

5 Implementação computacional do GFMBEM

Nesse capítulo será apresentado o algoritmo desenvolvido empregando o GFMBEM. Esta implementação tem por objetivo desenvolver um algoritmo para um problema com milhões de graus de liberdade, mas está ainda em um estágio inicial, tendo neste momento o seu foco no estudo do GFMM.

Neste estágio, o GFMM não foi integrado a um resolvidor iterativo, portanto ao invés de se buscar a solução do sistema de equações representado pela Equação (2.20), deseja-se calcular os vetores \mathbf{Hd} e \mathbf{Gt} da Equação (2.14) para valores conhecidos de \mathbf{d} e \mathbf{t} .

O presente desenvolvimento é baseado em distâncias topológicas entre os elementos de contorno, ao invés de distâncias geométricas (como apresentado na literatura). E foi desenvolvido para elementos lineares, quadráticos e cúbicos, particularizado para elementos constantes.

O algoritmo proposto, embora apresentado para um problema de potencial, pode ser modificado para outros problemas. As modificações necessárias se resumem à modificação do vetor de derivadas $Q(Z)$, que é a única parcela dependente da solução fundamental, além do procedimento que calcula os elementos adjacentes pelo CBEM.

5.1. Implementação computacional

Nesta seção serão apresentados todos os procedimentos envolvidos na implementação desenvolvida. O algoritmo pode ser dividido em três etapas. A primeira delas envolve cálculos preliminares relacionados à técnica ‘fast multipole’, a segunda está relacionada à discretização da malha e a terceira envolve uma série de procedimentos que são chamados recursivamente. Como dado de saída do algoritmo são obtidos os vetores \mathbf{Hd} e \mathbf{Gt} .

A etapa relacionada aos cálculos preliminares do GFMM envolve basicamente o cálculo do vetor fac definido na Equação (4.3), da matriz de constantes C definida na Equação (4.10) e o pré-cálculo do vetor das derivadas da solução fundamental $Q(Z)$ definido na Equação (4.5). Estes são calculados inicialmente por dependerem apenas do número de termos de expansão da série e da solução fundamental.

A segunda etapa envolve o refinamento da malha, feito no presente algoritmo numa discretização hierárquica, como apresentado na seção 5.1.1.

A terceira etapa será apresentada na seção 5.1.2, pelo algoritmo unificado para as expansões do GFMM. As expansões serão realizadas utilizando um conceito de elementos pais e filhos, provenientes dos refinamentos. Este conceito pode ser associado ao conceito de células mães e filhas apresentado na Seção 3.1.5.

5.1.1. Refinamento hierárquico da malha

O algoritmo deste procedimento está apresentado no Apêndice 1, e aqui será discutida a sua ideia geral. Este procedimento consiste em discretizar um contorno em nv níveis de refinamento, além do inicial. A cada nível de refinamento (k), cada elemento é subdividido em dois novos.

Como dado de entrada deste procedimento, deve-se determinar a geometria da estrutura a partir de uma malha inicial, a qual deve ser fornecida em termos do menor número de macroelementos possível. Para facilitar o entendimento, como exemplo será utilizado um quadrado. Cada lado do quadrado representa um macroelemento, nomenclatura que será empregada para se referir aos elementos no nível de menor refinamento ($k=1$). Uma vez determinada a geometria da estrutura, esta será refinada com a subdivisão de cada macroelemento em dois novos. A cada subdivisão são armazenadas as coordenadas nodais e uma nova matriz de incidência cinemática.

Na Figura 14(a) está representada a geometria determinada inicialmente, definida por quatro macroelementos lineares, bem como a numeração dos elementos e dos nós, enquanto na Figura 14(b) está representado o mesmo contorno em um nível imediatamente acima de refinamento ($k=2$), juntamente

