

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL PARA PROBLEMAS DE DIFUSÃO TRANSIENTE 2D PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO UTILIZANDO A SOLUÇÃO FUNDAMENTAL INDEPENDENTE DO TEMPO

Júlio C. Jesus^{*}, José P. Azevedo[†],

^{*} Departamento de Engenharia da Ufba
R. Rubens de Oliveira, 483 CEP 44380.000 Cruz das Almas (BA) Brasil
e-mail: julliuscj@bol.com.br:

[†] Programa de Engenharia Civil da Coppe/Ufjf
Caixa Postal 68506 cep 21945-970 Rio de Janeiro – RJ, Brasil fone 021 2562-7834
e-mail: zepaulo@hidro.ufjf.br

Key words: Boundary Element, Transient Diffusion, Numerical Methods

Abstract. *The present work has for objective to present an alternative computational implementation of the Boundary Element Method, with time independent fundamental solution, applied time to Transient heat Diffusion problems. The formulation uses the fundamental solution that is the solution of the Poisson equation for an unitary source applied in the point source ξ_i . The geometric approach uses linear elements with double nodes alternative, and the time discretization it is done by finite differences. The mathematical formulation obtains the boundary integral equation starting from the sentence of weighted residual. The explicit presence of the domain integral is maintained in the equation turning obligatory the discretization of the domain in internal cells. The time marching process starts from a known value of potential, u_0 in the time t_0 . Values of potential u in following time are calculated then, in an enough number of internal points, and they are used as initial condition for the next step of time. In this way, the potentials at internal points are calculated together with boundary the unknowns (potential and derived normal). The results of the obtained numeric solutions are compared with analytical, F.E.M. and time dependent B.E.M solutions to verify the quality of the solutions..*

1 INTRODUÇÃO

A formulação do Método dos Elementos de Contorno apresentada neste trabalho emprega como solução fundamental a solução da equação de Poisson para uma fonte pontual unitária aplicada num ponto fonte ξ de um domínio infinito. Na formulação matemática empregada, a Equação da Difusão Transiente com condições de contorno prescritas e condições iniciais dadas é transformada numa equação integral de contorno para a função incógnita u . O termo de Integral de domínio mantido na equação compeliu a discretização do domínio em células internas, para quais foi adotada a formas triangular. A aproximação geométrica no contorno utiliza elementos isoparamétricos lineares com alternativa de nós duplos. As integrais de domínio são resolvidas por processos numéricos utilizando a quadratura de Hammer e a eliminação da derivada temporal é feita pelo esquema de diferenças finitas.

Apresenta-se de forma original o detalhamento da equação integral matricial, partindo-se da equação integral de contorno obtida por Wrobel¹ e rededuzida aqui, oriunda da aplicação dos pontos fontes nos nós do contorno e pontos internos. A seção resultados apresenta as aplicações do MEC a problemas de simulação de difusão de calor transiente bidimensionais. Um programa em linguagem Fortran foi desenvolvido de modo a possibilitar a realização das simulações. Os resultados das soluções numéricas obtidas comparadas com as soluções analítica, do Método dos Elementos Finitos e do Método dos Elementos de Contorno com solução fundamental dependente do tempo, atestam a qualidade das soluções.

2 MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA DIFUSÃO TRANSIENTE

A equação da difusão transiente como visto em Brebbia et al² é dada por:

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

com condições de contorno dos seguintes tipos:

$$u(x,t) = \bar{u}(x,t) \quad x \in \Gamma_u \quad (2)$$

$$p(x,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial n(x)} = \bar{p}(x,t) \quad x \in \Gamma_p \quad (3)$$

prescreve-se as condições iniciais no tempo t_0 conforme expressão a seguir:

$$u(x,t) = u_0(x,t_0) \quad x \in \Omega \quad (4)$$

2.1 Equação Integral com Solução Fundamental Independente do Tempo.

A equação diferencial (1) é transformada, a partir de uma sentença de resíduos ponderados e um processo limite quando ponto $\xi \rightarrow \Gamma$, numa equação integral de contorno como

$$c(\xi, t)u(\xi, t) + \int_{\Gamma} u(x, t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma} p(x, t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) - k \int_{\Omega} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} u^*(\xi; x) d\Omega \quad (5)$$

2.2 Esquema Numérico de Avanço no Tempo - Diferenças Finitas

A derivada no tempo presente na equação (5) é aproximada pelo quociente da variação dos potenciais pelo intervalo de tempo correspondente, conforme equação (6).

