

CAPÍTULO 4

MÉTODOS NUMÉRICOS

Para solucionar a equação contínua de conservação da quantidade de movimento para a mesoescala, será utilizado o método dos elementos finitos. Este método consiste na divisão do domínio computacional em um número finito de *elementos*. Os elementos são subdomínios não sobrepostos, interconectados por um número discreto de pontos nodais situados em seus contornos (ZIENKIEWICZ, 1971).

Nesta tese, foram escolhidos elementos triangulares, por estes se adequarem melhor a geometrias mais complexas. Em MACHADO (1998), é apresentada uma metodologia para a geração de malhas bidimensionais de elementos triangulares, tendo como objetivo a modelagem de meios multicomponentes, como materiais compósitos e meios porosos. O código computacional proveniente do trabalho acima citado foi incorporado ao programa de cálculo desenvolvido nesta tese.

4.1. Geração de Domínios

Antes de iniciar a geração da malha, é necessário um pré-processamento que defina a geometria do domínio computacional correspondente, onde será simulado o escoamento. A geração da forma final da célula periódica de interesse é baseada no *Diagrama de Voronoi*. Pode-se definir este diagrama da seguinte maneira (PREPARATA & SHAMOS, 1995; MACHADO, 1998): “*O Diagrama de Voronoi de um conjunto finito S de n pontos em um plano é uma partição do plano em n regiões de modo que cada região i da partição, $i = 1, \dots, n$, é o lugar geométrico de pontos que estão mais próximos do i -ésimo membro de S do que de qualquer outro membro.*”

Em outras palavras, dado um conjunto de n pontos (chamados geradores) em um plano, o Diagrama de Voronoi identifica n regiões (chamadas lajotas) cujos pontos interiores estão mais próximos do gerador correspondente do que de qualquer outro

gerador. Para o problema de escoamento em meios porosos fibrosos, os geradores são os centros das fibras. Esses centros são posicionados randomicamente, de acordo com uma função densidade de probabilidade uniforme no espaço disponível (adição seqüencial randômica, CRUZ & PATERA, 1995), isto é, no espaço onde a fibra a ser posicionada não irá interceptar nenhuma outra preexistente. Assim, a lajota é o lugar geométrico dos pontos que estão mais próximos do centro da fibra correspondente do que de qualquer outro centro. A vantagem de se basear o domínio no Diagrama de Voronoi é que, por construção, nunca haverá interseção entre uma fibra e quaisquer arestas da célula. Isso porque a distância entre dois centros de fibras de lajotas vizinhas é maior ou igual ao diâmetro das fibras, e a aresta compartilhada pelas lajotas é equidistante a esses centros.

Para a geração da célula Voronoi, faz-se uso de um programa escrito em linguagem FORTRAN 77, utilizado em MACHADO (1998), que incorpora a rotina VORONOI2, de SUGIHARA & IRI (1989). Um arquivo texto fornece os parâmetros de entrada para o programa, que gera o domínio de interesse, como o número de fibras, a concentração e o nível de refino da malha. Este arquivo é detalhado no Anexo A.1.

O domínio gerado é armazenado em um outro arquivo texto, detalhado no Anexo A.2, arquivo este que será utilizado pelo programa que calcula a permeabilidade do meio poroso. A Figura 4.1 apresenta um exemplo de célula Voronoi composta de 5 lajotas, replicada nas duas direções, evidenciando a sua periodicidade.

4.2. Geração de Malhas

A partir da leitura do arquivo com os dados geométricos e topológicos do domínio, é dado início ao processo de geração da malha de elementos finitos. O processo é iniciado com a distribuição dos pontos nas fronteiras da célula, seguido da geração da malha propriamente dita. Em uma célula, a malha é gerada separadamente e seqüencialmente em cada lajota, ou seja, os pontos são distribuídos nas arestas (fronteiras retas) de cada lajota e, em seguida, são distribuídos no contorno da fibra (fronteira curva). A partir desses pontos, é feita a triangulação da lajota.

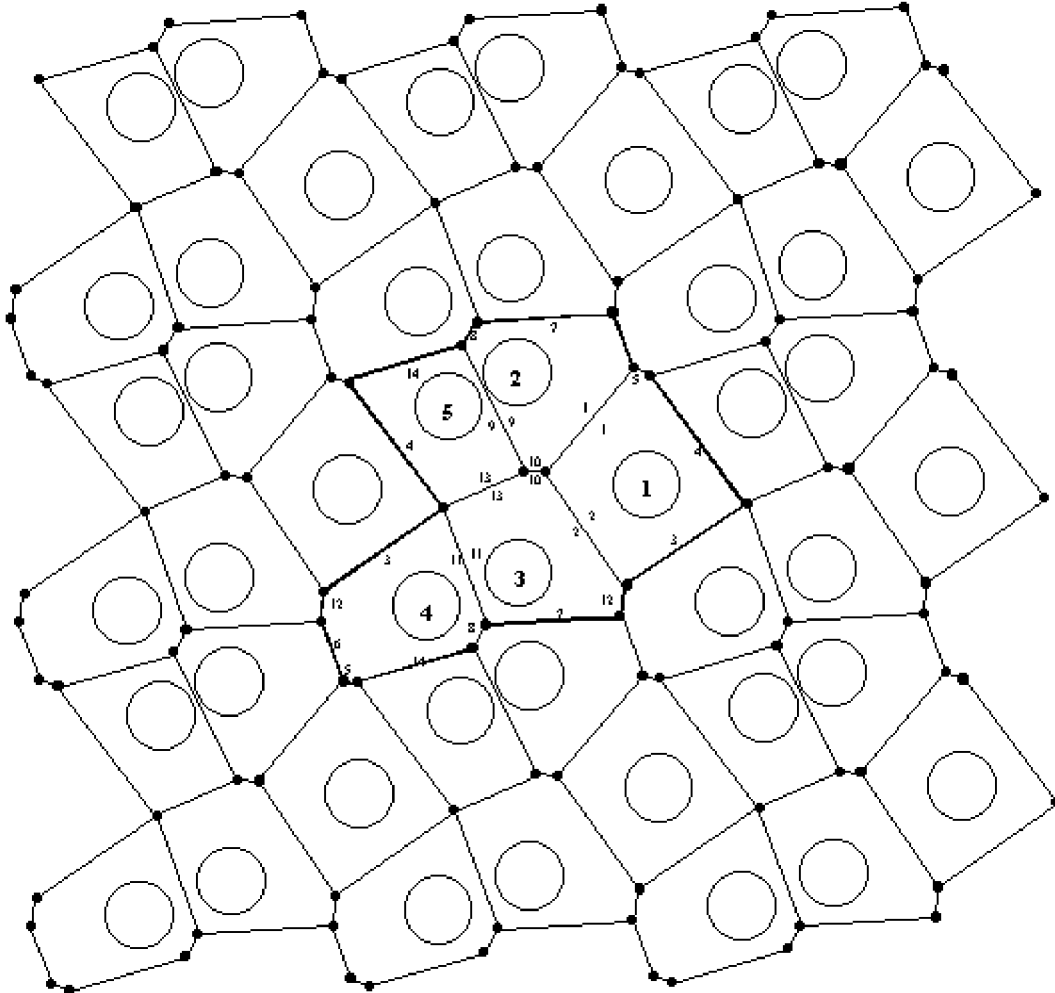


Figura 4.1 - Célula Voronoi com 5 lajotas, replicada nas duas direções.

Nas fronteiras da lajota, a distância entre dois nós consecutivos da malha é definida pela função de distribuição utilizada em CRUZ & PATERA (1995) e em MACHADO (1998),

$$h_r(\mathbf{y}_f) = \frac{1}{n_r} \left[\frac{1}{m/d_H(\mathbf{y}_f) + 1/h_o} \right], \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{y}_f = (y_{1f}, y_{2f})$ denota um nó de fronteira; h_r é o espaçamento real da malha entre dois nós de fronteira; $d_H(\mathbf{y}_f)$ é a distância entre o nó \mathbf{y}_f de uma fronteira (reta ou curva) e o ponto mais próximo na outra fronteira (curva ou reta), como mostrado na Figura 4.2; h_o é o espaçamento pré-definido da malha; m é o número mínimo de segmentos entre o cilindro e qualquer aresta; e n_r é o parâmetro de refino global da malha.

