

COMPARAÇÃO DAS SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PARA A EQUAÇÃO DA DIFUSÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL UTILIZANDO O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO E O MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Júlio C. Jesus

José-P. S. Azevedo

Programa de Engenharia Civil da COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro Caixa Postal 68506 – CEP 21945 –970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Resumo. 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. O Método dos Elementos de Contorno é aplicado a problemas transientes, regidos pela equação da difusão em sua forma bidimensional utilizando soluções fundamentais dependentes do tempo, 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. Na implementação do Método dos Elementos Finitos, o domínio espacial foi discretizado em elementos triangulares lineares, e a aproximação no tempo foi feita por Diferenças Finitas. O avanço no tempo por elementos finitos é feito partindo-se de um valor de potencial conhecido no domínio num instante inicial $t=t_0$ com condições de contorno prescritas ao longo do tempo em termos de u e da sua derivada normal ao contorno. Valores de u no tempo $t=t_{0+\Lambda t}$ (instante seguinte) são então computados e usados como valores iniciais para o próximo passo de tempo, e assim sucessivamente. Os resultados das soluções numéricas obtidas pelos dois métodos para os exemplos utilizados atestam a qualidade das duas soluções.

Palavras-chave: Elementos de Contorno, Elementos Finitos, Difusão Transiente.

1.INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos de Contorno (MEC) surgiu no fim da década de 70 e tem-se mostrado útil na análise de diversos problemas de engenharia. Uma das vantagens do método sobre outros processos consiste na redução da quantidade de dados necessários para resolver o problema em estudo, além de em geral apresentar uma melhor precisão numérica dos resultados do que métodos de domínio. O presente trabalho tem por objetivo comparar os resultados obtidos para difusão transiente usando o Método dos Elementos de Contorno (MEC) com resultados obtidos pelo Método dos Elementos Finitos. Para isto foi desenvolvido a partir dos desenvolvimentos anteriores de WROBEL (1981) um programa em linguagem Fortran para tratamento da equação da difusão pelo Método dos Elementos de Contorno, usando aproximação geométrica e temporal com elementos constantes EFFREN(1997). Para a formulação do Método dos Elementos Finitos foi usada aproximação espacial com em elementos finitos triangulares lineares e aproximação no tempo em Diferenças Finitas. Desse modo estabelecemos uma comparação para as soluções numéricas obtidas com os dois métodos

2.MÉTODOS NUMÉRICOS

2.1. Métodos dos Elementos de Contorno para Problemas de Difusão Transiente

A equação integral de contorno pode ser obtida a partir da equação da Difusão Transiente

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

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

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

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

e condições iniciais dadas por:

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

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, WROBEL(1981):

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

$$u^{*}(\underline{\xi},\underline{x};t_{F},t) = \frac{1}{4\pi\alpha\tau} \exp\left[\frac{-r^{2}}{4\alpha\tau}\right] \qquad p^{*}(\underline{\xi},\underline{x};t_{F},t) = \frac{-r\frac{\partial r}{\partial n}}{8\pi\alpha^{2}\tau^{2}} \exp\left[\frac{-r^{2}}{4\alpha\tau}\right] \qquad (6)$$

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:

$$0.5u_{i}^{NT} = \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} \sum_{k=1}^{NT} p^{k}(\underline{x}) \int_{t_{0}^{k}}^{t_{j}^{k}} \alpha u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}; t_{F}, t) dt d\Gamma_{j}(\underline{x}) - \sum_{j=1}^{NE} \int_{\Gamma_{j}} \sum_{k=1}^{NT} u^{k}(\underline{x}) \int_{t_{0}^{k}}^{t_{j}^{k}} \alpha p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}; t_{F}, t) dt d\Gamma(\underline{x})$$

$$(7)$$

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 EFFREN(1997)

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

2.2 Método dos Elementos Finitos aplicado a problemas transientes:

Para formular o Método dos Elementos Finitos a problemas transientes tomamos a equação da difusão bidimensional, conforme apresentado por WROBEL (1989):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \rho c \frac{\partial u}{\partial t}$$
(12)

onde $K_x e K_y$ são as condutividades nas direções x e y, ρ é a massa específica do meio, *c* o seu calor específico e u(x,t) a temperatura, incógnita do problema. As condições de contorno do problema são dadas por:

