

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA

***UM PROCEDIMENTO PARA A OTIMIZAÇÃO
DE FORMA APLICADO A ESCOAMENTO DE
FLUIDOS***

Dissertação submetida à Universidade Federal de Santa Catarina para
obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica

Hilbeth Parente de Deus

Florianópolis, julho de 2002

Um Procedimento para a Otimização de Forma Aplicado a Escoamento de Fluidos

Hilbeth Parente de Deus

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

Mestre em Engenharia

Especialidade Engenharia Mecânica, área de concentração Engenharia e Ciências Térmicas, e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Marcelo Krajnc Alves, Ph.D.

Orientador

Álvaro Toubes Prata, Ph.D.

Coorientador

José Antônio Bellini da Cunha Neto, Dr.

Coordenador da Pós-Graduação

Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, Ph.D.

Membro da Banca Examinadora

Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr.

Presidente da Banca Examinadora

César José Deschamps, Ph.D.

Membro da Banca Examinadora

Mário César Zambaldi, Dr.

Membro da Banca Examinadora

DEDICATÓRIA

Aos meus amados pais Hilton e Elizabeth que me criaram e educaram sempre dentro de um ambiente de muito amor e carinho . . .

AGRADECIMENTOS

... à D'us por ter-me permitido nascer de duas pessoas tão maravilhosas como meus pais, à estes por “ tudo ”, ao meu irmão e amigo Helilton, ao Club de Regatas Vasco da Gama pela sua existência, companhia e constante presença em minha vida ao longo de todos anos, e à CAPES pelo apoio financeiro nestes dois anos de trabalho.

... ao professor, orientador e grande amigo Marcelo Krajnc Alves por todo seu incentivo e apoio.

... aos meus amigos do GRANTE e do NRVA, bem como aos de outros laboratórios, em especial a Afrânio Rebolças C. Filho, Alexandre Dors Hoffmeister, André F. Vieira da Cunha, Camilo Moraes Diórgenes, Carlos A. Camargo de Abreu, Christian J. Losso Hermes, Francisco Frederico dos Santos Matos, Gabriel I. Medina Tápia, Jefferson Ernani Hartmann, Juliano Wilson F. Heidrich, Márcio Silveira, Nederson da Silva Köehler, Paulo Fernando Grando, Paulo Rogério C. Couto, Públio O. Oliveira Duarte, Raimundo R. Matos da Cunha, Raphaela Frota Reinaldo, Roberto Seidel, Rodrigo Rossi, Rogério Texeira Mâsih, Sérgio Pereira da Rocha, Tiago de Sousa Pereira, Viviane Lenzi da Rocha pelo carinho, incentivo, apoio e companheirismo, e ao meu grande amigo João Carlos Arantes Costa Jr.

“ So you thought you might like to go to the show.
To feel the warm thrill of confusion that space cadet glow.
Tell me is something eluding you, Sunshine?
Is this not what you expected to see?
If you wanna find out what's behind these cold eyes,
You'll just have to blow your way through this disguise. ”

R. Waters

Sumário

Capítulo 1: Introdução

1.1 Motivação	1
1.2 Revisão Bibliográfica	2
1.3 Objetivo / Estrutura da Dissertação	5

Capítulo 2: Equação de Navier-Stokes

2.1 Introdução	6
2.2 Formulação Forte do Problema	7
2.3 Formulação Fraca do Problema	8
2.4 Formulação do Problema pelo Método de Elementos Finitos	13
2.4.1 O Sistema Não Linear	26
2.4.2 O Campo de Velocidade Prescrito	26
2.5 O Algoritmo	27
2.5.1 Formulação do Esquema Numérico	27
2.5.2 Determinação de $[K_T^k]$	29
2.5.3 Algoritmo para Solução do Sistema Não Linear	30
2.6 Problemas Aplicados	31
2.6.1 “Square Lid-Driven Cavity”	31
2.6.2 Difusor Divergente	48

Capítulo 3: Otimização de Forma

3.1	Introdução	60
3.2	Otimização de Funções	60
3.2.1	Condição Necessária de Otimalidade	61
3.2.2	Método do Lagrangeano Aumentado	62
3.3	Geração de Malha	70
3.4	A Função Objetivo	72
3.5	Aplicações	74
3.5.1	Problema Clássico da Cavidade (“Square Lid-Driven Cavity”)	74
3.5.2	Difusor Divergente	84
3.5.3	Comentários Adicionais	94

Capítulo 4: Conclusões e Sugestões

4.1	Conclusões	99
4.2	Sugestões	100

	Referências Bibliográficas	101
--	-----------------------------------	------------

	Apêndice A: Derivadas de Segunda Ordem	108
--	---	------------

	Apêndice B: O Teorema de Kuhn-Tucker	112
--	---	------------

	Apêndice C: A Equação de Euler-Lagrange	118
--	--	------------

Apêndice D: O Método de Newton	126
Apêndice E: A Matriz Hessiana	131
Apêndice F: O Gradiente	134

Lista de Símbolos

\vec{u}	Vetor velocidade (Capítulo 2)
\vec{u}	Vetor dos multiplicadores de Lagrange (Capítulo 3)
p	Pressão (Capítulo 2)
ρ	Densidade
\vec{b}	Vetor de força de corpo
$\varepsilon(\cdot)$	Tensor deformação (Capítulo 2)
ε	Parâmetro de penalidade (Capítulo 3)
$\vec{\lambda}$	Vetor dos multiplicadores de Lagrange (Capítulo 3)
ν	Viscosidade dinâmica
Re	Número de Reynolds
\vec{x}	Vetor posição (Capítulo 2)
\vec{x}	Vetor das variáveis de projeto (Capítulo 3)
x_i^{inf}	Ínfimo da i-ésima restrição de caixa
x_i^{sup}	Supremo da i-ésima restrição de caixa
∇	Gradiente
Δ	Operador Laplaciano
\wedge	Conectivo lógico “e”
\vee	Conectivo lógico “ou”
\therefore	Conectivo lógico “então”
\forall	Quantificador “qualquer que seja”
\otimes	Produto tensorial
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produto interno
\cdot	Produto escalar
$\ \cdot \ $	Norma

Lista de Figuras

Fig. 1: Exemplo de domínio genérico a ser estudado	8
Fig. 2: Exemplo de elemento T3	15
Fig. 3: Exemplo de elemento T6	15
Fig. 4: “Square Lid-Driven Cavity”	32
Fig. 5: Divisão do domínio nas nove regiões	33
Fig. 6: Malha 90 X 90 estruturada e não regular	34
Fig. 7: Norma euclidiana do vetor velocidade ($Re = 1000$)	34
Fig. 8: Campo de pressão ($Re = 1000$)	35
Fig. 9: Campo de velocidade ($Re = 1000$)	35
Fig. 10: Vórtice captado no canto direito inferior da cavidade ($Re = 1000$)	36
Fig. 11: Vórtice captado no canto esquerdo inferior da cavidade ($Re = 1000$)	36
Fig. 12: Perfil da vel. horizontal ao longo da linha de centro vertical ($Re = 1000$)	37
Fig. 13: Perfil da vel. vertical ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 1000$)	38
Fig. 14: Perfil do campo de pres. ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 1000$)	39
Fig. 15: Perfil do campo de pres. ao longo da linha de centro vertical ($Re = 1000$)	40
Fig. 16: Norma euclidiana do vetor velocidade ($Re = 5000$)	41
Fig. 17: Campo de pressão ($Re = 5000$)	41
Fig. 18: Campo de velocidade ($Re = 5000$)	42
Fig. 19: Vórtice captado no canto esquerdo superior ($Re = 5000$)	42
Fig. 20: Vórtice captado no canto esquerdo inferior ($Re = 5000$)	43
Fig. 21: Vórtice captado no canto direito inferior ($Re = 5000$)	43
Fig. 22: Perfil da vel. horizontal ao longo da linha de centro vertical ($Re = 5000$)	44
Fig. 23: Perfil da vel. vertical ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 5000$)	45
Fig. 24: Perfil do campo de pres. ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 5000$)	46
Fig. 25: Perfil do campo de pres. ao longo da linha de centro vertical ($Re = 5000$)	47
Fig. 26: Difusor Divergente	49
Fig. 27: Malha 25 X 40	50
Fig. 28: Norma euclidiana do vetor velocidade ($Re = 10$)	51

Fig. 29: Campo de pressão (Re =10)	51
Fig. 30: Campo de velocidade (Re = 10)	52
Fig. 31: Perfil do campo de pressão na parede do canal (Re = 10)	53
Fig. 32: Malha 25 X 80	54
Fig. 33: Norma euclidiana do vetor velocidade (Re = 100)	54
Fig. 34: Campo de pressão (Re = 100)	55
Fig. 35: Campo de velocidade (Re = 100)	55
Fig. 36: Perfil do campo de pressão na parede do canal (Re = 100)	56
Fig. 37: Algoritmo de otimização	67
Fig. 38: Vista global do esquema de solução do problema de ótimo	68
Fig. 39: Exemplo de abordagem do domínio via macro-elementos	68
Fig. 40: Descriminação das faces do macro-elemento	69
Fig. 41: Descriminação das interpolações utilizadas nos macro-elementos	70
Fig. 42: “Lid-Driven Cavity” modelada com dois macro-elementos e serendipity 17	70
Fig. 43: Geração da malha em elementos triangulares	71
Fig. 44: Domínio inicial	74
Fig. 45: Malha da forma inicial da cavidade (1.i)	75
Fig. 46: Malha da forma otimizada (1.i)	75
Fig. 47: Norma euclidiana do vetor velocidade (1.i)	76
Fig. 48: Campo de pressão (1.i)	76
Fig. 49: Campo de velocidade (1.i)	77
Fig. 50: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (1.i)	77
Fig. 51: Malha da forma inicial da cavidade (1.ii)	79
Fig. 52: Malha da forma otimizada (1.ii)	80
Fig. 53: Norma euclidiana do vetor velocidade (1.ii)	80
Fig. 54: Campo de pressão (1.ii)	81
Fig. 55: Campo de velocidade (1.ii)	81
Fig. 56: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (1.ii)	82
Fig. 57: Otimização da rampa da difusor divergente	84
Fig. 58: Malha da forma inicial do difusor (2.i)	85

Fig. 59: Malha da forma otimizada (2.i)	85
Fig. 60: Norma euclidiana do vetor velocidade (2.i)	86
Fig. 61: Campo de pressão (2.i)	86
Fig. 62: Campo de velocidade (2.i)	87
Fig. 63: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (2.i)	87
Fig. 64: Malha da forma inicial do difusor (2.ii)	89
Fig. 65: Malha da forma otimizada (2.ii)	90
Fig. 66: Norma euclidiana do vetor velocidade (2.ii)	90
Fig. 67: Campo de pressão (2.ii)	91
Fig. 68: Campo de velocidade (2.ii)	91
Fig. 69: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (2.ii)	92
Fig. 70: Pos. inicial e final dos nós da tampa superior referente ao caso (1.i)	95
Fig. 71: Pos. inicial e final dos nós da tampa superior referente ao caso (1.ii)	96
Fig. 72: Pos. inicial e final dos nós da rampa referente ao caso (2.i)	97
Fig. 73: Pos. inicial e final dos nós da parede referente ao caso (2.ii)	98

Lista de Tabelas

Tabela 1: Condições de Contorno da “Lid-Driven Cavity”

69

RESUMO

O trabalho aqui presente destina-se a fazer uma abordagem de um problema de *Otimização de Forma*, via *Método de Elementos Finitos de Galerkin*, sendo os alvos de estudos as equações de *Navier-Stokes* e *Continuidade* (bidimensionais). Os escoamentos aqui tratados são incompressíveis e encontram-se em regime permanente.

O objetivo do trabalho é dado um escoamento sobre uma superfície, encontrar a forma desta que “*minimiza*” a dissipação viscosa do escoamento analisado. Sendo esta definida como a *função objetivo* do nosso problema de ótimo, e onde as restrições encontradas são do tipo *lateral* e/ou *volumétrica*.

O tratamento dado neste trabalho ao problema de otimização de forma é fortemente baseado no cálculo do gradiente da função objetivo, que é feito numericamente. Este cálculo se dá através de *diferença finita central*, onde cada uma das *variáveis de projeto* são “*perturbadas*” em ambas as direções. A cada perturbação dada uma nova malha é gerada para o domínio e a análise do escoamento é refeita. A formulação implementada para a análise do escoamento, possui ainda *parâmetros de estabilização* que possibilitam o tratamento de escoamentos em que valores elevados do *número de Reynolds* ($Re \sim 1000$) estejam envolvidos, bem como permitem a não satisfação das *condições de Brezzi-Babuška* (ou *condições de inf-sup*). A eficiência desta estratégia é checada em duas aplicações. O critério de otimalidade adotado é a satisfação das *condições de Kuhn-Tucker*.

Palavras-chave: [*Kuhn-Tucker*], [*Método de Elementos Finitos de Galerkin*], [*Otimização de Forma*].

ABSTRACT

The present work presents an approach to the solution of a *Shape Optimization* problem, where one makes use of the *Galerkin Finite Element Method*. The target state equations of the optimization problem are *Navier-Stokes* and *Continuity* equations. The flows considered here are incompressible and at a steady-state condition.

The objective of this work is to find the optimal shape of a domain so that it minimizes the viscous dissipation of the resulting flow. Thus, the viscous dissipation is defined as the *objective function* of the optimization problem which is subjected to a volume and side constraints.

The treatment given in this work to shape optimization is strongly based on the computation of the gradient of the objective function, that is done numerically by the central finite difference scheme. At each perturbation of the finite difference scheme a new mesh is generated for the modified domain where a flow analysis is done. In the flow formulation we have introduced some stabilization parameters that allowed to solve flows with high Reynolds number ($Re \sim 1000$) without satisfying the Brezzi-Babuška (or inf-sup) conditions. The effectiveness of this strategy is verified by solving two problem cases. The Kuhn-Tucker necessary optimality condition is verified for all problem cases.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Este trabalho foi motivado pelo desejo de resolver problemas de otimização de forma, cuja aplicação tem crescido ao longo dos anos, particularmente em áreas como mecânica estrutural e controle ótimo, onde muitos problemas podem ser formulados como a minimização de funcionais definidos sobre uma classe de domínios admissíveis.

A otimização de forma é um procedimento quase indispensável no projeto e construção de estruturas industriais. Por exemplo a fuselagem de aeronaves e de espaçonaves devem satisfazer a estritos critérios de performance mecânica e simultaneamente ter o mínimo peso possível. O problema de otimização de forma para tais estruturas consiste em encontrar a geometria da estrutura que minimiza um dado funcional (i.e. tal como o peso da estrutura) e que simultaneamente satisfaça as restrições especificadas (como espessura, energia de deformação, ou limites de deformação/físicos).

A geometria da estrutura pode ser considerada como um domínio no espaço Euclidiano tri-dimensional. Em geral o funcional toma a forma de uma integral sobre o domínio, ou sobre sua fronteira, onde o integrando depende da suavidade da solução do problema de valor de contorno. O problema de otimização de forma consiste na minimização de tal funcional com respeito ao domínio geométrico que deve ser tomado sobre uma família de domínios admissíveis.

Solucionar um problema de otimização de forma significa idealmente encontrar o mínimo de um funcional específico sobre um conjunto de domínios admissíveis. A análise, a priori, da existência da solução de tal problema seria de grande importância, todavia torna-

se muito pouco adequado avaliar os resultados quanto à existência (a priori) deste mínimo. Em geral a existência da solução para tais problemas é obtida pela imposição, de algumas restrições não reais, a família de domínios admissíveis. Estas restrições são comumente não satisfatórias do ponto de vista físico.

Na prática, a engenharia está interessada em aumentar a rigidez de uma placa, reduzir o arrasto na asa de um avião, diminuir o peso de um radiador, etc. Muitos estudos no campo da otimização de forma tem sido desenvolvidos nestes últimos anos. Os resultados na formulação de problemas de mecânica, na análise funcional e na teoria de controle tem sido recentemente combinados, tornando este um campo muito fértil em termos de estudo e produção científica. O trabalho aqui desenvolvido tem o intuito de aplicar tais teorias e conceitos a problemas de escoamento de fluidos sobre superfícies.

1.2 Revisão Bibliográfica

As metodologias apresentadas nas referências podem ser divididas didaticamente em dois grupos: as que fazem referência à solução da equação de Navier-Stokes pelo Método de Elementos Finitos e as que se referem à otimização de forma.

A literatura especializada mostra que os resultados de simulações numéricas da equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis, com a utilização do método clássico de Galerkin, podem sofrer oscilações espúrias (instabilidades numéricas). Isto se deve a duas fontes principais. A primeira seria o caráter advectivo-difusivo das equações, que pode permitir a contaminação do campo de pressão, assim como a conseqüente contaminação do campo de velocidade (quando o escoamento é submetido a elevados números de Reynolds). A segunda fonte destas oscilações numéricas seria à formulação de caráter “ misto ” (envolvendo campos de pressão e velocidade) das equações, o que limita fortemente a escolha das combinações das funções de interpolação elementares usadas para aproximar os campos de velocidade e pressão.

O contorno destes problemas, i.e. a estabilização da solução, tem sido estudada de forma incessante com o passar dos anos. Como exemplo das metodologias com esta finalidade pode-se citar: a formulação de Petrov-Galerkin onde a base das funções peso não são simplesmente iguais a uma base de funções forma (“ shape functions ”). Neste caso esta

base é enriquecida pela adição de funções perturbação descontínuas que possuem características numéricas desejáveis, resultando então em um esquema que foi introduzido por Hughes e Brooks (1980), Hughes e Brooks (1982), e Kondo (1994). Esta metodologia é referenciada na literatura como “ SUPG – Streamline Upwind Petrov Galerkin ”. O “ SUPG ” tem-se mostrado capaz de controlar as instabilidades numéricas e com a vantagem de não produzir uma excessiva difusão numérica que pudesse prejudicar a solução (o que ocorre no esquema “ up wind ” puro). O que se percebeu, porém, foi que na vizinhança de regiões com elevados gradientes a precisão dos resultados se mostrou vulnerável às tão indesejadas instabilidades.

Formulações adicionais com a mesma finalidade da citada acima também podem ser referenciadas, como o Método do Gradiente Projetado (ver Cecchi et al (1998) e Codina e Blasco (2000)), onde o gradiente de pressão é projetado no espaço do campo de vetores contínuos do elemento finito e o divergente da diferença entre estes dois vetores (gradiente de pressão e sua projeção) é incorporado na equação da continuidade. Outros exemplos de metodologias são as que utilizam as Funções Bolha (“Residual Free Bubbles” – ver Franca et al (1998)), onde a idéia é enriquecer o subespaço das funções peso com funções elementares pré-definidas para que agreguem precisão e estabilidade à solução. Há ainda o Método de Mínimos Quadrados de Galerkin (“Galerkin Least Square”) baseado nas referências Achdou et al (1999), Codina (2000) e Franca e Frey (1992), que alia um termo adicional cujo objetivo é eliminar as oscilações que podem estar presentes nas regiões de gradientes elevados. Tal metodologia tem alcançado excelentes resultados. Outros bons exemplos são os esquemas semi-implícitos (ver Codina et al (1998) e Kjellgren (1997)), que consistem em tratar os termos difusivos de forma implícita e os termos advectivos de forma explícita. Pode-se citar ainda os esquemas que utilizam ordem de interpolação iguais para os campos de pressão e velocidade (ver Franca e Frey (1992) e Codina e Blasco (1997)), i.e. tais formulações não satisfazem a condição de Brezzi-Babuška, ou condições de inf-sup (ver Babuška (1973) e Brezzi (1974)). Esta é uma condição necessária para performance ótima de um método, quando este é aplicado a um conjunto bem definido de dados de entrada A . Sendo satisfeitas as condições de inf-sup, diz-se então que tal método é robusto com relação ao conjunto A . Quando tal condição não é satisfeita o método apresenta uma performance sub-ótima ou não converge. Neste caso diz-se que o método não é robusto com relação ao

conjunto \mathcal{A} . Todavia, é possível que haja um subconjunto \mathcal{A}^* de \mathcal{A} , com respeito ao qual o método estudado seja robusto (ver Babuška e Narasimhan (1997)). Existem também esquemas com captura de descontinuidades (ver Codina (1993)), onde uma parcela de “amortecimento” é inserida na formulação, de tal forma que esta só atue em regiões de elevados gradientes com o objetivo de combater as possíveis oscilações numéricas da solução. Há ainda metodologias que fazem uso de malhas adaptativas a fim de capturar melhor as regiões de elevados gradientes, e deste modo contribuir para uma melhor precisão dos resultados (ver Bugada e Oñate (1995)).

A literatura na área de otimização de forma fornece uma gama de possibilidades para abordagem de tais problemas. Pode-se ter o gradiente da função objetivo calculado semi-analiticamente, ou numericamente (como é o caso deste trabalho). Também há a possibilidade do contorno do domínio ser modelado através de uma “spline” paramétrica que pode ser do tipo Ferguson, Bezier ou ainda uma “B-spline” (ver Bugada e Oñate (1995) e Virgil et al (1992)). Pode-se ainda descrever o contorno via funções polinomiais (ver Francavilla et al (1975)), ou através de linhas retas e circunferências, assim como através de “carregamentos fictícios” (ver Belegundu e Sajan (1988), Sajan e Belegundu (1989) e Yatheendhar e Belegundu (1993)). Os Métodos de Carregamentos Fictícios tem a peculiaridade de utilizar a solução problemas auxiliares, onde se encontram aplicadas as ditas cargas fictícias. A solução destes problemas auxiliares por sua vez permite achar a matriz da transformação que leva a perturbação das variáveis de projeto na perturbação das coordenadas dos nós da malha. Na verdade cada um destes métodos representam diferentes maneiras pelas quais as variáveis de projetos podem definir a forma da estrutura.

O problema de ótimo pode ser formulado de várias maneiras. Dentre as metodologias existentes pode-se destacar as seguintes: Os Métodos Sequenciais Quadráticos (“Sequential Quadratic Programming”) para otimização (ver Mahmoud et al (1994)), que ao longo dos anos tem-se mostrado bem eficiente para uma larga classe de problemas de otimização. Este método se caracteriza pela minimização de uma aproximação quadrática da função Lagrangeana a cada passo. Uma outra metodologia é a do Lagrangeano Aumentado (“Augmented Lagrangian Method”) que transforma o problema original em uma seqüência de problemas de caixa (“set box constrains”), e além acrescenta positividade à curvatura da função Lagrangeana do problema original.

O trabalho aqui presente utilizará o Método de Mínimos Quadrados de Galerkin (“Galerkin Least Square”). O cálculo do gradiente da função objetivo será feito de forma numérica, enquanto que para a descrição do contorno, se fará o uso de funções polinomiais. No que diz respeito a otimização, se fará o uso da metodologia do Lagrangeano Aumentado para transformar o problema original em uma seqüência de problemas de caixa (“set box constrains”), e com relação ao “solver” de otimização será utilizado um pacote da biblioteca IMSL do próprio compilador do Fortran (“Compaq Visual Fortran 6.6”).

1.3 Objetivo / Estrutura da Dissertação

O objetivo deste trabalho é desenvolver e implementar um código computacional para abordar problemas de otimização de forma referentes a escoamentos bidimensionais, incompressíveis, e em regime permanente, de fluidos Newtonianos, sobre uma superfície.

Segue agora uma breve apresentação a respeito de cada capítulo deste trabalho:

Capítulo 2: Este capítulo engloba desde a apresentação da formulação forte do escoamento até a apresentação do esquema numérico para a formulação em elementos finitos, bem como a apresentação de alguns exemplos de aplicação.

Capítulo 3: Este capítulo engloba desde a apresentação da formulação de um problema genérico de otimização, bem como a apresentação das condições necessárias de otimalidade, indo até a definição da estratégia numérica adotada para minimizar a função objetivo definida, além da apresentação de exemplos de aplicação da metodologia.

Capítulo 4: Este capítulo apresenta as conclusões referentes aos resultados alcançados neste trabalho, bem como sugestões para o incremento e continuidade deste em um provável trabalho futuro.

Capítulo 2

Equação de Navier-Stokes

2.1 Introdução

O capítulo aqui presente engloba desde a apresentação da formulação forte do escoamento até a apresentação do esquema numérico para a formulação em elementos finitos, bem como exemplos de aplicação deste.

Primeiramente será realizada a exposição do problema em sua forma forte, com todas as suas condições de contorno (essenciais e naturais). A equação de Navier-Stokes será aqui tratada em sua forma bi-dimensional, incompressível e em regime permanente, como se perceberá pelas condições a ela impostas.

O segundo passo é a obtenção da forma fraca do problema inicialmente apresentado. Uma importante observação que deve ser feita nesta etapa é o cuidado que se deve tomar com a “dimensão” da forma integral ponderada do problema, que deverá estar dimensionalmente consistente. Terminada a obtenção da forma fraca do problema, prossegue-se com a incorporação, a esta, dos parâmetros de estabilização aliados ao parâmetro de captura de descontinuidade. Os quais se tornam necessários ao se trabalhar com números de Reynolds elevados ($Re \sim 1000$) e também quando não se atende a condição de Brezzi-Babuška (“inf-sup condition”). Feito isto segue-se com a aplicação da formulação de elementos finitos.

A formulação de elementos finitos do problema é sem dúvida a etapa mais importante deste processo inicial, mas vale observar ainda que tal etapa é fortemente influenciada pelas anteriores. Nesta etapa serão obtidas todas as matrizes e vetores elementares que contribuirão para a formação da matriz de rigidez global.

Uma vez definida a estrutura de finitos, apresenta-se o esquema de solução do sistema não linear de equações gerado, e por fim são feitas algumas aplicações.

2.2 Formulação Forte do Problema

O problema (escoamento) a ser resolvido, pode ser descrito da seguinte forma: Seja o domínio limitado $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$, e seja $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ o seu contorno (fronteira). O problema consiste em determinar $\vec{u}(\vec{x})$ e $p(\vec{x})$, $\forall \vec{x} \in \Omega \cup \Gamma$, tais que:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\nabla \vec{u}(\vec{x}))\vec{u}(\vec{x}) - 2\nu \nabla \cdot \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) + \frac{1}{\rho} \nabla p(\vec{x}) = \vec{b}(\vec{x}) \quad \text{em } \Omega; \\ \text{onde } \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) = \frac{\nabla \vec{u}(\vec{x}) + \nabla^T \vec{u}(\vec{x})}{2}; \\ \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{u}(\vec{x}) = 0 \quad \text{em } \Omega; \\ \vec{u}(\vec{x}) = \vec{g}(\vec{x}) \quad \text{em } \Gamma_u; \\ 2\nu \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) \cdot \hat{n} - \frac{1}{\rho} p(\vec{x}) \hat{n} = \vec{h}(\vec{x}) \quad \text{em } \Gamma_t. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

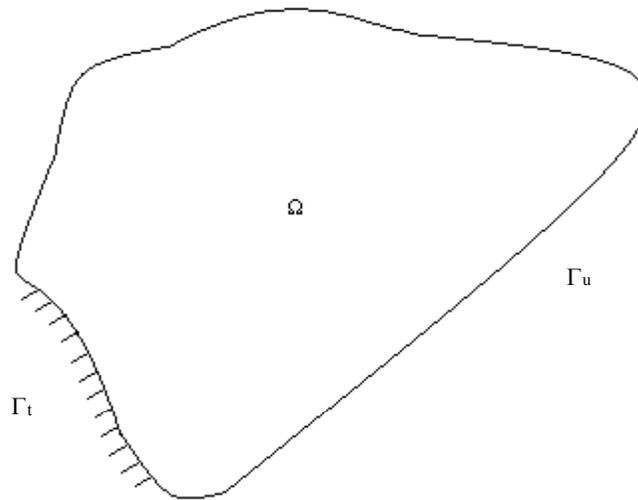


Figura 1: Exemplo de domínio genérico a ser estudado.

Onde:

Γ_u = Partição do contorno com campo de velocidade prescrito;

Γ_t = Partição do contorno com tensão prescrita;

definindo agora os conjuntos de trabalho:

$$\begin{aligned} Kinu &= \left\{ \vec{u}(\vec{x}) \in H^1(\Omega) \mid \vec{u}(\vec{x}) = \vec{g}(\vec{x}) \text{ em } \Gamma_u \right\}; \\ Varu &= \left\{ \vec{v}(\vec{x}) \in H^1(\Omega) \mid \vec{v}(\vec{x}) = \vec{0} \text{ em } \Gamma_u \right\}; \\ Kinp &= \left\{ p(\vec{x}) \in L^2(\Omega) \right\}; \\ Varp &= \left\{ \hat{p}(\vec{x}) \in L^2(\Omega) \right\}. \end{aligned}$$

Onde $L^2(\Omega)$ é o espaço normado das funções Lebesgue quadrado integráveis em Ω , e $H^1(\Omega)$ é o espaço Sobolev das funções Lebesgue quadrado integráveis, deriváveis em Ω , cujas derivadas também são Lebesgue quadrado integráveis, e normado ($\| \cdot \|_1$).

2.3 Formulação Fraca do Problema

Visando a obtenção da forma fraca, apresenta-se agora o problema em sua formulação integral ponderada:

Determinar $(\vec{u}, p) \in Kinu \times Kinp$, tais que:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \left\{ (\nabla \vec{u}) \vec{u} - 2\nu \nabla \cdot \varepsilon(\vec{u}) + \frac{1}{\rho} \nabla p - \vec{b} \right\} \cdot \vec{v} d\Omega \\ - \iint_{\Omega} \left\{ \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \vec{u} \right\} \hat{p} d\Omega = 0, \quad \forall (\vec{v}, \hat{p}) \in Varu \times Varp. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Onde convencionou-se que $\vec{b} = \vec{b}(\vec{x})$.

Agora:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})^T \vec{v}) &= \vec{v} \cdot \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})) + \nabla(\vec{v}) \cdot \varepsilon(\vec{u}) \\ &= \vec{v} \cdot \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})) + \varepsilon(\vec{v}) \cdot \varepsilon(\vec{u}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Também:

$$\operatorname{div}(p\vec{v}) = p \cdot \operatorname{div}(\vec{v}) + \vec{v} \cdot \nabla p. \quad (2.4)$$

Como resultado pode-se escrever:

$$\begin{aligned} &\iint_{\Omega} \{(\nabla \vec{u})\vec{u}\} \cdot \vec{v} d\Omega - \iint_{\Omega} 2\nu \{ \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})^T \vec{v}) - \varepsilon(\vec{v}) \cdot \varepsilon(\vec{u}) \} d\Omega \\ &+ \iint_{\Omega} \frac{1}{\rho} \{ \operatorname{div}(p\vec{v}) - p \cdot \operatorname{div}(\vec{v}) \} d\Omega \\ &- \iint_{\Omega} \{\vec{b}\} \cdot \vec{v} d\Omega - \iint_{\Omega} \frac{1}{\rho} \{ \nabla \cdot \vec{u} \} \hat{p} d\Omega = 0, \end{aligned} \quad (2.5)$$

porém:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \{ \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})^T \vec{v}) \} d\Omega &= \iint_{\partial\Omega} \{ \varepsilon(\vec{u})^T \vec{v} \cdot \hat{n} \} d\Gamma \\ &= \iint_{\Gamma_u} \{ \vec{v} \cdot \varepsilon(\vec{u}) \hat{n} \} d\Gamma + \iint_{\Gamma_t} \{ \vec{v} \cdot \varepsilon(\vec{u}) \hat{n} \} d\Gamma. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Contudo $\vec{v} \in \text{Varu}$, logo $\vec{v} = \vec{0}$ em Γ_u o que implica em:

$$\iint_{\Omega} \{ \operatorname{div}(\varepsilon(\vec{u})^T \vec{v}) \} d\Omega = \iint_{\Gamma_t} \{ \vec{v} \cdot \varepsilon(\vec{u}) \hat{n} \} d\Gamma. \quad (2.7)$$

Também:

$$\begin{aligned}
 \iint_{\Omega} \{div(p\vec{v})\}d\Omega &= \iint_{\partial\Omega} \{p\vec{v} \cdot \hat{n}\}d\Gamma \\
 &= \iint_{\Gamma_u} \{\vec{v} \cdot p\hat{n}\}d\Gamma + \iint_{\Gamma_t} \{\vec{v} \cdot p\hat{n}\}d\Gamma \\
 &= \iint_{\Gamma_t} \{\vec{v} \cdot p\hat{n}\}d\Gamma.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Agora substituindo os resultados de (2.7) e (2.8) em (2.5), encontra-se:

$$\begin{aligned}
 &\iint_{\Omega} \{(\nabla\vec{u})\vec{u}\} \cdot \vec{v}d\Omega - \iint_{\Omega} 2\nu\{\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{v})\}d\Omega \\
 &- \iint_{\Omega} \frac{1}{\rho}\{p \cdot div(\vec{v})\}d\Omega - \iint_{\Omega} \{\vec{b}\} \cdot \vec{v}d\Omega \\
 &- \iint_{\Omega} \frac{1}{\rho}\{div(\vec{u})\}\hat{p}d\Omega - \iint_{\Gamma_t} \{(2\nu\varepsilon(\vec{u}) \cdot \hat{n} - \frac{1}{\rho}p\hat{n}) \cdot \vec{v}\}d\Gamma = 0.
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Neste ponto, define-se:

$$\langle f(\vec{x}), g(\vec{x}) \rangle = \iint_{\Omega} \{f(\vec{x})g(\vec{x})\}d\Omega, \tag{2.10}$$

como o produto interno de quaisquer funções arbitrárias $f(\vec{x}), g(\vec{x}) \in L^2(\Omega)$. Desta forma substituindo a condição de contorno natural $(2\nu\varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) \cdot \hat{n} - \frac{1}{\rho}p(\vec{x})\hat{n} = \vec{h}(\vec{x})$ em Γ_t) obtém-se a seguir a formulação fraca:

Determinar $(\vec{u}, p) \in Kinu \times Kinp$, tais que:

$$\begin{aligned}
 &\langle (\nabla\vec{u})\vec{u}, \vec{v} \rangle_{\Omega} - 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}), \varepsilon(\vec{v}) \rangle_{\Omega} - \frac{1}{\rho} \langle p, div(\vec{v}) \rangle_{\Omega} \\
 &- \langle \vec{b}, \vec{v} \rangle_{\Omega} - \frac{1}{\rho} \langle div(\vec{u}), \hat{p} \rangle_{\Omega} - \langle \vec{h}, \vec{v} \rangle_{\Gamma_t} = 0, \quad \forall (\vec{v}, \hat{p}) \in Varu \times Varp.
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Objetivando possibilitar o trabalho com as mais diversas condições (satisfazendo ou não a condição de inf-sup, trabalhando ou não com elevados números de Reynolds) aplica-se agora o Método de Mínimos Quadrados de Galerkin proposto por Franca e Frey (1992).

Este método tem a peculiaridade de conter um termo adicional, cujo objetivo é eliminar as oscilações que podem se apresentar em regiões de elevados gradientes. Tal termo é denotado de termo de captura de descontinuidade ou captura de choque. Acrescentando estes parâmetros propostos por Franca e Frey (1992), o problema pode ser reformulado como:

Determinar $(\vec{u}, p) \in K_{inu} \times K_{inp}$, tais que:

$$B(\vec{u}, p, \vec{v}, \hat{p}) = F(\vec{v}, \hat{p}) \quad \forall (\vec{v}, \hat{p}) \in Varu \times Varp, \quad (2.12)$$

com

$$\begin{aligned} B(\vec{u}, p, \vec{v}, \hat{p}) &= \langle (\nabla \vec{u}) \vec{u}, \vec{v} \rangle_{\Omega} - 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}), \varepsilon(\vec{v}) \rangle_{\Omega} \\ &- \frac{1}{\rho} \langle p, \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega} - \frac{1}{\rho} \langle \text{div}(\vec{u}), \hat{p} \rangle_{\Omega} + \langle \text{div}(\vec{u}), \delta \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega} \\ &+ \sum_e \left\langle \left((\nabla \vec{u}) \vec{u} - \nu \Delta \vec{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau \left((\nabla \vec{v}) \vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

e

$$F(\vec{v}, \hat{p}) = \langle \vec{b}, \vec{v} \rangle_{\Omega} + \langle \vec{h}, \vec{v} \rangle_{\Gamma_t} + \sum_e \left\langle \vec{b}, \tau \left((\nabla \vec{v}) \vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}, \quad (2.14)$$

onde Ω_e é o domínio elementar, e os demais parâmetro de estabilidade são definidos abaixo:

$$\delta = \lambda \|\vec{u}(\vec{x})\|_p h_e \xi(\text{Re}_e(\vec{x})); \quad (2.15)$$

$$\tau = \frac{h_e}{2 \|\vec{u}(\vec{x})\|_p} \xi(\text{Re}_e(\vec{x})); \quad (2.16)$$

$$\text{Re}_e(\vec{x}) = \frac{m_k \|\vec{u}(\vec{x})\|_p h_e}{4\nu}; \quad (2.17)$$

$$\xi(\operatorname{Re}_e(\vec{x})) = \begin{cases} \operatorname{Re}_e(\vec{x}), & 0 \leq \operatorname{Re}_e(\vec{x}) < 1; \\ 1, & \operatorname{Re}_e(\vec{x}) \geq 1; \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\|\vec{u}(\vec{x})\|_p = \begin{cases} \left(\sum_{i=1}^n |u_i(\vec{x})|^p\right)^{\frac{1}{p}}, & 1 \leq p < \infty; \\ \max_{i=1, \dots, n} |u_i(\vec{x})|, & p = \infty; \end{cases} \quad (2.19)$$

$$m_k = \min\left\{\frac{1}{3}, 2C_k\right\}; \quad (2.20)$$

$$C_k \sum_e h_e^2 \|\nabla \cdot \varepsilon(\vec{v})\|_{0,e}^2 \leq \|\nabla \cdot \varepsilon(\vec{v})\|_0^2, \quad \vec{v} \in \operatorname{Varu}; \quad (2.21)$$

$$\lambda > 0. \quad (2.22)$$

O problema descrito em (2.1) fornece a condição de contorno essencial não homogênea ($\vec{u}(\vec{x}) = \vec{g}(\vec{x})$ em Γ_u). Pode-se então considerar a seguinte decomposição:

$$\vec{u} = \vec{u}^* + \vec{u}^\nabla, \quad (2.23)$$

onde \vec{u}^∇ é um campo de velocidade particular conhecido que satisfaz a condição de contorno não homogênea do campo prescrito na fronteira (i.e. $\vec{u}^\nabla \in \operatorname{Kinu}$), e \vec{u}^* é um campo de velocidades desconhecido tal que $\vec{u}^* \in \operatorname{Varu}$. Como resultado de tal decomposição, o problema em questão pode ser formulado como:

Dado $\vec{u}^\nabla \in \operatorname{Kinu}$, determine $(\vec{u}^*, p) \in \operatorname{Varu} \times \operatorname{Varp}$, tal que:

$$B(\vec{u}^*, p, \vec{v}, \hat{p}) = F(\vec{v}, \hat{p}) \quad \forall (\vec{v}, \hat{p}) \in \operatorname{Varu} \times \operatorname{Varp}, \quad (2.24)$$

com

$$\begin{aligned}
 B(\vec{u}^*, p, \vec{v}, \hat{p}) &= \left\langle (\nabla(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla))(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \vec{v} \right\rangle_\Omega \\
 &- 2\nu \left\langle \varepsilon(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \varepsilon(\vec{v}) \right\rangle_\Omega \\
 &- \frac{1}{\rho} \left\langle p, \operatorname{div}(\vec{v}) \right\rangle_\Omega - \frac{1}{\rho} \left\langle \operatorname{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \hat{p} \right\rangle_\Omega + \left\langle \operatorname{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \delta \operatorname{div}(\vec{v}) \right\rangle_\Omega \\
 &\sum_e \left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p + (\nabla(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla))(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla) - \nu \Delta(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \right. \right. \\
 &\left. \left. \tau((\nabla \vec{v})(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla) \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}) \right) \right\rangle_{\Omega_e},
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

e

$$F(\vec{v}, \hat{p}) = \left\langle \vec{b}, \vec{v} \right\rangle_\Omega + \left\langle \vec{h}, \vec{v} \right\rangle_{\Gamma_t} + \sum_e \left\langle \vec{b}, \tau((\nabla \vec{v})(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla) \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}) \right\rangle_{\Omega_e}. \tag{2.26}$$

2.4 Formulação do Problema pelo Método de Elementos Finitos

Tomando agora $\vec{u} = u_1 \hat{e}_1 + u_2 \hat{e}_2$, onde \hat{e}_1 e \hat{e}_2 são os vetores da base canônica. O domínio Ω é “aproximadamente” particionado em elementos Ω_e , nos quais os campos de velocidade e pressão serão interpolados. Seguindo então os procedimentos clássicos utilizados no Método de Elementos Finitos, pode-se escrever os campos de interpolação na seguinte forma matricial:

$$\begin{aligned}
 u_1^* &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_1^*} & u_1^\nabla &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_1^\nabla} & \therefore u_1 &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_1}; \\
 u_2^* &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_2^*} & u_2^\nabla &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_2^\nabla} & \therefore u_2 &= [\mathbb{N}_u] \vec{q}_e^{u_2}; \\
 p &= [\mathbb{N}_p] \vec{q}_e^p,
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

onde $[\mathbb{N}_i]_{i=u,p}$ é o vetor que contém as funções de interpolação elementares, $\vec{q}_e^{u_1} = \vec{q}_e^{u_1^*} + \vec{q}_e^{u_1^\nabla}$ e $\vec{q}_e^{u_2} = \vec{q}_e^{u_2^*} + \vec{q}_e^{u_2^\nabla}$.