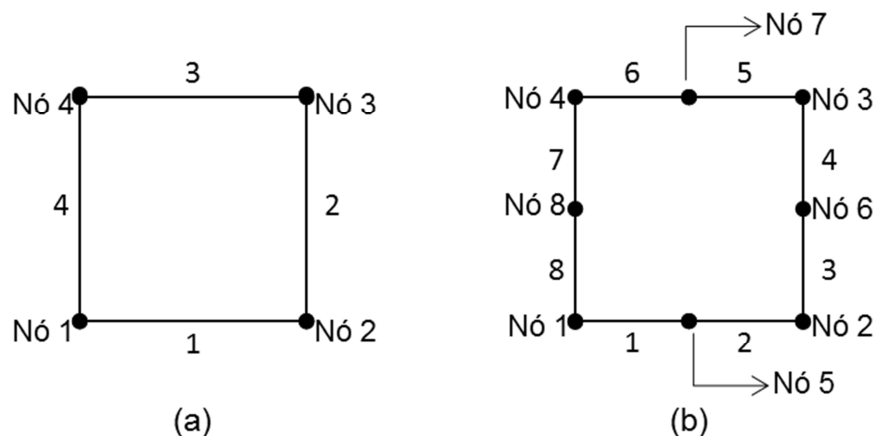


Figura 14 - Esquema do refinamento hierárquico de uma malha de elementos lineares. (a) Estrutura fornecida, ou seja, equivale à malha no menor nível de refinamento ($k = 1$). (b) Estrutura no segundo nível de refinamento ($k = 2$).

com a numeração dos novos nós e dos elementos filhos. É válido notar que os elementos obedecem a uma numeração por nível, enquanto os nós apresentam uma numeração global, independente do nível.

Na Equação (5.1) está exemplificado o esquema de armazenamento das matrizes de incidência e das coordenadas, respectivamente. No caso das matrizes de incidência, estas são armazenadas em um vetor (inc), onde cada elemento deste é uma matriz de incidência no nível de refinamento (k).

$$inc = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 4 \\ 4 & 1 \end{array} \right] \\ \left[\begin{array}{cc} 1 & 5 \\ 5 & 2 \\ 2 & 6 \\ 6 & 3 \\ 3 & 7 \\ 7 & 4 \\ 4 & 8 \\ 8 & 1 \end{array} \right] \end{array} \right] \quad X_{gl} = \begin{bmatrix} x_{nó1} \\ x_{nó2} \\ x_{nó3} \\ x_{nó4} \\ x_{nó5} \\ x_{nó6} \\ x_{nó7} \\ x_{nó8} \end{bmatrix} \quad Y_{gl} = \begin{bmatrix} y_{nó1} \\ y_{nó2} \\ y_{nó3} \\ y_{nó4} \\ y_{nó5} \\ y_{nó6} \\ y_{nó7} \\ y_{nó8} \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

As coordenadas são armazenadas nos vetores X_{gl} e Y_{gl} apresentados na Equação (5.1). A cada refinamento estes vetores são expandidos com a criação de novos nós.

As divisões dos elementos são sempre realizadas levando em conta a ordem dos elementos (linear, quadrática ou cúbica) na qual o contorno foi discretizada inicialmente. Portanto, a forma da estrutura é sempre mantida.

Um conceito importante que será utilizado ao longo deste trabalho é o de microelemento, denominação adotada para elementos no maior nível de

refinamento ($k=mv+1$). Será visto que este conceito pode ser associado ao mesmo conceito de folha empregado na literatura.

O número de elementos em cada nível de refinamento será armazenado em um vetor denominado nek . Cada coeficiente deste vetor representa um nível de refinamento:

$$nek[k] = nek[1] \cdot 2^{k-1} \quad (5.2)$$

De maneira similar, o número de nós por nível é armazenado no vetor $nglk$, dado por:

$$nglk[k] = oe \cdot nek[1] \cdot 2^{k-1} \quad (5.3)$$

onde k é o nível de refinamento e oe é a ordem dos elementos utilizados para discretizar o contorno.

Na Figura 15 está representado o mesmo contorno da Figura 14(a), em vários níveis de refinamento. Cada cor representa um determinado nível de refinamento, conforme legenda apresentada. Este esquema será utilizado como referência para exemplificar os conceitos e desenvolvimentos apresentados a seguir.