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \quad (6)$$

Substituindo (6) em (5) e agrupando-se convenientemente os termos obtém-se:

$$c(\xi)u(\xi, t + \Delta t) + \int_{\Gamma} u(x, t + \Delta t) p^*(\xi; x) d\Gamma(x) + \frac{k}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Omega = \int_{\Gamma} p(x, t + \Delta t) u^*(\xi; x) d\Gamma(x) + \frac{k}{\Delta t} \int_{\Omega} u(x, t) u^*(\xi; x) d\Omega \quad (7)$$

2.3 Solução Numérica da Equação Integral

Para a solução numérica da equação (7) o contorno Γ é discretizado em elementos isoparamétricos lineares contínuos com alternativa de nós duplos e o domínio Ω será discretizado em células triangulares lineares, conforme pode ser visto pela figura 1.

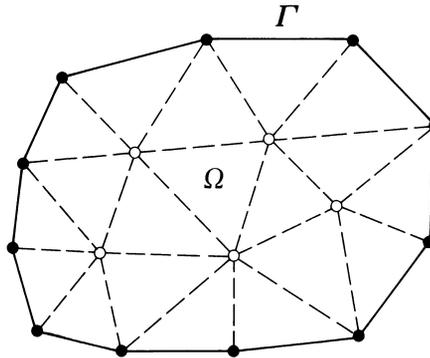


Figura 1 – Discretização simultânea do contorno Γ e do domínio Ω .

A equação integral (7) na forma discretizada, conforme Jesus³, se escreve do seguinte modo:

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \frac{k}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\tilde{\Omega}_r} \phi u^*(\xi; x) \{u^c\}_{t+\Delta t} d\Omega = \tag{8}$$

$$\sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_j} [N_1 \quad N_2] u^*(\xi; x) \begin{Bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} d\Gamma(x) + \frac{k}{\Delta t} \sum_{r=1}^{NC} \int_{\tilde{\Omega}_r} \phi u^*(\xi; x) \{u^c\}_t d\Omega$$

sendo $\{u^c\}$, vetor contendo os valores de potenciais nodais na célula.

N_1 e N_2 são funções de interpolação associadas aos nós 1 e 2 do elemento linear e que são função de uma coordenada adimensional η

NC o número total de células o qual foi discretizado o domínio

r índice que se refere à célula que está sendo integrada

Admitiu-se que dentro de cada célula u variou linearmente com a coordenada intrínseca triangular η ,

$$u = \phi \{u^c\} \tag{9}$$

e usou-se o conjunto de funções de interpolação $\phi = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3]$.

2.4 Cálculo do Integral de Domínio

Para o cálculo do Integral

$$\int_{\tilde{\Omega}_j} \phi u^*(\xi; x) \{u^c\} d\Omega \tag{10}$$

adotou-se funções de interpolação $\phi = [\eta_1 \quad \eta_2 \quad \eta_3]$ que são as próprias coordenadas intrínsecas ou homogêneas η_α definidas numa célula triangular Wrobel⁴.

Para a formação da matriz $[M]$, que é a matriz resultante da integração do domínio, equação (8), cada célula $\tilde{\Omega}_j$ que é integrada contribui com uma submatriz m_{ij} , de ordem (1 x 3) dada por:

$$m_{ij} = \int_{\tilde{\Omega}_j} [\eta_1 u^* \quad \eta_2 u^* \quad \eta_3 u^*] d\Omega \tag{11}$$

(o índice i refere-se ao ponto fonte ; o índice j , à célula)

2.5 Quadratura de Hammer

A integral dada por (11) pode ser calculada numericamente utilizando a Quadratura de Hammer, procedimento este adotado nesta implementação conforme a seguir:

$$m_{ij} = \int_{\tilde{\Omega}_j} \phi u^*(\xi; x) d\Omega = \sum_{\ell=1}^{\ell} \left(\phi u^*(\xi; x) \right)_{\ell} w_{\ell} A_j \quad (12)$$

onde

ℓ representa o número de pontos de integração

w_{ℓ} peso associado a cada ponto

A_j representa a área da célula

As coordenadas intrínsecas ou triangulares que correspondem aos pontos de Hammer e seus respectivos pesos são encontrados em Brebbia et al².

