



Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Formulação Multidimensional – Pré- e Pós-Processamento

PME5425 – Métodos de Elementos Finitos de Alta Ordem
com Aplicações em Mecânica dos Fluidos e Transferência
de Calor

Prof. Bruno S. Carmo

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

2017



Sumário

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- 1 Discretização das condições de contorno
- 2 Geração de malhas
- 3 Pós-processamento: visualização de resultados
- 4 Pós-processamento: traçadores



Discretização das condições de contorno I

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Até agora, assumimos que as condições de contorno eram especificadas em termos dos coeficientes da expansão (modal ou nodal). Contudo, isso não é o caso típico numa implementação geral.
- É necessário projetar uma dada função que expressa a condição de contorno numa base de expansão discreta e C^0 quando se tem:
 - Condições de contorno essenciais (Dirichlet);
 - Contornos curvos.
- Impor esta continuidade 'de uma vez só' na fronteira de Dirichlet levaria a um problema unidimensional para casos 2d, mas levaria a um problema bidimensional completo em casos 3d.



Discretização das condições de contorno II

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Seria melhor se pudéssemos desenvolver um método de projeção no nível do elemento, que conservasse a propriedade C^0 da aproximação global.
- Isso pode ser alcançado fazendo uma projeção 'mista': colocação nos vértices, e Galerkin nas arestas e faces.



Projeção mista no contorno: caso 2d I

Pré- e Pós-
Processamen-
to

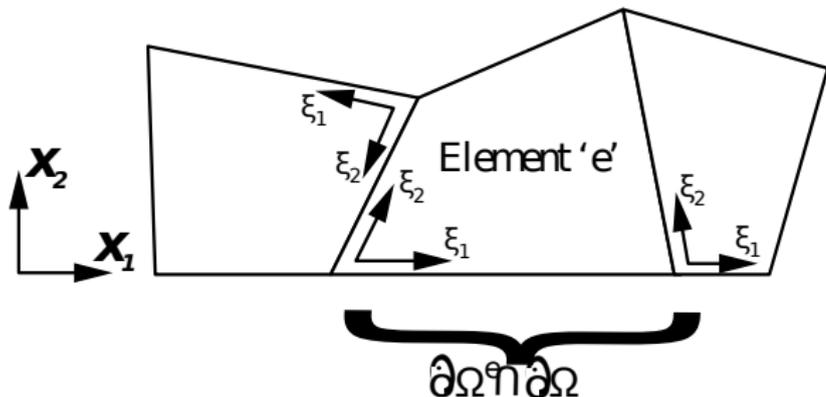
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



Desejamos projetar uma função de contorno conhecida g_D na fronteira do elemento e sobre $\partial\Omega$.

A solução discreta ao longo da aresta é

$$u^\delta(x_1, x_2) = \sum_{pq} \hat{u}_{pq}^e \phi_{pq}^e(\xi_1, -1) = \sum_{p=0}^{P_1} \hat{u}_{p0}^e \phi_{p0}^e(\xi_1, -1)$$



Projeção mista no contorno: caso 2d II

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

$$u^\delta(x_1, x_2) = \sum_{pq} \hat{u}_{pq}^e \phi_{pq}^e(\xi_1, -1) = \sum_{p=0}^{P_1} \hat{u}_{p0}^e \phi_{p0}^e(\xi_1, -1)$$

- Expansão modal modificada:

$$\phi_{p0}(\xi_1, -1) = \psi_p^a(\xi_1) \psi_0^a(-1) = \psi_p^a(\xi_1)$$

- Expansão nodal: $\phi_{p0}(\xi_1, -1) = h_p(\xi_1)$

Para a expansão modal, queremos achar \hat{u}_{p0}^e tal que:

$$\sum_{p=0}^{P_1} \hat{u}_{p0}^e \psi_p^a(\xi_1) \simeq g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(\xi_1, -1))$$



Projeção mista no contorno: caso 2d III

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

$$\sum_{p=0}^{P_1} \hat{u}_{p0}^e \psi_p^a(\xi_1) \simeq g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(\xi_1, -1)) \quad (1)$$

Os modos de vértice tem valor unitário em uma das extremidades da aresta e todos os outros modos são nulos neste ponto. Assim, podemos impor continuidade C^0 atribuindo aos coeficientes dos modos de vértice os valores

$$\begin{aligned} \hat{u}_{00}^e &= g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(-1, -1)), \\ \hat{u}_{P_1 0}^e &= g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(1, -1)). \end{aligned}$$

Isolando os coeficientes desconhecidos na eq. (1)

$$\sum_{p=1}^{P_1-1} \hat{u}_{p0}^e \psi_p^a(\xi_1) \simeq g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(\xi_1, -1)) - \hat{u}_{00}^e \phi_0^a(\xi_1) - \hat{u}_{P_1 0}^e \phi_{P_1}^a(\xi_1)$$



