi empregada a formulação SUPG/PSPG na solução das equações de *Navier-Stokes* incompressíveis e em regime permanente, utilizando elementos triangulares de mesma ordem de interpolação para os campos de velocidade e pressão. O sistema de equações algébricas não-lineares resultantes do método discreto, foi resolvido a partir da implementação dos métodos tipo-*Newton* Inexatos providos de retrocesso, conforme sugerido em [28], [13] e [14]. Os sistemas localmente lineares, presentes em cada iteração do método de *Newton*, foram resolvidos comparativamente pelos métodos iterativos GMRES [39], TFQMR [19] e BiCGSTAB [52]. Além disso, foi implementado um algoritmo capaz de lidar com o escoamento de fluidos não-*Newtonianos* típicos da indústria, representados pelos modelos de *Lei de Potência* e *Bingham* encontrados em [11] e [2].

1.1. Objetivos

- Estudar o desempenho dos métodos tipo-*Newton* Inexatos, associados à formulação estabilizada SUPG/PSPG de elementos finitos em escoamentos incompressíveis *Newtonianos* e não-*Newtonianos*;
- Avaliar a contribuição das técnicas de retrocesso (*backtracking*) à solução dos métodos tipo-*Newton*;

- Estudar o desempenho dos solucionadores lineares GMRES, TFQMR e BiCGSTAB com o uso de três técnicas simples de pré-condicionamento.

1.2. Organização do Texto

O Capítulo 2 apresenta as equações de *Navier-Stokes* para fluidos incompressíveis em estado estacionário e coordenadas cartesianas bidimensionais, as definições de condições de contorno e as relações constitutivas referentes a reologia de fluidos.

No Capítulo 3 é abordada a formulação variacional das equações de *Navier-Stokes* baseada na formulação estabilizada proposta por TEZDUYAR em [49]. São descritos: o elemento triangular linear, o cálculo dos parâmetros de estabilização e desenvolvidas as matrizes e resíduos de elemento.

O Capítulo 4 trata dos métodos de solução de problemas não-lineares com base nos métodos tipo-*Newton* Inexatos. São apresentados os algoritmos para os métodos convencionais, Inexatos e globalmente convergentes, bem como as técnicas de obtenção das tolerâncias adaptativas requeridas pelos métodos inexatos e procedimentos de retrocesso de passo (*backtracking*) dos métodos globalmente convergentes

No Capítulo 5 são descritos os solucionadores lineares, GMRES, TFQMR e BiCGSTAB, utilizados no tratamento dos sistemas localmente lineares provenientes do método tipo-*Newton*. São apresentadas também duas técnicas simples de pré-condicionamento utilizadas no aperfeiçoamento do desempenho dos solucionadores lineares.

O Capítulo 6 descreve os resultados do algoritmo implementado aplicado à solução de três problemas amplamente conhecidos na área de dinâmica dos fluidos computacional. O primeiro trata do escoamento no interior de uma cavidade quadrada (*Cavity Flow*). O segundo refere-se ao escoamento com alargamento de canal (*Backward Facing Step*). O terceiro aborda o escoamento ao redor de um cilindro circular (*Flow Past Around a Cylinder*). São apresentados também os resultados dos testes com fluidos não-*Newtonianos* em um problema de interesse em perfuração de

poços. Trata-se do escoamento rotacional de um fluido no interior de uma anular excêntrica. Este problema aborda de uma forma simplificada o fenômeno observado em operações de perfuração de poços. Todos os testes são desenvolvidos sob diferentes condições, definidas pelo número de *Reynolds* do escoamento e os resultados são validados e comparados quanto ao desempenho das diversas estratégias de solução.

Finalmente no Capítulo 7 são apresentadas as considerações finais e propostas de trabalhos futuros.

1.3. Recursos Computacionais

O código proposto foi implementado em linguagem *FORTRAN 77* em ambiente *Windows 2000*. Os testes foram executados nos nós de processamento do *cluster ITAUTEC Infoserver* do NACAD-COPPE/UFRJ. Constituído de 16 máquinas *Intel dual Pentium III* de 1Ghz, 512 Mb de memória e 256 Kb de cache, operando sob plataforma *Red Hat Linux* utilizando compilador Intel *FORTRAN*. Algumas análises foram desenvolvidas em máquinas *AMD Athlon XP +2200*, 1 Gb de memória e 512 kb de cache sob plataforma *Microsoft Windows 2000*. Os problemas de validação, pós-processamento e geração de imagens, foram efetuados no pacote comercial *FLOTRAN* da *Ansys Inc.* disponível no Laboratório de Métodos Computacionais em Engenharia (LAMCE).

Capítulo 2

Equações Governantes

A análise de qualquer problema em mecânica dos fluidos começa, com as declarações das leis e os princípios básicos que regem o movimento do fluido, tais como os princípios de conservação de massa e quantidade de movimento. Além disso é necessário trazer à análise as relações adicionais, na forma de equações de estado ou outras de caráter constitutivo, que descrevam o comportamento das propriedades físicas dos fluidos sob determinadas condições.

As leis e princípios abordados a seguir, são as mesmas amplamente utilizadas na mecânica clássica, aplicadas aos fluidos sob a hipótese do contínuo.

2.1. Equações de Navier-Stokes

Considera-se um fluido viscoso, incompressível ocupando o domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^{ndim}$, de contorno Γ , onde $ndim$ é o número de dimensões no espaço. A velocidade e a pressão, \mathbf{u} e p , são governadas em regime permanente, desprezando-se as forças de inércia, pelos seguintes balanços de quantidade de movimento e massa respectivamente:

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \text{ em } \Omega \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \text{ em } \Omega \quad (2.2)$$

onde ρ é a densidade do fluido, assumida constante para escoamento incompressível, \mathbf{f} é um vetor de forças externas de origem gravitacional ou de forças de corpo e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões correspondente aos campos de velocidade e pressão e que será descrito na próxima seção. As equações (2.1) e (2.2) são conhecidas como equações de *Navier-Stokes* para escoamento incompressível em estado estacionário. Estas estão sujeitas às condições de contorno de *Dirichlet* e *Neumann*, que são respectivamente representadas por:

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \text{ em } \Gamma_{g,d}, d = 1 \dots ndim \quad (2.3)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{h} \text{ em } \Gamma_{h,d}, d = 1 \dots ndim \quad (2.4)$$

onde Γ_g e Γ_h são subconjuntos do contorno Γ .

De um ponto de vista numérico, o sistema de equações acopladas formado pelas equações (2.1) e (2.2) apresenta algumas dificuldades. Primeiramente a equação de quantidade de movimento é não-linear devido à presença do termo de convecção. Além disso, a equação de quantidade de movimento possui seu comportamento dominado pelo termo de difusão, em escoamentos altamente viscosos ou em baixa velocidade, ou pelo termo de convecção, em escoamentos pouco viscosos ou em alta velocidade. Outra característica importante deve-se à presença da restrição de incompressibilidade da equação (2.2) e que exige que procedimentos específicos de estabilização sejam aplicados para satisfazer tal restrição.

Neste trabalho será aplicada a formulação estabilizada de elementos finitos, proposta inicialmente por TEZDUYAR [49], com a velocidade e a pressão atuando como variáveis primárias.

2.2. Equações Constitutivas

A seguir serão descritas as equações constitutivas adotadas neste trabalho, sob a ótica do tratamento numérico do escoamento de fluidos incompressíveis *Newtonianos* e *Não-Newtonianos*.

As equações constitutivas envolvendo problemas de escoamento de fluidos, consistem nas diferentes formas de se relacionar o tensor de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ e as variáveis cinemáticas que descrevem o movimento do fluido. No escoamento de um fluido incompressível, determina-se o tensor de tensões a partir de um tensor isotrópico arbitrário onde sua decomposição pode ser descrita da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\sigma}(p, \mathbf{u}) = -p\mathbf{I} + \mathbf{T} \quad (2.5)$$

onde p representa a pressão hidrostática, \mathbf{I} é o tensor identidade e \mathbf{T} é o tensor de tensão desviadora ou de tensões cisalhantes.

No caso de um fluido *Newtoniano*, o tensor de tensão desviadora relaciona-se à taxa de deformação do fluido através de uma constante de proporcionalidade que representa a difusão da quantidade de movimento experimentada pelo fluido ao escoar, assim a definição da tensão desviadora se expressa por:

$$\mathbf{T} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \quad (2.6)$$

onde μ é a constante de proporcionalidade conhecida como viscosidade cinemática e $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o tensor taxa de deformações ou

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) \quad (2.7)$$

Os fluidos que não obedecem a equação (2.6) são denominados fluidos *Não-Newtonianos*. A principal característica dos fluidos *Não-Newtonianos*, reside na dependência da viscosidade com outros parâmetros do escoamento, como a taxa de cisalhamento ou até mesmo da história de deformação do fluido como se verifica em alguns fluidos denominados *tixotrópicos* e *reopéticos* [17]. Os fluidos *Não-Newtonianos* adotados neste trabalho foram tratados através dos modelos de Lei de Potência (*Power Law*) e *Bingham*, por representarem bem uma ampla gama de materiais comuns nas indústrias como tintas, lamas de perfuração de poços, pastas e resinas poliméricas [17].

Nas definições a seguir a equação (2.6) foi modificada de forma a refletir o caráter Não-Newtoniano do fluido tornando sua definição mais ampla, desta forma:

$$\mathbf{T} = 2\mu(\dot{\gamma})\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \quad (2.8)$$

onde $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento do fluido e $\mu(\dot{\gamma})$ passa a ser chamada de viscosidade aparente de fluidos Não-Newtonianos.

A partir da equação (2.8) as leis constitutivas aqui consideradas passam a ser definidas por:

- Fluido *Newtoniano*:

$$\mu(\dot{\gamma}) = \mu = \text{const} \quad (2.9)$$

- Fluido de Lei de Potência (*Power Law*):

$$\mu(\dot{\gamma}) = \begin{cases} \mu_0 k \dot{\gamma}^{n-1} & \text{se } \dot{\gamma} > \dot{\gamma}_0 \\ \mu_0 k \dot{\gamma}_0^{n-1} & \text{se } \dot{\gamma} \leq \dot{\gamma}_0 \end{cases} \quad (2.10)$$

onde k denota o índice de consistência, μ_0 é uma viscosidade nominal, n o expoente da Lei de Potência e $\dot{\gamma}_0$ é a taxa de cisalhamento limite.

- Fluido de *Bingham* clássico:

$$\mu(\dot{\gamma}) = \mu_0 + \frac{\sigma_Y}{\dot{\gamma}} \quad (2.11)$$

na expressão acima σ_Y é a tensão limite para fluidos de *Bingham* e μ_0 é a viscosidade plástica.

A Figura 2.1 mostra a variação da tensão cisalhante experimentada por alguns fluidos em função da taxa de cisalhamento. Nota-se a relação linear existente nos fluidos *Newtonianos*, onde a inclinação da reta representa a viscosidade. Segundo FOX [17] os fluidos que seguem a Lei de Potência apresentam dois comportamentos distintos. Nos casos em que a viscosidade diminui com o aumento da taxa de de-

formação ($n < 1$) o fluido é chamado de *pseudo-plástico* (torna-se delgado com as tensões tangenciais). A maioria dos fluidos *Não-Newtonianos* enquadra-se neste grupo e os exemplos incluem soluções poliméricas e suspensões coloidais. Os fluidos nos quais a viscosidade aumenta com o aumento da taxa de deformação ($n > 1$) são chamados de *dilatantes* (tornam-se mais espessos com as tensões tangenciais). As suspensões de amido e areia são exemplos de fluidos dilatantes.

Um “fluido” que se comporta como um sólido até que uma tensão limite seja excedida, e subseqüentemente apresenta uma relação linear entre a tensão e a taxa de cisalhamento, é denominado de fluido de *Bingham*.

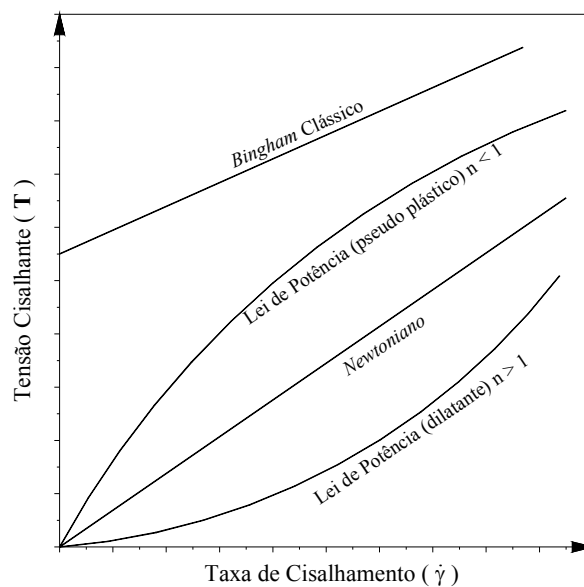


Figura 2.1 - Representação da reologia dos fluidos considerados

Cuidados especiais devem ser tomados, quando se deseja simular o escoamento de fluidos de *Bingham* conforme definido pela equação (2.11). Dentro das regiões do domínio onde a tensão desviadora apresenta-se abaixo da tensão limite σ_Y , o material comporta-se como um corpo rígido e a viscosidade tende ao infinito, i.e. $\mu(\dot{\gamma}) \rightarrow \infty$. Para contornar tal dificuldade, o fluido de *Bingham* será tratado por um modelo “Biviscoso” conforme sugerido em [2], desta forma:

$$\mu(\dot{\gamma}) = \begin{cases} \mu_0 + \frac{\sigma_Y}{\dot{\gamma}} & \text{se } \dot{\gamma} > \frac{\sigma_Y}{\mu_r - \mu_0} \\ \mu_r & \text{se } \dot{\gamma} \leq \frac{\sigma_Y}{\mu_r - \mu_0} \end{cases} \quad (2.12)$$

onde μ_r é uma viscosidade Newtoniana normalmente escolhida para ser algumas ordens de magnitude maior que a viscosidade plástica, com o objetivo de reproduzir as características de um fluido de *Bingham*. A Figura 2.2 abaixo apresenta o modelo de *Bingham* “bi-viscoso” definido pela equação (2.12).

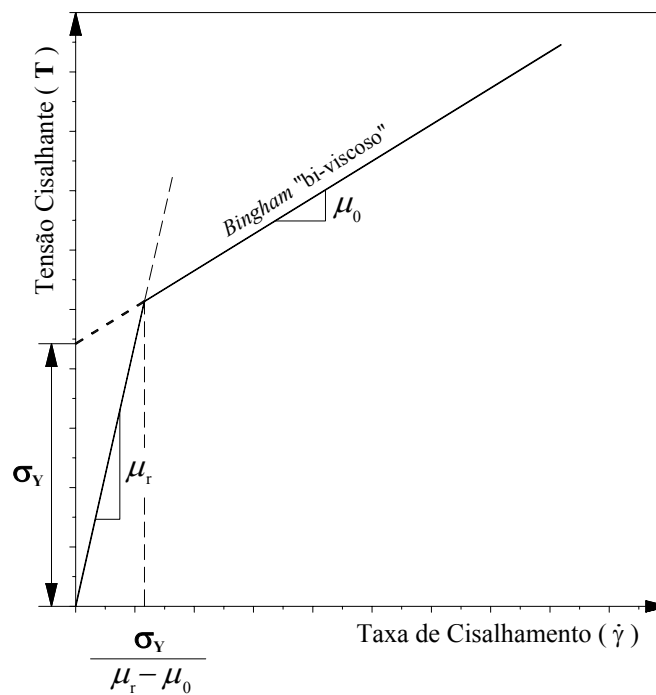


Figura 2.2 – Modelo de *Bingham* “bi-viscoso”.

Capítulo 3

Formulação de Elementos Finitos

Neste capítulo é apresentada a formulação estabilizada de elementos finitos, proposta inicialmente por TEZDUYAR [49]. Nesta formulação o uso dos parâmetros de estabilização SUPG (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) e PSPG (*Pressure Stabilizing Petrov Galerkin*) permitem a utilização de funções de interpolação de mesma ordem para os campos de velocidade e pressão. Na primeira seção é apresentada a formulação variacional das equações de *Navier-Stokes* em regime permanente. A seguir são apresentados os parâmetros de estabilização e construídas as funções de aproximação inerentes ao elemento triangular linear. Finalizando, são desenvolvidos os coeficientes das matrizes e resíduos de elemento.

3.1. Forma Variacional das Equações de Navier-Stokes

Considere a discretização do domínio Ω pela sua subdivisão em elementos Ω^e , $e=1,2, \dots, nel$, onde nel é o número de elementos utilizados nesta subdivisão, tal que $\Omega_i^e \cap \Omega_j^e \neq \emptyset$ e $\bigcup \Omega^e = \Omega$. Associados a esta discretização, considere a definição dos seguintes espaços para as funções de interpolação de velocidade e pressão

$$S_{\mathbf{u}}^h = \left\{ \mathbf{u}^h \mid \mathbf{u}^h \in [H^{1h}(\Omega)]^{ndim}, \mathbf{u}^h = g^h \text{ em } \Gamma_g \right\} \quad (3.1)$$

$$V_{\mathbf{u}}^h = \left\{ \mathbf{w}^h \mid \mathbf{w}^h \in [H^{1h}(\Omega)]^{ndim}, \mathbf{w}^h = 0 \text{ em } \Gamma_g \right\} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{S}_p^h = \mathbf{V}_p^h = \left\{ q^h \mid q^h \in [H^{1h}(\Omega)]^{ndim} \right\} \quad (3.3)$$

onde $ndim$ é o número de dimensões no espaço e $H^{1h}(\Omega)$ representa o espaço de funções dimensionais finitas sobre o domínio espacial Ω . Este espaço é formado pelo uso, no domínio do elemento, de polinômios de primeira ordem. A formulação estabilizada proposta por TEZDUYAR [49] para as equações (2.1) e (2.2) pode ser escrita como: Encontrar $\mathbf{u}^h \in \mathbf{S}_u^h$ e $p^h \in \mathbf{S}_p^h$ tal que, $\forall \mathbf{w}^h \in \mathbf{V}_u^h$ e $\forall q^h \in \mathbf{V}_p^h$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{w}^h \cdot \rho(\mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{u}^h - \mathbf{f}) d\Omega + \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}^h) : \boldsymbol{\sigma}(p^h, \mathbf{u}^h) d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{w}^h \cdot h d\Gamma + \int_{\Omega} q^h \nabla \cdot \mathbf{u}^h d\Omega \\ + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} (\delta^h + \phi^h) \cdot [\rho(\mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{u}^h) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(p^h, \mathbf{u}^h)] d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Na expressão acima as primeiras quatro integrais representam os termos da formulação padrão de *Galerkin* enquanto os termos adicionais representam as parcelas devido à formulação estabilizada. Esses termos são avaliados por somatórias por elemento, devido ao caráter de descontinuidade apresentado pelas funções de interpolação da formulação estabilizada.

A discretização espacial da equação (3.4) dá origem a um sistema não-linear de equações diferenciais da forma:

$$\mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{N}_{\delta}(\mathbf{u}) + \mathbf{K}\mathbf{u} - (\mathbf{G} + \mathbf{G}_{\delta})\mathbf{p} = \mathbf{f} + \mathbf{f}_{\delta} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{G}^T \mathbf{u} + \mathbf{N}_{\phi}(\mathbf{u}) + \mathbf{G}_{\phi} \mathbf{p} = \mathbf{e} + \mathbf{e}_{\phi} \quad (3.6)$$

onde \mathbf{u} é o vetor com os valores das incógnitas nodais de \mathbf{u}^h e \mathbf{p} é o vetor de valores nodais de p^h . O vetor $\mathbf{N}(\mathbf{u})$ corresponde aos termos convectivos não-lineares e as matrizes \mathbf{K} e \mathbf{G} são oriundas respectivamente dos termos viscosos e de pressão. Os vetores \mathbf{f} e \mathbf{e} são devidos às condições de contorno e/ou forças de corpo e os subscritos δ e ϕ identificam as contribuições SUPG e PSPG respectivamente.

Aplicando-se as técnicas de linearização descritas adiante no Capítulo 4, o sistema de equações descrito pelas equações (3.5) e (3.6) torna-se:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} + \mathbf{K}_\delta + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{N}_\delta(\mathbf{u})) & -(\mathbf{G} + \mathbf{G}_\delta) \\ \mathbf{G}^T + \mathbf{K}_\phi + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\mathbf{N}_\phi(\mathbf{u}) & \mathbf{G}_\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta p \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{q} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

ou de forma mais compacta

$$\mathbf{K}_T \Delta \mathbf{d} = -\mathbf{b} \quad (3.8)$$

onde \mathbf{K}_T é a matriz tangente, $\Delta \mathbf{d}$ é o vetor de solução incremental do método de *Newton* e \mathbf{b} é o vetor de resíduos definido pelo lado esquerdo das equações (3.5) e (3.6).

3.1.1. Derivadas das Matrizes Não-lineares

Neste trabalho, as derivadas das matrizes não-lineares apresentadas em (3.7) foram obtidas numericamente a partir de expansões em série de Taylor segundo sugerido em [45], da seguinte forma

$$\mathbf{N}(\mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) \cong \mathbf{N}(\mathbf{u}) + \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}} \Delta \mathbf{u} + \dots \quad (3.9)$$

3.2. Parâmetros de Estabilização

Como pode ser visto pela equação (3.4), foram adicionados dois termos de estabilização à formulação padrão de *Galerkin*. O primeiro representado por δ^h é o termo SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) proposto inicialmente por BROOKS e HUGHES em [7]. O segundo representado por ϕ^h é o termo PSPG (*Pressure Stabilizing Petrov Galerkin*) introduzido por TEZDUYAR em [49]. As funções de Petrov-*Galerkin* δ^h e ϕ^h são definidas por:

$$\delta^h = \tau_{\text{SUPG}} \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{w}^h \quad (3.10)$$

$$\phi^h = \frac{1}{\rho} \tau_{\text{PSPG}} \nabla q^h \quad (3.11)$$

os parâmetros τ_{SUPG} e τ_{PSPG} são obtidos segundo [46] pela seguinte expressão:

$$\tau_{\text{SUPG}} = \tau_{\text{PSPG}} = \left[\left(\frac{2 \|\mathbf{u}^h\|}{h^\#} \right)^2 + 9 \left(\frac{4\nu}{(h^\#)^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (3.12)$$

onde ν é a viscosidade dinâmica do fluido e $h^\#$ é o “comprimento de elemento” baseado no diâmetro da circunferência de mesma área:

$$h^\# = \sqrt{\frac{4A^e}{\pi}} \quad (3.13)$$

3.3. Elementos Triangulares

Introduzindo-se na equação (3.4) as aproximações de elementos finitos para os campos de velocidade e pressão

$$\mathbf{u}^h = p^h = \sum_{B=1} d_B N_B \quad (3.14)$$

$$\mathbf{w}^h = q^h = \sum_{A=1} c_A N_A \quad (3.15)$$

onde \mathbf{u}^h e p^h são as aproximações de \mathbf{u} e p tal que $\mathbf{u}^h = \mathbf{g}$ e $n \cdot \boldsymbol{\sigma} = h$ no contorno Γ_g e Γ_h respectivamente. d_B representa os valores das incógnitas \mathbf{u}^h e p^h no nó “B”. c_A são coeficientes arbitrários no nó “A” tal que $\mathbf{w}^h = 0$ em Γ_g e $q^h = 0$ em Γ_h e N_A e N_B são funções de interpolação no interior do elemento.

Em cada elemento, a solução aproximada assume a forma de uma combinação linear das funções prescritas da forma:

$$\begin{aligned}
 u^h &= \sum_{\Omega_1}^{i=1, nen} c_i^{(1)} N_i^{(1)} + \sum_{\Omega_2}^{i=1, nen} c_i^{(2)} N_i^{(2)} + \dots + \sum_{\Omega_{nel}}^{i=1, nen} c_i^{(nel)} N_i^{(nel)} \\
 &\text{ou} \\
 p^h &= \sum_{\Omega_1}^{i=1, nen} c_i^{(1)} N_i^{(1)} + \sum_{\Omega_2}^{i=1, nen} c_i^{(2)} N_i^{(2)} + \dots + \sum_{\Omega_{nel}}^{i=1, nen} c_i^{(nel)} N_i^{(nel)}
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

onde nen é o número de nós por elemento e nel é o número total de elementos.

A forma dos elementos é freqüentemente a mesma para um dado problema, e as funções de teste (3.14) são empregadas de maneira repetitiva ao longo de todo o domínio, desta forma, pode-se trabalhar a formulação para um único elemento Ω^e e estendê-la por todo o domínio Ω . Tal propriedade, consiste na principal característica dos métodos de elementos finitos.

Uma geometria bastante simples e largamente empregada em elementos finitos bidimensionais é a do triângulo como o da Figura 3.1a.

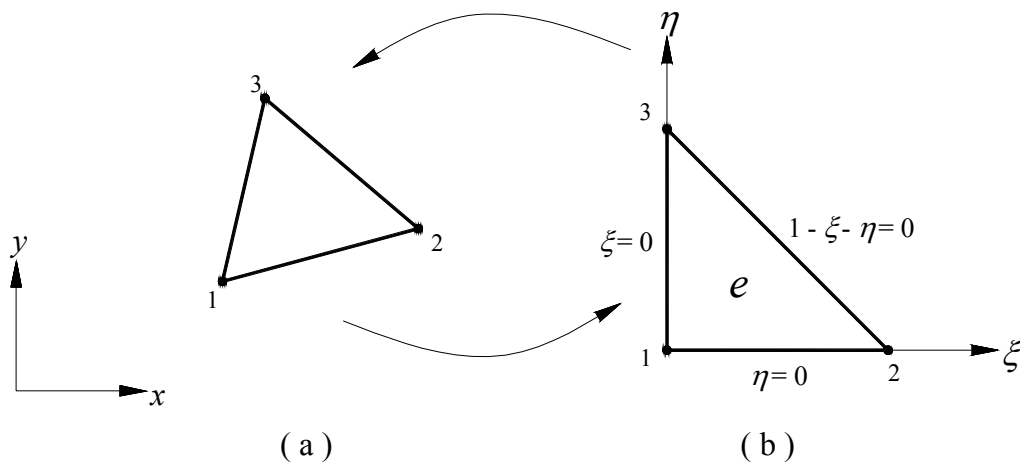


Figura 3.1 - Elemento Triangular Linear Isoparamétrico

Em uma malha de elementos finitos o elemento freqüentemente adquire formas distorcidas e inclinadas em relação ao sistema de coordenadas (Figura 3.1a), desta forma, é conveniente representar o elemento em um sistema de coordenadas locais e mapeá-lo em uma geometria mestre (Figura 3.1b), mais simples de se realizarem os cálculos. As funções que definem os três lados do triângulo mestre são dadas por $\eta = 0$, $1 - \xi - \eta = 0$ e $\xi = 0$. As funções de interpolação do elemento podem agora ser facilmente obtidas, como a seguir

$$N_1^e = 1 - \xi - \eta \quad (3.17)$$

$$N_2^e = \xi \quad (3.18)$$

$$N_3^e = \eta \quad (3.19)$$

Note que estas funções são tais que $N_i^e(\xi_j, \eta_j) = \delta_{ij}$, onde δ_{ij} é o *Delta de Kronecker* e $i, j = 1, 2, 3$ correspondem aos nós do elemento.

A formulação das matrizes do elemento requer que as funções de interpolação sejam derivadas em relação às coordenadas cartesianas, desta forma

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_i}{\partial \xi} &= \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} &= \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta}\end{aligned}\tag{3.20}$$

conseqüentemente, as derivadas $\frac{\partial N_i}{\partial x}$ e $\frac{\partial N_i}{\partial y}$ podem ser obtidas com a seguinte inversão

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \end{bmatrix}\tag{3.21}$$

onde \mathbf{J} é a matriz *jacobiana* que define a transformação das coordenadas globais para coordenadas locais e é dada por:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{13} & -x_{32} \\ -y_{31} & y_{23} \end{bmatrix}\tag{3.22}$$

sendo x_i e y_j coordenadas globais do elemento, e $x_{ij} = x_i - x_j$, $i, j = 1, 2, 3$. A inversa da matriz *jacobiana* é dada por:

$$\mathbf{J}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \end{bmatrix}\tag{3.23}$$

onde A^e é a área do elemento e e as derivadas das funções de interpolação ficam

$$N_{1,x} = \frac{1}{2A} y_{23}; \quad N_{2,x} = \frac{1}{2A} y_{31}; \quad N_{3,x} = \frac{1}{2A} y_{12}\tag{3.24}$$

$$N_{1,y} = \frac{1}{2A} x_{32}; \quad N_{2,y} = \frac{1}{2A} x_{13}; \quad N_{3,y} = \frac{1}{2A} x_{21}\tag{3.25}$$

é comum definir o operador gradiente discreto a partir das derivadas descritas acima

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_x \\ \mathbf{B}_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

3.4. Matrizes de Elemento

A seguir serão apresentadas as contribuições de cada elemento para o sistema de equações descrito pela equação (3.7).

3.4.1. Derivada da Matriz de Convecção

Aplicando-se a expansão descrita pela expressão (3.9) e desprezando-se os termos de ordem superior, obtém-se a derivada numérica da matriz de convecção de *Galerkin* segundo TEZDUYAR [45], desta forma:

$$\int_{\Omega^e} \rho(\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) \cdot \nabla(\mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) d\Omega^e \cong \int_{\Omega^e} \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} d\Omega^e + \int_{\Omega^e} \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\Delta\mathbf{u} d\Omega^e + \int_{\Omega^e} \rho(\Delta\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} d\Omega^e + \dots \quad (3.27)$$

na expressão acima pode-se identificar no primeiro termo do lado direito o vetor correspondente ao resíduo \mathbf{r}_n , o segundo termo correspondente a matriz de convecção $(\mathbf{N})^e$ e um termo adicional que será posteriormente chamado de termo de incremento e diferenciado dos demais por um sinal +, ou seja, $(\mathbf{N}^+)^e$ será chamada por *matriz de convecção incremental*. A derivada aproximada da matriz de convecção de *Galerkin* fica:

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}} \cong \mathbf{A} \Big|_{e=1}^{nel} (\mathbf{N} + \mathbf{N}^+)^e \quad (3.28)$$

a seguir serão apresentadas as duas matrizes que compõem a derivada aproximada (3.28)

Matriz de Convecção

$$\mathbf{n}^e = \rho \int_{\Omega^e} \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Delta \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.29a)$$

$$\mathbf{N}^e = \rho \int_{\Omega^e} N_a (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_b \delta_{ij} \, d\Omega^e \quad (3.29b)$$

onde δ_{ij} é o delta de *Kronecker* e \mathbf{u} é o vetor de velocidades avaliado no baricentro do elemento como:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \bar{u}_x \\ \bar{u}_y \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} u_x^1 + u_x^2 + u_x^3 \\ u_y^1 + u_y^2 + u_y^3 \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

onde u_i^j , com $i = x, y$ e $j = 1, 2, 3$, representa a componente i de velocidade no nó j do elemento. O termo $(\mathbf{u} \cdot \nabla)$ na equação (3.29) será tratado nesta e nas definições posteriores, como um “operador convectivo” do escalar N_j , com $j = 1, 2, 3$, ou seja:

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_b &= \left[(\bar{u}_x N_{1,x} + \bar{u}_y N_{1,y}) \quad (\bar{u}_x N_{2,x} + \bar{u}_y N_{2,y}) \quad (\bar{u}_x N_{3,x} + \bar{u}_y N_{3,y}) \right] \\ &\quad \text{ou} \\ (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_b &= \frac{1}{2A^e} \left[(\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \quad (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \quad (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \right] \end{aligned} \quad (3.31)$$

As integrais dos monômeros (3.17) - (3.19) no domínio do elemento Ω^e podem ser resolvidas com o auxílio da seguinte expressão exata [24]:

$$\int_{\Omega^e} r^\alpha s^\beta t^\gamma \, d\Omega^e = \frac{\alpha! \beta! \gamma!}{(\alpha + \beta + \gamma + 2)!} 2A^e \quad (3.32)$$

desta forma a integral (3.29) resulta na seguinte matriz:

$$N^e = \frac{1}{6} \rho \begin{bmatrix} (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{I} \\ (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{I} \\ (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{I} & (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

onde \mathbf{I} é a matriz de identidade de ordem 2, utilizada para tornar a representação mais compacta.