A Equação (4.1) possui diversas características apropriadas para o meio poroso de interesse nesta tese (CRUZ & PATERA, 1995). O parâmetro de refino global da malha permite que se obtenha um refino uniforme da malha em todo o domínio. A equação para h_r gera uma malha mais refinada nas regiões entre duas ou mais fibras muito próximas. Esta equação garante também que no mínimo $2m$ segmentos existam entre cilindros de lajotas adjacentes. Além disso, a equação garante que o valor de h_r em um vértice seja igual para todas as arestas que o contêm, o que evita a geração de triângulos distorcidos nos cantos das lajotas.

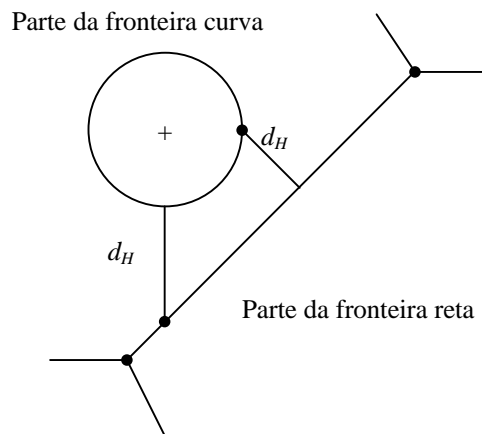


Figura 4.2 - Distâncias $d_H(\mathbf{y}_f)$ para um ponto na fronteira reta e para um ponto na fronteira curva.

Para a distribuição de pontos nas fronteiras da lajota, quatro casos devem ser considerados em separado: (i) lajotas onde não há eliminação de regiões de estreito; (ii) lajotas onde há uma eliminação de região de estreito, na qual ocorre a união de dois

círculos (limite inferior); (iii) lajotas onde há mais de uma eliminação de região de estreito, de limite inferior; (iv) e lajotas onde há uma ou mais eliminações de regiões de estreito, nas quais ocorre corte do círculo (limite superior).

No primeiro caso, onde não há eliminação de regiões de estreito, os pontos são distribuídos inicialmente sobre as arestas da lajota e, em seguida, sobre o contorno do círculo. O primeiro nó de uma aresta é coincidente com um de seus vértices; desse nó em diante, o espaçamento entre os pontos é definido pela Equação (4.1), conforme descrito anteriormente. O último nó coincide com o outro vértice da lajota (ver detalhes em MACHADO, 1998).

Se ocorrer a eliminação de apenas uma região de estreito, de limite inferior, a distribuição de pontos é feita de modo diferente. Na lajota apresentada na Figura 4.3, os pontos são gerados normalmente nas arestas 1, 2, 4 e 5. Na aresta 3, os pontos são gerados inicialmente no segmento 1, em seguida no segmento AC, no arco de círculo CD, no segmento DB e no segmento 2. O espaçamento entre dois pontos consecutivos nos segmentos AC e BD é calculado a partir do espaçamento entre os dois últimos pontos do segmento 1; este valor é ajustado de modo que haja um espaçamento constante nos segmentos.

No caso de haver eliminação de mais de uma região de estreito, de limite inferior, os pontos são distribuídos de outra maneira. Na lajota apresentada na Figura 4.4, a distribuição dos pontos é feita independentemente nas regiões 1 e 2. Na região 1, inicialmente são gerados pontos sobre o segmento 1, em seguida sobre o segmento AC, o arco de círculo CH, o segmento HF, o segmento 4 e as arestas 4 e 5. Na região 2, a distribuição de pontos se dá de maneira semelhante. Nos segmentos AC, BD, EG e FH os pontos são distribuídos com o mesmo critério utilizado nos segmentos AC e BD do caso anterior.

No quarto e último caso, havendo eliminações de regiões de estreito de limite superior, a distribuição de pontos é feita similarmente ao primeiro caso, em que não há regiões de estreito. A única diferença se deve ao espaçamento entre pontos nos segmentos retos no contorno do círculo cortado e nas projeções desses segmentos

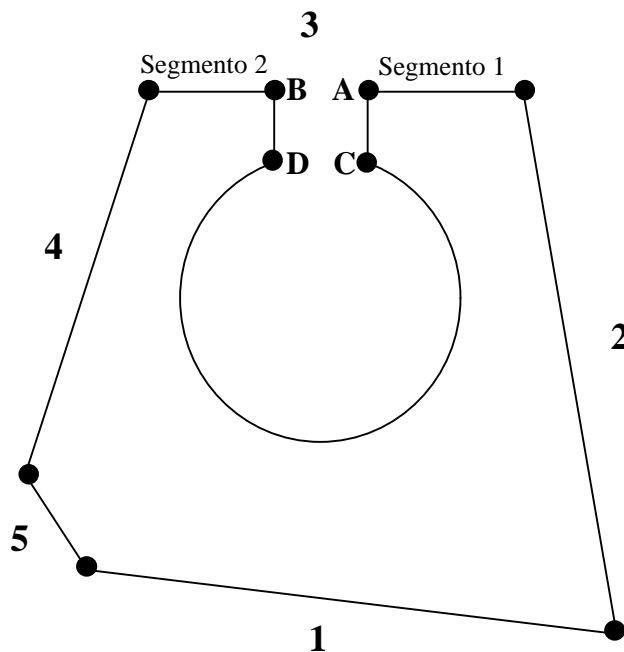


Figura 4.3 - Lajota com apenas uma região de estreito, de limite inferior.

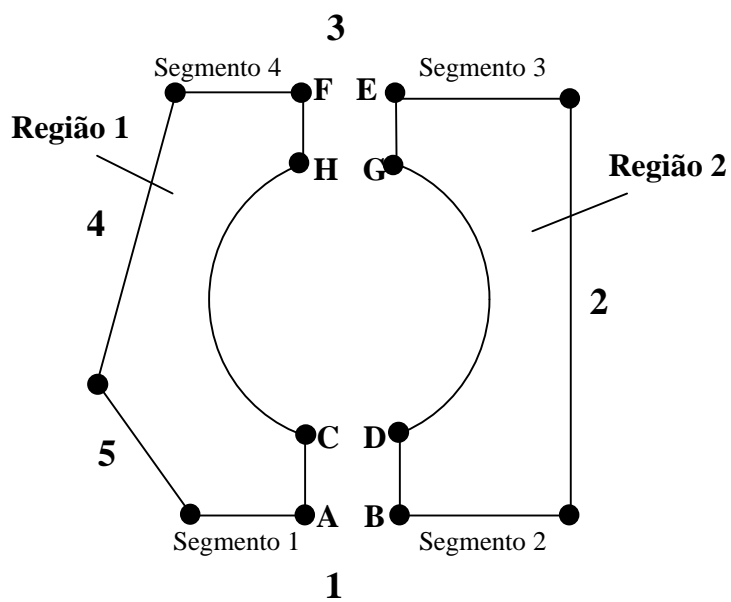


Figura 4.4 - Lajota com mais de uma região de estreito, de limite inferior.

nas arestas da lajota. Na Figura 4.5, os pontos são distribuídos normalmente nas arestas 1, 2, 4 e 5, nos segmentos 1 e 2 e no arco de círculo DC. O espaçamento entre dois pontos consecutivos nos segmentos AB e CD é calculado a partir do espaçamento entre os dois últimos pontos do segmento 1; este valor é ajustado de modo que haja um espaçamento constante nos segmentos.