Projeção mista no contorno: caso 2d IV

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

$$\sum_{p=1}^{P_1-1} \hat{u}_{p0}^e \psi_p^a(\xi_1) \simeq g_{\mathcal{D}}(\chi_1^e(\xi_1, -1)) - \hat{u}_{00}^e \psi_0^a(\xi_1) - \hat{u}_{P_10}^e \psi_{P_1}^a(\xi_1)$$

Como estes modos remanescentes são nulos nos pontos extremos, podemos usar projeção de Galerkin sem destruir a continuidade C^0 :

$$\left(\phi_i, \sum_{p=1}^{P_1-1} \hat{u}_{p0}^e \phi_p \right) = (\phi_i, g_{\mathcal{D}} - \hat{u}_{00}^e \phi_0^a - \hat{u}_{P_10}^e \phi_{P_1}^a), \quad 0 \leq i \leq P_1-1$$

Para bases nodais, o valor dos coeficientes é igual ao valor da condição de contorno nos nós.



Projeção mista no contorno: caso 3d

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

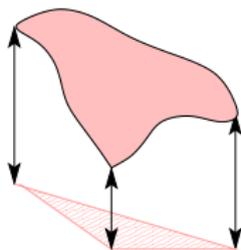
Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

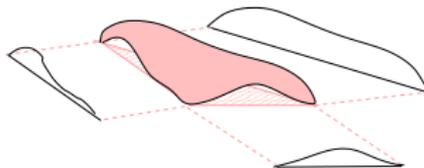
Visualização

Traçadores

- 1** Atribuir o valor de g_D calculado nos vértices aos modos de vértice.
- 2** Subtrair a contribuição dos modos de vértice de g_D e calcular os coeficientes dos modos de aresta usando uma projeção de Galerkin 1d local no interior da aresta.
- 3** Subtrair os modos de vértice e aresta de g_D e calcular os coeficientes dos modos de face usando uma projeção de Galerkin 2d local no interior da face.



a) Vertex projection



a) Edge projection



a) Face projection



Geração de malhas para métodos de alta ordem

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

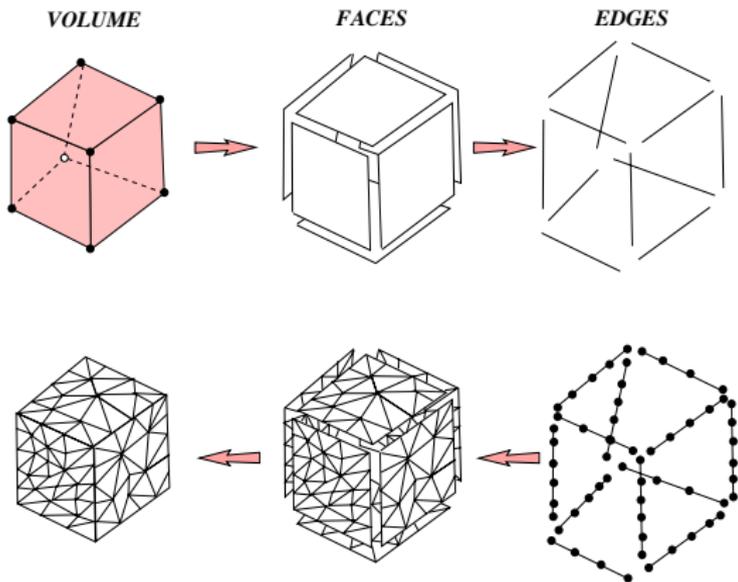
Traçadores

- Precisamos garantir elementos válidos – Jacobiano positivo.
- Procedimento: construir uma malha grosseira inicialmente, com lados e arestas retas. Então usar o máximo de informações possível sobre a topologia para deformar a malha.
- Entretanto, este procedimento pode sim gerar elementos inválidos.
- São necessárias estratégias para minimizar a geração de elementos inválidos, tais como refinamento por curvatura, deformação de arestas e faces interiores, uso de elementos híbridos.



Geração da malha inicial

- Malha de arestas retas (2d e 3d) e faces planas (3d)
- Malha “grosseira” (menor número de elementos do que em métodos de baixa ordem)



"TOP-DOWN"
Boundary representation

"BOTTOM-Up"
Mesh Generation

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



Geração de malha de alta ordem

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Determinar uma transformação de fronteira no nível de elemento, com filosofia “bottom-up” (vértices, arestas, faces).
- Local dos vértices já está definido pela malha inicial.
- Os próximos passos são, portanto,
 - 1 Definir uma representação das arestas que as faça conformes ao domínio;
 - 2 Definir as arestas e faces no interior do domínio.