Matriz de Convecção Incremental

$$\mathbf{n}^+ = \rho \int_{\Omega^e} \mathbf{w} \cdot (\Delta \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.34a)$$

$$\mathbf{N}^+ = \rho \int_{\Omega^e} N_a N_b \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \, d\Omega^e \quad (3.34b)$$

utilizando a expressão (3.32) a matriz fica:

$$\mathbf{N}^+ = \frac{1}{12A^e} \rho \begin{bmatrix} 2\mathbf{C} & \mathbf{C} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C} & 2\mathbf{C} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C} & \mathbf{C} & 2\mathbf{C} \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

onde \mathbf{C} na matriz acima, representa a seguinte sub-matriz:

$$\mathbf{C} = (\nabla \mathbf{u})^T = \begin{bmatrix} u_{x,x} & u_{x,y} \\ u_{y,x} & u_{y,y} \end{bmatrix} = \frac{1}{2A^e} \begin{bmatrix} (y_{23} u_x^1 + y_{31} u_x^2 + y_{12} u_x^3) & (x_{32} u_x^1 + x_{13} u_x^2 + x_{21} u_x^3) \\ (y_{23} u_y^1 + y_{31} u_y^2 + y_{12} u_y^3) & (x_{32} u_y^1 + x_{13} u_y^2 + x_{21} u_y^3) \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

3.4.2. Derivada da Matriz de Convecção SUPG

De forma similar ao que foi feito para a matriz de convecção de *Galerkin*, a derivada aproximada da matriz de convecção SUPG pode ser avaliada da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{N}_\delta}{\partial \mathbf{u}} \cong \mathbf{A} \left(\mathbf{N}_\delta + \mathbf{N}_\delta^+ + \mathbf{N}_\delta^{++} \right)^e \quad (3.37)$$

a seguir serão apresentadas as 3 matrizes de elemento que formam a derivada da matriz de convecção SUPG.

Matriz de Convecção SUPG

$$\mathbf{n}_\delta = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Delta \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.38a)$$

$$\mathbf{N}_\delta = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_a \delta_{ij} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_b \, d\Omega^e \quad (3.38b)$$

utilizando a definição (3.31), a matriz torna-se:

$$\mathbf{N}_\delta = \rho \tau_{SUPG} \frac{1}{4A^e} \begin{bmatrix} N_\delta^{11} \mathbf{I} & N_\delta^{12} \mathbf{I} & N_\delta^{13} \mathbf{I} \\ & N_\delta^{22} \mathbf{I} & N_\delta^{23} \mathbf{I} \\ sim & & N_\delta^{33} \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

os coeficientes da matriz (3.39) são sub-matrizes de ordem 2, cujos coeficientes N_δ^{ab} são:

$$\begin{aligned} N_\delta^{12} &= (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \\ N_\delta^{13} &= (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \\ N_\delta^{23} &= (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \\ N_\delta^{11} &= -(N_\delta^{12} + N_\delta^{13}) \\ N_\delta^{22} &= -(N_\delta^{21} + N_\delta^{23}) \\ N_\delta^{33} &= -(N_\delta^{31} + N_\delta^{32}) \end{aligned} \quad (3.40)$$

os demais coeficientes são obtidos por simetria.

1ª. Matriz de Convecção SUPG Incremental

$$\mathbf{n}_\delta^+ = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{w} \cdot (\Delta \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.41a)$$

$$\mathbf{N}_\delta^+ = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_a N_b \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \, d\Omega^e \quad (3.41b)$$

utilizando as definições (3.31), (3.32) e (3.36) obtém-se a seguinte matriz:

$$\mathbf{N}_\delta^+ = \rho \tau_{SUPG} \frac{1}{6} \begin{bmatrix} (\bar{u}_x \gamma_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{C} \\ (\bar{u}_x \gamma_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{C} \\ (\bar{u}_x \gamma_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{C} & (\bar{u}_x \gamma_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{C} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

2ª. Matriz de Convecção SUPG Incremental

$$\mathbf{n}_\delta^{++} = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\Delta \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.43a)$$

$$\mathbf{N}_\delta^{++} = \rho \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_a}{\partial x_j} N_b (\mathbf{u} \cdot \nabla) u_i \, d\Omega^e \quad (3.43b)$$

utilizando as definições (3.24), (3.25) e (3.32) a matriz resultante fica:

$$\mathbf{N}_\delta^{++} = \rho \tau_{SUPG} \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{11} \\ \mathbf{A}_{22} & \mathbf{A}_{22} & \mathbf{A}_{22} \\ \mathbf{A}_{33} & \mathbf{A}_{33} & \mathbf{A}_{33} \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

onde \mathbf{A}_{ii} representa as seguintes sub-matrizes:

$$\mathbf{A}_{11} = \begin{bmatrix} \gamma_{23} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) & x_{32} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) \\ \gamma_{23} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) & x_{32} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

$$\mathbf{A}_{22} = \begin{bmatrix} \gamma_{31} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) & x_{13} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) \\ \gamma_{31} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) & x_{13} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_{33} = \begin{bmatrix} \gamma_{12} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) & x_{21} (\bar{u}_x u_{x,x} + \bar{u}_y u_{x,y}) \\ \gamma_{12} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) & x_{21} (\bar{u}_x u_{y,x} + \bar{u}_y u_{y,y}) \end{bmatrix}$$

3.4.3. Derivada da Matriz de Convecção PSPG

De forma similar ao que foi feito anteriormente para as matrizes de convecção de *Galerkin* e SUPG, a derivada da matriz de convecção PSPG possui a seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{N}_\phi}{\partial \mathbf{u}} \cong \mathbf{A} \left(\mathbf{N}_\phi + \mathbf{N}_\phi^+ \right)^e \quad (3.46)$$

a seguir serão apresentadas as 2 matrizes de elemento que formam a derivada da matriz de convecção PSPG

Matriz de Convecção PSPG

$$\mathbf{n}_\phi = \tau_{PSPG} \int_{\Omega^e} \nabla q \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Delta \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.47a)$$

$$\mathbf{N}_\phi = \tau_{PSPG} \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_a}{\partial x_j} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_b \, d\Omega^e \quad (3.47b)$$

nesta matriz, o efeito do gradiente da função de peso de pressão atuando sobre as funções de teste de velocidade resultam numa matriz retangular de dimensão (3×6). Utilizando a definição (3.26) a matriz (3.47b) torna-se:

$$\mathbf{N}_\phi = \tau_{PSPG} \frac{1}{2} \left[\left(\bar{u}_x \gamma_{23} + \bar{u}_y x_{32} \right) \mathbf{B}^T \quad \left(\bar{u}_x \gamma_{31} + \bar{u}_y x_{13} \right) \mathbf{B}^T \quad \left(\bar{u}_x \gamma_{12} + \bar{u}_y x_{21} \right) \mathbf{B}^T \right] \quad (3.48)$$

Matriz de Convecção PSPG incremental

$$\mathbf{n}_\phi^+ = \tau_{PSPG} \int_{\Omega^e} \nabla q \cdot (\Delta \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \, d\Omega^e \quad (3.49a)$$

$$\mathbf{N}_\phi^+ = \tau_{PSPG} \int_{\Omega^e} \nabla N_a \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} N_b \, d\Omega^e \quad (3.49b)$$

esta matriz também possui estrutura retangular de dimensão (3×6) da seguinte forma:

$$[\mathbf{N}_\phi^+] = \tau_{PSPG} \frac{1}{6} [\mathbf{E} \quad \mathbf{E} \quad \mathbf{E}] \quad (3.50)$$

e os coeficientes da sub-matriz \mathbf{E} são:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} y_{23}u_{x,x} + x_{32}u_{y,x} & y_{23}u_{x,y} + x_{32}u_{y,y} \\ y_{31}u_{x,x} + x_{13}u_{y,x} & y_{31}u_{x,y} + x_{13}u_{y,y} \\ y_{12}u_{x,x} + x_{21}u_{y,x} & y_{12}u_{x,y} + x_{21}u_{y,y} \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

3.4.4. Matriz Viscosa

$$\mathbf{K} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\mathbf{K}^e) \quad (3.52)$$

$$\mathbf{k}^e = \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}) : 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega^e \quad (3.53a)$$

$$\mathbf{K}^e = \int_{\Omega^e} \mu \left(\delta_{ij} \nabla N_a \cdot \nabla N_b + \frac{\partial N_a}{\partial x_j} \frac{\partial N_b}{\partial x_i} \right) d\Omega^e \quad (3.53b)$$

Substituindo as derivadas das funções de interpolação definidas em (3.24) e (3.25) a matriz (3.52) torna-se:

$$\mathbf{K}^e = \frac{\mu}{4A^e} \begin{bmatrix} 2y_{23}y_{23} + x_{32}x_{32} & x_{32}y_{23} & 2y_{23}y_{31} + x_{32}x_{13} & x_{32}y_{31} & 2y_{23}y_{12} + x_{32}x_{21} & x_{32}y_{12} \\ & y_{23}y_{23} + 2x_{32}x_{32} & y_{23}x_{13} & y_{23}y_{31} + 2x_{32}x_{13} & y_{23}x_{21} & y_{23}y_{12} + 2x_{32}x_{21} \\ & & 2y_{31}y_{31} + x_{13}x_{13} & x_{13}y_{31} & 2y_{31}y_{12} + x_{13}x_{21} & x_{13}y_{12} \\ & & & y_{31}y_{31} + 2x_{13}x_{13} & y_{31}x_{21} & y_{31}y_{12} + 2x_{13}x_{21} \\ & & & & 2y_{12}y_{12} + x_{21}x_{21} & x_{21}y_{12} \\ & sim & & & & y_{12}y_{12} + 2x_{21}x_{21} \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

3.4.5. Matriz de Pressão

$$\mathbf{G} = \mathbf{A} \underset{e=1}{\overset{nel}{}} (\mathbf{G}^e) \quad (3.55)$$

$$\mathbf{g}^e = \int_{\Omega^e} (\nabla \cdot \mathbf{w}) p \, d\Omega^e \quad (3.56a)$$

$$\mathbf{G}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_a}{\partial x_i} N_b \, d\Omega^e \quad (3.56b)$$

Esta matriz é retangular de dimensão (6×3) devido à presença da função de peso de velocidade atuando sobre as funções de teste de pressão. Utilizando a definição (3.26) a matriz torna-se:

$$\mathbf{G}^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \quad (3.57)$$

3.4.6. Matriz de Pressão Transposta

$$\mathbf{G}^T = \mathbf{A} \underset{e=1}{\overset{nel}{}} (\mathbf{G}^T)^e \quad (3.58)$$

$$(\mathbf{g}^T)^e = \int_{\Omega^e} q (\nabla \cdot \mathbf{u}) \, d\Omega^e \quad (3.59a)$$

$$(\mathbf{G}^T)^e = \int_{\Omega^e} N_a \frac{\partial N_b}{\partial x_j} \, d\Omega^e \quad (3.59b)$$

Transpondo-se a matriz (3.57) obtém-se:

$$(\mathbf{G}^T)^e = \frac{1}{6} [\mathbf{B}^T \quad \mathbf{B}^T \quad \mathbf{B}^T] \quad (3.60)$$

3.4.7. Matriz de Pressão SUPG

$$\mathbf{G}_\delta = \mathbf{A} \begin{matrix} nel \\ e=1 \end{matrix} (\mathbf{G}_\delta^e) \quad (3.61)$$

$$\mathbf{G}_\delta^e = \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{w} \cdot \nabla \Delta p \, d\Omega^e \quad (3.62a)$$

$$\mathbf{G}_\delta^e = \tau_{SUPG} \int_{\Omega^e} (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_a \frac{\partial N_b}{\partial x_i} \, d\Omega^e \quad (3.62b)$$

de forma similar ao que foi visto na matriz (3.57), esta matriz é retangular de dimensão (6×3), e igual a transposta da matriz (3.48)

$$\mathbf{G}_\delta^e = \tau_{SUPG} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (\bar{u}_x y_{23} + \bar{u}_y x_{32}) \mathbf{B} \\ (\bar{u}_x y_{31} + \bar{u}_y x_{13}) \mathbf{B} \\ (\bar{u}_x y_{12} + \bar{u}_y x_{21}) \mathbf{B} \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

3.4.8. Matriz de Pressão PSPG

$$\mathbf{G}_\phi = \mathbf{A} \begin{matrix} nel \\ e=1 \end{matrix} (\mathbf{G}_\phi^e) \quad (3.64)$$

$$\mathbf{g}_\phi^e = \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \nabla q \cdot \nabla \Delta p \, d\Omega^e \quad (3.65a)$$

$$\mathbf{G}_\phi^e = \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho} \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{B} \, d\Omega^e \quad (3.65b)$$

a matriz acima é de ordem 3 por apresentar somente termos referentes à pressão, assim sendo:

$$\mathbf{G}_\phi^e = \frac{\tau_{PSPG}}{4A^e} \frac{1}{\rho} \begin{bmatrix} y_{23}^2 + x_{32}^2 & y_{23}y_{31} + x_{32}x_{13} & y_{23}y_{12} + x_{32}x_{21} \\ & y_{31}^2 + x_{13}^2 & y_{31}y_{12} + x_{13}x_{21} \\ sim & & y_{12}^2 + x_{21}^2 \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

3.5. Resíduo

O resíduo do sistema de equações diferenciais (3.5) - (3.6) é definido por:

$$\mathbf{r} = \mathbf{f} + \mathbf{f}_\delta - [\mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{N}_\delta(\mathbf{u}) + \mathbf{K}\mathbf{u} - (\mathbf{G} + \mathbf{G}_\delta)\mathbf{p}] \quad (3.67)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{e} + \mathbf{e}_\phi - [\mathbf{G}^T\mathbf{u} + \mathbf{N}_\phi(\mathbf{u}) + \mathbf{G}_\phi\mathbf{p}] \quad (3.68)$$

Da mesma forma como foram tratadas as matrizes na secção anterior, o resíduo pode ser obtido através das respectivas contribuições em cada elemento:

$$\mathbf{r} = \mathbf{A} \begin{matrix} nel \\ e=1 \end{matrix} (\mathbf{r}^e) \quad (3.69)$$

$$\mathbf{r}^e = \mathbf{f}^e + \mathbf{f}_\delta^e - [\mathbf{n}^e(\mathbf{u}^e) + \mathbf{n}_\delta^e(\mathbf{u}^e) + \mathbf{k}^e\mathbf{u}^e - (\mathbf{g}^e + \mathbf{g}_\delta^e)\mathbf{p}^e]$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{A} \begin{matrix} nel \\ e=1 \end{matrix} (\mathbf{q}^e) \quad (3.70)$$

$$\mathbf{q}^e = \mathbf{e}^e + \mathbf{e}_\phi^e - [\mathbf{g}^T\mathbf{u}^e + \mathbf{n}_\phi^e(\mathbf{u}^e) + \mathbf{g}_\phi^e\mathbf{p}^e]$$

sendo \mathbf{u}^e e \mathbf{p}^e , os vetores representados por:

$$\mathbf{u}^e = (u_x^1, u_y^1, u_x^2, u_y^2, u_x^3, u_y^3)^T \quad (3.71)$$

$$\mathbf{p}^e = (p^1, p^2, p^3)^T$$

onde os índices 1, 2 e 3 representam respectivamente as contribuições dos vetores \mathbf{u}^e e \mathbf{p}^e nos nós 1, 2 e 3. Os resíduos \mathbf{r}^e e \mathbf{q}^e podem ainda ser representados por:

$$\mathbf{r}^e = \mathbf{f}^e + \mathbf{f}_\delta^e - [\mathbf{r}_n^e + \mathbf{r}_{n_\delta}^e + \mathbf{r}_k^e - (\mathbf{r}_g^e + \mathbf{r}_{g_\delta}^e)] \quad (3.72)$$

$$\mathbf{q}^e = \mathbf{e}^e + \mathbf{e}_\phi^e - (\mathbf{r}_{g^T}^e + \mathbf{r}_{n_\phi}^e + \mathbf{r}_{g_\phi}^e) \quad (3.73)$$

Para calcular as componentes do resíduo em cada elemento como descrito em (3.72) e (3.73) multiplicam-se os vetores (3.71) pelas respectivas matrizes deduzidas

na secção anterior. Note que podem ainda ser feitas simplificações nos cálculos dos resíduos devido ao fato que $\sum_{i=1}^3 \frac{\partial N_i}{\partial x_j} = 0$, o que aumenta a eficiência da programação.

Capítulo 4

Solução do Problema Não-Linear

A discretização das equações (2.1) e (2.2) dá origem a um sistema de equações algébricas não-lineares. Muitos são os métodos de linearização atualmente empregados na solução de tais problemas, dentre os quais, podem-se citar: o método de *Picard*, também conhecido como método de ponto fixo ou iterações sucessivas, o método de *Broyden* e a família dos métodos de *Newton* como estratégias de sucesso [16].

No presente trabalho optou-se por uma comparação entre os métodos de iterações sucessivas (IS) e o método de *Newton* convencional em suas versões inexata e inexata com retrocesso (*backtracking*). O objetivo é avaliar o desempenho de algumas propriedades desejáveis em um método iterativo, tais como, robustez, taxa de convergência e balanceamento no esforço computacional exigido.

4.1. Métodos de tipo-Newton

Na solução de sistemas de equações algébricas não-lineares pelo método de *Newton*, admite-se que dada uma configuração inicial, o problema consiste em se determinar uma correção para o problema localmente linear aproximando-se as parcelas não lineares através de séries de *Taylor* de ordem superior truncada [22], [36]. Para ilustrar o método, considere o seguinte sistema:

$$\mathbf{N}(\mathbf{d}) = \mathbf{F} \tag{4.1}$$

A cada iteração, dada uma solução aproximada \mathbf{d}^i calcula-se a correção $\Delta\mathbf{d}^i$, tal que

$$\mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \Delta\mathbf{d}^i) \cong \mathbf{F} \quad (4.2)$$

onde $\Delta\mathbf{d}^i$ pode ser obtido a partir da seguinte expansão em série de *Taylor* em torno de \mathbf{d}^i

$$\mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \Delta\mathbf{d}^i) \cong \mathbf{N}(\mathbf{d}^i) + \left. \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{d}} \right|_{\mathbf{d}^i} \Delta\mathbf{d}^i \quad (4.3)$$

substituindo-se (4.3) em (4.2), e fazendo $\mathbf{r}^i = \mathbf{F} - \mathbf{N}(\mathbf{d}^i)$ o resíduo da iteração não-linear, obtém-se:

$$\left. \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{d}} \right|_{\mathbf{d}^i} \Delta\mathbf{d}^i = \mathbf{r}^i \quad (4.4)$$

onde a atualização da solução é feita por:

$$\mathbf{d}^{i+1} = \mathbf{d}^i + \Delta\mathbf{d}^i \quad (4.5)$$

No procedimento descrito acima, a derivada do lado esquerdo da equação (4.4) é comumente chamada de *Jacobiano* de \mathbf{N} ou matriz de rigidez tangente em problemas multidimensionais, e será referida posteriormente por:

$$\mathbf{K}_T(\mathbf{d}^i) = \left. \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{d}} \right|_{\mathbf{d}^i} \quad (4.6)$$

O método de *Newton* conforme definido pelas equações (4.4) e (4.5) converge quadraticamente, desde que observados os seguintes aspectos:

- A solução inicial \mathbf{d}^0 deve estar próxima o suficiente da solução do sistema, caso contrário, o método diverge, a não ser que sejam tomadas providências no

sentido de contornar tal problema. Isto será descrito mais adiante nos métodos de *Newton* globalmente convergentes;

- A inversa de \mathbf{K}_T existe em todas as iterações necessárias até a convergência ser atingida.

Caso os termos correspondentes às derivadas numéricas que formam a matriz de rigidez tangente não sejam avaliados, o método de *Newton* recai no método de iterações sucessivas (IS).

4.1.1. Métodos de IS e *Newton* Convencional

O método de *Newton* Convencional analisado, consiste simplesmente em se aplicar os procedimentos descritos pelas equações (4.4) e (4.5) recursivamente até a convergência ser atingida conforme pode ser observado no Algoritmo 4.1.

1. $iter = 0$
2. Norma residual da solução inicial: $\|\mathbf{r}^0\|$
3. **ENQUANTO** $\|\mathbf{r}^{iter}\|/\|\mathbf{r}^0\| \geq \tau_{res}$ **E** $\|\Delta\mathbf{d}^{iter}\|/\|\mathbf{d}^{iter}\| \geq \tau_{\Delta d}$ **FAZER:**
4. Atualiza contador de iterações: $iter \leftarrow iter + 1$
5. Avaliar matriz tangente: $\mathbf{K}_T(\mathbf{d}^{iter})$
6. Resolver sistema linear: $\Delta\mathbf{d}^{iter} = \mathbf{K}_T^{-1}(\mathbf{d}^{iter}) \cdot \mathbf{r}^{iter}$
7. Atualizar solução: $\mathbf{d}^{iter} = \mathbf{d}^{iter-1} + \Delta\mathbf{d}^{iter}$
8. Avaliar resíduo: $\mathbf{r}^{iter} = \mathbf{F} - \mathbf{N}(\mathbf{d}^{iter})$
9. Avaliar norma residual da solução: $\|\mathbf{r}^{iter}\|$
10. Avaliar norma residual do incremento de solução: $\|\Delta\mathbf{d}^{iter}\|$
11. Avaliar norma da solução: $\|\mathbf{d}^{iter}\|$
12. **FIM ENQUANTO**

Algoritmo 4.1: Algoritmo para o método de Newton Convencional

onde τ_{res} é a tolerância à norma do resíduo não-linear e $\tau_{\Delta d}$ é a tolerância ao incremento ou direção de busca não-linear.

Note que se no passo 5 do Algoritmo 4.1 for desprezada a avaliação dos termos correspondentes à derivada numérica dos termos não-lineares, o método de *Newton* recai no método de iterações sucessivas.

O procedimento descrito acima está ilustrado para um problema escalar na Figura 4.1.

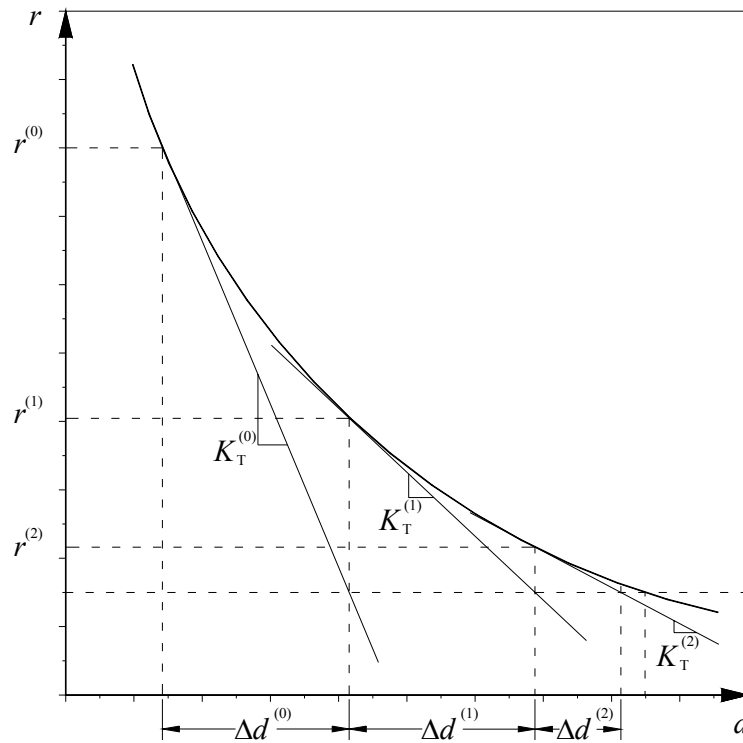


Figura 4.1 – Ilustração do método de *Newton* Convencional

Dentro da estratégia de solução dos sistemas de equações não-lineares o método de *Newton* consiste na geração de uma série de problemas linearizados. Para problemas de grande-porte, a solução dos sistemas de equações linearizadas, juntamente com as repetidas avaliações da matriz de rigidez tangente, tornam o método de *Newton* extremamente dispendioso do ponto de vista computacional. Tais inconvenientes constituem em estímulo para o emprego de variações do método de *Newton*, de forma a torná-lo economicamente viável sem comprometer significativamente a taxa de convergência e a precisão da solução final.

4.1.2. Métodos de IS e *Newton* Inexato

Os diversos métodos tipo *Newton* são baseados na expansão de série de *Taylor* da equação (4.3) próxima da solução. Sendo assim, o cálculo das soluções lineares no início das iterações não-lineares não necessita grande precisão [33]. Esta necessidade aumenta na medida em que as iterações não-lineares vão, cada vez mais, aproximando-se da solução final no equilíbrio. Portanto, a idéia do método de *Newton* Inexato, também conhecido por *Newton* Truncado, é minimizar o esforço empregado para a

solução dos sistemas de equações lineares quando a direção de busca não-linear estiver longe da solução no equilíbrio. Portanto, a idéia desta variação do método de *Newton* é minimizar o esforço empregado para a solução do sistema de equações lineares quando a direção de busca não-linear estiver longe da solução de equilíbrio. A análise matemática do efeito da aplicação desta técnica ao comportamento da convergência da solução calculada pelo método não-linear pode ser encontrada em [13], [14], [28].

A taxa de convergência assintótica [28] e o esforço computacional no método de *Newton* Inexato são controlados por um parâmetro calculado, η_i , o qual especifica o critério de terminação truncado requerido para a solução linear dentro da iteração não-linear i . Um método de determinação do critério de terminação truncada é sugerido em [28]. Segundo [28], a medida do grau de aproximação da iteração não-linear i em relação à solução pode ser dada por

$$\eta_i^A = \gamma \frac{\|\mathbf{r}_i\|^2}{\|\mathbf{r}_{i-1}\|^2} \quad (4.7)$$

onde $\gamma \in (0, 1]$. Para a implementação do algoritmo, se η_i^A é uniformemente limitada longe de 1, então, fazendo $\eta_i = \eta_i^A$ para $i > 0$ produz uma convergência q-quadrática [28]. Dessa forma, a tolerância utilizada na solução do sistema linear é eficientemente explorada. No intuito de se determinar o valor da tolerância na primeira iteração, bem como nas demais, mantendo o limite da escolha sempre longe de 1, tem-se

$$\eta_i^B = \begin{cases} \eta_{máx}, & i = 0, \\ \text{mín}(\eta_{máx}, \eta_i^A), & i > 0. \end{cases} \quad (4.8)$$

em (4.8), o parâmetro $\eta_{máx}$ é um limite superior da seqüência η_i , $i = 1, 2, \dots$. Os valores sugeridos por EISENSTAT [13] são $\gamma = 0,9$ e $\eta_{máx} = 0,9999$. Nos testes apresentados no Capítulo 6 foi considerado $\eta_{máx} = 0,1; 0,5$ e $0,9$.

Pode ocorrer entretanto, que η_i^B seja pequeno demais para uma ou mais iterações enquanto a iteração não-linear ainda esteja longe da solução. Para evitar este tipo de problema, KELLEY [28] sugere que se η_{i-1} for suficientemente grande, o valor seguinte, η_i não pode diminuir muito mais que um fator de η_{i-1} . Ou seja,

$$\eta_i^C = \begin{cases} \eta_{máx}, & i = 0, \\ \text{mín}(\eta_{máx}, \eta_i^A), & i > 0, \gamma\eta_{i-1}^2 < 0,1, \\ \text{mín}(\eta_{máx}, \text{máx}(\eta_i^A, \gamma\eta_{i-1}^2)), & i > 0, \gamma\eta_{i-1}^2 > 0,1. \end{cases} \quad (4.9)$$

O valor 0,1 é arbitrário.

Há casos em que a iteração não-linear reduz $\|\mathbf{r}_i\|$ a valores muito pequenos, além do nível de precisão desejado, produzindo portanto, elevado custo no cálculo da solução linear, sendo esta mais precisa que o necessário. Este esforço pode ser reduzido ao necessário, se a norma do resíduo da iteração não-linear corrente for comparada com a norma do resíduo determinante do final das iterações não-lineares

$$\tau = \tau_{res} \|\mathbf{r}_0\| \quad (4.10)$$

e limitando η_i por uma constante múltipla de $\tau/\|\mathbf{r}_i\|$. KELLEY [28] sugere

$$\eta_i = \text{mín}(\eta_{máx}, \text{máx}(\eta_i^C, 0.5\tau/\|\mathbf{r}_i\|)) \quad (4.11)$$

O cálculo de η conforme a equação (4.7) resulta em um algoritmo adaptativo para a solução do problema não-linear. Ou seja, quando a iteração não-linear está longe da solução, $\|\mathbf{r}_i\|$ é grande e portanto, pouco esforço é necessário para se obter uma solução que satisfaça à tolerância corrente. Conforme as iterações não-lineares vão se aproximando da solução, o valor de $\|\mathbf{r}_i\|$ vai diminuindo e portanto, o esforço para o cálculo da solução é maior, pois a precisão necessária aumenta.

O Algoritmo 4.2 apresenta a implementação do método de *Newton Inexato* com determinação da tolerância de acordo com KELLEY [28].