2.6 Detalhamento da Equação Integral na forma Matricial

A equação (8), conforme Jesus³, pode ainda ser escrita como:

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}^{cc} & \tilde{H}^{ci} \\ \tilde{H}^{ic} & \tilde{I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{k}{\Delta t} \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} = \quad (13)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{G}^{cc} & \tilde{0} \\ \tilde{G}^{ic} & \tilde{0} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{P}^c \\ \tilde{0} \end{Bmatrix}_{t+\Delta t} + \frac{k}{\Delta t} \begin{bmatrix} \tilde{M}^{cc} & \tilde{M}^{ci} \\ \tilde{M}^{ic} & \tilde{M}^{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{u}^c \\ \tilde{u}^i \end{Bmatrix}_t$$

Os superíndices c e i designam, respectivamente, o contorno e o domínio. A utilização de duplo superíndice pode ser interpretada do seguinte modo: o primeiro superíndice corresponde à posição do ponto fonte, o segundo, à posição do ponto campo.

A matriz $[H]$ é formada a partir das submatrizes \tilde{H}^{cc} , \tilde{H}^{ci} , \tilde{H}^{ic} , \tilde{I} .

Os coeficientes de influência da submatriz \tilde{H}^{cc} são obtidos da mesma maneira que quando da resolução da equação de Laplace. Resulta da interação entre os pontos fontes do contorno sobre pontos campos do contorno.

Os coeficientes de influência da submatriz \tilde{H}^{ci} são todos nulos. Resulta da interação entre os pontos fontes do contorno sobre pontos campos situados no domínio. Como não estamos integrando o domínio a submatriz \tilde{H}^{ci} é nula.

Os coeficientes de influência da submatriz \tilde{H}^{ic} são obtidos de forma análoga aos obtidos resolvendo-se a equação de Laplace da forma convencional, utilizando-se a mesma sub-rotina de integração no contorno, utilizada para cálculo da submatriz \tilde{H}^{cc} , permutando-se apenas o ponto fonte que agora é ponto interno.

É interessante observar que os procedimentos descritos para gerar a matriz [H] são os mesmos para a matriz [G].

A submatriz identidade \tilde{I} representa os coeficientes $c(\xi)=1$ associados aos pontos internos.

A matriz $[M]$ é formada das submatrizes $\tilde{M}^{cc}, \tilde{M}^{ci}, \tilde{M}^{ic}, \tilde{M}^{ii}$. É uma matriz cheia cujos coeficientes de influência resultam da interação entre os pontos de colocação situados no contorno e domínio sobre pontos campos localizados no contorno e no domínio.

A submatriz \tilde{M}^{cc} resulta da interação entre pontos fontes do contorno sobre pontos campos que são vértices das células pertencentes ao contorno Γ .

A submatriz \tilde{M}^{ci} resulta da interação entre pontos fontes do contorno sobre pontos campos do domínio.

A submatriz \tilde{M}^{ic} resulta da interação entre pontos fontes do domínio sobre pontos campos que são vértices das células pertencentes ao contorno Γ .

A submatriz \tilde{M}^{ii} resulta da interação entre pontos fontes do domínio sobre pontos campos do domínio.

O cálculo dos coeficientes de $[M]$ se faz conforme descrito na seção 2.4 Cálculo do Integral de Domínio

2.7 Solução do Sistema de Equação Integral

Aplicando-se a equação discretizada na forma da equação (8) para todos os nós do contorno e pontos internos, pode-se escrever um sistema de equações com representação matricial do tipo:

$$[H]\{U\}_{J+\Delta t} + \frac{k}{\Delta t} [M]\{U\}_{J+\Delta t} = [G]\{P\}_{J+\Delta t} + \frac{k}{\Delta t} [M]\{U\}_J \quad (14)$$

que pode ser escrita na forma compacta como:

$$[H^*]\{U\}_{J+\Delta t} = [G]\{P\}_{J+\Delta t} + \frac{k}{\Delta t} [M]\{U\}_J \quad (15)$$

Ao se impor as condições de contorno do problema, as colunas correspondentes das matrizes $[H^*]$ e $[G]$ podem trocar de posição, da mesma maneira como se faz na resolução da equação de Laplace. O sistema (15) pode ser então escrito como:

$$[A]\{y\}_{t+\Delta t} = \{F1\}_{t+\Delta t} + \{F2\}_t = \{F\}_{t+\Delta t} \quad (16)$$

onde: $\{y\}$ vetor que contém as incógnitas nos nós funcionais

$\{F\}$ vetor de termos independentes, contém as contribuições dos valores conhecidos do contorno.

Para a solução do sistema de equações dado pela equação (16) o nível de tempo ou período de interesse é dividido em intervalos, e a equação da difusão é resolvida sucessivamente para cada intervalo de tempo discreto, determinando os potenciais finais do intervalo, os quais corresponderão aos valores iniciais na análise do intervalo seguinte”.