No caso particular de um elemento triangular com interpolação linear (T3, observar figs. 2 e 3), os vetores incógnitas ficam representados da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\vec{q}_e^{u_1} &= (u_1^{*(1)}, u_1^{*(2)}, u_1^{*(3)}); \\ \vec{q}_e^{u_2} &= (u_2^{*(1)}, u_2^{*(2)}, u_2^{*(3)}); \\ \vec{q}_e^p &= (p^{(1)}, p^{(2)}, p^{(3)}).\end{aligned}\tag{2.28}$$

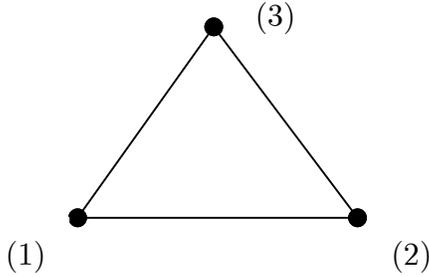


Figura 2: Exemplo de elemento T3

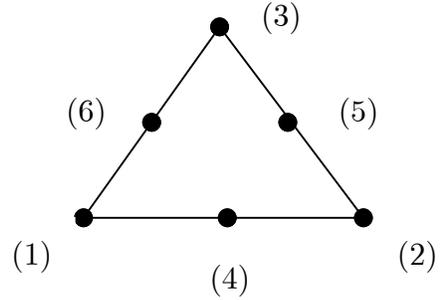


Figura 3: Exemplo de elemento T6

Seguindo com o raciocínio elementar procede-se agora ao cálculo de cada uma das parcelas da formulação apresentada em (2.24), (2.25) e (2.26):

A) Determinação de $\langle (\nabla \vec{u}) \vec{u}, \vec{v} \rangle_{\Omega_e} = \langle (\nabla(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla))(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \vec{v} \rangle_{\Omega_e}$:

$$(\nabla \vec{u}) \vec{u} = \begin{Bmatrix} u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \\ u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \end{Bmatrix} = [\mathbf{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e, \text{ onde } \vec{q}_e = (\vec{q}_e^{u_1}, \vec{q}_e^{u_2}, \vec{q}_e^p).$$

Todavia:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} &= \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^u; & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} &= \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^u; \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} &= \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^v; & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} &= \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^v, \end{aligned}$$

logo tem-se:

$$[\mathbb{N}^{\nabla uu}] = \begin{bmatrix} u_1 \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] & [0] \\ [0] & u_1 \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \end{bmatrix}.$$

Note ainda que:

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} [\mathbb{N}_u] & [0] & [0] \\ [0] & [\mathbb{N}_u] & [0] \end{bmatrix} \vec{q}_e = [\mathbb{N}^{disp}] \vec{q}_e, \text{ analogamente tem-se } \vec{v} = \begin{Bmatrix} \hat{u}_1 \\ \hat{u}_2 \end{Bmatrix} = [\mathbb{N}^{disp}] \hat{q}_e, \text{ onde}$$

$\hat{q}_e = (\hat{q}_e^{u_1}, \hat{q}_e^{u_2}, \hat{q}_e^p)$, o que fornece:

$$\begin{aligned} \langle (\nabla \vec{u}) \vec{u}, \vec{v} \rangle_{\Omega_e} &= \langle [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e, [\mathbb{N}^{disp}] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} = \langle [\mathbb{N}^{disp}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} = \langle [\mathbb{N}^{disp}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \left[\iint_{\Omega_e} [\mathbb{N}^{disp}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^{\nabla uu}(\vec{q}_e)] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^{\nabla uu}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Observando melhor a matriz $[K_e^{\nabla uu}]$, tem-se:

$$[K_e^{\nabla uu}] = \begin{bmatrix} [K_e^{u_1 u_1}] & [0] & [0] \\ [0] & [K_e^{u_2 u_2}] & [0] \\ [0] & [0] & [0] \end{bmatrix},$$

onde:

$$[K_e^{u_1 u_1}] = [K_e^{u_2 u_2}] = \iint_{\Omega_e} \left\{ u_1 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] \right\} d\Omega.$$

Então $[K_e^{\nabla uu}]$ pode ser visto abaixo:

$$[K_e^{\nabla uu}] = \begin{bmatrix} [\mathbf{N}_u]^T & [0] \\ [0] & [\mathbf{N}_u]^T \\ [0] & [0] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] & [0] \\ [0] & u_1 \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \\ u_1 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] & [0] \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} u_1 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] & [0] \\ [0] & u_1 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_1} \right] + u_2 [\mathbf{N}_u]^T \left[\frac{\partial \mathbf{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \\ [0] & [0] & [0] \end{bmatrix}.$$

B) Determinação de $2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}), \varepsilon(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} = 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \varepsilon(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e}$, tem-se agora:

$$\varepsilon(\vec{v}) = \frac{\nabla \vec{v} + \nabla^T \vec{v}}{2} \quad \wedge \quad \varepsilon(\vec{u}) = \frac{\nabla \vec{u} + \nabla^T \vec{u}}{2} \quad \therefore \quad \vec{u} = \vec{u}^* + \vec{u}^\nabla \quad \therefore \quad \varepsilon(\vec{u}) = \varepsilon(\vec{u}^*) + \varepsilon(\vec{u}^\nabla),$$

todavia:

$$\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{v}) = \text{tr}(\varepsilon^T(\vec{u})\varepsilon(\vec{v})) = \varepsilon(\vec{u})_{11}\varepsilon(\vec{v})_{11} + \varepsilon(\vec{u})_{12}\varepsilon(\vec{v})_{12} + \varepsilon(\vec{u})_{22}\varepsilon(\vec{v})_{22} + \varepsilon(\vec{u})_{21}\varepsilon(\vec{v})_{21}.$$

Note porém que $\varepsilon(\cdot)$ é a parte simétrica do gradiente de velocidade, logo:

$$\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{v}) = \varepsilon(\vec{u})_{11}\varepsilon(\vec{v})_{11} + 2\varepsilon(\vec{u})_{12}\varepsilon(\vec{v})_{12} + \varepsilon(\vec{u})_{22}\varepsilon(\vec{v})_{22}.$$

Definindo agora:

$$\vec{\varepsilon}(\vec{u}) = \begin{Bmatrix} \varepsilon(\vec{u})_{11} \\ \varepsilon(\vec{u})_{22} \\ 2\varepsilon(\vec{u})_{12} \end{Bmatrix},$$

pode-se escrever:

$$2\nu\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{v}) = \begin{bmatrix} 2\nu & 0 & 0 \\ 0 & 2\nu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{bmatrix} \vec{\varepsilon}(\vec{u}) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{v}) = [H^\nu] \vec{\varepsilon}(\vec{u}) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{v}).$$

Note ainda que:

$$\varepsilon(\vec{u})_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}; \quad \varepsilon(\vec{u})_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}; \quad 2\varepsilon(\vec{u})_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1},$$

onde:

$$\vec{\varepsilon}(\vec{u}) = \begin{Bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \end{Bmatrix}.$$

Seguindo com o raciocínio análogo ao do item anterior, tem-se agora:

$$\varepsilon(\vec{u})_{11} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^{u_1}; \quad \varepsilon(\vec{u})_{22} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^{u_2}; \quad 2\varepsilon(\vec{u})_{12} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^{u_1} + \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^{u_2};$$

$$[B^\nu] = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] & [0] & [0] \\ [0] & \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \\ \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] & [0] \end{bmatrix} \vec{q}_e,$$

o que nos permite obter:

$$\begin{aligned} 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}), \varepsilon(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} &= \langle [H^\nu] \vec{\varepsilon}(\vec{u}), \vec{\varepsilon}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} = \langle [H^\nu] [B^\nu] \vec{q}_e, [B^\nu] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \langle [B^\nu]^T [H^\nu] [B^\nu] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} = \left[\iint_{\Omega_e} [B^\nu]^T [H^\nu] [B^\nu] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^\nu] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.30)$$

C) Determinação de $\frac{1}{\rho} \langle p, \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e}$, tem-se agora:

$$p = [\mathbb{N}_p] \vec{q}_e^p \quad \therefore \quad \hat{u}_1 = [\mathbb{N}_u] \hat{q}_e^{u_1} \quad \therefore \quad \hat{u}_2 = [\mathbb{N}_u] \hat{q}_e^{u_2};$$

$$\text{div}(\vec{v}) = \frac{\partial \hat{u}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \hat{u}_2}{\partial x_2} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \hat{q}_e^{u_1} + \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \hat{q}_e^{u_2}.$$

Denotando:

$$[\mathbb{N}^{press}] = \begin{bmatrix} [0] & [0] & [\mathbb{N}_p] \end{bmatrix} \quad \therefore \quad p = [\mathbb{N}^{press}] \cdot \vec{q}_e;$$

$$[B^{div}] = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] & \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \end{bmatrix} \quad \therefore \quad \text{div}(\vec{v}) = [B^{div}] \cdot \hat{q}_e,$$

então:

$$\frac{1}{\rho} \langle p, \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{\rho} \langle [\mathbb{N}^{press}] \cdot \vec{q}_e, [B^{div}] \cdot \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{\rho} \iint_{\Omega_e} ([\mathbb{N}^{press}] \cdot \vec{q}_e) ([B^{div}] \cdot \hat{q}_e) d\Omega.$$

Logo tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \langle p, \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} &= \frac{1}{\rho} \iint_{\Omega_e} ([\mathbb{N}^{press}] \cdot \vec{q}_e) ([B^{div}] \cdot \hat{q}_e) d\Omega = \frac{1}{\rho} \left[\iint_{\Omega_e} [[B^{div}] \otimes [\mathbb{N}^{press}]] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &= [K_e^{press}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.31)$$

D) Determinação de $\frac{1}{\rho} \langle \text{div}(\vec{u}), \hat{p} \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{\rho} \langle \text{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \hat{p} \rangle_{\Omega_e}$, tem-se agora por analogia:

$$\text{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla) = [B^{div}] \cdot \vec{q}_e \quad \wedge \quad \hat{p} = [\mathbb{N}^{press}] \cdot \hat{q}_e,$$

então:

$$\frac{1}{\rho} \langle \text{div}(\vec{u}), \hat{p} \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{\rho} \left[\iint_{\Omega_e} [[\mathbb{N}^{press}] \otimes [B^{div}]] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^{\hat{p}}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \quad (2.32)$$

Note ainda que:

$$[K_e^{\hat{p}}] = [K_e^{press}]^T.$$

E) Determinação de $\langle \text{div}(\vec{u}), \delta \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} = \langle \text{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla), \delta \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e}$, tem-se agora por analogia novamente:

$$\text{div}(\vec{u}^* + \vec{u}^\nabla) = [B^{div}] \cdot \vec{q}_e \quad \wedge \quad \text{div}(\vec{v}) = [B^{div}] \cdot \hat{q}_e,$$

então:

$$\langle \text{div}(\vec{u}), \delta \text{div}(\vec{v}) \rangle_{\Omega_e} = \left[\iint_{\Omega_e} \delta [[B^{div}] \otimes [B^{div}]] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^\delta] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \quad (2.33)$$

Este é o termo de captura de descontinuidade (ou captura de choque). Note ainda que sua atuação é dirigida a regiões de elevados gradientes, i.e. regiões nas quais a equação da continuidade é violada.

F) Determinação de $\left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p), \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se então:

$$\begin{aligned} \left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p), \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}) \right\rangle_{\Omega_e} &= \left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e} \\ &\quad - \left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e} \\ &\quad + \left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e} \\ &\quad - \left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}. \end{aligned}$$

Este é o termo de estabilização, que é obtido pela aplicação da condição de estacionaridade ao funcional do quadrado da norma do resíduo da Equação de Navier-Stokes. A atuação desta parcela é dirigida a combater instabilidades numéricas que podem ser geradas por exemplo pela não satisfação da condição de inf-sup.

Procedendo então ao cálculo de cada uma das parcelas isoladamente:

F.1) Determinação de $\left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se então por analogia:

$$(\nabla \vec{u})\vec{u} = [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e \quad \wedge \quad (\nabla \vec{v})\vec{u} = [\mathbb{N}^{\nabla uv}] \hat{q}_e.$$

Todavia:

$$\nu \Delta \vec{u} = \nu \left(\frac{\partial^2 u^1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u^1}{\partial x_2^2} \right) \hat{e}_1 + \nu \left(\frac{\partial^2 u^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u^2}{\partial x_2^2} \right) \hat{e}_2.$$

Então:

$$\Delta \vec{u} = \begin{Bmatrix} \left(\frac{\partial^2 u^1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u^1}{\partial x_2^2} \right) \\ \left(\frac{\partial^2 u^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u^2}{\partial x_2^2} \right) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \left(\frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_2^2} \right) \vec{q}_e^{u_1} \\ \left(\frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_2^2} \right) \vec{q}_e^{u_2} \end{Bmatrix} = [\mathbb{N}^{\Delta u}] \vec{q}_e \quad \therefore \quad \Delta \vec{v} = [\mathbb{N}^{\Delta u}] \hat{q}_e,$$

onde:

$$[\mathbb{N}^{\Delta u}] = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_2^2} \right) & [0] & [0] \\ [0] & \left(\frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \mathbb{N}_u}{\partial x_2^2} \right) & [0] \end{bmatrix}.$$

Como consequência pode-se escrever:

$$\begin{aligned} (\nabla \vec{u}) \vec{u} - \nu \Delta \vec{u} &= [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \vec{q}_e - \nu [\mathbb{N}^{\Delta u}] \vec{q}_e \\ &= [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] \vec{q}_e, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} (\nabla \vec{v}) \vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} &= [\mathbb{N}^{\nabla uu}] \hat{q}_e \pm \nu [\mathbb{N}^{\Delta u}] \hat{q}_e \\ &= [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}] \hat{q}_e. \end{aligned}$$

Tem-se finalmente:

$$\begin{aligned} \langle ((\nabla \vec{u}) \vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau ((\nabla \vec{v}) \vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \rangle_{\Omega_e} &= \langle [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] \vec{q}_e, \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \langle \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \left[\iint_{\Omega_e} \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &= [K_e^{F,1}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \tag{2.34}$$

F.2) Determinação de $\left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se novamente por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e} &= \frac{1}{\rho} \langle [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] \vec{q}_e, \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{\rho} \langle \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ \Rightarrow \left\langle ((\nabla \vec{u})\vec{u} - \nu \Delta \vec{u}), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e} &= \frac{1}{\rho} \left[\iint_{\Omega_e} \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}]^T [\mathbb{N}^{\nabla uu - \Delta u}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e = [K_e^{F.2}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e, \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde:

$$\nabla \hat{p} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \hat{p}}{\partial x_2} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \mathbb{N}_p}{\partial x_1} \hat{q}_e^p \\ \frac{\partial \mathbb{N}_p}{\partial x_2} \hat{q}_e^p \end{Bmatrix} = [\mathbb{N}^{\nabla p}] \hat{q}_e,$$

com:

$$[\mathbb{N}^{\nabla p}] = \begin{bmatrix} [0] & [0] & \frac{\partial \mathbb{N}_p}{\partial x_1} \\ [0] & [0] & \frac{\partial \mathbb{N}_p}{\partial x_2} \end{bmatrix}.$$

F.3) Determinação de $\left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau ((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau ((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e} &= \frac{1}{\rho} \langle [\mathbb{N}^{\nabla p}] \vec{q}_e, \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \frac{1}{\rho} \langle \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}]^T [\mathbb{N}^{\nabla p}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \frac{1}{\rho} \left[\iint_{\Omega_e} \tau [\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \Delta u}]^T [\mathbb{N}^{\nabla p}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &= [K_e^{F.3}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Note ainda que:

$$[K_e^{F.3}] = [K_e^{F.2}]^T.$$

F.4) Determinação de $\left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \tau \left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e} &= \frac{1}{\rho^2} \langle [\mathbb{N}^{\nabla p}] \vec{q}_e, \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}] \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \frac{1}{\rho^2} \langle \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}]^T [\mathbb{N}^{\nabla p}] \vec{q}_e, \hat{q}_e \rangle_{\Omega_e} \\ &= \frac{1}{\rho^2} \left[\iint_{\Omega_e} \tau [\mathbb{N}^{\nabla p}]^T [\mathbb{N}^{\nabla p}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &= [K_e^{F.4}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned}$$

G) Determinação de $\left\langle \vec{b}, \vec{v} \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{b}, \vec{v} \right\rangle_{\Omega_e} &= \left\langle \iint_{\Omega_e} \vec{b} \cdot \vec{v} d\Omega \right\rangle_{\Omega_e} = \left[\iint_{\Omega_e} [\mathbb{N}^{disp}]^T \begin{Bmatrix} b_x \\ b_y \end{Bmatrix} d\Omega \right] \cdot \hat{q}_e \\ &= [F_e^b] \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \tag{2.37}$$

H) Determinação de $\left\langle \vec{h}, \vec{v} \right\rangle_{\Gamma_t}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{h}, \vec{v} \right\rangle_{\Gamma_t} &= \iint_{\Gamma_t} \vec{h} \cdot \vec{v} d\Gamma = \left[\iint_{\Gamma_t} [\mathbb{N}^{disp}]^T \begin{Bmatrix} h_x \\ h_y \end{Bmatrix} d\Gamma \right] \cdot \hat{q}_e \\ &= [F_e^t] \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \tag{2.38}$$

I) Determinação de $\left\langle \vec{b}, \tau \left((\nabla \vec{v}) \vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p} \right) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\left\langle \vec{b}, \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}) \right\rangle_{\Omega_e} = \left\langle \vec{b}, \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e} - \left\langle \vec{b}, \tau\left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}\right) \right\rangle_{\Omega_e},$$

novamente procedendo ao cálculo de cada parcela isoladamente, tem-se:

I.1) Determinação de $\left\langle \vec{b}, \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{b}, \tau((\nabla \vec{v})\vec{u} \pm \nu \Delta \vec{v}) \right\rangle_{\Omega_e} &= \left[\iint_{\Omega_e} \tau[\mathbb{N}^{\nabla uu \pm \nu \Delta u}]^T \begin{Bmatrix} b_x \\ b_y \end{Bmatrix} d\Omega \right] \cdot \hat{q}_e \\ &= [F_e^{I.1}] \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.39)$$

I.2) Determinação de $\left\langle \vec{b}, \tau\left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}\right) \right\rangle_{\Omega_e}$, tem-se por analogia:

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{b}, \tau\left(\frac{1}{\rho} \nabla \hat{p}\right) \right\rangle_{\Omega_e} &= \left[\iint_{\Omega_e} \tau[\mathbb{N}^{press}]^T \begin{Bmatrix} b_x \\ b_y \end{Bmatrix} d\Omega \right] \cdot \hat{q}_e \\ &= [F_e^{I.2}] \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Pode-se escrever agora:

$$\begin{aligned} B(\vec{u}, p, \vec{v}, \hat{p})|_{\Omega_e} &= [K_e^{\nabla uu}(\vec{u})]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e + [K_e^\nu]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &\quad - [K_e^{press}]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e - [K_e^{\hat{p}}]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &\quad + [K_e^\delta]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e + [K_e^{F.1}(\vec{u})]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &\quad - [K_e^{F.2}(\vec{u})]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e + [K_e^{F.3}(\vec{u})]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e \\ &\quad - [K_e^{F.4}]\vec{q}_e \cdot \hat{q}_e. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Note que os termos $[K_e^{\nabla uu}(\vec{u})]$, $[K_e^{F.1}(\vec{u})]$, $[K_e^{F.2}(\vec{u})]$ e $[K_e^{F.3}(\vec{u})]$ são dependentes de \vec{u} , logo o que tem-se nas mãos são os termos de um sistema não linear em $B(\cdot)$; e lembre-se ainda que:

$$[K_e^{\hat{p}}] = [K_e^{press}]^T \quad \therefore \quad [K_e^{F.3}(\vec{u})] = [K_e^{F.2}(\vec{u})]^T.$$

Os termos clássicos de Galerkin presentes em $B(\cdot)$ ($[K_e^{\nabla uu}(\vec{u})]$, $[K_e^\nu]$, $[K_e^{press}]$ e $[K_e^{\hat{p}}]$) podem ser representados por:

$$[K_e^{Galerkin}] = [K_e^{\nabla uu}(\vec{u})] + [K_e^\nu] - [K_e^{press}] - [K_e^{press}]^T.$$

Agora tem-se:

$$F(\vec{v}, \hat{p})|_{\Omega_e} = [F_e^b] \cdot \hat{q}_e + [F_e^t] \cdot \hat{q}_e + [F_e^{I.1}(\vec{u})] \cdot \hat{q}_e - [F_e^{I.2}] \cdot \hat{q}_e. \quad (2.42)$$

Note ainda que o termo $[F_e^{I.1}(\vec{u})]$ é uma função de \vec{u} e conseqüentemente é um termo do sistema não linear.

É importante destacar agora os termos de cada funcional associados à formulação de regime permanente:

i) $B(\cdot)$:

- termos clássicos de Galerkin: $[K_e^{\nabla uu}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$, $[K_e^\nu] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$, $[K_e^{press}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$ e $[K_e^{\hat{p}}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$;
- termo de captura de choque: $[K_e^\delta] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$;
- termos de estabilização: $[K_e^{F.1}(\vec{u})] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$, $[K_e^{F.2}(\vec{u})] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$, $[K_e^{F.3}(\vec{u})] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$ e $[K_e^{F.4}] \vec{q}_e \cdot \hat{q}_e$.

ii) $F(\cdot)$:

- termos clássicos de Galerkin: $[F_e^b] \cdot \hat{q}_e$ e $[F_e^t] \cdot \hat{q}_e$;
- termos de estabilização para força de corpo: $[F_e^{I.1}(\vec{u})] \cdot \hat{q}_e$ e $[F_e^{I.2}] \cdot \hat{q}_e$.

2.4.1 O Sistema Não Linear

Agora faz-se com que os vetores e matrizes elementares dêem lugar às matrizes e vetores globais, que são definidos da seguinte forma:

$$\vec{d} \Leftarrow \sum_e \vec{q}_e;$$

$$[K(\vec{d})] \Leftarrow \sum_e \{[K_e^{Galerkin}] + [K_e^\delta] + [K_e^{F.1}(\vec{u})] - [K_e^{F.2}(\vec{u})] + [K_e^{F.3}(\vec{u})] - [K_e^{F.4}]\};$$

$$[F^{ext}(\vec{d})] \Leftarrow \sum_e \{[F_e^b] + [F_e^t] + [F_e^{I.1}(\vec{u})] - [F_e^{I.2}]\},$$

e finalmente chega-se ao sistema não linear global:

$$[K(\vec{d})]\vec{d} = [F^{ext}(\vec{d})]. \quad (2.43)$$

2.4.2 Campo de Velocidade Prescrito

$$\vec{U}(\vec{x}), \text{ com } \vec{x} \in \Gamma_u.$$

Aqui neste trabalho será considerado que ambas as componentes \bar{u}_1 e \bar{u}_2 são dadas em cada nó, representado por suas coordenadas como $\vec{x}_i \in \Gamma_u$, onde $i = \text{nós}$ com o vetor velocidade especificado. Desta forma o campo prescrito pode ser representado como:

$$\bar{u}_j(\vec{x}_i) = a_i + b_i \phi_i, \quad j = 1, 2, \quad (2.44)$$

onde a_i , b_i e $\phi_i = \phi(\vec{x}_i)$ são dados de entrada do problema.

2.5 O Algoritmo

Aqui faz-se a apresentação da idéia principal do algoritmo para a solução do sistema não linear de uma forma esquemática.

2.5.1 Formulação do Esquema Numérico

Recordando o conjunto de equações de acordo com (2.43):

$$[K(\vec{d})]\vec{d} = [F^{ext}(\vec{d})].$$

Definindo agora o vetor resíduo como:

$$\vec{R}(\vec{d}) = [F^{ext}(\vec{d})] - [K(\vec{d})]\vec{d}, \quad (2.45)$$

pode-se agora redefinir o problema como sendo:

Determinar $\vec{d} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$$\vec{R}(\vec{d}) = \vec{0}. \quad (2.46)$$

O critério de convergência é então $\|\vec{R}(\vec{d})\| < tol$, onde $tol > 0$ é suficientemente pequeno. Para solucionar tal problema será aplicado o Método de Newton, o qual inicia-se com o chute \vec{d}^0 ; com isto o vetor \vec{d} será atualizado da seguinte forma:

$$\vec{d}^{k+1} = \vec{d}^k + \vec{w}^k, \quad (2.47)$$

onde:

k – interação atual;

\vec{d}^{k+1} - é a estimativa $(k+1)$ -ésima para solução de (2.46);

\vec{d}^k - é a estimativa (k) -ésima para solução de (2.46);

\vec{w}^k - é a correção para (k) -ésima estimativa de solução de (2.46).

De maneira a determinar o termo \vec{w}^k , impõe-se que na convergência ocorra o seguinte:

$$\vec{R}(\vec{d}^{k+1}) = \vec{R}(\vec{d}^k + \vec{w}^k) = \vec{0}. \quad (2.48)$$

Agora, expandindo (2.48) em série de Taylor até o termo de primeira ordem, em torno de \vec{d}^k , tem-se:

$$\vec{R}(\vec{d}^{k+1}) \cong \vec{R}(\vec{d}^k) + \left[\frac{D(\vec{R}(\vec{d}^k))}{D\vec{d}^k} \Big|_{\vec{d}^k} \right] \vec{w}^k = \vec{0}. \quad (2.49)$$

Denota-se agora a matriz de rigidez tangente em \vec{d}^k :

$$[K_T^k] = \left[\frac{D[\vec{R}(\vec{d}^k)]}{D\vec{d}^k} \Big|_{\vec{d}^k} \right]. \quad (2.50)$$

Por (2.49) tem-se:

$$[K_T^k] \vec{w}^k = -\vec{R}(\vec{d}^k), \quad (2.51)$$

i.e.,

$$\vec{w}^k = -[K_T^k]^{-1} \vec{R}(\vec{d}^k). \quad (2.52)$$

2.5.2 Determinação de $[K_T^k]$

A matriz de rigidez tangente avaliada em \vec{d}^k , pode ser calculada da seguinte forma:

$$[K_T(\vec{d}^k)]_{ij} = \frac{D[\vec{R}(\vec{d}^k)]_i}{D[\vec{d}^k]_j}, \quad (2.53)$$

onde:

$$\vec{R}(\vec{d}^k) = [F^{ext}(\vec{d}^k)] - [K(\vec{d}^k)]\vec{d}^k, \quad (2.54)$$

e $\vec{R}(\vec{d})$ está descrito em (2.45). Com a finalidade de se obter uma aproximação para esta matriz tangente, pode-se considerar:

$$[K_T^k] \cong [[\bar{K}^k(\vec{d}^k, \vec{d}^{k-1})]], \quad (2.55)$$

na qual:

$$[\bar{K}^k(\vec{d}^k, \vec{d}^{k-1})]_{ij} = \frac{D[\vec{\bar{R}}(\vec{d}^k, \vec{d}^{k-1})]_i}{D[\vec{d}^k]_j}, \quad (2.56)$$

e onde:

$$\vec{\bar{R}}(\vec{d}^k, \vec{d}^{k-1}) = [F^{ext}(\vec{d}^{k-1})] - [K(\vec{d}^{k-1})]\vec{d}^k. \quad (2.57)$$

Definindo $[K_T^{eff}]$ a partir da substituição de (2.55) em (2.54), tem-se:

$$[\bar{K}^k(\vec{d}^k, \vec{d}^{k-1})] = [K_T^{eff}(\vec{d}^{k-1})] = -[K(\vec{d}^{k-1})]. \quad (2.58)$$

Agora substituindo (2.56) em (2.51):

$$[K_T^{eff}(\vec{d}^{k-1})]\vec{w}^k = -\vec{R}(\vec{d}^k). \quad (2.59)$$

2.5.3 Algoritmo para Solução do Sistema não Linear

Com a finalidade de se resolver o problema representado pela equação (2.46), será aplicado o Método de Newton, como já havia sido mencionado anteriormente. Para um chute inicial, \vec{d}^0 , prossegue-se então, de forma teórica:

1. Inicie com: \vec{d}^{k-1} , \vec{d}^k e erro;
para $k=1$: $\vec{d}^{k-1} \leftarrow \vec{d}^0$ $\vec{d}^k \leftarrow \vec{d}^0$ erro = 1.0;
2. Enquanto (erro > tolerância (tol)):
 - Calcule $\vec{R}(\vec{d}^k)$ pela equação (2.54);
 - Calcule $[K_T^{eff}(\vec{d}^{k-1})]$ pela equação (2.58);
 - Solucione para \vec{w}^k pela equação (2.59);
 - Determinação de \vec{d}^{k+1} pela equação (2.47);
 - Calcule a medida do novo erro, onde $\vec{R}(\vec{d}^{k+1})$ é calculado pela equação (2.54), e calcule o novo erro = $\|\vec{R}(\vec{d}^{k+1})\|$;
 - Proceder a atualizações de \vec{d}^k e \vec{d}^{k+1} : $\vec{d}^{k-1} \leftarrow \vec{d}^k \wedge \vec{d}^k \leftarrow \vec{d}^{k+1}$;
3. Fim Enquanto.

A medida do erro é dada por $\|\vec{R}(\vec{d}^{k+1})\|$. Contudo a equação (2.54) fornece o vetor residuo discretizado exato. Como conseqüência se o algoritmo converge, i.e. $\vec{d}^k \rightarrow \vec{d}^{solução}$, então $\vec{d}^{solução}$ será, a menos de uma tolerância, a solução exata do problema discretizado. A única aproximação feita foi a respeito da determinação da matriz tangente. A conseqüência desta aproximação é que a taxa de convergência pode decrescer ou o método pode não convergir. Note ainda que a determinação exata da matriz tangente não assegura que o

algoritmo convergirá, já que o Método de Newton poderá falhar se o chute inicial \vec{d}^0 não estiver suficientemente próximo da solução exata do problema discretizado. Devido a tais problemas, neste trabalho se utilizará o Método de Newton com busca linear (“line search”), que encontra-se descrito no Apêndice D. Note ainda que o único passo a se modificar no algoritmo anteriormente apresentado, é o modo como se obtém a parcela \vec{w}^k , que será feito de forma mais eficiente, com a adição da busca linear ao procedimento.

2.6 Problemas Aplicados

Aqui foram selecionados alguns problemas já bem conhecidos da literatura para se testar o código implementado.

Vale ressaltar aqui que não serão apresentados resultados referentes à dissipação viscosa sobre o domínio. Isto se deve ao fato do interesse principal deste trabalho ser o de analisar o valor da dissipação viscosa integrada em todo o domínio, o que será abordado de forma mais consistente no capítulo três desta dissertação.

2.6.1 “Square Lid-Driven Cavity”

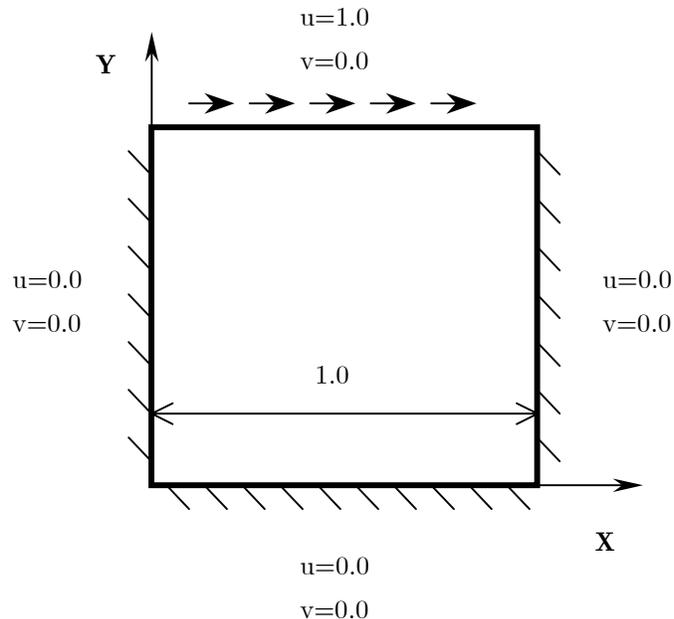


Figura 4: “Square Lid-Driven Cavity”

O problema configura-se como um escoamento incompressível em uma cavidade quadrada cuja face superior move-se com uma velocidade horizontal constante. Este problema tem servido como modelo para teste e avaliação de muitas técnicas numéricas, principalmente devido aos seus dois pontos de singularidade situados nos vértices superiores da cavidade. Aqui estes pontos são considerados como se tivessem a velocidade da face superior da cavidade, e os resultados são comparados com os resultados apresentados em Ghia et al (1982).

A malha, aqui utilizada, foi uma malha 90 X 90, estruturada e não uniforme. O domínio foi dividido em nove regiões e cada uma recebeu uma malha 30 X 30. As regiões podem ser assim destacadas: quatro regiões de dimensão 0.25 X 0.25, quatro regiões de dimensão 0.5 X 0.25, e uma de dimensão 0.5 X 0.5. Quanto ao tipo de elemento utilizado, foi o “quad – four” isoparamétrico. A divisão do domínio em nove regiões está apresentada na figura logo abaixo.

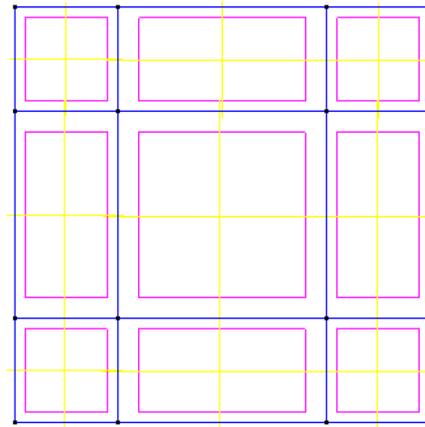


Figura 5: Divisão do domínio nas nove regiões

A malha aqui utilizada pode ser visualizada na próxima figura.

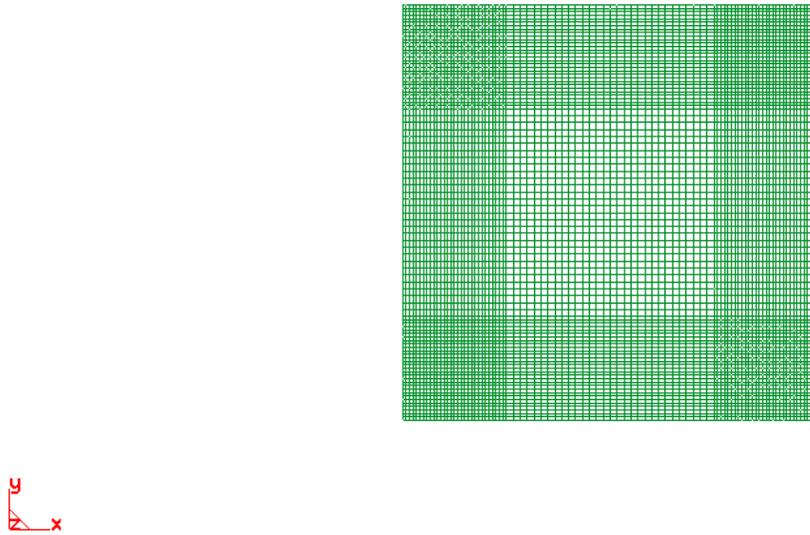


Figura 6: Malha 90 X 90 estruturada e não regular

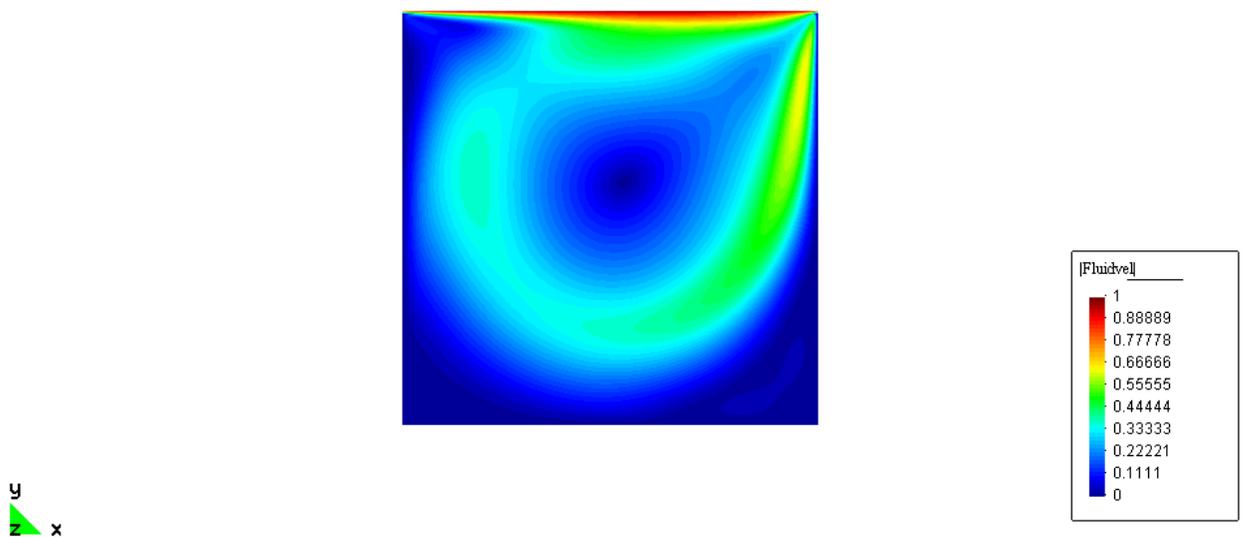


Figura 7: Norma euclidiana do vetor velocidade (Re = 1000)

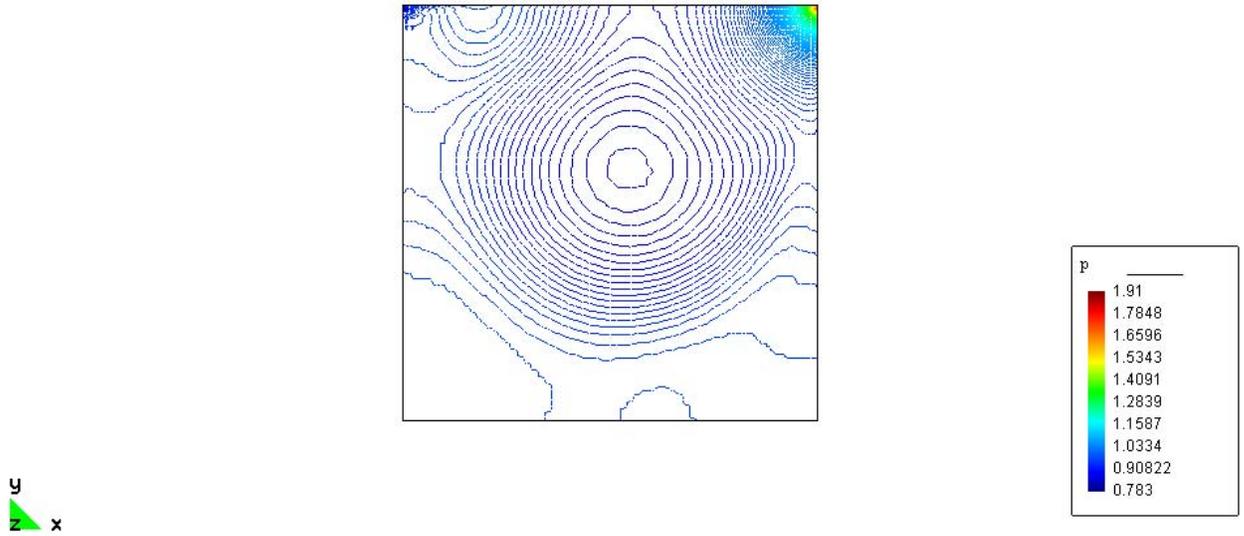


Figura 8: Campo de pressão ($Re = 1000$)

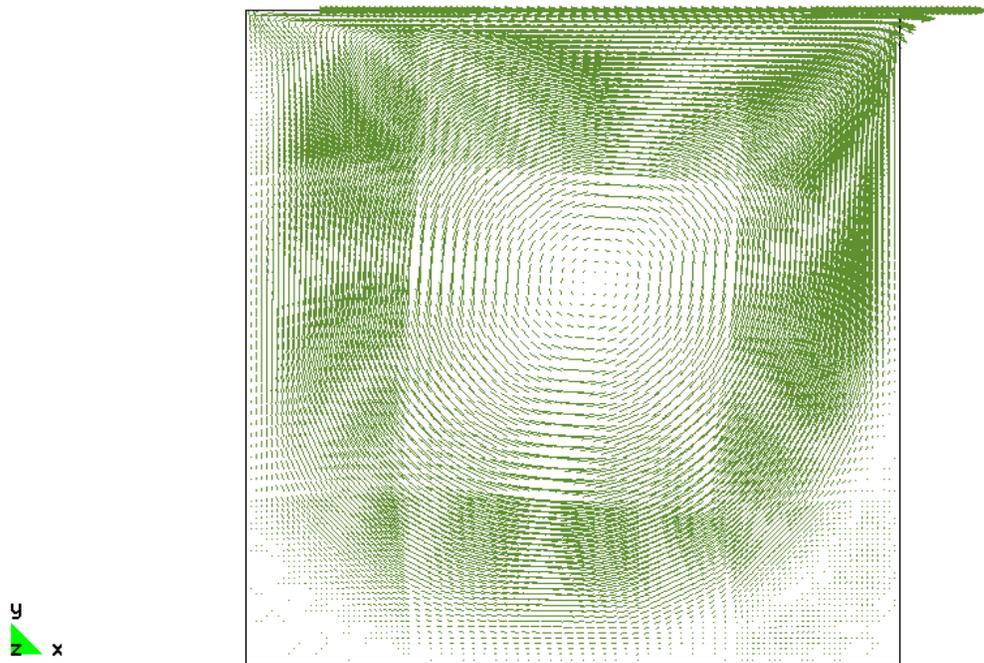


Figura 9: Campo de velocidade ($Re = 1000$)

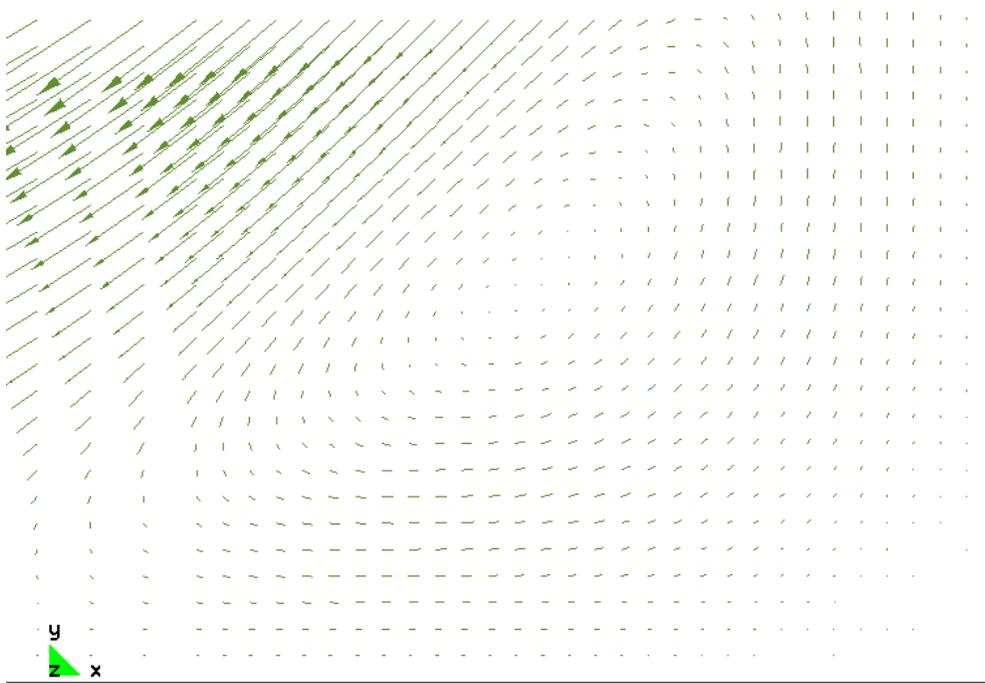


Figura 10: Vórtice captado no canto direito inferior da cavidade ($Re = 1000$)

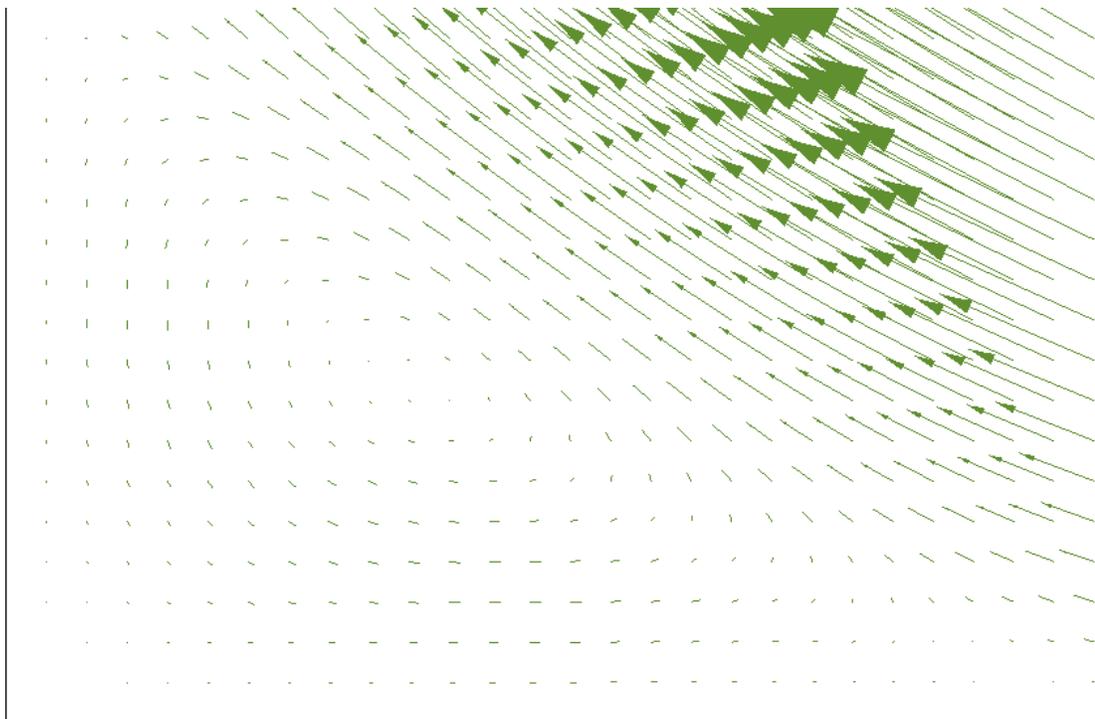


Figura 11: Vórtice captado no canto esquerdo inferior da cavidade ($Re = 1000$)

São apresentados agora os gráficos comparativos com Ghia et al (1982), onde convencionou-se que de agora em diante **uh**, **vh**, **puh** e **pvh** representam respectivamente a velocidade horizontal (**u**), a velocidade vertical (**v**) e os perfis do campo de pressão ao longo das linhas de centro vertical (**pu**) e horizontal (**pv**) que foram calculados pelo código desenvolvido neste trabalho, enquanto que **ug** e **vg** representam respectivamente os perfis das velocidades horizontal e vertical que são apresentados em Ghia et al (1982).