1. $iter = 0$
2. Norma residual da solução inicial: $\|\mathbf{r}^0\|$
3. **ENQUANTO** $\|\mathbf{r}^{iter}\|/\|\mathbf{r}^0\| \geq \tau_{res}$ **E** $\|\Delta\mathbf{d}^{iter}\|/\|\mathbf{d}^{iter}\| \geq \tau_{\Delta d}$ **FAZER:**
4. Atualiza contador de iterações: $iter \leftarrow iter + 1$
5. Avaliar resíduo: $\mathbf{r}^{iter} = \mathbf{F} - \mathbf{N}(\mathbf{d}^{iter})$
6. Avaliar norma residual da solução: $\|\mathbf{r}^{iter}\|$
- Determinar critério de terminação truncado para *Newton Inexato***
7. **SE** $iter = 1$ **ENTÃO:**
8. $\eta_{iter} = \eta_{m\acute{a}x}$
9. **SENÃO:**
10. **SE** $(\gamma\eta_{iter-1}^2 < 0,1)$ **ENTÃO:**
11. $\eta_{iter} = \min(\eta_{m\acute{a}x}, \gamma\|\mathbf{r}_{iter}\|^2/\|\mathbf{r}_{iter-1}\|^2)$
12. **SENÃO:**
13. **SE** $(\gamma\eta_{iter-1}^2 > 0,1)$ **ENTÃO:**
14. $\eta_{iter} = \min(\eta_{m\acute{a}x}, \max(\gamma\|\mathbf{r}_{iter}\|^2/\|\mathbf{r}_{iter-1}\|^2, \gamma\eta_{iter-1}^2))$
15. **FIM SE**
16. **FIM SE**
17. **FIM SE**
- Controle de Oversolving:**
18. $\eta_{iter} \leftarrow \max(\eta_{m\acute{i}n}, \min(\eta_{m\acute{a}x}, \max(\eta_{iter}, 0.5\tau_{res}\|\mathbf{r}_0\|/\|\mathbf{r}_{iter}\|)))$
19. Avaliar matriz tangente: $\mathbf{K}_T(\mathbf{d}^{iter})$
20. Resolver sistema linear: $\Delta\mathbf{d}^{iter} = \mathbf{K}_T^{-1}(\mathbf{d}^{iter}) \cdot \mathbf{r}^{iter}$, com toler.: η_{iter}
21. Atualizar solução: $\mathbf{d}^{iter} = \mathbf{d}^{iter-1} + \Delta\mathbf{d}^{iter}$
22. Avaliar norma residual da solução: $\|\mathbf{r}^{iter}\|$
23. Avaliar norma residual do incremento de solução: $\|\Delta\mathbf{d}^{iter}\|$

24. Avaliar norma da solução: $\|\mathbf{d}^{iter}\|$
25. FIM ENQUANTO

Algoritmo 4.2 : Algoritmo para o método de *Newton* Inexato, com tolerância conforme KELLEY [28].

No passo 19 caso seja desprezada a avaliação das derivadas dos termos não lineares, o método descrito no Algoritmo 4.2 recai na versão inexata do método de iterações sucessivas.

4.1.3. Métodos de IS e *Newton* Inexato Globalmente Convergente

Os métodos tipo-*Newton* apresentados nas seções 4.1.1 e 4.1.2 do presente capítulo, apresentam uma estrutura em comum descrita basicamente pelo procedimento recursivo envolvendo as equações (4.4) e (4.5), nas quais várias aproximações lineares da matriz \mathbf{K}_T^i são utilizadas. Em cada uma destas aproximações (iterações), o vetor de solução (\mathbf{d}^i) é atualizado por um incremento de solução ($\Delta\mathbf{d}^i$), também conhecido como direção de busca ou comprimento de passo (*step length*), obtido a partir da solução de um sistema linear pertinente a cada iteração do método. O objetivo é alcançar um vetor de solução para o qual o resíduo $\|\mathbf{r}^i\|$ se reduza a um valor mínimo dentro de uma tolerância (τ_{res}). Porém isto nem sempre é fácil de se obter, e frequentemente o método de *Newton* torna-se sensível à estimativa inicial utilizada. Esta característica de fragilidade apresentada pelo método de *Newton* constitui o principal estímulo aos procedimentos de globalização abordados nesta seção.

Um algoritmo globalmente convergente, é aquele provido de mecanismos que aumentem a probabilidade de convergência, independentemente se a estimativa inicial está próxima ou não da solução [38]. Isto é conseguido reduzindo-se de um fator λ o tamanho do passo com o qual a solução é atualizada todas as vezes que for verificado um aumento no resíduo não-linear $\|\mathbf{r}^i\|$. A este procedimento dá-se o nome de retrocesso (*backtracking*) ou busca em linha (*linesearch*) devido a forma com que ele é efetuado, e no presente estudo utilizou-se a regra de *Armijo* [28] na implementação de um algoritmo para o método globalizado de *Newton-Armijo*

Inexato com *linesearch* polinomial de 3 pontos na estimativa do valor de λ conforme será descrito mais adiante.

A idéia da globalização consiste em algo relativamente simples. Reduzir o tamanho de passo calculado pelo método de *Newton*, todas as vezes que este passo não satisfizer o objetivo do método de encontrar a cada iteração uma solução que reduza o resíduo não-linear $\|\mathbf{r}^i\|$. Porém, deve-se observar que esta redução de passo, pode influenciar significativamente a taxa de convergência do método, desde que ela é obtida através do teste de diversos tamanhos de redução de passo até que se obtenha a redução do resíduo desejada (ver Algoritmo 4.3 para maior compreensão). Daí surge o principal problema na obtenção de um procedimento otimizado de globalização. Determinar a redução de tamanho de passo *suficiente*, sem prejudicar de maneira significativa a taxa de convergência do método de *Newton*.

A regra de *Armijo* propõe que seja aplicada somente a redução *suficiente*, tal que seja satisfeita a seguinte condição:

$$\|\mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \lambda\Delta\mathbf{d}^i)\| < (1 - \alpha\lambda)\|\mathbf{N}(\mathbf{d}^i)\| \quad (4.12)$$

onde o parâmetro $\alpha \in (0, 1)$ é um valor positivo e pequeno, que faça com que a condição (4.12) seja satisfeita da maneira mais fácil possível. Seguindo a literatura [28], adotou-se o valor $\alpha = 10^{-4}$. O parâmetro λ é obtido de forma a produzir a redução

$$\sigma_0\lambda_{i-1} \leq \lambda_i \leq \sigma_1\lambda_{i-1} \quad (4.13)$$

onde $0 < \sigma_0 < \sigma_1 < 1$. Em tal método desenvolvido mais adiante, minimiza-se um polinômio de interpolação baseado nos passos testados em iterações anteriores. O risco é que a redução de passo obtida pode alcançar valores próximos de zero e tornar-se inútil, pois a iteração não linear entraria em estagnação. O parâmetro σ_0 garante que isso não aconteça. Esta *garantia* é importante em muitos métodos globalmente convergentes e tem sido utilizada por muitos anos no contexto de algoritmos que utilizam interpolação polinomial. Valores típicos para σ_0 e σ_1 são 0,1 e 0,5. O Algoritmo 4.3 mostra uma possível implementação para a regra de *Armijo*

1. $iter = 0$
2. Determinar resíduo inicial: $\|\mathbf{r}^0\|$
3. **ENQUANTO** $\|\mathbf{r}^{iter}\|/\|\mathbf{r}^0\| \geq \tau_{res}$ **E** $\|\Delta\mathbf{d}^{iter}\|/\|\mathbf{d}^{iter}\| \geq \tau_{\Delta d}$ **FAZER:**
4. Incrementar contador de iterações: $iter \leftarrow iter + 1$
5. Encontrar $\Delta\mathbf{d}^{iter}$ tal que $\|\mathbf{K}_T^{iter}(\mathbf{d}^{iter})\Delta\mathbf{d}^{iter} + \mathbf{N}(\mathbf{d}^{iter})\| \leq \eta_{iter} \|\mathbf{N}(\mathbf{d}^{iter})\|$
6. Ajustar $\lambda = 1$
7. $\mathbf{d}_t^{iter} = \mathbf{d}^{iter} + \lambda\Delta\mathbf{d}^{iter}$
8. **SE** $\|\mathbf{N}(\mathbf{d}_t^{iter})\| < (1 - \alpha\lambda)\|\mathbf{N}(\mathbf{d}^{iter})\|$ **ENTÃO:**
9. $\mathbf{d}^{iter} = \mathbf{d}_t^{iter}$
10. **VÁ PARA O PASSO 15**
11. **SENÃO:**
12. Escolher $\sigma \in [\sigma_0, \sigma_1]$
13. Ajustar $\lambda \leftarrow \sigma\lambda$
14. **VÁ PARA O PASSO 7**
15. **FIM SE**
16. **FIM ENQUANTO**

Algoritmo 4.3 : Algoritmo para o método de *Newton-Armijo* Inexato

No algoritmo acima o passo 5 consiste na condição de *Newton* Inexato para a solução do sistema linear e obtenção do tamanho de passo ($\Delta\mathbf{d}^{iter}$) truncado. O passo 6 garante a manutenção da convergência quadrática do método de *Newton*.

Conforme salientado anteriormente, caso for desprezada a avaliação dos termos referentes às derivadas numéricas dos termos não lineares, o método descrito no Algoritmo 4.3 recai na versão Inexata e provida de *backtracking* do método de iterações sucessivas.

Cálculo de λ e buscas em linha polinomiais

Considere a adoção de uma redução de passo fixa. Isto poderia ser feito, já que alguns problemas respondem bem a uma ou duas reduções modestas, da ordem de 1/2 por exemplo; já outros necessitariam de muitas reduções desta mesma ordem e responderiam melhor a uma redução mais agressiva, como 1/10. A possibilidade de modelar como o resíduo decai quando o comprimento de passo é reduzido, torna possível estimar melhor um fator de redução apropriado. Na prática, tais métodos respondem melhor que fatores de redução constantes [28].

Ao rejeitar k reduções de passos tem-se a seguinte seqüência:

$$\left\| \mathbf{N}(\mathbf{d}^i) \right\|_2, \left\| \mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \lambda_1 \Delta \mathbf{d}^i) \right\|_2, \dots, \left\| \mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \lambda_{k-1} \Delta \mathbf{d}^i) \right\|_2 \quad (4.14)$$

Pode-se utilizar a seqüência acima com intuito de se modelar a função escalar:

$$f(\lambda) = \left\| \mathbf{N}(\mathbf{d}^i + \lambda \Delta \mathbf{d}^i) \right\|_2 \quad (4.15)$$

como um polinômio e o mínimo deste polinômio como a próxima redução de comprimento de passo. No presente estudo adotou-se um polinômio de 2º grau na implementação deste procedimento, segundo KELLEY [28].

Após rejeitar λ_c e computar o modelo polinomial, obtém-se o mínimo λ_t analiticamente e faz-se o seguinte ajuste:

$$\lambda_{k+1} = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_c & \text{se } \lambda_t < \sigma_0 \lambda_c, \\ \sigma_1 \lambda_c & \text{se } \lambda_t > \sigma_1 \lambda_c, \\ \lambda_t & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.16)$$

No *modelo parabólico de 3 pontos* segue-se o procedimento de avaliar $f(0)$ e $f(1)$. Se o passo para $\lambda = 1$ for rejeitado, ajusta-se $\lambda = \sigma_1$ e tenta-se novamente.

Após o segundo passo ser rejeitado, têm-se os seguintes valores para construção do polinômio:

$$f(0), f(\lambda_c) \text{ e } f(\lambda_k) \quad (4.17)$$

onde λ_c e λ_k são os valores de λ , mais recentemente rejeitados. O polinômio de interpolação de f nos pontos $0, \lambda_c, \lambda_k$ é:

$$p(\lambda) = f(0) + \frac{\lambda}{\lambda - \lambda_k} \left(\frac{(\lambda - \lambda_k)(f(\lambda_c) - f(0))}{\lambda_c} + \frac{(\lambda_c - \lambda)(f(\lambda_k) - f(0))}{\lambda_k} \right) \quad (4.18)$$

Devem-se considerar duas situações. Se a curvatura de p

$$p''(0) = \frac{2\lambda_c\lambda_k}{\lambda_c - \lambda_k} (\lambda_k(f(\lambda_c) - f(0)) - \lambda_c(f(\lambda_k) - f(0))) \quad (4.19)$$

é positiva, então se ajusta λ_t para o mínimo de p

$$\lambda_t = -\frac{p'(0)}{p''(0)} \quad (4.20)$$

e aplica-se (4.16) para se computar λ_{k+1} . Se $p''(0) \leq 0$ ajusta-se λ_{k+1} como mínimo de p no intervalo $[\sigma_0\lambda, \sigma_1\lambda]$ ou rejeita-se o modelo parabólico e simplesmente ajusta-se λ_{k+1} como $\sigma_0\lambda$ ou $\sigma_1\lambda$. Neste estudo adotou-se a segunda estratégia ajustando-se $\lambda_{k+1} = \sigma_1\lambda$.

Capítulo 5

Solução do Problema Linear

Seja o sistema

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{x}^T = (x_1, \dots, x_{neq})$ é o vetor de variáveis nodais sendo neq o número de incógnitas; \mathbf{A} uma matriz esparsa não-simétrica $neq \times neq$ e \mathbf{b} é o vetor de termos independentes também de ordem neq .

A matriz \mathbf{A} e o vetor \mathbf{b} são construídos a partir da montagem das contribuições dos elementos da malha de triângulos lineares, isto é,

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\mathbf{A}^e) \quad (5.2)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}_{e=1}^{nel}(\mathbf{b}^e) \quad (5.3)$$

Os métodos de solução de sistema de equações nos quais a matriz de coeficientes \mathbf{A} é fatorada são chamados de métodos diretos. Tais métodos se tornam muito caros computacionalmente se \mathbf{A} é esparsa, especialmente, em problemas onde a matriz de coeficientes é não simétrica.

Como alternativa aos métodos diretos têm-se os métodos iterativos. Estes métodos geram uma seqüência de aproximações da solução $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ e, essencialmente, utilizam a matriz \mathbf{A} somente em multiplicações com vetores.

Neste capítulo são apresentados resumidamente os métodos iterativos GMRES (*Generalized Minimum RESidual*), TFQMR (*Transpose Free Quasi Minimal Residual*) e BiCGSTAB (*Bi-Conjugate Gradient STABILized*), empregados na solução dos sistemas de equações localmente lineares resultantes das iterações dos métodos de *Newton* e de IS; seus aspectos computacionais e implementações elemento por elemento (EBE) utilizando pré-condicionamento diagonal e bloco-diagonal nodal.

5.1. Método GMRES

O método iterativo GMRES [37], [39] tem por objetivo básico minimizar a norma residual do sistema (5.1). Considerando \mathbf{x}_0 a solução inicial, uma solução aproximada apresenta a forma $\mathbf{x}_0 + \mathbf{z}$ onde \mathbf{z} é um vetor do espaço de *Krylov* definido como $\mathcal{K} = span\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0\}$, sendo $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ e k é a dimensão de \mathcal{K} . O método GMRES determina \mathbf{z} tal que a norma do resíduo seja mínima, isto é,

$\mathbf{x}_0 + \mathbf{z}$ é a solução de (5.1) se $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{z})\|$ é mínima, onde $\|\cdot\|$ denomina a norma *euclideana*.

Uma base ortonormal de \mathcal{K} pode ser obtida pelo *Processo Modificado de Gram-Schmidt* [39]:

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{r}_0}{\|\mathbf{r}_0\|}$$

Para $i = 1, \dots, k$ faça:

$$\tilde{\mathbf{u}}_{i+1} = \mathbf{A}\mathbf{u}_i$$

Para $j = 1, \dots, i$ faça:

$$\beta_{i+1,j} = (\tilde{\mathbf{u}}_{i+1}, \tilde{\mathbf{u}}_j)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_{i+1} \leftarrow \tilde{\mathbf{u}}_{i+1} - \beta_{i+1,j}\mathbf{u}_j$$

Fim do j

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\tilde{\mathbf{u}}_{i+1}}{\|\tilde{\mathbf{u}}_{i+1}\|}$$

Fim do i

Seja $\mathbf{U}_k = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_k]$. Pode-se então, mostrar que $\mathbf{AU}_k = \mathbf{U}_{k+1}\mathbf{H}_k$ onde \mathbf{H}_k é a matriz superior de *Hessenberg* de ordem $(k+1) \times k$,

$$\mathbf{H}_k = \begin{bmatrix} \beta_{2,1} & \beta_{3,1} & \cdots & \beta_{k,1} & \beta_{k+1,1} \\ \|\tilde{\mathbf{u}}_2\| & \beta_{3,2} & \cdots & \beta_{k,2} & \beta_{k+1,2} \\ 0 & \|\tilde{\mathbf{u}}_3\| & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \beta_{k,k-1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \|\tilde{\mathbf{u}}_k\| & \beta_{k+1,k} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \|\tilde{\mathbf{u}}_{k+1}\| \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

Seja $\mathbf{z} = \sum_{j=1}^k y_j \mathbf{u}_j$ e $\mathbf{e} = \{\|\mathbf{r}_0\|, 0, \dots, 0\}^T$ com $k+1$ termos. Observe que

$\mathbf{r}_0 = \mathbf{U}_{k+1}\mathbf{e}$, portanto, tem-se:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}(x_0 + z)\| &= \|\mathbf{r}_0 - \mathbf{A}\left(\sum_{j=1}^k y_j \mathbf{u}_j\right)\| \\ &= \|\mathbf{r}_0 - \mathbf{AU}_k \mathbf{y}\| \\ &= \|\mathbf{U}_{k+1}(\mathbf{e} - \mathbf{H}_k \mathbf{y})\| \\ &= \|\mathbf{e} - \mathbf{H}_k \mathbf{y}\| \end{aligned} \quad (5.5)$$

Assim o problema de minimização em questão pode ser reescrito por:

$$\min_{z \in \mathcal{K}} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}(x_0 + z)\| = \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k} \|\mathbf{e} - \mathbf{H}_k \mathbf{y}\| \quad (5.6)$$

A matriz \mathbf{H}_k tem uma estrutura quase triangular superior, necessitando-se somente eliminar a diagonal contendo $\|\tilde{\mathbf{u}}_2\|, \|\tilde{\mathbf{u}}_3\|, \dots, \|\tilde{\mathbf{u}}_{i+1}\|$. A transformação de \mathbf{H}_k em uma matriz triangular superior pode ser feita pelo algoritmo *QR*, usando em ca-

da passo o processo de rotação de *Givens* para obter um novo problema de minimização. Maiores detalhes podem ser vistos em [39]. Assim, obtém-se:

$$\min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k} \|\bar{\mathbf{e}} - \bar{\mathbf{H}}_k \mathbf{y}\| \quad (5.7)$$

onde $\bar{\mathbf{H}}_k$ é uma matriz triangular superior. O sistema pode então, ser resolvido facilmente por retro-substituição e um novo resíduo é calculado com a aproximação encontrada. Se a convergência não for atingida dentro de um ciclo (formado pelo número de vetores na base de *Krylov*), a solução mais recente será usada para iniciar a próxima iteração. Resumindo, uma iteração do Método GMRES consiste de:

- Formação de uma base ortogonal para o espaço de *Krylov* pelo processo modificado de *Gram-Schmidt*;
- Triangularização da Matriz de *Hessenberg* pelo algoritmo *QR*;
- Retrosubstituição para obter a solução aproximada.

Com estas considerações descreve-se um algoritmo padrão do método GMRES. Para tal definem-se os parâmetros:

- ε_{tol} → tolerância;
- k → número de vetores de *Krylov*;
- l_{max} → número máximo de iterações.

Dados \mathbf{A} , \mathbf{b} , k , ε_{tol} e l_{max}

(Inicializações)

$$\varepsilon \leftarrow \varepsilon_{tol} \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

(ciclo GMRES)

Para $l = 1, \dots, l_{max}$ **faça**

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{b} - \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{x}$$

$$\bar{e} = \|\mathbf{u}_1\|$$

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{u}_1}{\|\mathbf{u}_1\|}$$

(iterações GMRES)

Para $i = 1, \dots, k$ **faça**

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{u}_i$$

(Ortogonalização modificada de *Gram-Schmidt*)

Para $j = 1, \dots, i$ **faça**

$$\beta_{i+1,j} = (\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{u}_j)$$

$$\mathbf{u}_{i+1} \leftarrow \mathbf{u}_{i+1} - \beta_{i+1,j} \mathbf{u}_j$$

Fim do j

(Fim da orthogonalização modificada de *Gram-Schmidt*)

$$\bar{\mathbf{h}}^{(i)} = \{\beta_{i+1,1}, \dots, \beta_{i+1,i}, \|\mathbf{u}_{i+1}\|\}^T$$

$$\mathbf{u}_{i+1} = \frac{\mathbf{u}_{i+1}}{\|\mathbf{u}_{i+1}\|}$$

(Algoritmo *QR*)

Para $j = 1, \dots, i-1$ **faça**

$$\begin{Bmatrix} \bar{h}_j^{(i)} \\ \bar{h}_{j+1}^{(i)} \end{Bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} c_j & s_j \\ -s_j & c_j \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{h}_j^{(i)} \\ \bar{h}_{j+1}^{(i)} \end{Bmatrix}$$

Fim do j

$$r = \sqrt{(\bar{h}_i^{(i)})^2 + (\bar{h}_{i+1}^{(i)})^2}$$

$$c_i = \frac{\bar{h}_i^{(i)}}{r}$$

$$s_i = \frac{\bar{h}_{i+1}^{(i)}}{r}$$

$$\bar{h}_i^{(i)} \leftarrow r$$

$$\bar{h}_{i+1}^{(i)} \leftarrow 0$$

$$\bar{e}_{i+1} = -s_i \bar{e}_i$$

$$\bar{e}_i = c_i \bar{e}_i$$

(Fim do algoritmo *QR*)

Teste de convergência: Se $|\bar{e}_{i+1}| \leq \varepsilon_{tol}$, fim do i

(Fim da iteração GMRES)

Resolver \mathbf{y} :

$$\begin{bmatrix} \bar{h}_1^{(1)} & \dots & \bar{h}_1^{(i-1)} & \bar{h}_1^{(i)} \\ 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \bar{h}_{i-1}^{(i-1)} & \bar{h}_{i-1}^{(i)} \\ 0 & \dots & 0 & \bar{h}_i^{(i)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{i-1} \\ y_i \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \bar{e}_1 \\ \vdots \\ \bar{e}_{i-1} \\ \bar{e}_i \end{Bmatrix}$$

Cálculo da Solução:

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \sum_{j=1}^i y_j \mathbf{u}_j$$

Teste de Convergência: Se $|\bar{e}_{i+1}| \leq \varepsilon$, fim do l

(Fim do ciclo GMRES)

\mathbf{x} é a solução aproximada

5.2. Método BiCGSTAB

O Método dos Gradientes Bi-Conjugados Estabilizado foi desenvolvido para resolver sistemas lineares não-simétricos resolvendo a freqüente irregularidade de convergência dos métodos nos quais ele é baseado, tal como o Método dos Gradientes Conjugados Quadrados (CGS), ver [52] para maiores detalhes. Ao invés de computar a seqüência $i \mapsto \mathbf{P}_i^2(\mathbf{A})\mathbf{r}^{(0)}$ como no CGS, o BiCGSTAB computa $i \mapsto \mathbf{Q}_i(\mathbf{A})\mathbf{P}_i(\mathbf{A})\mathbf{r}^{(0)}$ onde \mathbf{Q}_i é um polinômio de grau i descrevendo a atualização da direção de busca da solução. A seguir é apresentado o algoritmo para o Método dos Gradientes Bi-Conjugados Estabilizado.

Dados \mathbf{A} , \mathbf{b} , ε_{tol} e k_{max}

(Inicializações)

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}\mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{x}_0$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_0 = \tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_0$$

$$\rho_0 = \alpha = \omega_0 = 1$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} = \mathbf{0}$$

$$\rho_1 = \tilde{\mathbf{r}}_0^T \tilde{\mathbf{r}}$$

$$k = 0$$

Enquanto $\|\mathbf{r}\|_2 > \varepsilon_{tol} \|\mathbf{b}\|_2$ e $k < k_{max}$ **fazer:**

$$k = k + 1$$

$$\beta = (\rho_k / \rho_{k-1})(\alpha / \omega)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{r} + \beta(\mathbf{p} - \omega \mathbf{v})$$

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{p} \mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{p}}$$

$$\alpha = \rho_k / (\tilde{\mathbf{r}}_0^T \mathbf{v})$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{r} - \alpha \mathbf{v}$$

$$\tilde{\mathbf{s}} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{s} \mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{s}}$$

$$\omega = \mathbf{t}^T \mathbf{s} / \|\mathbf{t}\|_2$$

$$\rho_{k+1} = -\omega \tilde{\mathbf{r}}_0^T \mathbf{t}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} + \alpha \tilde{\mathbf{p}} + \omega \tilde{\mathbf{s}}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{s} - \omega \mathbf{t}$$

Fim do Enquanto

No algoritmo acima, o método pode falhar nos passos 2, 6 e 10 internos ao loop devido a divisões por zero.

5.3. Método TFQMR

O método TFQMR faz parte da família de métodos QMR (*Quase Minimal Residual*) descritos em [19]. A base do algoritmo TFQMR proposto em [18] é a idéia de *quasi-minimização* livre de transposição de matrizes. Todos os algoritmos da família QMR minimizam a norma de uma quantidade facilmente computável $\mathbf{q} = \mathbf{f} - \mathbf{H}\mathbf{z}$, um *quasi-resíduo* sobre $\mathbf{z} \in \mathbb{R}$. O *quasi-resíduo* se relaciona ao resíduo real por uma

transformação não-singular $\mathbf{r} = \mathbf{L}\mathbf{q}$ e a redução do resíduo pode ser aproximadamente medida pela redução em \mathbf{q} . A formulação específica de \mathbf{q} e \mathbf{L} depende do algoritmo. Maiores detalhes podem ser obtidos em [28]. A seguir é apresentado o algoritmo para o método TFQMR.

Dados \mathbf{A} , \mathbf{b} , ε_{tol} e k_{max}

(Inicializações)

$$k = \theta = \eta = 0$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}\mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{y}_1 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{y}_1$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{0}$$

$$\rho_0 = \mathbf{r}_0^T \mathbf{r}_0$$

$$\tau = \|\mathbf{r}\|_2$$

Para $k < k_{max}$ fazer:

$$k = k + 1$$

$$\sigma_{k-1} = \mathbf{r}_0^T \mathbf{v}$$

$$\alpha = \rho_{k-1} / \sigma_{k-1}$$

$$\mathbf{y}_2 = \mathbf{y}_1 - \alpha_{k-1} \mathbf{v}$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_2 = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{y}_2 \mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{y}}_2$$

Para $j = 1, 2 (m = 2k - 2 + j)$ fazer:

$$\mathbf{w} = \mathbf{w} - \alpha_{k-1} \mathbf{u}_j$$

$$\mathbf{d} = \tilde{\mathbf{y}}_j + (\theta^2 \eta / \alpha_{k-1}) \mathbf{d}$$

$$\theta = \|\mathbf{w}\|_2 / \tau$$

$$c = 1 / \sqrt{1 + \theta^2}$$

$$\tau = \tau c$$

$$\eta = c^2 \alpha_{k-1}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} + \eta \mathbf{d}$$

Se $\tau\sqrt{m+1} \leq \varepsilon \|\mathbf{b}\|_2$ a solução foi alcançada!

Fim do j

$$\rho_k = \mathbf{r}_0^T \mathbf{w}$$

$$\beta = \rho_k / \rho_{k-1}$$

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{w} + \beta \tilde{\mathbf{y}}_2$$

$$\tilde{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{y}_1 \mathbf{U}^{-1}$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{y}}_1$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{u}_1 + \beta(\mathbf{u}_2 + \beta \mathbf{v})$$

Fim do k

No algoritmo acima $\tilde{\mathbf{y}}_2$ e $\mathbf{u}_2 = \mathbf{A} \tilde{\mathbf{y}}_2$ só necessitam ser computados se o *loop* interno j não terminar quando $j = 1$. Esta característica pode ser utilizada para se reduzir o custo das operações matriz-vetor envolvidas no método.

5.4. Pré-condicionadores

A fragilidade dos métodos iterativos com relação à rapidez de convergência é amplamente conhecida, portando técnicas que permitam acelerar a convergência tem sido desenvolvida. Tais técnicas são caracterizadas pelo uso de pré-condicionadores. A grosso modo, um pré-condicionamento é uma maneira explícita ou implícita de modificar um sistema original de forma que se possa resolvê-lo “facilmente” por um dado método iterativo. Por exemplo, o escalonamento de todas as linhas de um sistema linear feito pelos coeficientes da diagonal principal é uma forma explícita de pré-condicionamento. Outros exemplos poderiam ser:

$$\mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{b} \quad (5.8)$$

$$\mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{b} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{A} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{b} \quad (5.10)$$

onde (5.8) é conhecido como pré-condicionador à esquerda, (5.9) é conhecido como pré-condicionador à esquerda e a direita e finalmente (5.10) é conhecido como pré-

condicionador à direita. \mathbf{L} e \mathbf{U} podem representar simples decomposições ou complicadas transformações de \mathbf{A} . Segundo SAAD em [37], encontrar um bom pré-condicionador para resolver um sistema linear é freqüentemente visto como uma combinação de arte e ciência. Resultados teóricos são raros e algumas técnicas oferecem resultados surpreendentes para algumas aplicações, e para outras nem tanto. A eficiência da operação matriz-vetor, mais uma vez é a maior preocupação, pois nela baseia-se a transformação do sistema.

A seguir são apresentadas duas técnicas de pré-condicionamento utilizados neste trabalho como alternativa para acelerar a convergência dos métodos iterativos citados na seção anterior.

5.4.1. Pré-condicionador Diagonal

Uma estratégia bastante simples de pré-condicionamento consiste no escalonamento das linhas da matriz \mathbf{A} por um pré-condicionador à esquerda, ou das suas colunas por um pré-condicionador à direita [30]. Desta forma, dada uma matriz $\mathbf{D} = \text{diag}(d_{11}, \dots, d_{nn})$ como sendo um pré-condicionador à esquerda ou à direita, existem várias possibilidades para a obtenção de \mathbf{D} , por exemplo:

$$d_{ii} = \frac{1}{a_{ii}} \quad (5.11)$$

$$d_{ii} = \frac{1}{\sqrt{a_{ii}}} \quad (5.12)$$

$$d_{ii} = \frac{1}{\sum_{j=1}^n |a_{ij}|} \quad (5.13)$$

$$d_{ii} = \frac{1}{\left(\sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}} \quad (5.14)$$

$$d_{ii} = \frac{1}{\max_{j=1, \dots, n} |a_{ij}|} \quad (5.15)$$

O pré-condicionamento diagonal apresenta algumas vantagens óbvias sobre outras técnicas, tal como, fácil implementação e baixo custo de armazenamento da matriz de pré-condicionamento. Em contrapartida, não é esperada grande aceleração do solucionador linear, por ser a matriz \mathbf{D} uma aproximação bastante “ingênua” da inversa de \mathbf{A} . Note que as formas (5.11), (5.13), (5.14) e (5.15) são usadas à esquerda ou à direita conforme as equações (5.8) ou (5.10), enquanto que a forma (5.12) é usada à esquerda e a direita de acordo com a equação (5.9).