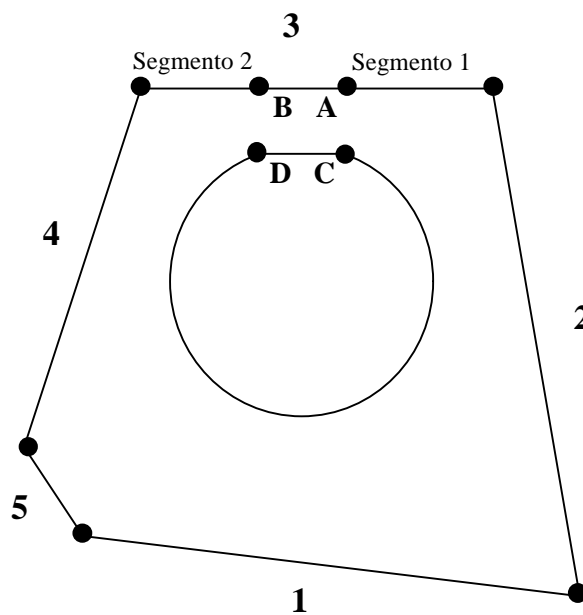


Figura 4.5 - Lajota contendo região de estreito, de limite superior.

Feita a distribuição de todos os nós nas fronteiras de uma lajota, é chamada a rotina MSHPTG (HECHT & SALTEL, 1990), que realiza a triangulação do seu domínio. Então, uma nova lajota é processada, e assim sucessivamente, até que a malha tenha sido gerada em todo o domínio da célula. Feito isso, calcula-se o campo de velocidades e a permeabilidade para a célula em questão, cálculos estes que serão descritos nas seções a seguir. As Figuras 4.6 a 4.13 apresentam exemplos de malhas geradas, divididas em três séries. Para que as malhas fiquem visualmente adequadas, o valor de h_o escolhido para as malhas dessas figuras é maior que o valor utilizado para a geração dos resultados (Capítulo 5).

Na primeira série, é considerada uma célula periódica contendo 5 lajotas. As malhas são geradas nos domínios sem eliminação das regiões de estreito (Figura 4.6), com eliminação das regiões de estreito utilizando limite inferior (Figura 4.7) e com eliminação das regiões de estreito utilizando limite superior (Figura 4.8).

Na segunda série, é considerada uma célula periódica contendo 32 lajotas. São apresentadas, similarmente à primeira série, três figuras contendo malha sem eliminação das regiões de estreito (Figura 4.9), com eliminação das regiões de estreito utilizando limite inferior (Figura 4.10) e com eliminação das regiões de estreito utilizando limite superior (Figura 4.11).

Na terceira série, foi selecionado um domínio contendo 32 lajotas no qual não é possível a geração de malhas sem que haja eliminação das regiões de estreito. São apresentadas apenas duas figuras, contendo malha com eliminação das regiões de estreito utilizando limite inferior (Figura 4.12) e com eliminação das regiões de estreito utilizando limite superior (Figura 4.13).

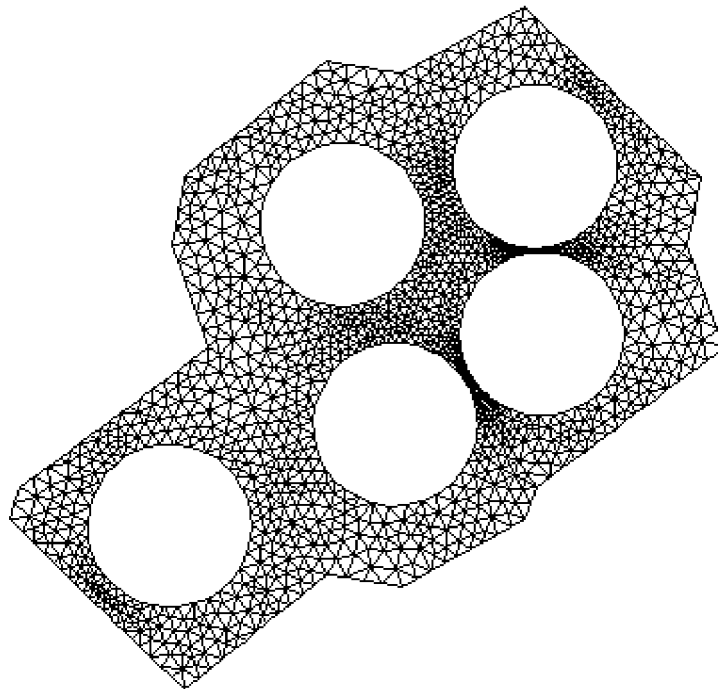


Figura 4.6 - Malha em célula contendo 5 lajotas, sem eliminação de regiões de estreito, 1906 vértices, 2994 triângulos.

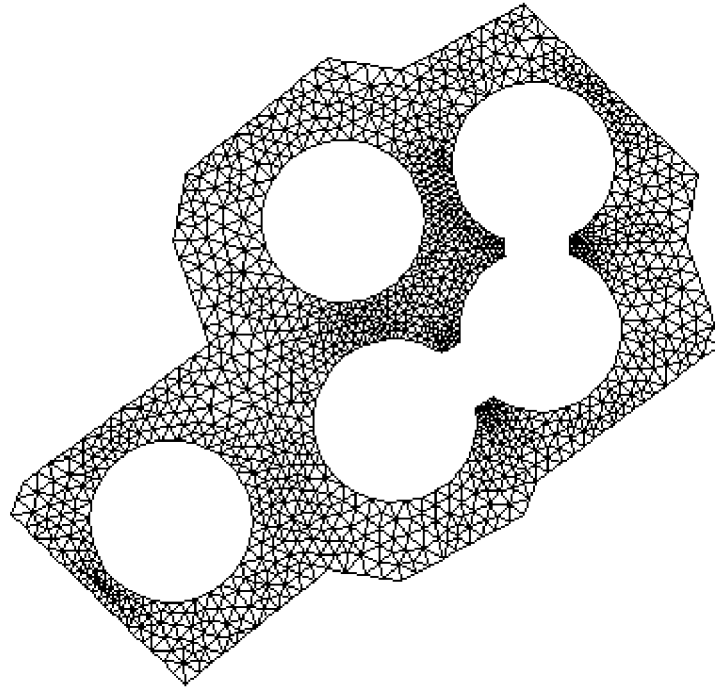


Figura 4.7 - Malha em célula contendo 5 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através da união das fibras, 1478 vértices, 2371 triângulos.

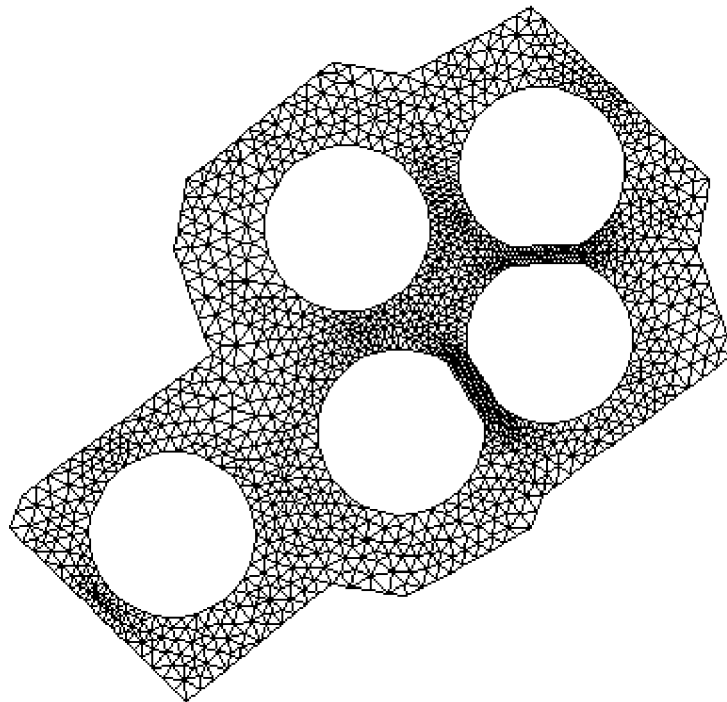


Figura 4.8 - Malha em célula contendo 5 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através do corte das fibras, 1668 vértices, 2655 triângulos.