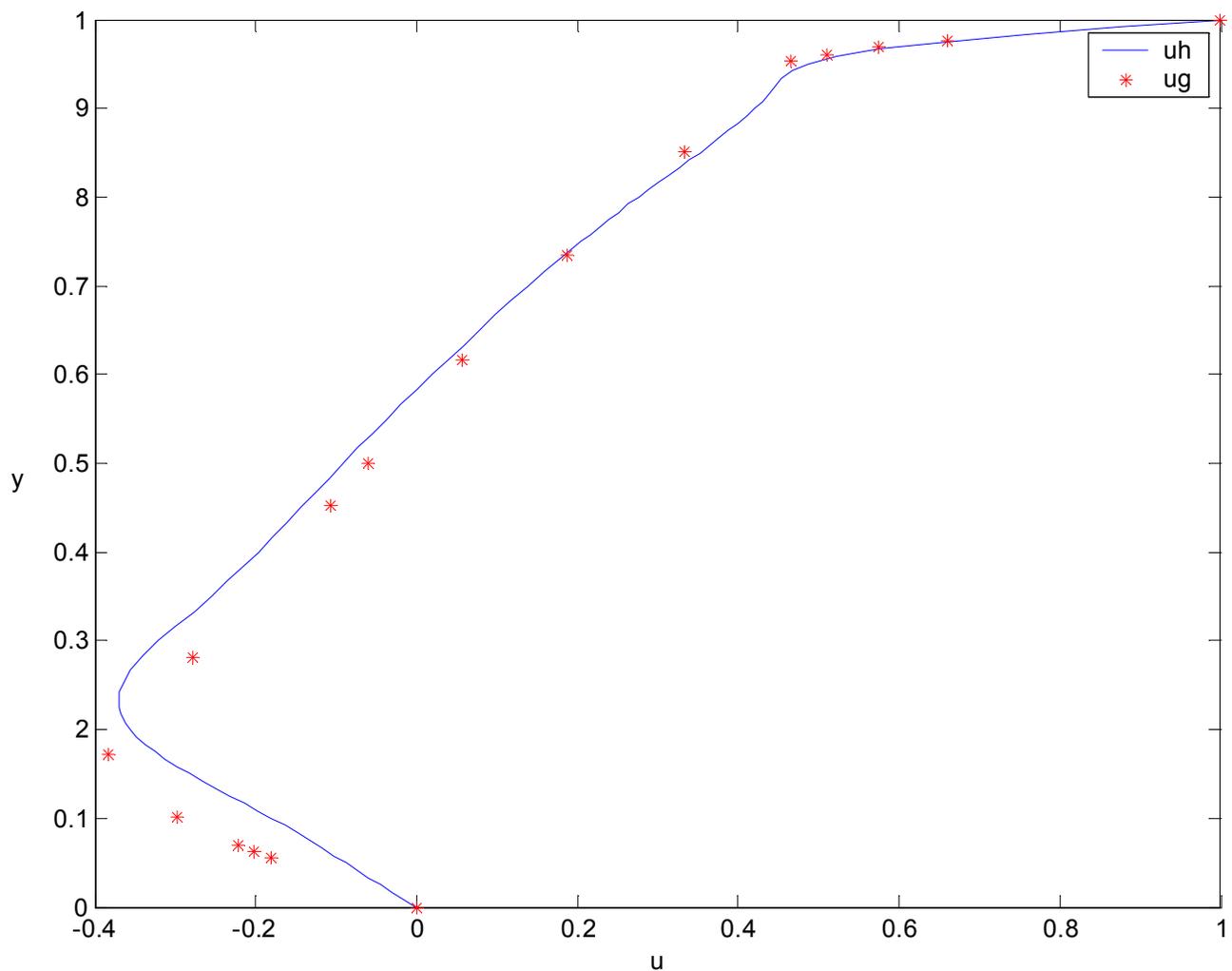


Figura 12: Perfil da velocidade horizontal ao longo da linha de centro vertical ($Re = 1000$)

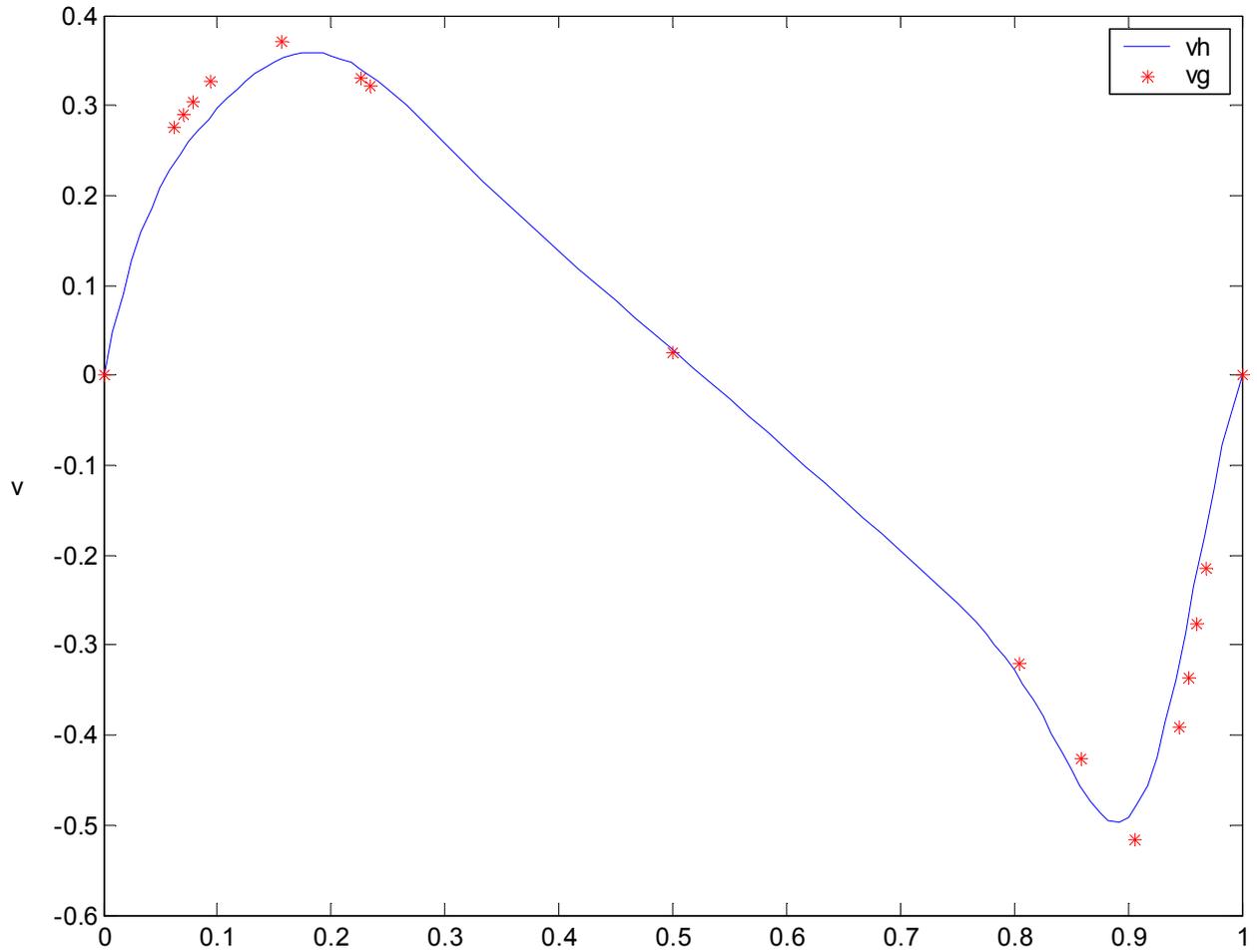


Figura 13: Perfil da velocidade vertical ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 1000$)

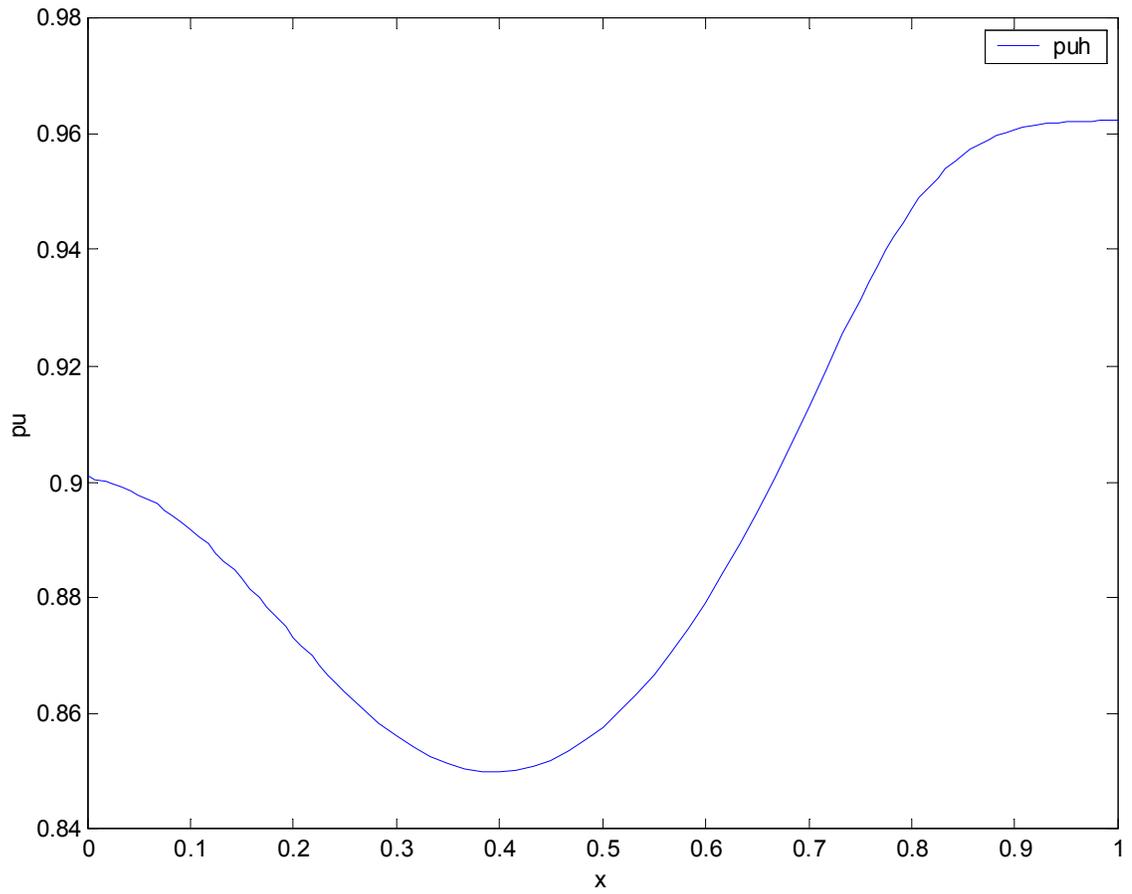


Figura 14: Perfil do campo de pressão ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 1000$)

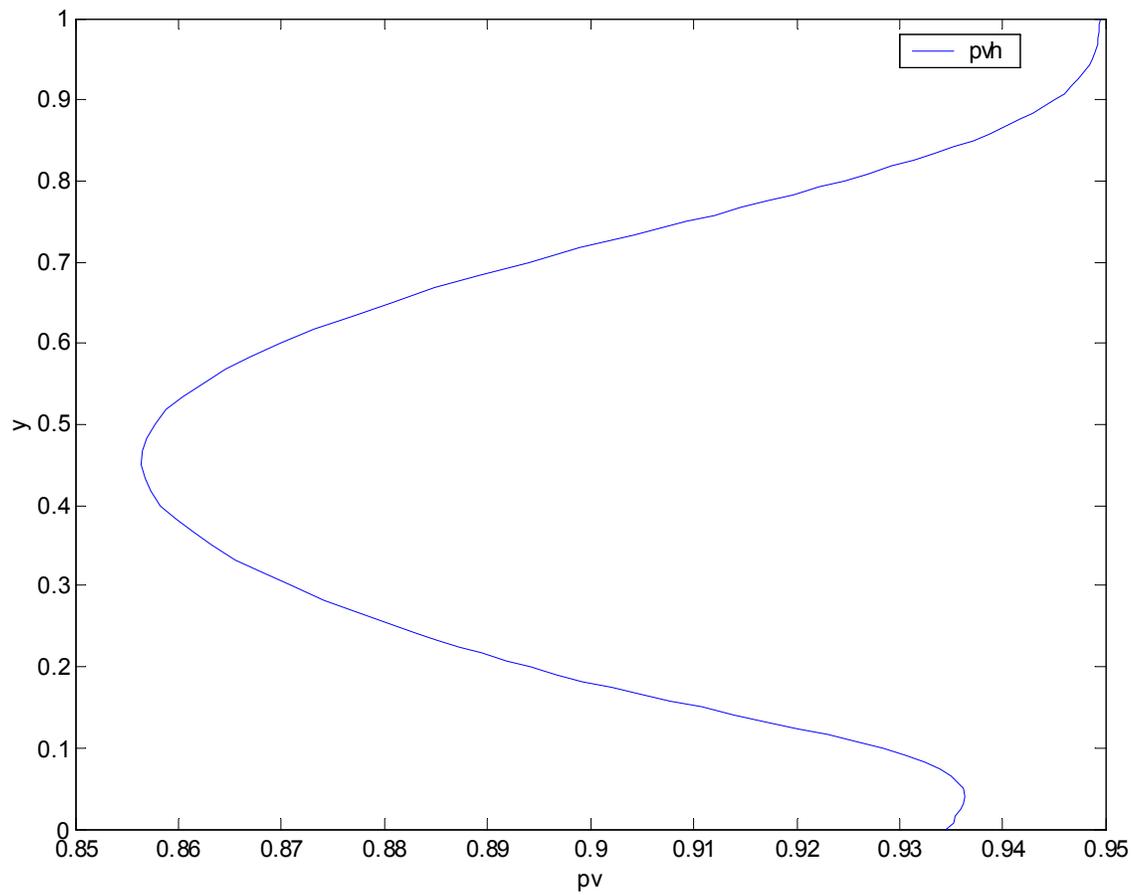


Figura 15: Perfil do campo de pressão ao longo da linha de centro vertical ($Re = 1000$)

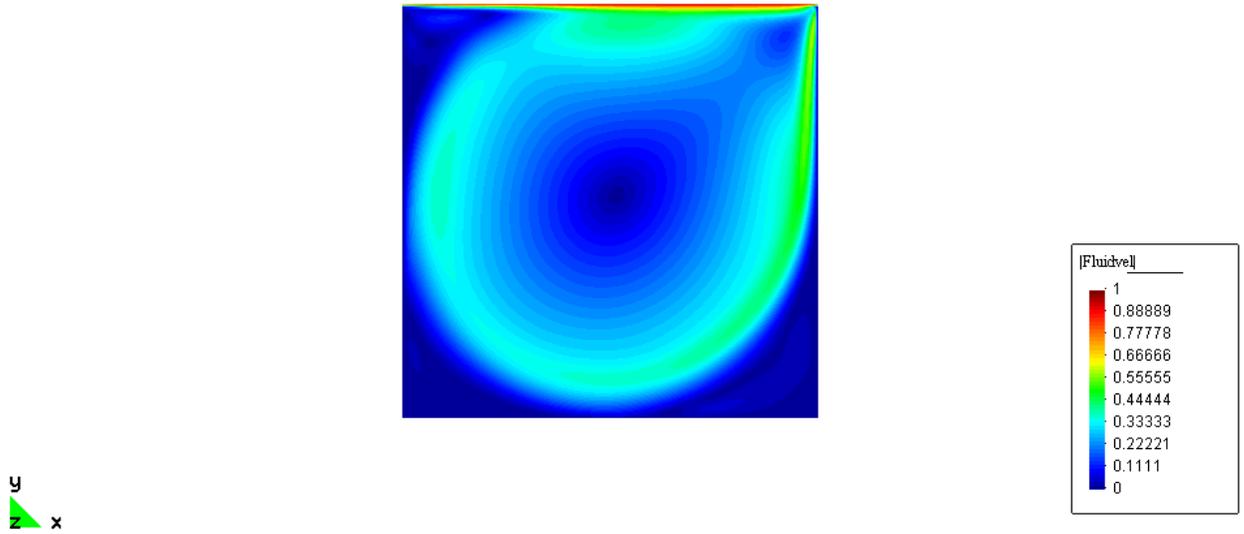


Figura 16: Norma euclidiana do vetor velocidade (Re = 5000)

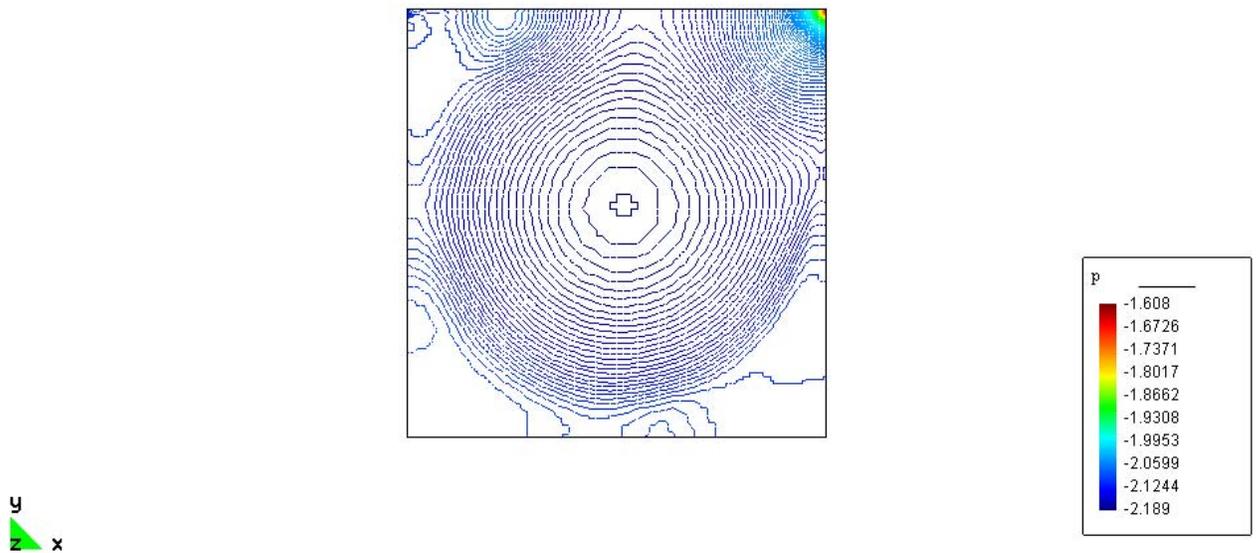


Figura 17: Campo de pressão (Re = 5000)

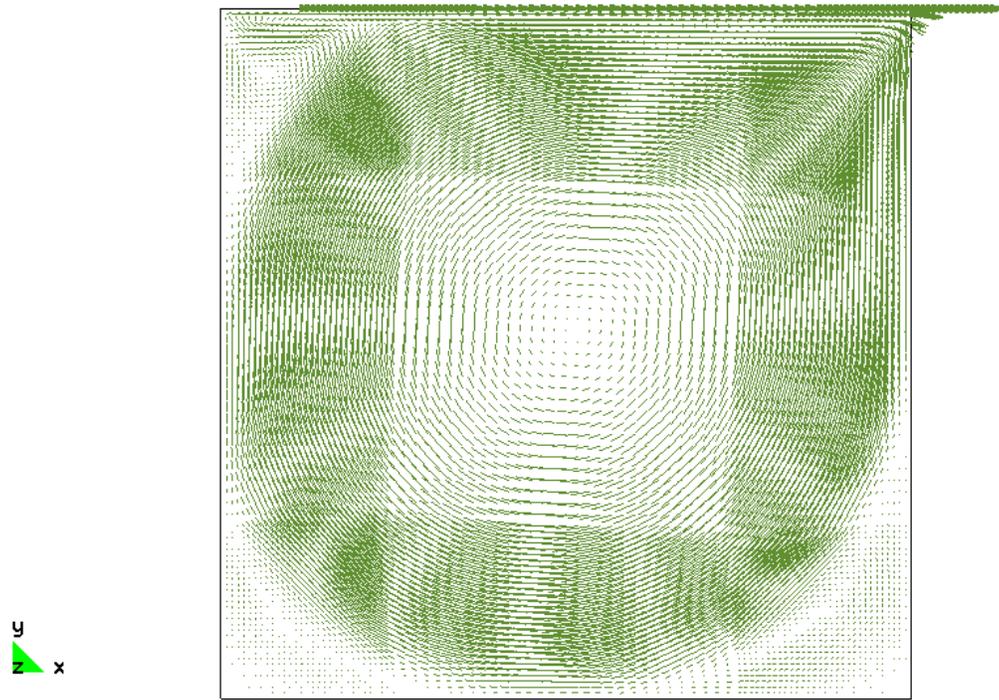


Figura 18: Campo de velocidade ($Re = 5000$)

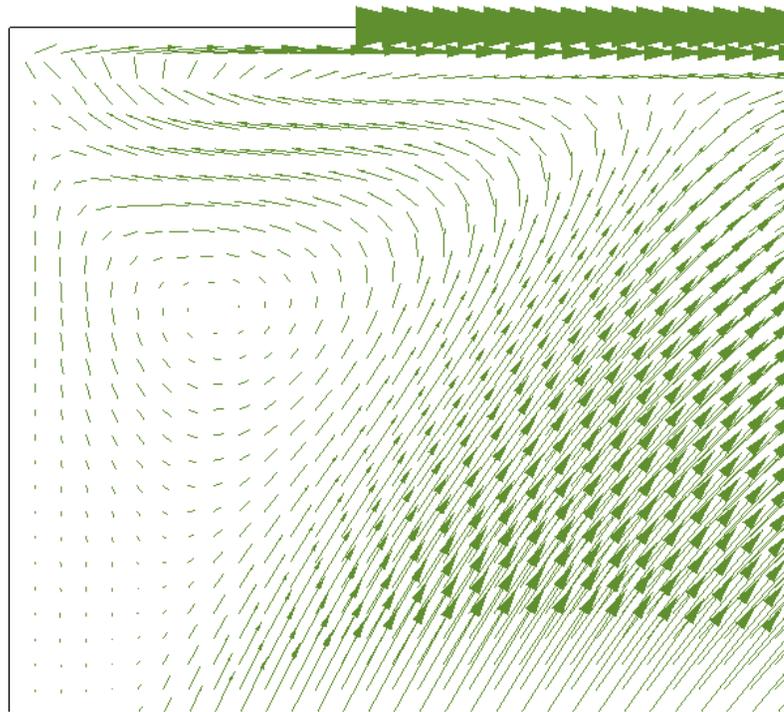


Figura 19: Vórtice captado no canto esquerdo superior ($Re = 5000$)

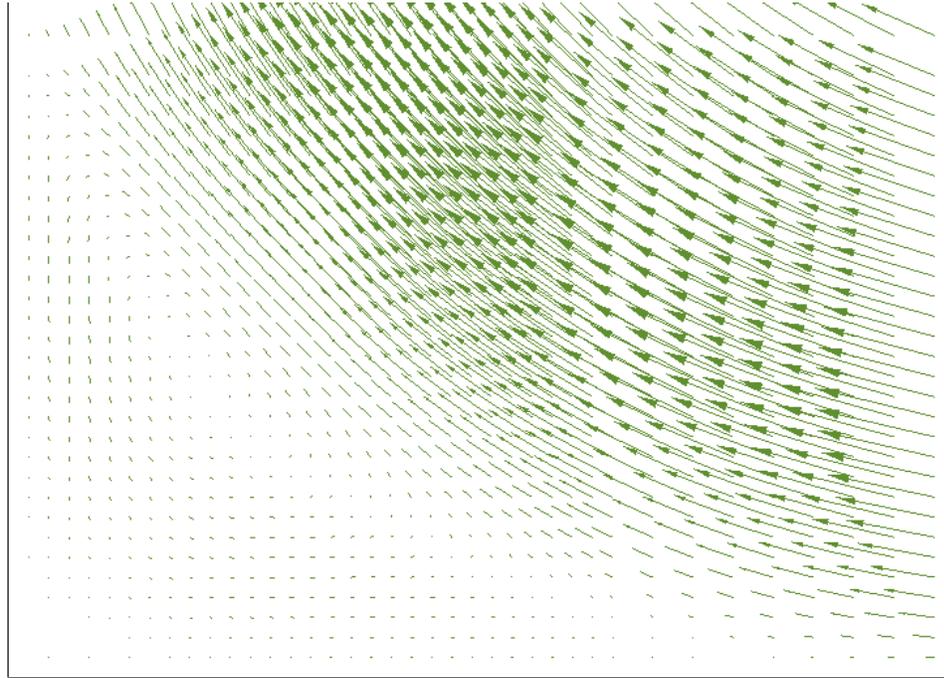


Figura 20: Vórtice captado no canto esquerdo inferior ($Re = 5000$)

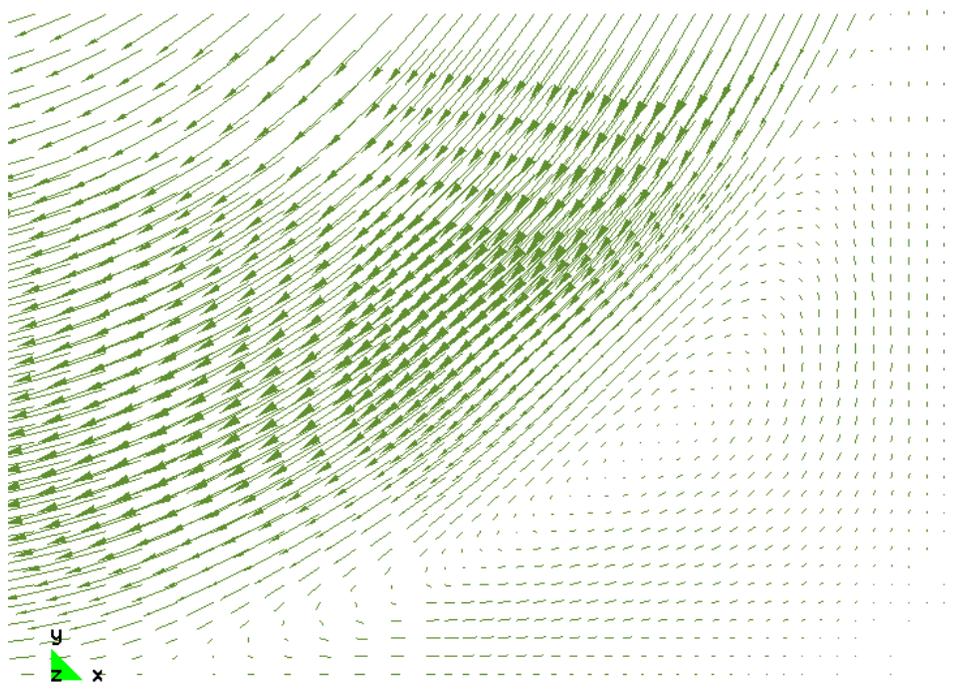


Figura 21: Vórtice captado no canto direito inferior ($Re = 5000$)

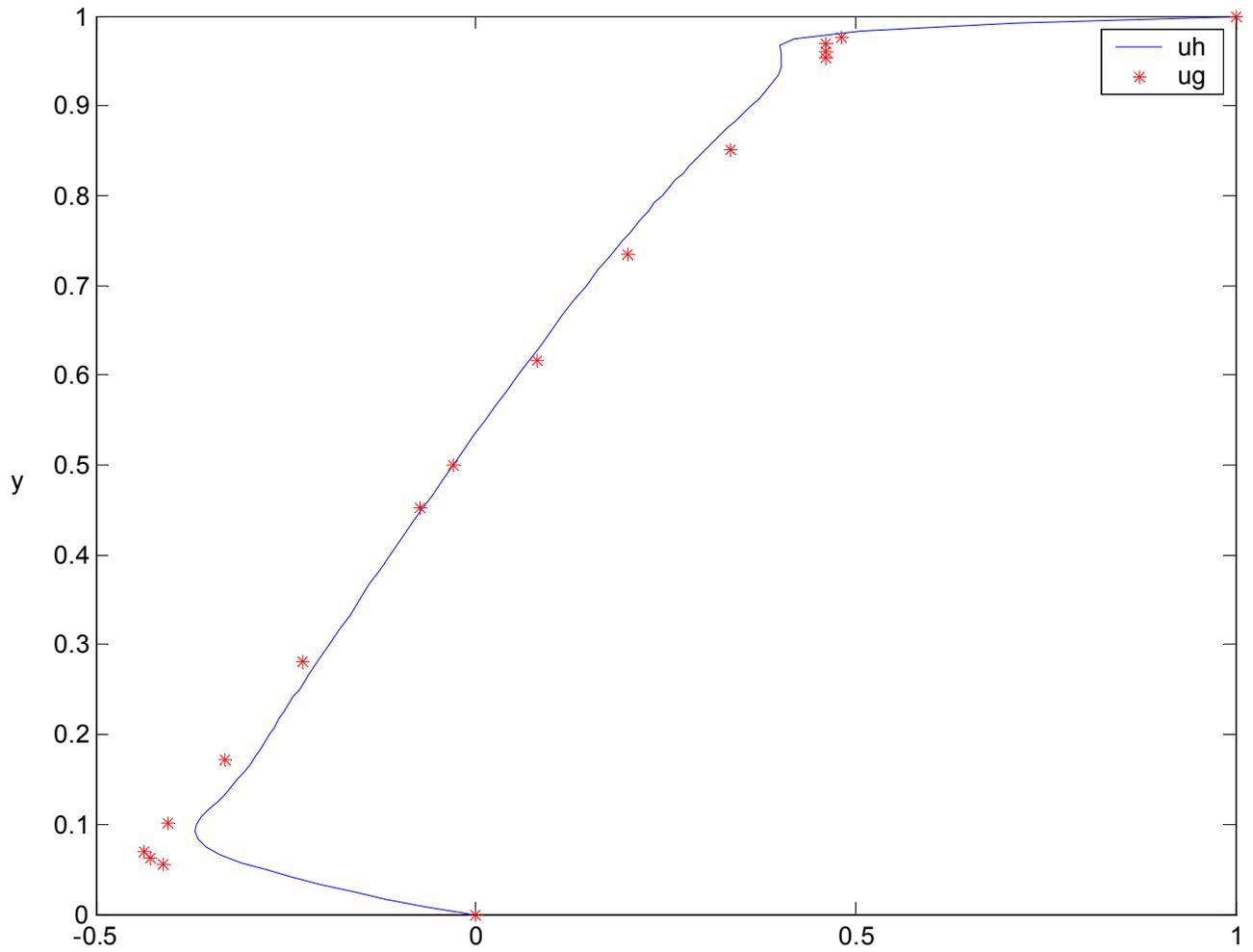


Figura 22: Perfil da velocidade horizontal ao longo da linha de centro vertical ($Re = 5000$)

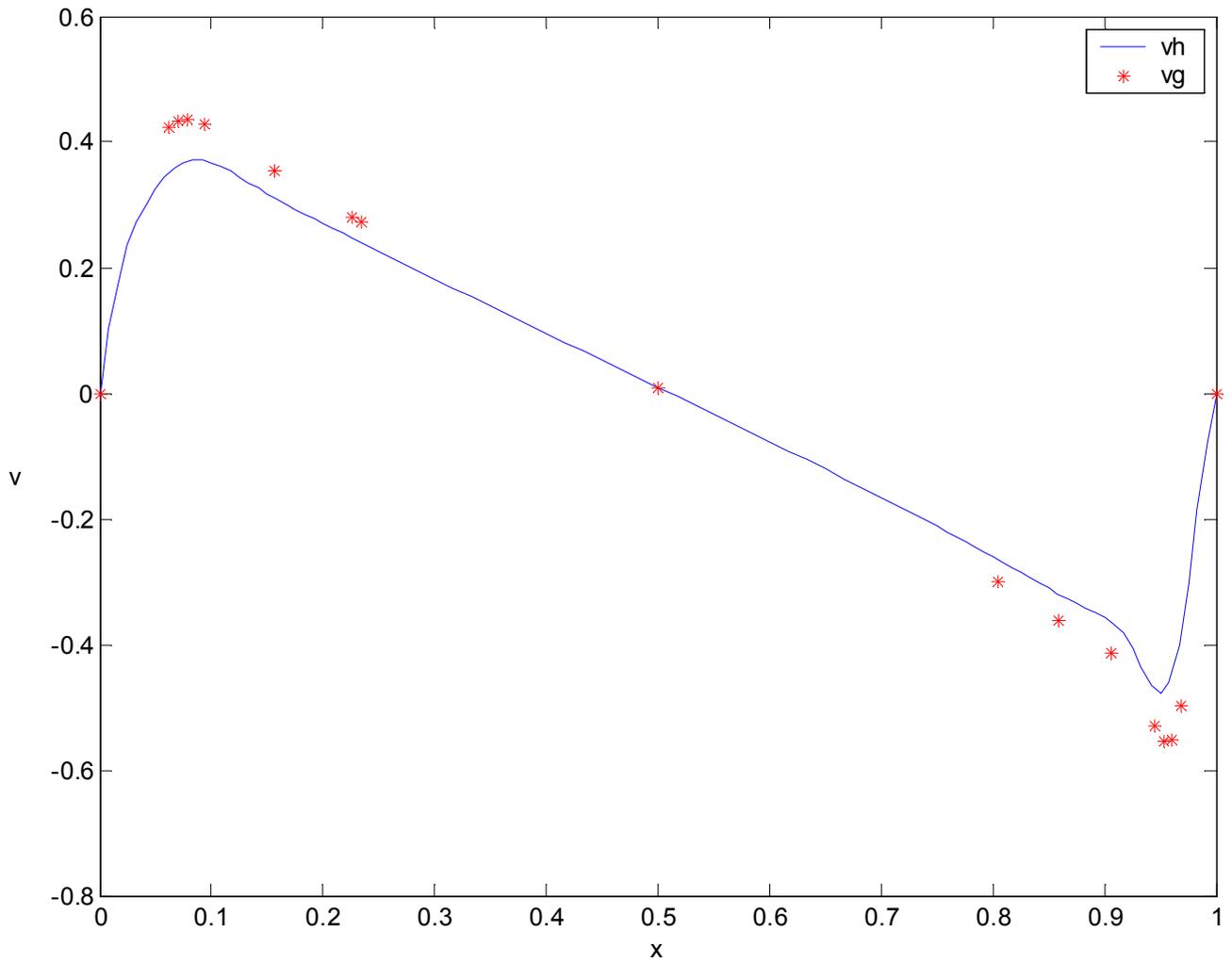


Figura 23: Perfil da velocidade vertical ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 5000$)

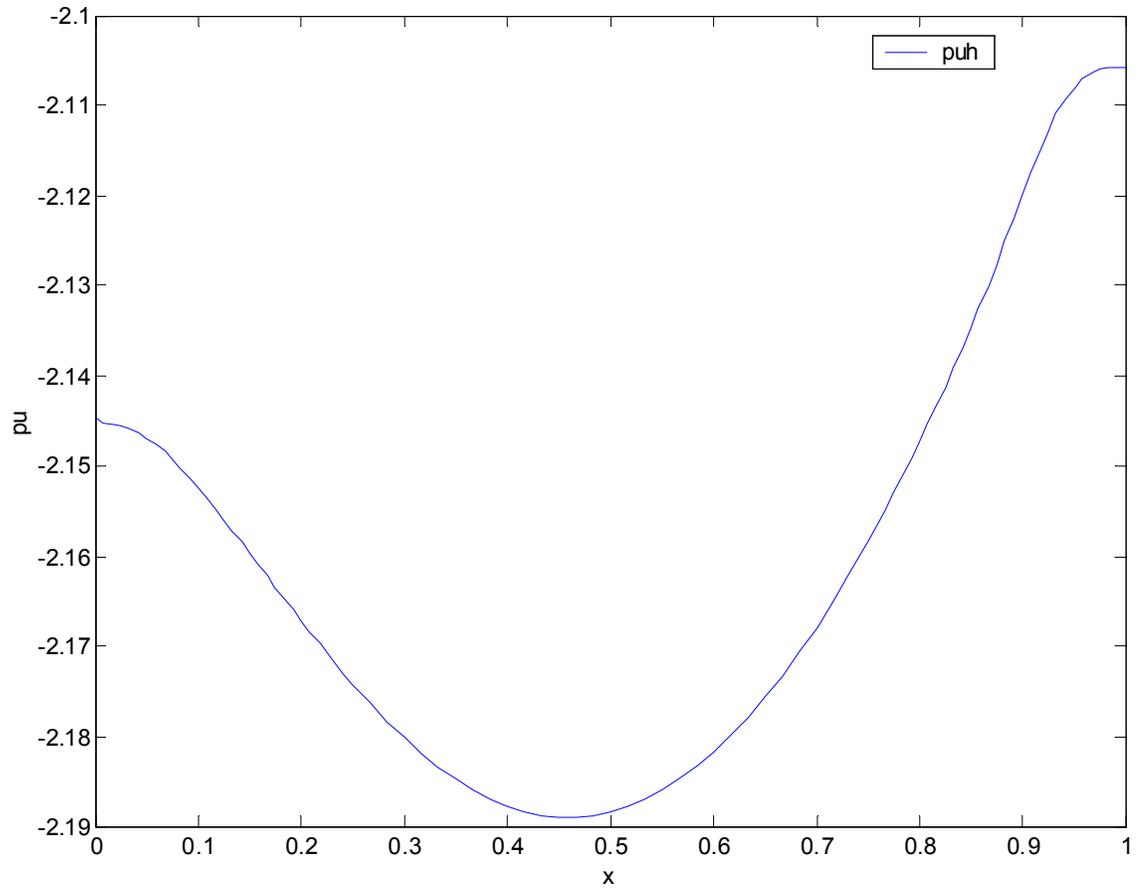


Figura 24: Perfil do campo de pressão ao longo da linha de centro horizontal ($Re = 5000$)

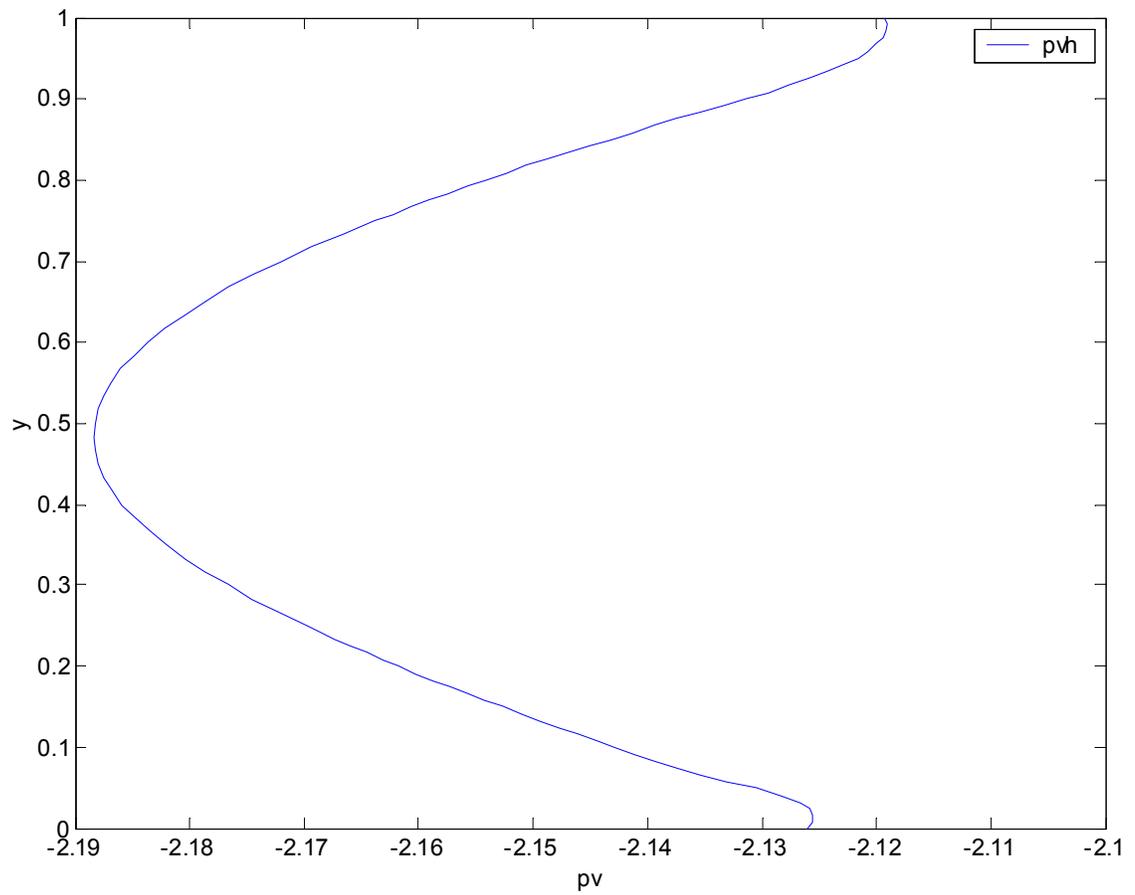


Figura 25: Perfil do campo de pressão ao longo da linha de centro vertical ($Re = 5000$)

Na abordagem do problema foram usados quatro passos de carregamento para solução do caso $Re=1000$ e seis passos para o caso $Re=5000$. O método de Newton foi solicitado para solução do sistema não linear de equações. A precisão requerida para ambos os casos foi de 10^{-4} , uma vez que testes realizados com tolerâncias menores não mostraram diferenças significativas. Quanto ao tempo de CPU o caso $Re=1000$ convergiu em aproximadamente 17 min e o caso $Re=5000$ em aproximadamente 35 min.