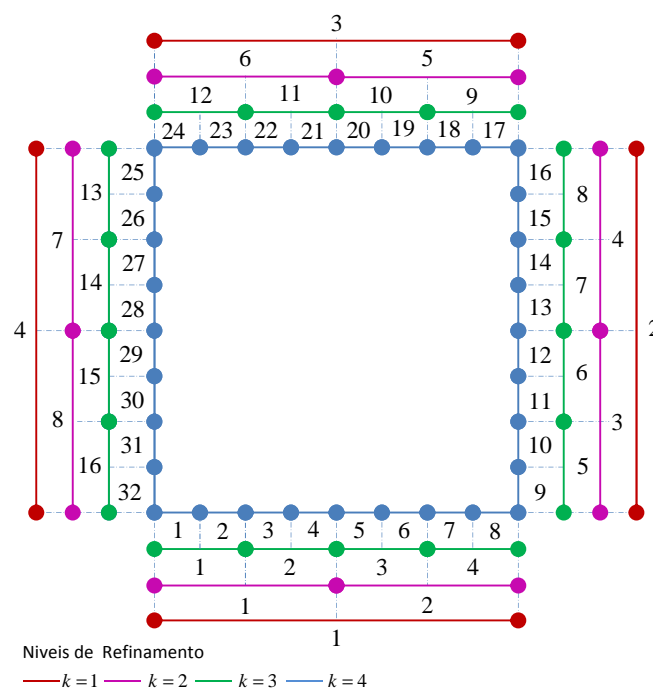


Figura 15 - Esquema de Refinamento, considerando $mv=3$, resultando em um total de 4 níveis de refinamento.

5.1.2.

Algoritmo unificado para as expansões do GFMBEM

Este algoritmo se refere a um grupo de procedimentos que são executados recursivamente dentro de um loop dos macroelementos (elementos no nível de menor refinamento).

No Apêndice 2, está apresentado o algoritmo deste grupo de procedimentos, sendo aqui discutida a sua ideia geral.

- **Estrutura de adjacências**

Uma vez que o contorno foi refinado, conforme descrito anteriormente, cria-se uma estrutura hierárquica, uma espécie de árvore genealógica, dos macroelementos campo com os seus filhos. Esta árvore pode ser comparada à estrutura hierárquica apresentada na Figura 8. O procedimento responsável por esta estrutura hierárquica também é responsável por executar todos os demais procedimentos. Na Figura 16 está apresentada a estrutura hierárquica proveniente do macroelemento 1 do contorno apresentado na Figura 15.

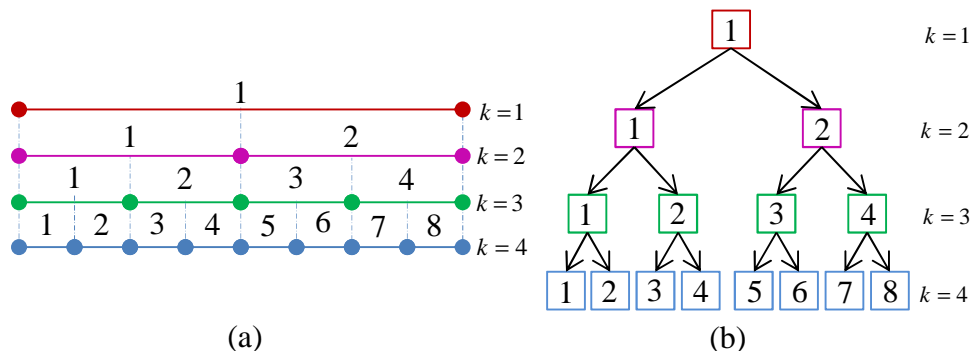


Figura 16 - (a) Macroelemento 1 e seus filhos. A numeração apresentada se refere aos elementos. (b) Estrutura hierárquica do macroelemento 1.

Juntamente com a estrutura hierárquica citada anteriormente, também é criada uma lista de adjacências de cada elemento por nível de refinamento. Por definição, todo elemento é adjacente a ele mesmo, de maneira que, para o caso bidimensional, cada elemento apresenta três elementos adjacentes.

No intuito de exemplificar a criação das listas de adjacências, tomou-se como exemplo o microelemento 8. Na Figura 17, o mesmo contorno apresentado na Figura 14(a) é apresentado com quatro níveis de refinamento. Os elementos pertencentes à estrutura hierárquica deste elemento aparecem hachurados com

pontos e os elementos adjacentes a cada elemento membro da desta estrutura hierárquica aparecem na cor cinza.

