

IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE DIFUSÃO -ADVECÇÃO TRANSIENTE BIDIMENSIONAL

Marcos, D. S. de Souza

José-Paulo, S. de Azevedo

Programa de Engenharia Civil da COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro

Resumo. No presente trabalho o Método dos Elementos de Contorno é usado para solução numérica da Equação da Difusão -Advecção para duas dimensões, adotando-se soluções fundamentais transientes. A equação integral de contorno é aproximada numa discretização em elementos constantes tanto no espaço quanto no tempo. Os programas desenvolvidos consideram que em cada elemento do contorno é conhecido um valor de potencial ou de fluxo ao longo do tempo. Fazendo uso de um processo de marcha no tempo os valores de potencial e fluxo tornam-se conhecidos em todo o contorno, sendo possível a obtenção dos valores de potencial em pontos internos do domínio para cada intervalo de tempo. A singularidade que surge no primeiro passo de tempo quando o ponto fonte pertence ao elemento campo é removida com um processo de repartição do primeiro nível de tempo e fazendo uso da transformada de Telles no primeiro trecho. Fazemos comparações entre os resultados numéricos e outros presentes na literatura.

Palavras-chave: Métodos Numéricos, Elementos de Contorno, Difusão-Advecção Transiente.

1. INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos de Contorno (MEC) ganhou popularidade com o desenvolvimento da informática (hardware e software) e é um método que apresenta algumas vantagens em relação a outros métodos numéricos para solução de problemas de engenharia, dentre as quais podemos salientar o fato de este considerar que o problema pode ser representado apenas pelo seu contorno, reduzindo assim o número de incógnitas para sua solução e o trabalho de preparação de dados de entrada e de resultados. A Equação da Difusão-Advecção transiente representa a distribuição de potencial em um meio ao longo do tempo, podendo ser aplicada a problemas de diluição de poluente em rios. Desenvolvemos um programa em linguagem Fortran para solução da Equação da Difusão-Advecção Transiente em duas dimensões adotando elementos de contorno constantes no espaço e no tempo. Sendo assim estabelecemos uma analogia entre as soluções numéricas e as analíticas. O sistema de equações é resolvido para cada intervalo de tempo, levando em consideração a influência dos valores obtidos nos passos de tempo anteriores.

2. MÉTODOS NUMÉRICOS

2.1. Método dos Elementos de Contorno Para Problemas de Difusão-Advecção Transiente

A equação integral de contorno pode ser determinada a partir da equação da Difusão-Advecção Transiente expressa em forma adimensional como:

$$-\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - Pe \frac{\partial u(x,t)}{\partial x_1} + \nabla^2 u(x,t) = 0 \qquad \text{em } \Omega$$
(1)

Pe é o número de Peclet (Pe=V.L/K), onde V é a velocidade convectiva na direção de x_1 , L é um comprimento característico da superfície e K é um termo difusivo.

Tendo como condição de contorno:

$$u(\underline{x},t) = \overline{u}(\underline{x},t) \qquad \text{em } \Gamma_u \tag{2}$$

$$\frac{\partial u(\underline{x},t)}{\partial x_i} n_i = \overline{p}(\underline{x},t) \qquad \text{em } \Gamma_p \tag{3}$$

e condições iniciais dadas por: $u(\underline{x},t) = \overline{u}(\underline{x},t_0)$ (4)

Fazendo uso da solução fundamental dependente do tempo, aplicando uma sentença de resíduo ponderados, integrando-se por partes e utilizando um processo de limite quando o ponto interno é levado até o contorno, encontra-se a Equação Integral de Contorno, válida para pontos do contorno ou do domínio:

$$c(\underline{\xi})u(\underline{\xi},t_{f}) = \int_{t_{0}}^{t_{f}} \{ \int_{\Gamma} \left[u^{*}(\underline{\xi},t_{f};x,t)P(x,t) - P^{*}(\underline{\xi},t_{f};x,t)u(\underline{x},t) \right] d\Gamma \} dt$$

$$-Pe \int_{t_{0}}^{t_{f}} \{ \int_{\Gamma} u^{*}(\underline{\xi},t_{f};x,t)P(x,t) - P^{*}(\underline{\xi},t_{f};x,t)u(\underline{x},t) + \int_{\Gamma} dt \} dt$$
(5)

onde: $c(\underline{\xi})$ é a razão entre o ângulo interno no ponto $\xi \in 2\pi$, faz-se necessário a introdução deste coeficiente para identificar a posição do ponto fonte (ξ) , se interno $(c(\underline{\xi})=1)$, se pertencer ao contorno suave $(c(\xi)=0,5)$, ou se está externo ao contorno $(c(\xi)=0)$.

