Mecânica Computacional Vol. XXII B. Rosales, V. H. Cortinez y D.V. Bambrill(Editores) Bahia Blanca, Argentina, Noviembre 2003

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM SOLUÇÃO FUNDAMENTAL TRANSIENTE PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO TRANSIENTE

Júlio C. Jesus^{*}, José P. S. Azevedo⁺

^{*}Departamento de Engenharia da Ufba, R. Rubens de Oliveira 483 CEP 44380000 Cruz das Almas (Ba) e-mail jullius@ufba.br

*Programa de Engenharia Civil da COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro Caixa Postal 68506 – CEP 21945 –970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil e-mail zepaulo@hidro.ufrj.br

Key words: Elementos Finitos, Elementos de Contorno, Difusão Transiente

Resumo. É essencial o estudo da solução da equação da difusão transiente tendo em vista o grande número de fenômenos da natureza que ela rege, tais como transporte por difusão de poluentes em solos, filtração de petróleo etc. A solução numérica da equação é efetuada empregando o Método dos Elementos de Contorno que, quando aplicado a um meio homogêneo, transforma a equação diferencial que rege o fenômeno numa equação integral de contorno O presente trabalho tem por objetivo apresentar a implementação computacional do Método dos Elementos de Contorno aplicado a Problemas de Difusão Transiente, e estabelecer uma comparação com resultados obtidos pelo Método dos Elementos Finitos. A formulação do Método dos Elementos de Contorno emprega soluções fundamentais transientes, usando aproximação geométrica e temporal com elementos constantes. O processo de marcha no tempo implica na consideração via matrizes de influência de valores em tempos anteriores do potencial e de sua derivada normal no contorno.O Método dos Elementos Finitos é aplicado à equação da difusão discretizando o domínio espacial em elementos triangulares lineares e a aproximação no tempo por diferenças finitas. Os resultados das soluções numéricas obtidas pelos dois métodos para os exemplos utilizados atestam a qualidade das duas soluções.

1. INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é desenvolver a implementação computacional do Método dos Elementos de Contorno para a solução da equação da Difusão Transiente 2D utilizando solução fundamental transiente para representação de problemas de difusão transiente, com ênfase na descrição dos procedimentos envolvidos, conforme teoria apresentado por Wrobel¹, e estabelecer comparação com simulações correspondentes aplicando o Método dos Elementos Finitos. A seção Métodos Numéricos a seguir descreve a formulação matemática utilizada neste trabalho bem como os esquemas numéricos decorrentes da sua implementação. As integrais de domínio não são consideradas por motivo de simplicidade e as condições iniciais são consideradas nulas.

A seção resultados apresenta as aplicações do MEC a problemas de simulação de difusão de calor transiente bidimensionais.

Os resultados das soluções numéricas obtidas comparadas com as soluções analíticas, do Método dos Elementos Finitos atestam a qualidade das soluções.

Enfim, apresentamos as conclusões obtidas a partir dos resultados das simulações.

2. MÉTODOS NUMÉRICOS

2.1. Método dos Elementos de Contorno para Difusão Transiente

A equação integral de contorno pode ser obtida a partir da equação da difusão transiente

$$\nabla^2 u(\underline{x},t) - \frac{1}{\alpha} \frac{\partial u(\underline{x},t)}{\partial t} = 0 \quad \underline{x} \in \Omega$$
⁽¹⁾

onde α é o coeficiente de difusividade térmica cuja dimensão é $[L^2T^{-1}]$ com condições de contorno essenciais e/ou naturais conforme descrito na figura 1, respectivamente:

$$u(x,t) = \overline{u}(\underline{x},t), \ \underline{x} \in \Gamma_1$$
(2)

$$p(x,t) = \frac{\partial u(\underline{x},t)}{\partial n(\underline{x})} = \overline{p}(\underline{x},t) \ \underline{x} \in \Gamma_2$$
(3)

e condições iniciais dadas por:

$$u(\underline{x},t) = \overline{u}(\underline{x},t_0) \tag{4}$$



Figura 1 Domínio e condições de contorno

Utilizando soluções fundamentais dependentes do tempo, aplicando-se uma sentença de resíduos ponderados, integrando-se por partes e avaliando-se o limite quando o ponto interno é levado ao contorno obtém-se a Equação Integral de Contorno, Wrobel¹:

$$c(\underline{\xi})u(\underline{\xi},t_F) = \alpha \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Gamma} p(\underline{x},t)u^*(\underline{\xi},\underline{x};t_F,t)d\Gamma(\underline{x})dt - \alpha \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Gamma} u(\underline{x},t)p^*(\underline{\xi},\underline{x};t_F,t)d\Gamma(\underline{x})dt$$
(5)

onde $c(\underline{\xi})$ é a razão entre o ângulo interno no ponto $\xi \in 2\pi$; α foi admitido constante no tempo e no espaço.