5.4.2. Pré-condicionador Bloco-Diagonal Nodal

Seja uma matriz \mathbf{B} da forma:

$$\mathbf{B} = \text{block}(\mathbf{A}) \quad (5.16)$$

onde o operador “block” extrai de \mathbf{A} as matrizes bloco-diagonais nodais de ordem $m \times m$, onde m é o número de graus de liberdade por nó ($m = 3$ para as equações de Navier-Stokes incompressíveis em duas dimensões) ver Figura 5.1 abaixo:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \square & & & & \\ & \square & & & \\ & & \square & & \\ & & & \dots & \\ & & & & \square \end{bmatrix}$$

Figura 5.1 - Pré-condicionador Bloco-Diagonal Nodal

Para os sistemas sob consideração, \mathbf{B} deve ser positiva-definida e de fácil inversão de forma que o sistema (5.1) transformado fique:

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{b} \quad (5.17)$$

O bloco-diagonal nodal representa uma técnica de pré-condicionamento de fácil implementação, com custo de armazenamento e computacional maior que no pré-

condicionador diagonal, porém com uma maior eficiência na aceleração da solução iterativa de sistemas de equações.

5.5. Produto Matriz-Vetor Elemento-por-Elemento (EBE)

A cada iteração dos algoritmos descritos nas seções anteriores é necessário executar o produto matriz-vetor esparsos. Esta operação pode ser feita de uma forma mais eficiente usando uma estratégia local, que pode ser executada no nível de cada elemento, denominada elemento-por-elemento (EBE). Assim, tem-se:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{nel} (\mathbf{A}^e \mathbf{x}_{\text{dof}}) \quad (5.18)$$

onde nel é o número de elementos da malha, \mathbf{A}^e é a matriz tangente do elemento e \mathbf{x}_{dof} são as componentes de \mathbf{x} restritas aos graus de liberdade do elemento descritas respectivamente nas seções 3.4 e 3.5.

A implementação do produto matriz-vetor para estruturas locais, em linhas gerais segue o seguinte algoritmo:

Para $e = 1, nel$ **faça**:

(Localização de \mathbf{x}_{dof} em \mathbf{x})

$$\mathbf{x}_{\text{dof}} \leftarrow \mathbf{x} [lm[e, \text{dof}]]$$

(Multiplicação matriz-vetor elemento-por-elemento)

$$\mathbf{ap}_{\text{dof}} \leftarrow \sum_{n=1}^{\text{ndof}} (\mathbf{A}_{\text{dof},n} \mathbf{x}_n)$$

(Globalização de \mathbf{ap}_{dof})

$$\mathbf{ap} [lm[e, \text{dof}]] \leftarrow \mathbf{ap} [lm[e, \text{dof}]] + \mathbf{ap}_{\text{dof}}$$

fim do

onde $lm[e, \text{dof}]$ é a matriz de localização dos elementos, que mapeia as equações globais do problema para as equações locais (de elemento). A matriz \mathbf{A}^e é armaze-

nada como um arranjo $\mathbf{A}[e, \text{ndof}, \text{ndof}]$, $e = 1, \dots, nel$ e \mathbf{x} e \mathbf{ap} são vetores globais de ordem neq , sendo neq o número de equações do problema [24].

Capítulo 6

Testes de Desempenho Numérico

Neste capítulo são apresentados os testes de validação e comparativos de resultados obtidos com a implementação da formulação descrita nos capítulos anteriores. Foram realizados centenas de testes com intuito de se avaliar o impacto da escolha dos métodos tipo *Newton*, a influência de alguns parâmetros inerentes a este método, assim como, o efeito da seleção de diferentes solucionadores iterativos na solução dos problemas localmente lineares. A eficiência na solução dos problemas foi avaliada, comparando-se o tempo gasto e o número de iterações necessárias.

Os testes de validação foram confrontados com resultados obtidos na literatura, e na sua ausência, foram comparados aos resultados obtidos no pacote comercial *FLOTRAN* da *ANSYS Inc* [2].

6.1. Problemas Analisados

Nesta seção são analisados quatro problemas de validação para a avaliação da eficiência dos algoritmos implementados. O primeiro trata-se do escoamento no interior de uma cavidade quadrada. O segundo consiste no escoamento com alargamento de canal. O terceiro trata do escoamento ao redor de um cilindro circular e o quarto problema apresenta um exemplo de aplicação da dinâmica dos fluidos na perfuração de poços. Trata-se do escoamento rotacional no interior de um anular excêntrico. Os três exemplos iniciais são amplamente estudados ao longo de décadas de pesquisas

na área de dinâmica dos fluidos computacional, consistindo desta forma, em excelentes testes de validação. Nestes exemplos, o código foi submetido a diferentes condições definidas através do número de *Reynolds* do escoamento de 100, 500 e 1000 e calculado a partir da seguinte expressão:

$$Re = \frac{\text{forças inerciais}}{\text{forças viscosas}} = \frac{\rho \mathbf{u}_\infty L_\infty}{\mu} \quad (6.1)$$

onde \mathbf{u}_∞ e L_∞ são a velocidade e um comprimento característico de cada problema.

6.1.1. Escoamento no Interior de uma Cavidade Quadrada

O problema do escoamento em uma cavidade quadrada (*Cavity Flow*) tem sido exhaustivamente estudado por vários pesquisadores a muitos anos [21]. O domínio consiste de um quadrado de lado unitário conforme o esquema da Figura 6.1a. A malha de elementos finitos com 3200 elementos triangulares e 1681 nós é apresentada na Figura 6.1b. Os símbolos em vermelho na figura indicam as prescrições de velocidade impostas ao problema. Em todos os testes que serão apresentados selecionou-se $\|\mathbf{r}\|/\|\mathbf{r}_0\| = 10^{-3}$ e $\|\mathbf{du}\|/\|\mathbf{u}\| = 10^{-3}$ como critérios de parada para o problema não-linear.

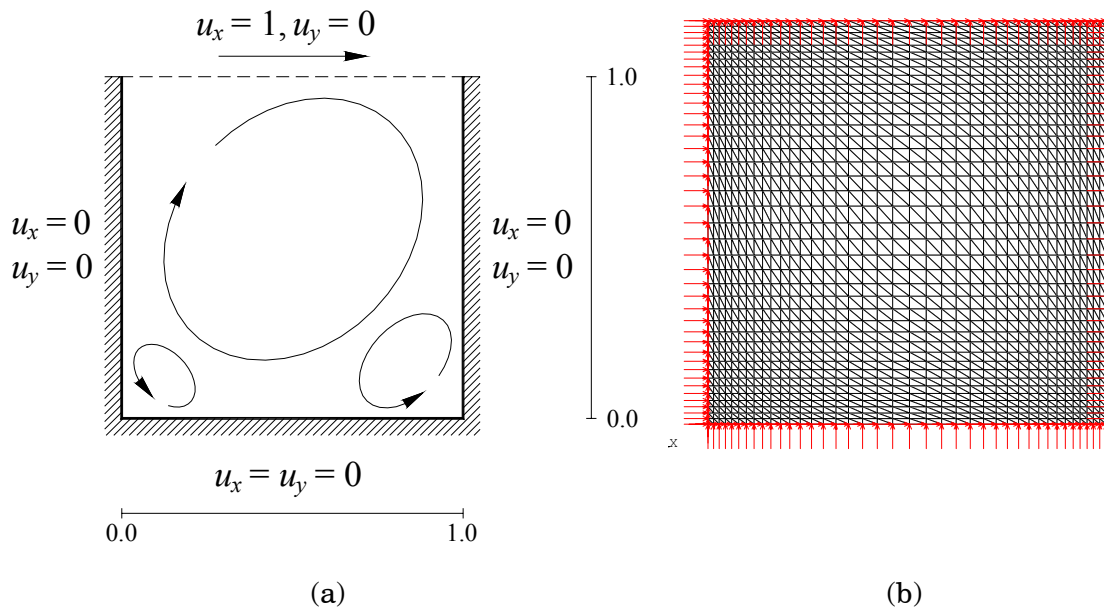
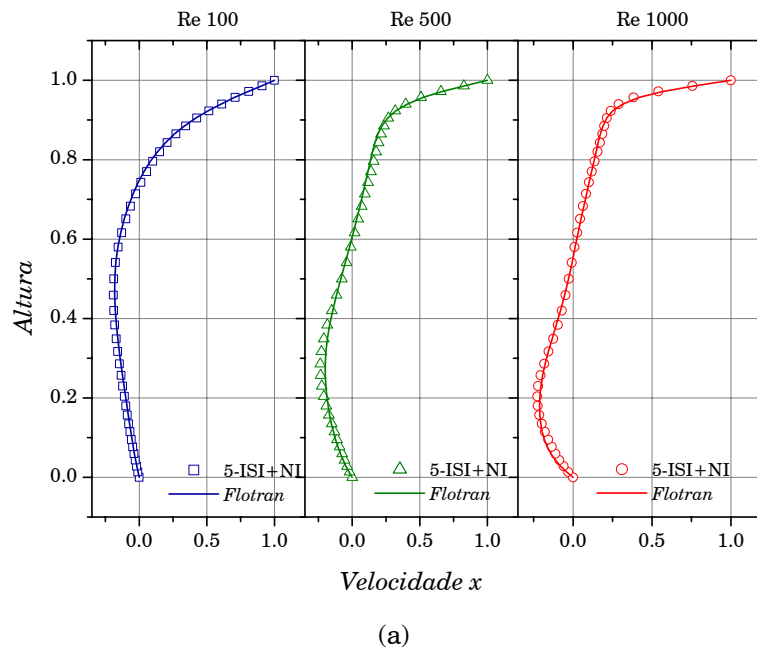
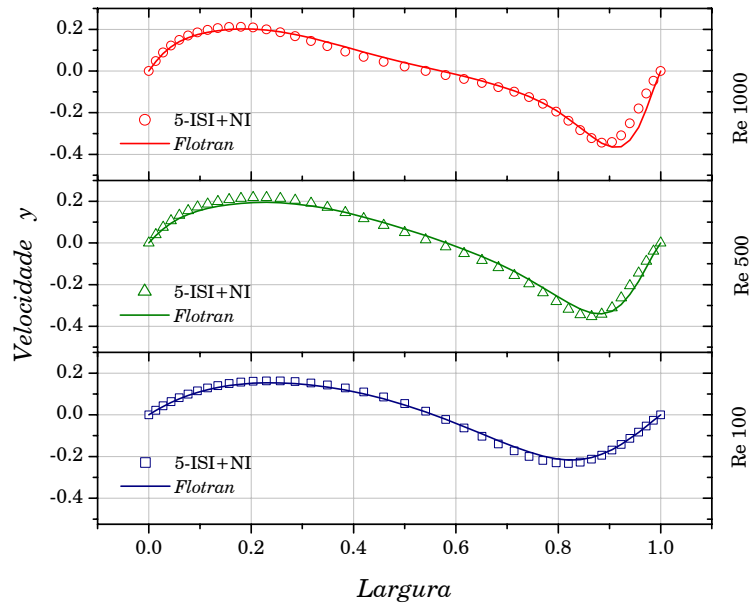


Figura 6.1 – Escoamento no Interior de uma Cavidade Quadrada (a) Descrição do modelo e (b) Malha de elementos finitos

Nas Figuras 6.2a e 6.2b os perfis de velocidade x e y do centro da cavidade foram comparados aos resultados obtidos no pacote comercial *FLOTTRAN* para os números de *Reynolds* 100, 500 e 1000. Os símbolos indicam os resultados obtidos pelo presente código enquanto as linhas apresentam os resultados do *FLOTTRAN*.





(b)

Figura 6.2 – Perfis de velocidade no centro da cavidade.

Observa-se nas figuras acima que o código desenvolvido obteve resultados válidos em comparação ao *FLOTTRAN*, apresentando desvios maiores no teste com *Reynolds* 1000. Em todos os casos acima foi adotada tolerância linear máxima ($\eta_{máx}$) igual a 0,1.

A Tabela 6.1 a seguir exhibe os resultados do comparativo entre as diferentes estratégias de solução adotadas para o problema da cavidade quadrada com *Reynolds* 100, 500 e 1000. Para esta tabela foram selecionados os resultados obtidos utilizando-se o GMRES(45) com pré-condicionamento bloco diagonal nodal como método de solução linear – o valor entre parênteses indica o número de direções de busca ou vetores de *Krylov* inerentes à este método. No método dito convencional adotou-se 10^{-6} como tolerância para o solucionador linear. Nos métodos inexatos foram adotados os valores 0,1; 0,5 e 0,9 como tolerância linear máxima ($\eta_{máx}$). Como parâmetro de avaliação da qualidade e semelhança dos resultados são apresentadas as normas *euclydeanas* ($\|\cdot\|_2$) da solução para cada grau de liberdade juntamente com o número de iterações lineares (#IL), o número de iterações não-lineares (#INL) e o tempo de execução em segundos. As siglas IS e ISI na Tabela 6.1 representam respectivamente os métodos de **I**teração **S**ucessiva (convencional) e **I**teração **S**ucessiva **I**nexata. Os valores 0,1, 0,5 e 0,9 associados ao rótulo ISI são as tolerâncias máximas associadas ao método.

Tabela 6.1 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), $Re = 100, 500$ e 1000 .

$Re = 100$	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
IS	8667	5	224.0	10.6873	5.6228	5.4948
ISI-0.1	1388	7	28.0	10.6873	5.6210	5.4783
ISI-0.5	1174	13	44.0	10.6862	5.6183	5.4748
ISI-0.9	779	11	16.0	10.6826	5.5825	5.4686
$Re = 500$	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
IS	11668	7	293.0	9.6971	5.7740	2.2638
ISI-0.1	1832	14	34.0	9.6979	5.7738	2.2163
ISI-0.5	1142	23	37.0	9.6974	5.7687	2.2114
ISI-0.9	968	41	23.0	9.6972	5.7600	2.2065
$Re = 1000$	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
IS	19809	11	443.0	9.0300	5.2626	1.5739
ISI-0.1	1686	14	26.0	9.0318	5.2653	1.5234
ISI-0.5	1199	28	35.0	9.0345	5.2681	1.5162
ISI-0.9	905	39	22.0	9.0342	5.2689	1.5182

Nota-se na Tabela 6.1 que os métodos inexatos são expressivamente mais rápidos que os métodos convencionais mesmo utilizando um número maior de iterações não-lineares. O número maior de iterações lineares do método convencional indica ser a solução linear a etapa de maior custo computacional no processo global de solução.

A Tabela 6.2 a seguir apresenta a influência da matriz de rigidez tangente implementada a partir de derivação numérica, conforme proposto por TEZDUYAR em [45]. São listadas três estratégias de solução modificando-se somente a forma de avaliação da matriz de rigidez do problema linearizado. No método de Iterações Sucessivas Inexato (ISI) os termos de derivação numérica não são avaliados em momento algum do processo de solução, no método de *Newton* Inexato a matriz tangente é avaliada desde o início do processo iterativo e no método chamado de Misto (n -ISI+NI), adotou-se a estratégia de executar as n iterações iniciais no método ISI e as demais com o método de *Newton* Inexato (NI). Nos testes que serão apresentados adotou-se arbitrariamente n igual a 5 iterações, desta forma, seguindo a nomenclatura proposta o método Misto será chamado de 5-ISI+NI. Este método foi proposto com intuito de se contornar as dificuldades de inicialização apresentadas pelo método de *Newton* Inexato em alguns problemas.

Tabela 6.2 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$, $Re = 100, 500$ e 1000.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
ISI	1388	7	28.0	10.6873	5.6210	5.4783
NI	1400	5	41.0	10.6871	5.6224	5.4794
5-ISI+NI	1543	7	41.0	10.6871	5.6224	5.4787
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
ISI	1832	14	34.0	9.6979	5.7738	2.2163
NI	1952	10	51.0	9.6970	5.7739	2.7762
5-ISI+NI	1405	9	45.0	9.6970	5.7739	2.2162
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$
ISI	1686	14	26.0	9.0318	5.2653	1.5234
NI	1378	12	922.0	9.0306	5.2636	1.5995
5-ISI+NI	1488	10	47.0	9.0308	5.2639	1.5230

Nota-se que no problema em questão o método de Iterações Sucessivas executou um número maior de iterações que os demais, porém em um tempo menor. Em todos os casos a solução obtida foi bastante similar com exceção dos casos NI com número de *Reynolds* 500 e 1000, onde o campo de pressão apresentou discrepâncias da ordem de 25% e 5% respectivamente (ver as normas de pressão). A seguir são mostradas nas Figuras 6.3 a 6.5 a taxa de convergência $\| \mathbf{r} \| / \| \mathbf{r}_0 \|$ por iteração, para cada uma das estratégias citadas na Tabela 6.2.

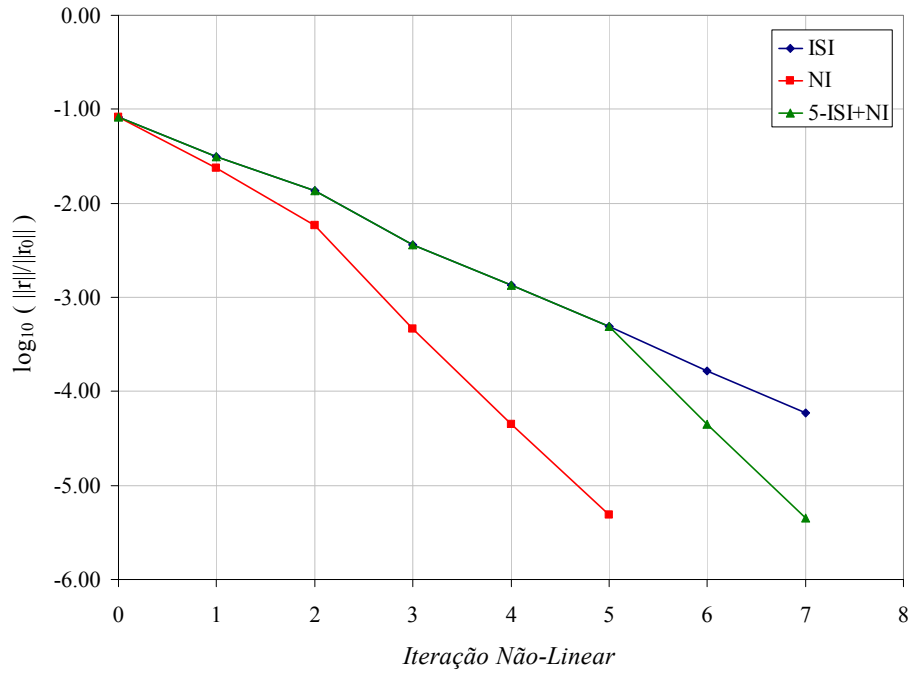


Figura 6.3 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, Reynolds 100.

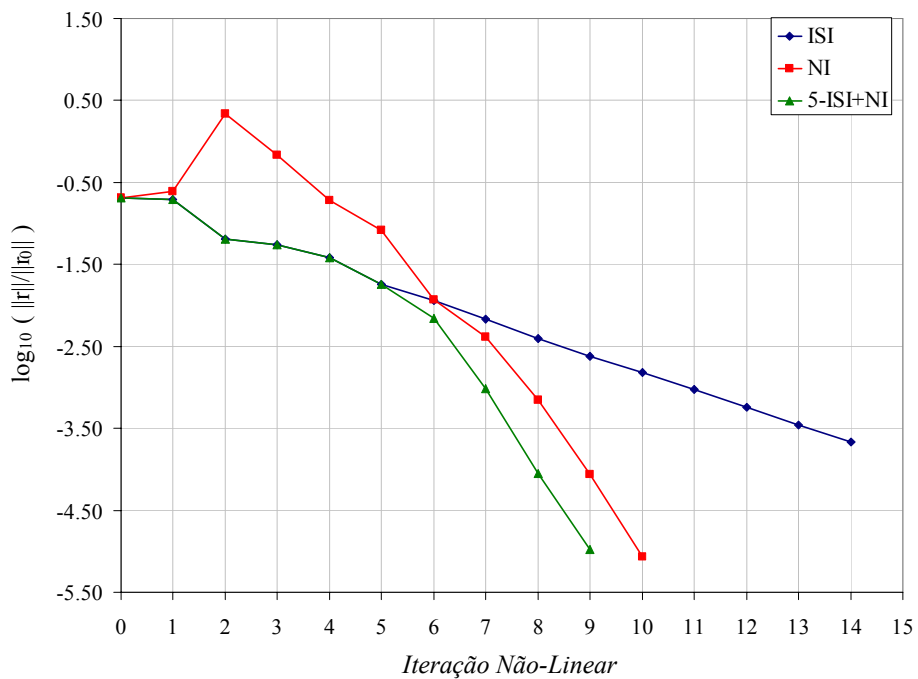


Figura 6.4 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, Reynolds 500.

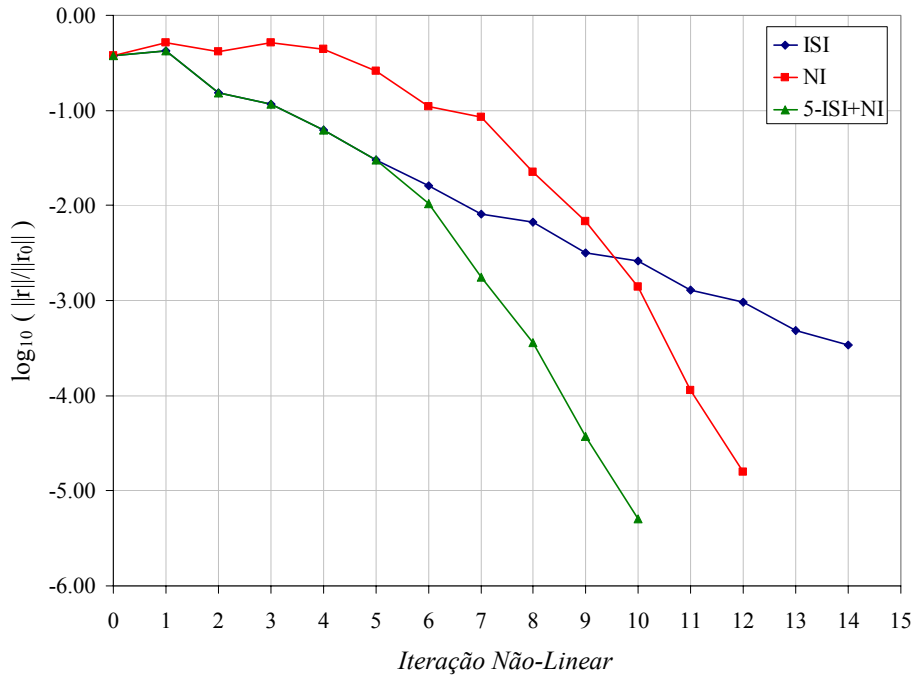


Figura 6.5 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, *Reynolds* 1000.

As figuras acima mostram que os métodos NI e misto (5IS+NI) necessitam de um número menor de iterações para convergir, porém como visto na Tabela 6.2 estas iterações são desenvolvidas em um tempo maior, comprovando ser o método ISI o mais indicado para a solução deste problema. Note porém, que caso fosse selecionado um resíduo relativo menor que 10^{-3} e observando as tendências das curvas 6.3 a 6.5, provavelmente o método ISI consumiria um número maior de iterações que os outros métodos.

A seguir são apresentados na Tabela 6.3 os resultados obtidos nos testes de desempenho dos solucionadores lineares para o escoamento no interior da cavidade quadrada para *Reynolds* 100, 500 e 1000. Em todos os testes foi utilizado o método de Iterações Sucessivas Inexato com tolerância linear máxima (η_{max}) igual a 0,1. Foi adotado o pré-condicionamento diagonal à esquerda conforme a expressão (5.11) da seção 5.4.1 por simplicidade e para ressaltar as características dos solucionadores. A coluna **INFO** representa um código de erro ou aviso eventualmente emitido pelo programa durante o processo de solução. Esta coluna será incluída somente nas tabelas que apresentam casos nos quais o programa tenha retornado esta informação.

Tabela 6.3 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. ISI-0.1.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ u_x\ _2$	$\ u_v\ _2$	$\ p\ _2$	INFO
GMRES(25)	1481	7	47.0	10.6873	5.6211	5.4932	--
GMRES(35)	1444	7	45.0	10.6872	5.6211	5.4932	--
GMRES(45)	1430	7	48.0	10.6873	5.6211	5.4932	--
GMRES(55)	1432	7	50.0	10.6873	5.6211	5.4932	--
TFQMR	2265	5	122.0	10.6873	5.6228	5.4934	--
BiCGSTAB	1850	6	101.0	10.6872	5.6230	5.4936	#2
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ u_x\ _2$	$\ u_v\ _2$	$\ p\ _2$	INFO
GMRES(25)	1903	13	28.0	9.6977	5.7729	2.2368	--
GMRES(35)	1854	13	29.0	9.6979	5.7736	2.2370	--
GMRES(45)	1802	13	29.0	9.6978	5.7733	2.2369	--
GMRES(55)	1940	14	31.0	9.6976	5.7736	2.2368	--
TFQMR	2725	7	72.0	9.6971	5.7741	2.2347	--
BiCGSTAB	2667	17	69.0	9.6985	5.7738	9.2502	#2
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	$\ u_x\ _2$	$\ u_v\ _2$	$\ p\ _2$	INFO
GMRES(25)	1661	12	44.0	9.0315	5.2647	1.5247	--
GMRES(35)	1633	13	51.0	9.0320	5.2654	1.5257	--
GMRES(45)	1638	13	44.0	9.0320	5.2654	1.5256	--
GMRES(55)	1650	13	57.0	9.0318	5.2655	1.5259	--
TFQMR	4492	11	245.0	9.0300	5.2626	1.5230	--
BiCGSTAB	1291	12	71.0	9.0319	5.2649	1.5240	--

INFO #2 – O solucionador linear atingiu o número máximo de iterações sem convergir em alguma etapa da solução não-linear.

A tabela acima mostra ser o GMRES o método de melhor desempenho para o problema em questão. Neste método a escolha do número de vetores de base está normalmente associada à velocidade de obtenção da solução. Nos testes da Tabela 6.3 pode-se concluir que o aumento do número de vetores de base não contribuiu efetivamente na redução do tempo de solução. Em alguns casos o aumento do número desses vetores chegou a afetar negativamente o tempo. Isto se deve ao crescimento do custo de armazenamento de matrizes maiores e conseqüentemente no aumento das operações de ponto flutuante desenvolvidas no processo de ortogonalização desenvolvido pelo método. Os métodos TFQMR e BiCGSTAB apresentaram desempenho inferior ao GMRES em todos os casos apresentados na tabela acima.

A seguir a Tabela 6.4 apresenta os testes com os procedimentos de globalização descritos na seção 4.1.3. Os parâmetros de controle utilizados pelo retrocesso são os mesmos sugeridos nas referências [13], [14], [28], [35] e mencionados na seção 4.1.3. Nestes testes foram consideradas as mesmas estratégias de avaliação da matriz de rigidez tangente descritas na Tabela 6.2 utilizando-se o GMRES(45) como solucionador linear e tolerância linear máxima de 0,1. Na Tabela 6.4 a coluna #BCT indica o

número de tentativas de redução de passo desenvolvidas no procedimento de globalização.

Tabela 6.4 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
ISI	1388	7	28.0	0	10.6873	5.6210	5.4783
NI	1401	5	44.0	0	10.6871	5.6224	5.4794
5-ISI+NI	1543	7	51.0	0	10.6871	5.6224	5.4787
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
ISI	1832	14	34.0	0	9.6979	5.7738	2.2163
NI	1478	7	49.0	2	9.6969	5.7737	2.2158
5-ISI+NI	1405	9	37.0	0	9.6970	5.7739	2.2162
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
ISI	1783	14	33.0	1	9.0323	5.2659	1.5135
NI	1641	9	54.0	3	9.0305	5.2634	1.5244
5-ISI+NI	1339	9	40.0	1	9.0311	5.2645	1.5131

Os resultados da Tabela 6.4 quando comparados aos apresentados na Tabela 6.2 indicam que os procedimentos de globalização não foram efetivamente necessários. Isto se deve principalmente ao fato de que estes problemas representam casos em que a solução é naturalmente estável e desta forma, não é necessário nenhuma intervenção no sentido de corrigir a convergência dos métodos não-lineares. Os resultados das tabelas 6.4 e 6.2 para *Reynolds* 1000 utilizando o método de *Newton* inexato, mostram que o procedimento de globalização resultou em uma solução melhor para o campo de pressão consumindo um tempo consideravelmente menor.

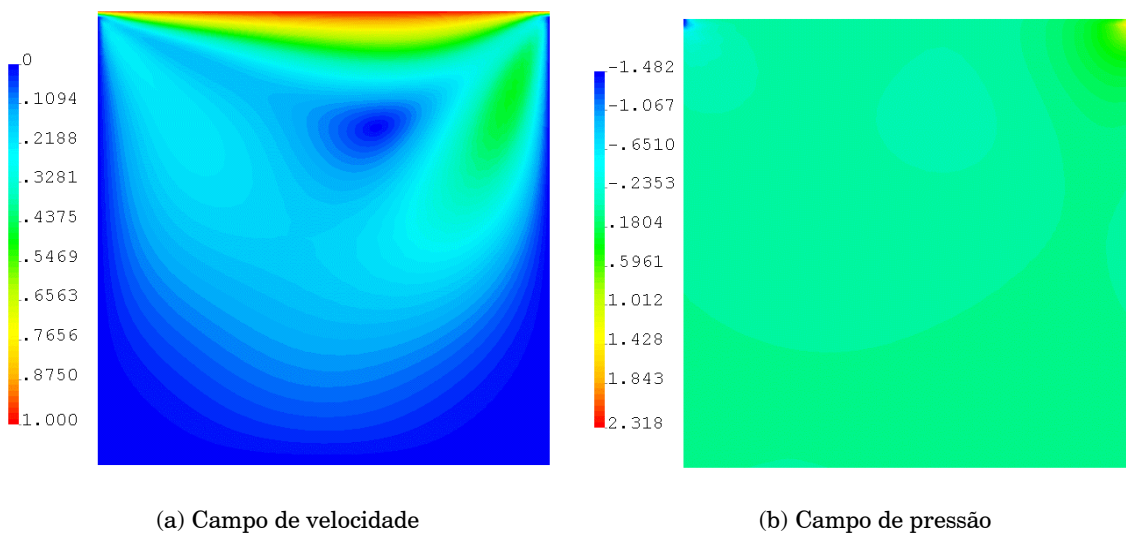
A seguir são apresentados na Tabela 6.5 os resultados referentes ao desempenho do solucionador GMRES(45) sem utilizar pré-condicionamento (S-PREC), utilizando o pré-condicionador diagonal conforme definido em (5.11) (DIAG-1), utilizando o pré-condicionamento diagonal conforme (5.12) (DIAG-2) e utilizando o pré-condicionador bloco-diagonal descrito na seção 5.4.2 (BDIAG). Neste teste adotou-se a estratégia mista como procedimento de solução para *Reynolds* 100, 500 e 1000 e tolerância linear máxima 0,1.