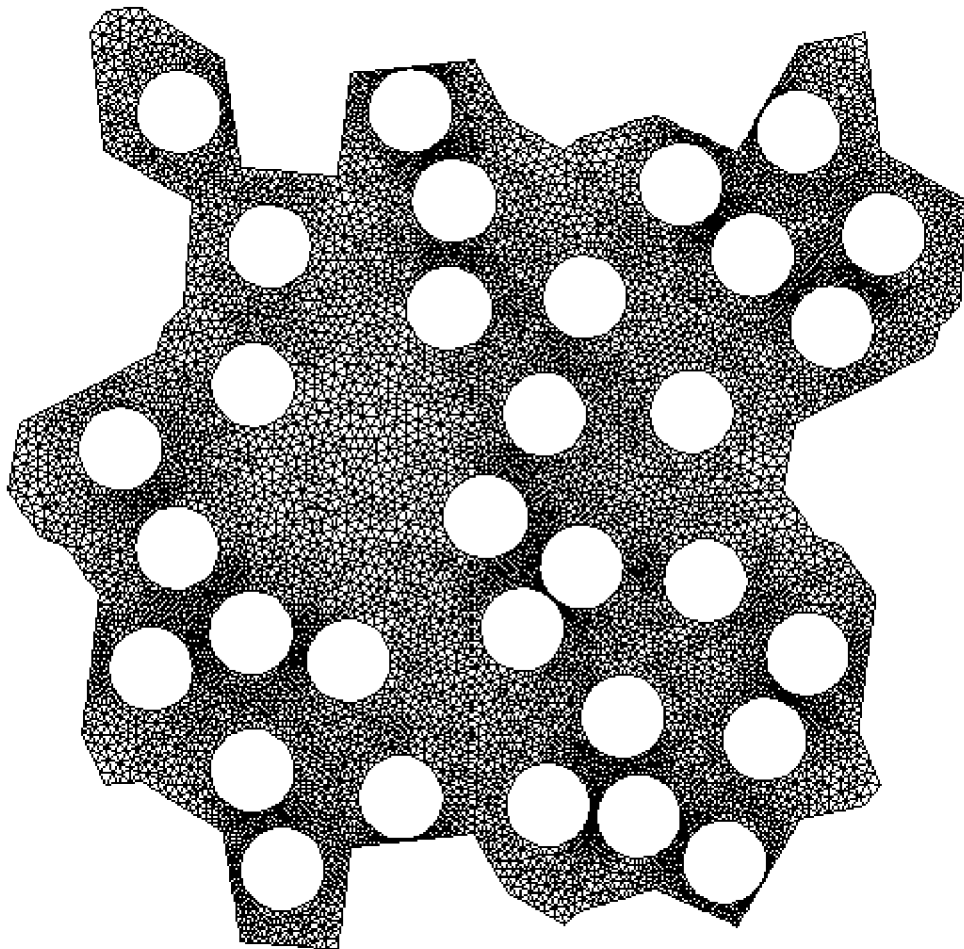


Figura 4.9 - Malha em célula contendo 32 lajotas, sem eliminação de regiões de estreito, 11381 vértices, 18600 triângulos.

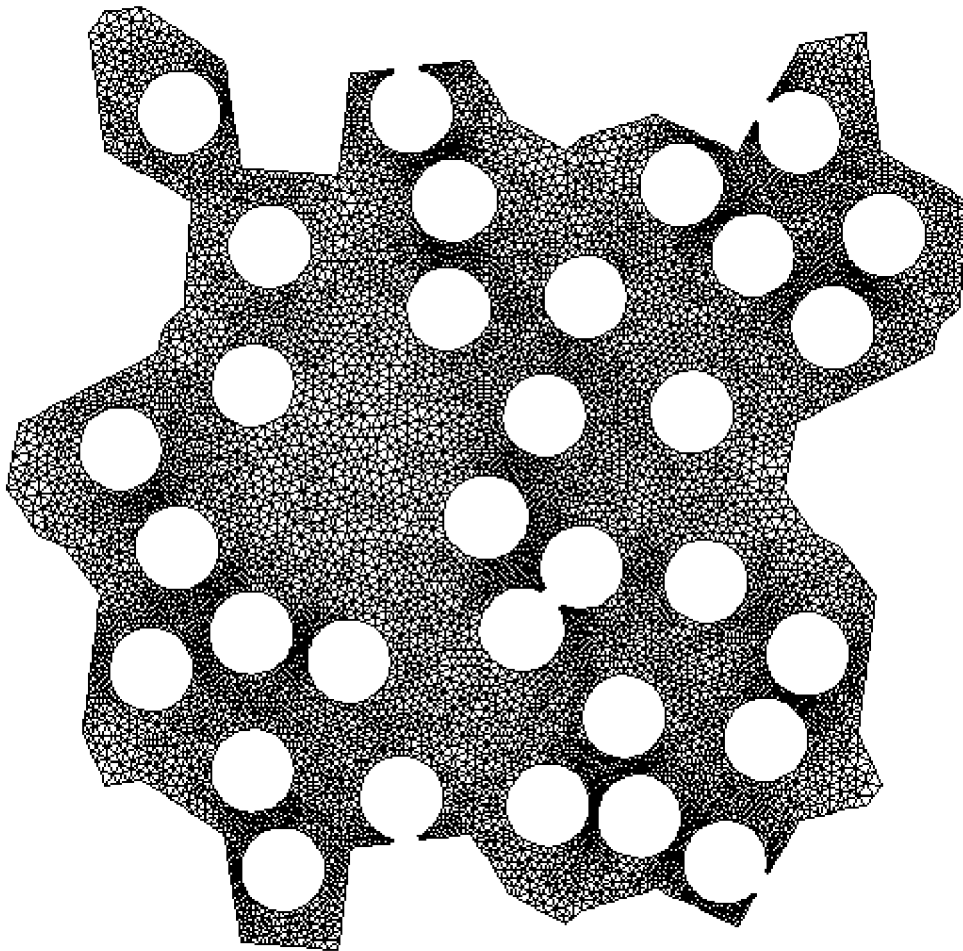


Figura 4.10 - Malha em célula contendo 32 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através da união das fibras, 10574 vértices, 17437 triângulos.