-Essenciais: $u = \overline{u}$ em Γ_u (13)

- Naturais:
$$K_x \frac{\partial u}{\partial x} n_x + K_y \frac{\partial u}{\partial y} n_y = f(x, y) + h(x, y)u$$
 em Γ_p (14)

Inicialmente, estabelecemos uma equação de resíduos ponderados na forma

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial_y} \left(K_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \right] W_{\Omega}^l d\Omega =
\int_{\Gamma_p} \left(K_x \frac{\partial u}{\partial x} n_x + K_y \frac{\partial u}{\partial y} n_y - f - hu \right) W_{\Omega}^l d\Gamma_p$$
(15)

Integrando-se por partes, empregando-se o teorema da divergência, discretizando o contínuo em elementos, aplicando-se uma função de interpolação (espacial) para $u e u^e$ dentro de cada elemento na forma $u = [N]\{u^e\}$, obtemos a equação discretizada

$$\int_{\Omega_{e}} \left(K_{x} \{\phi_{l}^{e}\}^{T} [N_{x}]^{T} [N_{x}] \{u^{e}\} + K_{y} \{\phi_{l}^{e}\}^{T} [N_{y}]^{T} [N_{y}] \{u^{e}\} + \rho c \{\phi_{l}^{e}\}^{T} [N]^{T} [N] \{u^{e}\} \right) d\Omega - \int_{\Gamma_{p,e}} \left(f \{\phi_{l}^{e}\}^{T} [N]^{T} + h \{\phi_{l}^{e}\}^{T} [N]^{T} [N] \{u^{e}\} \right) d\Gamma_{p,e} = 0$$
(16)

Considerando que os vetores $\{u^e\} \in \{\phi_i^e\}$ contêm apenas valores pontuais, a equação pode ser reescrita na forma:

$$\{\phi_{l}^{e}\}\{[\int_{\Omega_{e}}(K_{x}[N_{x}]^{T}[N_{x}]+K_{y}[N_{y}]^{T}[N_{y}])d\Omega_{e}-\int_{\Gamma_{p,e}}h[N]^{T}[N]d\Gamma_{p,e}]\{u^{e}\}+\int_{\Omega_{e}}\rho c[N]^{T}[N]d\Omega_{e}\{u^{e}\}-\int_{\Gamma_{p,e}}f[N]^{T}d\Gamma_{p,e}\}=0$$
(17)

Chegamos então à seguinte equação matricial para cada elemento:

$$([K^{e}] - [H^{e}])\{u^{e}\} + [M^{e}]\{u^{e}\} = \{P_{f}^{e}\}$$
(18)

Onde $[M^{e}] = \int_{\Omega_{e}} \rho c[N]^{T} [N] d\Omega$ e as outras matrizes e vetores são definidos como na secção 1.4.1. de WROBEL (1989). Adicionando-se as contribuições de todos os elementos chega-se, finalmente, ao sistema global:

$$[C]{U} + [M]{U} = {P_f}$$
(19)

no qual [C] = [K] - [H].

A solução da equação (19), para a variável u, exige um esquema de discretização no tempo com aproximação temporal de u e u^e em cada passo. Faremos esta aproximação pelos métodos de diferenças finitas.

Aproximação de Diferenças Finitas no Tempo.

Neste tipo de aproximação supõe-se uma variação linear para u, em cada ponto x_i , entre os níveis de tempo $t_i \in t_i + \Delta t$ na forma

$$u(x_i, t_i + \theta \Delta t) = \theta u(x_i, t_i + \Delta t) + (1 - \theta) u(x_i, t_i) \ge \theta \ge 0$$
(20)

Com a relação entre θ e $t = t_i + \theta \Delta t$ tem-se para u:

$$u(x_i, t_i + \theta \Delta t) = (u(x_i, t_i + \Delta t) - u(x_i, t_i)) / \Delta t$$
(21)

Levando-se as duas aproximações acima em (19) e rearrumando, obtém-se

$$(M / \Delta t + \theta C) U_{t_i + \Delta t} = [M / \Delta t - (1 - \theta) C] U_{t_i} + (1 - \theta) P_{f, t_i} + \theta P_{f, t_i + \Delta t}$$

$$(22)$$

na qual foi considerada uma variação para P análoga à dada em (20).