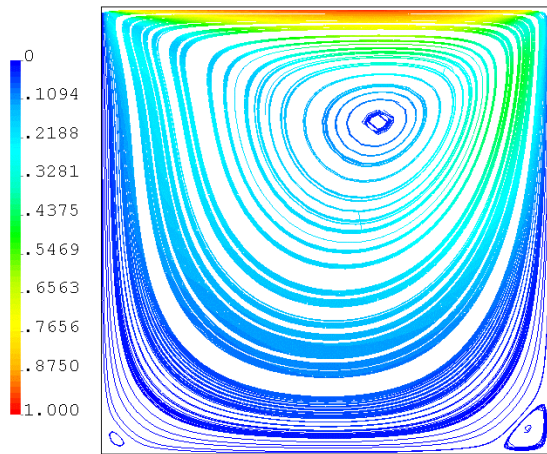
Tabela 6.5 – Desempenho de pré-condicionadores. IS5+NI, GMRES(45), $\eta_{max} = 0,1$, Re 100, 500 e 1000.

$Re = 100$	# IL	# INL	Tempo (s)	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
S-PREC	1279	7	40.0	10.6871	5.6226	5.4680
DIAG-1	1626	7	54.0	10.6871	5.6224	5.4936
DIAG-2	1553	7	49.0	10.6871	5.6223	5.4947
BDIAG	1543	7	35.0	10.6871	5.6224	5.4787
$Re = 500$	# IL	# INL	Tempo (s)	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
S-PREC	3753	9	121.0	9.6970	5.7739	2.1987
DIAG-1	1407	9	49.0	9.6970	5.7740	2.2364
DIAG-2	1456	9	48.0	9.6970	5.7740	2.2348
BDIAG	1405	9	36.0	9.6970	5.7739	2.2162
$Re = 1000$	# IL	# INL	Tempo (s)	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$
S-PREC	4573	9	154.0	9.0306	5.2634	1.5026
DIAG-1	1548	9	55.0	9.0309	5.2641	1.5250
DIAG-2	1576	9	38.0	9.0308	5.2639	1.5229
BDIAG	1488	10	38.0	9.0308	5.2639	1.5230

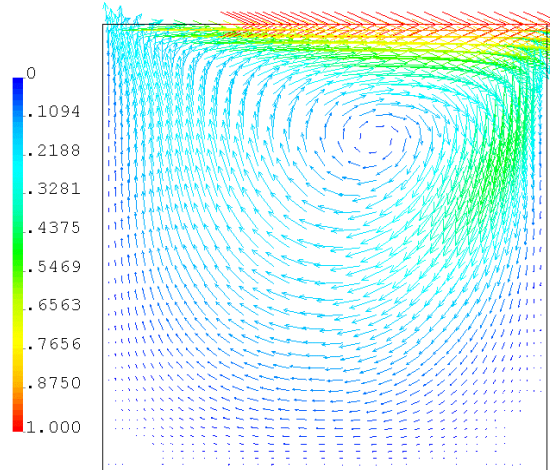
Nota-se que o uso do pré-condicionador apresentou resultados mais efetivos nos testes onde o número de *Reynolds* foi superior a 100. Dentre os pré-condicionadores testados, o bloco-diagonal nodal mostrou melhores resultados frente aos demais, embora ser este o pré-condicionador que despense um maior custo de armazenamento e cálculo.

A seguir são apresentadas nas figuras 6.6a-d a 6.9a-d, as soluções obtidas para os casos listados na Tabela 6.1 utilizando o método ISI-0.1.



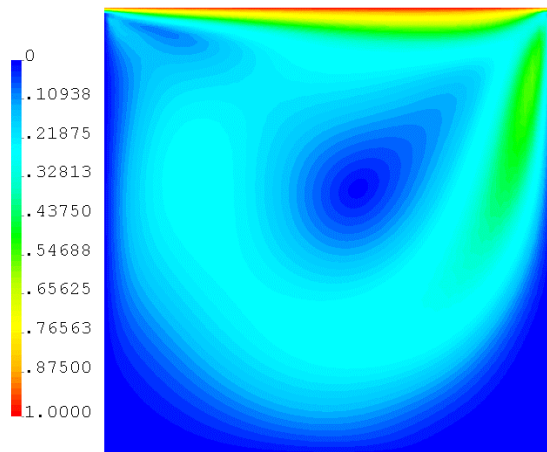


(c) Linha de corrente

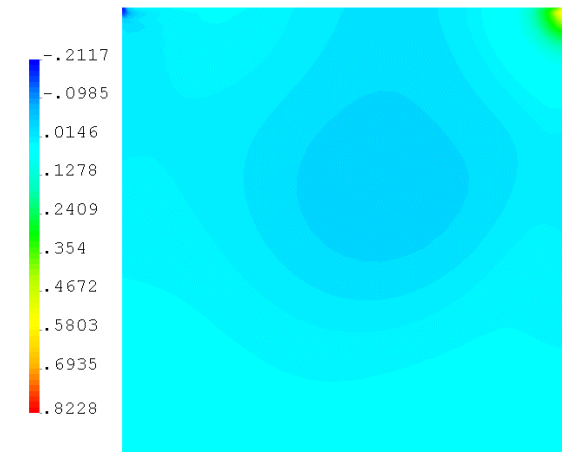


(d) Vetores de velocidade

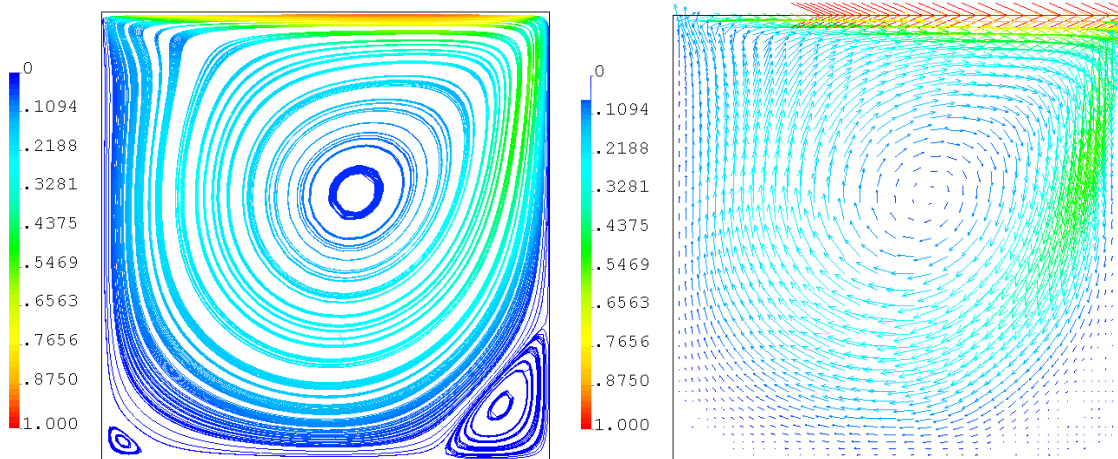
Figura 6.6 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de *Reynolds* 100.



(a) Campo de velocidade



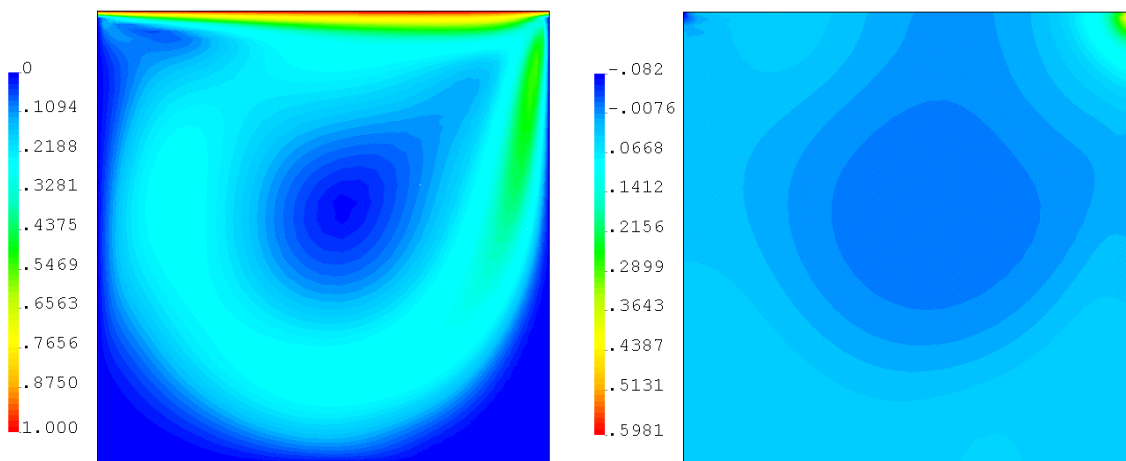
(b) Campo de pressão



(c) Linhas de corrente

(d) Vetores de velocidade

Figura 6.7 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de *Reynolds* 500.



(a) Campo de velocidade

(b) Campo de pressão

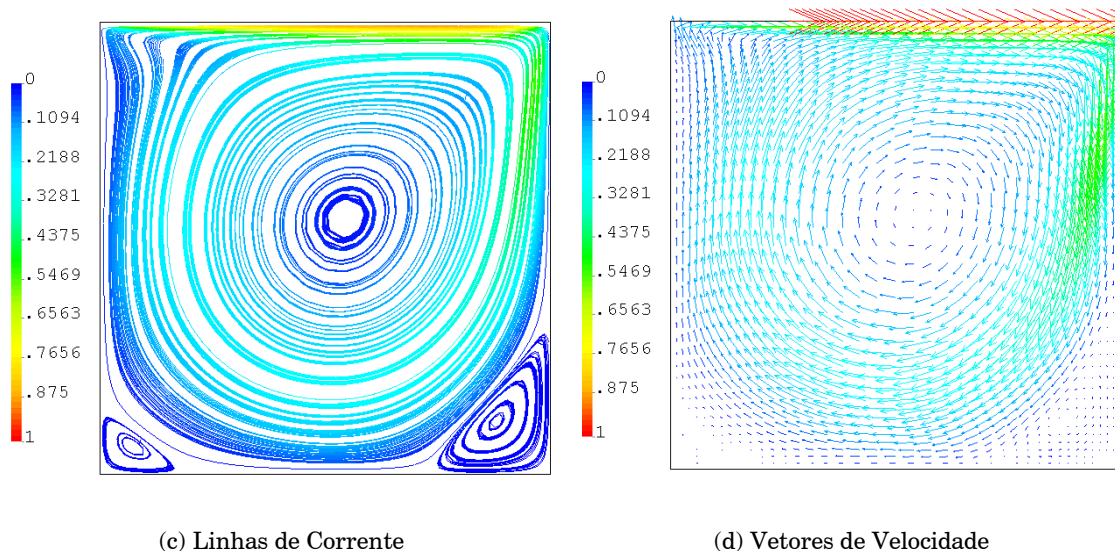


Figura 6.8 – Solução estacionária para o problema de escoamento no interior de uma cavidade quadrada com número de *Reynolds* 1000.

Nota-se pelas figuras 6.6c, 6.7c e 6.8c que conforme o número de *Reynolds* aumenta, o vórtice principal tende a se deslocar para a parte central da cavidade e inicia-se a formação de vórtices secundários. Primeiramente no canto inferior direito do domínio com *Reynolds* igual a 100, e em seguida define-se o vórtice do canto inferior esquerdo com *Reynolds* 500 e 1000.

6.1.2. Escoamento com Alargamento de Canal

Como segundo exemplo foi considerado o escoamento com alargamento de canal (*Backward Facing Step*), o qual representa outro problema bastante popular como teste de códigos de simulação de escoamentos de fluidos [21]. Ele consiste de um fluido movendo-se no interior de um canal reto o qual abruptamente se alarga. Resultados numéricos podem ser obtidos em [20]. Resultados de experimentos físicos são dados em [3]. As condições de contorno e as dimensões do modelo são apresentadas na Figura 6.9a. A malha com 1800 elementos triangulares e 1021 nós pode ser vista na Figura 6.9b.

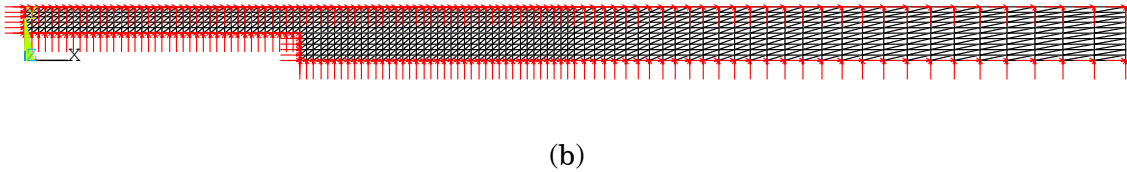
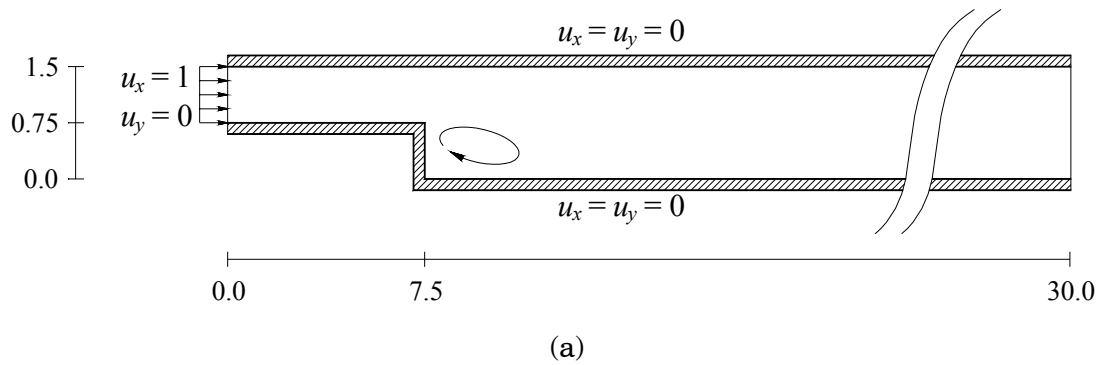
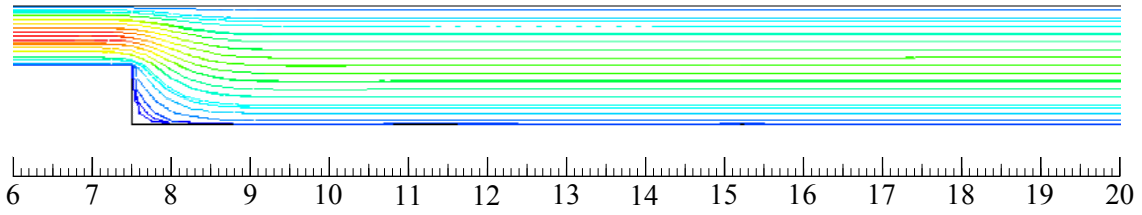
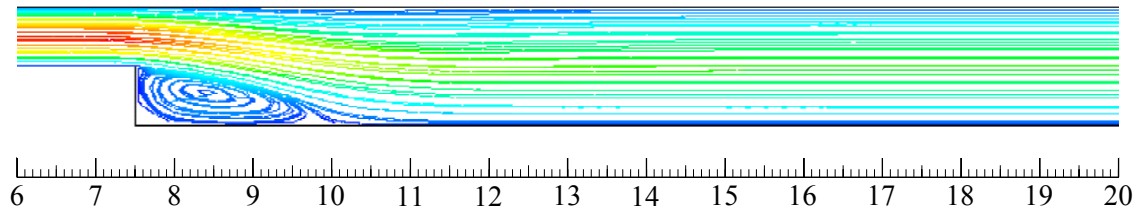


Figura 6.9 – Escoamento com Alargamento de Canal (a) Descrição do modelo e (b) Malha de elementos finitos.

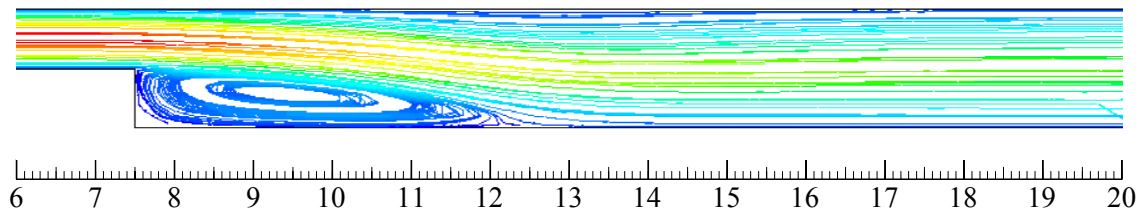
As características básicas deste exemplo estão bem ilustradas nos resultados das figuras 6.10a a 6.10d para números de *Reynolds* igual a 1, 100, 250 e 500. O domínio foi truncado entre $6 < x < 20$, por ser esta a parte que concentra todas as características essenciais do problema. As linhas de corrente mostradas na Figura 6.10 revelam que, para um *Reynolds* pequeno ($Re = 1$) o escoamento expande-se imediatamente após o obstáculo. À medida que o número de *Reynolds* aumenta inicia-se a formação de um vórtice na parte inferior do obstáculo. Este vórtice aumenta de tamanho e quando *Reynolds* atinge valores superiores a 250, o fluxo principal do escoamento é deslocado para baixo e se inicia a formação de um segundo vórtice na parte superior do domínio [21].



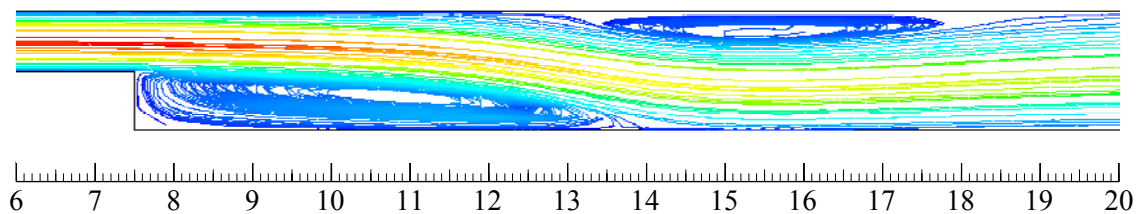
(a) $Re = 1$



(b) $Re = 100$



(c) $Re = 250$



(d) $Re = 500$

Figura 6.10 – Escoamento com alargamento de canal, linhas de corrente para diversos número de *Reynolds*.

Os comprimentos característicos x_1 e x_2 dos vórtices superior e inferior, bem como a distância horizontal entre o vórtice superior e o obstáculo x_3 normalizados pela altura do obstáculo (s) (ver Figura 6.11) são valores frequentemente utilizados para caracterizar o resultado da simulação deste problema [3]. Na Tabela 6.6 são apresentados os comprimentos característicos obtidos pela implementação proposta

nesse trabalho – identificada por 5-ISI+NI - em comparação aos resultados obtidos por GRIEBEL *et al* em [21] para $Re = 1, 100, 250$ e 500 .

Tabela 6.6 – Comprimentos característicos obtidos por GRIEBEL *et al* [21].

Re	GRIEBEL <i>et al</i> [21]			5-ISI+NI		
	x_1/s	x_2/s	x_3/s	x_1/s	x_2/s	x_3/s
1	0.30	--	--	0.27	--	--
100	3.80	--	--	3.46	--	--
250	5.80	5.50	4.40	6.26	*	*
500	8.30	9.10	6.20	8.26	9.06	6.53

* Não houve resolução suficiente para a medição.

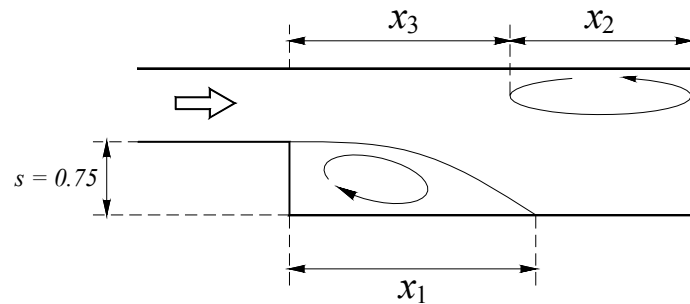


Figura 6.11 – Comprimentos característicos para o escoamento com alargamento de canal.

Os resultados para a implementação 5-ISI+NI na Tabela 6.6 foram extraídos das Figuras 6.10a-d e mostram que o código proposto conseguiu reproduzir de forma satisfatória os resultados obtidos por GRIEBEL em [21] utilizando um código de diferenças finitas.

A Tabela 6.7 abaixo apresenta os resultados obtidos nos testes de desempenho para as versões convencional e inexata do método de Iterações Sucessivas para $Reynolds$ 100, 500 e 1000. Nestes testes foi aplicado o mesmo solucionador linear e as mesmas tolerâncias e nomenclaturas que foram empregadas na descrição do problema no interior de uma cavidade quadrada (ver seção 6.1.1). Além das normas *euclidianas* dos graus de liberdade foi adicionado mais um indicador de qualidade da solução. Trata-se da massa residual (MR) em unidade de massa por tempo [M/T]. Este indicador representa o quanto o código atende a restrição de incompressibilidade imposta pela equação da continuidade (2.2) e é obtido pela diferença dos fluxos de massa fluida que entram e saem do domínio.

Tabela 6.7 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000 .

$Re = 100$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	11430	7	168.0	+2.74E-08	17.7681	0.8313	18.2585	--
ISI-0.1	1745	11	14.0	-7.55E-04	17.7609	0.8316	18.2407	--
ISI-0.5	1446	22	28.0	-1.92E-03	17.7504	0.8310	18.2157	--
ISI-0.9	1218	36	17.0	-4.92E-03	17.7185	0.8312	18.1392	--
$Re = 500$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	33384	19	361.0	+4.86E-08	19.2898	0.9705	2.8084	--
ISI-0.1	5398	60	49.0	-9.34E-04	19.2937	0.9464	2.8255	--
ISI-0.5	3921	163	59.0	-4.10E-03	19.2638	0.9740	2.8404	--
ISI-0.9	4061	495	41.0	-4.97E-03	19.2543	0.9896	2.8410	#2
$Re = 1000$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	88840	65	35512.0	-9.00E-08	19.9769	1.1784	3.1129	#2
ISI-0.1	7449	141	336.0	+9.61E-04	19.9721	1.1934	3.0964	#2
ISI-0.5	5861	1000	964.0	-2.15E-01	20.0368	0.8243	3.4243	#1
ISI-0.9	1911	1000	126.0	+1.02E-01	20.6229	0.1962	1.6459	#1

INFO #1 – O método não-linear atingiu o número máximo de 1000 iterações sem convergir. **INFO #2** – O solucionador linear atingiu o número máximo de iterações sem convergir em alguma etapa da solução não-linear.

Confirmando o que foi visto na seção anterior os métodos inexatos exibiram resultados substancialmente melhores que os métodos convencionais, porém é importante salientar que nos métodos “mais relaxados” ($\eta_{max} = 0,5$ e $0,9$) o aumento na tolerância linear implica, em alguns casos, em perdas na qualidade da solução e aumento do tempo de processamento, conforme indicado pelas normas dos casos ISI-0.5 e ISI-0.9 com *Reynolds* igual 1000. O aumento no tempo de processamento deve-se ao maior número de iterações não-lineares necessárias para o método convergir. O número de iterações e o tempo de execução crescente em relação ao aumento do número de *Reynolds* indicam que à medida que a velocidade do escoamento cresce, os termos convectivos da equação de *Navier-Stokes* tornam-se mais dominantes, e o problema passa a exibir um caráter maior de não-linearidade.

Na Tabela 6.8 a seguir são apresentados os resultados dos testes de influência da avaliação da matriz tangente na solução do problema de escoamento com alargamento de canal. As tolerâncias e demais parâmetros são os mesmos considerados no problema apresentado na seção 6.1.1.

Tabela 6.8 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $\eta_{max} = 0,1$; $Re = 100, 500$ e 1000 .

$Re = 100$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
ISI	1745	11	14.0	-7.55E-04	17.7609	0.8316	18.2407	--
NI	2153	8	35.0	-2.91E-05	17.7682	0.8307	18.2579	#2
5-ISI+NI	1968	9	34.0	-8.26E-05	17.7676	0.8307	18.2567	#2
$Re = 500$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
ISI	5398	60	49.0	-9.34E-04	19.2937	0.9464	2.8255	--
NI	3338	20	1165.0	-8.73E-03	19.2035	1.0314	2.8324	#4
5-ISI+NI	4499	32	1715.0	-1.60E-02	19.1278	1.0886	2.8517	#4
$Re = 1000$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
ISI	7449	141	336.0	+9.61E-04	19.9721	1.1934	3.0964	#2
NI	2692	29	3063.0	+3.96E-02	20.4647	0.4220	2.7222	#4
5-ISI+NI	2922	29	1678.0	+7.79E-02	20.5511	0.2154	1.9513	#4

INFO #2– O solucionador linear atingiu o número máximo de iterações sem convergir em alguma etapa da solução não-linear. **ERRO #4**– O método não-linear entrou em estagnação.

Nota-se que embora as estratégias que avaliam a matriz tangente tenham realizado menos iterações não-lineares essa redução não se refletiu em redução no tempo de execução. A estratégia mista não apresentou nenhum ganho de desempenho em relação às demais. A seguir são mostradas nas figuras 6.12 a 6.14 a taxa de convergência por iteração para cada uma das estratégias mencionadas na Tabela 6.8.

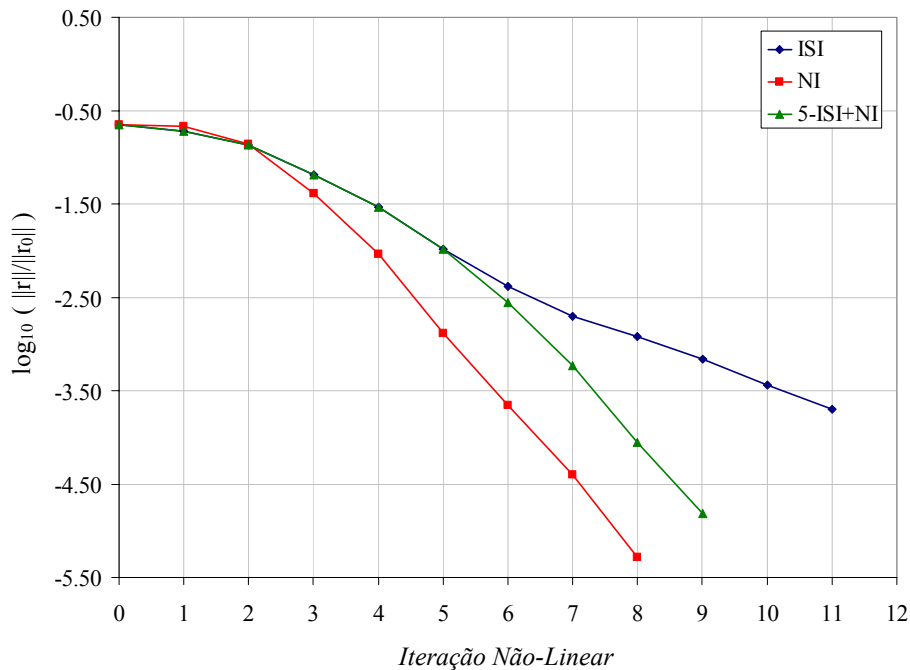


Figura 6.12 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, *Reynolds* 100.

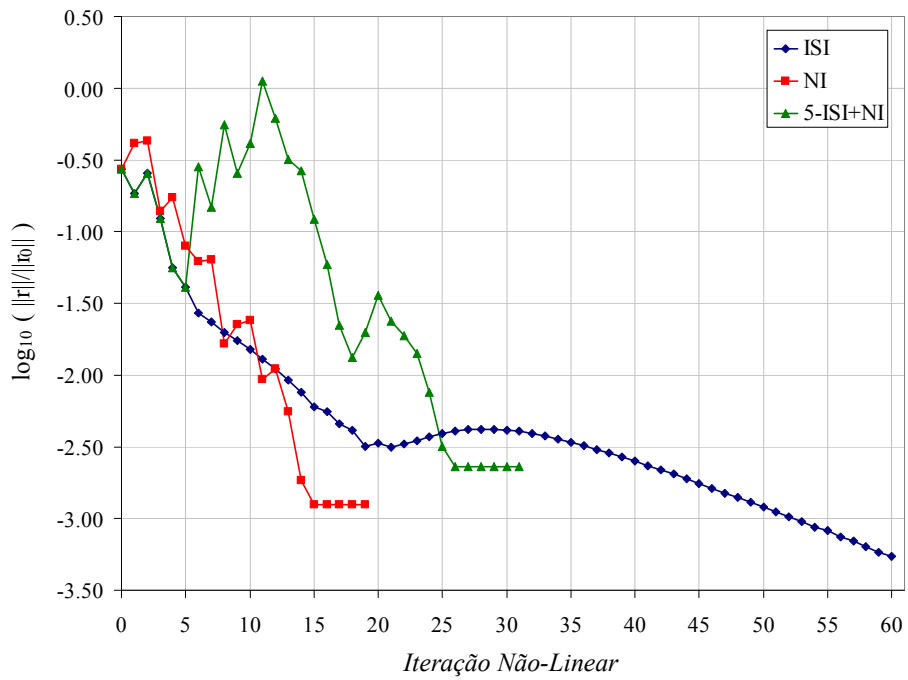


Figura 6.13 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, *Reynolds* 500.

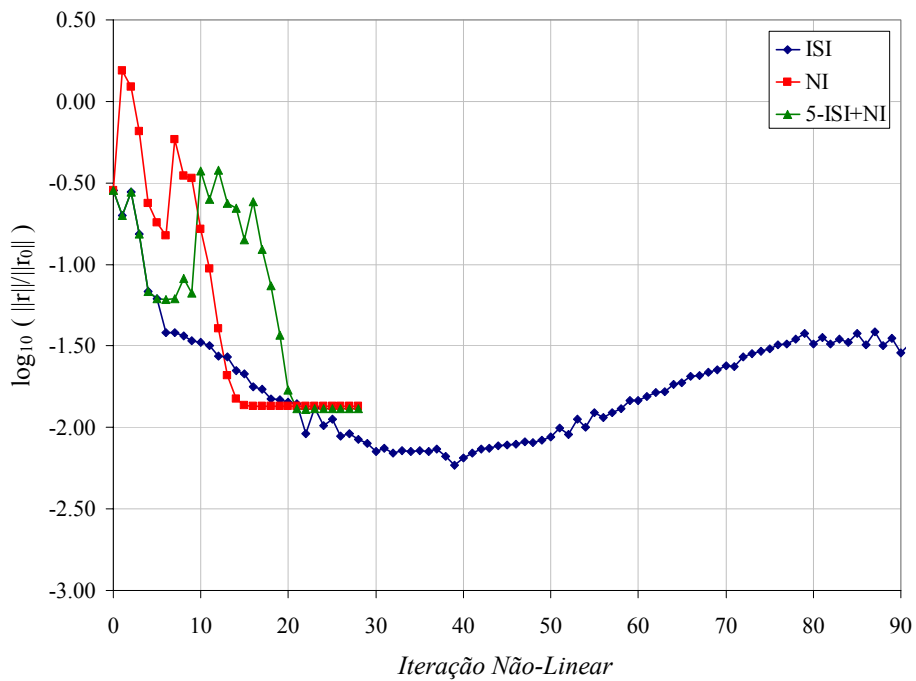


Figura 6.14 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência não-linear, *Reynolds* 1000.