Nas figuras de 5 até 11 estão apresentadas as características de malha e do escoamento para o caso $Re=1000$. Similarmente, para o caso $Re=5000$, tem-se as figuras de 16 até 21. Já as figuras 12, 13, 22 e 23 apresentam gráficos comparativos entre os resultados obtidos neste trabalho e os resultados obtidos por Ghia et al (1982), isto para ambos os casos ($Re=1000$ e $Re=5000$). Os gráficos mostram os perfis das componentes do vetor velocidade ao longo das linhas de centro da cavidade. Nas figuras 14, 15, 24 e 25 são apresentados os perfis dos campos de pressão ao longo das linhas de centro, também para ambos os casos.

Observando os gráficos apresentados nas figuras 12 e 13, caso $Re=1000$, nota-se que os resultados do trabalho aqui apresentado tiveram uma boa concordância com os resultados de Ghia et al (1982), sendo que na região do fundo da cavidade observou-se pela figura 12, que houve uma certa divergência quanto ao gradiente dos resultados, o que não se observa em qualquer outra região. Já na figura 13, nota-se novamente uma boa concordância entre os resultados, além disto observa-se ainda que os perfis obtidos são bastante similares aos perfis resultantes de Ghia et al (1982). O caso $Re=5000$ (figs. 22 e 23) mostra também um comportamento bem similar no que diz respeito a comparação de resultados, sendo a região do fundo da cavidade a principal zona de discordância (fig. 22). No que diz respeito à figura 23 nota-se também uma boa concordância entre os resultados, assim como observou-se que os perfis obtidos são bastante similares aos perfis resultantes de Ghia et al (1982).

Vale ressaltar também que a metodologia utilizada em Ghia et al (1982) não fornece os perfis do campo de pressão nas linhas de centro da cavidade. Tais perfis seriam de grande importância para a análise dos resultados do campo de velocidade, uma vez que da literatura sabe-se que o campo de pressão é mais suscetível a instabilidades numéricas que o campo de velocidades. Então as instabilidades numéricas são bem mais facilmente

visualizadas e perceptíveis no campo de pressão, o que não é observado pelos gráficos das figuras 14, 15, 24 e 25.

Convém ainda observar que a malha usada neste trabalho para o referido problema foi uma malha de 90 x 90 de elementos quadrilaterais “quad – four” em ambos os casos, isto é para $Re=1000$ e $Re=5000$. A malha (90 x 90) estruturada e não uniforme com elementos quadrilaterais “quad – four”, resultou de testes que foram feitos com outras malhas para ambos os casos, onde não se observou diferenças significativas nos resultados, com relação a malhas mais refinadas. Devido ao processo de otimização onde o escoamento é resolvido várias vezes, optou-se, então, em se utilizar uma precisão mais elevada e uma malha com menos nós, o que contribui para a diminuição do esforço computacional durante tal processo.

2.6.2 Difusor Divergente

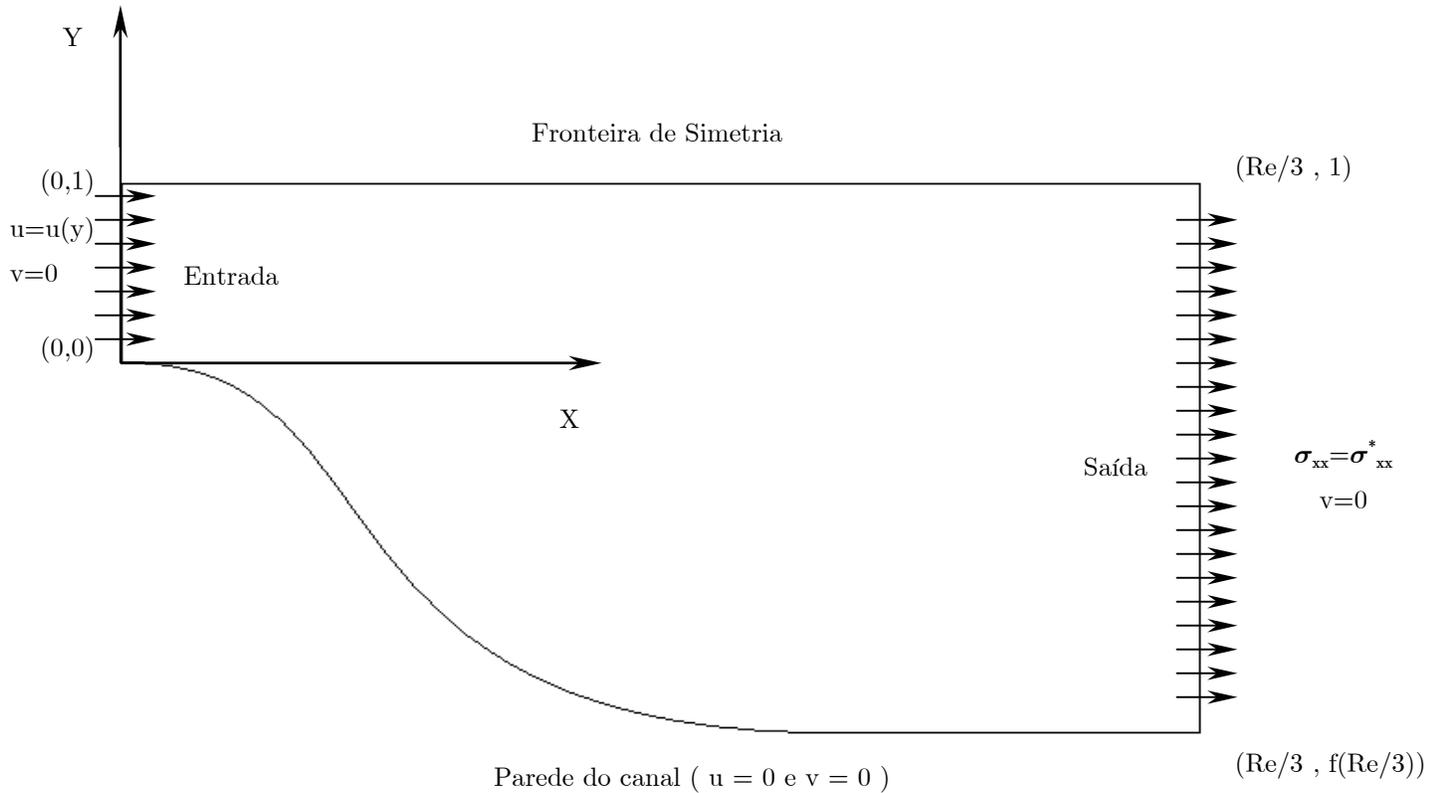


Figura 26: Difusor Divergente

O problema configura-se como um escoamento incompressível em um canal cuja geometria será apresentada à posteriore, e onde os maiores detalhamentos ficam ao encargo das condições de contorno a serem denotadas. Este problema bem como o anterior tem servido como modelo para teste e avaliação de muitas técnicas numéricas.

A malha aqui utilizada foi uma malha estruturada, a qual fez uso de elementos isoparamétricos quadrilaterais (“quad – four”). O problema foi resolvido para números de Reynolds iguais a 10 e 100, que são baseados nas condições de entrada do canal, sendo a geometria do problema dependente deste número de acordo com a seguinte expressão:

$$y = f(x) = \frac{1}{2} \left[\tanh\left(2 - \frac{30x}{\text{Re}}\right) - \tanh(2) \right] \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq \frac{\text{Re}}{3}, \quad (2.60)$$

e as componentes cartesianas do vetor velocidade na entrada do canal são:

$$u = 3\left(y - \frac{y^2}{2}\right) \quad e \quad v = 0 \quad \text{para} \quad x = 0 \quad e \quad 0 \leq y \leq 1. \quad (2.61)$$

i) Caso $\text{Re} = 10$: Visando comparar os resultados aqui obtidos com os de Perez (1987), assume-se que $\sigma_{xx}^* = 0,046$.

A malha aqui utilizada pode ser visualizada na figura abaixo.

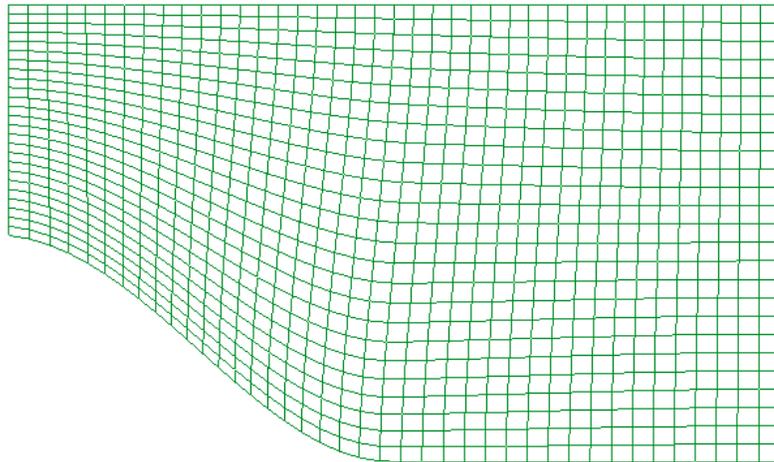


Figura 27: Malha 25 X 40

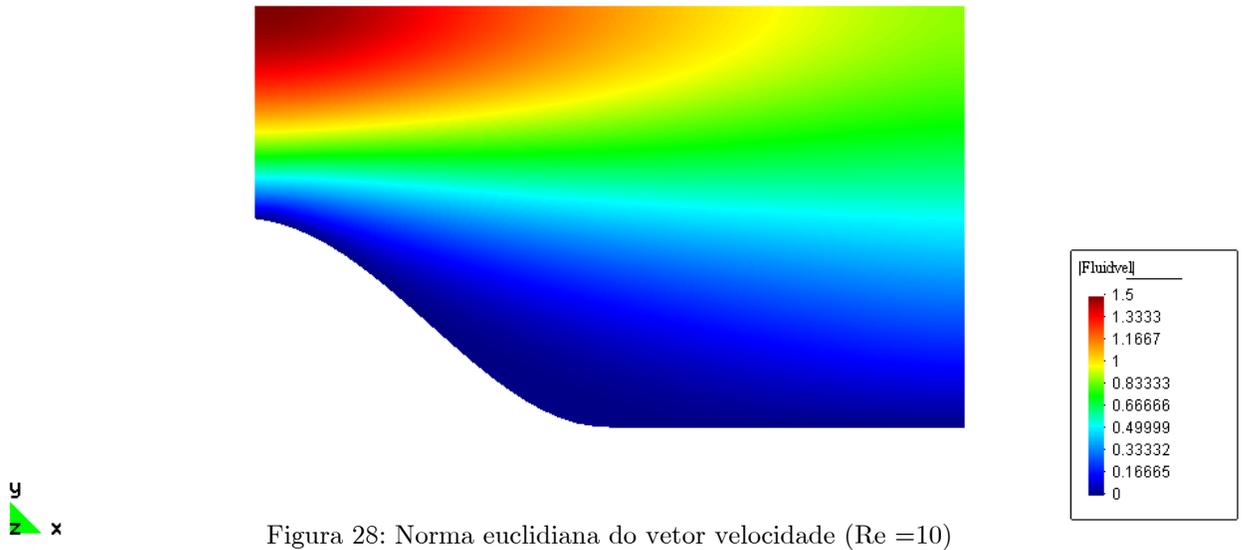


Figura 28: Norma euclidiana do vetor velocidade ($Re = 10$)

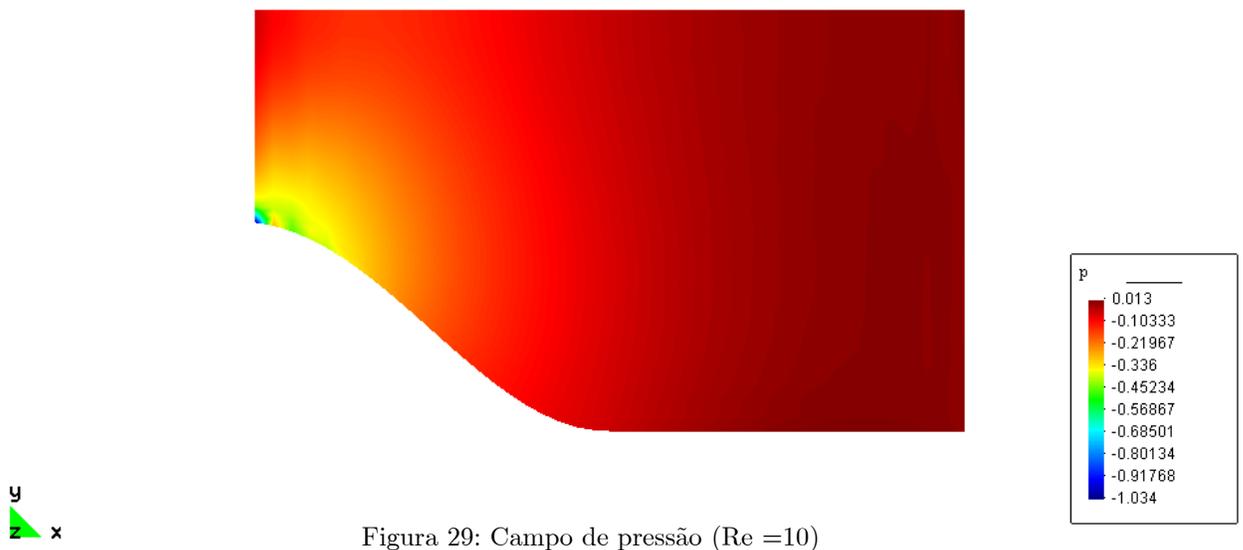


Figura 29: Campo de pressão ($Re = 10$)

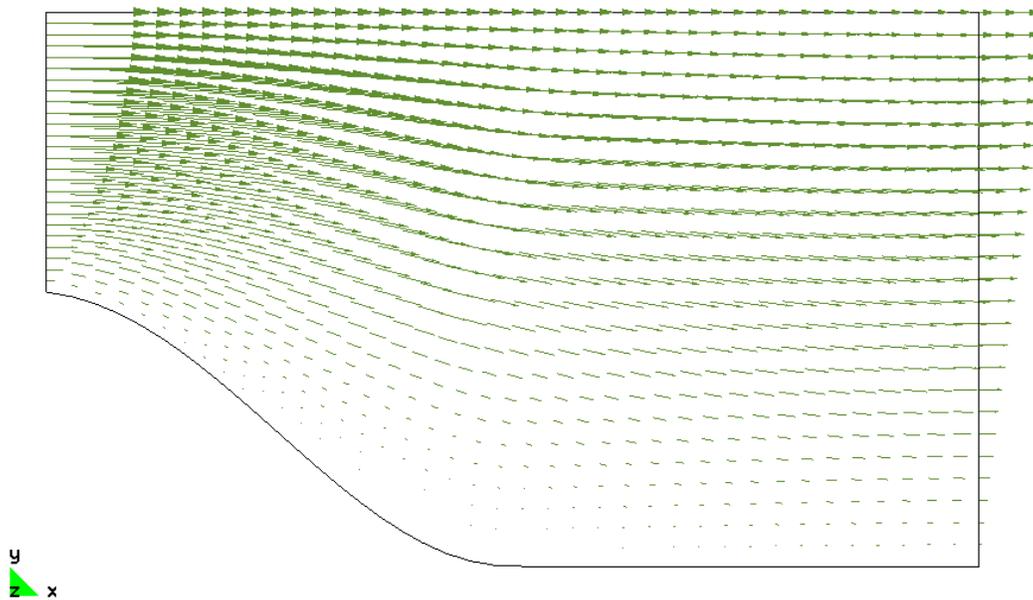


Figura 30: Campo de velocidade ($Re = 10$)

Apresentam-se agora os gráficos comparativos dos resultados obtidos neste trabalho com Perez (1987). Convenciona-se que de agora em diante **Ph** representa o perfil de pressão que foi obtido por este trabalho, ao longo do fundo do canal (**P_w**), e que **CJG**, **H**, **R**, **WA2**, **TEST1**, **TEST2** (e **TEST3** em $Re = 100$) são resultados apresentados em Perez (1987), que serão melhor especificados posteriormente.

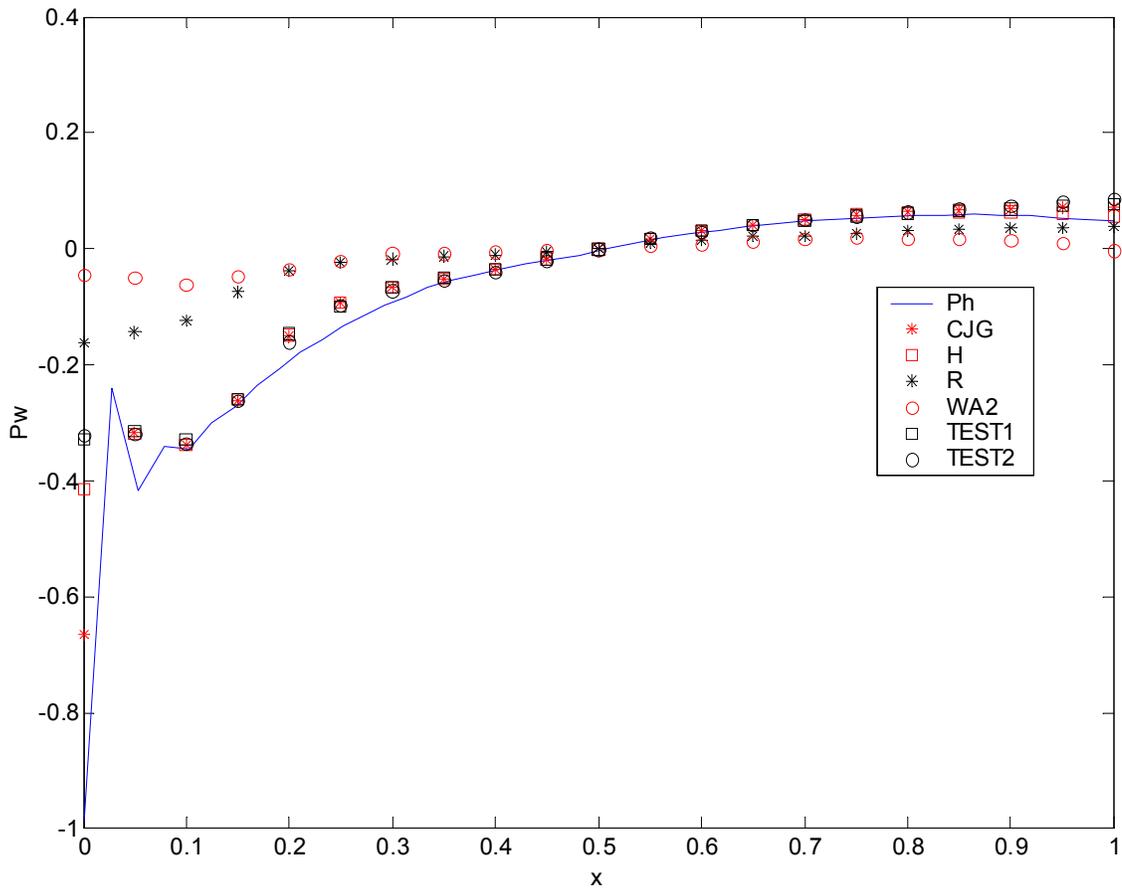


Figura 31: Perfil do campo de pressão na parede do canal ($Re = 10$)

ii) **Caso $Re = 100$** : Visando comparar os resultados aqui obtidos com os de Perez (1987), assume-se que $\sigma_{xx}^* = 0,019$.

A malha aqui utilizada pode ser visualizada na figura abaixo.



Figura 32: Malha 25 X 80

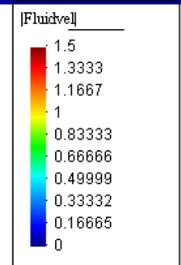
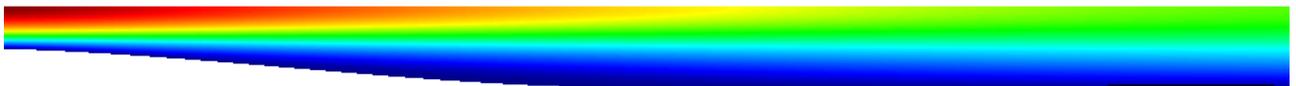


Figura 33: Norma euclidiana do vetor velocidade ($Re = 100$)



Figura 34: Campo de pressão ($Re = 100$)

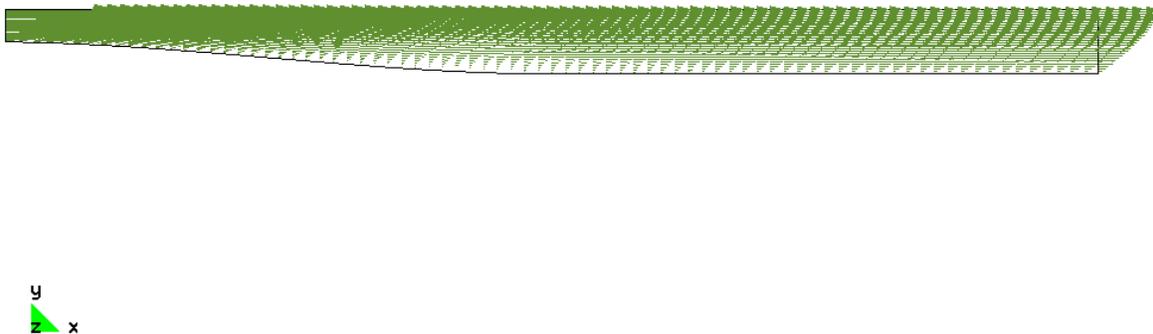


Figura 35: Campo de velocidade ($Re = 100$)

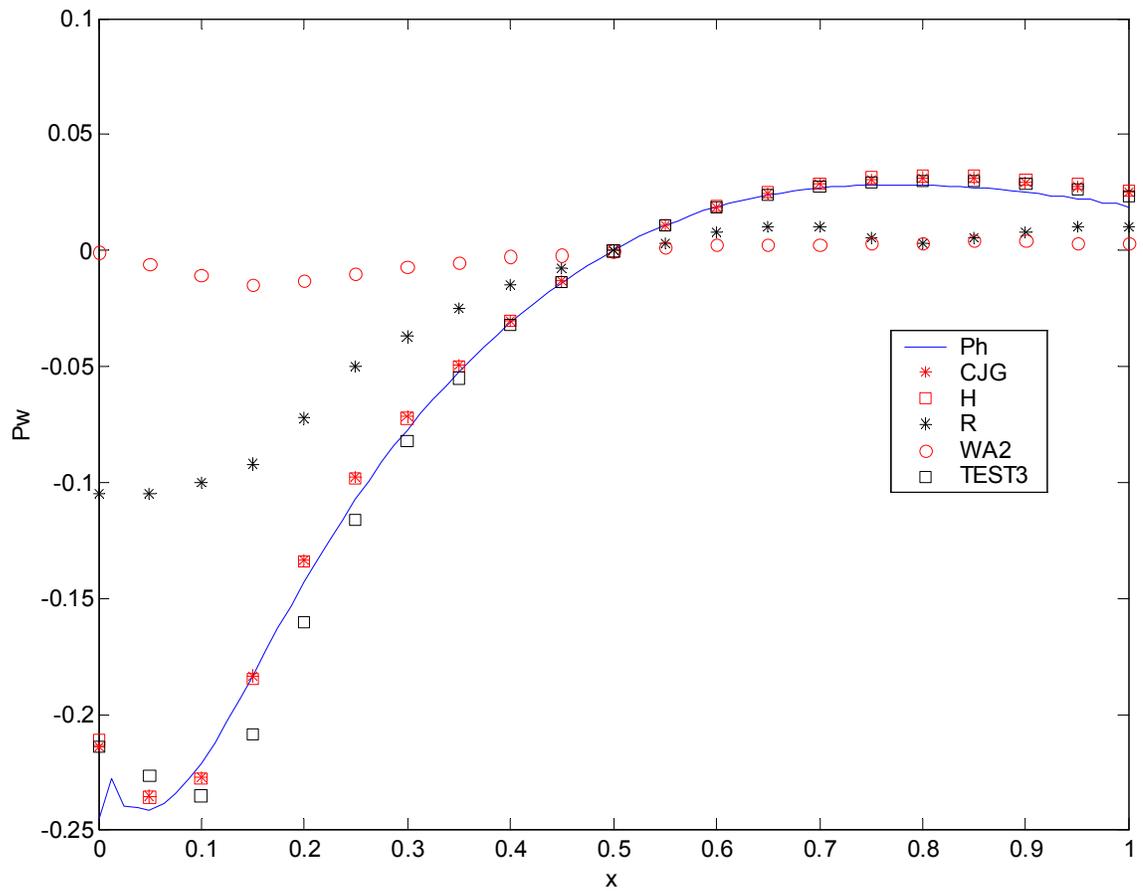


Figura 36: Perfil do campo de pressão na parede do canal ($Re = 100$)

As características dos métodos cujos resultados foram apresentados juntamente com o do presente trabalho, são as seguintes:

- CJG, Cliffe et al. (Perez (1987)) – Método de Elementos Finitos com elementos isoparamétricos de nove pontos (quadrilateral quadrático), utilizando como variáveis primitivas u , v e P , respectivamente, as componentes do vetor velocidade nas direções x e y , e a pressão.
- H, A. G. Hutton (Perez (1987)) – Método de Elementos Finitos associado a formulação de Galerkin, com a equação da continuidade incorporada através do uso dos Multiplicadores de Lagrange. Também utiliza como variáveis primitivas u , v e P .
- R, A. K. Rasgoti (Perez (1987)) – As equações de Navier-Stokes são modeladas em coordenadas curvilíneas ortogonais por diferenças finitas. Emprega-se a integração elementar para a solução das equações de continuidade e momento, além de aproximações híbridas para os termos difusivos e convectivos. Também utiliza como variáveis primitivas u , v e P .
- WA2, A. Wada & K. Adachi (Perez (1987)) – As equações de Navier-Stokes são modeladas por diferenças finitas, e em coordenadas cartesianas. Também utiliza como variáveis primitivas u , v e P .
- Test 1, Test 2, Test 3, J. O. Perez (Perez (1987)) – As equações governantes são transformadas de um sistema de coordenadas cartesiano para um sistema de coordenadas não ortogonais, gerado este, a partir da solução de um sistema elíptico de equações. O Método dos Volumes Finitos é então aplicado as equações, que são discretizadas no plano transformado. Também utiliza como variáveis primitivas u , v e P .

As condições de contorno para a equação de Navier-Stokes implicam na imposição nos contornos das variáveis principais (u – velocidade na direção x , e v – velocidade na direção y) prescritas e/ou a imposição das componentes da tensão prescrita, como se pôde

observar na formulação fraca deste problema. Lembrando-se agora que as componentes do tensor tensão são apresentadas da seguinte forma:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kroneker e μ é o coeficiente de viscosidade cinemática, conseqüentemente escreve-se:

i) Condição de saída:

$$\overline{\overline{\sigma}} \cdot \hat{n} = (\sigma_{ij} \hat{e}_i \otimes \hat{e}_j) \cdot \hat{e}_k = \sigma_{ij} (\hat{e}_j \cdot \hat{e}_k) \hat{e}_i = \sigma_{ij} \delta_{jk} \hat{e}_i = \sigma_{ik} \hat{e}_i, \quad \text{onde } i=1,2 \text{ e } k=1$$

$$\Rightarrow \overline{\overline{\sigma}} \cdot \hat{n} = \begin{pmatrix} -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \overline{\overline{\sigma}} \cdot \hat{n} = \begin{Bmatrix} -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{Bmatrix}.$$

Impõe-se as seguintes condições nesta face :

essencial:

$$v = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

e como conseqüência tem-se a natural:

$$\left(\overline{\overline{\sigma}} \cdot \hat{n} \right)_x = \sigma_{xx}^*.$$

ii) Condição de simetria:

$$\overline{\sigma} \cdot \hat{n} = (\sigma_{ij} \hat{e}_i \otimes \hat{e}_j) \cdot \hat{e}_k = \sigma_{ij} (\hat{e}_j \cdot \hat{e}_k) \hat{e}_i = \sigma_{ij} \delta_{jk} \hat{e}_i = \sigma_{ik} \hat{e}_i, \quad \text{onde } i=1,2 \text{ e } k=1$$

$$\Rightarrow \overline{\sigma} \cdot \hat{n} = \begin{pmatrix} -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \overline{\sigma} \cdot \hat{n} = \begin{Bmatrix} \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \end{Bmatrix}.$$

Impõe-se as seguintes condições nesta face :

essencial:

$$v = 0,$$

e como consequência tem-se a natural:

$$\left(\overline{\sigma} \cdot \hat{n} \right)_x = 0 \Rightarrow \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial y} = 0.$$

Impostas então as condições de contorno, que são resultados naturais das equações de Euler-Lagrange (ver Apêndice C), o problema está pronto para ser abordado. Foi usado um passo de carregamento para solução do caso Re=10 e três passos para o caso Re=100. O método de Newton foi novamente solicitado para solução do sistema não linear de equações. A precisão solicitada para ambos os casos foi de 10^{-4} , uma vez que testes realizados com tolerâncias menores não mostraram diferenças significativas. Quanto ao tempo de CPU o caso Re=10 convergiu em aproximadamente 12 min e o caso Re=100 em aproximadamente 16 min.

Nas figuras 27, 28, 29 e 30 estão apresentadas as características de malha e do escoamento para o caso $Re=10$. Similarmente para o caso $Re=100$ tem-se as figuras 32, 33, 34 e 35. As figuras 31 e 36 apresentam gráficos dos valores da pressão ao longo da parede do difusor que foram obtidos neste trabalho.

Observando os gráficos apresentados nas figuras 31 e 36, nota-se que para o caso $Re=10$ (fig. 31) os resultados deste trabalho tiveram uma melhor concordância com as metodologias CJG, H, Test 1 e Test 2, sendo que no primeiro nó a que obteve maior proximidade foi a CJG. O caso $Re=100$ (fig. 36) mostra novamente um comportamento bem similar no que diz respeito a comparação de resultados, sendo as metodologias que melhor concordaram com os resultados deste trabalho: CJG, H e Test 3.

Convém ainda observar que as malhas usadas no trabalho aqui presente foram as seguintes: para o caso no qual $Re=10$ utilizou-se uma malha 25×40 de elementos quadrilaterais “quad – four”, enquanto que para o caso no qual $Re=100$ utilizou-se uma malha 25×80 também de elementos quadrilaterais “quad – four”. Vale ressaltar que as malhas para ambos os casos resultaram de testes que foram feitos com outras malhas para ambos os casos, e para cada caso não se observou diferenças significativas nos resultados, com relação a malhas mais refinadas. Novamente devido ao processo de otimização onde o escoamento é resolvido várias vezes, optou-se, então, em se utilizar uma precisão mais elevada e uma malha com menos nós, o que contribui para a diminuição do esforço computacional durante tal processo.

Capítulo 3

Otimização de Forma

3.1 Introdução

O capítulo aqui presente engloba desde a apresentação da formulação geral de um problema de otimização, bem como a apresentação das condições necessárias de otimalidade, e vai até a definição da estratégia numérica adotada para minimizar a função objetivo a ser definida. Primeiramente será realizada a exposição de um típico problema de otimização restrita. As demais considerações serão feitas tomando por base este problema como “padrão”, quando por fim faz-se a conexão com a função objetivo e as restrições de interesse para as aplicações.

3.2 Otimização de Funções

O objetivo aqui consiste em solucionar problemas de otimização definidos na seguinte forma padrão:

Determinar $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que seja solução do problema abaixo:

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\bar{x}) \\ & g_j(\bar{x}) \leq 0, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m \\ & e \\ & x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}, \quad \text{onde } i = 1, \dots, n. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Note que as restrições de desigualdades foram divididas em dois grupos:

- (1) restrições gerais, i.e., $g_j(\bar{x}) \leq 0$, onde $j = 1, \dots, m$;
- (2) restrições laterais, i.e., $x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}$, onde $i = 1, \dots, n$.

Seja agora o conjunto: $X = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^n : x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}, \text{ onde } i = 1, \dots, n\}$. O problema pode ser então redefinido da seguinte forma:

Determinar $\bar{x} \in X$ tal que seja solução do problema abaixo:

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\bar{x}) \\ & g_j(\bar{x}) \leq 0, \text{ onde } j = 1, \dots, m; \quad \forall \bar{x} \in X. \end{aligned} \tag{3.2}$$

3.2.1 Condição Necessária de Otimalidade

Definição: Um ponto $\bar{x}^* \in X$ é dito *regular* se os vetores gradientes de todas as restrições ativas ($g_k(\bar{x}) = 0$), em \bar{x}^* forem linearmente independentes, i.e., se $J = \{k \in \{1, \dots, m\} : g_k(\bar{x}^*) = 0\}$ então o conjunto $\{\bar{\nabla} g_k(\bar{x}^*), k \in J\}$ é linearmente independente.

Teorema (Kuhn - Tucker): Seja \bar{x}^* um ponto regular de X o qual é solução de

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\bar{x}) \\ & \bar{x} \in S, \end{aligned} \tag{3.3}$$

onde $S = \{\bar{x} \in X : g_j(\bar{x}) \leq 0, \text{ onde } j = 1, \dots, m\}$. Seja $L(\cdot)$ a função Lagrangeana definida por:

$$L(\bar{x}, \bar{u}) = f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m u_j g_j(\bar{x}). \tag{3.4}$$

Então existe $\vec{u}^* \in \mathbb{R}^m$ tal que:

$$\nabla L(\vec{x}^*, \vec{u}^*) = \vec{\nabla} f(\vec{x}^*) + \sum_{j=1}^m u_j^* \nabla g_j(\vec{x}^*) = \vec{0},$$

onde, (3.5)

$$\begin{cases} g_j(\vec{x}^*) \leq 0, \\ u_j^* \geq 0, \\ u_j^* g_j(\vec{x}^*) = 0. \end{cases} \quad \text{para } j = 1, \dots, m,$$

Para solução de tal problema utiliza-se o Método do Lagrangeano Aumentado.

3.2.2 Método do Lagrangeano Aumentado

Considere então como problema inicial:

Determinar $\vec{x} \in X$ tal que seja solução do problema abaixo:

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\vec{x}) \\ & h_j(\vec{x}) = 0, \quad \text{onde } j = 1, \dots, p; \quad \forall \vec{x} \in X. \end{aligned} \quad (3.6)$$

A função Lagrangeana associada ao problema seria:

$$L(\vec{x}, \vec{u}) = f(\vec{x}) + \sum_{j=1}^p \lambda_j h_j(\vec{x}). \quad (3.7)$$

O problema pode ser então reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} L(\vec{x}, \vec{\lambda}) \\ & h_j(\vec{x}) = 0, \quad \text{onde } j = 1, \dots, p; \quad \forall \vec{x} \in X. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Note que como $h_j(\bar{x}) = 0$, para $j = 1, \dots, p$, este problema é equivalente ao anterior, e para a solução de tal problema aplica-se o Método de Penalidade Exterior, o que neste caso fornecerá a função Lagrangeana Aumentada, que é dada por:

$$\chi(\bar{x}, \vec{\lambda}, \varepsilon) = f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^p \lambda_j h_j(\bar{x}) + \frac{1}{2\varepsilon} \sum_{j=1}^p [h_j(\bar{x})]^2. \quad (3.9)$$

Nesta formulação, dados $\vec{\lambda}$ e $\varepsilon > 0$ (parâmetro de penalidade), o Método do Lagrangeano Aumentado consiste na aplicação de um algoritmo para a solução do seguinte problema:

Determinar $\bar{x}^ \in \mathbb{R}^n$ tal que $\bar{x}^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \bar{x}_k^*$, onde \bar{x}_k^* é solução do problema: Dados $\varepsilon^k > 0$, $\vec{\lambda}^k \in \mathbb{R}^p$, determinar \bar{x}_k^* tal que seja solução de*

$$\begin{aligned} \min_{i.q.} \chi(\bar{x}, \vec{\lambda}^k, \varepsilon^k) \\ \bar{x} \in X. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Note ainda que como $X = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^n : x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}, \text{ onde } i = 1, \dots, n\}$, o problema acima consiste na solução de uma seqüência de problemas com restrições laterais, i.e. um problema da seguinte forma:

Determinar $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que para $\vec{\lambda} \in \mathbb{R}^p$ e $\varepsilon > 0$, \bar{x} seja solução do problema abaixo:

$$\begin{aligned} \min_{i.q.} \chi(\bar{x}, \vec{\lambda}^k, \varepsilon^k) \\ x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}, \text{ onde } i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.11)$$

O multiplicador de Lagrange $\vec{\lambda}^k \in \mathbb{R}^p$ e o parâmetro de penalidade $\varepsilon^k > 0$ são então convenientemente reajustados de modo a obter a solução do problema original. Este processo de reajuste é repetido até a convergência.