3 RESULTADOS

3.1 Difusão Transiente Bidimensional com Fluxo no Contorno

A figura 2 apresenta uma região com geometria quadrada de lado $L = 1,0\text{m}$, na qual se quer estudar o fenômeno difusivo térmico, mantida inicialmente à temperatura de 0°C , isolada apenas na face $y = 1,0$. A temperatura na face $x = 0$ é subitamente elevada para $1,0^\circ\text{C}$, enquanto a face $x = 1,0$ é mantida a 0°C , e na face $y = 0$ prescreve-se um fluxo $p = 1$.

Para esta simulação optou-se por uma discretização espacial com 24 elementos lineares no contorno e 72 células triangulares lineares no domínio, conforme descrito pela figura 2 juntamente com as condições de contorno e condições iniciais. Emprega-se na discretização temporal o intervalo de tempo $\Delta t = 0,01\text{s}$.

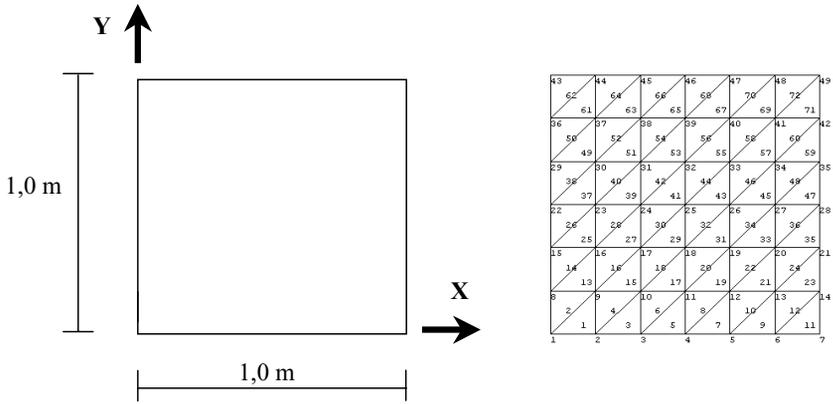
Deseja-se acompanhar a evolução da distribuição de potenciais de temperaturas ao longo do tempo para os pontos $J(0,5;0,5)$ e $K(0,1666;0,5)$, sobre esta região. Este exemplo também foi simulado pelo Método dos Elementos Finitos, quando se utiliza uma discretização espacial de 72 elementos triangulares lineares, e cujos resultados podem ser acompanhados pelos gráficos contido nas figuras 3 e 4.

Observando os diagramas 3 e 4, que se referem aos pontos $J(0,5;0,5)$ e $K(0,1666;0,5)$, respectivamente, inferimos que as curvas correspondentes entre M.E.C e M.E.F. estão superpostas, traduzindo-se pela boa aderência entre elas.

Uma comparação entre as formulações do MEC com solução fundamental independente do tempo e MEC com solução fundamental independente do tempo foi estabelecida para o ponto $J(0,5;0,5)$, e o resultado obtido encontra-se descrito pelo gráfico contido na figura 5.

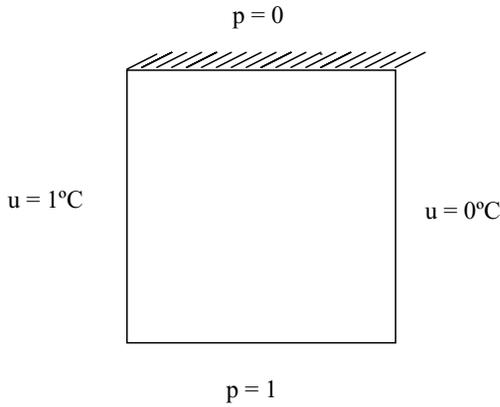
A figura 6 apresenta um mapa de contorno com linhas de níveis e de fluxos.

A figura 7 apresenta um gráfico tridimensional que representa a superfície de potenciais de temperaturas para a região discretizada na figura 2, $\Delta t = 0,01\text{s}$, no tempo $t = 1,0\text{s}$ após aplicação do choque. Observando-se a perspectiva, nota-se as curvas de níveis plotadas a cada nível de temperatura $T = 0,05^\circ\text{C}$, conforme legenda, e os vetores gradientes com grafia de seus respectivos módulos, aplicados nos pontos internos objeto de cálculo. Analisando o espectro do conjunto desses vetores, é possível perceber que eles balizam a trajetória das linhas de fluxo de temperaturas do fenômeno difusivo. Note o ligeiro e compulsório arqueamento da superfície na face $y = 0,0$, onde prescreve-se uma derivada normal $p = 1$.