Os valores mais comumente adotados para θ são : $\theta = 1/2$;2/3 e , que correspondem aos esquemas de Crank-Nicolson, Galerkin e Totalmente Implícito. Note-se que, neste caso, mesmo para $\theta = 0$ é necessário resolver um sistema de equações algébricas simultâneas a cada passo de tempo, e o termo "explícito" deixa de se ter exatamente o mesmo significado que tinha na solução por diferenças finitas.

3.RESULTADOS

A formulação matemática apresentada foi aplicada a alguns exemplos de difusão de calor bidimensionais em que as soluções numéricas obtidas pelo Método dos Elementos de Contorno, utilizando elementos retilíneos, constantes no espaço e no tempo, e pelo Método dos Elementos Finitos, utilizando elementos triangulares lineares no espaço, e variação linear no tempo, são comparadas com as soluções analíticas através de gráficos e/ou tabelas, ou são corroboradas comparando-se respectivas simulações. Apresentamos dois destes exemplos a seguir nos quais a difusividade térmica é igual a 1 cm/s².

Exemplo 1 - Neste exemplo tomamos uma chapa de geometria retangular medindo 10cm por 8cm, estando inicialmente na tempertura de 0°C, e a submetemos a um choque térmico de 1°C em todo o seu contorno. A região é discretizada em 28 elementos constantes pelo M.E.C. e em 72 elementos triangulares lineares pelo M.E.F. Adotaram-se três discretizações para o tempo: $\Delta t = 0,25$; 0,5 e 1,0s.

Os resultados obtidos para um ponto J(5,0;4,0) situado no centro do retângulo, podem ser vistos na tabela 1 e também na figura1.

	Analítica	Sol.Numérica					
Tempo		∆t=0,25s		∆t=0,50s		∆t=1,0s	
		M.E.F.	M.E.C.	M.E.F.	M.E.C.	M.E.F.	M.E.C.
2.0	0,114	0.0616	0.1062	0.0518	0.1007	0.0541	0.0923
4.0	0,420	0.4111	0.4115	0.3923	0.4034	0.3532	0.3884
6,0	0,646	0.6525	0.6394	0.6388	0.6333	0.6104	0.6210
8.0	0,786	0.7963	0.7816	0.7870	0.7775	0.7681	0.7688
10.0	0.871	0.8807	0.8681	0.8746	0.8654	0.8622	0.8594
12,0	0,922	0,9301	0,9203	0.9262	0.9186	0.9181	0.9145
14,0	0,953	0.9591	0.9519	0.9565	0.9508	0.9513	0.9481
16.0	0.972	0.9760	0.971	0.9744	0.9702	0.9711	0.9685
18,0	0,983	0,9860	0,9825	0.9849	0.820	0.9828	0.9808
20,0	0,990	0.9918	0.9894	0.9911	0.9891	0.9898	0.9884

Tabela 1 - Temperaturas em °C em J(5,0;4,0) para as discretizações utilizadas.



Figura 1 – Distribuição de Potenciais de Temperaturas ao longo do tempo para o ponto J(5,0;4,0)(M.E.F.) - (a) Com condição de potencial inicial nula em $\Omega \in \Gamma$. (b) Com condição inicial para os nós do contorno, igual aos valores prescritos para eles.



Figura 2 – (a) Comparação entre M.E.C(28 elementos) e M.E.F(72 elementos) para o ponto J(5,0;4,0). (b) Superfície de potenciais em t = 1,5s após aplicação do choque.

Exemplo 2 - Para este exemplo, tomamos uma região circular de raio unitário, estando inicialmente a 0°C e a submetemos a choques térmicos, em todo seu contorno.

A discretização espacial usa 112 elementos triangualares lineares (conforme figura 3) e a temporal com passos de tempo $\Delta t = 0,05s \in 0,01s$.



Figura 3 – Difusão transiente em região circular

A variação do perfil de temperatura ao longo do tempo é observada nas figuras 3 e 4 para dois pontos sobre a região: J(0,0;0,875) e K(0,0;0,0). Três situações:

- I) Um choque de temperatura de 100°C em t=0s.
- II) Um choque de temperatura de 50°C em 0,5s e de 100°C em t=0,5s.
- III) Um choque de temperatura de 50°C em t=0s e de 100°C em t=1s.