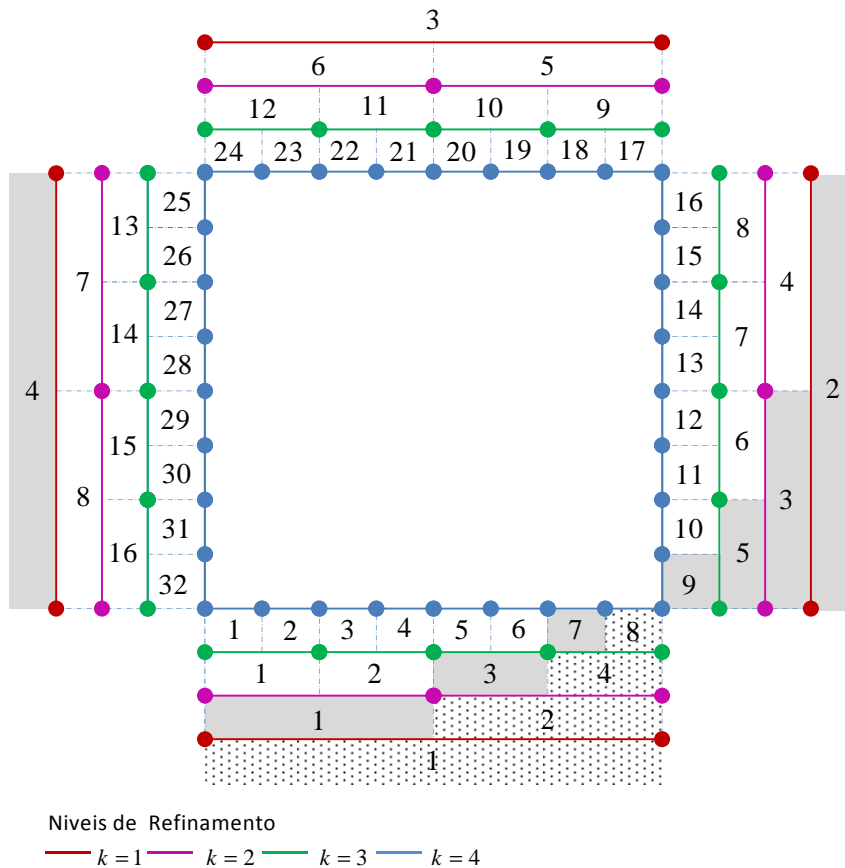


Figura 17 - Esquema dos elementos adjacentes ao microelemento 8. Os elementos pontilhados compõem a estrutura hierárquica do microelemento 8 e os na cor cinza são os elementos adjacentes em cada nível de refinamento.

Na Equação (5.4) está apresentado o vetor com a estrutura hierárquica do elemento microelemento 8 ($elsplit$) e a matriz de adjacências ($elAdj$) que contém os elementos adjacentes em cada nível hierárquico, respectivamente.

$$elsplit = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 8 \end{bmatrix} \quad elAdj = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \\ 3 & 4 & 5 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

Como mencionado no Capítulo 3, no FMM a interação entre pontos fonte e campo se dá pela interação entre grupo de elementos. No caso do presente trabalho, estas interações são realizadas a partir do conceito de elementos pais, em contrapartida ao conceito de células usado na literatura, e o conceito de distância

está diretamente associado à adjacência entre os elementos, utilizando-se da topologia da estrutura, ao invés de calcular as distâncias de fato.

- **Avaliação dos elementos adjacentes pelo CBEM**

Uma vez criada a estrutura hierárquica apresentada anteriormente, e exemplificada na Equação (5.4), para um dado microelemento, verifica-se quais elementos fonte são próximos a este, devendo ter a sua contribuição avaliada pelo CBEM.

A proximidade entre os elementos campo e fonte é definida pela variável k_{BEM} . Esta variável define em qual nível deve-se procurar por adjacências, sendo a interação entre o elemento campo realizada com os filhos destes elementos adjacentes.

Tomando novamente o microelemento 8 como exemplo, retornando à Figura 17, e adotando $k_{BEM} = nv$, tem-se que os elementos 3, 4 e 5 são adjacentes, logo os seus elementos filhos 5, 6, 7, 8, 9 e 10, terão sua contribuição avaliada com relação ao elemento 8 em termos de uma integração convencional.

É importante ressaltar que a estrutura criada é sempre em relação ao elemento campo, e os elementos para os quais se verifica a adjacência são os elementos fonte.

- **Expansões do GFMBEM**

No algoritmo desenvolvido, as expansões entre os elementos campo e fonte com os seus respectivos polos serão sempre realizadas entre os elementos pais com os seus filhos.