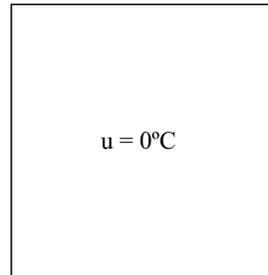


(a) Geometria

(b) Discretização Espacial



(c) Condições de Contorno



(d) Condições Iniciais

Figura. 2. Difusão transitiva bidimensional em região quadrada com fluxo no contorno.

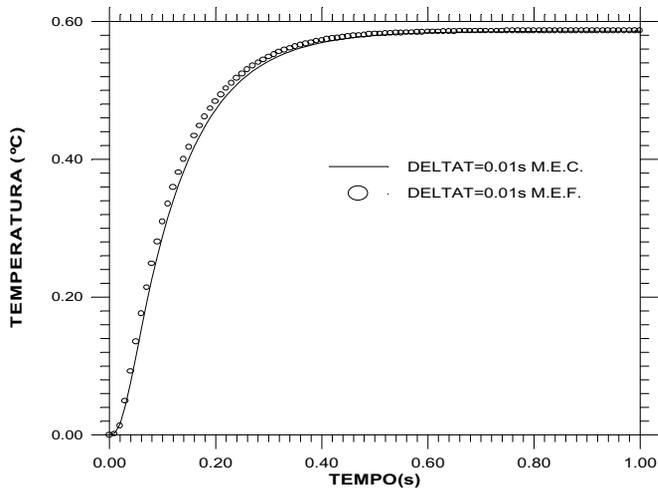


Figura 3 Comparação M.E.C com solução fundamental independente do tempo e M.E.F para o ponto J(0,5;0,5) sobre o quadrado com fluxo $p = 1$ no contorno.

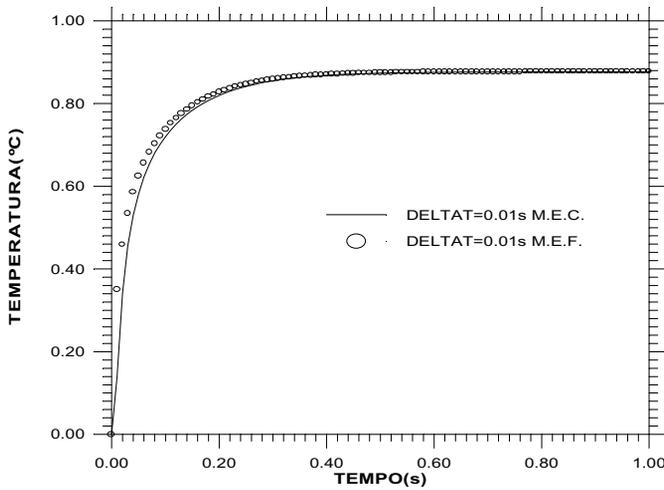


Figura 4 Comparação M.E.C com solução fundamental independente do tempo e M.E.F para o ponto K(0,1666;0,5) sobre o quadrado com fluxo $p = 1$ no contorno.

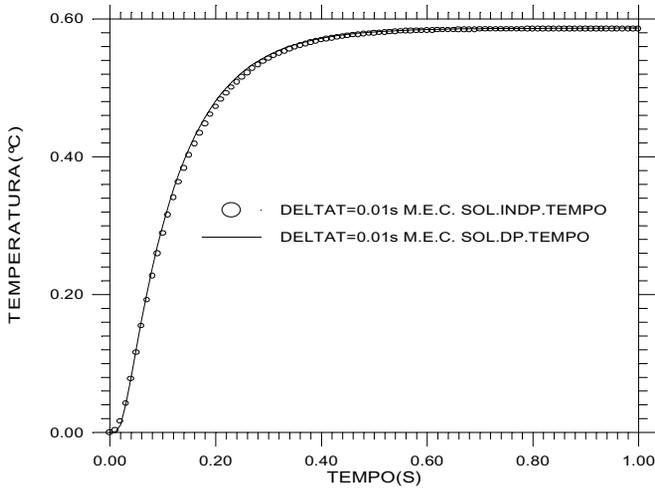


Figura 5 Comparação entre M.E.C com solução fundamental independente do tempo e M.E.C com solução fundamental dependente do tempo para o ponto J(0,5;0,5).