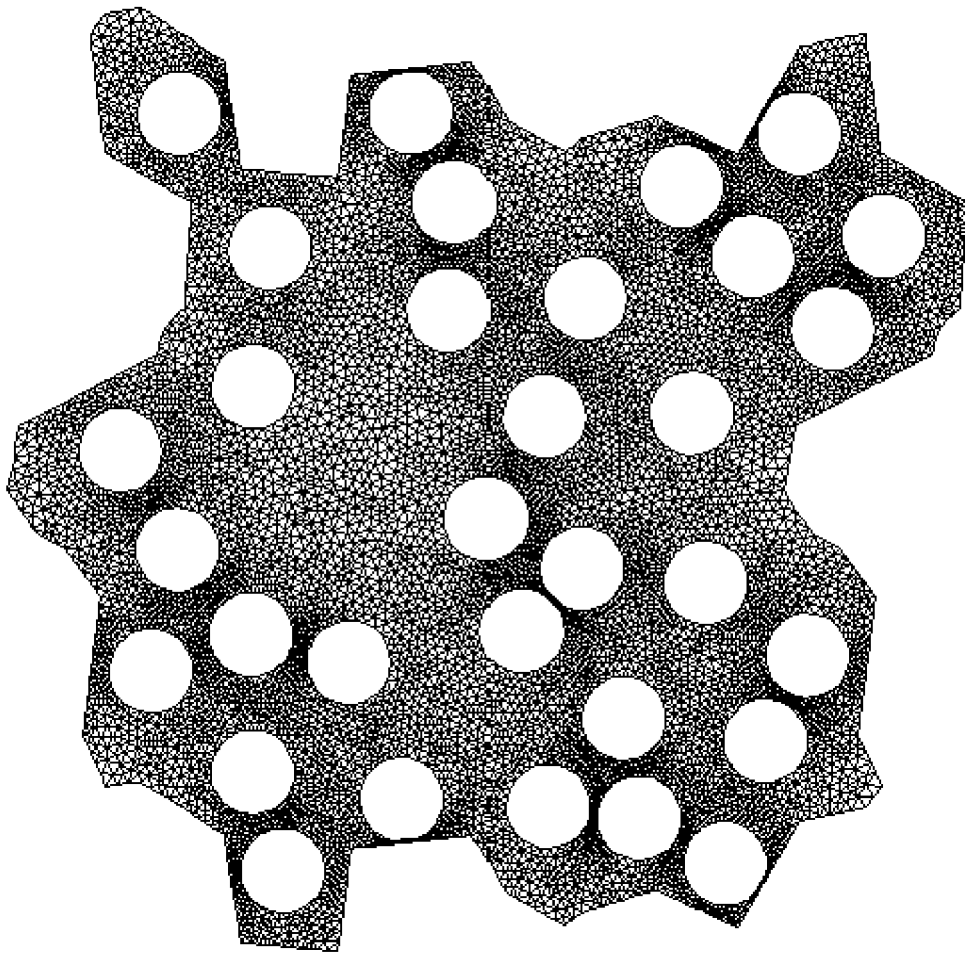


Figura 4.11 - Malha em célula contendo 32 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através do corte das fibras, 10952 vértices, 18001 triângulos.

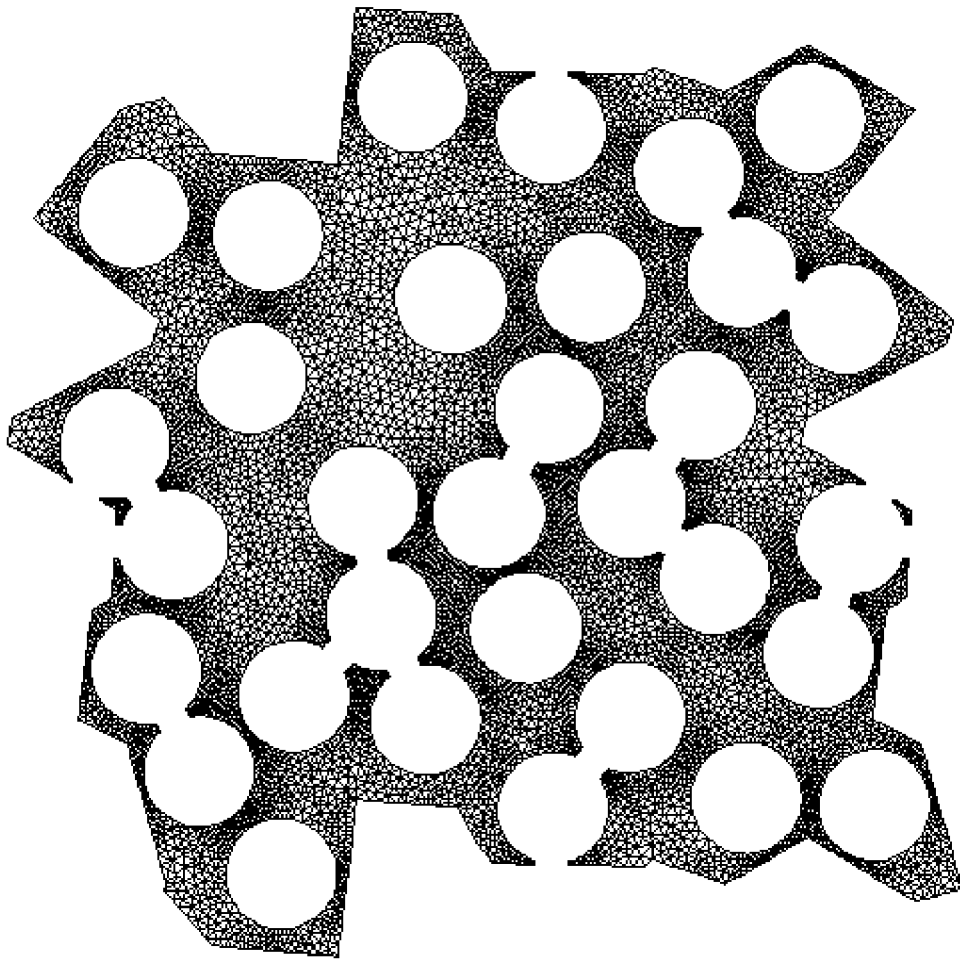


Figura 4.12 - Malha em célula contendo 32 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através da união das fibras, 10243 vértices, 15820 triângulos.

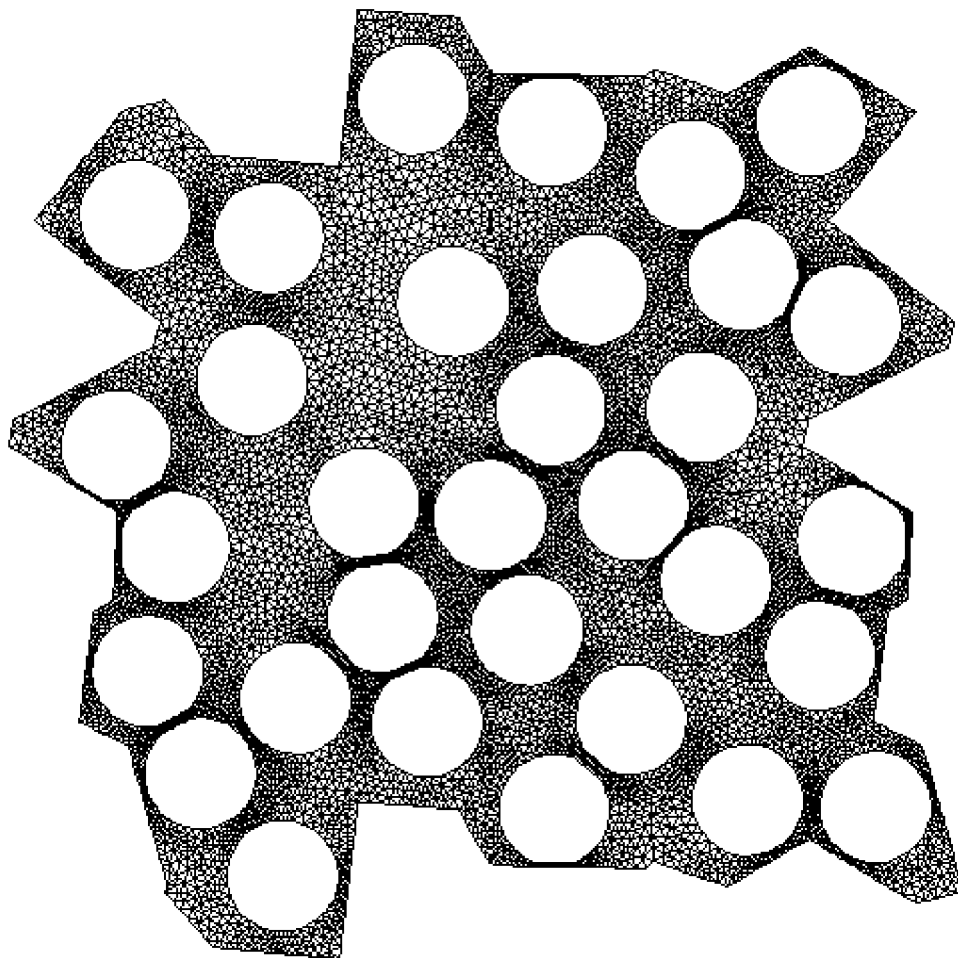


Figura 4.13 - Malha em célula contendo 32 lajotas, com eliminação de regiões de estreito através do corte das fibras, 11935 vértices, 18337 triângulos.