A atualização do parâmetro de penalidade ($\varepsilon^k > 0$) é feita de acordo com esquema abaixo:

$$\varepsilon^{k+1} = \begin{cases} \gamma \varepsilon^k, & \text{se } \varepsilon^{k+1} > \varepsilon^{crit}, \text{ onde } \gamma \in (0,1); \\ \varepsilon^{crit}, & \text{se } \varepsilon^{k+1} < \varepsilon^{crit}. \end{cases} \quad (3.12)$$

Escolheu-se para este trabalho $\gamma = 10^{-1}$ e $\varepsilon^{crit} = 10^{-8}$. A atualização de $\vec{\lambda}$ é obtida comparando-se a condição necessária de otimalidade de Kuhn – Tucker com a condição de estacionaridade de $\chi(\vec{x}, \vec{\lambda}, \varepsilon)$ em $(\vec{x}_k^*, \vec{\lambda}^k, \varepsilon^k)$, i.e. comparando-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla L(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*) = \nabla f(\vec{x}^*) + \sum_{j=1}^p \lambda_j^* \nabla h_j(\vec{x}^*) = \vec{0}, \\ e \\ \nabla \chi(\vec{x}_k^*, \vec{\lambda}^k, \varepsilon^k) = \nabla f(\vec{x}_k^*) + \sum_{j=1}^p \left[\lambda_j^k + \frac{1}{\varepsilon^k} h_j(\vec{x}_k^*) \right] \nabla h_j(\vec{x}_k^*) = \vec{0}, \end{array} \right. \quad (3.13)$$

o que permite considerar como fórmula de atualização para $\vec{\lambda}^k$:

$$\lambda_j^{k+1} = \lambda_j^k + \frac{1}{\varepsilon^k} h_j(\vec{x}_k^*), \quad \text{onde } j = 1, \dots, p. \quad (3.14)$$

No caso de problemas com restrições de desigualdade, tem-se:

Determinar $\vec{x} \in X$ tal que seja solução do problema abaixo:

$$\begin{array}{l} \min f(\vec{x}) \\ \text{i.q.} \\ g_j(\vec{x}) \leq 0, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m; \quad \forall \vec{x} \in X. \end{array} \quad (3.15)$$

Tal problema pode ser convertido em um problema de igualdade em X através da introdução de “variáveis de folga”. Vale ressaltar que este procedimento não fornece a condição de positividade dos multiplicadores de Lagrange.

Tem-se agora o problema:

Determinar $(\vec{x}, \vec{z}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$, com $\vec{x} \in X$, e tal que seja solução do problema:

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\bar{x}) \\ & g_j(\bar{x}) + z_j^2 = 0, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m; \quad \forall \bar{x} \in X. \end{aligned} \quad (3.16)$$

A função Lagrangeana Aumentada neste caso é dada por:

$$\chi(\bar{x}, \bar{z}, \bar{\lambda}, \varepsilon) = f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j [g_j(\bar{x}) + z_j^2] + \frac{1}{2\varepsilon} \sum_{j=1}^m [g_j(\bar{x}) + z_j^2]^2. \quad (3.17)$$

Impondo então a condição de estacionaridade de $\chi(\cdot)$ em $(\bar{x}^*, \bar{z}^*, \bar{\lambda}^*, \varepsilon)$, pode-se eliminar as variáveis de folga. Procede-se então da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial z_j} = 0, \quad \text{com } j = 1, \dots, m & \Rightarrow 2z_j \lambda_j + \frac{1}{\varepsilon} (g_j(\bar{x}) + z_j^2)(2z_j) = 0 \\ \Rightarrow 2z_j (\varepsilon \lambda_j + g_j(\bar{x}) + z_j^2) = 0, \quad \text{onde } \varepsilon > 0, \end{aligned}$$

o que permite concluir que $z_j^2 = 0 \vee z_j^2 = -\varepsilon \lambda_j - g_j(\bar{x})$, donde pode-se seleccionar:

$$z_j^2 = \max\{0, -[\varepsilon \lambda_j + g_j(\bar{x})]\}, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m. \quad (3.18)$$

Tal selecção satisfaz a condição necessária de otimalidade, e permite remover a variável de folga da formulação. Note ainda que:

$$g_j(\bar{x}) + z_j^2 = \max\{g_j(\bar{x}), -\varepsilon \lambda_j\}, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m. \quad (3.19)$$

Substituindo a relação acima, tem-se:

$$\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2\varepsilon} \sum_{j=1}^m \Psi_j(g_j(\bar{x}), \varepsilon \lambda_j), \quad (3.20)$$

onde:

$$\Psi_j(g_j(\bar{x}), \varepsilon \lambda_j) = \begin{cases} g_j(\bar{x})[g_j(\bar{x}) + 2\varepsilon \lambda_j], & \text{se } g_j(\bar{x}) \geq -\varepsilon \lambda_j; \\ -(\varepsilon \lambda_j)^2, & \text{se } g_j(\bar{x}) < -\varepsilon \lambda_j. \end{cases} \quad (3.21)$$

Note ainda que $\Psi_j(\bar{x}, \cdot) \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n)$ caso $g_j(\bar{x})$ o seja. Neste caso a fórmula para a atualização do vetor $\bar{\lambda}$ fica:

$$\lambda_j^{k+1} = \max\{0, \lambda_j^k + \frac{1}{\varepsilon^k} g_j(\bar{x})\}, \quad \text{onde } j = 1, \dots, m. \quad (3.22)$$

Tem-se então a seguinte formulação final do problema:

Determinar $\bar{x}^* \in \mathbb{R}^n$ tal que $\bar{x}^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \bar{x}_k^*$, onde \bar{x}_k^* é solução do problema: Dados $\varepsilon^k > 0$, $\bar{\lambda}^k \in \mathbb{R}^m$, determinar \bar{x}_k^* tal que seja solução de

$$\begin{aligned} & \min_{i.q.} \chi(\bar{x}, \bar{\lambda}^k, \varepsilon^k) \\ & \bar{x} \in X, \end{aligned}$$

onde

$$X = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^n : x_i^{\text{inf}} \leq x_i \leq x_i^{\text{sup}}, \quad \text{onde } i = 1, \dots, n\};$$

$$\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}^k, \varepsilon^k) = f(\bar{x}) + \frac{1}{2\varepsilon^k} \sum_{j=1}^m \Psi_j(g_j(\bar{x}), \varepsilon^k \lambda_j^k);$$

$$\Psi_j(g_j(\bar{x}), \varepsilon^k \lambda_j^k) = \begin{cases} g_j(\bar{x})[g_j(\bar{x}) + 2\varepsilon^k \lambda_j^k], & \text{se } g_j(\bar{x}) \geq -\varepsilon^k \lambda_j^k; \\ -(\varepsilon^k \lambda_j^k)^2, & \text{se } g_j(\bar{x}) < -\varepsilon^k \lambda_j^k, \end{cases}$$

e as atualizações de ε^k e $\bar{\lambda}^k$ são dadas respectivamente por:

$$\varepsilon^{k+1} = \begin{cases} \gamma \varepsilon^k, & \text{se } \varepsilon^{k+1} > \varepsilon^{\text{crit}}, \quad \text{onde } \gamma \in (0, 1); \\ \varepsilon^{\text{crit}}, & \text{se } \varepsilon^{k+1} < \varepsilon^{\text{crit}}. \end{cases}$$

$$\lambda_j^{k+1} = \max \left\{ 0, \lambda_j^k + \frac{1}{\varepsilon^k} g_j(\bar{x}) \right\}, \text{ onde } j = 1, \dots, m.$$

O algoritmo pode ser ilustrado da seguinte maneira:

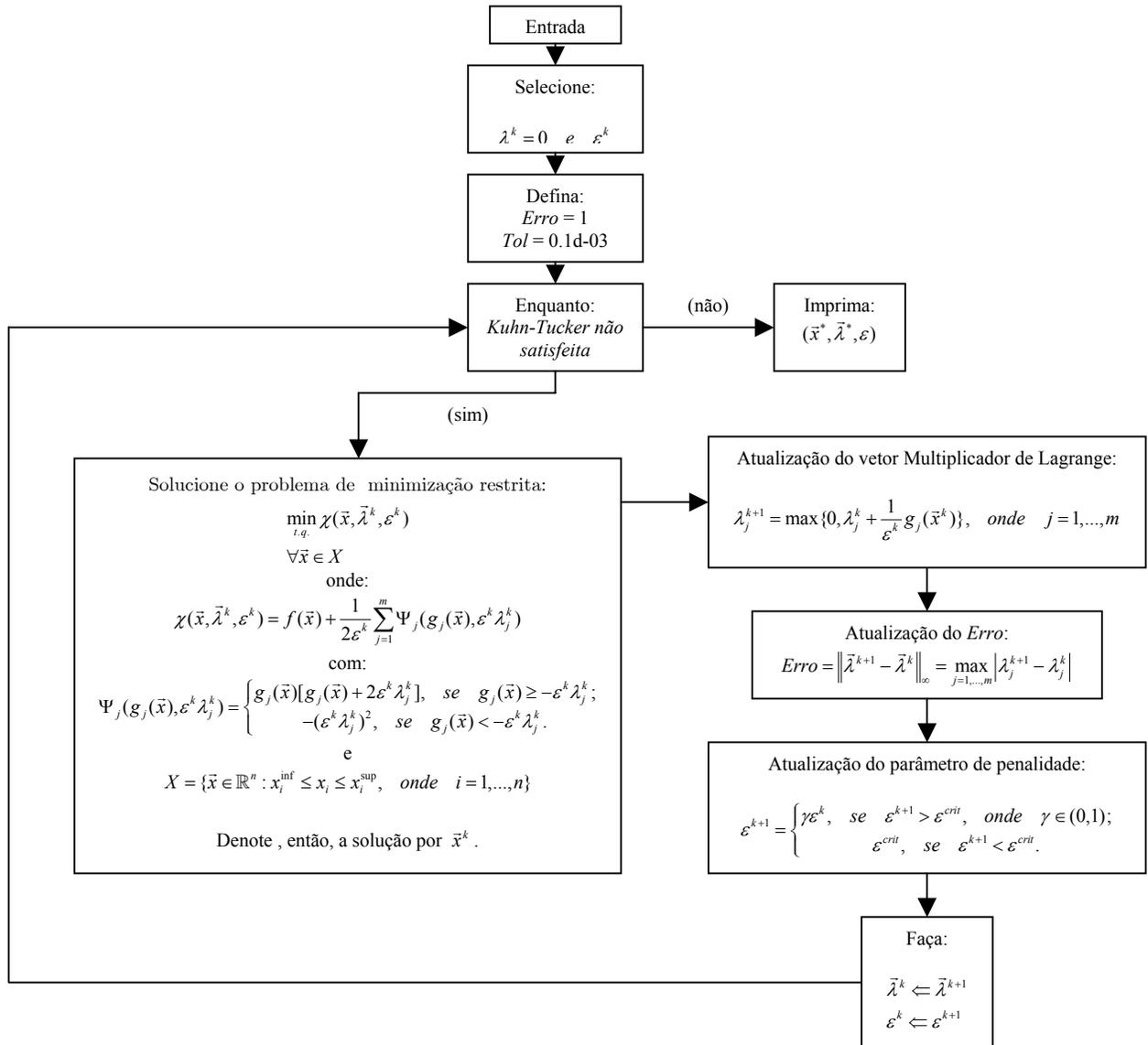


Figura 37: Algoritmo de otimização

A esquematização da abordagem do problema de ótimo pode ser representado como se segue:

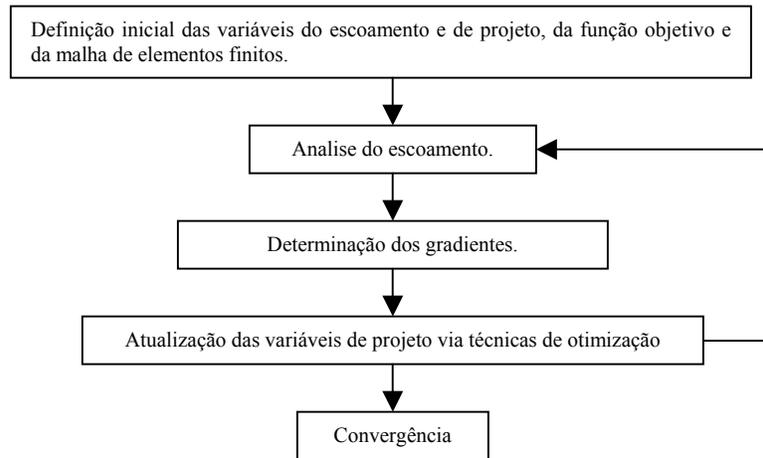


Figura 38: Vista global do esquema de solução do problema de ótimo

Obs.: O cálculo da matriz Hessiana está mais detalhado no Apêndice E.

3.3 Geração de Malha

O código desenvolvido para a geração de malha caracteriza-se por trabalhar com a idéia de “macro-elementos”. A união destes macro-elementos por sua vez definem o domínio a ser mapeado. A figura abaixo dará uma melhor compreensão a respeito, consistindo de um domínio retangular mapeado com quatro macro-elementos:

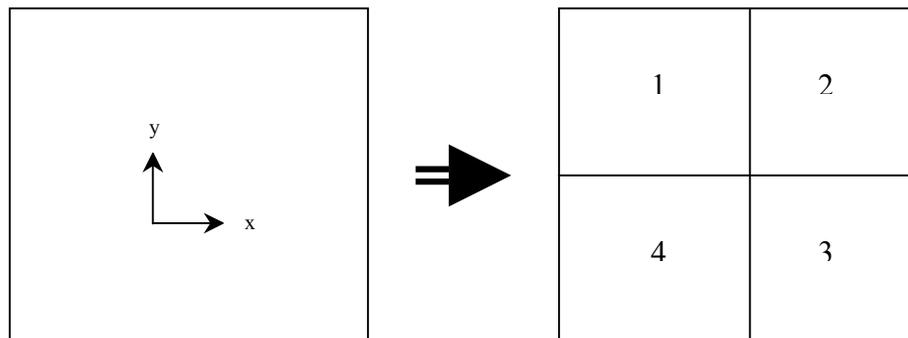


Figura 39: Exemplo de abordagem do domínio via macro-elementos

Os macro-elementos são responsáveis por receber as condições de contorno em cada uma das suas respectivas faces, que são assim enumeradas:

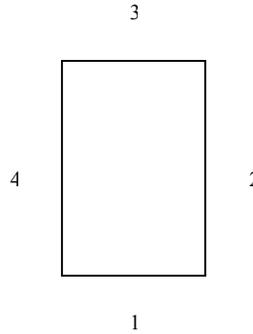


Figura 40: Discriminação das faces do macro-elemento

Então suponha que se queira colocar as condições de contorno do problema da “Lead Driven Cavity” no domínio apresentado na figura 39, tem-se então:

<i>ME</i> \ <i>GL</i>	<i>1</i>				<i>2</i>				<i>3</i>				<i>4</i>			
	F1	F2	F3	F4	F1	F2	F3	F4	F1	F2	F3	F4	F1	F2	F3	F4
Velocidade em x	Livre	Livre	Prescrito	Fixo	Livre	Fixo	Prescrito	Livre	Fixo	Fixo	Livre	Livre	Fixo	Livre	Livre	Fixo
Velocidade em y	Livre	Livre	Fixo	Fixo	Livre	Fixo	Fixo	Livre	Fixo	Fixo	Livre	Livre	Fixo	Livre	Livre	Fixo
Pressão	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre	Livre

ME – Macro-Elementos GL - Graus de Liberdade F1 - Face 1 F2 - Face 2 F3 - Face 3 F4 - Face 4

Tabela 1: Condições de Contorno da “Lid-Driven Cavity”

Os macro-elementos são ainda quem fornecem as variáveis de projeto do problema de ótimo, isto somente dependerá do tipo de interpolação (“serendipity”) escolhida para o macro-elemento. Esta poderá ser dos tipos mais variados. Neste trabalho foram implementadas interpolações com quatro macro-nós, com oito macro-nós, com doze macro-nós e com dezessete macro-nós. Tais configurações podem ser vistas na figura que se segue:

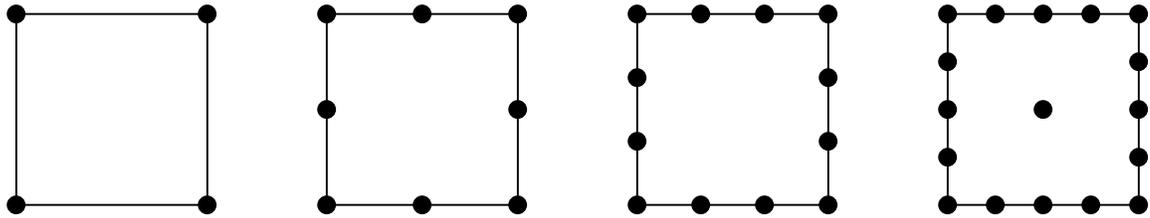


Figura 41: Discriminação das interpolações utilizadas nos macro-elementos (da esquerda pra direita: serendipity 4, serendipity 8, serendipity 12, serendipity 17)

Os macro-nós (“macro-nodes”) são ainda divididos em nós-mestres (“master-nodes”) e nós-escravos (“slaves-nodes”). Os nós-mestres são responsáveis pela definição do contorno do domínio, enquanto que os nós-escravos são definidos como uma combinação convexa dos nós-mestres. Cada nó-mestre pode ainda ser móvel ou fixo, e os nós-mestres móveis são responsáveis pela definição das variáveis de projeto, mais especificamente cada um dos graus de liberdade de cada nó-mestre móvel será uma variável de projeto. No caso, por exemplo, de querer-se modelar o domínio do problema da cavidade (“Lid-Driven Cavity”), pode-se utilizar dois macros-elementos, do tipo “serendipity” 17, como ilustrado na figura abaixo:

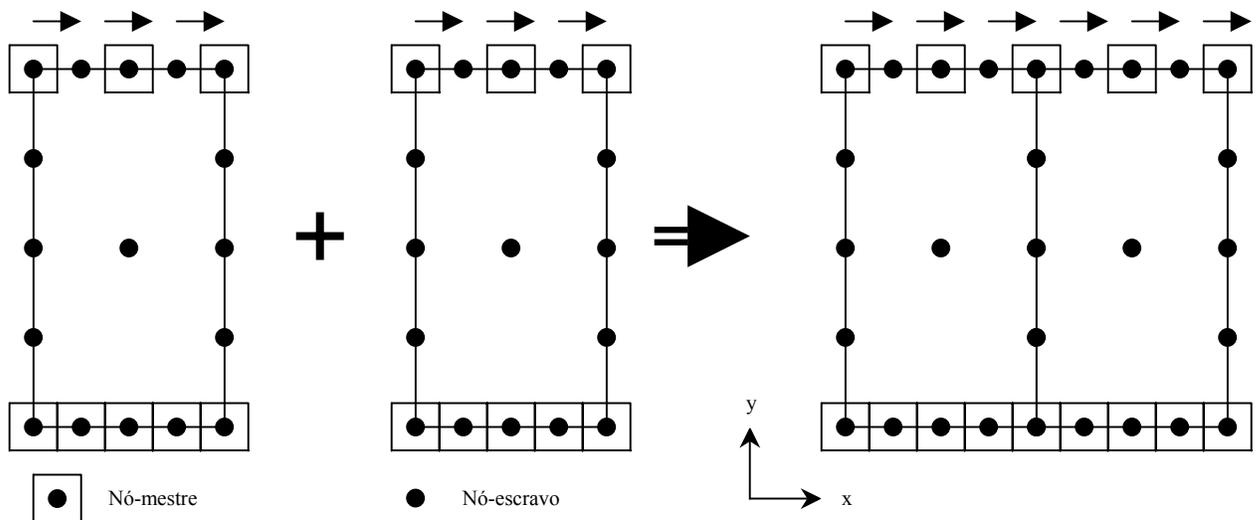


Figura 42: “ Lid-Driven Cavity ” modelada com dois macro-elementos e serendipity 17

Feito isto entra-se então com o número de divisões, em cada direção, para cada macro-elemento. Com estes dados, a malha estruturada com elementos quadrilaterais é então gerada para cada um dos macro-elementos. Após verifica-se a existência de nós coincidentes em ambas as malhas para que se possa colapsá-los e assim obter a malha-base do domínio. Vale ainda ressaltar que tal malha gerada é transformada em uma malha com elementos triangulares. Desta forma espera-se reduzir a possibilidade dos elementos da malha final ficarem muito degenerados, e assim prejudicarem o mapeamento do domínio. Este procedimento é feito de tal forma que cada elemento quadrilateral dá origem a dois elementos triangulares. Feita esta ultima etapa a malha definitiva do domínio é então alcançada. Observa-se a figura que se segue para uma melhor compreensão:

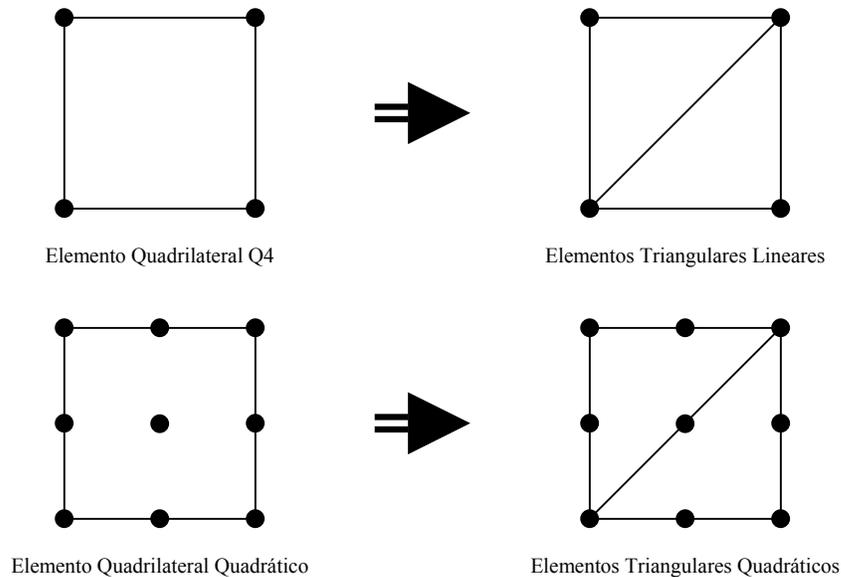


Figura 43: Geração da malha em elementos triangulares

Uma importante observação a ser feita ainda é que durante o processo de otimização a malha resultante (ou melhor as variáveis de projeto que darão origem a malha) gerada, a partir de um passo de descida, terá as mesmas características da malha imediatamente anterior a este passo, tais como número de elementos, número de nós, a incidência destes,

etc. A única característica a se alterar de um passo a outro serão as coordenadas dos nós gerados a partir dos novos valores das variáveis de projeto. Este é o motivo principal pelo qual se utilizou uma malha estruturada, i.e., a facilidade de se aproveitar o máximo de parâmetros da malha anterior, tornando assim desnecessários um novo cálculo destes. O cálculo do gradiente da função objetivo de forma numérica também tira proveito desta característica (ver Apêndice F).

3.4 A Função Objetivo

Nas aplicações deste trabalho a função objetivo a ser considerada será a dissipação viscosa integrada no domínio Ω :

$$f(\vec{x}) = 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})), \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) \rangle_{\Omega} = 2\nu \iint_{\Omega} \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) \cdot \varepsilon(\vec{u}(\vec{x})) d\Omega,$$

onde ν é a viscosidade dinâmica, $\varepsilon(\cdot)$ é o tensor de deformação, \vec{u} é o vetor velocidade e \vec{x} é o vetor posição das variáveis de projeto. Tal função objetivo foi motivada por representar o trabalho das forças viscosas do escoamento, de uma forma global. Pode-se agora escrever:

$$\varepsilon(\vec{u}) = \frac{\nabla \vec{u} + \nabla^T \vec{u}}{2},$$

todavia: $\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{v}) = \text{tr}(\varepsilon^T(\vec{u})\varepsilon(\vec{v})) = \varepsilon(\vec{u})_{11}\varepsilon(\vec{v})_{11} + \varepsilon(\vec{u})_{12}\varepsilon(\vec{v})_{12} + \varepsilon(\vec{u})_{22}\varepsilon(\vec{v})_{22} + \varepsilon(\vec{u})_{21}\varepsilon(\vec{v})_{21}$, mas lembre-se que $\varepsilon(\cdot)$ é a parte simétrica do gradiente da velocidade, logo:

$$\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{u}) = \varepsilon(\vec{u})_{11}\varepsilon(\vec{u})_{11} + 2\varepsilon(\vec{u})_{12}\varepsilon(\vec{u})_{12} + \varepsilon(\vec{u})_{22}\varepsilon(\vec{u})_{22}.$$

Tomando agora:

$$\vec{\varepsilon}(\vec{u}) = \begin{Bmatrix} \varepsilon(\vec{u})_{11} \\ \varepsilon(\vec{u})_{22} \\ 2\varepsilon(\vec{u})_{12} \end{Bmatrix},$$

pode-se então escrever:

$$2\nu\varepsilon(\vec{u}) \cdot \varepsilon(\vec{u}) = \begin{bmatrix} 2\nu & 0 & 0 \\ 0 & 2\nu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{bmatrix} \vec{\varepsilon}(\vec{u}) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{u}) = [H^\nu] \vec{\varepsilon}(\vec{u}) \cdot \vec{\varepsilon}(\vec{u}).$$

Note ainda que:

$$\varepsilon(\vec{u})_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}; \quad \varepsilon(\vec{u})_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}; \quad 2\varepsilon(\vec{u})_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1},$$

onde:

$$\vec{\varepsilon}(\vec{u}) = \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \end{array} \right\}.$$

Utilizando a notação matricial, obtem-se:

$$\varepsilon(\vec{u})_{11} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^{u_1}; \quad \varepsilon(\vec{u})_{22} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^{u_2}; \quad 2\varepsilon(\vec{u})_{12} = \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] \vec{q}_e^{u_1} + \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] \vec{q}_e^{u_2},$$

$$[B^\nu] = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] & [0] & [0] \\ [0] & \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & [0] \\ \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_2} \right] & \left[\frac{\partial \mathbb{N}_u}{\partial x_1} \right] & [0] \end{bmatrix} \vec{q}_e, \text{ onde } \vec{q}_e = (\vec{q}_e^{u_1}, \vec{q}_e^{u_2}, \vec{q}_e^p).$$

O que acarreta:

$$\begin{aligned}
 2\nu \langle \varepsilon(\vec{u}), \varepsilon(\vec{u}) \rangle_{\Omega} &= \langle [H^{\nu}] \vec{\varepsilon}(\vec{u}), \vec{\varepsilon}(\vec{u}) \rangle_{\Omega} = \langle [H^{\nu}] [B^{\nu}] \vec{q}_e, [B^{\nu}] \vec{q}_e \rangle_{\Omega} \\
 &= \langle [B^{\nu}]^T [H^{\nu}] [B^{\nu}] \vec{q}_e, \vec{q}_e \rangle_{\Omega} = \left[\iint_{\Omega} [B^{\nu}]^T [H^{\nu}] [B^{\nu}] d\Omega \right] \vec{q}_e \cdot \vec{q}_e = [K_e^{\nu}] \vec{q}_e \cdot \vec{q}_e.
 \end{aligned}$$

3.5 Aplicações

3.5.1 Problema Clássico da Cavityde (“Square Lid-Driven Cavity”)

O objetivo deste exemplo é encontrar o formato da tampa superior da “Lid-Driven Cavity” de modo a minimizar a dissipação viscosa. As análises de otimização de forma serão feitas para $Re=100$ em duas situações distintas:

- 1.i) O caso em que ambas as extremidades da tampa superior da cavityde estão fixas.
- 1.ii) O caso em que apenas a extremidade direita encontra-se fixa.

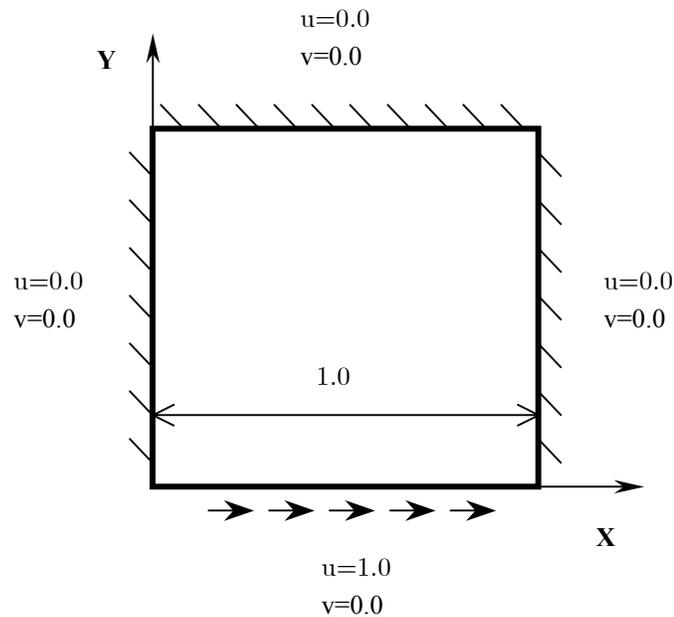


Figura 44: Domínio inicial

Serão mostrados agora como ficaram os resultados para a cavidade no caso (1.i):

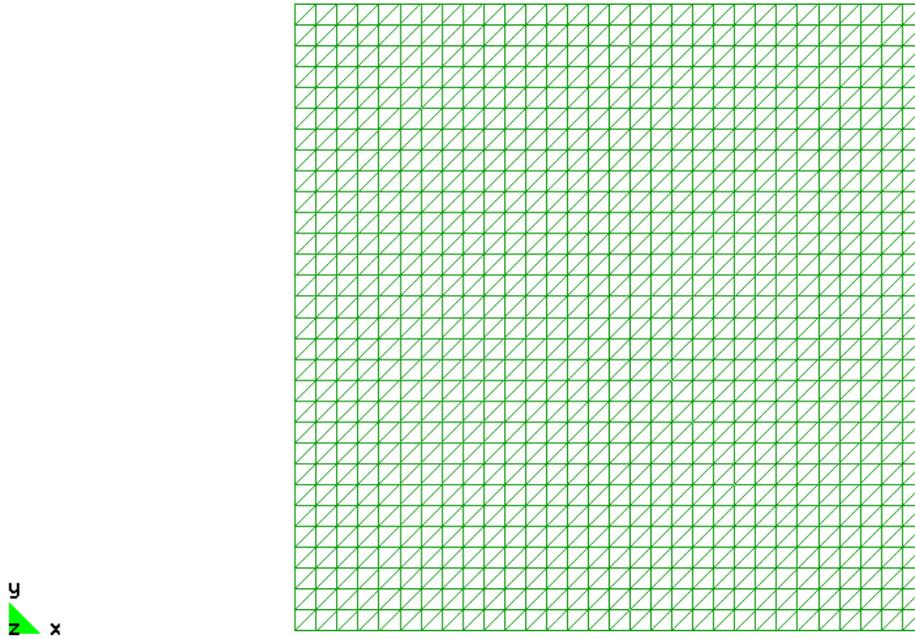


Figura 45: Malha da forma inicial da cavidade (1.i)

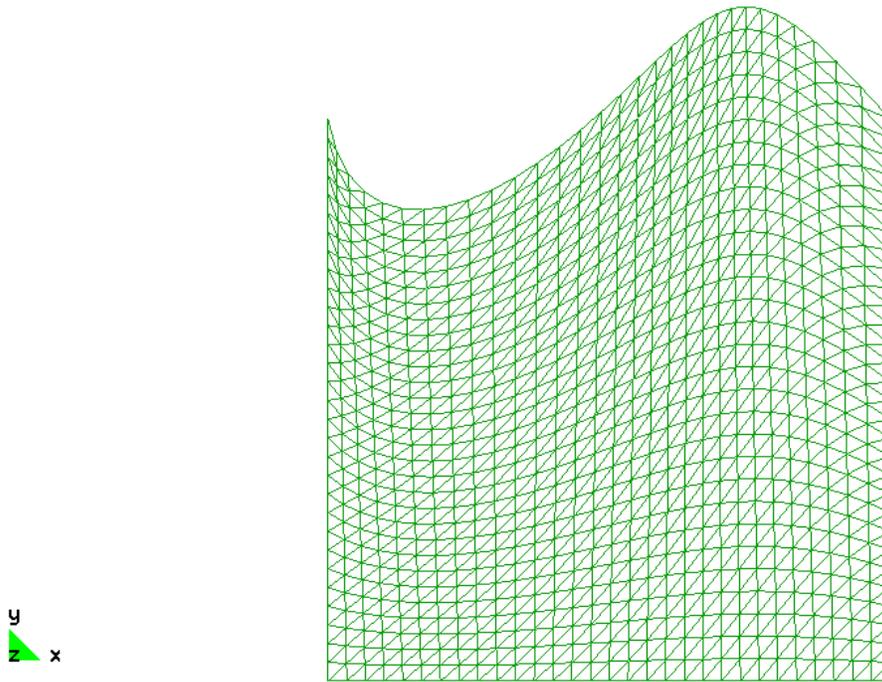


Figura 46: Malha da forma otimizada (1.i)

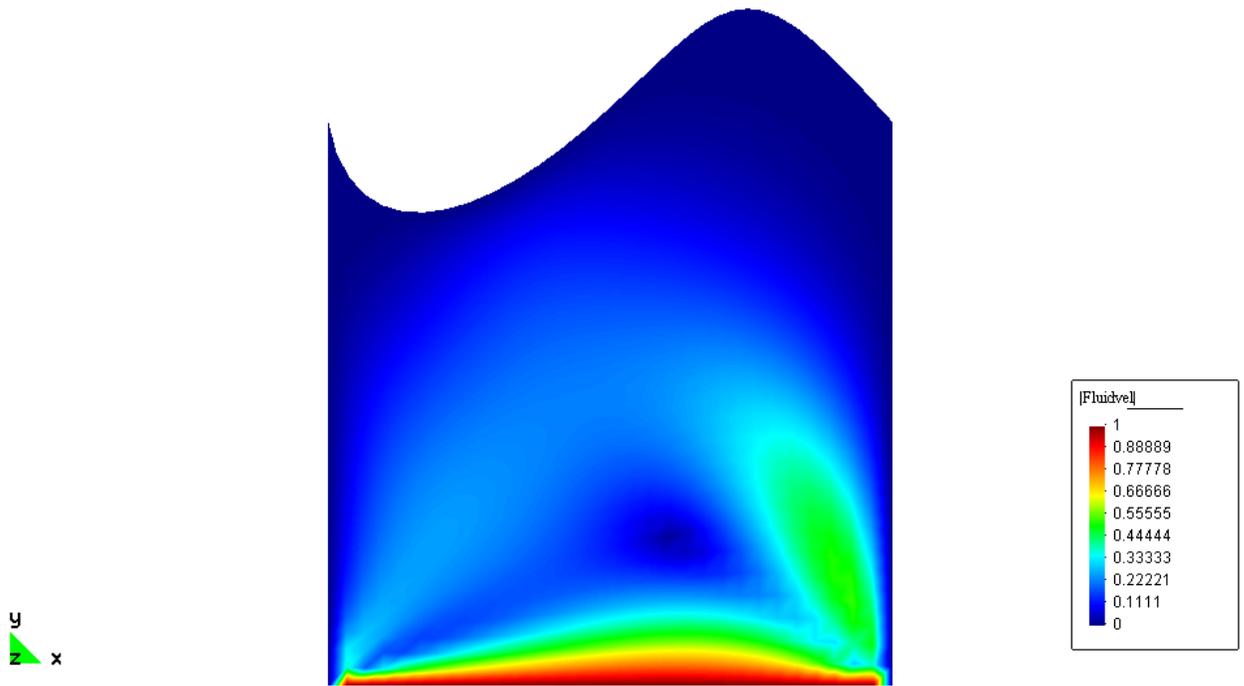


Figura 47: Norma euclidiana do vetor velocidade (1.i)

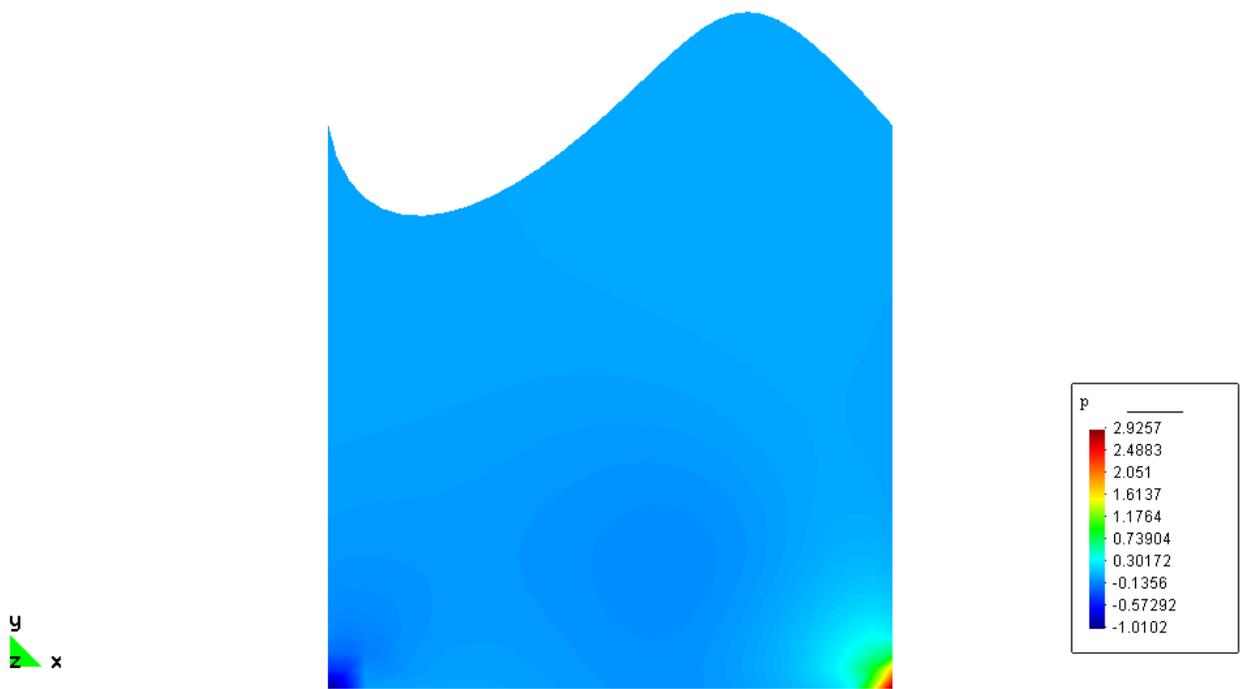


Figura 48: Campo de pressão (1.i)

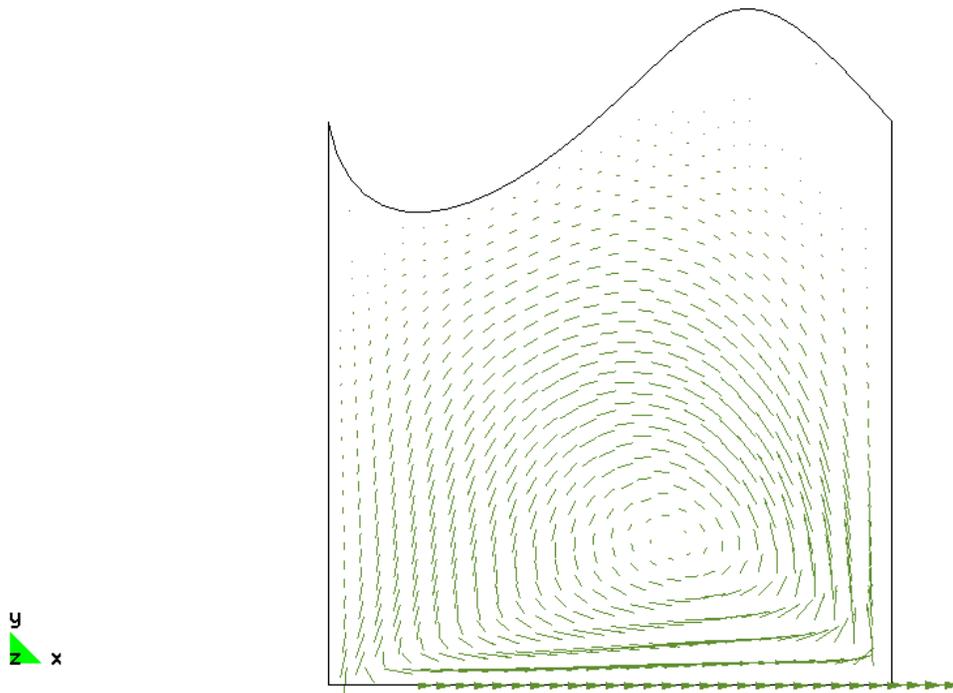


Figura 49: Campo de velocidade (1.i)

Neste exemplo utilizou-se uma malha base 30 X 30 de elementos quadrilaterais “quad – four”, que por sua vez deram origem a elementos triangulares lineares. Apenas um macro-elemento de dezessete nós foi utilizado, e cuja configuração pode ser observada abaixo:

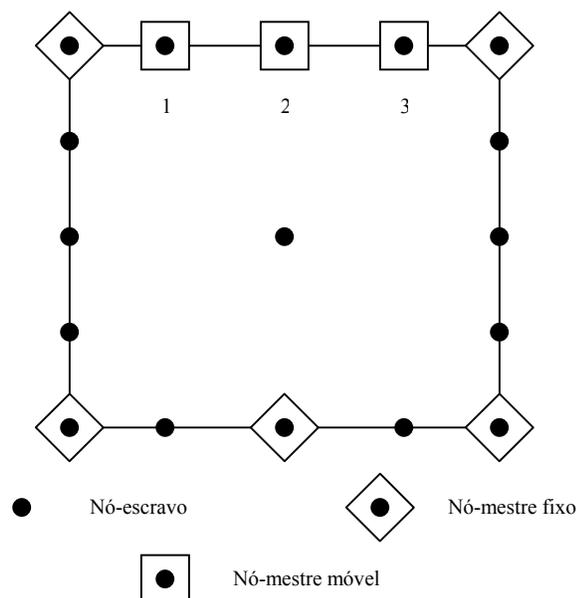


Figura 50: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (1.i)

As restrições aqui usadas foram do tipo caixa para os nós mestres livres, e restrição de área, como se pode observar a seguir:

$$\begin{aligned} 0,23 &\leq x_1 \leq 0,27; \\ 0,85 &\leq y_1 \leq 1,2; \\ 0,48 &\leq x_2 \leq 0,52; \\ 0,85 &\leq y_2 \leq 1,2; \\ 0,73 &\leq x_3 \leq 0,77; \\ 0,85 &\leq y_3 \leq 1,2; \\ S &\leq 1,1 \times S_o = S_{adm}. \end{aligned}$$

Os valores encontrados para o resultado final, do formato otimizado da tampa superior da cavidade, foram:

$$\begin{aligned} S_{adm} &= 1,1; \\ S &= 1,0121; \\ F_o &= 0,1612; \\ F &= 0,1609; \\ x_1 &= 0,23; \\ y_1 &= 0,85; \\ x_2 &= 0,52; \\ y_2 &= 1,0442; \\ x_3 &= 0,73; \\ y_3 &= 1,2. \end{aligned}$$

Onde S_o é a área inicial da cavidade, S_{adm} é a área admissível, S é a área final da cavidade, F_o é a dissipação viscosa inicial, F é a dissipação viscosa final, e os (x_i, y_i) , $i=1,2,3$ são as coordenadas finais dos nós mestres livres. Os multiplicadores de Lagrange não nulos estão listados a seguir:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 5,1321\text{E-}002; \\ \lambda_2 &= 2,4725\text{E-}003; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\lambda_3 &= 5,117\text{E-}003; \\ \lambda_4 &= 8,9237\text{E-}003; \\ \lambda_5 &= 1,0439\text{E-}003.\end{aligned}$$

Note ainda que os gradientes das restrições ativas são linearmente independentes no ponto de ótimo, uma vez que se tratam dos próprios eixos coordenados, ou seja se trata de um ponto regular. Adicionalmente os multiplicadores de Lagrange para estas restrições são positivos e o ponto de ótimo se encontra dentro da região factível. Desta forma todas as hipóteses da condição necessária de otimalidade (Teorema de Kuhn – Tucker) são satisfeitas, garantindo que o critério de convergência aqui adotado foi atingido.