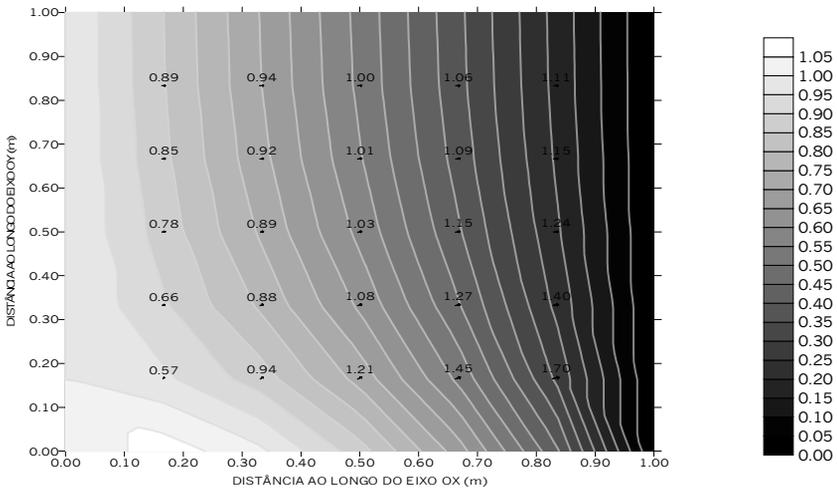


Figura 6 Mapa de contorno com linhas de níveis e de fluxos para a região quadrada de lado $l = 1,0m$ com fluxo prescrito $p = 1$ no contorno, no nível de tempo $t = 1,0s$.

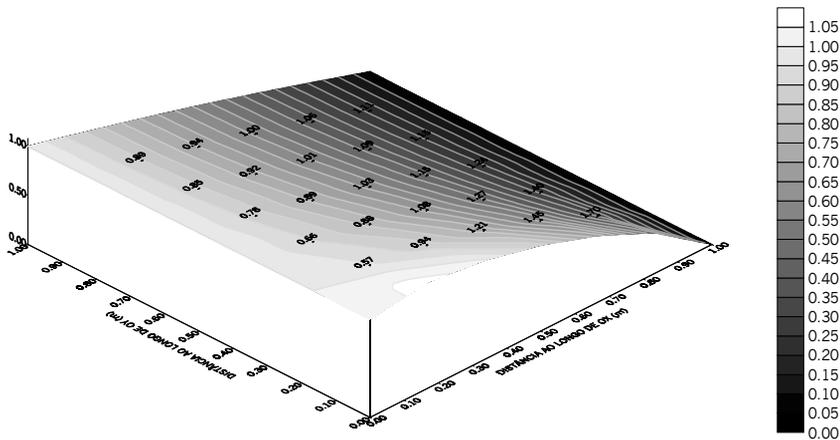


Figura 7 Superfície de potenciais de temperaturas para a região quadrada de lado $L = 1,0$ m, no tempo $t = 1,0$ s após aplicação do choque, pelo MEC com solução fundamental independente do tempo.

3.2 Difusão Transiente Unidimensional

(Exemplo 2) - Para estudar este exemplo de difusão térmica unidimensional, toma-se uma região quadrada de lado $L=6,0$ m, isolada nas faces $y = 0$ e $y = 6$, estando inicialmente à temperatura de 0°C . A temperatura na face $x = 0$ é subitamente elevada para 300°C , enquanto a face $x = 6$ é mantida a 0°C . A geometria e discretização espacial adotada são mostradas na figura 8. A aproximação espacial aplicada consiste em se discretizar o contorno em 24 elementos lineares e o domínio em 72 células triangulares lineares. Diferentes discretizações temporais foram empregadas, utilizando intervalos de tempo $\Delta t = 1,0$ s e $\Delta t = 0,1$ s.

Na figura 9 apresenta-se uma comparação dos perfis numéricos e analíticos de distribuição de potenciais de temperaturas ao longo do eixo do x para a região, utilizando-se um $\Delta t = 1,0$ s. Pode-se observar que inicialmente os valores de potenciais de temperaturas estão afastados dos analíticos e por ocasião de $t=10,0$ s há um maior estreitamento das curvas, culminando com a virtual coincidência por ocasião de tempo $t = 20,0$ s.