4.3. Discretização por Elementos Finitos

Para facilidade de acompanhamento do procedimento de discretização, a Equação (3.33), que descreve o problema contínuo da célula, é reescrita abaixo,

$$\int_{\Omega_{me}} \frac{\partial v}{\partial y_j} \frac{\partial \Psi}{\partial y_j} d\mathbf{y} = \int_{\Omega_{me}} v d\mathbf{y} \quad \forall v \in Y(\Omega_c). \quad (4.2)$$

As funções $v(\mathbf{y})$ e $\Psi(\mathbf{y})$ podem ser reescritas como combinações lineares das funções de interpolação \mathbf{f}_j , características do método dos elementos finitos (ZIENKIEWICZ, 1971). A função de interpolação \mathbf{f}_j vale 1 no grau de liberdade j e cai até zero nos nós vizinhos a j (Figura 4.14 para \mathbf{f}_j linear); fora dos elementos vizinhos, \mathbf{f}_j vale zero. As funções $v(\mathbf{y})$ e $\Psi(\mathbf{y})$ tornam-se então

$$v(\mathbf{y}) = \sum_{A=1}^{N_{gl}} c_A \mathbf{f}_A(\mathbf{y}), \quad (4.3)$$

$$\Psi(\mathbf{y}) = \sum_{B=1}^{N_{gl}} d_B \mathbf{f}_B(\mathbf{y}), \quad (4.4)$$

onde c_j e d_j correspondem, respectivamente, aos valores de v e de Ψ no grau de liberdade j , $j \in \{1, 2, \dots, N_{gl}\}$, sendo N_{gl} o número de graus de liberdade do problema.

É importante ressaltar a diferença entre nós globais da malha e graus de liberdade do problema: *nós globais* são todos os vértices dos elementos constituintes da malha, enquanto *graus de liberdade* são os valores nodais da função solução desconhecidos. Nesta tese, a solução numérica procurada é periódica. Portanto, um nó pertencente a um determinado lado de uma lajota no contorno da célula possui um nó correspondente no lado oposto. Esses dois nós globais representam um mesmo grau de liberdade, já que os valores da função solução nesses dois nós devem ser iguais. O quadrado da Figura 4.15 representa um domínio periódico genérico discretizado por elementos finitos

triangulares. Os nós globais B e V, por exemplo, representam um mesmo grau de liberdade, assim como os nós K e O e os nós A, E, U e Y. Os nós globais G, H, I, L, M, N, Q, R e S, pertencentes ao interior do quadrado, representam, cada um, um grau de liberdade. O domínio em questão possui, portanto, 25 nós globais e apenas 16 graus de liberdade.

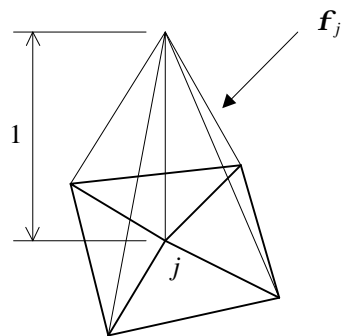


Figura 4.14 - Função de interpolação f_j .

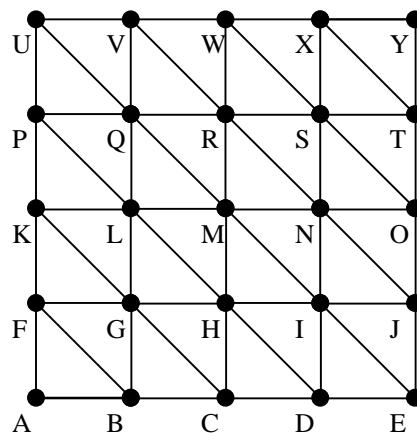


Figura 4.15 - Esquema de domínio periódico discretizado: 32 elementos, 25 nós globais e 16 graus de liberdade.

Substituindo-se as Equações (4.3) e (4.4) em (4.2), chega-se a

$$\int_{\Omega_{me}} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\sum_{A=1}^{N_{gl}} c_A \mathbf{f}_A \right) \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\sum_{B=1}^{N_{gl}} d_B \mathbf{f}_B \right) d\mathbf{y} = \int_{\Omega_{me}} \sum_{A=1}^{N_{gl}} c_A \mathbf{f}_A d\mathbf{y}. \quad (4.5)$$

Os coeficientes c_A podem sair da integral, por serem independentes de \mathbf{y} . Assim,

$$\sum_{A=1}^{N_{gl}} c_A \int_{\Omega_{me}} \frac{\partial \mathbf{f}_A}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\sum_{B=1}^{N_{gl}} d_B \mathbf{f}_B \right) d\mathbf{y} = \sum_{A=1}^{N_{gl}} c_A \int_{\Omega_{me}} \mathbf{f}_A d\mathbf{y}. \quad (4.6)$$

Como a Equação (4.6) é válida para qualquer v pertencente a $Y(\Omega_{me})$, então pode-se escolher $c_k = 1$ para um determinado valor de k e $c_l = 0$ para $l \neq k$, $k, l \in \{1, 2, \dots, N_{gl}\}^2$; tem-se, portanto, que

$$\int_{\Omega_{me}} \frac{\partial \mathbf{f}_A}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial y_j} \left(\sum_{B=1}^{N_{gl}} d_B \mathbf{f}_B \right) d\mathbf{y} = \int_{\Omega_{me}} \mathbf{f}_A d\mathbf{y} \quad A = 1, 2, \dots, N_{gl}. \quad (4.7)$$

Como os coeficientes d_B também não dependem de \mathbf{y} , então

$$\sum_{B=1}^{N_{gl}} \left(\int_{\Omega_{me}} \frac{\partial \mathbf{f}_A}{\partial y_j} \frac{\partial \mathbf{f}_B}{\partial y_j} d\mathbf{y} \right) d_B = \int_{\Omega_{me}} \mathbf{f}_A d\mathbf{y} \quad A = 1, 2, \dots, N_{gl}, \quad (4.8)$$

que pode ser escrita na forma

$$\sum_{B=1}^{N_{gl}} K_{AB} d_B = P_A, \quad A = 1, 2, \dots, N_{gl}, \quad (4.9)$$

onde

$$K_{AB} = \int_{\Omega_{me}} \frac{\partial \mathbf{f}_A}{\partial y_j} \frac{\partial \mathbf{f}_B}{\partial y_j} d\mathbf{y}, \quad (4.10)$$

$$P_A = \int_{\Omega_{me}} \mathbf{f}_A d\mathbf{y} \quad (4.11)$$

e os coeficientes d_B representam a solução desejada Ψ de (4.2) nos graus de liberdade do problema. Logo, da observação da Equação (4.9), conclui-se que o problema discreto correspondente ao problema contínuo (4.2) consiste na solução do seguinte sistema de equações algébricas lineares:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{p}, \quad (4.12)$$

onde \mathbf{K} é a chamada *matriz de rigidez*, de dimensão $N_{gl} \times N_{gl}$, e \mathbf{u} e \mathbf{p} são, respectivamente, os vetores *solução* e *carga*, tendo ambos dimensão N_{gl} . A matriz \mathbf{K} , originária do operador Laplaciano, é simétrica e positiva definida. Nesta tese, a matriz global \mathbf{K} não é armazenada. Ao invés disso, são armazenadas as matrizes elementares, o que permite uma redução considerável na memória utilizada pelo programa; o esquema elemento-a-elemento recupera a ação da matriz global \mathbf{K} (Anexo B).