A solução fundamental do tempo $u^*(\xi, t_f; x, t)$ e sua derivada na direção normal p^* no plano tem por expressão:

$$u^{*}(\xi, t_{f}; x, t) = \frac{1}{4\pi(\tau)} \exp\left[-\frac{r^{2}}{4(\tau)}\right] \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_{1}(x) - x_{1}(\xi))\right] \exp\left[-\frac{Pe^{2}}{4}(\tau)\right]$$
(6)

$$P^{*}(\underline{\xi}, t_{f}; \underline{x}, t) = \frac{-r\frac{\partial r}{\partial n}}{8\pi\tau^{2}} \cdot \exp\left[-\frac{r^{2}}{4\tau}\right] \cdot \exp\left[-\frac{Pe}{2}(x_{1}(\underline{x}) - x_{1}(\underline{\xi}))\right] \cdot \exp\left[\frac{-Pe^{2}\tau}{4}\right]$$
(7)

onde: $r \cdot \frac{\partial r}{\partial n} = \left[x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi}) \right] h_1(\underline{x}) + \left[x_2(\underline{x}) - x_2(\underline{\xi}) \right] h_2(\underline{x})$ é a projeção da distância r sobre a

normal ao contorno.

Onde: t é o tempo de aplicação da fonte, t_f é o tempo de observação e $\tau = t_f - t_f$

Discretização com Elementos Constantes no Tempo e no Espaço

No caso transiente, utilizando elementos constantes, na discretização funcional no tempo a consideração que u e p são constantes em cada intervalo de tempo dentro de cada elemento e levando em conta que o contorno é suave em ξ , a equação Integral de Contorno discretizada em forma matricial fica:

$$0,5.u_{i}^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} P_{j}^{k} \int_{\Gamma_{j}} U_{k}^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x}) - \sum_{j=1}^{NE} u_{j}^{k} \int_{\Gamma_{j}} P_{k}^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x}) \right) + \sum_{k=1}^{NT} \left(-\sum_{j=1}^{NE} u_{j}^{k} \int_{\Gamma_{j}} U_{k}^{**}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x}) \right)$$

$$(8)$$

onde: NT = Número de intervalos em que o período de tempo considerado é dividido

 $u_i^{NT} = u(\xi, t_f)$ é o valor de u no tempo t^{NT} no ponto ξ_i .

A expressão matricial resultante é conforme SOUZA(1999)

$$\sum_{k=1}^{NT} [H]^{k} \{u\}^{NT-k+1} = \sum_{k=1}^{NT} [G]^{k} \{p\}^{NT-k+1}$$
(9)

onde as matrizes G_{ij}^k e H_{ij} são expressas por:

$$G_{ij}^{k} = \int_{\Gamma_{j}} U_{k}^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x})$$
(10)

$$\stackrel{\wedge}{H}_{ij}^{k} = \int_{\Gamma_{j}} P_{k}^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x}) + \int_{\Gamma_{j}} \overrightarrow{U}_{k}^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j}(\underline{x})$$
(11)

Nestas matrizes a integral $\int_{\Gamma_j} U_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ e a integral $\int_{\Gamma_j} P_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ são

formadas devido a influência da difusão, ao passo que a $\int_{\Gamma_j} \overrightarrow{U_k}^* (\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_j(\underline{x})$ é formada a partir da influência da advecção.

$$H_{ij}^{k} = \begin{cases} \hat{H}_{ij}^{k} + 0,5 & \text{se } k=1 \text{ e } i=j \end{cases}$$
(12)

$$H_{ij}^{k} = \begin{cases} \hat{A}_{ij}^{k} & \text{nos demais casos} \end{cases}$$
(13)

Aqui:
$$U_k^*(\underline{\xi}, \underline{x}) = \int_{t_{0k}}^{t_{fk}} u^*(\underline{\xi}, t_f; \underline{x}, t) dt$$
 (14)

$$P_k^*(\underline{\xi},\underline{x}) = \int_{t_{0k}}^{t_R} p^*(\underline{\xi},t_f;\underline{x},t)dt$$
(15)

$$\vec{U}_{k}^{*}(\underline{\xi},\underline{x}) = \int_{t_{0k}}^{t_{fk}} Pe.u^{*}(\underline{\xi},t_{f};\underline{x},t)n_{1}(\underline{x},t)dt$$
(16)

Para obter os valores de {u} e {p} nos nós funcionais dos elementos de contorno no tempo NT faz-se necessário um esquema de marcha no tempo a partir de NT=1, uma vez que não conhecemos a priori os valores de u_j e p_j no contorno em todos os tempos. Após determinado os valores de 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 Eq. (9) particularizada para NT=2, e assim sucessivamente até atingir o nível de tempo desejado NT.

$$[H]^{1} \{u\}^{NT} = [G]^{1} \{p\}^{NT} + \{h\}^{NT}$$
(17)

onde: $\{h\}^{NT}$ representa a contribuição da história anterior de $u_i e_j$ em todo o contorno:

$$\{h\}^{NT} = \sum_{k=2}^{NT} \left(\left[G\right]^{k} \left\{p\right\}^{NT-k+1} - \left[H\right]^{k} \left\{u\right\}^{NT-k+1} \right)$$
(18)