A figura 10 representa uma comparação entre os perfis numéricos de distribuição de temperaturas ao longo do eixo do x e os correspondentes às soluções analíticas para cada nível de tempo, adotando-se um $\Delta t = 0,1$ s. Nota-se que nos instantes iniciais ($t=0,1$ s; $0,2$ s e $0,3$ s) pequenas oscilações são observadas e que as curvas numéricas estão afastadas das respectivas analíticas. Comparando-se o gráfico 9 com o 10, pode-se inferir que há uma significativa melhora de resultados

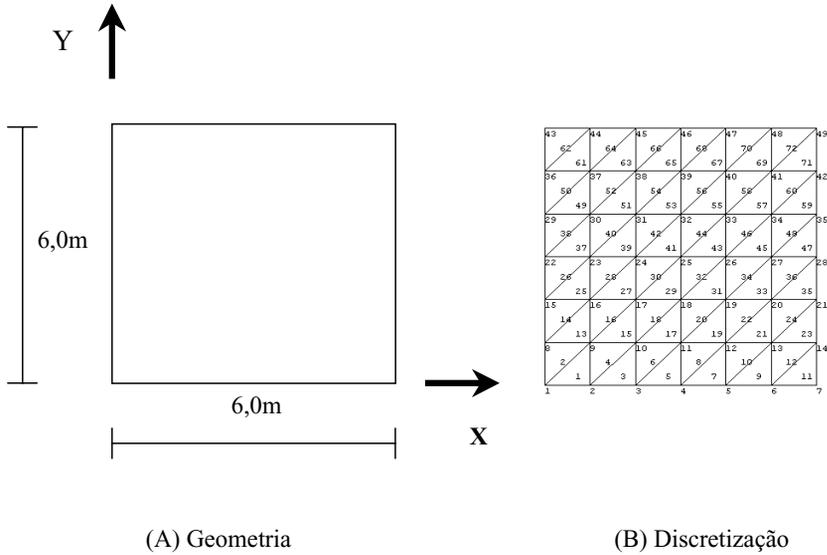


Figura 8 - Simulação de difusão transiente unidimensional

. Por exemplo, para o nível de $t=1,0s$ o perfil numérico adere ao analítico, coisa que não acontece para o correspondente nível de tempo da figura 9. Como esperado, um melhor refinamento da malha temporal corresponde a uma melhor precisão de resultados. Nota-se que a partir da curva $t=0,5s$, os perfis numéricos encontram-se suficientemente próximos dos perfis analíticos, evidenciando um bom resultado do transiente. As oscilações descritas pelos perfis numéricos correspondentes aos tempos iniciais, conforme descrito em Zienkiewicz e Taylor⁵, podem ser imputadas principalmente à abrupta mudança de temperatura (descontinuidade), e são análogas às oscilações presentes nos esquemas numéricos do Método dos Elementos Finitos.

A figura 11 apresenta as curvas de distribuição de potenciais de temperaturas para dois pontos de coordenadas $x = 1,0; y = 1,0$ e $x = 3,0; y = 3,0$. É possível notar que a curva que representa a solução numérica para o ponto $x=1,0$ e $y=1,0$; tem uma taxa de variação nos instantes iniciais mais elevada que a correspondente ao ponto $x=3,0$ e $y=3,0$, traduzindo-se por uma curva mais vertical. Observa-se que as curvas que correspondem às soluções numéricas apresentam-se virtualmente aderentes à solução analítica.

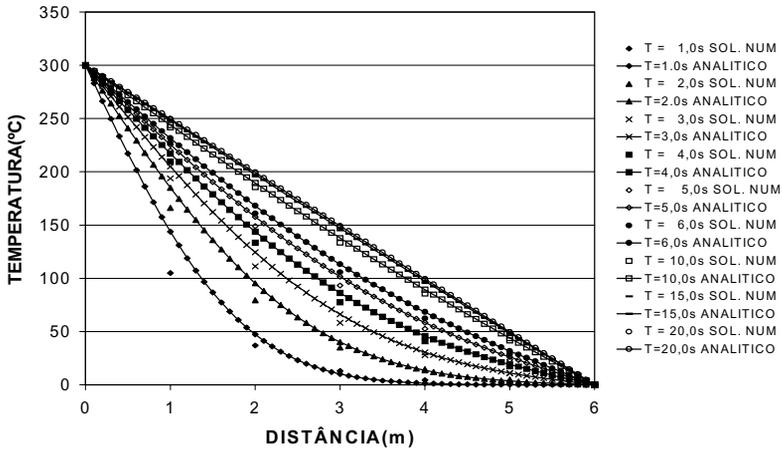


Figura 9 - Comparação de perfis numéricos de distribuição de potenciais de temperaturas e solução analítica