Serão mostrados agora como ficaram os resultados para cavidade no caso (1.ii):

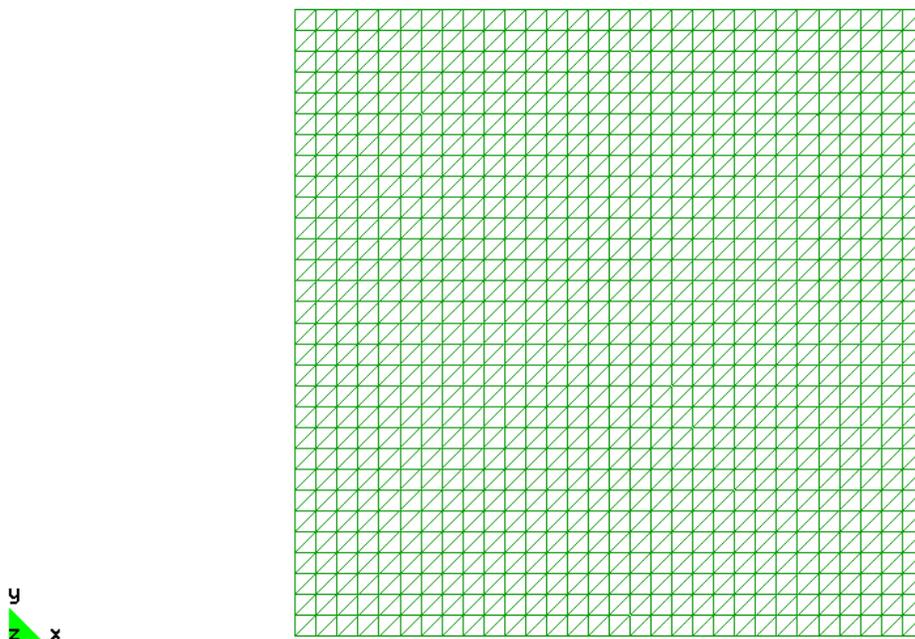


Figura 51: Malha da forma inicial da cavidade (1.ii)

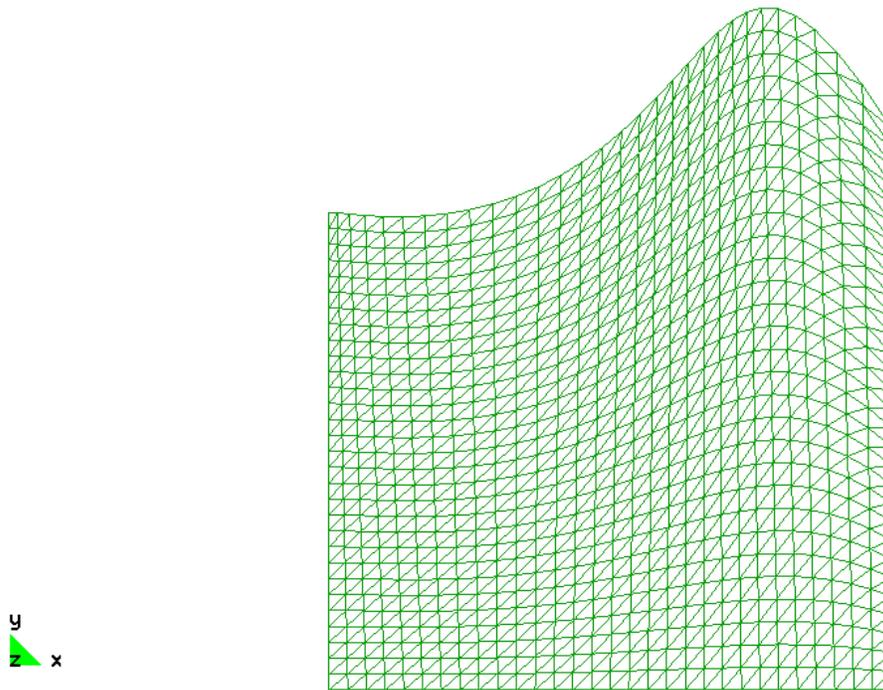


Figura 52: Malha da forma otimizada (1.ii)

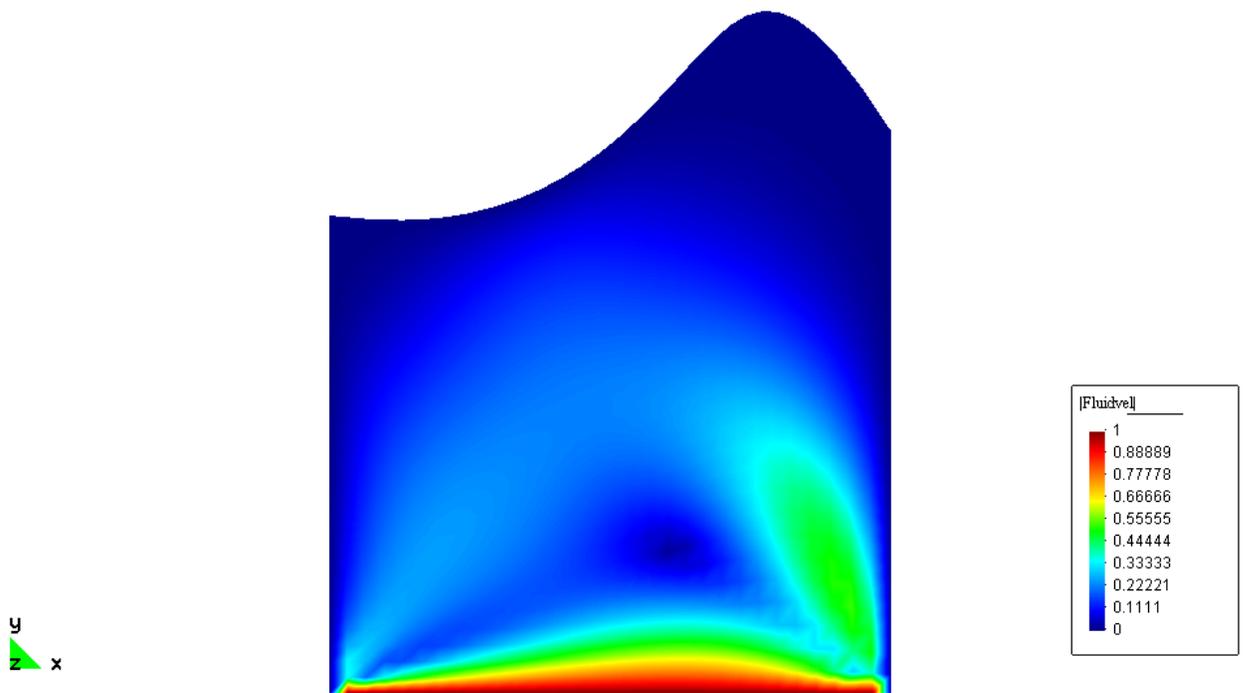


Figura 53: Norma euclidiana do vetor velocidade (1.ii)

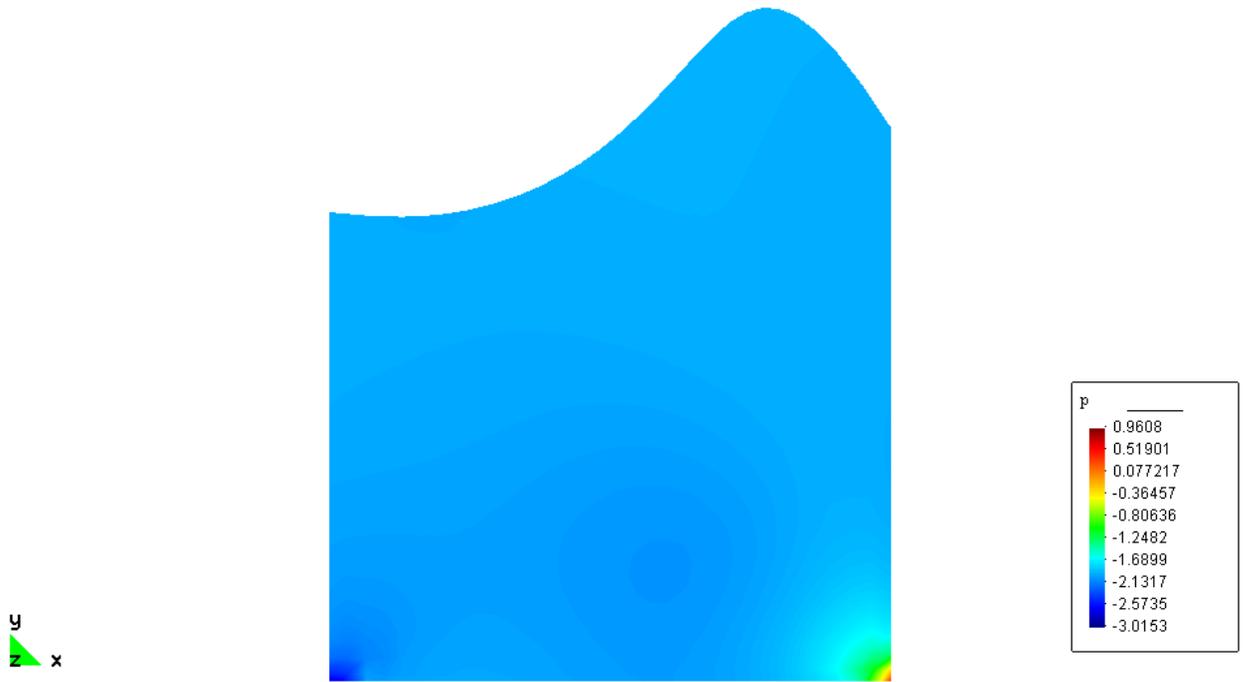


Figura 54: Campo de pressão (1.ii)

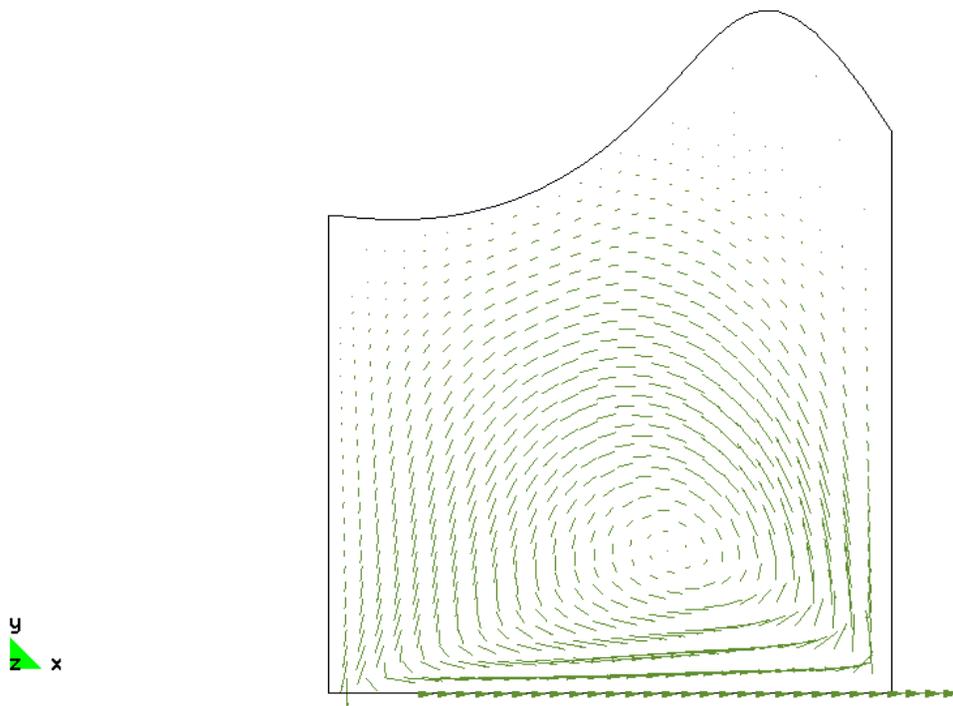


Figura 55: Campo de velocidade (1.ii)

Os valores encontrados para o resultado final do formato otimizado da tampa superior da cavidade foram:

$$\begin{aligned}S_{adm} &= 1,1; \\S &= 0,9981; \\F_o &= 0,1612; \\F &= 0,1607; \\x_1 &= 0; \\y_1 &= 0,85; \\x_2 &= 0,23; \\y_2 &= 0,851; \\x_3 &= 0,52; \\y_3 &= 0,9938; \\x_4 &= 0,73; \\y_4 &= 1,2.\end{aligned}$$

Onde S_o é a área inicial da cavidade, S_{adm} é a área admissível, S é a área final da cavidade, F_o é a dissipação viscosa inicial, F é a dissipação viscosa final, e os (x_i, y_i) , $i = 1, 2, 3, 4$ são as coordenadas finais dos nós mestres livres. Os multiplicadores de Lagrange não nulos estão listados a seguir:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 0,3053; \\ \lambda_2 &= 8,7893\text{E-}003; \\ \lambda_3 &= 2,8756\text{E-}003; \\ \lambda_4 &= 5,7537\text{E-}003; \\ \lambda_5 &= 8,7753\text{E-}003; \\ \lambda_6 &= 8,7472\text{E-}004.\end{aligned}$$

Observe novamente que os gradientes das restrições ativas são linearmente independentes no ponto de ótimo, já que se tratam dos próprios eixos coordenados, i.e., é um ponto regular, além do que os multiplicadores de Lagrange para estas restrições são positivos e o ponto encontrado está dentro da região factível. Logo tem-se que todas as hipóteses da condição necessária de otimalidade (Teorema de Kuhn – Tucker) são satisfeitas e

como consequência tem-se que o critério de convergência foi atingido. Um comentário final para este exemplo, seria ressaltar que a malha (base de 30 X 30) usada em ambos os casos resultou de testes que foram feitos com outras malhas, onde não se observou diferenças significativas nos resultados, com relação a malhas mais refinadas. Uma questão que ainda resta é com relação ao erro de discretização da malha final, uma vez que não foram utilizados “estimadores de erro” neste trabalho. Relacionado a isto tomou-se o cuidado de se escolher “restrições de caixa” pequenas, de modo a não permitir uma grande distorção na malha resultante, e também optou-se em trabalhar com números de Reynolds não elevados.

3.5.2 Difusor Divergente

O objetivo deste exemplo é encontrar o formato da rampa do difusor divergente de modo a minimizar a dissipação viscosa. As análises de otimização de forma serão feitas para número de Reynolds igual a 10. As situações abordadas são as seguintes:

- 2.i) O caso em que ambas as extremidades da rampa do canal estão fixas.
- 2.ii) O caso em que apenas a extremidade esquerda encontra-se fixa.

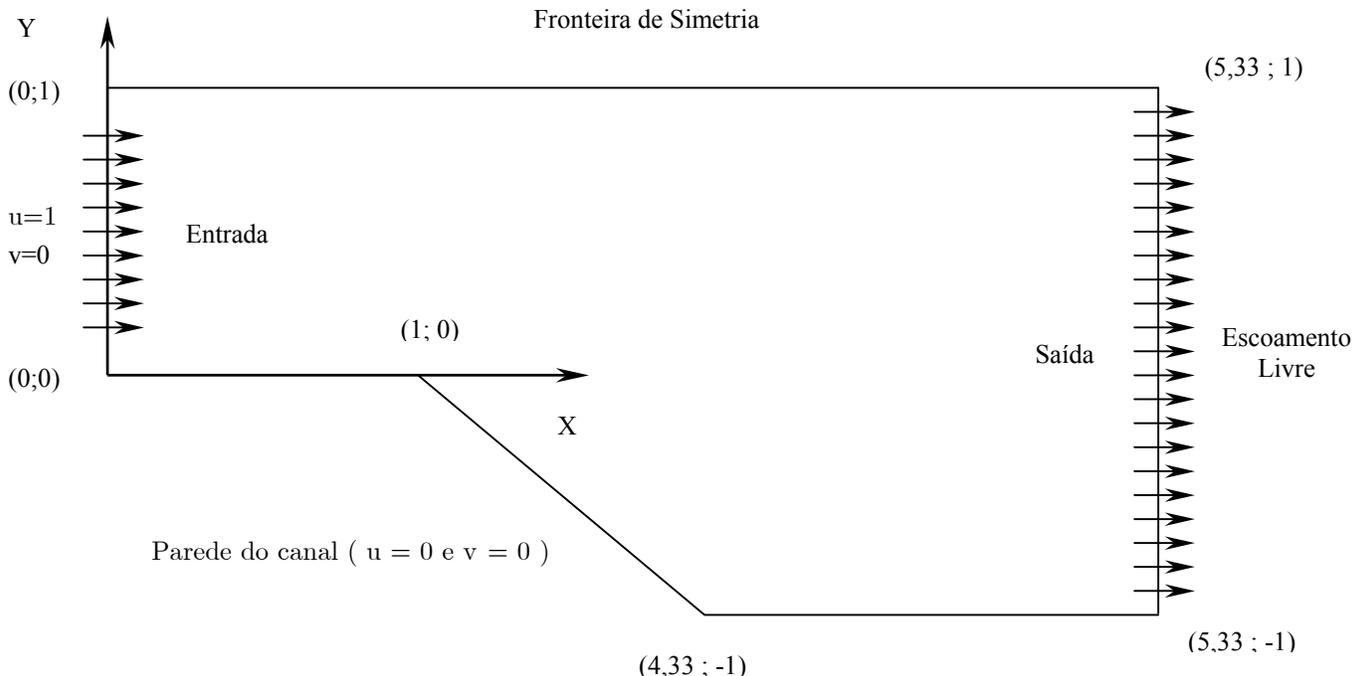


Figura 57: Otimização da rampa do difusor divergente

Serão mostrados agora como ficaram os resultados para o difusor no caso (2.i):

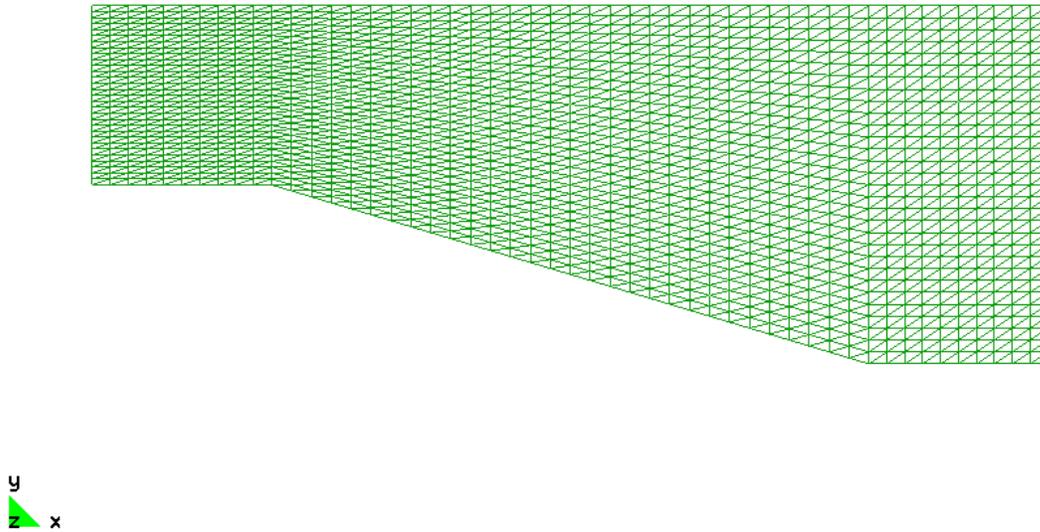


Figura 58: Malha da forma inicial do difusor (2.i)

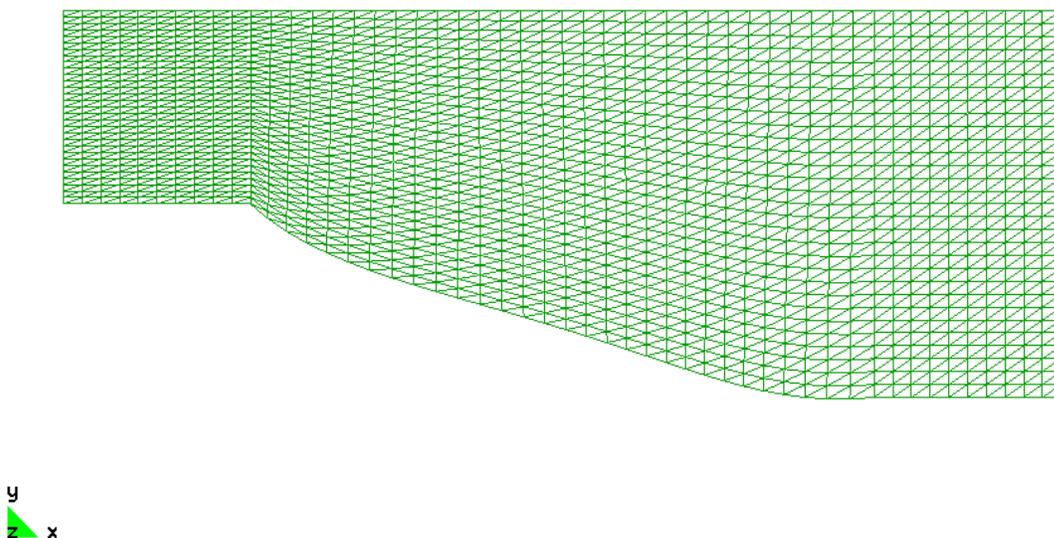


Figura 59: Malha da forma otimizada (2.i)

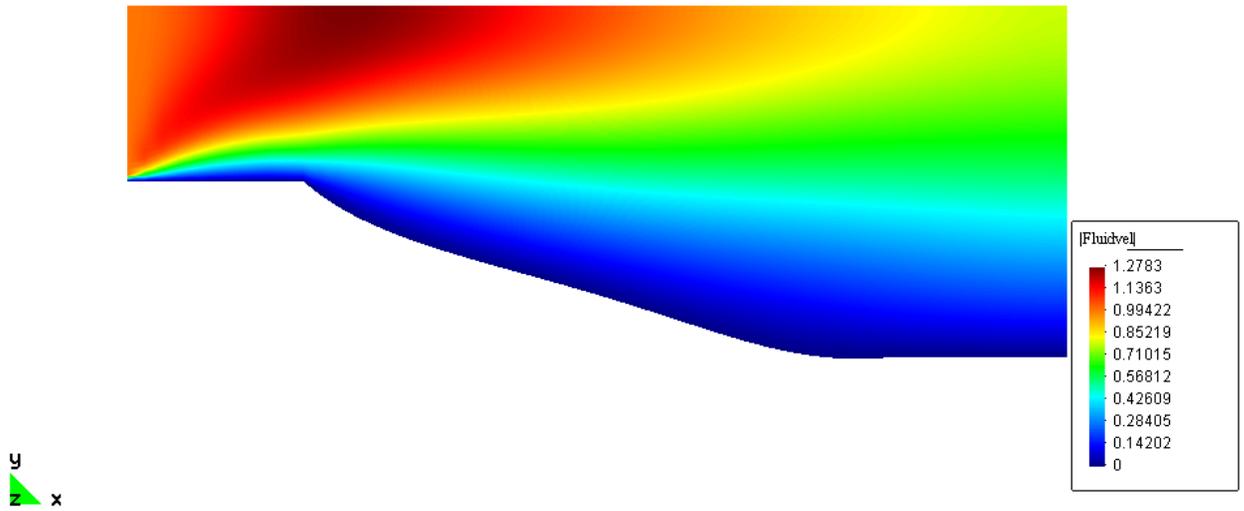


Figura 60: Norma euclidiana do vetor velocidade (2.i)

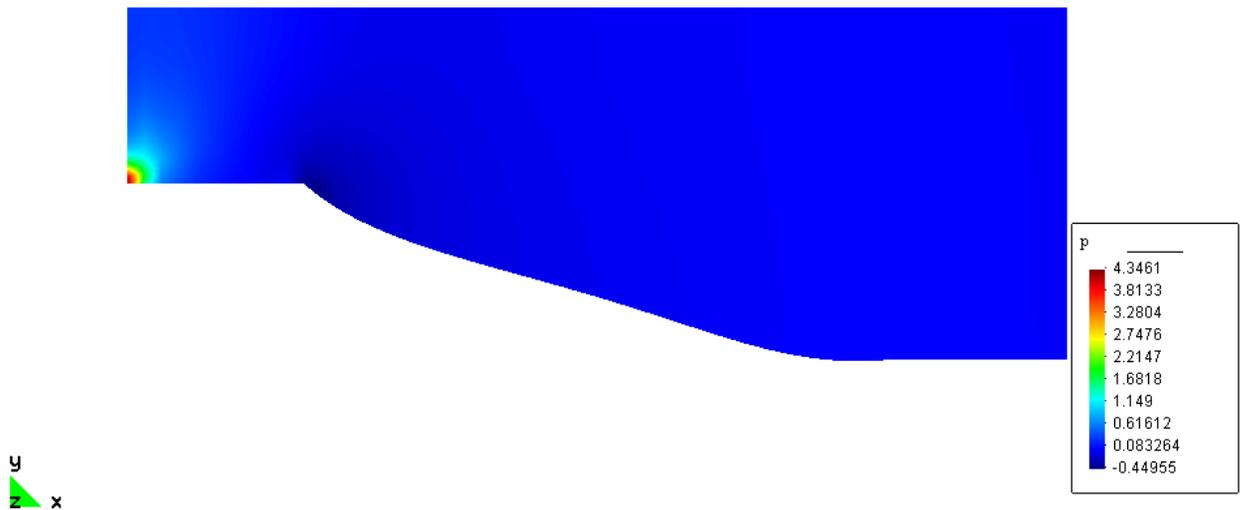


Figura 61: Campo de pressão (2.i)

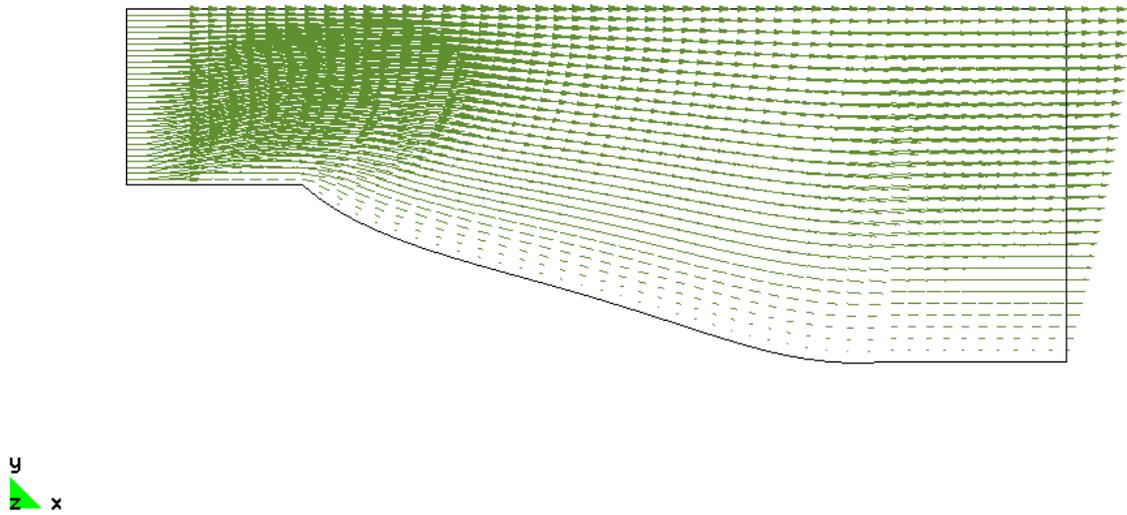


Figura 62: Campo de velocidade (2.i)

Neste exemplo utilizou-se uma malha base 50 X 30 de elementos quadrilaterais “quad – four”, que por sua vez deram origem a elementos triangulares lineares. Os macro-elementos utilizados são de dezessete nós, cuja configuração pode ser observada na figura abaixo.

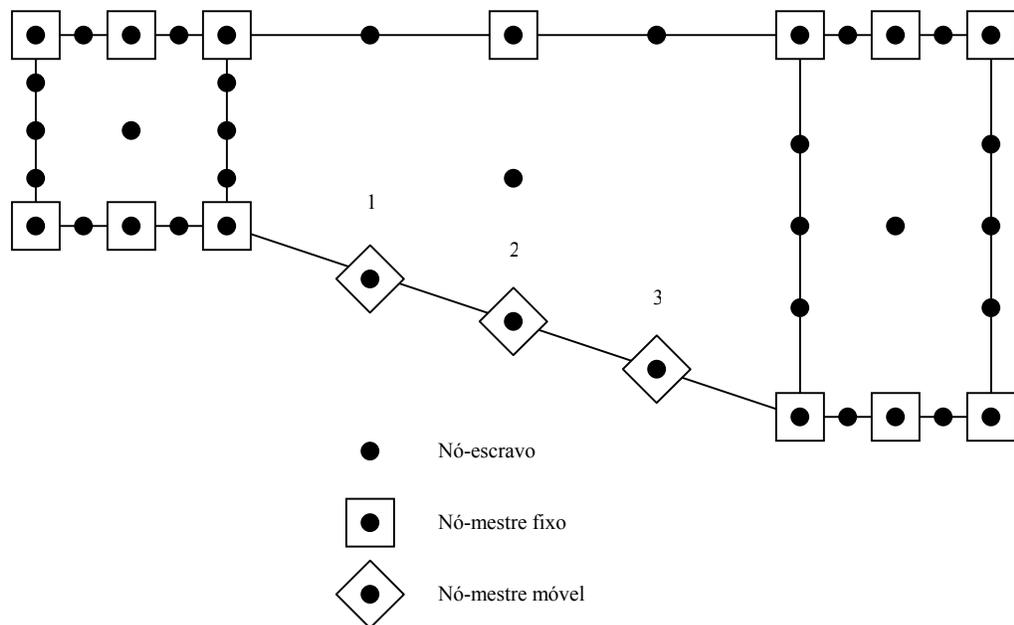


Figura 63: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (2.i)

As restrições adotadas foram do tipo caixa para os nós mestres livres, e restrição de área:

$$1,8133 \leq x_1 \leq 1,8533;$$

$$-0,4 \leq y_1 \leq -0,15;$$

$$2,6466 \leq x_2 \leq 2,6866;$$

$$-0,65 \leq y_2 \leq -0,4;$$

$$3,4799 \leq x_3 \leq 3,5199;$$

$$-0,9 \leq y_3 \leq -0,65;$$

$$S \leq 1,1 \times S_o = S_{adm}.$$

Os valores encontrados para o resultado final do formato otimizado da rampa do canal foram:

$$S_{adm} = 8,7999;$$

$$S = 8,4329;$$

$$F_o = 1,1928;$$

$$F = 1,1288;$$

$$x_1 = 1,8133;$$

$$y_1 = -0,4;$$

$$x_2 = 2,6866;$$

$$y_2 = -0,65;$$

$$x_3 = 3,48;$$

$$y_3 = -0,9.$$

Aqui, S_o é a área inicial do canal, S_{adm} é a área admissível, S é a área final do canal, F_o é a dissipação viscosa inicial, F é a dissipação viscosa final, e os (x_i, y_i) , $i=1,2,3$ são as coordenadas finais dos nós mestres livres. Os multiplicadores de Lagrange não nulos estão listados a seguir:

$$\lambda_1 = 7,293\text{E-}002;$$

$$\lambda_2 = 0,1484;$$

$$\lambda_3 = 9,5155\text{E-}003;$$

$$\lambda_4 = 2,4989\text{E-}002;$$

$$\lambda_5 = 1,7997E-002;$$

$$\lambda_6 = 4,0423E-002.$$

Perceba que os gradientes das restrições ativas são linearmente independentes no ponto de ótimo, já que se tratam dos próprios eixos coordenados, ou seja se trata de um ponto regular, além do que os multiplicadores de Lagrange para estas restrições são positivos e o ponto de ótimo se encontra dentro da região factível. Então tem-se que todas as hipóteses da condição necessária de otimalidade (Teorema de Kuhn – Tucker) são satisfeitas e conseqüentemente que o critério de convergência aqui adotado foi atingido.

Serão mostrados agora como ficaram os resultados para o difusor no caso (2.ii):

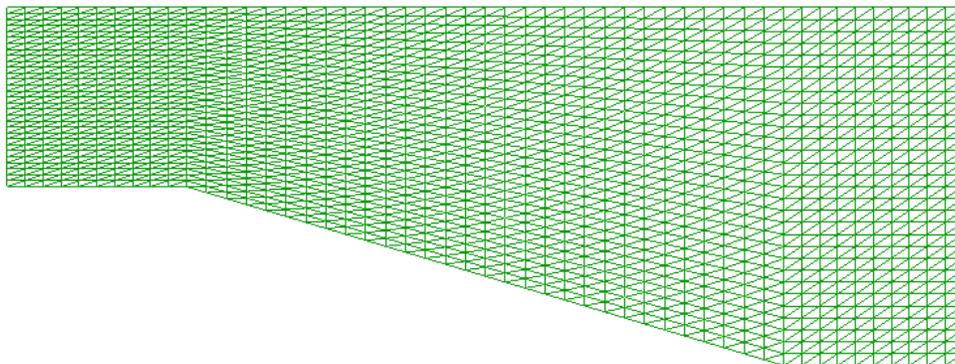


Figura 64: Malha da forma inicial do difusor (2.ii)

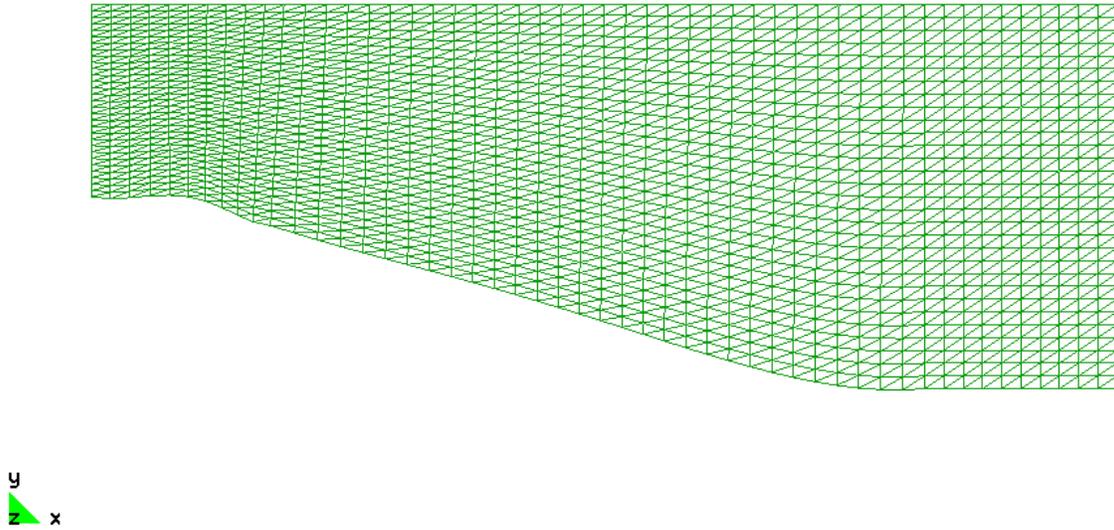


Figura 65: Malha da forma otimizada (2.ii)

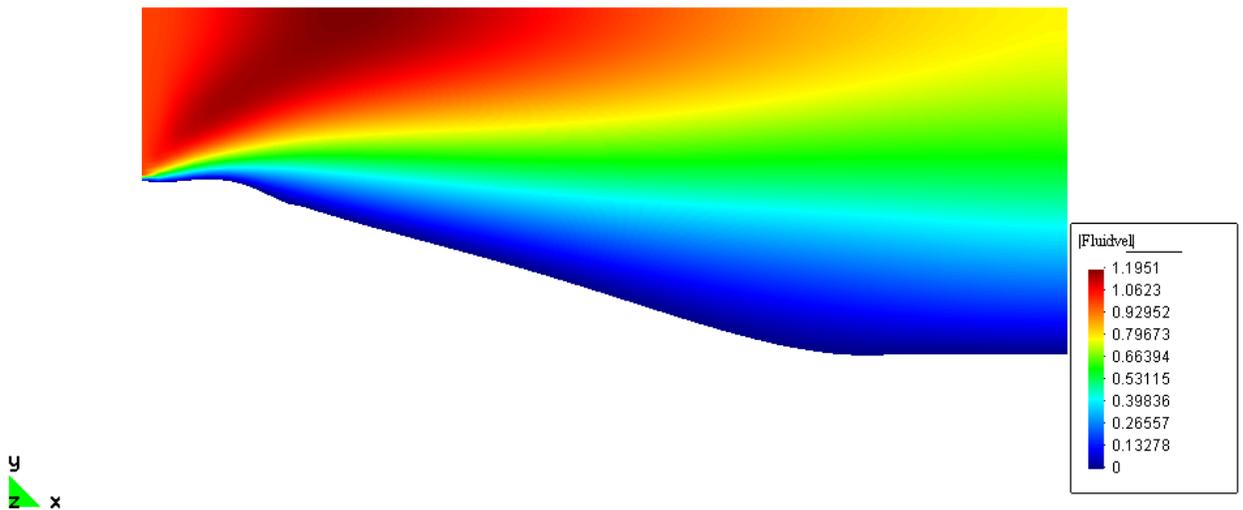


Figura 66: Norma euclidiana do vetor velocidade (2.ii)

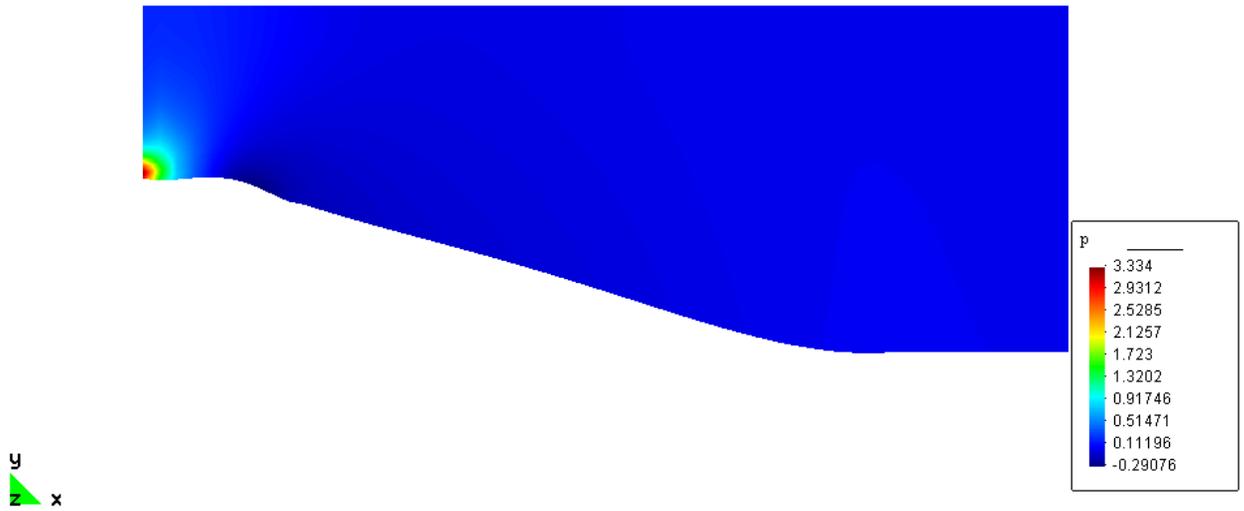


Figura 67: Campo de pressão (2.ii)

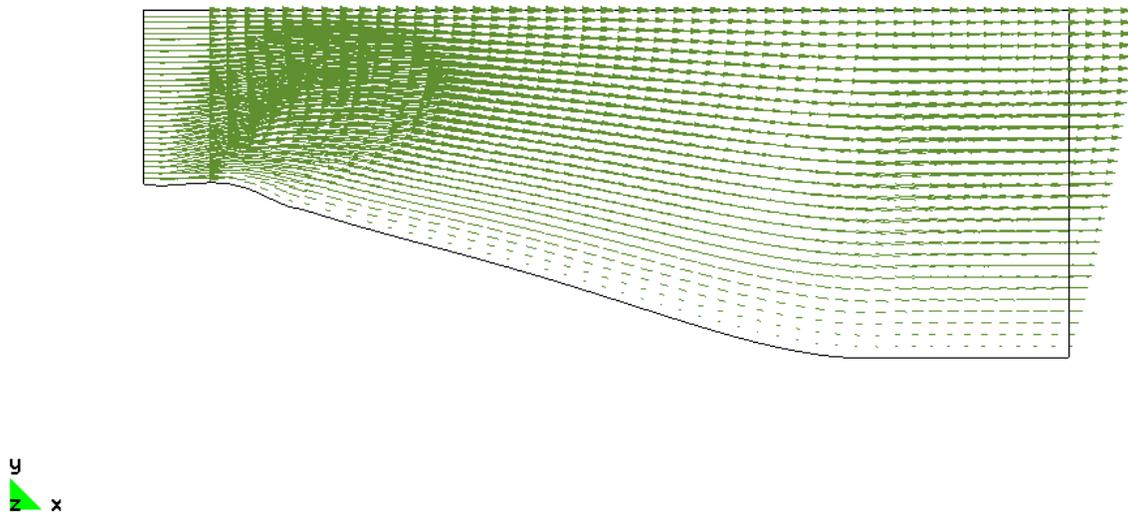


Figura 68: Campo de velocidade (2.ii)

Neste exemplo utilizou-se uma malha base 50 X 30 de elementos quadrilaterais “quad – four”, que por sua vez deram origem a elementos triangulares lineares. Os macro-elementos utilizados são de dezessete nós, cuja configuração pode ser observada na figura abaixo.