4.4. Solução Iterativa pelo Método dos Gradientes Conjugados

Da resolução da equação de Navier-Stokes (na qual o termo de inércia é identicamente nulo) por elementos finitos, chega-se a um sistema de equações lineares $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{p}$, onde \mathbf{p} é um vetor carga originário do gradiente de pressão e \mathbf{K} é uma matriz quadrada, simétrica e positiva definida. O vetor de velocidades \mathbf{u} é a incógnita a ser encontrada.

Para a solução deste sistema será utilizado o método dos gradientes conjugados. Este método é especialmente apropriado a matrizes simétricas e positivas definidas, atendendo assim ao problema desta tese. Como serão utilizadas matrizes muito grandes, será empregado o esquema elemento-a-elemento, que não necessita do armazenamento

da matriz \mathbf{K} em memória; ao invés disso, são armazenadas as matrizes elementares (Anexo B). Além disso, em precisão infinita, o método garante a convergência em n iterações, sendo n a dimensão da matriz \mathbf{K} ; na prática, após $O(n)$ iterações, resta o erro de iteração incompleta, que deve ser controlado (Capítulo 5).

Métodos iterativos como gradientes conjugados são apropriados para se utilizar com matrizes esparsas. Se \mathbf{K} for uma matriz densa, outra técnica de solução é fatorar a matriz e resolver a equação por retro-substituição. O tempo necessário para se fatorar uma matriz densa é praticamente o mesmo gasto para se resolver o sistema iterativamente. Uma vez fatorada a matriz, o sistema pode ser resolvido rapidamente. Já para matrizes esparsas, soluções iterativas são consideravelmente mais rápidas (SHEWCHUK, 1994).

Para melhor entender o método dos gradientes conjugados, é proveitoso analisar-se um método de abordagem semelhante: o método da máxima descida. Ao longo desta seção, dois vetores são utilizados para se medir o quão longe se está da solução do sistema da Equação (4.12) na i -ésima iteração, representada pelo subscrito (i). São os vetores *erro* e *resíduo*: o erro é um vetor que guarda a diferença entre o vetor solução na iteração i e o vetor solução correto. É definido por

$$\mathbf{e}_{(i)} = \mathbf{u}_{(i)} - \mathbf{u}; \quad (4.13)$$

o resíduo indica o quão longe \mathbf{Ku} está do valor de \mathbf{p} , ou seja

$$\mathbf{r}_{(i)} = \mathbf{p} - \mathbf{Ku}_{(i)}. \quad (4.14)$$

Pode-se entender o resíduo como sendo o erro transformado por \mathbf{K} no mesmo espaço de \mathbf{p} , visto que $\mathbf{r}_{(i)} = -\mathbf{Ke}_{(i)}$.

4.4.1. Método da Máxima Descida

No método da máxima descida (“steepest descent”) para solução de um sistema de equações, começa-se de um vetor solução arbitrário $\mathbf{u}_{(0)}$ e caminha-se em direção ao

vetor solução de erro nulo (SHEWCHUK, 1994), através de uma série de passos $\mathbf{u}_{(1)}$, $\mathbf{u}_{(2)}$, ..., onde

$$\mathbf{u}_{(i+1)} = \mathbf{u}_{(i)} + a \mathbf{r}_{(i)}, \quad (4.15)$$

até satisfazer que $\mathbf{u}_{(n)}$ seja próximo o suficiente da solução \mathbf{u} . O valor de a é escolhido de modo que minimize a função quadrática $f(\mathbf{u})$, definida por

$$f(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} - \mathbf{p}^T \mathbf{u} + \mathbf{c}, \quad (4.16)$$

ao longo de uma linha; \mathbf{c} é um vetor constante. Do cálculo diferencial, a minimiza f quando a derivada direcional é nula, ou seja

$$\frac{df}{da}(\mathbf{u}_{(i+1)}) = 0. \quad (4.17)$$

Da regra da cadeia,

$$\frac{df}{da}(\mathbf{u}_{(i+1)}) = \frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})^T \frac{d\mathbf{u}_{(i+1)}}{da} = \frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})^T \mathbf{r}_{(i)}. \quad (4.18)$$

Igualando esta expressão a zero, chega-se à conclusão de que a deve ser escolhido de modo a $\mathbf{r}_{(i)}$ e $\frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})^T$ serem ortogonais. Se \mathbf{K} for uma matriz simétrica, então

$$\frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)}) = \mathbf{K} \mathbf{u}_{(i+1)} - \mathbf{p} = -\mathbf{r}_{(i+1)}. \quad (4.19)$$

Pode-se portanto escrever a seqüência de equações

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_{(i+1)}^T \mathbf{r}_{(i)} &= 0, \\
(\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i+1)})^T \mathbf{r}_{(i)} &= 0, \\
[\mathbf{p} - \mathbf{K}(\mathbf{u}_{(i)} + a \mathbf{r}_{(i)})]^T \mathbf{r}_{(i)} &= 0, \\
(\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i)})^T \mathbf{r}_{(i)} - a (\mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)})^T \mathbf{r}_{(i)} &= 0, \\
(\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i)})^T \mathbf{r}_{(i)} &= a (\mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)})^T \mathbf{r}_{(i)}, \\
\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)} &= a \mathbf{r}_{(i)}^T (\mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}).
\end{aligned}$$

Da última equação, tem-se que

$$a = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)}}{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}}. \quad (4.20)$$

Das Equações (4.14), (4.20) e (4.15), o método da máxima descida pode ser esquematizado como (SHEWCHUK, 1994)

$$\mathbf{r}_{(i)} = \mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i)}, \quad (4.21)$$

$$a_{(i)} = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)}}{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}}, \quad (4.22)$$

$$\mathbf{u}_{(i+1)} = \mathbf{u}_{(i)} + a_{(i)} \mathbf{r}_{(i)}. \quad (4.23)$$

O algoritmo (4.21) - (4.23), como escrito, requer duas multiplicações matriz-vetor por iteração. Como o custo computacional do método é dominado por produtos matriz-vetor, é desejável eliminar uma das multiplicações. Isto é conseguido multiplicando-se os dois lados da Equação (4.23) por $-\mathbf{K}$ e adicionando-se \mathbf{p} . Tem-se então

$$\mathbf{r}_{(i+1)} = \mathbf{r}_{(i)} - a_{(i)} \mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}. \quad (4.24)$$

Apesar da Equação (4.21) ainda ser necessária para se computar $\mathbf{r}_{(0)}$, a Equação (4.24) pode ser utilizada para todas as iterações posteriores. O produto $\mathbf{K}\mathbf{r}$, que ocorre nas Equações (4.22) e (4.24), precisa ser computado apenas uma vez. A desvantagem de se usar este recurso é que a seqüência definida pela Equação (4.24) é gerada sem nenhum retorno de valor de $\mathbf{u}_{(i)}$, então o acúmulo de erros de arredondamento de ponto flutuante pode fazer com que $\mathbf{u}_{(i)}$ tenda para algum ponto afastado de \mathbf{u} . Este problema pode ser evitado utilizando-se a Equação (4.21) periodicamente para recalculando o resíduo correto. O algoritmo final do método da máxima descida é então

$$\mathbf{r}_{(0)} = \mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(0)}, \quad (4.25)$$

$$a_{(i)} = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)}}{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}}, \quad (4.26)$$

$$\mathbf{r}_{(i+1)} = \mathbf{r}_{(i)} - a_{(i)} \mathbf{K}\mathbf{r}_{(i)}. \quad (4.27)$$