No caso dos elementos campo as expansões partem sempre do elemento filho para o pai. A diferença de nível entre estes deve ser pré-determinada, e definida pela variável k_{child} . Na Figura 19, as expansões estão representadas para diferentes valores desta variável, considerando um contorno discretizado em elementos constantes. Desta forma, verifica-se que o número de filhos por elemento, no contexto das expansões, será dado por:

$$n_c = 2^{k_{child}} \quad (5.5)$$

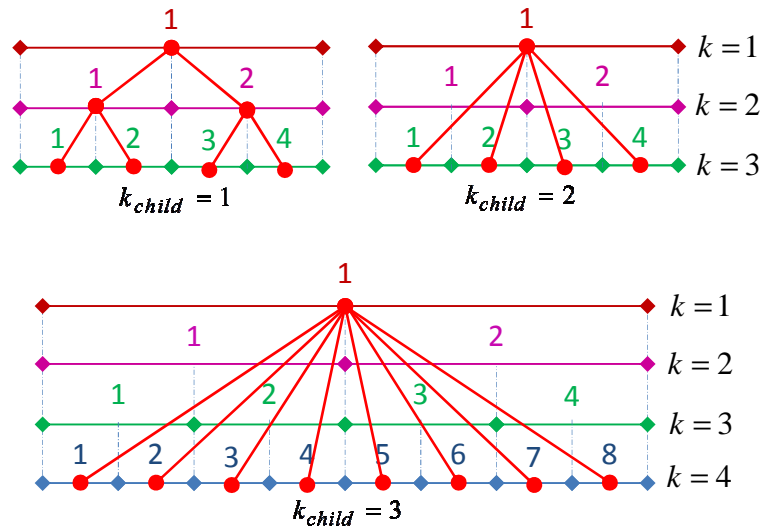


Figura 19 - Esquema de expansão dos polos de acordo com a variável k_{child} . Os losangos representam os nós geométricos dos elementos e os círculos os graus de liberdade dos elementos constantes (Peixoto, et al., 2015).

Independentemente da ordem do elemento empregado na discretização do contorno, os polos sempre estarão localizados no centro dos elementos pais. Na Figura 18 estão esquematizadas as expansões entre os pontos campo e os seus polos mais próximos (representadas pelas linhas sólidas em vermelho) e as expansões entre os polos campo (representadas pelas linhas tracejadas em preto), considerando $k_{child} = 1$.

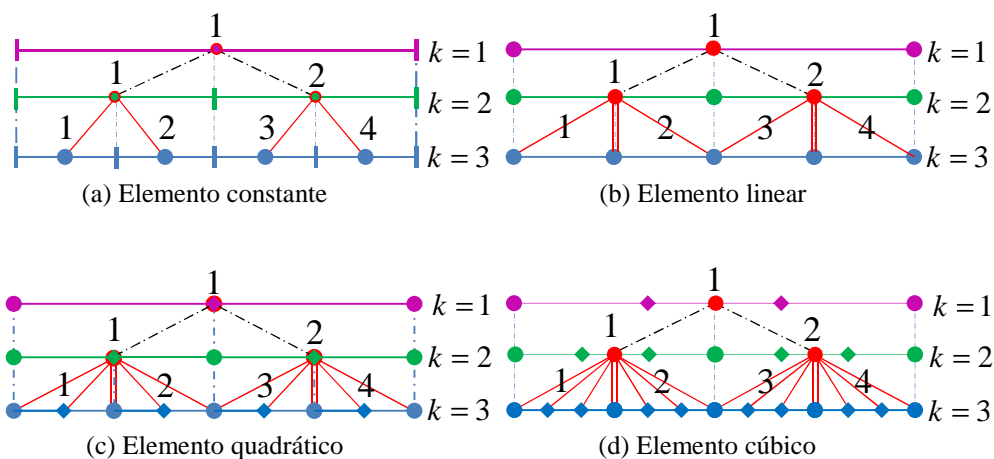


Figura 18 - Esquema das expansões dos pontos campo de acordo com a ordem dos elementos, para $k_{child} = 1$. Os círculos em vermelho representam os polos (a) os círculos representam os nós e os traços delimitam a geometria do elemento. (b), (c) e (d) Os nós externos dos elementos estão representados por círculos e os internos por losangos.

No contexto do GFMBEM, quando se fala em expansões dos pontos campo, refere-se ao cálculo dos vetores $P(Z)$. A primeira expansão a ser realizada é aquela entre o ponto campo (nó do elemento) e o polo mais próximo z_{c0} , na qual se realiza a integração sobre os elementos, ou seja, esta equivale ao cálculo das parcelas \widetilde{G} e \widetilde{H} apresentadas nas Equações (4.27) e (4.28). Esta expansão pode ser comparada às expansões denominadas na literatura de ‘*multipole expansion*’.