A solução fundamental do tempo u^* e sua derivada na direção normal p^* no caso bidimensional têm por expressão:

$$u^{*}(\underline{\xi},\underline{x};t_{F},t) = \frac{1}{4\pi\alpha\tau} \exp\left[\frac{-r^{2}}{4\alpha\tau}\right]$$

$$p^{*}(\underline{\xi},\underline{x};t_{F},t) = \frac{-r\frac{\partial r}{\partial n}}{8\pi\alpha^{2}\tau^{2}} \exp\left[\frac{-r^{2}}{4\alpha\tau}\right]$$
(6)

2.2 Solução Numérica da Equação Integral

Discretização com Elementos Constantes no Espaço e no Tempo

Adotando-se elementos de geometria reta dentro dos quais , u e p são constantes em cada intervalo de tempo dentro de cada elemento $\Gamma_{j,}$ e levando-se em conta que o contorno é suave em ξ , podemos reescrever a equação (5) da seguinte forma:

$$0,5u_{i}^{NT} = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} \sum_{K=1}^{NT} p^{k}(\underline{x}) \int_{t_{0}^{k}}^{t_{f}^{k}} \alpha u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}; t_{F}, t) dt d\Gamma_{j}(\underline{x}) - \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} \sum_{k=1}^{NT} u^{k}(\underline{x}) \int_{t_{0}^{k}}^{t_{f}^{k}} \alpha p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}; t_{F}, t) dt d\Gamma(\underline{x})$$

$$(7)$$

onde: NT = Número de intervalos em que o período de tempo considerado é dividido e $u_i^{NT} = u(\xi, t_F)$ é o valor de u no tempo t^{NT} no ponto $\xi_{I;}$

 t_0^k e t_f^k são os tempos inicial e final do k-ésimo intervalo de tempo.

A expressão matricial resultante é conforme Effren²

$$\sum_{k=1}^{NT} [H]^k \{u\}^{NT-k+1} = \sum_{k=1}^{NT} [G]^k \{p\}^{NT-k+1}$$
(8)

Tendo em vista que não conhecemos previamente os valores de $u_j e p_j$ em todos os tempos, para calcularmos os valores de {u} e {p} no tempo NT deveremos estabelecer um esquema de marcha no tempo a partir de NT=1.

Então, particularizando-se a equação (8) para NT=1:

$$[H]^{1}{u}^{1}=[G]^{1}{p}^{1}$$
(9)

Incorporando-se as condições de contorno na equação (7) de maneira análoga ao caso permanente, resulta no seguinte sistema de equações:

$$[A]^{1} \{x\}^{1} = \{f\}^{1}$$
(10)

que, após sua solução, fornece os valores de $u_i^1 e p_i^1$ em todo o contorno discretizado.

Uma vez conhecidos $u_j^1 e p_j^1$ em todo o contorno, pode-se avançar no tempo e calcular $u_j^2 e p_j^2$ usando a expressão (9) para NT = 2, e assim sucessivamente até atingir o tempo desejado NT.

Potenciais em pontos internos são obtidos pela forma discreta da equação (5) com $c(\xi)=1$. Introduzindo-se as aproximações geométricas e funcionais (espaciais e temporais):

$$u_{i}^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^{k} p_{j}^{k} - \sum_{j=1}^{NE} \hat{H}_{ij}^{k} u_{j}^{k} \right)$$
(11)

A cada passo de tempo, todos os valores de u_j e p_j no contorno de tempos anteriores são conhecidos.

3. RESULTADOS

3.1. Difusão de Calor Transiente em Meio Infinito Bidimensional

Para empregar a formulação matemática computacional desenvolvida nos tópicos anteriores, apresenta-se um exemplo de difusão térmica em região infinita bidimensional.

Neste exemplo deseja-se estudar o fenômeno da difusão térmica induzida por um fluxo de calor q = 1,0 W/cm² subitamente aplicado em toda a borda de uma cavidade circular de raio unitário situada sobre uma região infinita, que está inicialmente a uma temperatura de O°C. A geometria da região bem como sua aproximação geométrica estão descritas na figura 2. Para esta simulação discretizou-se o contorno da cavidade em 24 elementos constantes, e o domínio tempo em intervalos de tempo $\Delta t = 0,5s$. Adotou-se para o coeficiente de difusividade térmica $\alpha = 1$.

A figura 3 apresenta um esquema ilustrativo das condições de contorno e condição incial do problema. As condições de contorno são do tipo Newman com fluxo prescrito $\overline{p} = 1$ em toda a borda da cavidade e mantida constante durante toda a análise do fenômeno.

Objetiva-se acompanhar a evolução das temperaturas situadas na borda da cavidade e também em alguns pontos internos da região infinita. Como não se dispunha da solução analítica, validou-se os resultados obtidos com as simulações correspondentes geradas pelo Método dos Elementos Finitos. Tendo em vista que o MEF é uma técnica numérica tipicamente de domínio, a região infinita deve ser limitada por um contorno não condutor Wrobel¹.

A figura 4 apresenta duas malhas de Elementos Finitos, a primeira mais grosseira com 112 e a segunda mais refinada com 480 elementos triangulares lineares. Tendo em vista a simetria do problema apenas metade do domínio foi discretizada.