Observa-se nas figuras acima que o aumento do número de *Reynolds* torna a convergência do método difícil de ser alcançada. A irregularidade da taxa de convergência pode ser em parte explicada, pela interferência do processo de adaptatividade da tolerância linear imposta pelos métodos inexatos.

A seguir são apresentados na Tabela 6.9 os testes de desempenho dos três solucionadores lineares descritos no Capítulo 5 utilizando o pré-condicionamento diagonal à esquerda conforme a expressão (5.11) na seção 5.4.1. Este pré-condicionador foi adotado por simplicidade e para ressaltar as características dos solucionadores. Em todos os testes foi utilizado o método de Iterações Sucessivas com tolerância máxima igual a 0,1.

Tabela 6.9 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. ISI-0.1.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
GMRES(25)	2085	11	35.0	-6.99E-04	17.7614	0.8315	18.2432	#2
GMRES(35)	1785	10	29.0	-1.08E-03	17.7577	0.8318	18.2350	#2
GMRES(45)	2006	11	32.0	-6.94E-04	17.7613	0.8314	18.2426	#2
GMRES(55)	1972	11	35.0	-7.09E-04	17.7608	0.8315	18.2423	#2
TFQMR	2728	7	73.0	+6.33E-05	17.7687	0.8313	18.2603	#2
BiCGSTAB	855	8	24.0	-9.30E-04	17.7612	0.8317	18.2380	--
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
GMRES(25)	6037	59	43.0	-1.02E-03	19.2916	0.9502	2.8244	--
GMRES(35)	5941	59	45.0	-9.28E-04	19.2929	0.9489	2.8245	--
GMRES(45)	5657	59	45.0	-1.06E-03	19.2897	0.9531	2.8236	--
GMRES(55)	5796	60	44.0	-1.04E-03	19.2910	0.9507	2.8243	--
TFQMR	5705	18	75.0	+1.59E-05	19.2932	0.9599	2.8128	#2
BiCGSTAB	2591	49	31.0	-8.43E-04	19.2945	0.9479	2.8237	--
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$\ \mathbf{u}_x \ _2$	$\ \mathbf{u}_v \ _2$	$\ \mathbf{p} \ _2$	INFO
GMRES(25)	9344	176	2661.0	-1.09E-03	19.9658	1.1944	3.1345	--
GMRES(35)	9311	180	1058.0	-8.40E-04	19.9704	1.1880	3.1319	--
GMRES(45)	9679	163	361.0	-7.23E-04	19.9690	1.1900	3.1304	--
GMRES(55)	8387	178	1465.0	-1.87E-03	19.9606	1.2012	3.1473	#2
TFQMR	13292	79	365.0	-5.69E-05	19.9766	1.1794	3.1141	#2
BiCGSTAB	4033	111	110.0	-1.22E-03	19.9605	1.2052	3.1298	--

INFO #2 - O solucionador linear atingiu o número máximo de iterações sem convergir em alguma etapa da solução não-linear.

Diferente do que foi visto para o problema da seção 6.1.1, o método BiCGSTAB obteve o melhor desempenho dentre os solucionadores avaliados, indicando ser a escolha do solucionador dependente do tipo de problema que se deseja resolver. De um modo geral o método GMRES apresentou um bom desempenho em relação aos demais, obtendo resultados próximos ao do BiCGSTAB para *Reynolds* igual a 100 e

500. O método TFQMR obteve desempenho inferior aos demais solucionadores em todos os testes.

A Tabela 6.10 a seguir apresenta os resultados dos testes com os procedimentos de globalização descritos na seção 4.1.3. Os parâmetros, nomenclaturas e opções destes testes foram os mesmos utilizados no exemplo da seção 6.1.1.

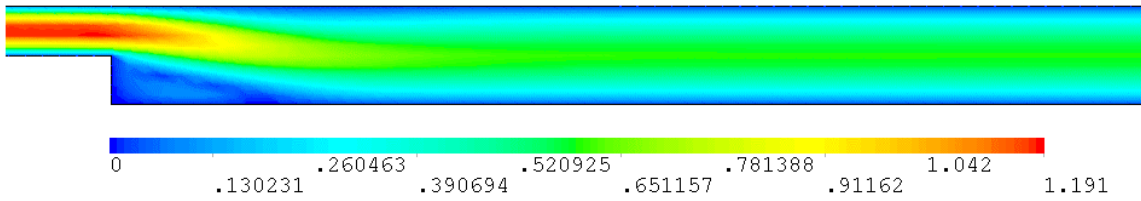
Tabela 6.10 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), pré-condicionador bloco-diagonal, $\eta_{max} = 0,1$.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	1745	11	13.0	0	17.7609	0.8316	18.2407	--
NI	2084	8	36.0	2	17.7672	0.8307	18.2555	#2
5-ISI+NI	1968	9	31.0	0	17.7676	0.8307	18.2567	#2
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	2319	22	27.0	22	19.4987	0.6021	2.8775	#3
NI	5796	15	881.0	31	19.5622	0.5958	2.8876	#3
5-ISI+NI	2098	12	437.0	22	19.7934	0.4730	2.7822	#3
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	2278	28	511.0	31	20.4603	0.2217	2.1124	#3
NI	267	4	599.0	23	9.8003	0.3398	0.3897	#3
5-ISI+NI	723	7	219.0	26	19.1764	0.6449	1.2578	#3

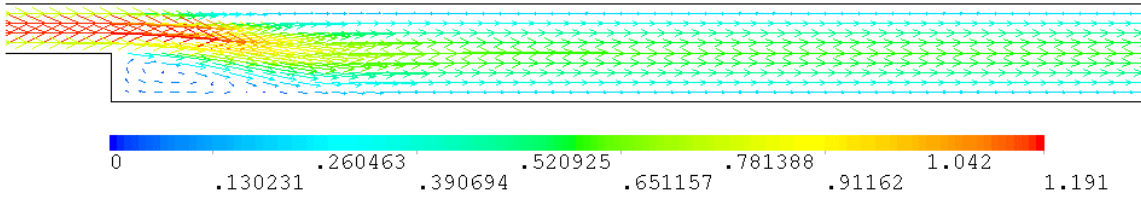
INFO #2 – O solucionador linear atingiu o número máximo de iterações sem convergir em alguma etapa da solução não-linear. **ERRO #3** – O retrocesso falhou no número máximo de 20 tentativas.

Na implementação adotada considerou-se como **ERRO** quando o algoritmo falhou na tentativa de obter uma redução de passo válida dentro de 20 tentativas. É importante observar que este critério poderia ser relaxado de forma a permitir que o procedimento continuasse, porém isto tornaria o algoritmo pouco efetivo na busca de uma solução tendo em vista que o método não-linear entraria em estagnação com incrementos de passos ($\Delta\mathbf{u}$) insignificantes. Nota-se que em todos os casos os métodos globalizados falharam na tentativa de obtenção de uma solução utilizando os parâmetros de controle de retrocesso (*backtracking*) sugeridos nas literaturas [13], [14], [28] e [35] e mencionados na seção 4.1.3.

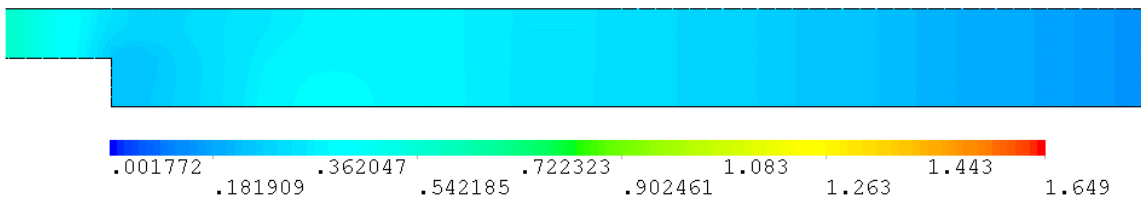
A seguir são apresentadas nas figuras 6.15 a 6.17 as soluções para os casos listados na Tabela 6.7 utilizando o método de Iterações Sucessivas Inexato com tolerância máxima de 0,1.



(a) Campo de Velocidade

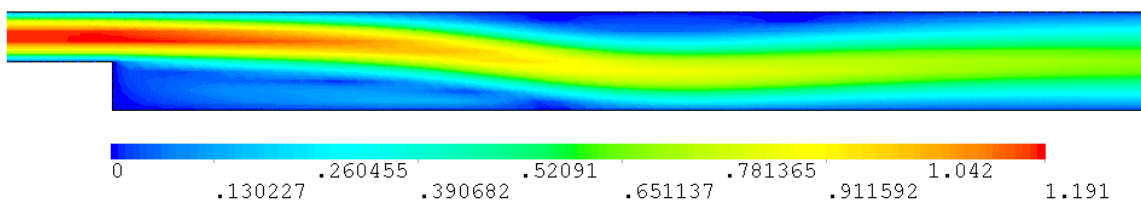


(b) Vetores de Velocidade

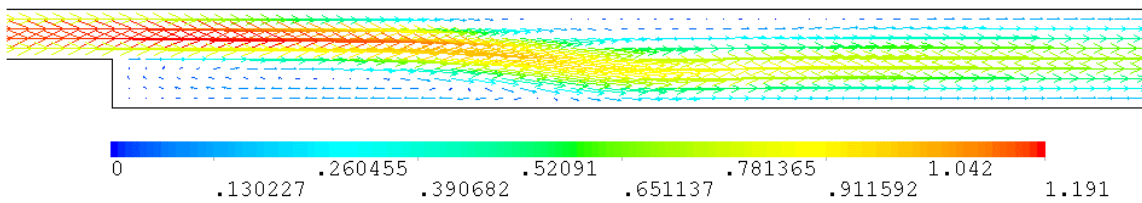


(c) Campo de pressão

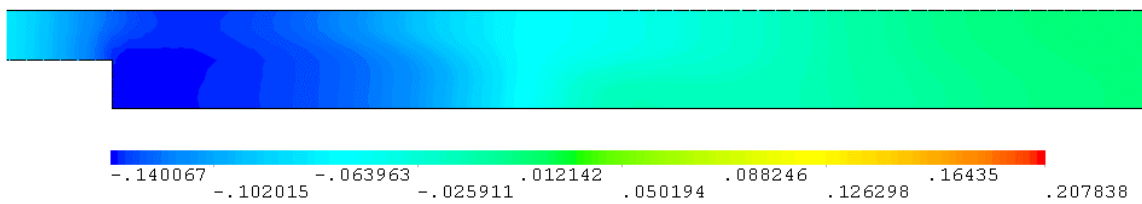
Figura 6.15 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de *Reynolds* 100



(a) Campo de Velocidade

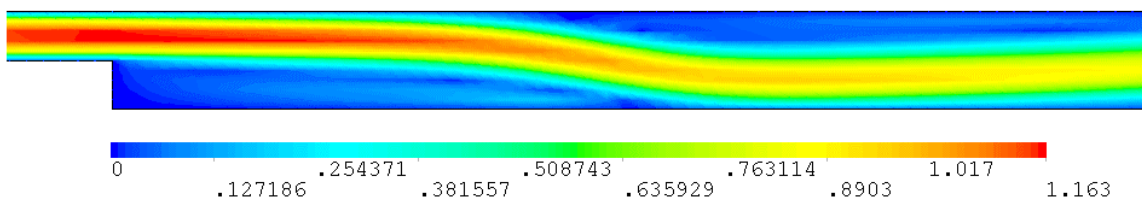


(b) Vetores de Velocidade

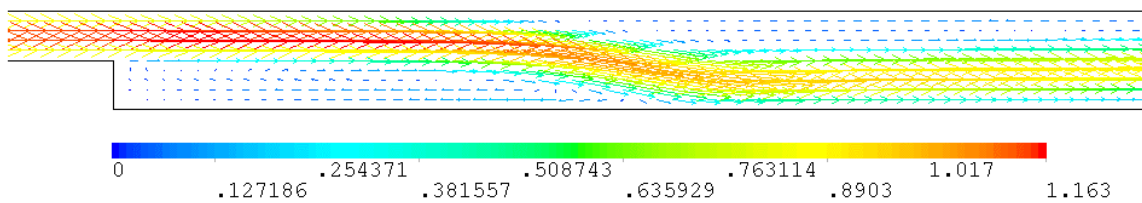


(c) Campo de pressão

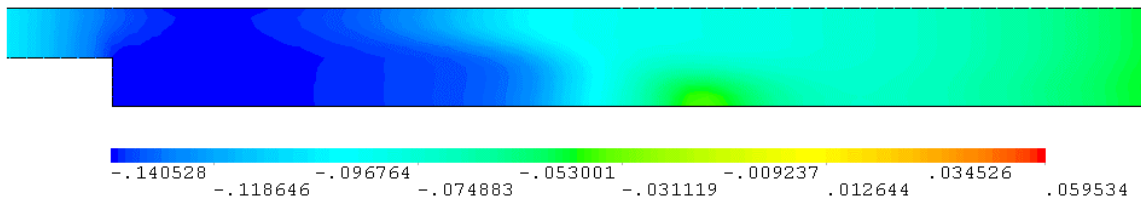
Figura 6.16 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de *Reynolds* 500



(a) Campo de Velocidade



(b) Vetores de Velocidade



(c) Campo de pressão

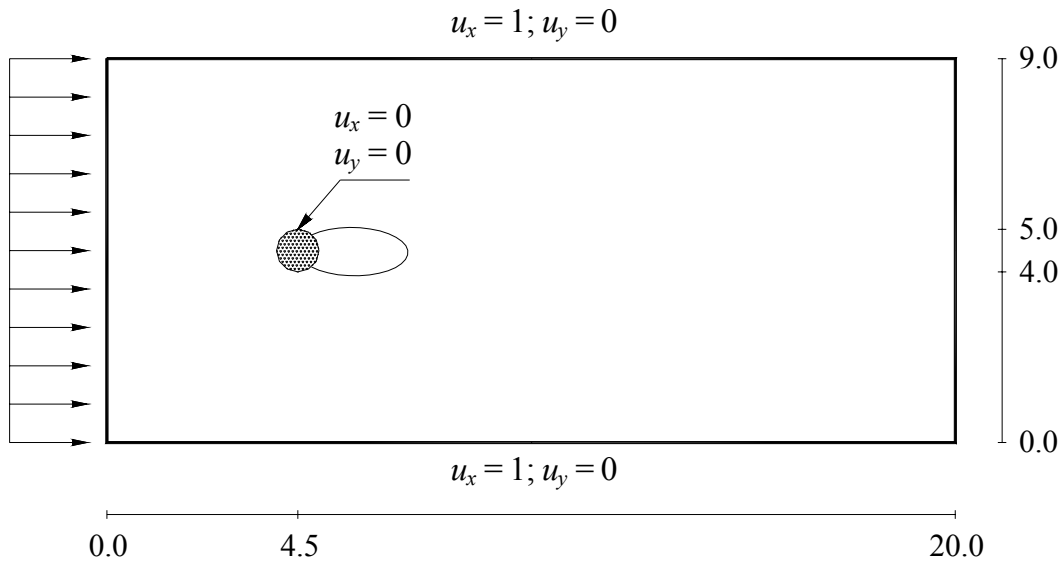
Figura 6.17 – Solução estacionária para o problema de escoamento com alargamento de canal com número de *Reynolds* 1000

As figuras acima indicam que com o aumento do número de *Reynolds* o vórtice associado ao obstáculo se alonga até haver o surgimento de um segundo vórtice na parte superior ao escoamento.

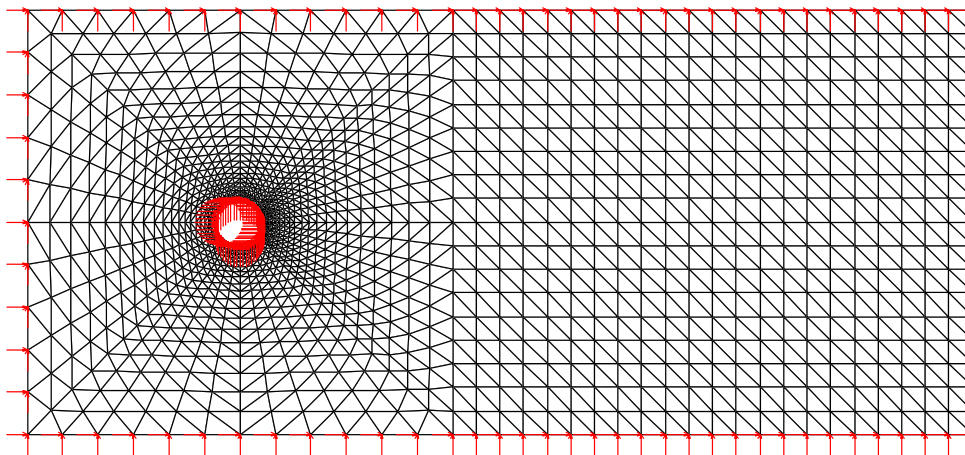
6.1.3. Escoamento ao Redor de um Cilindro Circular

A simulação do escoamento ao redor de um cilindro circular é um dos problemas mais desafiadores de ser solucionado via métodos numéricos. Diferente de outros problemas típicos, neste caso, todos os termos das equações governantes são significantes [7].

O problema consiste de um cilindro circular imerso em um fluido viscoso. O domínio do problema e as condições de contorno são mostrados na Figura 6.18a. A malha de elemento finitos com 2872 elementos triangulares e 1510 nós é apresentada na Figura 6.18b.



(a)



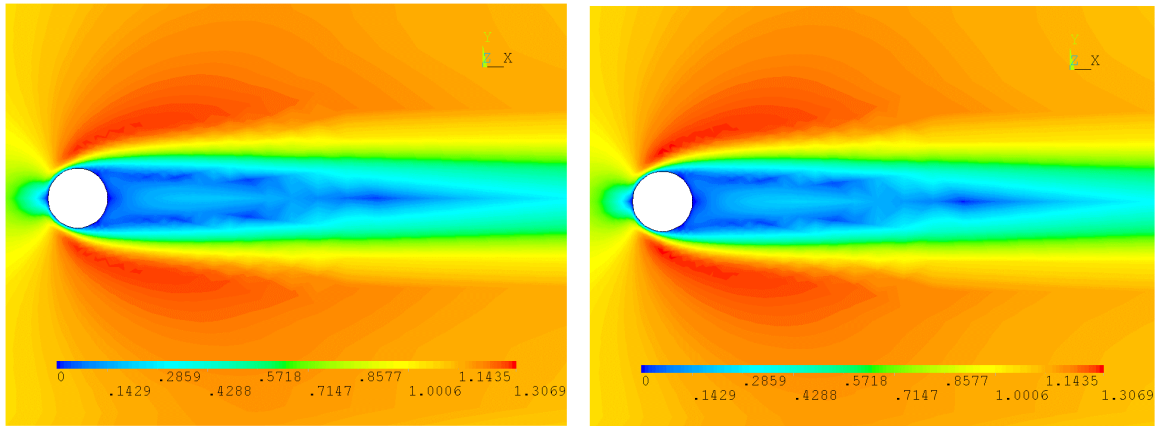
(b)

Figura 6.18 – Escoamento ao Redor de um Cilindro Circular – (a) Descrição do modelo e (b) malha de elementos finitos

Segundo BROOKS E HUGHES [7] com número de *Reynolds* abaixo de 40, um par de vórtices simétricos formam-se à jusante do cilindro. Para números de *Reynolds* maiores, esses vórtices tornam-se instáveis, espalham-se periodicamente e são transportados pelo escoamento formando o conhecido *caminho de vórtices de Karman*. Este fenômeno possui característica tipicamente transiente e se manifesta geralmente em análises dinâmicas. Os testes descritos a seguir são todos baseados na resposta estacionária deste problema sendo portanto incapazes de reproduzir o efeito de formação do *caminho de vórtices de Karman*.

A seguir as figuras 6.19 a 6.21 apresentam os resultados obtidos com o uso da estratégia mista 5IS+NI, descrita na seção 6.1.1, comparados aos resultados do pacote comercial *FLOTRAN*. Nestas figuras foi destacado o trecho próximo ao cilindro por concentrar as características essenciais do problema.

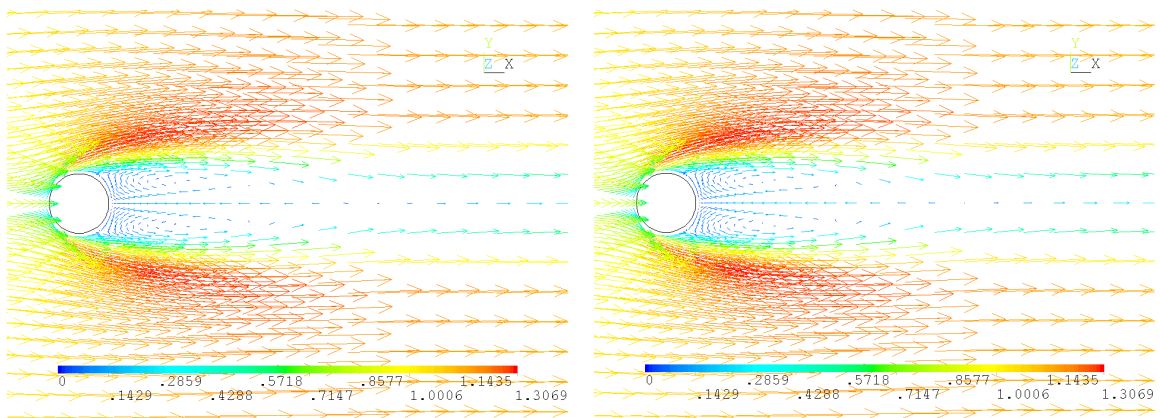
Campo de velocidade



(a) 5IS+NI

(b) *FLOTRAN*

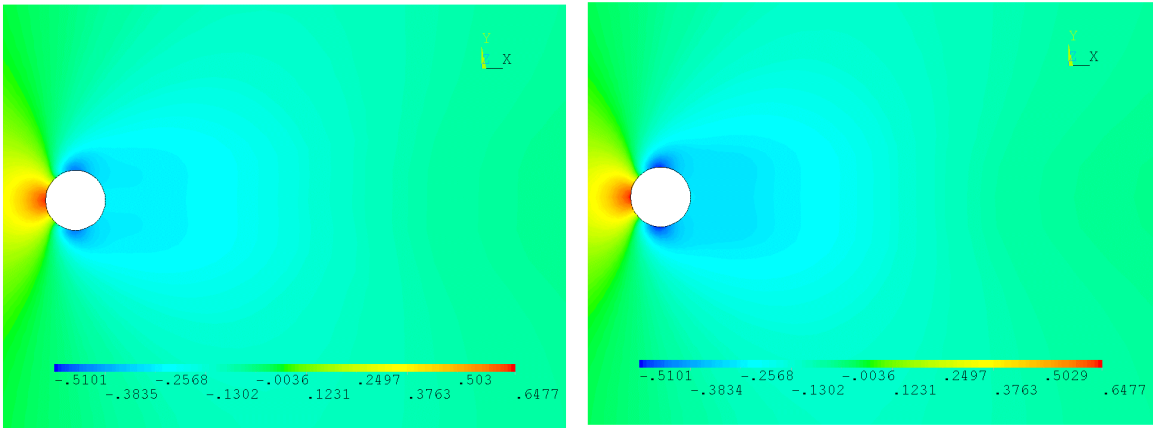
Vetores de velocidade



(c) 5IS+NI

(d) *FLOTRAN*

Campo de Pressão

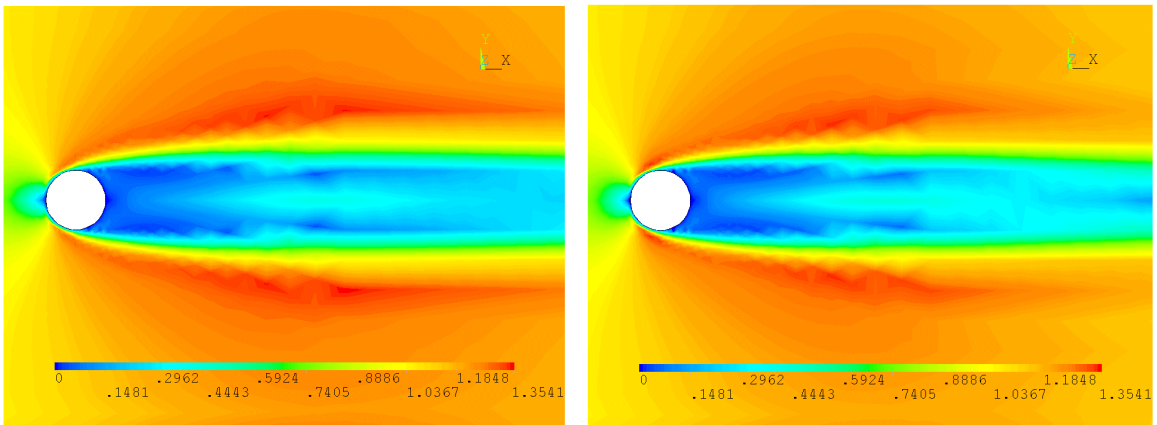


(e) 5IS+NI

(f) FLOTTRAN

Figura 6.19– Escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para *Reynolds* 100.

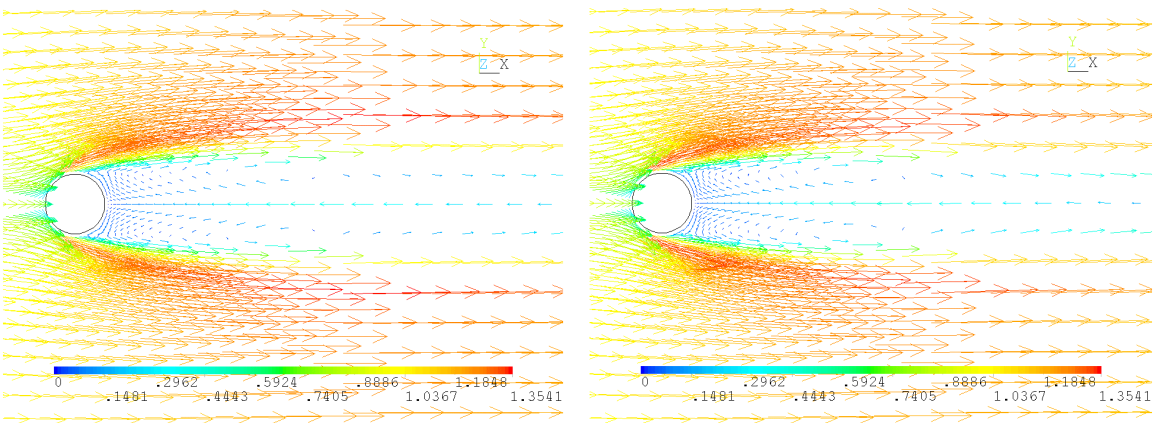
Campo de velocidade



(a) 5IS+NI

(b) FLOTTRAN

Vetores de velocidade



(c) 5IS+NI

(d) FLOTTRAN

Campo de Pressão

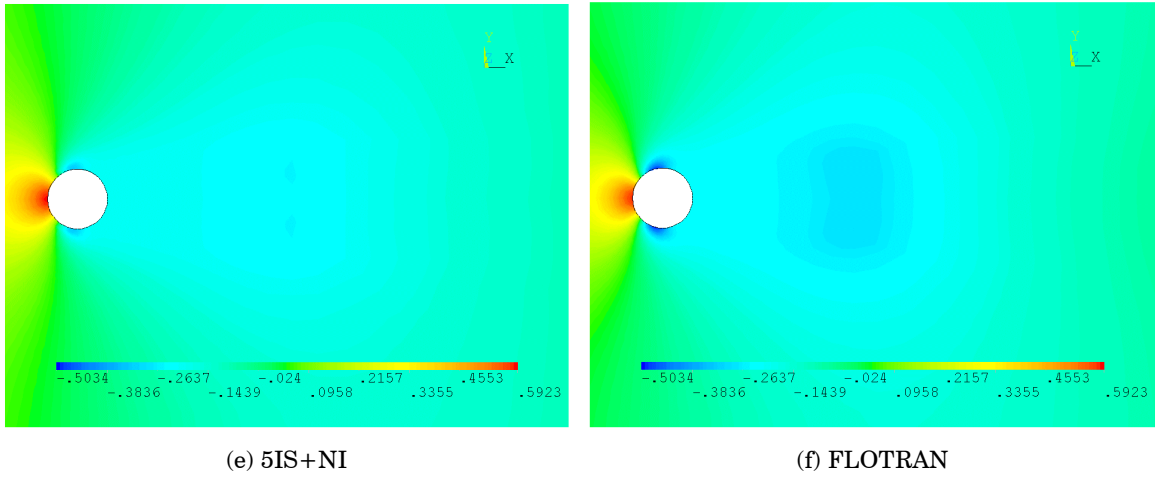
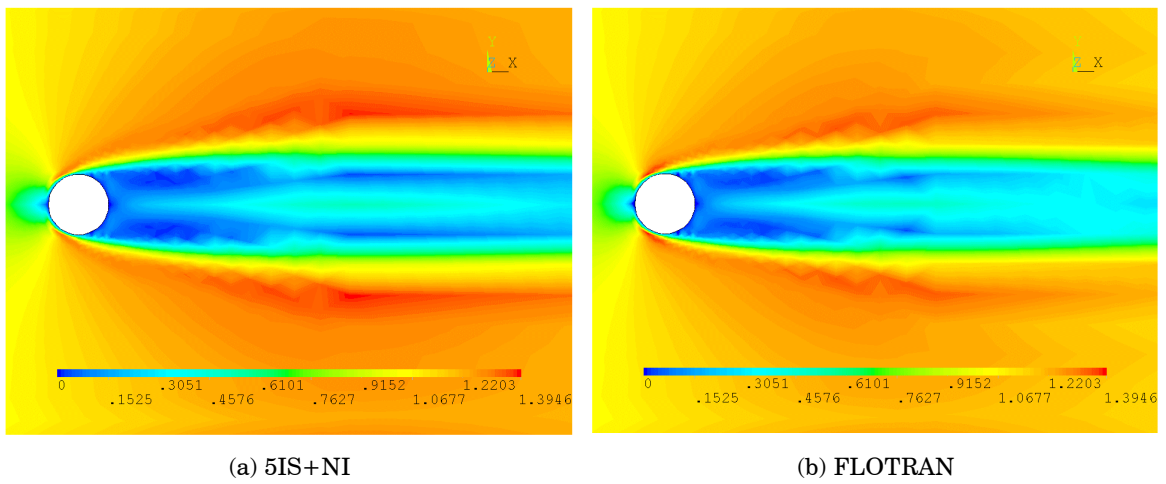
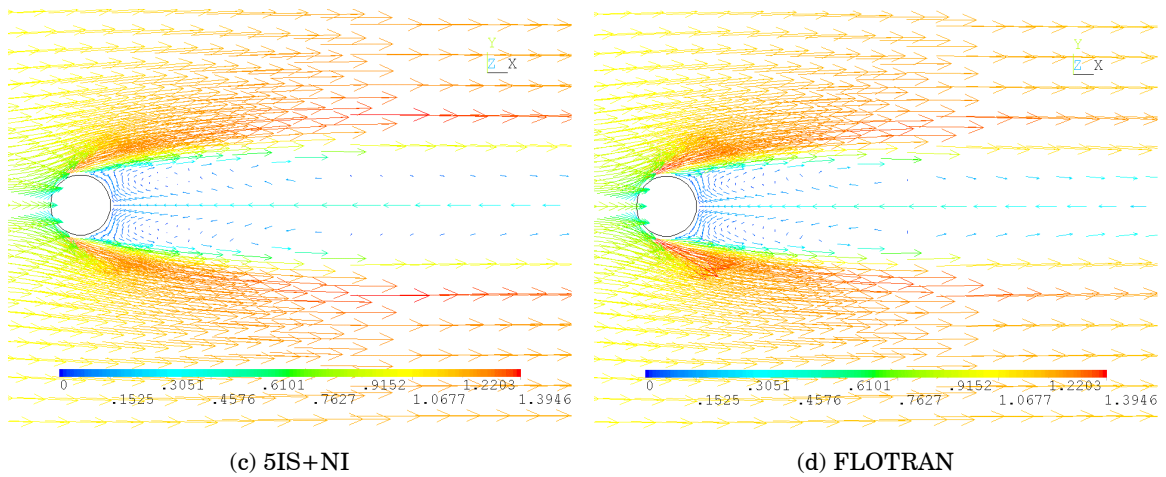


Figura 6.20– Escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para *Reynolds* 500.