As demais expansões que ocorrem entre polos campo são calculadas pela Equação (4.9). Uma vez que estas nada mais são do que sucessivas expansões do ponto campo, estas expansões podem ser comparadas as translações ‘*moment-to-moment*’ (M2M). As expansões dos pontos campo se encerram quando a expansão atinge o nível k_{exp} (nível pré-definido como o nível do polo de expansão mais elevada).

O algoritmo desenvolvido permite que se decida se haverá ou não expansões em torno do ponto fonte. No caso de não haver, as expansões são realizadas entre o polo campo e os nós dos microelementos que atendem ao critério de distância, sendo a expansão correspondente ao cálculo do vetor $Q(Z)$, conforme definido na Equação (4.5), e representado na Figura 20(b) pelas setas pretas tracejadas.

No caso de haver expansões em torno dos pontos fonte, o vetor $Q(Z)$ será avaliado em relação aos polos dos elementos fonte e campo de mesmo nível que atendem ao critério de distância e, posteriormente, são avaliadas as expansões entre o polo fonte e os nós dos seus microelementos filhos, sendo esta expansão representada pelo vetor $P(Z)$, definido na Equação (4.4). Na Figura 20(a) a seta preta pontilhada representa a expansão campo-fonte, referente ao vetor $Q(z)$ e as setas em verde representam as expansões entre os polos fonte e os pontos campo, referente ao vetor $P(Z)$.

Neste algoritmo, sucessivas expansões em torno do ponto fonte não fariam sentido, uma vez que estas incluiriam operações desnecessárias à estratégia adotada. Desta forma, as expansões do ponto fonte são realizadas sempre do polo do elemento pai que recebe as expansões dos elementos campo distantes para os nós dos microelementos.

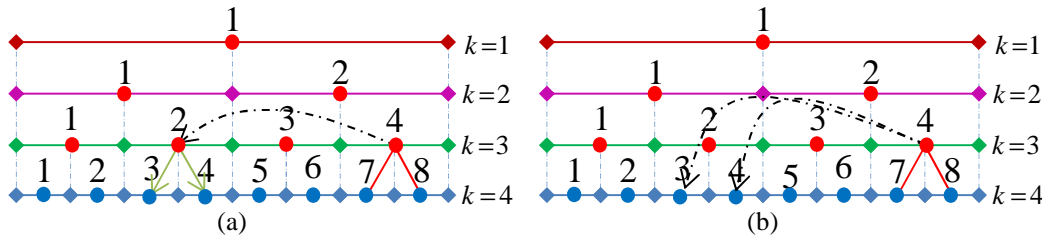


Figura 20 - Esquema das expansões campo-fonte para um contorno discretizado em elementos constantes considerando expansões (a) em torno do ponto campo e fonte (b) apenas em torno do ponto campo. Os losangos representam os nós geométricos, os círculos em azul os graus de liberdade e os em vermelho os polos de expansão;

O critério de distância das expansões é definido por um conceito topológico relativo à adjacência dos elementos. Desta forma, antes de se discutir este critério, alguns conceitos relacionados à adjacência entre elementos devem ser estabelecidos no intuito de facilitar a compreensão do desenvolvimento apresentado ao longo deste capítulo:

- Elementos Adjacentes imediatos: elementos que são adjacentes no mesmo nível de refinamento em que eles se encontram.
- Elementos adjacentes em um nível inferior: são elementos que não são adjacentes no nível em que eles se encontram, mas são adjacentes em um nível superior, ou seja, os seus elementos pais são adjacentes.

Tomando novamente o microelemento 8 como exemplo, verifica-se que os microelementos 7 e 9 são imediatamente adjacentes, uma vez que estes estão no mesmo nível do 8. Mas os elementos 3 e 5 no nível 3 são adjacentes ao seu pai (elemento 4 no nível 3), portanto, adjacentes ao microelemento 8 no nível imediatamente inferior.