Representação das arestas do contorno em 2d I

Pré- e Pós-
Processamento

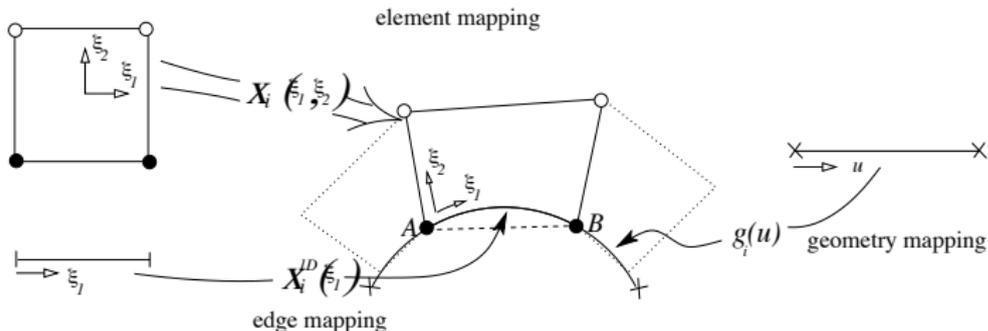
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



- Problema geral: achar $\chi_i(\xi_1, \xi_2)$, $i = 1, 2$.
- A definição do mapeamento $\chi_i(\xi_1, \xi_2)$ necessitará da definição do mapeamento de cada uma das arestas. No caso da fronteira curva da figura, $\chi_i^{1d}(\xi_1)$.



Representação das arestas do contorno em 2d II

Pré- e Pós-
Processamento

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Para obter $\chi_i^{1d}(\xi)$, precisamos de informações sobre a topologia da superfície, que geralmente são dadas em termos de outra transformação $\mathbf{g}(u) = [g_1(u), g_2(u)]$ e devem ser fornecidas de alguma forma na malha inicial.
- Aproximaremos a geometria da aresta por um polinômio de ordem $P - 1$.
- O primeiro requisito é que os valores dos polinômios nos extremos tem que ser os valores das coordenadas dos vértices \mathbf{x}_A e \mathbf{x}_B (continuidade C^0).

$$\chi^{1d}(-1) = \mathbf{x}_A, \quad \chi^{1d}(1) = \mathbf{x}_B$$

- Precisamos agora especificar outras $P - 1$ condições de modo a definir o polinômio.



Representação das arestas do contorno em 2d III

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

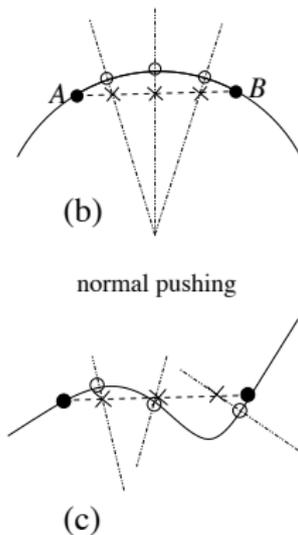
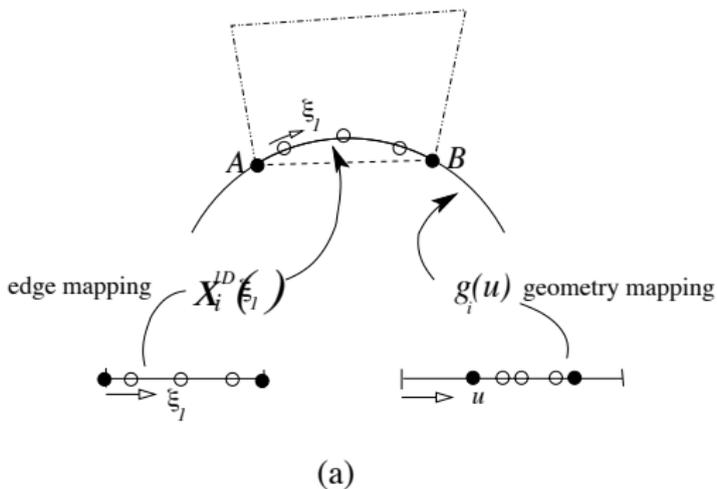
Traçadores

- Podemos especificar os pontos de quadratura de Gauss-Lobatto-Legendre na região padrão $-1 \leq \xi_1 \leq 1$.
- Resta agora especificar os pontos nodais, $\mathbf{x}_j(\xi_1)$, ao longo da fronteira curva, que corresponderiam aos pontos de quadratura na região padrão.

Representação das arestas do contorno em 2d IV

3 possíveis alternativas:

1 'Normal pushing'



Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



Representação das arestas do contorno em 2d V

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

2 Usar em u o mesmo espaçamento que em ξ_1 (bom para curvas simples)

3 Usar um procedimento de minimização do jacobiano do mapeamento $\chi_1^{1d}(\xi_1)$. Em Sherwin & Peiró (2002), o mapeamento ótimo foi aproximado como sendo aquele em que o espaçamento linear entre dois pontos $\mathbf{x}_k = \mathbf{g}(u_k)$ na geometria curva é o mesmo dos pontos nodais correspondentes na região padrão. Funcional a ser minimizado:

$$\mathcal{J}(u_1, \dots, u_{P-1}) = \sum_{i=1}^{P-1} \frac{\|\mathbf{g}(u_{i+1}) - \mathbf{g}(u_i)\|^2}{\xi_{i+1} - \xi_i}$$

