Estudo sobre a Geração de Malhas Tetraedrais Não Estruturadas para a Modelagem Tridimensional de Problemas de Fenômenos de Transporte com o Método de Volumes Finitos

Eduardo Hidenori Enari^{*,1}, Jeronimo dos Santos Travelho^{**,1}

(1) Área de Computação Científica e Processamento de Alto Desempenho

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)

(*) Doutorado, Bolsa CAPES, e-mail: eduardo@lac.inpe.br; (**) Orientador

Resumo

As malhas não estruturadas são cada vez mais utilizadas na modelagem numérica de problemas de fenômenos de transporte, devido a sua flexibilidade na discretização de geometrias complexas. O método de volumes finitos, por sua vez, possibilita discretizar as equações de transporte em volumes de controle com geometria arbitrária. O método de volumes finitos usa o centro do volume (esquemas *cell-centered*) ou os vértices (esquemas *cell-vertex*) para calcular as variáveis. Este artigo apresenta um estudo sobre a geração e utilização de malhas não estruturadas e o método de volumes finitos na modelagem numérica tridimensional, de problemas de fenômenos de transporte. Uma atenção especial é dada à qualidade da malha e os esquemas *cell-centered*.

Palavras-Chave: Malhas Tridimensionais não Estruturadas, Fenômenos de Transporte, Método dos Volumes Finitos, Esquemas Cell-Centered

Introdução

Nos últimos anos, as malhas não estruturadas tornaram-se o foco de uma quantidade considerável de pesquisas, envolvendo a modelagem de problemas de fenômenos de transporte. As malhas não estruturadas, em geral, formadas por um arranjo de triângulos e tetraedros, em duas e três dimensões, respectivamente, apresentam grande flexibilidade para discretizar geometrias complexas, e permitem adensar a malha somente em regiões de interesse, sem a necessidade de se modificar toda a malha. Além disso, vários avanços foram realizados na construção de algoritmos mais eficientes para a construção de malhas não estruturadas bi e tridimensionais [6].

As malhas não estruturadas foram utilizadas inicialmente com o método de elementos finitos. O uso do método de volumes finitos em conjunto com as malhas não estruturadas é mais recente. O método dos volumes finitos possibilita discretizar as equações de transporte em volumes com formato arbitrário, além de satisfazer os princípios de conservação, inerentes às equações de transporte. Isto ocorre porque a discretização envolve a integral de volume das equações de transporte sobre os volumes definidos pela malha, o que também pode ser obtido através do balanço dos fluxos pelas faces do volume. Melhores detalhes sobre o desenvolvimento da utilização de elementos finitos e volumes finitos com malhas não estruturadas podem ser encontrados em [12].

A modelagem numérica com malhas não estruturadas é feita com as propriedades calculadas no interior dos volumes (esquemas *cell-centered*), como feito em [3][4][5] ou nos vértices (esquemas *cell-vertex*), como [13]. Os esquemas baseados nos vértices demandam menor esforço computacional e menor necessidade de armazenamento de informações. Por outro lado, para uma mesma malha, os volumes de controle usado nos esquemas centrados no volume são menores que os usados nos esquemas centrados nos vértices, levando a crer que a qualidade de solução dos esquemas centrados nos volumes sejam melhores que a obtida com os esquemas centrados nos vértices [12].

Neste artigo, é feita uma breve discussão sobre a utilização do Método de Volumes Finitos com Malhas Não Estruturadas, em problemas tridimensionais de fenômenos de transporte. O interesse aqui é utilizar esquemas do tipo *cell-centered*. Em linhas gerais, este artigo vai apresentar algumas opções de discretização das equações de transporte, no esquema *cell-centered*. Uma seção vai ser dedicada à geração de malhas tridimensionais formadas por tetraedros e a qualidade dos volumes gerados. Ao final, em vista das necessidades das metodologias apresentadas para a discretização das equações e a qualidade dos volumes da malha, é feita uma discussão sobre as possibilidades na modelagem numérica.

Método de Volume Finitos no Esquema Cell-Centered

Em geral, a modelagem centrada no volume calcula as propriedades no baricentro dos volumes, como em [4][5]. A Abordagem Baseada no Circuncentro (ABC) [11] utiliza como centro do volume o circuncentro do volume. As modelagens baseadas no baricentro fazem uso do valor de algumas propriedades nos vértices do volume. O conhecimento das informações nos vértices possibilita calcular o valor das propriedades nas faces por

meio de uma média dos valores nos vértices [4], ou por meio de projeções entre a face e a linha que liga os baricentros [5]. A ABC, por sua vez, utiliza apenas os valores nos circuncentros, o que diminui a quantidade de memória utilizada no armazenamento das informações. Além disso, como a linha que liga dois circuncentros é perpendicular à face do volumes, possibilitando calcular o valor das propriedades nas faces através de uma média ponderada pela distância do circuncentro à face [11]

Com a utilização de um gerador de malhas com triangulação Delaunay, o *Easymesh* [7], foi possível aplicar a ABC na modelagem de problemas bidimensionais de transferência de calor [11] e na modelagem de problemas de escoamentos incompressíveis bidimensionais [1]. No caso tridimensional, Pereira Filho [8], utilizou a ABC para modelar escoamentos incompressíveis em uma malha semi-estruturada.

A ABC tem como dificuldade no seu uso, a qualidade dos volumes de controle gerados na malha. Caso o circuncentro esteja fora do volume de controle, por exemplo, não se pode utilizar a ABC. Assim, a ABC é dependente da qualidade da malha.