A figura 5 apresenta uma comparação das distribuições de potenciais de temperturas entre MEC e MEF, obtidas na borda da cavidade e nos pontos internos P (3,0; 0,0), Q (5,0; 0,0), R (7,0; 0,0), S (10,0; 00), situados sobre a região infinta ao longo do tempo, utilizando-se para o MEF a malha mais grosseira com 112 elementos triangulares. Infere-se que as soluções obtidas apresentam uma razoável concordância, mas que pode ser melhorada. A superposição parcial das curvas pode ser imputada à pobre discretização do domínio, insuficiente portanto para capturar melhor as condições de contorno do problema.

Buscou-se então fazer uma outra simulação utilizando uma nova malha mais refinada (figura 4.(a)) com 480 elementos triangulares.

A figura 6 apresenta uma nova comparação entre MEC e MEF para os mesmos pontos da simulação anterior. Pode-se observar que agora as curvas apresentam uma boa aderência.



Figura 2 – Cavidade em região infinita (a) Geometria (b) Discretização no MEC.



Figura 3 – Cavidade em região infinita (c) condições de contorno (d) condições iniciais

Note que na solução do MEF para os pontos sobre a borda, nos instantes iniciais da análise, apresentam uma pequena oscilação que pode ser atribuído a utilização de um passo de tempo largo.

Diligenciando uma melhor suavização da curva efetuou-se uma nova simulação pelo MEF adotando-se um $\Delta t = 0,05$ s. Os resultados obtidos estão descritos pela figura 7. Observa-se que agora desaparecem as oscilações e obtém-se uma perfeita aderência entre as soluções integrais do MEC e as soluções do MEF, traduzindo-se por uma concordância muito boa das curvas. Esta simulação vem demonstrar que para se obter o mesmo nível de exatidão do MEC, em problemas de domínio infinito, o MEF necessita uma discrteização mais refinada do domínio tempo, adotando-se intervalos de tempo de ordem 10 vezes menor, tornando o processo menos econômico que o MEC, uma vez que dispenderá mais tempo de execução do procedimento computacional.







(b)

Figura 4 – Discretização do domínio do fluxo de calor pelo MEF (a) 112 elementos triangulares lineares (b) 480 elementos triangulares lineares.



Figura 5 Distribuição de potenciais de temperaturas na borda e pontos internos da região infinita, utilizando a malha mais grosseira com 112 elementos finitos e $\Delta t = 0.5$ s.



Figura 6 Distribuição de potenciais de temperaturas na borda e pontos internos da região infinita, utilizando a malha do MEF mais refinada com 480 elementos finitos e $\Delta t = 0.5$ s.



Figura 7 Distribuição de potenciais de temperaturas na borda e pontos internos da região infinita, utilizando a malha do MEF mais refinada com 480 elementos finitos e $\Delta t = 0.05$ s.

4. CONCLUSÃO

A ênfase do trabalho foi desenvolver a implementação computacional do Método dos Elementos de Contorno com solução fundamental dependente do tempo para modelação de problemas de difusão transiente, e comparação com simulações correspondentes aplicando o Método dos Elementos Finitos

A adoção da solução fundamental transiente, desde que a mesma é dependente do tempo, permite o uso de passos de tempos largos.

A implementação do MEC com solução fundamental transiente representa fielmente o fenômeno da difusão, e bons resultados são alcançados mesmo quando a discretização do contorno não está muito refinada. Para se obter iguais resultados no MEF é necessário que o domínio esteja bem discretizado, o que faz com que se introduza muitas incógnitas, produzindo matrizes esparsas e de ordens maiores.

Em se tratando de problemas de domínio infinito, observa-se que o MEC é mais vantajoso que o MEF tendo em vista que no MEC apenas o contorno é discretizado enquanto naquele abrange todo o domínio, aumentando o tempo de execução computacional.

Infere-se dos exemplos estudados que os dois métodos M.E.C e M.E.F aplicados em simulação do fenômeno físico de difusão térmica apresentam boa concordância.

5. REFERÊNCIAS

- [1] L.C. Wrobel, Z.H. Qiu, H. Power, *Potential and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method*, Ph.D. Thesis, Southampton University, (1981)
- [2] T.C. Effren, Implementação Computacional do Método dos Elementos de Contorno para Solução de Problemas de Difusão, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (1997)
- [3] O.C Zienkiewicz and R.L. Taylor, *The Finite Element Method*, 4 ed., United King, Mc Graw Hill International Editions, Vol. II .,(1991).
- [4] C.A Brebbia, J.C.F Telles and L.C. Wrobel, *Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering*, Springer-Verlag, Berlin, (1984).
- [5] J.C. Jesus, Simulação Computacional para Solução da Equação da Difusão Transiente Bidimensional utilizando o Método dos Elementos Finitos e o Método dos Elementos de Contorno, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. (1999)
- [6] J.C. Jesus, Implementação Computacional pelo Método dos Elementos de Contorno para Solução da Equação da Difusão Transiente 2D utilizando a Solução Fundamental Independente do tempo, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, (2001).
- [7] W. J Mansur, J.H.A Prodanoff, e J.P.S Azevedo, "Métodos dos Elementos de Contorno em Recursos Hídricos". Em: Silva, R.V., Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II, 2 ed., capítulo 1, Porto Alegre, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos,(1996).