Campo de velocidade



Vetores de velocidade



Campo de Pressão

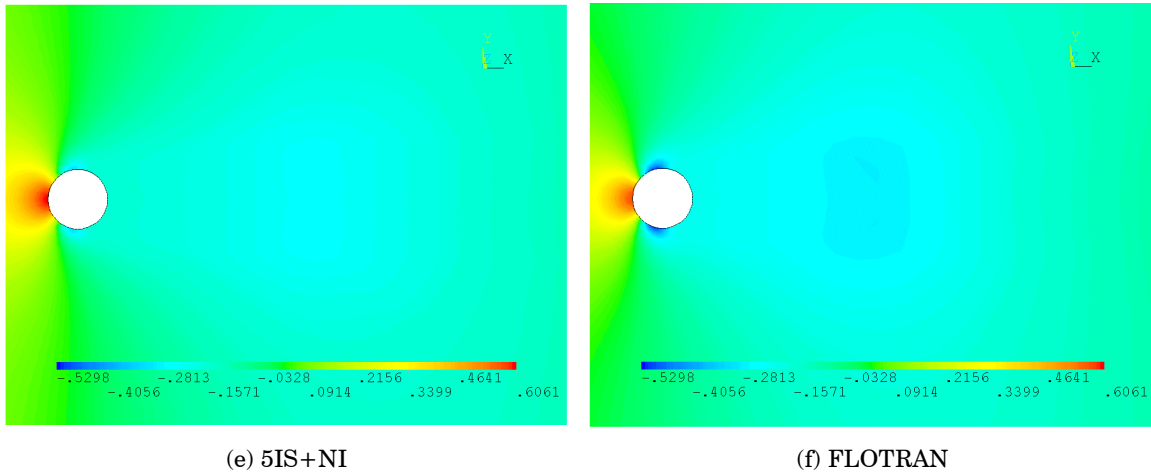


Figura 6.21– escoamento ao redor de um cilindro circular. Comparativo de resultados para *Reynolds* 1000.

Na Tabela 6.11 a seguir são listados os resultados do comparativo de desempenho para os métodos de Iterações Sucessivas convencional e inexato, semelhante ao que foi feito nas seções anteriores. As nomenclaturas e parâmetros utilizados também são os mesmos descritos anteriormente.

Tabela 6.11 – Comparativo de desempenho para as diferentes estratégias de solução do problema não-linear. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000 .

$Re = 100$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	8422	10	3491.0	-9.52E-08	36.8962	5.2257	7.2281	--
ISI-0.1	1872	28	27.0	-1.85E-05	36.8964	5.2255	7.2269	--
ISI-0.5	520	13	16.0	+7.60E-03	36.9170	5.2253	7.1980	--
ISI-0.9	454	21	7.0	-4.65E-03	36.8931	5.2223	7.2304	--
$Re = 500$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	608267	1000	20441.0	+3.42E-06	37.7883	5.4598	6.6087	#1
ISI-0.1	47133	1000	715.0	+1.15E-01	37.8262	5.4966	6.7096	#1
ISI-0.5	7503	1000	235.0	+1.83E-01	37.8892	5.4964	6.4847	#1
ISI-0.9	2478	1000	69.0	+1.33E-02	37.7802	5.5217	6.7531	#1
$Re = 1000$	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
IS	630266	1000	24095.0	+4.24E-06	38.1281	5.6824	6.2446	#1
ISI-0.1	41570	1000	635.0	+2.04E-01	38.0762	5.6258	6.4661	#1
ISI-0.5	7334	1000	206.0	+3.48E-01	38.1261	5.5316	6.3860	#1
ISI-0.9	1852	1000	68.0	-3.95E-01	38.2624	5.5240	6.7159	#1

INFO #1 – Método não-linear atingiu o número máximo de 1000 iterações sem convergir.

A Tabela acima confirma o melhor desempenho dos métodos inexatos frente aos métodos convencionais. Note que nos casos de *Reynolds* igual a 500 e 1000 que o método de Iterações Sucessivas Inexato não convergiu em 1000 iterações, entretanto,

essas 1000 iterações foram executadas em um tempo menor que as poucas iterações necessárias para a convergência do método convencional com *Reynolds* igual a 100. Observe também que o fato do método de iterações sucessivas não ter convergido dentro do limite de 1000 iterações aponta para o fato de que este método pode não ser o mais adequado para a solução deste problema.

A seguir na Tabela 6.12 são apresentados os resultados dos testes de influência da matriz de rigidez tangente implementada segundo TEZDUYAR em [45]. Conforme descrito nas seções anteriores, estes testes foram todos realizados sobre métodos não-lineares inexatos, utilizando o GMRES(45) como solucionador, tolerância máxima de 0,1 e pré-condicionador bloco-diagonal-nodal.

Tabela 6.12 – Influência da matriz de rigidez tangente. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $Re = 100, 500$ e 1000 .

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	1872	28	27.0	-1.85E-05	36.8964	5.2255	7.2269	--
NI	994	8	22.0	+3.68E-04	36.8967	5.2255	7.2259	--
5-ISI+NI	1049	9	29.0	+5.52E-04	36.8972	5.2255	7.2263	--
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	47133	1000	715.0	+1.15E-01	37.8262	5.4966	6.7096	#1
NI	1328	15	39.0	+7.86E-03	37.7702	5.5236	6.7597	--
5-ISI+NI	1053	12	567.0	+3.34E-02	37.8411	5.5253	6.7312	--
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	41570	1000	635.0	+2.04E-01	38.0762	5.6258	6.4661	#1
NI	1246	18	596.0	+2.90E-02	38.1154	5.6112	6.6121	--
5-ISI+NI	3515	40	9027.0	-4.76E-01	38.9457	6.2630	9.8824	#4

INFO #1 – Método não-linear atingiu o número máximo de 1000 iterações sem convergir; **ERRO #4** – Método não-linear entrou em estagnação.

A tabela acima mostra ser o Método de *Newton* Inexato (NI) o de melhor desempenho dentre as estratégias analisadas. Para números de *Reynolds* superiores a 100 a estratégia baseada no método de Iterações Sucessivas se mostrou incapaz de convergir em 1000 iterações e consumiu mais tempo que as demais estratégias. Para *Reynolds* igual a 1000 a estratégia mista (5-ISI+NI) entrou em estagnação após 40 iterações sem convergir para uma solução válida.

A seguir são apresentadas nas figuras 6.19 a 6.21 a taxa de convergência por iteração, para cada uma das estratégias citadas na Tabela 6.12.

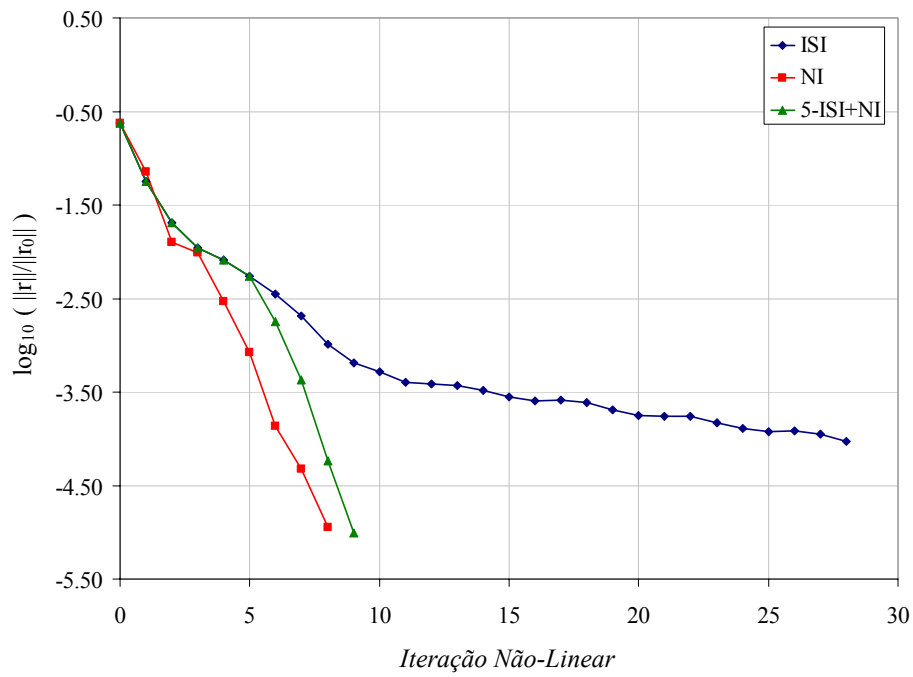


Figura 6.22 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, *Reynolds* 100.

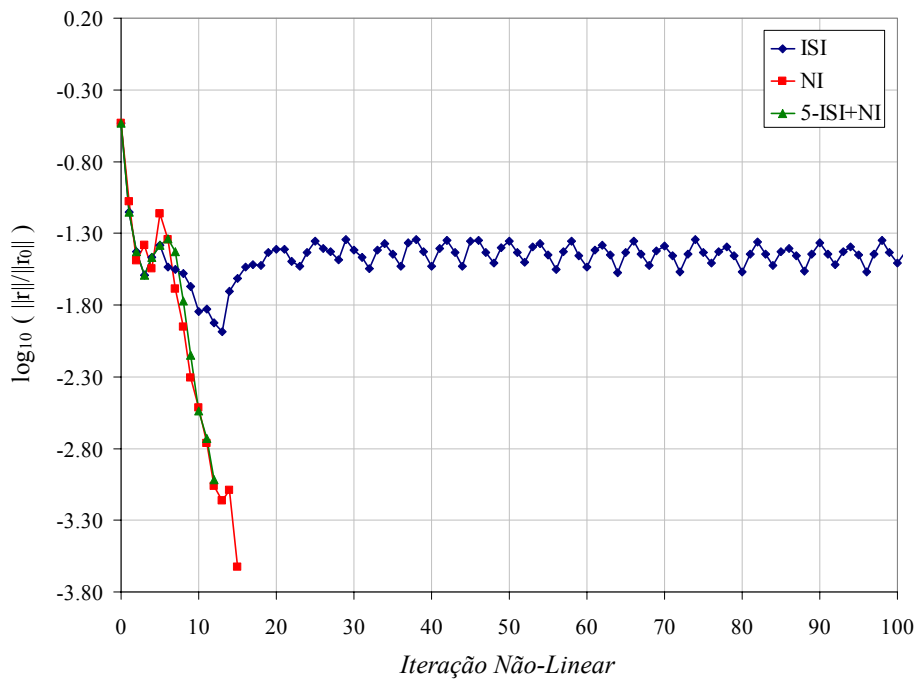


Figura 6.23 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, *Reynolds* 500.

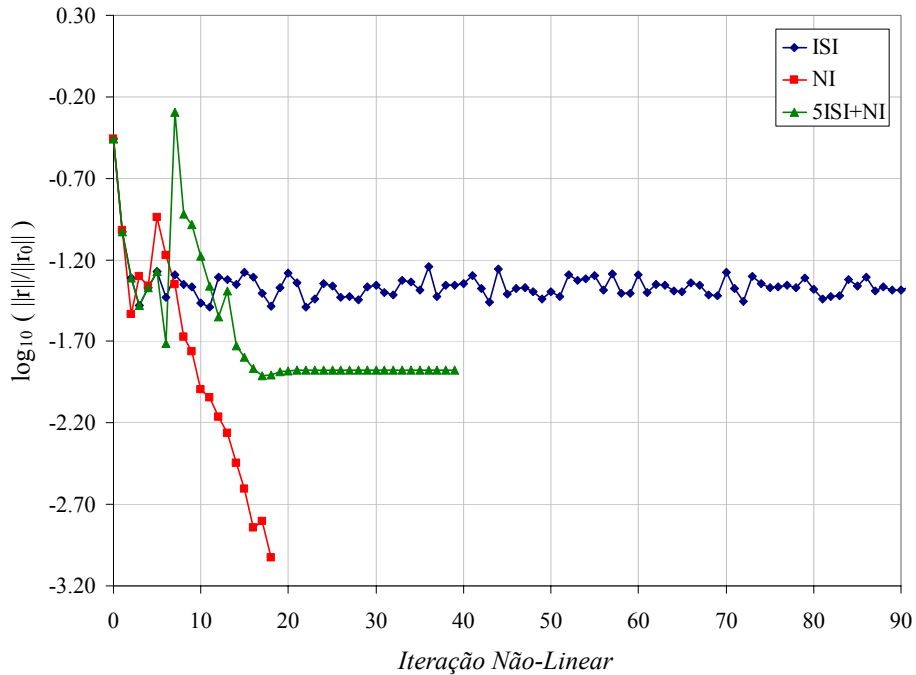


Figura 6.24 – Influência da avaliação da matriz de rigidez tangente na taxa de convergência Não-Linear, *Reynolds* 1000.

Observa-se nas figuras acima que embora o método de Iterações Sucessivas não ter convergido nas 1000 iterações, os resultados da Tabela 6.12 indicam que os resultados para este método foram satisfatórios (ver normas dos graus de liberdade). O mesmo não ocorreu com o método misto para *Reynolds* 1000 que entrou em estagnação em uma solução inadequada.

A Tabela 6.13 a seguir mostra os resultados do comparativo entre os solucionadores descritos no Capítulo 5. Estes testes foram realizados utilizando o pré-condicionamento diagonal à esquerda conforme a expressão (5.11) da seção 5.4.1 por questões de simplicidade e para ressaltar as diferenças de desempenho entre os solucionadores. Em todos os testes foi utilizado o método de Iterações Sucessivas com tolerância máxima de 0,1.

Tabela 6.13 – Avaliação de desempenho dos solucionadores na solução do problema linear. 5IS+NI, ($\eta_{max} = 0,1$)

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
GMRES(25)	2279	12	58.0	+2.11E-03	36.8983	5.2257	7.2212	#2
GMRES(35)	1760	12	47.0	-9.20E-04	36.8938	5.2250	7.2237	#2
GMRES(45)	1300	12	37.0	-3.97E-03	36.8906	5.2254	7.2288	#2
GMRES(55)	1448	12	43.0	+1.29E-03	36.8959	5.2247	7.2221	--
TFQMR	2459	10	113.0	+2.23E-04	36.8966	5.2258	7.2280	--
BiCGSTAB	793	11	39.0	+1.03E-03	36.8998	5.2264	7.2338	--
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
GMRES(25)	46929	1000	585.0	+6.07E-03	37.6283	5.6101	7.1904	#1
GMRES(35)	46599	1000	589.0	-3.40E-02	37.6853	5.5850	6.9060	#1
GMRES(45)	44181	1000	588.0	-1.16E-02	37.6818	5.4613	6.7860	#1
GMRES(55)	43456	1000	590.0	+4.24E-02	37.5510	5.5064	6.8797	#1
TFQMR	191855	1000	4157.0	-1.88E-03	37.7966	5.4512	6.6371	#1
BiCGSTAB	39675	1000	874.0	-8.98E-02	37.7216	5.4361	6.6276	#1
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	MR [M/T]	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
GMRES(25)	50171	1000	1357.0	-4.68E-03	37.8628	5.6454	6.9386	#1
GMRES(35)	48913	1000	1379.0	-1.24E-02	38.0559	5.6064	6.5059	#1
GMRES(45)	47137	1000	1378.0	-7.72E-02	37.8719	5.6133	6.7096	#1
GMRES(55)	46142	1000	1355.0	-6.43E-02	37.8200	5.4572	6.6187	#1
TFQMR	206267	1000	9685.0	-4.38E-04	38.1926	5.5113	6.3526	#1
BiCGSTAB	37758	1000	1796.0	+7.78E-03	38.3587	5.5062	6.6562	#1

INFO #1 – Método não-linear atingiu o número máximo de 1000 iterações sem convergir

Observa-se na tabela acima que o solucionador GMRES obteve o melhor desempenho médio dentre os três solucionadores analisados, reforçando o que foi visto no exemplo da seção 6.1.1. O TFQMR foi o método de pior desempenho e o BiCGSTAB alcançou tempos semelhantes aos do GMRES chegando a superá-lo no testes com número de *Reynolds* igual a 100.

Os resultados obtidos para os métodos inexatos providos dos procedimentos de globalização descritos na seção 4.1.3 são listados na Tabela 6.14 a seguir. Para estes testes foi utilizado o GMRES(45) como solucionador linear com tolerância máxima de 0,1 e pré-condicionador bloco diagonal nodal. Os parâmetros de retrocesso admitidos foram os mesmos discutidos na seção 4.1.3 e sugeridos nas referências [13], [14] e [35].

Tabela 6.14 – Desempenho dos métodos inexatos providos de procedimentos de globalização. GMRES(45), pré-condicionador bloco diagonal, $\eta_{max} = 0,1$.

Re = 100	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	1324	18	18.0	1	36.8967	5.2255	7.2269	--
NI	938	7	27.0	0	36.8962	5.2253	7.2251	--
5-ISI+NI	1073	9	29.0	0	36.8972	5.2256	7.2262	--
Re = 500	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	544	5	8.0	22	37.5641	5.3177	6.2644	#3
NI	577	3	18.0	21	39.9441	5.7647	6.2090	#3
5-ISI+NI	544	5	13.0	22	37.5641	5.3177	6.2644	#3
Re = 1000	# IL	# INL	Tempo (s)	# BCT	$ \mathbf{u}_x _2$	$ \mathbf{u}_v _2$	$ \mathbf{p} _2$	INFO
ISI	509	5	8.0	24	38.1178	5.4425	6.2275	#3
NI	1315	11	40.0	29	38.3424	5.5992	6.7735	#3
5-ISI+NI	509	5	12.0	24	38.1178	5.4425	6.2275	#3

ERRO #3 – O retrocesso falhou no número máximo de 20 tentativas.

Comparando-se os resultados das tabelas 6.12 e 6.14 nota-se que o método de Iterações Sucessivas com *Reynolds* igual a 100 foi o único teste favorecido pelo uso do procedimento de retrocesso. Nos outros testes os métodos providos de retrocesso foram incapazes de obter uma solução válida utilizando os parâmetros de controle extraídos da literatura.

6.1.4. Escoamento Rotacional em um Anular Excêntrico

Este problema foi formulado e proposto com base no fenômeno fluidodinâmico observado em operações de perfuração de poços, no qual, um fluido geralmente não-Newtoniano, com função de estabilização do poço, lubrificação e resfriamento da broca, percorre o interior da coluna de perfuração, retornando à superfície pelo anular formado entre a coluna e a parede do poço, maiores detalhes podem ser obtidos em [15], [31] e [1]. As análises que são apresentadas a seguir foram desenvolvidas em uma seção transversal do poço e conseqüentemente só são capazes de reproduzir o escoamento rotacional do fluido. A ascensão do fluido de perfuração através do anular, associado ao movimento rotacional da broca deve ser desenvolvida em uma análise tridimensional, conforme [1]. A Figura 6.25a descreve o domínio do problema com suas dimensões e condições de contorno. A malha de elementos finitos com 1600 elementos triangulares e 800 nós é apresentada na Figura 6.25b.

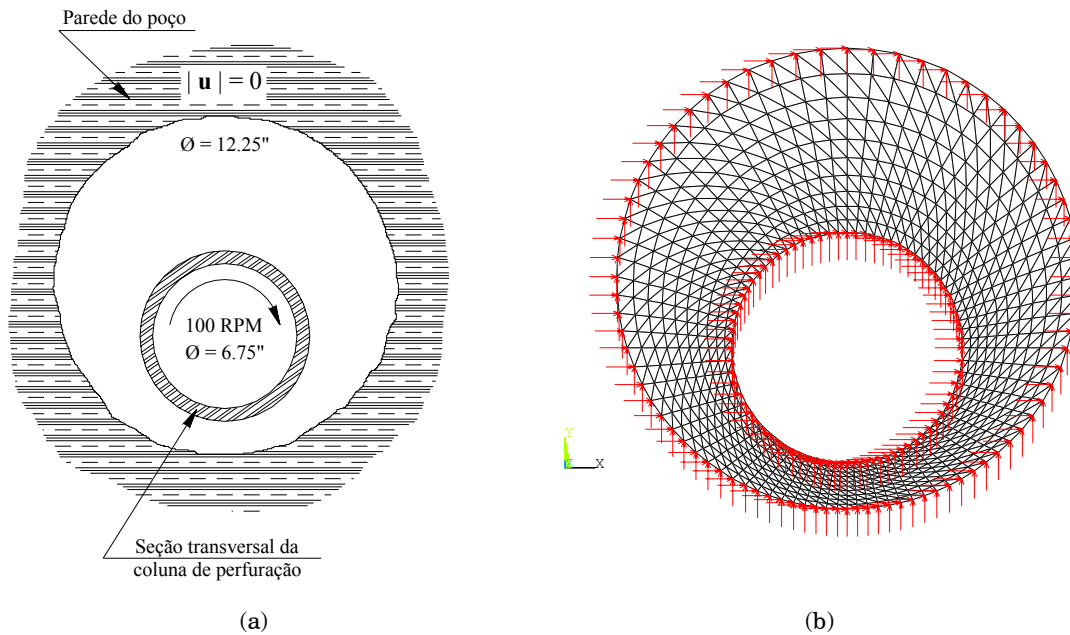


Figura 6.25 – Escoamento Rotacional no Interior de um Anular Excêntrico (a) descrição do modelo e (b) malha de elementos finitos.

As dimensões da seção de poço esquematizada na Figura 6.25a e os parâmetros reológicos dos fluidos apresentados na Tabela 6.15 foram extraídos da literatura [1].

Tabela 6.15 – Reologia dos Fluidos considerados.

FLUIDO	PARÂMETRO	VALOR
Newtoniano	Viscosidade (kg/m.s)	0.15
<i>Bingham</i>	Viscosidade <i>Newtoniana</i> (kg/m.s)	8.00
	Viscosidade plástica (kg/m.s)	0.08
	Viscosidade inicial (kg/m.s)	0.15
	Tensão limite (Pa)	7.16
Lei de Potência (Pseudo-Plástico)	Viscosidade inicial (kg/m.s)	0.15
	Viscosidade nominal (kg/m.s)	1.00
	Limite de escoamento (Pa)	1.0E-06
	Índice de consistência (Pa.s ⁿ)	0.15
	Expoente (adim.)	0.75
Lei de Potência (Dilatante)	Viscosidade inicial (kg/m.s)	0.15
	Viscosidade nominal (kg/m.s)	0.15
	Limite de Escoamento (Pa)	1.0E-06
	Índice de consistência (Pa.s ⁿ)	1.00
	Expoente (adim.)	1.25

Note que a simulação envolvendo fluidos não-Newtonianos acrescenta outra não-linearidade às equações de *Navier-Stokes* atribuída a dependência da viscosidade

com a taxa de deformação do fluido (ver Capítulo 2). Essa nova não-linearidade foi tratada utilizando-se a solução atrasada do processo iterativo no cálculo da viscosidade do passo corrente, similar ao procedimento de linearização que se desenvolve no método de Iterações Sucessivas discutido nas seções anteriores.

O código foi validado a partir dos perfis de velocidade obtidos no *FLOTRAN* para o escoamento laminar dos fluidos da Tabela 6.15 em uma seção reta tubular e são apresentados na Figura 6.26. Nesta figura as linhas cheias indicam os resultados do *FLOTRAN* enquanto os símbolos representam os resultados do código proposto. Os perfis da figura abaixo foram transladados para facilitar a visualização. Note a boa concordância entre os resultados do presente trabalho e os do *FLOTRAN*.

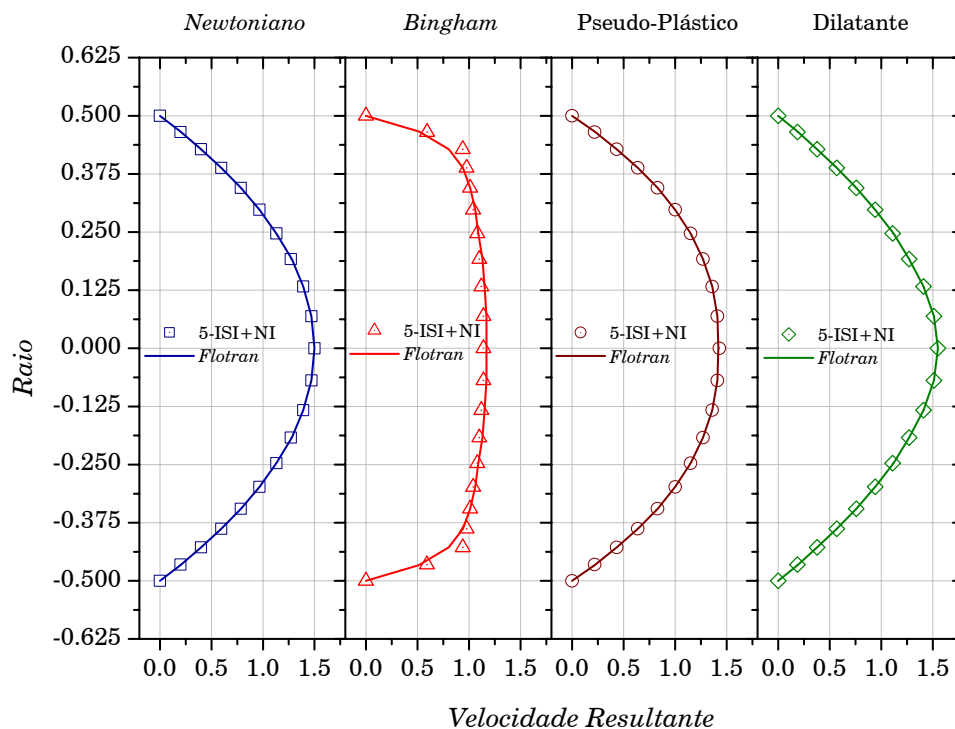


Figura 6.26 – Escoamento laminar no interior de uma seção reta tubular. Comparação entre os resultados obtidos no código proposto (símbolos) e no *FLOTRAN* (linha)

A seguir são apresentados os resultados para o problema do escoamento rotacional no interior de um anular excêntrico para os fluidos da Tabela 6.15. Nas figuras 6.27 a 6.29 abaixo são mostradas as taxas de convergência para cada uma das estratégias de solução descritas nas seções anteriores. Nessas figuras é possível identificar qual método de solução obteve o melhor desempenho em relação ao número de iterações não-lineares. Todos os testes foram efetuados selecionando-se

$\|\mathbf{r}\|/\|\mathbf{r}_0\| = 10^{-6}$ e $\|\mathbf{du}\|/\|\mathbf{u}\| = 10^{-6}$ como critérios de parada do método não-linear. O BiCGSTAB provido de pré-condicionamento bloco diagonal foi selecionado como solucionador linear por ter apresentado o melhor desempenho em testes preliminares.

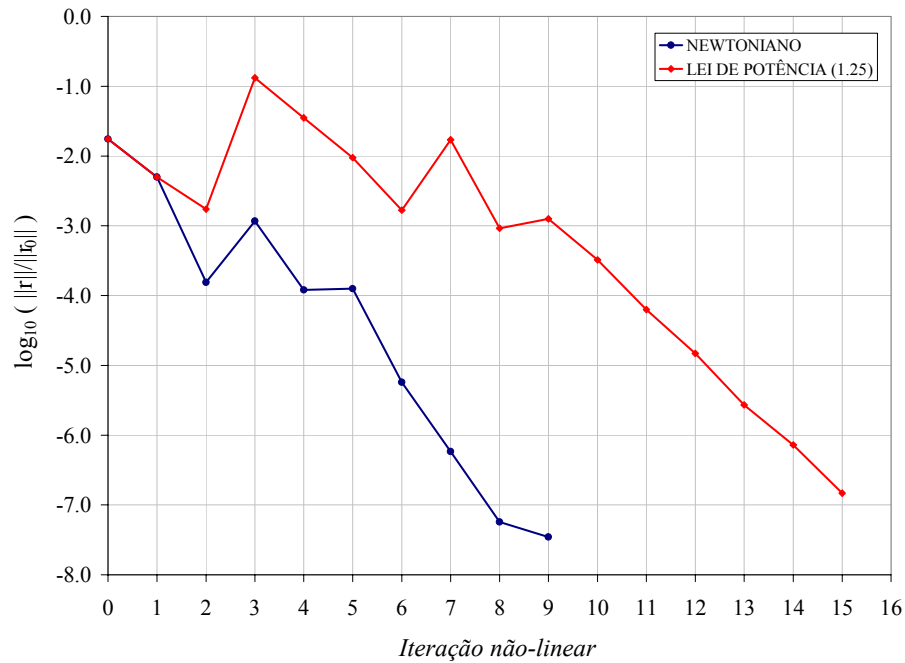


Figura 6.27 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método de Iterações Sucessivas (ISI).