Figura 5 – Comparação entre os resultados pelo M.E.C(24 elementos) e pelo M.E.F.(112 elementos) para os pontos J e K no Caso II



Figura 6 – Comparação entre os resultados pelo M.E.C.(24 elementos) e pelo M.E.F(112 elementos). para os pontos J e K no Caso III

4.CONCLUSÃO

A iniciativa de utilizar como condição inicial nos pontos pertencentes ao contorno os valores prescritos para eles, conduziu a resultados não muito diferentes dos obtidos considerando nula a condição inicial tanto para os pontos do domínio como para os pontos do contorno, embora um pouco mais afastada da solução analítica, conforme podemos ver na figura 1 contida no exemplo 1. O perfil de temperaturas ao longo do tempo obtido no exemplo 1, quando no tempo inicial a condição inicial foi imposta também no contorno no lugar da condição de contorno, ficou mais próximo da solução analítica do que aquele obtido impondo-se a condição de choque de temperatura no tempo zero. Isto ocorreu pois pela aproximação espacial de elementos finitos ao impormos valores de condições de contorno elas são interpoladas para dentro do domínio, não permitindo a captura do choque. No caso, o MEF interpreta o problema do choque como um problema mais suave no qual tal efeito se reduz à medida que a malha próxima ao contorno fica refinada, de tal forma que o choque no contorno não introduza condições iniciais falsas.

Pode-se dizer que esta característica é uma desvantagem do MEF em relação ao MEC para este tipo de problema, já que no MEC independentemente da discretização, a condição de choque é fielmente representada

Embora os Métodos dos Elementos Finitos e de contorno tenham formulações completamente diferentes, suas aplicações a problemas transientes descritos neste trabalho, através dos exemplos encontrados na literatura, mostraram um boa concordância.

5.REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I.A., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York.
- BREBBIA, C.A., 1978, *The Boundary Element Method for Engineers*, Pentech Press, London.
- BREBBIA, C.A., TELLES, J.C.F. and WROBEL, L.C., 1984, *Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering*, Springer-Verlag, Berlin.
- CARSLAW, H.S. & JAEGER, J. C., 1959, *Condution of Heat in Solids*, Oxford University Press, London.
- EFFREN, T.C.,1997, 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.
- KREYSZIG, E., 1979, Advanced Engineering Mathematics, John-Wiley & Sons, NewYork.
- MANSUR, W. J., PRODANOFF, J.H.A. e AZEVEDO, J.P.S., 1996, "Método dos Elementos de Contorno". Em: Silva, R.V., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II*, 2 ed., capítulo 1, Associação Brasileira de Recursos Hídricos , Porto Alegre.
- SMITH, I. M., 1982, Programming the Finite Element Method with application to Geomechanics, Great Britain, John-Wiley & Sons.
- WROBEL, L. C., 1981, Potencial and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method, Ph.D. Thesis, Southampton University.
- WROBEL, L. C.,1989, "Introdução aos Métodos Numéricos". Em: Silva, R. C, Métodos Numéricos em Recursos Hídricos, capítulo 1, Rio de Janeiro, Brasil, Associação Brasileira de Resursos Hídricos.
- ZIENKIEWICZ, O.C. and TAYLOR, R.L., 1991, *The Finite Element Method*, 4 ed., Mc Graw Hill International Editions.

COMPARISON OF BOUNDARY ELEMENT AND FINITE ELEMENT COMPUTER SIMULATIONS FOR TWO-DIMENSIONAL TRANSIENT DIFFUSION

Abstract: The present work presents results obtained using the Boundary Element Method (BEM) applied to two-dimensional transient diffusion, and shows a comparison with results obtained using finite elements. BEM is applied to transient problems governed by the diffusion equation using time dependent fundamental solutions with constant elements for both space and time. The time-stepping procedure takes into account the potential and its normal derivative at earlier times through influence matrices. Using finite elements the domain was discretized using linear triangular elements with finite differences adopted for time stepping. The time stepping when using the finite element analysis is done starting from the know potential in the domain at t=0 with boundary values (either u its normal derivative) prescribed in time. Values of u in the next time step are then computed and used as initial values for the time step and so on. Results for the numerical solutions obtained using both method for the example shown are in very good agreement.

Key-words: Boundary elements, Diffusion's equation, Transient diffusion.