4.4.2. Gradientes Conjugados

O método da máxima descida freqüentemente leva à execução de passos na mesma direção de passos anteriores. Para tentar evitar esta situação, são escolhidas direções de busca K-ortogonais $\mathbf{t}_{(0)}, \mathbf{t}_{(1)}, \dots, \mathbf{t}_{(n-1)}$. Dois vetores $\mathbf{t}_{(i)}$ e $\mathbf{t}_{(j)}$ são K-ortogonais ou conjugados se

$$\mathbf{t}_{(i)}^T \mathbf{K} \mathbf{t}_{(j)} = 0. \quad (4.28)$$

Desta maneira, em cada direção será dado um único passo, e esse passo terá o comprimento correto para que seja alinhado exatamente com \mathbf{u} . Ao fim de n passos, em precisão infinita, a solução será encontrada. Em geral, para cada passo escolhe-se um vetor solução

$$\mathbf{u}_{(i+1)} = \mathbf{u}_{(i)} + a_{(i)} \mathbf{t}_{(i)}, \quad (4.29)$$

onde o valor de $a_{(i)}$ é encontrado utilizando-se o fato de que $\mathbf{t}_{(i)}$ e $\mathbf{t}_{(i+1)}$ devem ser K-ortogonais, logo, nenhum passo deve ser dado na direção de $\mathbf{t}_{(i)}$ novamente. Usando esta condição, tem-se, similarmente ao apresentado no subitem anterior,

$$\frac{df}{da}(\mathbf{u}_{(i+1)}) = \frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})^T \frac{d\mathbf{u}_{(i+1)}}{da} = \frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})^T \mathbf{t}_{(i)}. \quad (4.30)$$

Igualando esta expressão a zero, chega-se à conclusão de que a deve ser escolhido de modo que $\mathbf{t}_{(i)}$ e $\frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)})$ sejam ortogonais. Como

$$\frac{df}{d\mathbf{u}}(\mathbf{u}_{(i+1)}) = -\mathbf{r}_{(i+1)}, \quad (4.31)$$

então pode-se escrever a seqüência de equações

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{(i+1)}^T \mathbf{t}_{(i)} &= 0, \\ (\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i+1)})^T \mathbf{t}_{(i)} &= 0, \\ [\mathbf{p} - \mathbf{K}(\mathbf{u}_{(i)} + a \mathbf{t}_{(i)})]^T \mathbf{t}_{(i)} &= 0, \\ (\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i)})^T \mathbf{t}_{(i)} - a (\mathbf{K}\mathbf{t}_{(i)})^T \mathbf{t}_{(i)} &= 0, \\ (\mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(i)})^T \mathbf{t}_{(i)} &= a (\mathbf{K}\mathbf{t}_{(i)})^T \mathbf{t}_{(i)}, \\ \mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{t}_{(i)} &= a \mathbf{t}_{(i)}^T (\mathbf{K}\mathbf{t}_{(i)}). \end{aligned}$$

Da última equação, tem-se que

$$a = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{t}_{(i)}}{\mathbf{t}_{(i)}^T \mathbf{K}\mathbf{t}_{(i)}}. \quad (4.32)$$

Nota-se que, se o vetor de busca $\mathbf{t}_{(i)}$ for o resíduo $\mathbf{r}_{(i)}$, esta fórmula será idêntica à obtida pelo método da máxima descida.

Métodos que utilizam a Equação (4.32) são conhecidos como *métodos de direções conjugadas*, diferenciando-se apenas pela maneira de se obter os vetores de busca K-ortogonais $\mathbf{t}_{(i)}$.

No método dos gradientes conjugados, os vetores de busca não são especificados inicialmente, sendo obtidos seqüencialmente à medida que o método é executado. A cada iteração, o vetor de gradiente negativo atual é determinado e adicionado a uma combinação linear dos vetores de busca anteriores, para que se obtenha uma nova direção conjugada, ao longo da qual será dado o novo passo (LUENBERGER, 1984).

Portanto, o método dos gradientes conjugados pode ser esquematizado como

$$\mathbf{t}_{(0)} = \mathbf{r}_{(0)} = \mathbf{p} - \mathbf{K}\mathbf{u}_{(0)}, \quad (4.33)$$

$$a_{(i)} = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)}}{\mathbf{t}_{(i)}^T \mathbf{K} \mathbf{t}_{(i)}}, \quad (4.34)$$

$$\mathbf{u}_{(i+1)} = \mathbf{u}_{(i)} + a_{(i)} \mathbf{t}_{(i)}, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{r}_{(i+1)} = \mathbf{r}_{(i)} - a_{(i)} \mathbf{K} \mathbf{t}_{(i)}, \quad (4.36)$$

$$b_{(i+1)} = \frac{\mathbf{r}_{(i+1)}^T \mathbf{r}_{(i+1)}}{\mathbf{r}_{(i)}^T \mathbf{r}_{(i)}}, \quad (4.37)$$

$$\mathbf{t}_{(i+1)} = \mathbf{r}_{(i+1)} + b_{(i+1)} \mathbf{t}_{(i)}. \quad (4.38)$$

Este é o algoritmo utilizado nesta tese para a solução do sistema de equações proveniente do método dos elementos finitos.

Através da metodologia proposta neste capítulo, pode-se resolver o problema da mesoescala, que consiste na determinação da permeabilidade da célula periódica. Da solução do sistema de equações algébricas lineares proveniente do método dos elementos finitos, chega-se ao campo de velocidades ao longo do domínio (Figura 4.16, por exemplo), que é utilizado na Equação (3.36) para o cálculo da permeabilidade.

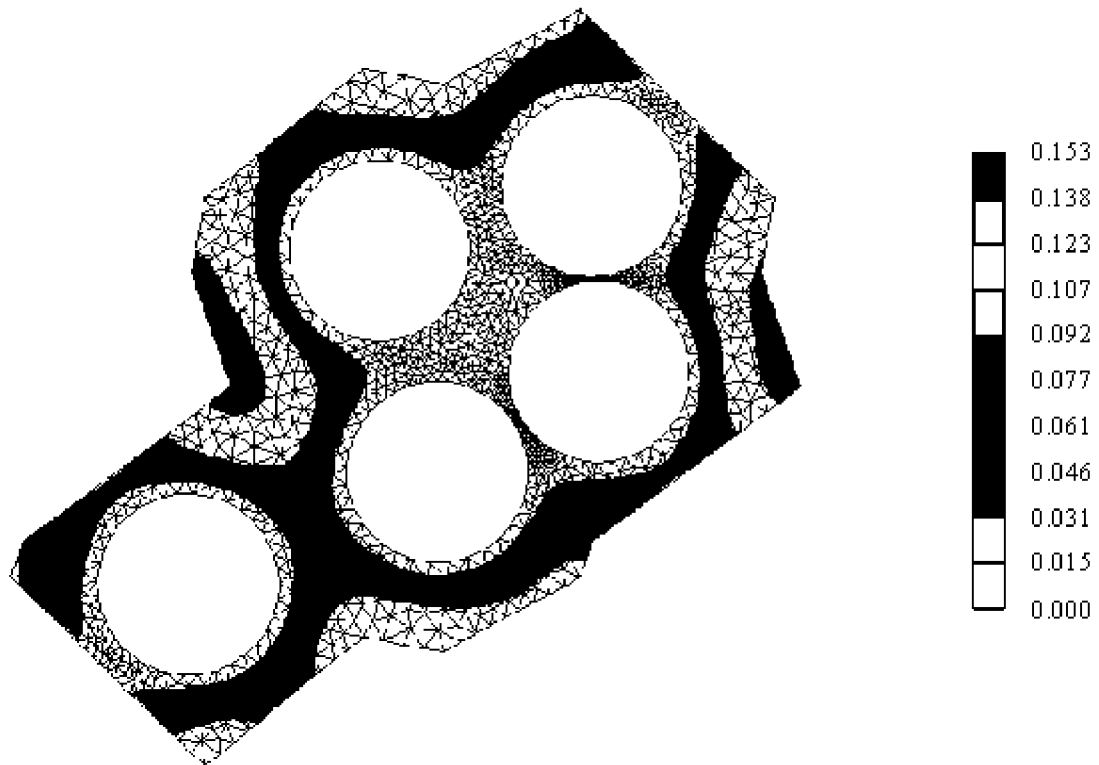


Figura 4.16 - Campo de velocidades em uma célula periódica.