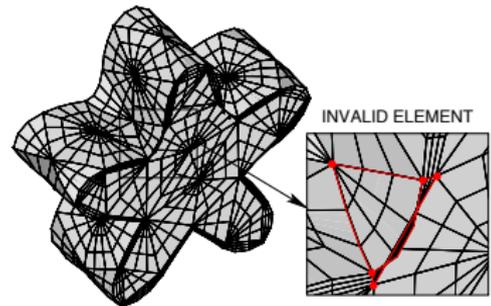
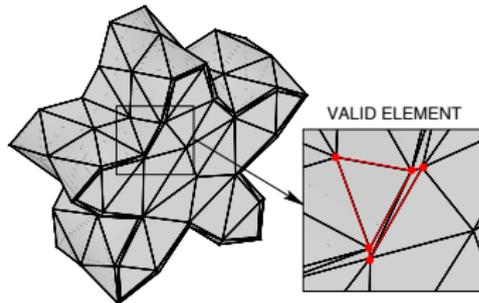


Definição das arestas no interior do domínio

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Em alguns casos, a imposição de curvatura na fronteira pode levar a elementos inválidos.



Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



Eliminação de elementos inválidos

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

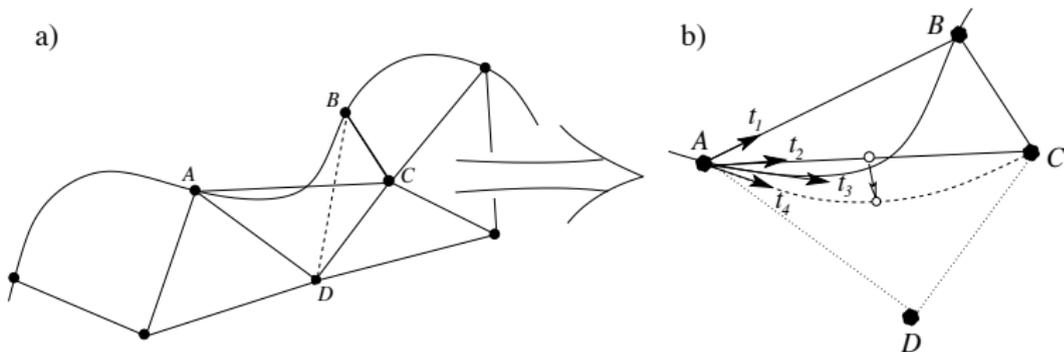
Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Troca de arestas e deformação de aresta interior



Refinamento baseado em curvatura

Pré- e Pós-
Processamento

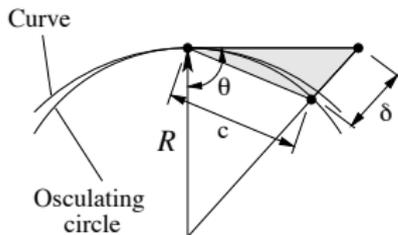
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

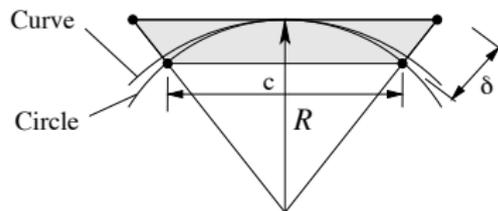
Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



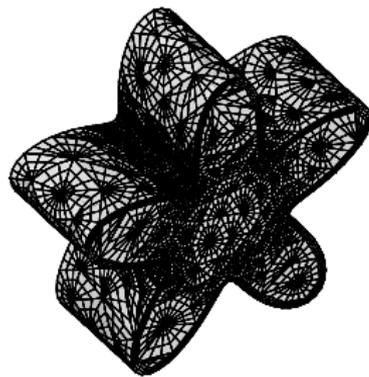
Triângulo



Quadrilátero



Refinamento de curvatura



Refinamento seletivo



Pós-processamento: visualização de resultados

Pré- e Pós-
Processamento

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Os programas de visualização de resultados na forma de contornos utilizam bibliotecas que fazem interpolação linear dentro de elementos, utilizando os valores das variáveis nos vértices (ex: OpenGL).
- Uma alternativa para visualizar resultados gerados por códigos de alta ordem é escrever o arquivo de resultados em uma malha mais refinada, utilizando os dados interpolados utilizando as funções de aproximação.
- Outra alternativa é utilizar um programa de visualização que interprete dados de alta ordem e plote os resultados em malhas de alta ordem (ex: Paraview e Gmsh). Estes programas plotam os dados em baixa ordem e refinam a malha automaticamente em regiões onde o erro de visualização ultrapasse uma certa tolerância.