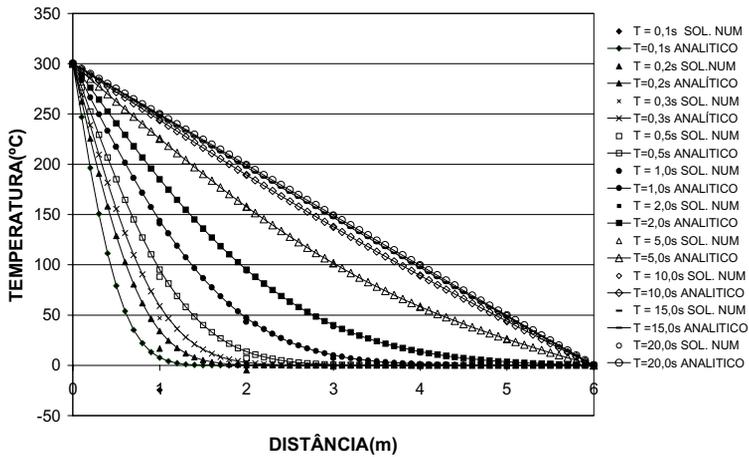


Figura 10 - Comparação de perfis numéricos de distribuição de potenciais de temperaturas e solução analítica, $\Delta t = 0,1s$.

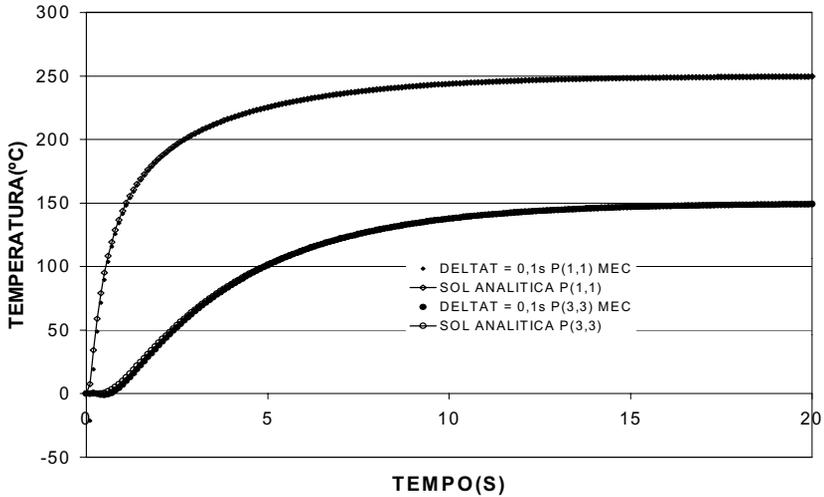


Figura 11 - Distribuição de potenciais de temperaturas ao longo do tempo para os pontos P(1,1) e P(3,3). $\Delta t = 0,1s$.

4. CONCLUSÃO

A implementação do MEC com solução fundamental independente do tempo não logra bons resultados quando se utiliza intervalos de tempos Δt largos. Porém, quando se refina a discretização espacial e adota-se intervalos de tempo discretos Δt suficientemente pequenos os resultados obtidos são satisfatórios.

Inferese dos exemplos estudados que os dois métodos (M.E.C) e (M.E.F) aplicados em simulação do fenómeno físico de difusão térmica, apresentam boa concordância.

A formulação do MEC com solução fundamental dependente do tempo é mais preciso que o MEC com solução fundamental independente do tempo para os tempos iniciais, contudo o avanço no tempo pela convolução leva em conta a contribuição do contorno em tempos anteriores, processando-se um tabuleiro de matrizes até o nível de tempo anterior, exigindo maior tempo computacional e espaço de memória.

A implementação computacional da formulação do MEC com solução fundamental independente do tempo é perfeitamente confiável e nada fica a desejar à formulação do MEC com solução fundamental dependente do tempo.

5. REFERÊNCIAS

- [1] Wrobel, L.C., Qiu, Z.H., Power, H., 1981, *Potential and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method*, Ph.D. Thesis, Southampton University.
- [2] Brebbia, C.A., Telles, J.C.F. and Wrobel, L.C., 1984, *Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering*, Springer-Verlag, Berlin.
- [3] Jesus, J.C., 2001, *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.
- [4] Wrobel., 1989, “Introdução aos Métodos Numéricos”. Em: Silva, R.V., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II*, 2 ed., capítulo 1, Porto Alegre, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.
- [5] Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1991, *The Finite Element Method*, 4 ed., United King, Mc Graw Hill International Editions.