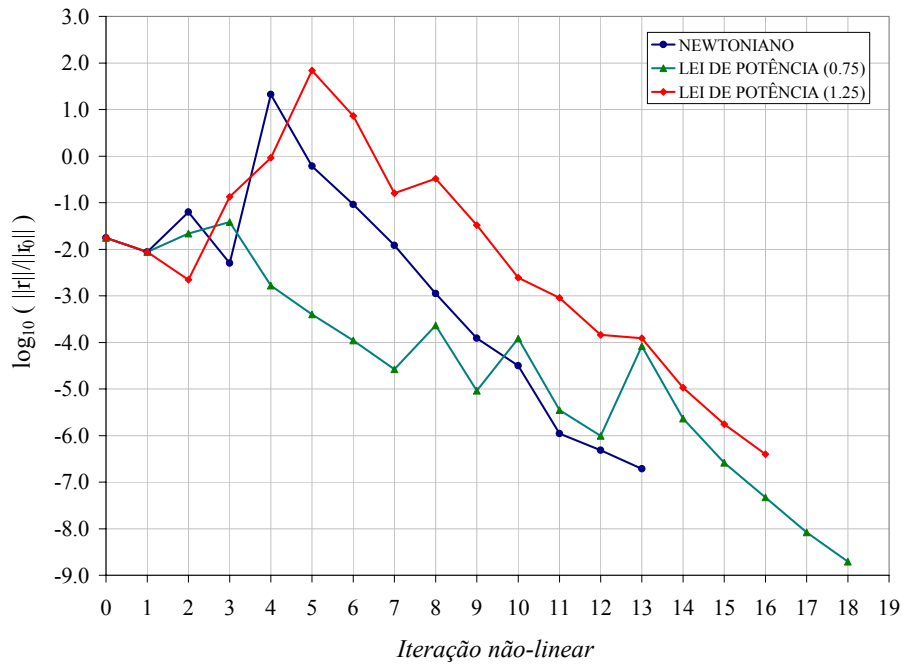


Figura 6.28 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método de *Newton Inexato (NI)*.

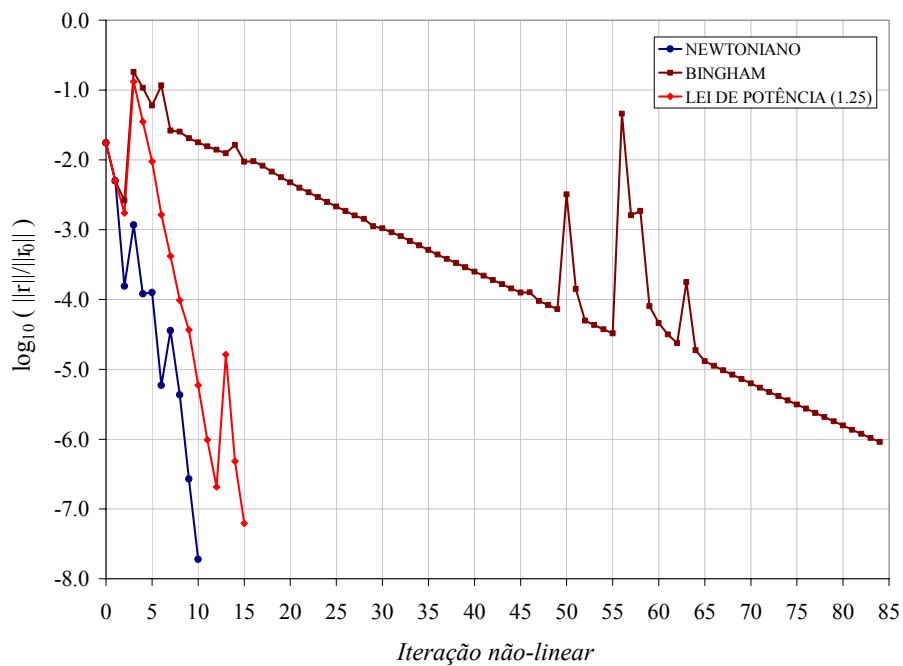


Figura 6.29 – Escoamento rotacional em um anular excêntrico. Taxa de convergência utilizando o método misto (**5ISI+NI**).

Nas figuras acima foram plotados somente os métodos convergentes, logo, pode-se concluir que o método ISI foi o de pior desempenho entre os demais, aplicando-

se somente à solução do escoamento de fluidos *Newtonianos* e dilatantes ($n=1.25$). O método misto (5ISI+NI) foi o que apresentou o melhor desempenho, solucionando três dos quatro problemas propostos. Nota-se que dos fluidos relacionados na Tabela 6.15, os fluidos pseudo-plástico ($n=0.75$) e de *Bingham* foram os que impuseram maior dificuldade de convergência, consumindo um número maior de iterações e sendo solucionados somente pelos métodos NI e 5ISI+NI respectivamente. Entre os fluidos testados o *Newtoniano* foi o de maior facilidade de convergência, não oferecendo dificuldades de convergência a nenhuma das três estratégias utilizadas.

A Tabela 6.16 a seguir mostra um comparativo de desempenho entre o algoritmo implementado e o *FLOTRAN* na solução dos testes com os diversos fluidos anteriormente apresentados.

Tabela 6.16 – Comparativo de desempenho entre o algoritmo implementado e o *FLOTRAN*.

	ISI		NI		5ISI+NI		FLOTRAN	
	#INL	Tempo	#INL	Tempo	#INL	Tempo	#INL	Tempo
Newtoniano	9	4.547	13	8.051	10	4.324	156	6.656
Bingham	ERRO #5		ERRO #5		84	33.902	348	37.781
Pseudo-Plástico	ERRO #5		18	8.574	ERRO #5		190	34.484
Dilatante	15	8.285	16	7.609	15	7.438	130	6.203

ERRO #5 - O solucionador linear divergiu

Note que na maioria dos casos analisados o código proposto obteve desempenho superior ao *FLOTRAN*, realizando em menos tempo um número menor de iterações não-lineares. É importante destacar as diferenças existentes entre os dois algoritmos. Ambos dispõem de formulações e métodos de soluções distintos, porém com objetivos comuns. O *FLOTRAN* provém solucionadores e pré-condicionadores amplamente testados e reconhecidamente mais robustos do que os que foram implementados neste trabalho (maiores detalhes podem ser obtidos em [2]), porém, o resultado dos testes comprova que o algoritmo baseado nos métodos tipo-*Newton* apresenta resultados de mesma qualidade e algumas vezes de desempenho superior ao *FLOTRAN*.

A seguir são apresentados os resultados para o problema do escoamento rotacional no interior de um anular excêntrico para os fluidos da Tabela 6.15.

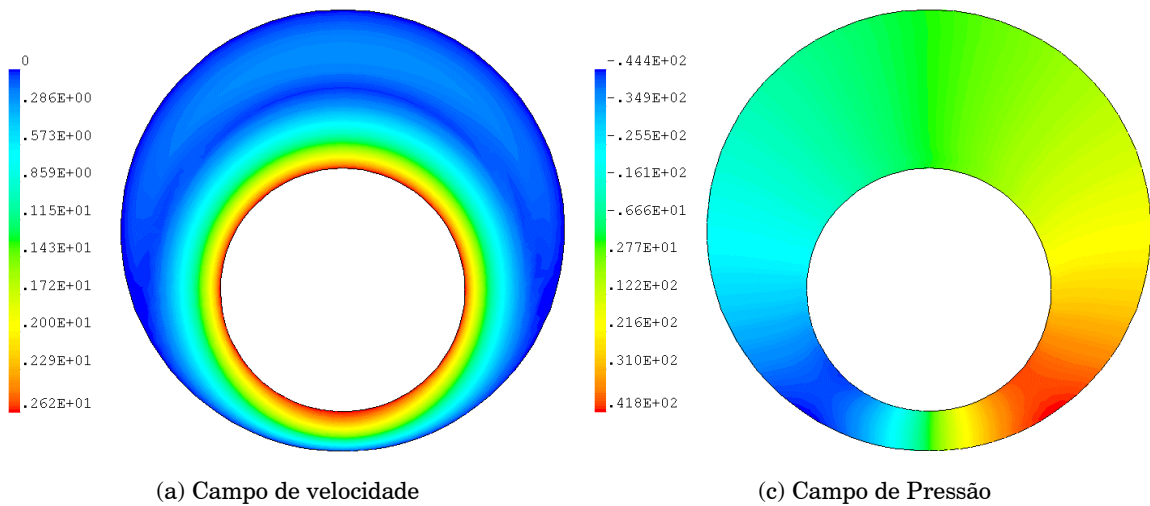


Figura 6.30 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido *Newtoniano* da Tabela 6.15.

Note que a região de maior velocidade coincide com o eixo de rotação da broca, na parte central do modelo, e a formação de uma região de pressão elevada a montante do escoamento ocasionada pelo afunilamento do anular seguida de outra de baixa pressão a jusante.

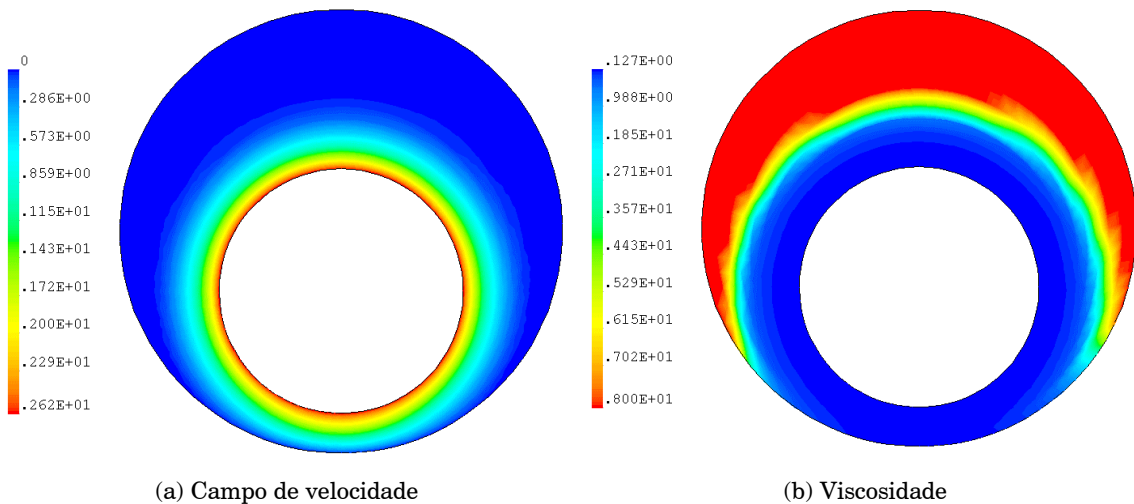


Figura 6.31 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido de *Bingham* da Tabela 6.15.

Observe nas figuras 6.31a e 6.31b que para as regiões mais afastadas do eixo de rotação o fluido se movimenta mais lentamente e conseqüentemente tende a enrijecer, caracterizando o comportamento apresentado por fluidos de *Bingham*.

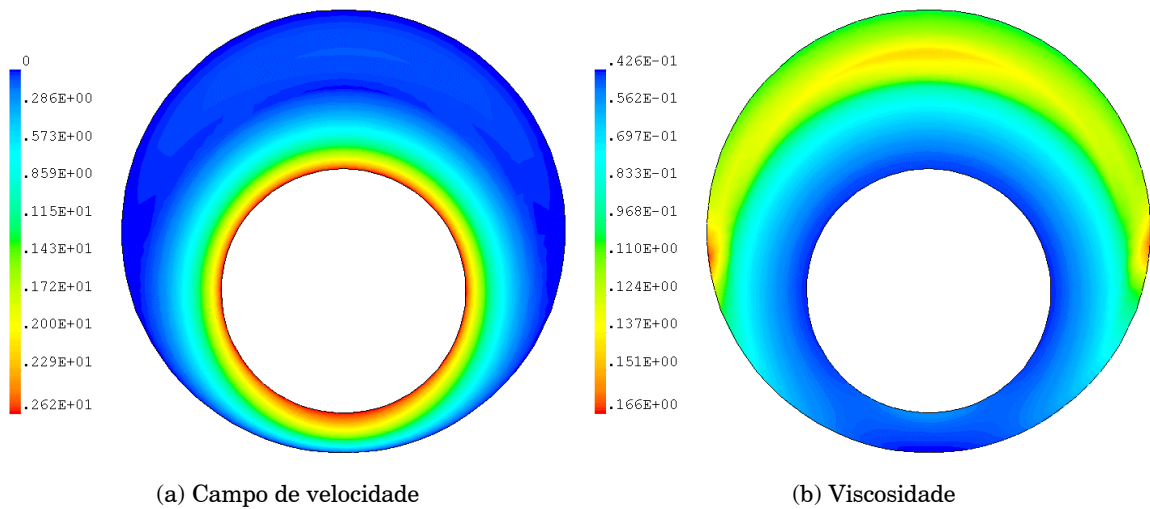


Figura 6.32 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido Pseudo-Plástico da Tabela 6.15.

Comparando-se as figuras 6.32a e 6.32b acima se nota que nas regiões próximas ao eixo de rotação, onde o fluido “acompanha” o movimento da coluna de perfuração, o fluido se desloca mais rapidamente e a viscosidade aparente do fluido tende a diminuir. O efeito contrário também pode ser visualizado. O fluido tornando-se mais viscoso à medida que se afasta do eixo de rotação.

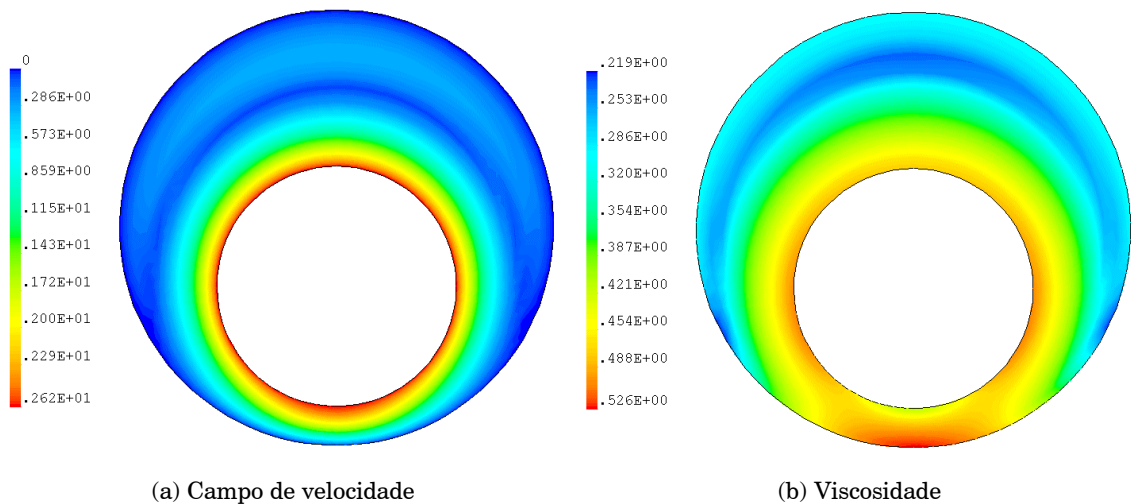


Figura 6.33 – Solução estacionária para o escoamento rotacional em um anular excêntrico utilizando o fluido Dilatante da Tabela 6.15.

Novamente observa-se que o resultado da simulação conseguiu reproduzir adequadamente o comportamento do fluido. Para fluidos dilatantes a viscosidade é diretamente proporcional à taxa de deformação, desta forma, pode-se deduzir que nas

regiões mais próximas ao eixo de rotação o fluido tende a ser mais viscoso e à medida que se afasta torna-se menos viscoso.

Capítulo 7

Conclusões

Este trabalho apresentou uma implementação da formulação estabilizada SUPG/PSPG utilizando funções de interpolação de mesma ordem para velocidade e pressão em elementos triangulares para as equações de *Navier-Stokes* incompressíveis em regime permanente, tratando-se fluidos *Newtonianos* e não-*Newtonianos*. Foi desenvolvido um algoritmo de solução baseado em métodos não-lineares tipo *Newton* Inexatos enfatizando a flexibilidade de avaliação da matriz de rigidez tangente. Isto possibilitou a conjugação de diversas técnicas de solução e conseqüentemente uma melhor abordagem para as dificuldades apresentadas por alguns problemas. Os sistemas localmente lineares oriundos dos métodos de *Newton* foram abordados a partir da implementação de três solucionadores lineares baseados nos métodos iterativos de *Krylov* utilizando três técnicas simples de pré-condicionamento, permitindo com isso, que várias possibilidades de solução fossem testadas quando à eficiência, estabilidade e precisão. O tratamento de fluidos não-*Newtonianos* foi abordado com intuito de expandir as potencialidades do código desenvolvido, obtendo-se soluções condizentes com as obtidas no pacote comercial *FLOTRAN* da *Ansys Inc.* Os procedimentos de retrocesso implementados segundo os parâmetros sugeridos na literatura, não foram efetivos na tentativa de remover as instabilidades apresentadas pelo método de *Newton* em alguns dos problemas. Isto indica ainda haver um vasto campo de testes a serem efetuados com os diversos parâmetros de controle inerentes a tais técnicas. TUMINARO e WALKER em [50] reportaram a possibilidade de perda de robustez, quando o método de *Newton* Inexato determina pequenas tolerâncias

para o solucionador linear na solução das equações de *Navier-Stokes* em regime permanente com transporte de massa e calor.

Com base nos resultados apresentados no Capítulo 6 pôde-se concluir que os métodos tipo-*Newton* representaram ganhos expressivos de desempenho em relação ao método de *Newton* convencional, chegando a superar o *FLOTRAN* com menor número de iterações e tempo de CPU, mesmo utilizando técnicas de pré-condicionamento simples, como visto nos testes com fluidos não-*Newtonianos*. A matriz tangente implementada por derivação numérica, como sugerido em [45], apresentou desempenho variável nos testes realizados, indicando haver possibilidades de melhorias de convergência com o uso de técnicas “mais analíticas” como as utilizadas por PERIĆ e SLIJEPCĀEVIĆ em [34] e [41]. Dos três solucionadores avaliados o GMRES foi o que apresentou o melhor desempenho global, com boa estabilidade e velocidade de convergência, porém, é importante ressaltar que o BiCGSTAB demonstrou grande potencialidade na solução de alguns problemas, chegando a superar o GMRES em desempenho. Nos testes com fluidos não-*Newtonianos* a estratégia mista (5ISI+NI) foi a que obteve o melhor desempenho global, solucionando a maioria dos problemas em menos tempo de execução e consumindo um número menor de iterações não-lineares, confirmando os resultados obtidos por CHOW *et al* em [10] ao aplicar independentemente, uma técnica semelhante na solução de problemas de glaciologia. Os testes com diferentes números de *Reynolds* mostraram que com o aumento da velocidade do escoamento, os termos convectivos da equação de *Navier-Stokes* tornam-se mais pronunciados e passam a exibir um caráter maior de não-linearidade dificultando o processo de solução. A diversidade das respostas apresentadas pelo algoritmo, ao ser submetido aos problemas descritos no Capítulo 6, apontam para o fato de que o sucesso da simulação dos fenômenos aqui abordados, dependem fundamentalmente da habilidade em se lidar com as diferentes técnicas de solução não-linear, juntamente com seus parâmetros de controle, bem como, do uso consciente dos solucionadores lineares e seus pré-condicionadores.

Trabalhos Futuros

Dando prosseguimento ao trabalho aqui iniciado são sugeridos os seguintes estudos futuros:

- Extensão do código de forma a abranger problemas transientes e tridimensionais como em [42], [43], [44], [47], [48] e [49];
- Implementação de estruturas de dados por arestas conforme descrito nos trabalhos de MARTINS [29] e CATABRIGA [8], [9];
- Desenvolvimento e teste de pré-condicionadores mais robustos;
- Implementação de *Jacobianos* analíticos como em [34], [38] e [41] ou derivadas direcionais associadas à uma estrutura livre de matrizes (*Matrix-Free*) [27];
- Desenvolvimento de uma metodologia de testes dos parâmetros de controle de retrocesso utilizados pelos métodos tipo-*Newton* Inexatos;
- Versão para máquinas de processamento distribuído (*Clusters*) utilizando a biblioteca MPI disponível em <http://www.mpi.org>;
- Acoplamento de fenômenos de transporte de massa e/ou energia, para análise da mesma classe de problemas descrita em [51] e [38].

Referências

- [1] ALVES, J. L. D., *Estudos para Evitar Prisão de Coluna em Poços de Grande Inclinação e Afastamento*, Relatório Técnico, Projeto CTPetro 793, COPPETEC, 2002.
- [2] ANSYS INC., *Ansys Theory Reference*, cp. 7 – Fluid Flow.
- [3] ARMANLY, B. F., DURST, F., PEREIRA, J. C. F. AND SCHÖNUNG, B., *Experimental and Theoretical Investigation of Backward-Facing Step Flow*, J. Fluid Mech., Vol. 127, pp. 473-496, 1983.
- [4] BARRET, R., BERRY, M., CHAN, T. F., DEMMEL, J., DONATO, J. M., DONGARRA, J., EIJKHOUT, V., POZO, R., ROMINE, C. AND VORST, H. V., *Templates for the Solution of Linear System: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, Philadelphia, 1994. <http://www.netlib.org>.
- [5] BIRD, R. B., STEWART, W. E. AND LIGHTFOOT, E. N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, 1960.
- [6] BOSE, A. AND CAREY, G. F., *Least-Squares p-r Finite Element Methods for Incompressible non-Newtonian Flows*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. , 180, pp. 431-458, 1999.
- [7] BROOKS, A. N. and HUGHES, T. J. R., *Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows With Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equation*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 32, pp. 199-259, 1982.
- [8] CATABRIGA, L. AND COUTINHO, A. L. G. A., *Implicit SUPG Solution of Euler Equation of Euler Equation Using Edge-Based Data Structures*,

Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. , 191, pp. 3477-3490, 2002.

- [9] CATABRIGA, L., *Soluções Implícitas das Equações de Euler Empregando Estrutura de Dados por Arestas*, Tese de Doutorado - COPPE/UFRJ, Maio 2000. (ISBN 85-87978-03-09).
- [10] CHOW, S. S., CAREY, G. F. AND ANDERSON, M. L., *Finite Element Approximations of a Glaciology Problem*, submetido, 2003.
- [11] CROCHET, M. J., DAVIES, A. R. AND WALTERS, K., *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*, Elsevier, Rheology Series, Amsterdam, Vol. 1, 1984.
- [12] DEMBO, R., S., EISENSTAT, S. C. AND STEIHAUG, T., *Inexact Newton Methods*, SIAM J. Numer. Anal., 19, pp. 400-408, 1982.
- [13] EISENSTAT, S. C. AND WALKER, H. F., *Choosing the Forcing Terms in Inexact Newton Method*, SIAM. J. Sci Comput. 17-1, 16-32, 1996.
- [14] EISENSTAT, S. C. AND WALKER, H. F., *Globally Convergent Inexact Newton Methods*, SIAM J. Optim., 4, pp. 393-422, 1994.
- [15] FISHER, K. A., WAKEMAN, R. J., CHIU, T. W. AND MEURIC, O. F. J., *Numerical Modeling of Cake Formation and Fluid Loss from Non-Newtonian Muds During Drilling Using Eccentric/Concentric Drill Strings with/without Rotation*, Trans IChemE, Vol. 78, Part A, July 2000.
- [16] FLUENT INC., *Theory Manual FIDAP 8, December 1998*.
- [17] FOX, R. W. AND McDONALD, A. T., *Introdução à Mecânica dos Fluidos*, LTC, 5a. ed., 1998.
- [18] FREUND, R. W., *A Transpose-free Quasi-minimal Residual Algorithm for Non-Hermitian Linear System*, SIAM J. Sci. Comput., 14, pp. 470-482, 1993.

- [19] FREUND, R. W. AND NACHTIGAL, *QMR: A Quasi-Minimal Residual Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems*, Numer. Math., 60, pp. 315-339, 1991.
- [20] GARTLING, D. K., *A Test Problem for Outflow Boundary Conditions – Flow Over a Backward-Facing Step*, Internat. J. Numer. Methods Fluids, Vol. 11, 953-967, 1990.
- [21] GRIEBEL, M., DORNSEIFER, T. AND NEUNHOEFFER T., *Numerical Simulation in Fluid Dynamics – A Practical Introduction*, SIAM, Philadelphia, 1998.
- [22] HEATH, M. T., *Nonlinear Equations – Lecture Notes to Accompany, Scientific Computing an Introductory Survey*, Chapter 5, 1997.
- [23] HUANG, H. C., LI, Z. H. AND USMANI, A. S., *Finite Element Analysis of Non-Newtonian Flow*, Springer-Verlag, London, 1999.
- [24] HUGHES, T. J. R., *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*, Prentice-Hall, Inc., 1987.
- [25] HUGHES, T. J. R., FRANCA, L. P. AND BALESTRA, M., *A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi Condition: A Stable Petrov-Galerkin Formulation of the Stokes Problem Accommodating Equal-Order Interpolations.*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 59, pp. 85-99, 1986.
- [26] HUGHES, T. J. R., FRANCA, L. P. AND HULBERT, G. M., *A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: VII. The Galerkin/Least-Square Method for Advective-Diffusive Equations*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 73, pp. 173-189, 1989.
- [27] JOHAN, Z. AND HUGHES, T. J. R., *A Globally Convergent Matrix-Free Algorithm for Implicit Time-Marching Schemes Arising in Finite Element*

Analysis in Fluids, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 87, pp. 281-304, 1991.

- [28] KELLEY, C. T., *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations - Frontiers in applied mathematics*, SIAM, Philadelphia, 1995.
- [29] MARTINS, M. A. D., *Estrutura de Dados por Arestas para a Solução de Problemas de Plasticidade Computacional*, Tese de Doutorado – COPPE/UFRJ, Maio 2001.
- [30] MEISTER, A. AND VÖMEL, C., *Efficient Preconditioning of Linear Systems Arising from the Discretization of Hyperbolic Conservation Laws*, Computational Fluid Dynamics and Data Analysis, 10 – July 1999
- [31] MEURIC, O. F. J., WAKEMAN, R. J., CHIU, T. W. AND FISHER, K. A., *Numerical Flow Simulation of Viscoplastic Fluids in Annuli*, The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 76, February 1998.
- [32] ORTEGA, J. M. AND RHEINBOLDT, *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press, New York, 1970.
- [33] PAPADRAKAKIS, M., *Solving Large-Scale Problems in Mechanics: The Development and Application of Computational Solution Procedures*, John Wiley & Sons, England, 1993.
- [34] PERIĆ, D. AND SLIJEPČEVIĆ, S., *Computational Modelling of Viscoplastic Fluids Based on a Stabilised Finite Element Method*, Engineering Computations, Vol. 18 - No. 3/4, pp. 577-591, 2001.
- [35] PERNICE, M. AND WALKER, H. F., *NITSOL: A Newton Iterative Solucionador for Nonlinear Systems*, SIAM J. Sci. COMPUT., Vol. 19, No. 1, pp. 302-318, January 1998.
- [36] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., FLANNERY, B. P., *Numerical Recipes in Fortran 77 – The Art of Scientific Computing*,

- [37] SAAD, Y., *Iterative methods for sparse linear systems*, Boston, PWS Publishing Company, 1996
- [38] SHADID, J. N., TUMINARO, R. S., WALKER, H. F., *An Inexact Newton Method for Fully-Coupled Solution of the Navier-Stokes Equations with Heat and Mass Transport*, SANDIA Report, SAND97-0132 UC-405, February 1997.
- [39] SHAKIB, F., HUGHES, T. J. R. AND JOHAN, Z., *A Multi-element Group Preconditioned GMRES Algorithm for Nonsymmetric Systems Arising in Finite Element Analysis*, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 75, 415-456, Sep. 1989.
- [40] SHERMAN, A. H., *On Newton-Iterative Methods for the Solution of Systems of Nonlinear Equations*, *SIAM J. Numer. Anal.*, 15, pp. 755-771, 1978.
- [41] SLIJEPČEVIĆ, S. AND PERIĆ, D., *Some Aspects of Computational Modeling of Non-Newtonian Fluid Based on Stabilised Finite Element Methods*, ECCOMAS 2000, Barcelona, September 2000
- [42] TEZDUYAR, T. E. AND OSAWA, Y., *Finite Element Stabilization Parameters Computed from Element Matrices and Vectors*, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190, pp. 411-430, 2000.
- [43] TEZDUYAR, T. E., *Adaptative Determination of the Finite Element Stabilization Parameters*, Rice University – Mechanical Engineering and Materials Science, 2001.
- [44] TEZDUYAR, T. E., *CFD Methods for Three-Dimensional Computation of Complex Flow Problems*, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 81, pp. 97-116, 1999.
- [45] TEZDUYAR, T. E., *Finite Elements In Fluids: Lecture Notes of the Short*

Course on Finite Elements in Fluids, Computational Mechanics Division – Vol. 99-77, Japan Society of Mechanical Engineers, Tokyo, Japan, 1999.

- [46] TEZDUYAR, T. E., MITTAL S., RAY S. E. AND SHIH R., *Incompressible Flow Computations with Stabilized Bilinear and Linear Equal-Order-Interpolation Velocity-Pressure Elements*, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 95, pp. 221-242, 1992.

- [47] TEZDUYAR, T. E., MITTAL, S. AND SHIH, *Time-Accurate Incompressible Flow Computations with Quadrilateral Velocity-Pressure Elements*, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 87, pp. 363-384, 1991.

- [48] TEZDUYAR, T. E., *Stabilization Parameters and Local Length Scales in SUPG and PSPG Formulations*, *Proceedings of the Fifth World Congress on Computational Mechanics (WCCM V)*, July 7-12, 2002, Vienna, Austria (ISBN 3-9501554-0-6).

- [49] TEZDUYAR, T. E., *Stabilized Finite Element Formulations for Incompressible Flow Computations*, *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 28 – 1992

- [50] TUMINARO, R. S., WALKER, H. F. AND SHADID, J. N., *On Backtracking Failure in Newton-GMRES Methods with a Demonstration for the Navier-Stokes Equations*, Accepted for publication in *JCP*, 190, pp. 549-558, 2002.

- [51] VALLI, A. M. P., CAREY, G. F. AND COUTINHO, A. L. G. A., *Control Strategies for Timestep Selection in Simulation of Coupled Viscous Flow and Heat Transfer*, *Commun. Numer. Meth. Engng*, 18, pp. 131-139, 2002.

- [52] VAN DER VORST, H. A., *BiCGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems*. *SIAM Journal and Statistic Computing*, 13(2), pp. 631-644, 1992.