Interpolação em malhas uniformemente mais refinadas

Pré- e Pós-
Processamen-
to

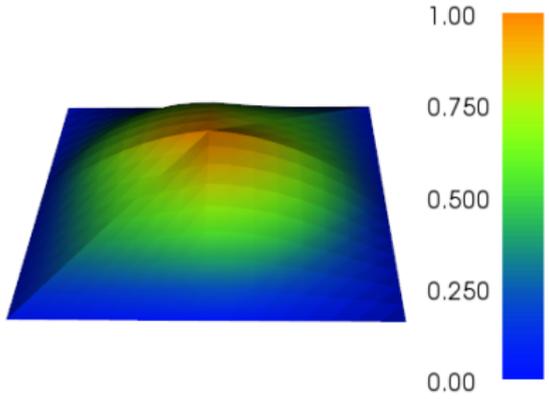
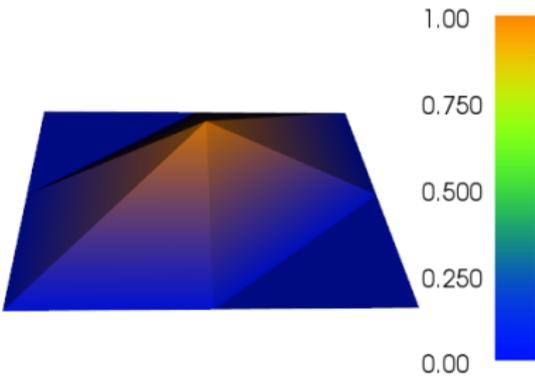
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores





Interpolação em malhas seletivamente mais refinadas

Pré- e Pós-Processamento

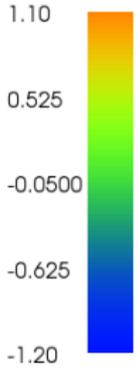
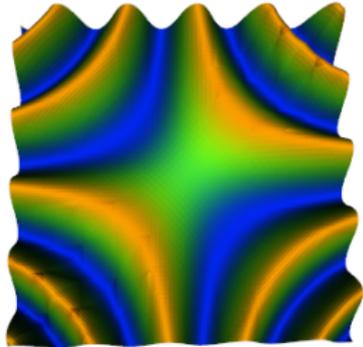
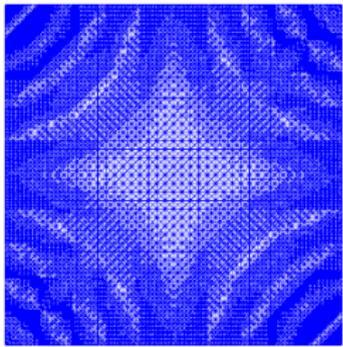
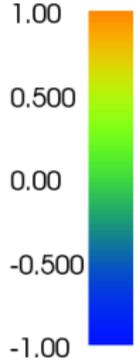
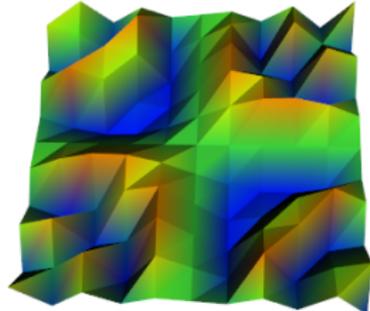
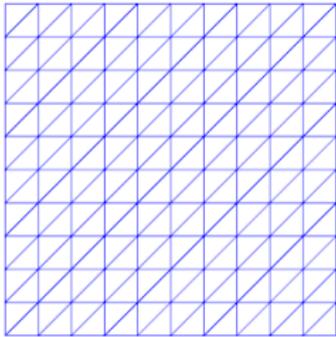
Bruno S. Carmo

Discretização das condições de contorno

Geração de malhas

Visualização

Traçadores





Visualização de alta ordem: Paraview

Pré- e Pós-
Processamen-
to

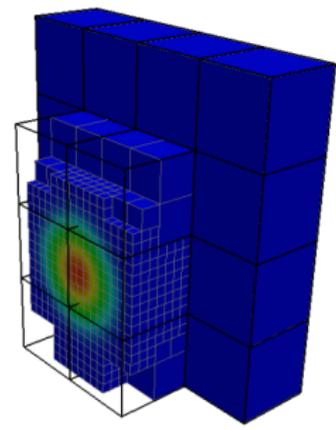
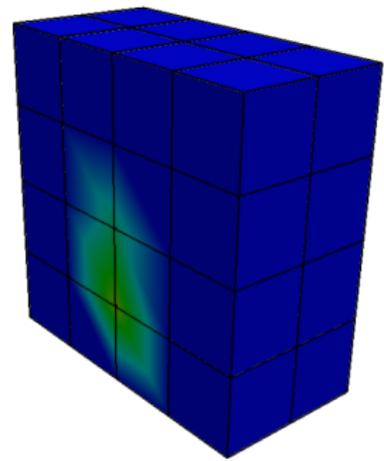
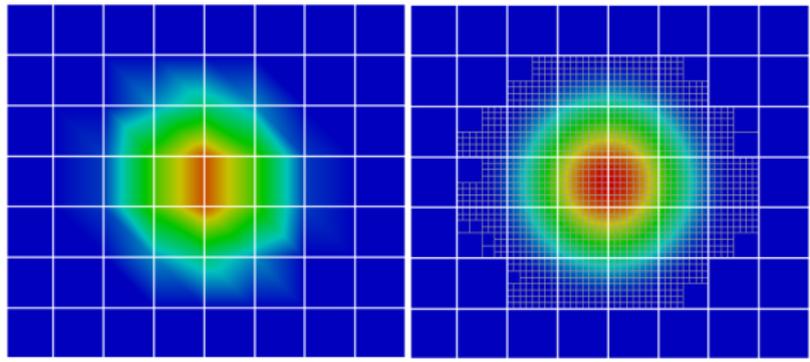
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores





Pós-processamento: traçadores

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- A visualização do escoamento por meio de traçadores, gerando linhas de corrente em escoamentos permanentes ou linhas de trajetória em escoamentos transitórios, envolve operações de integração bastante sensíveis à perturbações no campo de velocidade.
- A aproximação de resultados de alta ordem em malhas de baixa ordem pode resultar em cálculos imprecisos de trajetória.