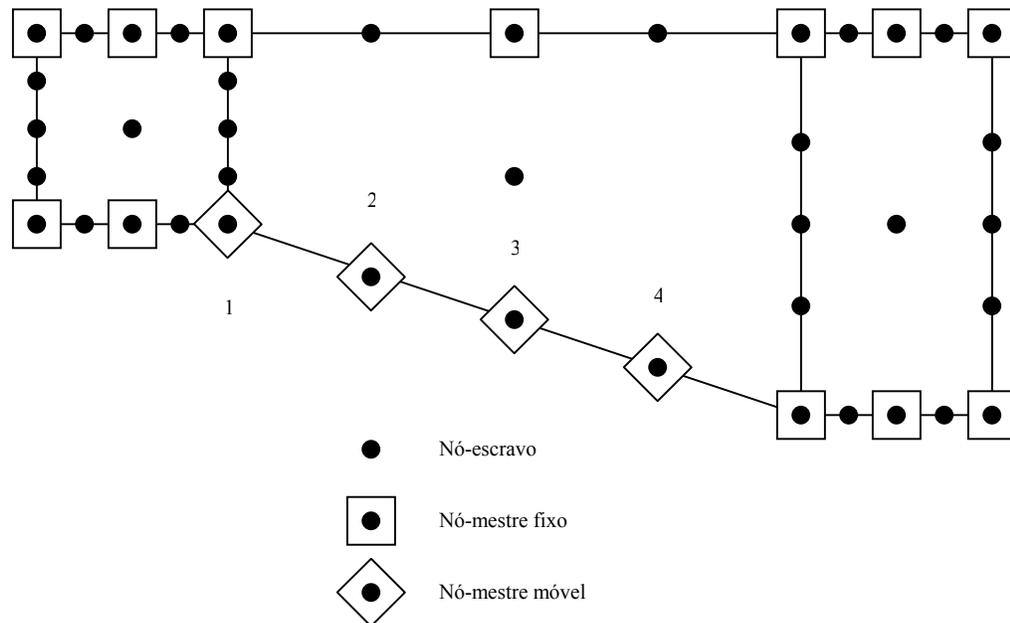


Figura 69: Macro-Elemento usado para abordagem do problema (2.ii)

As restrições aqui adotadas foram do tipo caixa para os nós mestres livres, e restrição de área, como pode-se observar a seguir:

$$\begin{aligned}
 &0,93 \leq x_1 \leq 1,07; \\
 &-0,15 \leq y_1 \leq 0,1; \\
 &1,8133 \leq x_2 \leq 1,8533; \\
 &-0,4 \leq y_2 \leq -0,15; \\
 &2,6466 \leq x_3 \leq 2,6866; \\
 &-0,65 \leq y_3 \leq -0,4; \\
 &3,4799 \leq x_4 \leq 3,5199; \\
 &-0,9 \leq y_4 \leq -0,65; \\
 &S \leq 1,1 \times S_o = S_{adm}.
 \end{aligned}$$

Os valores encontrados para o resultado final do formato otimizado da rampa do canal foram:

$$S_{adm} = 8,7999;$$

$$S = 8,5234;$$

$$F_o = 1,1928;$$

$$F = 1,009;$$

$$x_1 = 0,93;$$

$$y_1 = -0,15;$$

$$x_2 = 1,8133;$$

$$y_2 = -0,4;$$

$$x_3 = 2,6466;$$

$$y_3 = -0,6449;$$

$$x_4 = 3,48;$$

$$y_4 = -0,9.$$

Note que S_o é a área inicial do canal, S_{adm} é a área admissível, S é a área final do canal, F_o é a dissipação viscosa inicial, F é a dissipação viscosa final, e os (x_i, y_i) , $i = 1, 2, 3, 4$ são as coordenadas finais dos nós mestres livres. Os multiplicadores de Lagrange não nulos estão listados a seguir:

$$\lambda_1 = 0,1165;$$

$$\lambda_2 = 0,3436;$$

$$\lambda_3 = 6,6393\text{E-}002;$$

$$\lambda_4 = 0,2381;$$

$$\lambda_5 = 2,5324\text{E-}003;$$

$$\lambda_6 = 1,4196\text{E-}002;$$

$$\lambda_7 = 5,6894\text{E-}002.$$

Aqui mais uma vez os gradientes das restrições ativas são linearmente independentes no ponto de ótimo, uma vez que se tratam dos próprios eixos coordenados, tratando-se então de um ponto regular, além do que os multiplicadores de Lagrange para estas restrições são positivos e o ponto de ótimo se encontra dentro da região factível. Então

tem-se que todas as hipóteses da condição necessária de otimalidade (Teorema de Kuhn – Tucker) são satisfeitas e com isto garantindo que o critério de convergência aqui adotado foi atingido. Um fato que deve ser salientado, neste caso, diz respeito a um leve deslocamento para cima na fronteira da configuração otimizada do difusor, tal fato se deve à interpolação utilizada nos contornos dos macro-elementos que compõem o domínio.

Vale ressaltar ainda que é notória a discrepância das formas iniciais do difusor (casos 2.i e 2.ii) tratado aqui com o difusor presente seção 2.6.2. Este fato é justificado pela limitação da metodologia aqui utilizada para o mapeamento do domínio inicial (via macro-elementos). Devido a este fato, a aplicação abordada nesta seção é distinta da encontrada na seção 2.6.2.

Um comentário final para este exemplo seria observar que a malha (base de 50 X 30) usada em ambos os casos resultou de testes que foram feitos com outras malhas, onde não se observou diferenças significativas nos resultados, com relação a malhas mais refinadas. A questão a respeito do erro de discretização da malha final também é válida aqui. Relacionado a isto tomou-se novamente o cuidado de se escolher “restrições de caixa” pequenas, de modo a não permitir uma grande distorção na malha resultante, assim como preferiu-se trabalhar com escoamentos onde o número de Reynolds não fosse elevado ($Re=10$). Deve-se atentar ainda para o fato de que as formas finais do difusor, em ambos os casos, estão inteiramente de acordo com a intuição.

3.5.3 Comentários Adicionais

As argumentações feitas nos exemplos de aplicação, da metodologia de otimização, sugerem que alguns pontos ainda merecem ser melhor esclarecidos. Seriam eles:

- O erro de discretização da malha final do processo de otimização;
- A função objetivo (dissipação viscosa).

O erro com relação a discretização fornecido pela malha final é realmente uma questão séria. O tratamento desta questão, para que tal fator não afetasse de maneira significativa o valor da função objetivo, ficou ao encargo das escolhas que foram feitas tanto

para as restrições de caixa quanto para os números de Reynolds dos escoamentos apresentados. Tomou-se a precaução, em todos os exemplos apresentados, de se escolher “restrições de caixa” pequenas, de modo a não permitir uma grande distorção na malha resultante, assim como preferiu-se trabalhar com escoamentos onde o número de Reynolds não fosse elevado. Devido a essas medidas não é de se esperar que o valor da função objetivo seja tão severamente afetado por esse fator.

Um outro ponto igualmente importante diz respeito ao comportamento da função objetivo (dissipação viscosa) frente aos exemplos mostrados. Objetivando uma melhor visualização dos perfis finais em relação aos perfis iniciais para os casos 1.i e 1.ii (seção 3.5.1), seguem agora as figuras:

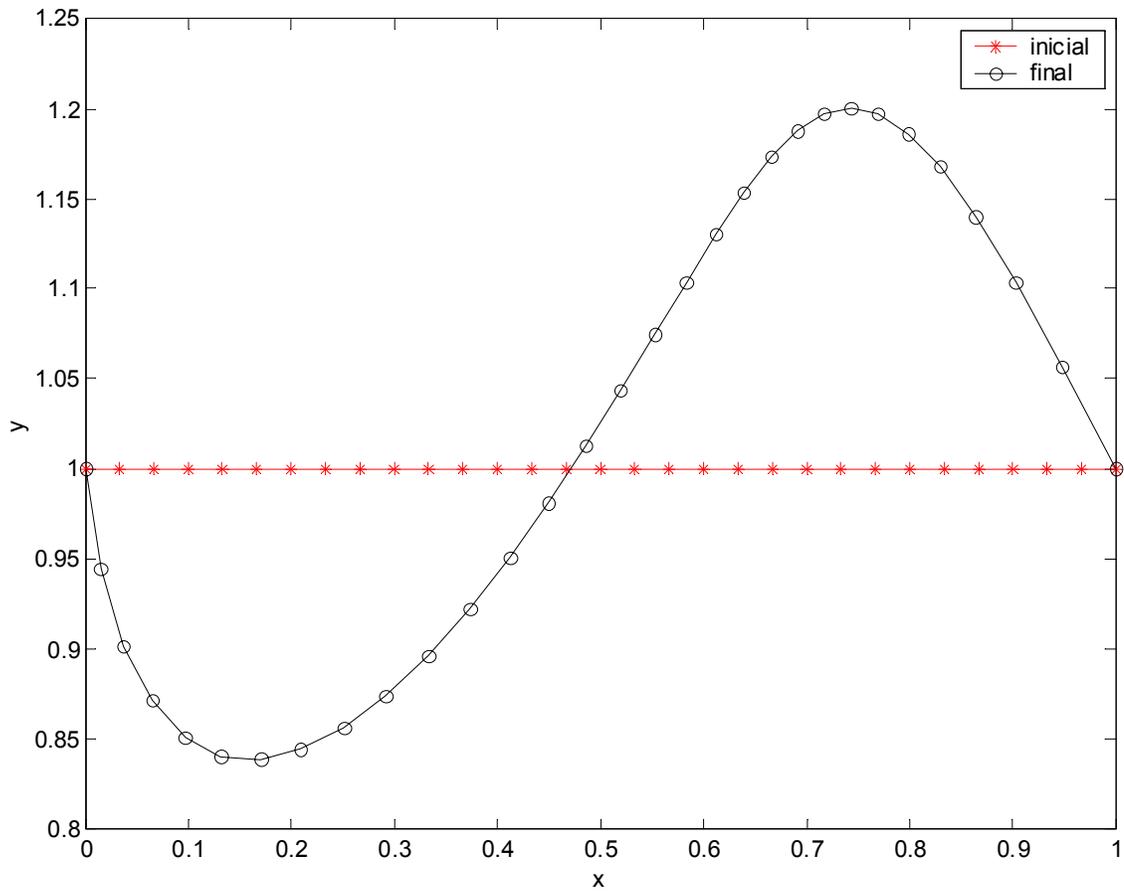


Figura 70: Posicionamentos inicial e final dos nós da tampa superior referente ao caso (1.i)

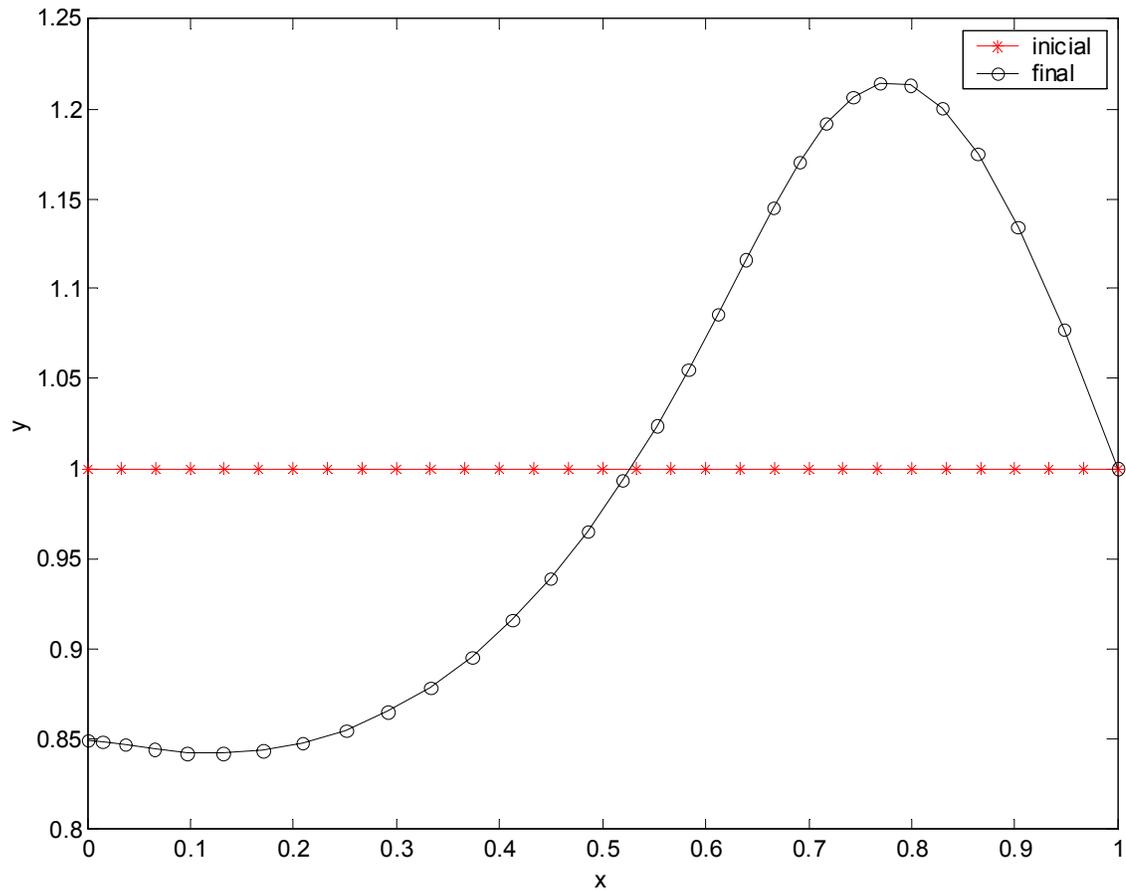


Figura 71: Posicionamentos inicial e final dos nós da tampa superior referente ao caso (1.ii)

Nestes casos nota-se em suas formas finais que o canto direito da tampa superior ficou abaulada para cima, reduzindo o gradiente da velocidade, naquela região, quando comparado com o obtido na configuração inicial. Outro fato interessante é a diminuição do campo de velocidades na região mais acima, ocasionado por um maior distanciamento desta região da tampa motriz (inferior). Já no canto esquerdo da tampa superior o que ocorre é a tentativa, do processo de otimização, de estagnar o escoamento nesta região, ou seja, fazendo com que o campo de velocidades seja baixo, e conseqüentemente contribuindo para a diminuição do valor da função objetivo. Tal efeito, evidenciado no caso 1.i, motivou a

segunda aplicação deste exemplo, isto é, o caso 1.ii, onde este comportamento é mais perceptível. Vale ainda frisar que este último efeito se deve muito provavelmente a restrição de área imposta em ambos os casos.

A visualização dos perfis finais em relação aos perfis iniciais para os casos 2.i e 2.ii (seção 3.5.2), são apresentadas nas figuras:

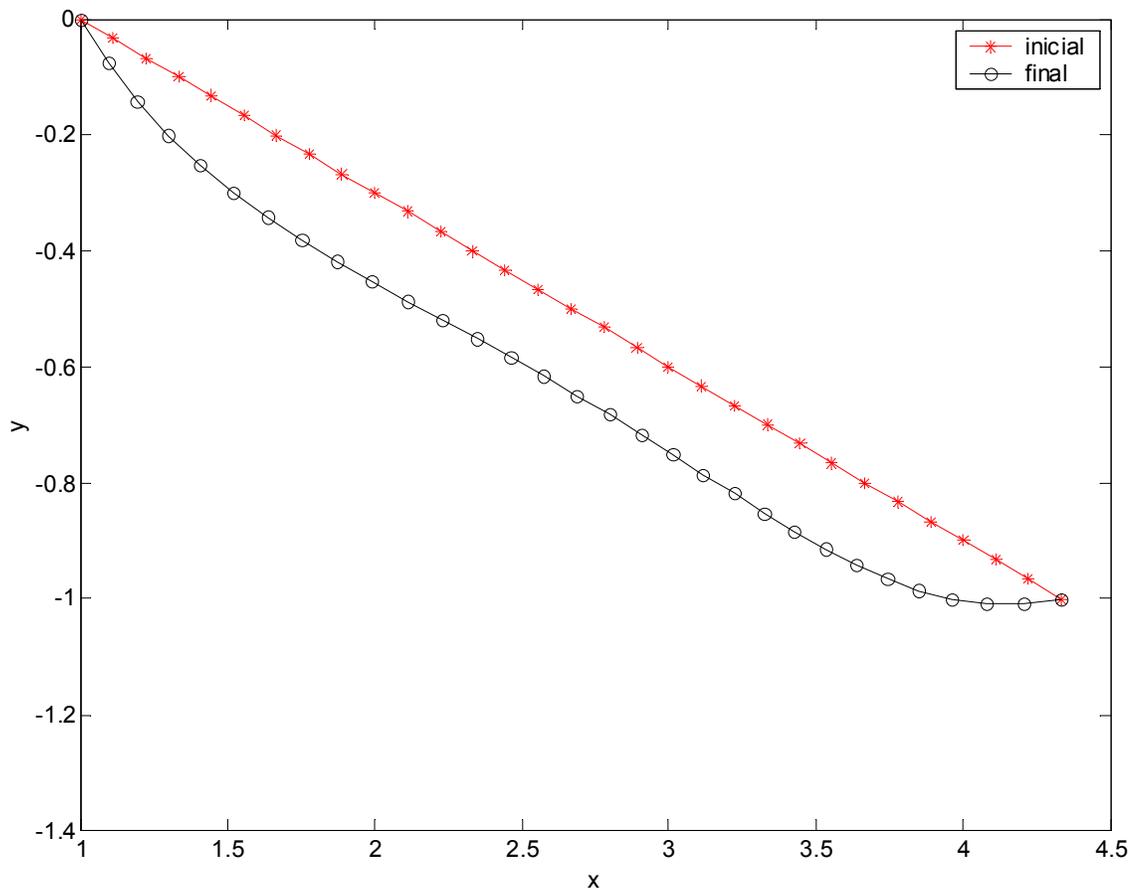


Figura 72: Posicionamentos inicial e final dos nós da rampa referente ao caso (2.i)

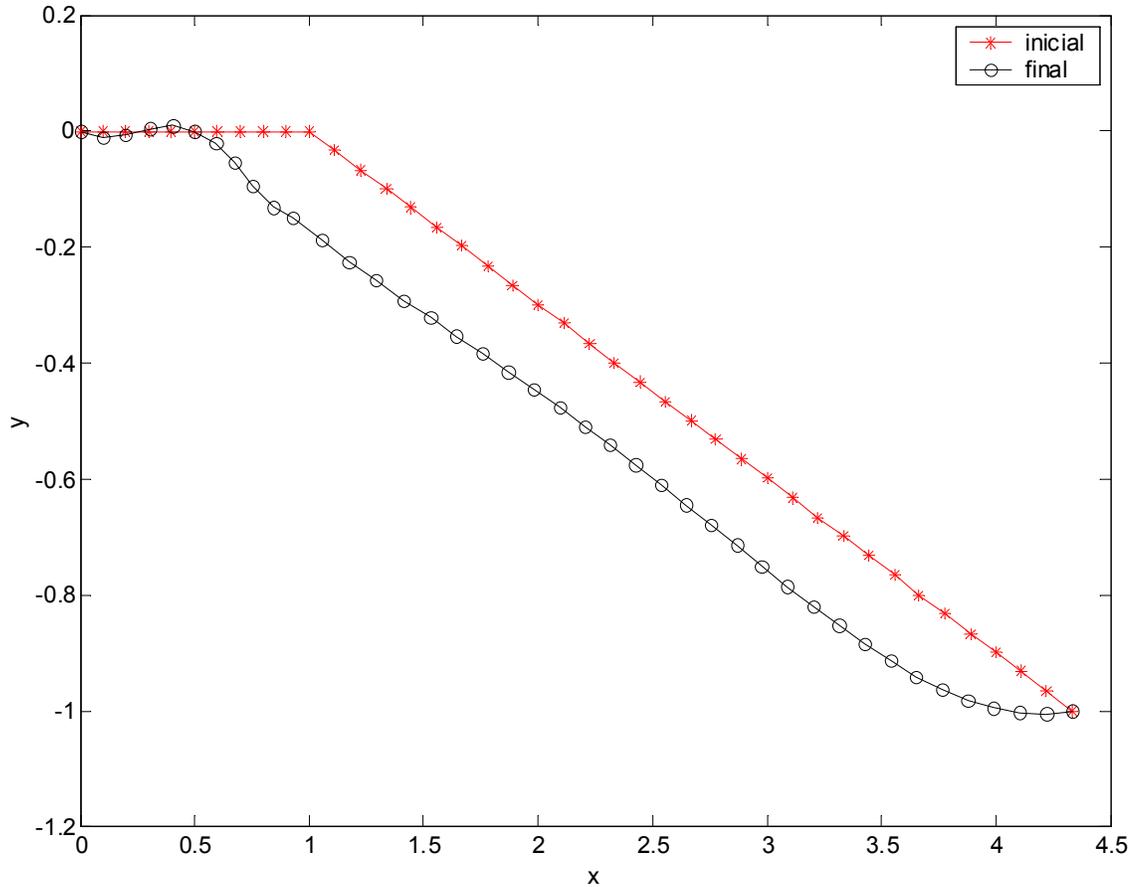


Figura 73: Posicionamentos inicial e final dos nós da parede referente ao caso (2.ii)

Nestes exemplos nota-se um “afundamento” da região da rampa de maneira a diminuir o campo de velocidade nesta região, e desta forma contribuir para a redução do valor da função objetivo em relação à configuração final. Um outro fator que também merece atenção diz respeito à suavização das quinas de maneira a reduzir os gradientes de velocidade. Este comportamento se torna bem evidente no caso 2.ii. Vale ainda ressaltar que a não suavização da quina superior da rampa, no caso 2.1, se deve ao tipo de polinômio utilizado para gerar a fronteira, que neste caso é um polinômio de quarta ordem.

Considerando-se os fatores acima citados, para os exemplos apresentados, conclui-se então que os resultados estão de acordo com o sentimento físico dos fenômenos abordados.

Capítulo 4

Conclusões e Sugestões

4.1 Conclusões

As metodologias utilizadas no trabalho aqui presente mostraram-se bastante eficientes no tratamento dos problemas de otimização de forma que aqui foram propostos. Pode-se observar ainda que as formas finais das superfícies são bastante suaves, e que as condições necessárias de Kuhn – Tucker (condições necessárias de otimalidade) são satisfeitas, e assim o critério global de convergência adotado foi atingido em todos os exemplos.

Vale ressaltar ainda que o mapeamento do domínio via blocos (macro-elementos) apesar de ter a vantagem de ter fácil manipulação e ser bastante versátil, tem se mostrado limitado, por não possibilitar o tratamento de superfícies de geometria complexa, como no caso da geometria apresentada na figura 26, no capítulo 2. Outra desvantagem que pode ser citada, diz respeito a suavidade do contorno gerado. Quando se trabalha com mais de um bloco, no processo de otimização, o que se percebeu foi o aparecimento de bicos na fronteira. Tais bicos encontram-se nos macro-nós pertencentes a fronteira que estão na interseção de dois blocos. Tal infortúnio pode ser contornado com a implementação de “splines” cúbicas, que possibilitam a representação da fronteira de forma mais suave.

Um outro fator relevante é o que diz respeito ao trabalho com malha estruturada, de onde se tem a vantagem de se trabalhar com o mesmo número de elementos, a mesma incidência e conectividade durante todo o processo de otimização. Contudo pode-se encontrar problemas com relação a degeneração dos elementos da malha, que conseqüentemente afetaria o mapeamento do domínio, e deste modo prejudicaria a

performance da metodologia aqui utilizada. Neste caso poderia-se usar uma malha não estruturada aliada a um esquema de refino adaptativo, que com certeza melhoraria os resultados. Isto se deve a uma captura, mais eficiente, das regiões de gradientes elevados.

4.2 Sugestões

A continuidade deste trabalho seguirá uma linha incremental, com a aplicação das ferramentas aqui desenvolvidas, para otimização de forma em escoamentos turbulentos, compressíveis, assim como em escoamentos de fluidos não newtonianos.

Outras idéias a serem exploradas em um trabalho futuro são:

- A implementação/incorporação de uma metodologia sem malha (“free mesh method”) para a abordagem do problema.,
 - A incorporação do software MSC/PATRAN, nas fases de pré e pós processamento do problema,
 - A implementação de “splines” cúbicas para modelar a fração da fronteira a ser manipulada,
 - A implementação do cálculo semi-analítico do gradiente da função objetivo.
-

Referências Bibliográficas

ACHDOU, Y. ; PIRONEAU, O. ; VALENTIN, F. – **A Stabilized Finite Element Method for Incompressible Navier-Stokes Equations Satisfying Wall Laws** – XX CILAMCE - Computational Methods in Engineering'99.

BABUŠKA, I. – **The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers** - Numer. Math. 20 (1973) 179-192.

BABUŠKA, I. ; NARASIMHAN, R. – **The Babuška-Brezzi Condition and the Patch Test: An Example** - Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 140 (1997) 183-199.

BAZARAA, M. S. ; SHERALI, H. D. ; SHETTY, C. M. – **Nolinear Programming: Theory and Algrithms** – John Wiley & Sons, New York, 1993.

BELEGUNDU, A. D. ; RAJAN, S. D. – **Shape Optimization Approach Based on Natural Design Variables and Shape Functions** – Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 66 (1988) 87-106.

BREZZI, F. – **On The Existence, Uniqueness and Aproximation of Saddle-Point Problems Arising from Lagrangian Multipliers** - RAIRO Ser. Rouge 8 (1974) 129-151.

BROOKS, A. N. ; HUGHES, T. J. R. – **Streamline Up Wind / Petrov Galerkin Methods for Advection Dominated Flows** – Third International Conference on Finite Element Method in Fluid Flows, Bnaff, Canadá, 1980.

BROOKS, A. N. ; HUGHES, T. J. R. – **Streamline Up Wind / Petrov Galerkin Formulations for Convective Dominated Flows with Particular Enphasis on the**

Incompressible Navier-Stokes Equations – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 32 (1982) 199-259.

BUGEDA, G. ; OÑATE, E. – **Optimum Aerodynamics Shape Design Including Mesh Adapativity** – International Jurnal for Numer. Meth. in Fluids 20 (1995) 915-934.

CECCHI, M. M. ; PICA, A. ; SECCO, E. – **A Projection Method for Shallow Water Equations** – International Jurnal for Numer. Meth. in Fluids 27 (1998) 81-95.

CODINA, R. – **A Discontinuity-Capturing Crosswind-Dissipation for the Finite Element Solution of the Convection Diffusion Equation** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 110 (1993) 325-342.

CODINA, R. – **On Stabilized Finite Element Methods for Linear Sistems of Convection-Diffusion-Reaction Equations** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 188 (2000) 61-82.

CODINA, R. ; BLASCO, J. – **A Finite Element Formulation for the Stokes Problem Allowing Equal Velocity-Pressure Interpolation** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 143 (1997) 373-391.

CODINA, R. ; BLASCO, J. – **Stabilized Finite Element Method for Transient Navier-Stokes Equations Based on a Pressure Gradiante Projection** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 182 (2000) 277-300.

CODINA, R. ; SOTO, O. – **Finite Element Solution of the Stokes Problem with Dominating Coriolis Force** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 142 (1997) 215-234.

CODINA, R. ; VÁZQUES, M. ; ZIECKIEWICZ, O. C. – **A General Algorithm for Compressible and Incompressible Flows. Part III: The Semi-Implicit Form** – International Jurnal for Numer. Meth. in Fluids 27 (1998) 13-32.

CODINA, R. ; VÁZQUES, M. ; ZIECKIEWICZ, O. C. ; MORGAN, K ; SATYA SAI, B. V. K. – **A General Algorithm for Compressible and Incompressible Flows. Part II: Tests on Explicit Form** – International Journal for Numer. Meth. in Fluids 20 (1995) 887-913.

CODINA, R. ZIECKIEWICZ, O. C. – **A General Algorithm for Compressible and Incompressible Flows. Part I: The Split, Characteristic-Based Scheme** – International Journal for Numer. Meth. in Fluids 20 (1995) 869-885.

DHATT, G. ; TOUZOT, G. – **The Finite Element Method Displayed** - John Wiley & Sons, New York, 1984.

FRANCA, L. P. ; FAHAT, C. ; LESOINNE, M. ; RUSSO, A. – **Unusual Stabilized Finite Element Methods and Residual Free Bubbles Form** – International Journal for Numer. Meth. in Fluids 27 (1998) 159-168.

FRANCA, L. P. ; FREY, S. L. – **Stabilized Finite Element Methods: II. The Incompressible Navier-Stokes Equations Interpolation** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 99 (1992) 209-233.

FRANCA, L. P. ; FREY, S. L. ; HUGHES, T. J. R. – **Stabilized Finite Element Methods: I. The Advective-Difusive Model** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 95 (1992) 253-276.

FRANCAVILLA, A. ; RAMAKRISHNAN, C. V. ; ZIENKIEWICZ, O. C. – **Optimization of Shape to Minimize Stress Concentration** – J. Strain Anal. 10 (1975).

GHIA, U. ; GHIA, K. N. ; SHIN, C. T. – **High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method** – Journal of Computational Physics 48 (1982) 387-411.

GOLUB, G. H. ; LOAN, C. F. V. – **Matrix Computations** – The Johns Hopkins University Press, London, 1996.

-
- GURTIN, M. E. – **An Introduction to Continuum Mechanics** – Academic Press, New York, 1981.
- HASLINGER, J. ; NEITTAANMÄKI, P. – **Finite Element Approximation for Optimal Shape Design: Theory and Applications** – John Wiley & Sons, New York, 1988.
- HAUG, E. J. ; CHOI, K. K. ; KOMKOV, V. – **Design Sensitivity Analysis of Structural Systems** – Academic Press, New York, 1984.
- HEINRICH, J. C. ; VAIONNET, C. A. – **The Penalty Method for the Navier-Stokes Equations** – Archives of Computational Methods in Engineering, vol 2, 2 (1995) 51-65.
- HUGHES, T. J. R. – **The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis** – Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1987.
- IDELSOHN, S. ; STORTI, M. ; NIGRO, N. – **Stability Analysis of Mixed Finite Element Formulations with Special Mention of Equal-Order Interpolations** – International Journal for Numer. Meth. in Fluids 20 (1995) 1003-1022.
- KJELLGREN, P. – **A Semi-Implicit Fractional Step Finite Element Method for Viscous Incompressible Flows** – Computational Mechanics 20 (1997) 541-550.
- KONDO, N. – **Third Order Up Wind Finite Element Solutions of High Reynolds Number Flows** – Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 122 (1994) 227-251.
- KOSMA, Z. – **Computing Laminar Incompressible Flows Over a Backward-Facing Step Using Newton Iterations** – Mechanics Research Communications, vol 27, Nº 2 (2000) 235-240.
-

LEWIS, R. W. ; RAVINDRAN, K. ; USMANI, A. S. – **Finite Element Solution of Incompressible Flows Using Segmented Approach** – Archives of Computational Methods in Engineering, vol 2, 4 (1995) 69-93.

LIU, C. H. ; LEUNG, D. Y. C. – **Development of Finite Element Solution for Unsteady Navier-Stokes Equations Using Projection Method and Fractional- θ -Scheme** – Comput. Methods Appl. Engrg 190 (2001) 4301-4317.

LUENBERGER, D. G. – **Linear and Nolinear Programming** – Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1969.

LUENBERGER, D. G. – **Optimization by Vector Space Methods** – John Wiley & Sons, New York, 1969.

LUND, E. – **Finite Element Based Design Sensitivity Analysis and Optimization** – Tese de Dotorado, Universidade de Aalborg, Dinamarca, 1994.

MAHMOUD, K. G. ; ENGL, H. W. ; HOLZLEITNER, L. – **Optimum Structural Design Using MSC/Nastran and Sequential Quadratic Programming** – Computers & Structures, vol 52, Nº 3 (1994) 437-447.

MALVERN, L. E. – **Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium** – Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1969.

PEREZ, J. O. – **Simulação Numérica de Descargas Térmicas em Corpos D'Água Rasos de Geometria e Profundidade Variáveis** – Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 1987.

PIRONNEAU, O. – **Optimal Shape Design for Elliptic Systems** – Springer-Verlag, New York, 1984.

-
- POURAZADY, M. ; FU, Z. – **An Integrated Approach to Structural Shape Optimization** – Computers & Structures, vol 60, Nº 2 (1996) 279-289.
- RAJAN, S. D. ; BELEGUNDU, A. D. – **Shape Optimal Design Using Fictitious Loads** – AIAA Journal, vol 27, Nº 1 (1989) 102-107.
- REDDY, J. N. – **An Introduction to the Finite Element Method** – McGraw-Hill, New York, 1992.
- SOKOLOWSKI, J. ; ZOLESIO, J. P. – **Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis** – Springer-Verlag, New York, 1992.
- TAVARES, L. V. ; CORREIA, F. N. – **Optimização Linear e Não Linear: Conceitos, Métodos e Algoritmos** – Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1986.
- TORTORELLI, D. A. – **Non-linear and Time-dependent Structural Systems: Sensitivity Analysis and Optimization** – Material de curso DCAMM, Universidade Técnica da Dinamarca, Lyngby, 1997.
- VIRGIL, A. E. A. ; NICIEZA, C. G. ; MERÉ, J. B. O. – **Numerical Solution of an Optimal Shape Design Problem with Elastic Solids** – Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 99 (1992) 147-170.
- WARSI, Z. U. A. – **Fluid Dynamics: Theoretical and Computational Approaches** – CRC Press Inc., Florida, 1996.
- YANG, R. J. – **Finite Element Computation of Structural Design Sensitivity Analysis** – Tese de Dotorado, Universidade de Iowa, Estados Unidos da América, 1984.
-

YATHEENDHAR, M. ; BELEGUNDU, A. D. –**Analytical Shape Sensitivity by Implicit Differentiation for General Velocity Fields** – Computers & Structures, vol 46, Nº 4 (1993) 617-623.

Apêndice A

Derivadas de Segunda Ordem

O objetivo deste apêndice é expor a forma com que foram tratados os termos de derivada de segunda ordem. Tem-se do mapeamento:

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\cdot)}{\partial x} &= \hat{j}_{11} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} + \hat{j}_{12} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \eta}; \\ \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} &= \hat{j}_{21} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} + \hat{j}_{22} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \eta},\end{aligned}$$

onde \hat{j}_{ij} , $i,j=1,2$, são os elementos da matriz inversa da matriz Jacobiana $[J]$. Temos então que:

$$\frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x^2} = \frac{\partial \hat{j}_{11}}{\partial x} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} + \hat{j}_{11} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} \right\} + \frac{\partial \hat{j}_{12}}{\partial x} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \eta} + \hat{j}_{12} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial \eta} \right\},$$

porém,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi} \right\} &= \hat{j}_{11} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial \xi^2} + \hat{j}_{12} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial \eta \partial \xi}; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial \eta} \right\} &= \hat{j}_{21} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial \xi \partial \eta} + \hat{j}_{22} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial \eta^2},\end{aligned}$$

logo:

$$\frac{\partial^2(.)}{\partial x^2} = \left\langle \frac{\hat{j}_{11}}{\partial x} \middle| \frac{\hat{j}_{12}}{\partial x} \right\rangle \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial(.)}{\partial \xi} \\ \frac{\partial(.)}{\partial \eta} \end{array} \right\} + \left\langle \hat{j}_{11}^2 \middle| \hat{j}_{12}^2 \middle| 2\hat{j}_{11}\hat{j}_{12} \right\rangle \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2(.)}{\partial \xi^2} \\ \frac{\partial^2(.)}{\partial \eta^2} \\ \frac{\partial^2(.)}{\partial \xi \partial \eta} \end{array} \right\}.$$

Como resultado, pode-se exprimir $\{\partial^2 x\}$ da seguinte forma:

$$\{\partial^2 x\} = [T_1]\{\partial \xi\} + [T_2]\{\partial^2 \xi\},$$

onde,

$$\begin{aligned} \{\partial^2 x\}^T &= \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right\}; \\ \{\partial \xi\}^T &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi}, \frac{\partial}{\partial \eta} \right\}; \\ \{\partial^2 \xi^T\} &= \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}, \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} \right\}, \end{aligned}$$

e,

$$[T_1] = \text{matriz}(3 \times 2);$$

$$[T_2] = \text{matriz}(3 \times 3).$$

A matriz $[T_2]$, para o caso particular de problemas bi-dimensionais, é dada por:

$$[T_2] = \begin{bmatrix} \hat{j}_{11}^2 & \hat{j}_{12}^2 & 2\hat{j}_{11}\hat{j}_{12} \\ \hat{j}_{21}^2 & \hat{j}_{22}^2 & 2\hat{j}_{21}\hat{j}_{22} \\ \hat{j}_{11}\hat{j}_{21} & \hat{j}_{12}\hat{j}_{22} & \hat{j}_{11}\hat{j}_{22} + \hat{j}_{12}\hat{j}_{21} \end{bmatrix},$$

onde $[\hat{j}] = [J]^{-1}$, i.e.,

$$\begin{aligned} \hat{j}_{11} &= \frac{J_{22}}{\det(J)}; & \hat{j}_{21} &= -\frac{J_{21}}{\det(J)}; \\ \hat{j}_{12} &= -\frac{J_{12}}{\det(J)}; & \hat{j}_{22} &= \frac{J_{11}}{\det(J)}. \end{aligned}$$

Por analogia, pode-se calcular a matriz $[T_1]$ como:

$$\{\partial^2 \xi\} = [c_1] \{\partial x\} + [c_2] \{\partial^2 x\}.$$

Porém,

$$\{\partial x\} = [\hat{j}] \{\partial \xi\},$$

logo:

$$\{\partial^2 \xi\} = [c_1] [\hat{j}] \{\partial \xi\} + [c_2] \{\partial^2 x\},$$

e ainda,

$$\begin{aligned} \{\partial^2 x\} &= [T_1] \{\partial \xi\} + [T_2] ([c_1] [\hat{j}] \{\partial \xi\} + [c_2] \{\partial^2 x\}) \\ \therefore \{\partial^2 x\} &= ([T_1] + [T_2] [c_1] [\hat{j}]) \{\partial \xi\} + [T_2] [c_2] \{\partial^2 x\}. \end{aligned}$$

Dai tem-se:

$$\begin{aligned} [T_2] [c_2] &= I \quad \therefore [T_2] = [c_2]^{-1}; \\ [T_1] + [T_2] [c_1] [\hat{j}] &= [0] \quad \therefore [T_1] = -[T_2] [c_1] [\hat{j}]. \end{aligned}$$

Determinando então a matriz $[c_1]$:

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial\xi} = J_{11} \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} + J_{12} \frac{\partial(\cdot)}{\partial y}$$

$$\therefore \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial\xi^2} = \frac{\partial J_{11}}{\partial\xi} \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} + J_{11} \frac{\partial}{\partial\xi} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} \right\} + \frac{\partial J_{12}}{\partial\xi} \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} + J_{12} \frac{\partial}{\partial\xi} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} \right\},$$

mas,

$$\frac{\partial}{\partial\xi} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} \right\} = J_{11} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x^2} + J_{12} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial y \partial x};$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi} \left\{ \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} \right\} = J_{11} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x \partial y} + J_{12} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial y^2},$$

conseqüentemente:

$$\frac{\partial^2(\cdot)}{\partial\xi^2} = \left\langle \frac{\partial J_{11}}{\partial\xi} \middle| \frac{\partial J_{12}}{\partial\xi} \right\rangle \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} \\ \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} \end{array} \right\} + \left\langle J_{11}^2 \middle| J_{12}^2 \middle| 2J_{11}J_{12} \right\rangle \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x \partial y} \end{array} \right\}.$$

Em particular para o caso bi-dimensional, tem-se:

$$[c_1] = \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial J_{11}}{\partial\xi} & \frac{\partial J_{12}}{\partial\xi} \\ \frac{\partial J_{21}}{\partial\eta} & \frac{\partial J_{22}}{\partial\eta} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial J_{11}}{\partial\eta} + \frac{\partial J_{21}}{\partial\xi} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial J_{12}}{\partial\eta} + \frac{\partial J_{22}}{\partial\xi} \right) \end{array} \right].$$

Donde conclui-se a expressão de $\{\partial^2 x\}$.