No caso de haver expansões em torno dos elementos fonte, as expansões entre os elementos campo e fonte são sempre realizadas entre os polos de elementos pertencentes a um mesmo nível k , que não são adjacentes imediatos, mas que apresentam adjacência no nível $k - k_{child}$. Esta expansão é representada pelo cálculo do vetor $Q(Z)$ segundo a Equação (4.5). Posteriormente, ocorrerão as expansões dos polos fonte de mais alto nível para os nós dos microelementos filhos do elemento ao qual o polo pertence e calculadas pelo vetor $P(Z)$.

No caso de não serem realizadas expansões em torno do ponto fonte, a expansão será realizada diretamente para os nós dos microelementos filhos do elemento que atendeu ao critério de distância para expansão. A parcela relativa à expansão campo-fonte é calculada diretamente a partir do vetor $Q(Z)$, conforme definido na Equação (4.5).

Por exemplo, retomando a Figura 17, considerando um polo campo pertencente ao elemento 4 no nível $k=3$, este tem como adjacentes em um nível superior $k - k_{child}$, considerando $k_{child} = 1$, os elementos 1, 2 e 3 no nível $k=2$. A partir destes elementos adjacentes no nível $k - k_{child} = 2$, buscam-se os filhos que não apresentam adjacência imediata com o elemento 4 no nível $k=3$. Desta forma, têm-se como elementos não adjacentes imediatos os elementos 1, 2 e 6, sendo a expansão realizada a partir do polo do elemento 4 para os nós de cada um destes.

5.2. Execução do algoritmo

Nesta seção será apresentada a sequência de execução do algoritmo. Para maiores informações, recomenda-se a leitura dos Apêndices 1 e 2;

1. Refinamento hierárquico da malha e criação das matrizes de incidência por nível de refinamento, bem como a expansão dos vetores de coordenadas (Equações (5.1));
2. Criação do vetor com a estrutura hierárquica (*elsplit*) e a matriz de adjacências (*elAdj*), partindo do macroelemento até o microelemento ($k = nv + 1$);
3. Avaliação direta da contribuição dos elementos adjacentes no nível k_{BEM} ;
4. Expansão do ponto campo para o polo do elemento pai no nível $nv + 1 - k_{child}$ (Cálculo das parcelas $\tilde{\mathbf{G}}$ e $\tilde{\mathbf{H}}$);
5. Verifica-se se todos os irmãos do elemento campo já foram expandidos para o polo do elemento pai. Caso ainda não tenham sido, retorna-se para o procedimento gerador de adjacências (passo 2), onde a matriz *elAdj* e o vetor *elsplit* serão atualizadas para este novo elemento, e os passos 3, 4 e 5 serão executados. Caso contrário o algoritmo segue para o passo 6;

6. Expansão entre os pontos fonte e campo no nível do polo atual da expansão, correspondente ao cálculo do vetor $Q(Z)$ conforme a Equação (4.5);
7. Expansão entre o polo fonte e os pontos fontes dos microelementos filhos, correspondente ao cálculo do vetor $P(Z)$, conforme Equação (4.4);
8. Cálculo das contribuições para os vetores **Hd** e **Gt**. Se ainda houver elementos que atendam o critério de distância para expansão, executam-se novamente os procedimentos 6, 7 e 8. Caso contrário, o algoritmo segue para o passo 9;
9. Caso tenha sido alcançado o nível máximo de expansão k_{exp} , buscam-se os elementos fonte que ainda não foram avaliados e executam-se os procedimentos 6, 7 e 8 para cada um destes, retornando para o passo 2 e executando os passos seguintes para o próximo elemento campo. Caso contrário, segue-se para o passo 10;
10. Expansão do polo campo para o polo do elemento pai. (Cálculo do vetor $P(Z)$ conforme a Equação (4.9) para expansões sucessivas);
11. Verifica-se se todos os elementos irmão ao elemento que foi expandido no passo 10 já foram expandidos para o polo do elemento pai. Caso ainda não tenham sido, retorna-se para o passo 2, onde o vetor $elsplit$ e a matriz $eladj$ serão atualizados para o elemento irmão à este. Caso contrário, retorna-se para os procedimento 6 e executam-se os passos seguintes;

O algoritmo encerra quando todas as interações entre pontos campo e fonte tiverem sido avaliadas, e fornece como resultado os vetores **Hd** e **Gt**.

A sequência de execução descrita acima, leva em consideração a realização de expansões em torno dos pontos fonte, no caso destas não serem realizadas, o passo 7 deixa de existir e no passo 6, ao invés da expansão ser realizada para o polo fonte, esta será realizada diretamente para os nós dos microelementos fonte.