Traçadores: comparação baixa e alta ordem

Pré- e Pós-Processamento

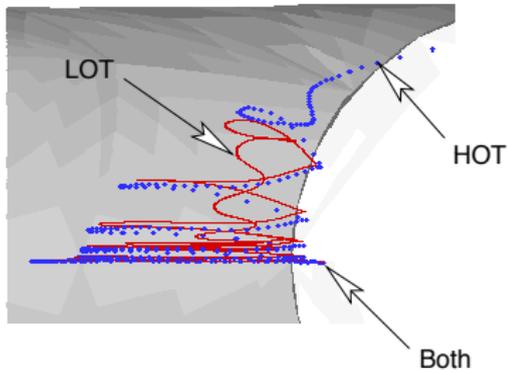
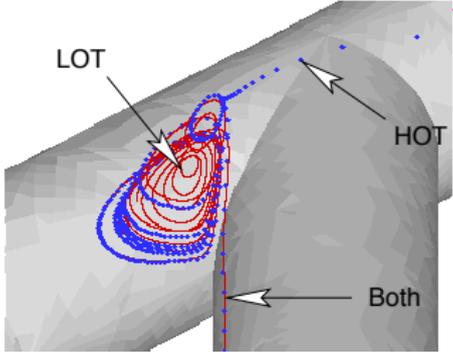
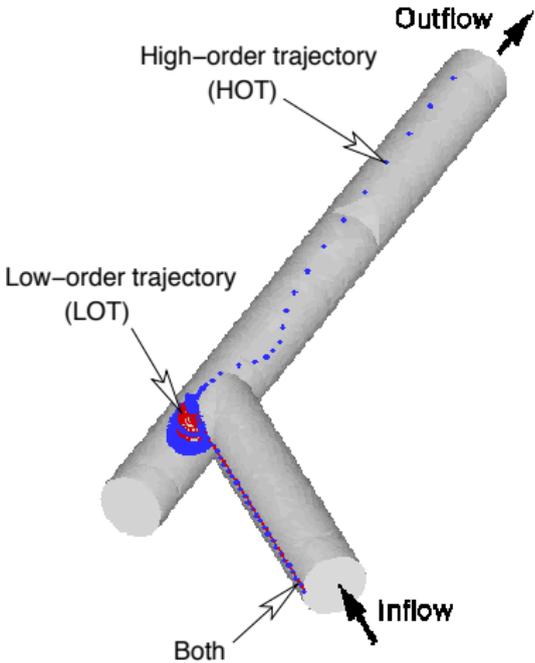
Bruno S. Carmo

Discretização das condições de contorno

Geração de malhas

Visualização

Traçadores





Integração de trajetórias

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Problema da integração de trajetórias resume-se a resolver um conjunto de equações diferenciais ordinárias submetido a condições iniciais:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0.$$

Dois tipos de esquemas podem ser utilizados para equações deste tipo: multi-estágios (ex: Runge–Kutta) ou multi-passos (ex: Adams–Bashfort). Por permitirem alterações dinâmicas do passo de tempo sem informações de passos de tempo anteriores, métodos multi-estágios são mais interessantes para a integração de trajetórias.



Métodos de Runge–Kutta I

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Dado um sistema de equações diferenciais ordinárias submetido a condições iniciais:

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

Pode-se integrá-lo numericamente segundo o esquema:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{f}_i$$

onde $\mathbf{y}^n = \mathbf{y}(t^n)$, s é o número de estágios, Δt é o passo de tempo e \mathbf{f}_i é dado por

$$\mathbf{f}_i = \mathbf{f} \left(\mathbf{y}^n + \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}_j, t^n + c_i \Delta t \right).$$



Métodos de Runge–Kutta II

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Os valores de b_i , c_i e a_{ij} são dados pela matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array}$$



Métodos de Runge–Kutta III

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

Que para métodos de Runge–Kutta até quarta ordem são:

$$\text{RK1: } \begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array} \quad \text{RK2: } \begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\text{RK3: } \begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ \hline 1 & -1 & 2 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \quad \text{RK4: } \begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \hline \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$



Estratégias de cálculo para traçadores I

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

1 Integrar no espaço físico. Este processo envolve a busca pelo elemento contendo o ponto onde se deve calcular a velocidade, seguido pela interpolação da velocidade usando a base de expansão dentro do elemento. O custo computacional se concentra em duas operações:

- Um procedimento iterativo não linear para encontrar as coordenadas locais ξ_j no espaço paramétrico a partir das coordenadas cartesianas \mathbf{x}_j no espaço físico. Uma forma de fazer isso é encontrar o zero da função $\mathbf{F}(\xi_j) = \chi^e(\xi_j) - \mathbf{x}_j$ através de um método de Newton–Raphson:

$$\mathbf{J}_e \cdot [\xi_i^{k+1} - \xi_i^k] = -\mathbf{F}(\xi_i^k), \quad \mathbf{J}_e = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \xi} = \frac{\partial \chi^e}{\partial \xi}.$$

- A interpolação da velocidade \mathbf{u} no ponto de coordenadas paramétricas ξ_j .