Apêndice B

O Teorema de Kuhn-Tucker

Definição: Seja S um conjunto não vazio em \mathbb{R}^n , e tome $\bar{x}^* \in \bar{S}$ (fecho de S). O cone das tangentes de S em \bar{x}^* , denotado por T , é o conjunto de todas as direções \vec{d} tais que $\vec{d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k (\bar{x}_k - \bar{x}^*)$, onde $\lambda_k \geq 0$, $\bar{x}_k \in S$ para cada k , e $\bar{x}_k \rightarrow \bar{x}^*$.

Teorema 1: Seja S um conjunto não vazio em \mathbb{R}^n , e tome $\bar{x}^* \in S$. Suponha ainda que $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em \bar{x}^* . Se \bar{x}^* localmente resolve o problema de minimizar $f(\bar{x})$ sujeito a $\bar{x} \in S$, então $F_o \cap T = \emptyset$, onde $F_o = \{\vec{d} : \vec{\nabla} f(\bar{x}^*)^T \vec{d} < 0\}$, e T é o cone das tangentes de S em \bar{x}^* .

Dem.: Tome $\vec{d} \in T$, então $\vec{d} = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k (\bar{x}_k - \bar{x}^*)$, onde $\lambda_k \geq 0$, $\bar{x}_k \in S$ para cada k , e $\bar{x}_k \rightarrow \bar{x}^*$.

Tem-se agora que:

$$f(\bar{x}_k) - f(\bar{x}^*) = \vec{\nabla} f(\bar{x}^*)^T (\bar{x}_k - \bar{x}^*) + \|\bar{x}_k - \bar{x}^*\| r(\bar{x}^*; \bar{x}_k - \bar{x}^*),$$

onde $r(\bar{x}^*; \bar{x}_k - \bar{x}^*) \rightarrow 0$, quando $\bar{x}_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \bar{x}^*$. Observando a otimalidade local de \bar{x}^* , para k suficientemente grande, tem-se $f(\bar{x}_k) \geq f(\bar{x}^*)$, logo:

$$\vec{\nabla} f(\bar{x}^*)^T (\bar{x}_k - \bar{x}^*) + \|\bar{x}_k - \bar{x}^*\| r(\bar{x}^*; \bar{x}_k - \bar{x}^*) \geq 0.$$

Multiplicando tal resultado por $\lambda_k > 0$ e tomando o limite quando $k \rightarrow \infty$, a inequação acima implica que $\vec{\nabla} f(\bar{x}^*)^T \vec{d} \geq 0$. Mostrou-se então que $\vec{d} \in T$ implica em $\vec{\nabla} f(\bar{x}^*)^T \vec{d} \geq 0$, logo dada a definição de F_o , tem-se $F_o \cap T = \emptyset$. ■

Teorema 2: Seja S um conjunto não vazio fechado e convexo em \mathbb{R}^n , e $\bar{y} \notin S$. Então existe um único ponto $\bar{x}^* \in S$ cuja a distância a \bar{y} é mínima. Além disto \bar{x}^* é o ponto mínimo se e somente se $(\bar{x} - \bar{x}^*)^T (\bar{x}^* - \bar{y}) \geq 0, \forall \bar{x} \in S$.

Dem.: Divide-se, didaticamente, esta demonstração em quatro tópicos:

i) Existência: Toma-se inicialmente $\inf \{\|\bar{y} - \bar{x}\| : \bar{x} \in S\} = \gamma > 0$. Existe uma seqüência $\{\bar{x}_k\}$ em S tal que $\|\bar{y} - \bar{x}_k\| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \gamma$. Será demonstrado que $\{\bar{x}_k\}$ tem limite $\bar{x}^* \in S$, mostrando que $\{\bar{x}_k\}$ é uma seqüência de Cauchy. Como conseqüência da regra do paralelogramo tem-se:

$$\begin{aligned} \|\bar{x}_k - \bar{x}_m\|^2 &= 2\|\bar{x}_k - \bar{y}\|^2 + 2\|\bar{x}_m - \bar{y}\|^2 - \|\bar{x}_k + \bar{x}_m - 2\bar{y}\|^2 \\ \therefore \|\bar{x}_k - \bar{x}_m\|^2 &= 2\|\bar{x}_k - \bar{y}\|^2 + 2\|\bar{x}_m - \bar{y}\|^2 - 4\left\|\frac{\bar{x}_k + \bar{x}_m}{2} - \bar{y}\right\|^2. \end{aligned}$$

Note que $\frac{\bar{x}_k + \bar{x}_m}{2} \in S$, e por definição $\left\|\frac{\bar{x}_k + \bar{x}_m}{2} - \bar{y}\right\|^2 \geq \gamma^2$, então:

$$\|\bar{x}_k - \bar{x}_m\|^2 \leq 2\|\bar{x}_k - \bar{y}\|^2 + 2\|\bar{x}_m - \bar{y}\|^2 - 4\gamma^2.$$

Escolhendo k e m suficientemente grandes, de tal modo que $\|\bar{x}_k - \bar{y}\|$ e $\|\bar{x}_m - \bar{y}\|$ seja suficientemente próximos de γ , e então fazendo com que $\|\bar{x}_k - \bar{x}_m\|^2$ possa ser suficientemente próximos de zero. Então $\{\bar{x}_k\}$ é uma seqüência de Cauchy e conseqüentemente tem um limite \bar{x}^* , e como S é fechado então $\bar{x}^* \in S$.

ii) Unicidade: Suponha que exista um $\bar{x}^{*'} \in S$ tal que $\|\bar{y} - \bar{x}^{*'}\| = \|\bar{y} - \bar{x}^*\| = \gamma$. Pela convexidade $\frac{\bar{x}^{*'} + \bar{x}^*}{2} \in S$, aplicando a desigualdade de Schwartz, tem-se:

$$\left\|\bar{y} - \frac{\bar{x}^{*'} + \bar{x}^*}{2}\right\| \leq \frac{1}{2}\|\bar{y} - \bar{x}^*\| + \frac{1}{2}\|\bar{y} - \bar{x}^{*'}\| = \gamma.$$

Se a desigualdade for estrita viola-se a definição de γ . Então a igualdade é assegurada e tem-se ainda que:

$$\left\| \bar{y} - \frac{\bar{x}^* + \bar{x}^*'}{2} \right\|^2 = \left\| \frac{(\bar{y} - \bar{x}^*) + (\bar{y} - \bar{x}^*')}{2} \right\|^2 = \left\| \frac{\bar{y} - \bar{x}^*}{2} \right\|^2 + \left\| \frac{\bar{y} - \bar{x}^*'}{2} \right\|^2 + \frac{(\bar{y} - \bar{x}^*)^T (\bar{y} - \bar{x}^*')}{2}$$

$$\therefore (\bar{y} - \bar{x}^*)^T (\bar{y} - \bar{x}^*') = \gamma^2 = (\bar{y} - \bar{x}^*)^T (\bar{y} - \bar{x}^*) = (\bar{y} - \bar{x}^*')^T (\bar{y} - \bar{x}^*').$$

Então pode-se escrever:

$$\begin{cases} (\bar{y} - \bar{x}^*)^T [(\bar{y} - \bar{x}^*') - (\bar{y} - \bar{x}^*)] = 0 \\ (\bar{y} - \bar{x}^*')^T [(\bar{y} - \bar{x}^*') - (\bar{y} - \bar{x}^*)] = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} [(\bar{y} - \bar{x}^*') - (\bar{y} - \bar{x}^*)]^T [(\bar{y} - \bar{x}^*') - (\bar{y} - \bar{x}^*)] = 0 \\ \therefore \left\| (\bar{y} - \bar{x}^*') - (\bar{y} - \bar{x}^*) \right\|^2 = 0. \end{cases}$$

Donde $\left\| \bar{x}^* - \bar{x}^* \right\|^2 = 0 \Rightarrow \bar{x}^* - \bar{x}^* = \bar{0} \Rightarrow \bar{x}^* = \bar{x}^*$.

iii) *Necessidade:* Seja $\bar{x} \in S$, então:

$$\left\| \bar{y} - \bar{x} \right\|^2 = \left\| \bar{y} - \bar{x}^* + \bar{x}^* - \bar{x} \right\|^2 = \left\| \bar{y} - \bar{x}^* \right\|^2 + \left\| \bar{x}^* - \bar{x} \right\|^2 + 2(\bar{y} - \bar{x}^*)^T (\bar{x}^* - \bar{x}),$$

como $\left\| \bar{x}^* - \bar{x} \right\|^2 \geq 0$ e $(\bar{x}^* - \bar{x})^T (\bar{y} - \bar{x}^*) \geq 0$, por hipótese então $\left\| \bar{y} - \bar{x} \right\|^2 \geq \left\| \bar{y} - \bar{x}^* \right\|^2, \forall \bar{x} \in S$ e \bar{x}^* é o ponto de mínimo.

iv) *Suficiência:* Tomando $\bar{x} \in S$ e notando que $\bar{x}^* + \lambda(\bar{x} - \bar{x}^*) \in S$ para $\lambda > 0$ e suficientemente pequeno, então:

$$\left\| \bar{y} - \bar{x}^* - \lambda(\bar{x} - \bar{x}^*) \right\|^2 \geq \left\| \bar{y} - \bar{x}^* \right\|^2,$$

também,

$$\|\bar{y} - \bar{x}^* - \lambda(\bar{x} - \bar{x}^*)\|^2 = \|\bar{y} - \bar{x}^*\|^2 + \lambda^2 \|\bar{x} - \bar{x}^*\|^2 + 2\lambda(\bar{x} - \bar{x}^*)^T(\bar{y} - \bar{x}^*).$$

Então $\lambda^2 \|\bar{x} - \bar{x}^*\|^2 + 2\lambda(\bar{x} - \bar{x}^*)^T(\bar{y} - \bar{x}^*) \geq 0$, para todo $\lambda > 0$ e suficientemente pequeno. Dividindo-se por λ e tomando $\lambda \rightarrow 0$, o resultado segue. ■

Teorema 3: Seja S um conjunto não vazio fechado e convexo em \mathbb{R}^n , e $\bar{y} \notin S$. Então existe um vetor \bar{p} e um escalar α , tais que $\bar{p}^T \bar{y} > \alpha$ e $\bar{p}^T \bar{x} \leq \alpha$ para todo $\bar{x} \in S$.

Dem.: Pelo teorema anterior tem-se que existe um único mínimo $\bar{x}^* \in S$ tal que $(\bar{x} - \bar{x}^*)^T(\bar{y} - \bar{x}^*) \leq 0$ para cada $\bar{x} \in S$. Note que:

$$\|\bar{y} - \bar{x}^*\|^2 = (\bar{y} - \bar{x}^*)^T(\bar{y} - \bar{x}^*) = \bar{y}^T(\bar{y} - \bar{x}^*) + \bar{x}^{*T}(\bar{y} - \bar{x}^*),$$

mas,

$$-\bar{x}^{*T}(\bar{y} - \bar{x}^*) \leq -\bar{x}^T(\bar{y} - \bar{x}^*), \forall \bar{x} \in S.$$

Então:

$$\bar{p}^T(\bar{y} - \bar{x}) \geq \|\bar{y} - \bar{x}^*\|^2, \forall \bar{x} \in S,$$

onde $\bar{p} = \bar{y} - \bar{x}^* \neq \vec{0}$. Isto mostra que $\bar{p}^T \bar{y} \geq \bar{p}^T \bar{x} + \|\bar{y} - \bar{x}^*\|^2$ para cada $\bar{x} \in S$. Então para completar a demonstração basta que se tome $\alpha = \sup\{\bar{p}^T \bar{x} : \bar{x} \in S\}$. ■

Teorema 4 (Teorema de Farkas): Seja A uma matriz $m \times n$ e c um vetor de dimensão n . Então exatamente um dos dois sistemas que se seguem tem uma solução:

Sistema 1: $A\bar{x} \leq \vec{0}$ e $c^T \bar{x} > 0$, para algum $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$;

Sistema 2: $A^T \bar{y} = c$ e $\bar{y} \geq \vec{0}$, para algum $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$.

Dem.: Suponha que o sistema 2 tenha uma solução, então existe um $\bar{y} > \bar{0}$ tal que $A\bar{y} = c$. Tome \bar{x} tal que $A\bar{x} \leq \bar{0}$, então $c^T \bar{x} = \bar{y}^T A\bar{x} \leq 0$, o que implica que o sistema 1 não tem solução. Suponha agora que o sistema 2 não tenha solução, seja então o conjunto $S = \{\bar{x} : \bar{x} = A^T \bar{y}, \bar{y} \geq \bar{0}\}$. Note que S é fechado e convexo e que $c \notin S$. Então existe um vetor $\bar{p} \in \mathbb{R}^n$ e um escalar α , tais que $\bar{p}^T c > \alpha$ e $\bar{p}^T \bar{x} \leq \alpha$ para todo $\bar{x} \in S$. Como $\bar{0} \in S$, então $0 \leq \alpha$ e $\bar{p}^T c > 0$. Também $\alpha \geq \bar{p}^T A^T \bar{y} = \bar{y}^T A\bar{p}$ para todo $\bar{y} \geq \bar{0}$. Como $\bar{y} \geq \bar{0}$, pode-se fazê-lo tão grande quanto se queira, então a última desigualdade implica que $A\bar{p} \leq \bar{0}$. Logo construiu-se um vetor $\bar{p} \in \mathbb{R}^n$ tal que $A\bar{p} \leq \bar{0}$ e $\bar{p}^T c > 0$. Então sistema 1 tem uma solução. ■

Teorema de Kuhn-Tucker: Seja \bar{x}^* um ponto regular de X o qual é solução de

$$\begin{aligned} & \min_{t.q.} f(\bar{x}) \\ & \bar{x} \in S, \end{aligned}$$

onde $S = \{\bar{x} \in X : g_j(\bar{x}) \leq 0, \text{ onde } j = 1, \dots, m\}$. Seja $L(\cdot)$ a função Lagrangeana definida por:

$$L(\bar{x}, \bar{u}) = f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^m u_j g_j(\bar{x}).$$

Então existe $\bar{u}^* \in \mathbb{R}^m$ tal que:

$$\bar{\nabla} L(\bar{x}^*, \bar{u}^*) = \bar{\nabla} f(\bar{x}^*) + \sum_{j=1}^m u_j^* \bar{\nabla} g_j(\bar{x}^*) = \bar{0},$$

onde,

$$\begin{cases} g_j(\bar{x}^*) \leq 0, \\ u_j^* \geq 0, \\ u_j^* g_j(\bar{x}^*) = 0, \end{cases} \quad \text{para } j = 1, \dots, m.$$

Dem.: Pelo teorema 1 sabe-se que $F_o \cap T = \emptyset$, onde $F_o = \{\vec{d} : \vec{\nabla}f(\vec{x})^T \vec{d} < 0\}$, assumindo $T = G'$, onde $G' = \{\vec{d} : \vec{\nabla}g_i(\vec{x})^T \vec{d} \leq 0, i \in I\}$ e $I = \{i : g_i(\vec{x}^*) = 0\}$, então $F_o \cap G' = \emptyset$. Em outras palavras o sistema que se segue não tem solução:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}f(\vec{x}^*)^T \vec{d} &< 0; \\ \vec{\nabla}g_i(\vec{x}^*)^T \vec{d} &\leq 0, \quad \text{onde } i \in I. \end{aligned}$$

Então o resultado decorre diretamente do teorema de anterior (teorema de Farkas). ■

Apêndice C

A Equação de Euler-Lagrange

Teorema Fundamental do Cálculo das Variações: Seja

$L = \left\{ f[x_1, x_2] \rightarrow \mathbb{R}, \int_{x_1}^{x_2} f^2(x) dx < +\infty \right\}$ com o produto interno $\langle g, f \rangle = \int_{x_1}^{x_2} g(x)f(x) dx$;

$L \subseteq L$ um sub-espaço de L equipado com a mesma norma de L , $A \subseteq L$ um subconjunto de L . Se A é denso em L então vale: seja $f \in L$ tal que $\langle f, g \rangle = 0, \forall g \in A \Rightarrow f = 0$.

Dem.: Como A é denso em L então tem-se que $\forall \varepsilon > 0, \forall f \in L, \exists g \in A$ tal que $\|f - g\| < \varepsilon$. Note ainda que:

$$\begin{aligned} \|f - g\|^2 &= \langle f - g, f - g \rangle \\ &= \langle f, f - g \rangle - \langle g, f - g \rangle \\ &= \langle f, f \rangle - \langle f, g \rangle - \langle g, f \rangle + \langle g, g \rangle \\ &= \langle f, f \rangle - 2\langle f, g \rangle + \langle g, g \rangle. \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} 2\underbrace{\langle f, g \rangle}_{=0} &= \underbrace{\langle f, f \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle g, g \rangle}_{\geq 0} - \underbrace{\|f - g\|^2}_{< \varepsilon^2} \\ &\geq \langle f, f \rangle + \langle g, g \rangle - \varepsilon^2 \\ &\geq \langle f, f \rangle - \varepsilon^2 \Rightarrow \varepsilon^2 \geq \langle f, f \rangle \geq 0, \quad \forall \varepsilon > 0. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle f, f \rangle = \|f\|^2 = 0 \Rightarrow \|f\| = 0 \Rightarrow f = 0. \blacksquare$$

Funcionais envolvendo funções em \mathbb{R}^2 e suas derivadas:

Serão considerados aqui funcionais do tipo:

$$I(w) = \int_{\Omega} F(x, y, w, w_x, w_y, w_{xx}, w_{xy}, w_{yx}, w_{yy}) d\Omega,$$

onde:

$$\begin{aligned} w_x &= \frac{\partial w}{\partial x}; & w_{xx} &= \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}; & w_{xy} &= \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}; \\ w_y &= \frac{\partial w}{\partial y}; & w_{yy} &= \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}; & w_{yx} &= \frac{\partial^2 w}{\partial y \partial x}. \end{aligned}$$

Obs.: Para que $w_{xy} = w_{yx}$ é necessário que w seja duas vezes diferenciável e sua segunda derivada seja contínua.

Sejam as seguintes considerações:

$\partial\Omega$ - fronteira do domínio Ω .

Sejam então os conjuntos:

$Kin = \{ w \text{ é suficientemente regular e satisfaz as condições de contorno em } \partial\Omega \};$

$Varu = \{ \eta \text{ é suficientemente regular e } \eta = 0 \text{ em } \partial\Omega \}.$

Seja agora a função arbitrária \tilde{w} que pode ser expressa como $\tilde{w}(x, y) = w(x, y) + \varepsilon\eta(x, y)$, conseqüentemente:

$$I(\varepsilon) = \int_{\Omega} F(x, y, \tilde{w}, \tilde{w}_x, \tilde{w}_y, \tilde{w}_{xx}, \tilde{w}_{xy}, \tilde{w}_{yx}, \tilde{w}_{yy}) d\Omega.$$

A condição necessária de otimalidade para um caminho extremo (máximo ou mínimo) $w(x, y)$ é dado por:

$$\left. \frac{dI}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{I(\varepsilon) - I(0)}{\varepsilon} \right) = 0,$$

ou seja,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} \left[F(x, y, \tilde{w}, \tilde{w}_x, \tilde{w}_y, \tilde{w}_{xx}, \tilde{w}_{xy}, \tilde{w}_{yx}, \tilde{w}_{yy}) - F(x, y, w, w_x, w_y, w_{xx}, w_{xy}, w_{yx}, w_{yy}) \right] d\Omega \right\} = 0$$

, $\forall \eta \in \text{Varu}$.

Obs.: Considera-se que $F(\cdot)$ seja suficientemente regular de tal forma que $F_{\varepsilon}(\cdot) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} F(\cdot)$ uniformemente.

$$\int_{\Omega} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{F(x, y, \tilde{w}, \tilde{w}_x, \tilde{w}_y, \tilde{w}_{xx}, \tilde{w}_{xy}, \tilde{w}_{yx}, \tilde{w}_{yy}) - F(x, y, w, w_x, w_y, w_{xx}, w_{xy}, w_{yx}, w_{yy})}{\varepsilon} \right] d\Omega = 0$$

$$\therefore \int_{\Omega} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\partial F}{\partial w} \eta + \frac{\partial F}{\partial w_x} \eta_x + \frac{\partial F}{\partial w_y} \eta_y + \frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_{xx} + \frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_{xy} + \frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \eta_{yx} + \frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_{yy} + \frac{o(\varepsilon^2)}{\varepsilon} \right] d\Omega = 0$$

$$\therefore \int_{\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w} \eta + \frac{\partial F}{\partial w_x} \eta_x + \frac{\partial F}{\partial w_y} \eta_y + \frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_{xx} + \frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_{xy} + \frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \eta_{yx} + \frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_{yy} \right] d\Omega = 0, \quad \forall \eta \in \text{Varu}.$$

Note ainda que:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \eta \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \right] \eta + \frac{\partial F}{\partial w_x} \eta_x;$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \eta \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \right] \eta + \frac{\partial F}{\partial w_y} \eta_y,$$

e pela aplicação do Teorema de Green tem-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (\cdot) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (\cdot) n_x d\Gamma;$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} (\cdot) d\Omega = \int_{\partial\Omega} (\cdot) n_y d\Gamma.$$

Como resultado pode-se escrever:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_x} \eta_x d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \eta \right] n_x d\Gamma - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \right] \eta d\Omega;$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_y} \eta_y d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \eta \right] n_y d\Gamma - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \right] \eta d\Omega.$$

Os termos associados as derivadas de segunda ordem podem ser determinados como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_x \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta_x + \frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_{xx};$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta \right\} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta_x,$$

ou seja,

$$\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_{xx} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_x \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta \right\} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta.$$

Por analogia,

$$\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_{yy} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_y \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] \eta \right\} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] \eta.$$

O termo cruzado w_{xy} pode ser determinado por:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_x \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta_x + \frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_{xy};$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta \right\} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta_x,$$

ou seja,

$$\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_{xy} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_x \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta \right\} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta.$$

Integrando estes termos em Ω e aplicando o teorema de Green, obtêm-se:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_{xx} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_x \right] n_x d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta n_x d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta d\Omega;$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_{yy} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_y \right] n_y d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] \eta n_y d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] \eta d\Omega;$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_{xy} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_x \right] n_y d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta n_x d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta d\Omega;$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \eta_{yx} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \eta_y \right] n_x d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \right] \eta n_y d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \right] \eta d\Omega.$$

Finalmente:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial F}{\partial w} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \right] \right\} \eta d\Omega \\ & + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \eta \right] n_x d\Gamma + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \eta \right] n_y d\Gamma + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \eta_x \right] n_x d\Gamma + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \eta_y \right] n_y d\Gamma + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \eta_x \right] n_y d\Gamma \\ & + \int_{\partial\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \eta_y \right] n_x d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] \eta n_x d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] \eta n_y d\Gamma - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] \eta n_x d\Gamma \\ & - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \right] \eta n_y d\Gamma = 0, \end{aligned}$$

para $\forall \eta \in \text{Varu}$.

Como $\eta = 0$ em $\partial\Omega$ e arbitrário no interior de Ω , determinou-se então a equação de Euler-Lagrange associada ao funcional:

$$\frac{\partial F}{\partial w} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_y} \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xx}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yy}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{xy}} \right] + \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \left[\frac{\partial F}{\partial w_{yx}} \right] = 0,$$

para $\forall (x, y) \in \text{int}(\Omega)$.

Onde as condições de contorno (essenciais e naturais) são obtidas pela aplicação do Teorema fundamental do Cálculo das Variações nas parcelas do contorno, uma vez que $\eta \in \text{Varu}$.

Definindo agora:

Γ_u - parte do domínio onde estão prescritas as condições de contorno essenciais.

Γ_t - parte do domínio onde estão prescritas os fluxos / tensões / etc.

$\partial\Omega$ - fronteira do domínio Ω , $\partial\Omega = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ e $\Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset$.

Sejam então os conjuntos:

$\text{Kinu} = \{ v \text{ é suficientemente regular e satisfaz as condições de contorno em } \Gamma_u \}$;

$\text{Varu} = \{ \hat{v} \text{ é suficientemente regular e } \hat{v} = 0 \text{ em } \Gamma_u \}$.

Assim tem-se para o caso da equação de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos e em regime permanente, a obtenção é feita a partir da aplicação da condição de estacionaridade no funcional característico. Note que as parcelas convectivas são incorporadas de forma indireta. O funcional fica então:

$$I(v_i, d_{ij}, T_{ij}, p) = \int_{\Omega} \left[\left(\frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}) - d_{ij} \right) T_{ij} - \rho f_i v_i - v_{i,i} p + \frac{1}{2} A_{ijkl} d_{kl} d_{ij} \right] d\Omega - \int_{\partial\Omega} \rho h_i v_i d\Gamma,$$

onde v_i é o vetor velocidade, d_{ij} é o tensor deformação, T_{ij} é o tensor dado pela equação constitutiva para fluidos Newtonianos ($T_{ij} = A_{ijkl}d_{kl}$), p é a pressão e Ω é o domínio ocupado pelo fluido. As equações de Euler-Lagrange neste caso ficam:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [T_{ij,j} - (p\delta_{ij})_{,j} - \rho f_i] \hat{v}_i d\Omega = 0 &\Rightarrow \int_{\partial\Omega} \{ [T_{ij} - p\delta_{ij}] n_i - \rho h_i \} \hat{v}_i d\Gamma = 0 \\ \int_{\Omega} [-T_{ij} + A_{ijkl}d_{kl}] \hat{d}_{ij} d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i}) - d_{ij} \right) \hat{T}_{ij} d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} v_{i,i} \hat{p} d\Omega = 0. \end{aligned}$$

Note que da primeira equação de Euler-Larange fazendo a componente f_i igual a parcela da aceleração convectiva $v_j v_{i,j}$, tira-se a equação de equilíbrio (Navier-Stokes). Perceba ainda que aqui desprezou-se o termo relativo as forças de corpo, ou seja, tira-se diretamente o problema apresentado em 2.1, com todas as condições de contorno. As demais equações fazem referencia a imposição, de forma fraca, das propriedades de deformação e tensão para fluidos Newtonianos, bem como de incompressibilidade. Vale ressaltar ainda que $\hat{d}_{ij}, \hat{T}_{ij}, \hat{p} \in L^2(\Omega)$ e $\hat{v}_i \in Varu$.

Apêndice D

O Método de Newton

O método de Newton puro utilizado na solução de sistemas de equações não lineares tem um grave inconveniente que é a tendência de não convergir caso o ponto inicial não seja suficientemente próxima da solução. Um método global é aquele que para todo ponto inicial converge para a solução. O essencial da idéia aqui usada é combinar a rápida convergência local do método de Newton com a estratégia de convergência global que garantirá que o processo siga para a solução em cada interação.

Recordando-se do passo de Newton para o conjunto de equações:

$$F(\vec{x}) = \vec{0},$$

onde $F_i(x_1, \dots, x_n) = 0$, com $i=1, \dots, n$, tem-se então:

$$F_i(\vec{x} + \delta\vec{x}) = F_i(\vec{x}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \delta x_j + o(\delta\vec{x}^2),$$

sendo a matriz das derivadas parciais a matriz Jacobiana:

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}.$$

Assim tem-se:

$$F(\vec{x} + \delta\vec{x}) = F(\vec{x}) + J \cdot \delta\vec{x} + o(\delta\vec{x}^2).$$

Desprezando o termo de ordem $\delta\vec{x}^2$ e impondo $F(\vec{x} + \delta\vec{x}) = \vec{0}$, obtêm-se o conjunto de equações que serão responsáveis pela atualização de $\delta\vec{x}$:

$$J.\delta\vec{x} = -F,$$

onde o sistema acima é resolvido por decomposição LU ($J = LU$) :

$$L.(U.\delta\vec{x}) = -F \Rightarrow L.y = -F \Rightarrow U.\delta\vec{x} = y.$$

As correções são então adicionadas ao vetor solução, determinando assim o próximo passo:

$$\vec{x}_k = \vec{x}_{k-1} + \delta\vec{x},$$

na k -ésima interação. Uma estratégia razoável é requerer a minimização de f :

$$f = \frac{1}{2} F \cdot F.$$

Note porém que a solução para $F(\vec{x}) = \vec{0}$ implica na minimização de f . Porém, pode haver um mínimo local de f que não solucione $F(\vec{x}) = \vec{0}$. Então a simples minimização pelo passo de Newton puro de f não é uma boa idéia.

Para desenvolver uma estratégia melhor, note que o passo de Newton é uma direção de descida para a função f :

$$\nabla f \cdot \delta\vec{x} = (F.J).(-J^{-1}.F) = -F.F < 0.$$

Então a estratégia será a seguinte: Sempre se tentará primeiro o passo de Newton puro, porque uma vez próximo da solução, o suficiente, tem-se garantida a convergência quadrática, sob certas condições. Será checado a cada interação se o passo de Newton puro reduz f , caso contrário faz-se uma busca linear (“backtracking”) sobre a direção de Newton puro, até que se tenha um passo aceitável. Além do que a direção de Newton puro é uma direção de descida para f , daí tem-se, então, a garantia de se encontrar um passo aceitável pelo “backtracking”.

Perceba ainda que este método minimiza f por tomar passos de Newton que levam F para zero (vetor nulo), o que não equivale a minimizar f com passos de Newton que levem o ∇f para zero.

Tomando o passo de Newton puro por $d = \delta \bar{x}$, para uma interação k tem-se:

$$\bar{x}_k = \bar{x}_{k-1} + \lambda d_k, \quad 0 < \lambda \leq 1.$$

É necessário encontrar λ tal que faça com que $f(\bar{x}_{k-1} + \lambda d)$ decresça o suficiente. Daí vem a pergunta: que critério(s) adotar para que o passo seja aceitável?. Para isto tem-se as chamadas condições de Wolfe:

i) Armijo: $f(\bar{x}_k) \leq f(\bar{x}_{k-1}) + C_1 \lambda \nabla f(\bar{x}_{k-1}) \cdot (\bar{x}_k - \bar{x}_{k-1});$

ii) Curvatura: $\nabla f(\bar{x}_k)^T d_k \geq C_2 \nabla f(\bar{x}_{k-1})^T d_k, \quad 0 < C_1 < C_2 < 1.$

Todavia a segunda condição de Wolfe (curvatura), na prática não foi imposta. A busca linear aqui utilizada foi baseada em interpolações de funções conhecidas e suas derivadas, as quais fortalecerão a condição de “armijo”. Tais funções serão melhor descritas mais adiante. Seguindo recomendações da literatura utilizou-se $C_1 \approx 10^{-4}$. A estratégia na prática para o “backtracking” foi:

$$g(\lambda) := f(\bar{x}_{k-1} + \lambda d) \Rightarrow g'(\lambda) = \lambda [\nabla f(\bar{x}_{k-1}) \cdot d],$$

onde tem-se que achar λ , o qual minimiza o modelo que será construído a seguir. Tem-se já calculados $g(0)$ e $g'(0)$, e como o primeiro passo é o passo de Newton puro, então tem-

se também $g(\lambda_0 = 1)$. Inicialmente será considerado $\lambda_0 = 1$, para o qual será avaliada a condição de “Armijo”. Caso esta condição não seja satisfeita é construído então um modelo quadrático de $g(\lambda)$:

$$g(\lambda) \approx \left[\frac{g(\lambda_0) - g(0) - \lambda_0 g'(0)}{\lambda_0^2} \right] \lambda^2 + g'(0)\lambda + g(0),$$

donde encontra-se como mínimo:

$$\lambda = -\frac{g'(0)\lambda_0^2}{2[g(\lambda_0) - g(0) - \lambda_0 g'(0)]}.$$

Em um segundo e subseqüentes “backtracks”, caso necessários, utiliza-se uma aproximação cúbica para g , usando o valor prévio de $g(\lambda_0)$ e um segundo mais recente $g(\lambda_1)$:

$$g(\lambda) = a\lambda^3 + b\lambda^2 + g'(0)\lambda + g(0).$$

Obs.: Dado um intervalo $[c, q]$ conhecido (para o presente caso $[0, 1 ; 0, 5]$), que contenha os comprimentos dos passos aceitáveis, tem-se que esta função cúbica sempre existe e é única.

Determina-se assim a e b , bem como λ_2 , e deste modo o processo se repete até que “Armijo” seja satisfeita. Caso λ_k seja muito próximo de λ_{k-1} ou muito menor que este, impõe-se então que $\lambda_k = \frac{1}{2}\lambda_{k-1}$. Tem-se então para a minimização da cúbica:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - (\lambda_k - \lambda_{k-1}) \left[\frac{g'(\lambda_k) + s_2 - s_1}{g'(\lambda_k) - g'(\lambda_{k-1}) + 2s_2} \right],$$

onde,

$$s_1 = g'(\lambda_{k-1}) + g'(\lambda_k) - 3 \frac{g(\lambda_{k-1}) - g(\lambda_k)}{\lambda_{k-1} - \lambda_k};$$

$$s_2 = [s_1^2 - g'(\lambda_{k-1})g'(\lambda_k)]^2.$$

A interpolação cúbica é uma poderosa estratégia já que pode produzir uma taxa de convergência quadrática na interação acima descrita para o processo de minimização de λ .

Apêndice E

A Matriz Hessiana

A idéia aqui utilizada é fazer uso de uma aproximação Quase – Newton B_k para a matriz Hessiana da função Lagrangeana aumentada $\nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2 \chi(\bar{x}_k, \bar{\lambda}_k, \varepsilon_k)$. A atualização da aproximação da matriz Hessiana é feita via BFGS que segundo a literatura tem alcançado bons resultados.

A atualização para B_k , que resulta do passo k , para o passo $k+1$ será realizada com o uso dos vetores \bar{p}_k e \bar{y}_k , que são definidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \bar{p}_k &= \bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k; \\ \bar{y}_k &= \bar{\nabla}_{\bar{x}} \chi(\bar{x}_{k+1}, \bar{\lambda}_{k+1}, \varepsilon_{k+1}) - \bar{\nabla}_{\bar{x}} \chi(\bar{x}_k, \bar{\lambda}_{k+1}, \varepsilon_{k+1}). \end{aligned}$$

Uma observação importante que se deve fazer é quanto à positividade de $\nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2 \chi(\cdot)$, caso esta seja positiva definida na região onde a minimização está atuando, a aproximação Quase – Newton (B_k) portará alguma informação da curvatura do problema, e a interação convergirá robusta e rapidamente. Todavia caso $\nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2 \chi(\cdot)$ tenha autovalores negativos, então a aproximação BFGS aproximando-a como uma matriz positiva definida torna-se ineficaz. De fato a atualização via BFGS requer que \bar{p}_k e \bar{y}_k satisfaçam a condição de curvatura ($\bar{p}_k^T \bar{y}_k > 0$), que não pode ser assegurada pelas definições anteriores. Para superar tal problema, poderia-se omitir a atualização via BFGS caso a condição:

$$\bar{p}_k^T \bar{y}_k \geq \theta \bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k,$$

não seja satisfeita. Onde θ é um parâmetro positivo ($\sim 10^{-2}$). Esta estratégia tem-se mostrado boa quando utilizadas implementações do tipo SQP (“ sequential quadratic

program ”). Todavia em outros tipos de implementação o seu desempenho tem-se mostrado fraco.

Uma modificação mais efetiva assegura que a atualização estará sempre bem definida. Modificando a definição de \bar{y}_k por \bar{r}_k que está abaixo descrito:

$$\bar{r}_k = \theta_k \bar{y}_k + (1 - \theta_k) B_k \bar{p}_k,$$

onde,

$$\theta_k = \begin{cases} 1, & \text{se } \bar{p}_k^T \bar{y}_k \geq 0, 2 \bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k; \\ \frac{0,8 \bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k}{(\bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k - \bar{p}_k^T \bar{y}_k)}, & \text{se } \bar{p}_k^T \bar{y}_k < 0, 2 \bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k. \end{cases}$$

Então a atualização B_k fica da seguinte forma:

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k \bar{p}_k \bar{p}_k^T B_k}{\bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k} + \frac{\bar{r}_k^T \bar{r}_k}{\bar{p}_k^T \bar{r}_k}.$$

Tal atualização garante que B_{k+1} é positiva definida, desde que $\theta_k \neq 1$ pois daí tem-se:

$$\bar{p}_k^T \bar{r}_k = 0, 2 \bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k > 0.$$

Note ainda que quando $\theta_k = 0$ tem-se $B_{k+1} = B_k$, e que $\theta_k = 1$ produzirá, uma matriz possivelmente indefinida, pela a BFGS sem modificações ($\bar{r}_k = \bar{y}_k$). O valor de $\theta_k \in (0,1)$ produz uma matriz que interpola o valor da aproximação atual B_k e uma produzida pela BFGS sem modificações. A escolha correta do valor de θ_k assegura que a aproximação seguinte esteja próxima o suficiente da aproximação atual B_k para que a positividade esteja assegurada. Todavia a estratégia aqui adotada toma um caminho um pouco diferente, já

que tem-se assegurado que $\nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2\chi(\bar{x}^*, \bar{\lambda}^*, \varepsilon)$ é positiva definida para ε suficientemente pequeno, e assim satisfazendo a condição de suficiência de segunda ordem. Tem-se então:

$$\begin{aligned}\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon) &= f(\bar{x}) + \sum_{j=1}^p \lambda_j h_j(\bar{x}) + \frac{1}{2\varepsilon} \sum_{j=1}^p [h_j(\bar{x})]^2 \\ \Rightarrow \nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon) &= \nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2 L(\bar{x}, \bar{\lambda}) + \frac{1}{\varepsilon} \bar{\nabla}_{\bar{x}} \bar{h}(\bar{x})^T \bar{\nabla}_{\bar{x}} \bar{h}(\bar{x}).\end{aligned}$$

Note ainda que o último termo em $\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon)$ acrescenta curvatura positiva a $L(\bar{x}, \bar{\lambda})$ no espaço das colunas de $\bar{\nabla}_{\bar{x}} \bar{h}(\bar{x})^T$, enquanto que deixa a curvatura sem modificações no espaço nulo de $\bar{\nabla}_{\bar{x}} \bar{h}(\bar{x})$. Pode-se fazer agora a aplicação do BFGS, para uma escolha suficientemente pequena de ε , e tal que a matriz Hessiana será sempre positiva definida. O método aqui adotado também tem suas imperfeições, pois caso ε seja demasiadamente pequeno pode resultar que o último termo de $\nabla_{\bar{x}\bar{x}}^2\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon)$ se torna dominante, e isto pode algumas vezes prejudicar a performance da metodologia. Já no caso em que ε for muito grande a matriz Hessiana, da função Lagrangeana Aumentada, pode não ser positiva definida e $\chi(\bar{x}, \bar{\lambda}, \varepsilon)$ pode não ser convexa, o que implica que a condição de curvatura pode não ser satisfeita. Para o presente caso tem-se simplesmente:

$$\bar{y}_k = \bar{\nabla}_{\bar{x}} \chi(\bar{x}_{k+1}, \bar{\lambda}_{k+1}, \varepsilon_{k+1}) - \bar{\nabla}_{\bar{x}} \chi(\bar{x}_k, \bar{\lambda}_{k+1}, \varepsilon_{k+1}) \Rightarrow B_{k+1} = B_k - \frac{B_k \bar{p}_k \bar{p}_k^T B_k}{\bar{p}_k^T B_k \bar{p}_k} + \frac{\bar{y}_k \bar{y}_k^T}{\bar{p}_k^T \bar{y}_k},$$

de onde tem-se a equação secante ($\bar{y}_k = B_{k+1} \bar{p}_k$) satisfeita. Aqui utilizou-se como valores limites de ε , os seguintes valores: $\varepsilon^{\min} = \varepsilon^{\text{crit}} = 10^{-8}$ e $\varepsilon^{\max} = \varepsilon^{\text{inicial}} = 10^{-5}$.

Apêndice F

O Gradiente

O gradiente da função objetivo, aqui neste trabalho, será calculado numericamente como já comentado anteriormente. Dada então a função objetivo $f(\vec{x})$, onde $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ é o vetor das variáveis de projeto. A metodologia utilizada será a diferença finita central, e por ela tem-se o gradiente da seguinte forma:

$$\nabla f(\vec{x}) \approx \sum_{i=1}^n \left(\frac{f(\vec{x} + \delta \hat{e}_i) - f(\vec{x} - \delta \hat{e}_i)}{2\delta} \hat{e}_i \right),$$

onde \hat{e}_i são vetores da base canônica e o escalar δ é da ordem de 10^{-4} .