Geração de Malhas Não Estruturadas Tetraedrais

Quando se gera uma malha formada por triângulos ou tetraedros, uma das preocupações é gerar volumes de controle “bem formados”, para garantir a precisão dos resultados dos métodos utilizados na modelagem numérica. Deseja-se que os elementos gerados apresentem uma baixa razão ou limites sobre seus maiores e menores ângulos internos [10].

Em duas dimensões a triangulação Delaunay produz os triângulos com os “maiores menores ângulos”, ou seja, os triângulos são gerados com as menores razões entre o maior e o menor ângulo interno. Esta característica tornou bastante interessante a geração de algoritmos para a geração de malhas com volumes Delaunay. Em três dimensões, os tetraedros gerados por metodologias análogas às utilizadas em duas dimensões, poderiam gerar tetraedros com baixa razão entre os maiores e menores ângulos internos.

Podem ser encontrados vários trabalhos a respeito de geração de malhas tetraedrais não estruturadas. As metodologias adotadas incluem o avanço da frente [2][9], ou o refinamento Delaunay [10].

Uma medida utilizada na verificação da qualidade dos tetraedros de uma malha é a razão entre o circunraio da esfera que passa pelos vértices do tetraedro e o comprimento da menor aresta (B) [10]. Este valor possibilita verificar a existência de tetraedros “alongados”, onde esta razão é alta, enquanto que em tetraedros com as dimensões das arestas mais uniformes, esta razão seria baixa. Esta razão está relacionada com os menores ângulos das arestas de um tetraedro, pela equação abaixo:

$$\frac{r}{l} = \frac{1}{2 \sin \theta_{\min}} \quad (1)$$

onde r é o comprimento do circunraio, l é o comprimento da menor aresta e $\theta_{\min}$ é o menor ângulo entre arestas do tetraedro.

Shewchuk [10] apresentou um algoritmo de refinamento Delaunay, onde a tetraedralização é obtida a partir de uma tetraedralização inicial, onde os tetraedros são refinados por meio de inserção de pontos. Esta inserção de pontos leva em conta as dimensões (de acordo com a necessidade de refinamento da malha) e a qualidade dos tetraedros (tetraedros com baixa qualidade são divididos pela inserção de novos pontos em seu interior). Pelo algoritmo de Shewchuk, o limite superior de B é 2. Shewchuk aponta que outros algoritmos, tais como o de Ruppert e Chew, tem como limitantes superiores de B , $B = \sqrt{2}$ e $B = 1$, respectivamente.

Como testes para a geração de malhas tetraedrais, foram geradas duas malhas: para uma esfera e para um cubo, as quais apresentavam como limitantes superiores de B , $B = 1,93$ e $B = 0,87$, respectivamente. Verificando os tetraedros gerados, observou-se que na malha gerada para a esfera, vários tetraedros apresentavam o Circuncentro fora do tetraedro. No caso do cubo, os circuncentros dos tetraedros se encontravam sobre a face. Desta forma, mesmo com limitantes tão baixos, as malhas geradas dificultam o uso da ABC.

Conclusões

Dos resultados obtidos na geração de malhas, verificou-se uma grande dificuldade em se obter uma malha com boa qualidade dos tetraedros, para possibilitar a utilização da ABC. Dos casos gerados, verificou-se que os circuncentros se encontravam, em alguns casos, fora do volume de controle. Observa-se porém, que as malhas geradas tem qualidade bastante razoável para a utilização em modelagens numéricas, considerando o baricentro como centro do volume.

Referências

- [1] Fazenda, A. L.; Travelho, J. S. “Abordagem Baseada no Circuncentro em Escoamentos Incompressíveis Bidimensionais”, CNMAC, Belo Horizonte, Set, 2001.
- [2] Frey, P. J.; Borouchaki, H.; George, P. L.; *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157:1-2, 115-131, 1998
- [3] Frink, N. T. *A Fast Upwind Solver for the Euler Equations on Three-Dimensional Unstructured Meshes*, AIAA-91-0102, 1991.
- [4] Frink, N. T. *Recent Progress Toward a Three-Dimensional Unstructured Navier-Stokes Flow Solver*, AIAA-94-0061, 1994.
- [5] Mathur, S. R.; Murthy, S. R. *Numerical Heat Transfer*, Part B, 31:195-215, 1997
- [6] Mavriplis, D. J. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 29:473-514, 1997
- [7] Niceno B. *EasyMesh – version 1.4 A Two-Dimensional Quality Mesh*. <http://www-dinma.univ.trieste.it/~nirftc/research/easymesh/easymesh.html>
- [8] Pereira Filho, N. “Simulação de Escoamentos Incompressíveis Trimensionais com Uso da Abordagem Baseada no Circuncentro”, Tese de Doutorado em Computação Aplicada, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), 2000.
- [9] Rassineux, A.; *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 141: 3-4, 335-354, 1997
- [10] Shewchuk, J. R. *Tetrahedral Mesh Generation by Delaunay Refinement*. Internet: <http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/delref3d.ps> (download em 18/09/2001). Proceedings of the Fourteenth Annual Symposium on Computational Geometry (Minneapolis, Minnesota), pages 86-95, Association for Computing Machinery, 1998.
- [11] Travelho, J. S., Fazenda, A. L., Enari, E. H., “Abordagem pelo Circuncentro para Malhas Não Estruturadas em Transferência de Calor”, XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Águas de Lindóia, 1999
- [12] Venkatakrisnan, V. *A Perspective on Unstructured Grid Flows Solvers*, NASA CR-195025, ICASE Report No. 95-3, 1995
- [13] Venkatakrisnan, V.; Mavriplis, D. J. *Implicit Method for the Computation of Unsteady Flows on Unstructured Grids*, NASA CR-198206, ICASE Report No. 95-60, 1995