Estratégias de cálculo para traçadores II

Pré- e Pós-
Processamento

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- 2 Integrar no espaço paramétrico do elemento padrão. Este processo envolve avançar a partícula dentro de um elemento usando um campo de velocidades transformado no espaço paramétrico até que a partícula atinja a fronteira do elemento. O processo é então continuado no elemento vizinho para onde a partícula se dirige. O custo computacional se concentra em duas operações:

- Interpolação da velocidade \mathbf{u}_ξ num ponto de coordenadas ξ_j no espaço paramétrico, que pode ser obtida pela fórmula:

$$\mathbf{u}_\xi^e = \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \chi^e} \mathbf{u}$$

- Um procedimento iterativo não linear para encontrar a interseção da linha de trajetória com a fronteira do elemento.



Estratégias combinadas: busca guiada I

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Na *busca guiada*, a velocidade é predominantemente avaliada no espaço físico, mas utiliza o espaço paramétrico, eliminando a necessidade do mapeamento inverso (que é feito de forma iterativa), mas introduzindo um erro associado à variação do Jacobiano no mapeamento.
- A ideia é variar o passo de tempo nos estágios do procedimento de Runge–Kutta de forma que a partícula sempre atinja a fronteira em cada estágio ou permaneça dentro do elemento no último estágio. Vale lembrar que cada estágio de Runge–Kutta é linear.
- Cada subpasso requer três operações de interpolação para calcular \mathbf{v}_ξ nas fronteiras do elemento. Isto deve ser comparado com as doze interpolações necessárias na iteração de Newton–Raphson.

Estratégias combinadas: busca guiada II

Pré- e Pós-
Processamen-
to

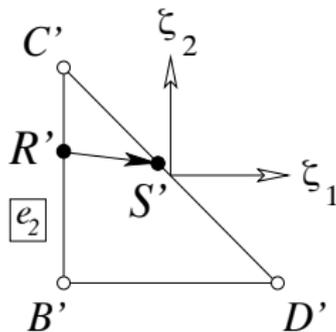
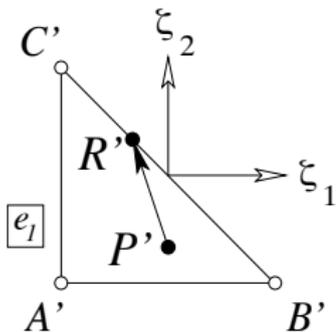
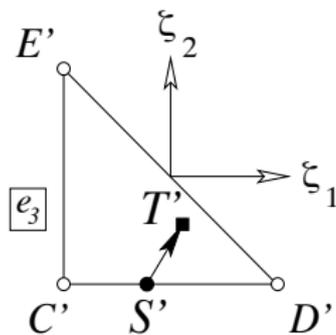
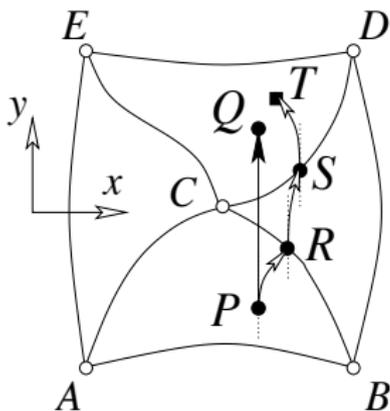
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores





Estratégias combinadas: busca guiada com verificação de erro e esquema híbrido

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores

- Na *busca guiada com verificação de erro*, o erro introduzido pelo Jacobiano variável em elementos curvos é monitorado e se ultrapassa uma tolerância ϵ , o mapeamento inverso é aplicado.
- No *esquema híbrido*, as trajetórias são calculadas no espaço paramétrico desde que as partículas permaneçam no interior dos elementos durante todos os estágios do algoritmo de Runge–Kutta. Se por acaso a partícula alcançar a fronteira do elemento, então uma busca guiada com verificação de erro no espaço físico é feita.



Teste e comparação das estratégias: escoamento transiente em tubo I

Pré- e Pós-
Processamento

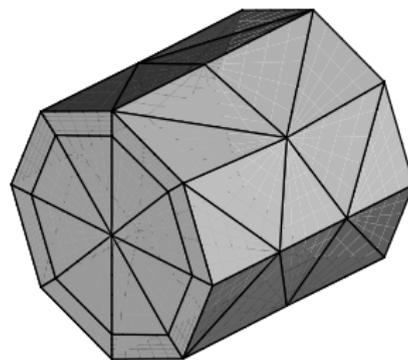
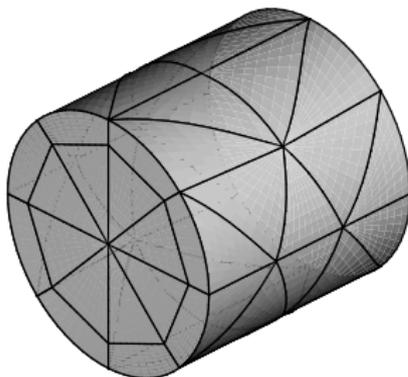
Bruno S.
Carmo

Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

Visualização

Traçadores



Campo de velocidades:

$$u = -x, \quad v = -0,1y, \quad w = -20ze^{-0,1t},$$

Que resultará nas seguintes coordenadas para uma partícula no tempo t

$$x(t) = x_0e^{-t}, \quad y(t) = y_0e^{-0,1t}, \quad z(t) = z_0e^{200(e^{-0,1t}-1)}.$$



Teste e comparação das estratégias: escoamento transiente em tubo II

Pré- e Pós-Processamento

Bruno S. Carmo

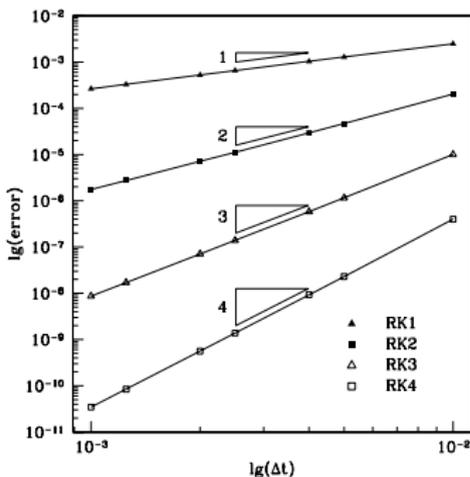
Discretização das condições de contorno

Geração de malhas

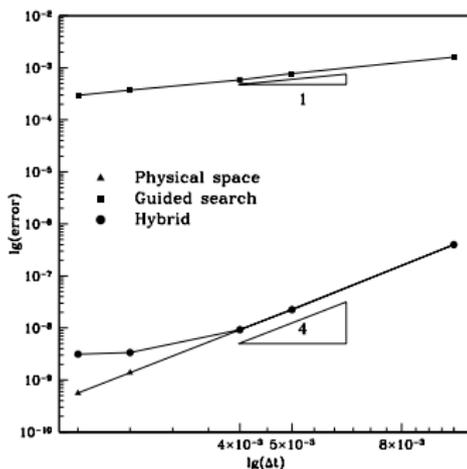
Visualização

Traçadores

Calculando a posição de uma partícula com $x_0 = 0,5$, $y_0 = 0,25$ e $z_0 = 0,35$ e tempo final $T = 0,2$.



Busca guiada com $\epsilon = 10^{-12}$, variando o número de estágios do RK e o Δt



Comparação entre as estratégias, usando RK4.



Teste e comparação das estratégias: escoamento transiente em tubo III

Pré- e Pós-
Processamen-
to

Bruno S.
Carmo

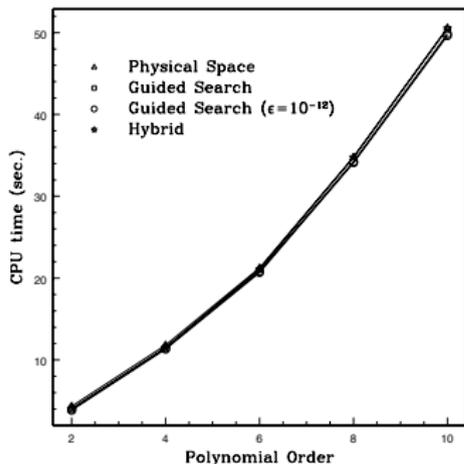
Discretização
das condições
de contorno

Geração de
malhas

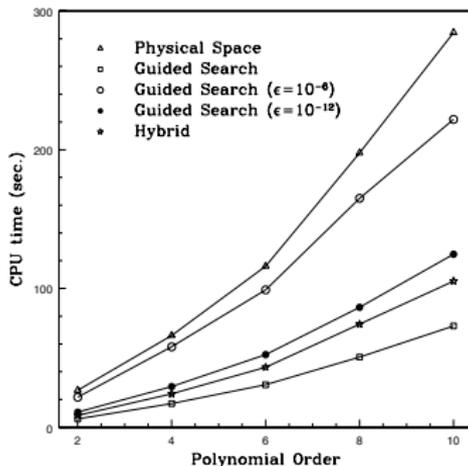
Visualização

Traçadores

Comparação de custo computacional, avançando 100 partículas cuja posição inicial é uma circunferência concêntrica ao tubo.



Diâmetro da circunferência
igual a $0,45D$.



Diâmetro da circunferência
igual a $0,90D$.