O sistema de equações algébricas é obtido aplicando-se as condições de contorno em NT, o que nos leva a:

$$\{A\}^{1}\{x\}^{NT} = \{f\}^{NT} + \{h\}^{NT}$$
(19)

Potenciais em pontos internos, são obtidos pela forma discreta da Eq.(5) com $C(\underline{\xi}) = 1$. Introduzindo–se as aproximações geométricas e funcionais (espaciais e temporais):

$$u_i^{NT} = \sum_{k=1}^{NT} \left(\sum_{j=1}^{NE} G_{ij}^k \cdot P_j^k - \sum_{j=1}^{NE} \hat{H}_{ij}^k \cdot u_j^k \right)$$
(20)

Os resultados obtidos por elementos de contorno constantes ficam tão mais próximos do resultado analítico quanto maior for a discretização do espaço e tempo e menor for o número de Péclet. Deve-se portanto levar sempre em consideração a tabela 1 (LIM et La (1994)), que relaciona estas variáveis.

Tabela 1 - Ordem de grandeza de Δt e o máximo valor para o número de Péclet com $\Delta X=0,1$

$\Delta t(s)$	Pe
10 ⁻²	0 - 100
10 ⁻³	100 - 300
10^{-4}	300 - 1000
10 ⁻⁵	1000 - 2100

Na formulação incondicionalmente estável do M.E.C. (LIM et alli (1994)) o termo $(Pe^2/4)^n(\tau)^n$ tem uma tendência de criar um transbordamento no cálculo para número de Péclet alto. Isto pode ser evitado escolhendo um incremento de tempo adequado.

Para comparar a precisão dos resultados aqui obtidos definimos o erro de cada passo de tempo como:

$$E = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \frac{(u_i - \tilde{u}_i)^2}{N}}$$
(21)

onde: u_i é a solução analítica, \tilde{u}_i é solução aproximada e N é o Número de Nós.

3. INTEGRAÇÃO QUASE – SINGULAR COM TRANSFORMAÇÃO CÚBICA PARA ELEMENTOS CONSTANTES

Com o intuito de se obter maior exatidão em integrações quase singulares, usando o mesmo número de pontos na quadratura de Gauss, bem como resolver o problema de singularidade logarítmica existente em problemas de Difusão – Advecção transiente bidimensional, utilizou-se o esquema de integração proposto por Telles(1987).

Sendo grande a complexidade da integral analítica no tempo da solução fundamental da equação da difusão-advecção transiente bidimensional, num primeiro momento expandimos em série de Taylor a terceira exponencial da solução fundamental Eq. (7),que representa a influência da advecção transiente, e truncamos no terceiro termo devido a influência dos termos seguintes ser muito pequena.

$$U_{CEDO} = \frac{1}{4\pi\tau} \exp\left[\frac{-r^2}{4\tau}\right] \exp\left[-Pe\left(x_1(\underline{x}) - x_1(\underline{\xi})\right)\right] \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{-Pe^2}{4}\right)^n}{n!} (\tau)^n\right]$$
(24)

Posteriormente repartimos o primeiro intervalo de tempo em dois trechos(cedo e tarde). No primeiro trecho utilizamos a transformada cúbica de Telles para retirar a singularidade logarítmica existente; no segundo trecho e nos outros intervalos de tempo a transformada apesar de não ser essencial é usada pois também melhora a precisão além de ser desativada automaticamente onde não melhora os resultados.

Pela análise do comportamento da solução fundamental da equação da Difusão -Advecção transiente bidimensional com a variação do número de Péclet, conclui-se que o tempo de repartição do primeiro intervalo de tempo é variável com o número de Péclet e deve ser menor quanto maior for este.

Neste esquema, a quadratura de Gauss é feita numa coordenada γ que se relaciona com a coordenada natural usual η pela transformação cúbica que concentra mais pontos de integração na região próxima ao ponto fonte.

$$|\eta(\gamma)| = a\gamma^3 + b\gamma^2 + c\gamma + d \tag{23}$$

O jacobiano da transformação é dado por:

$$\left|G(\gamma)\right| = \frac{\partial\eta}{\partial\gamma} = 3a\gamma^2 + 2b\gamma + c \tag{24}$$

As integrações numéricas dos coeficientes H_{ij} e G_{ij} do elemento constante são feitas por quadratura de Gauss na variável γ por mudança da variável original Γ para η e em seguida para γ :

$$H_{ij}^{k} = \int_{\Gamma} p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j} = \int_{-1}^{1} p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) |J| d\eta = \frac{l_{j}}{2} \int_{-1}^{1} p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) G(\gamma) d\gamma = \frac{l_{j}}{2} \sum_{g=1}^{NG} p^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) (\eta(\gamma_{g})) G(\gamma) \omega_{g}$$
(25)

$$G_{ij}^{k} = \int_{\Gamma} u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) d\Gamma_{j} = \int_{-1}^{1} u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) |J| d\eta = \frac{l_{j}}{2} \int_{-1}^{1} u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) |G(\gamma)| d\gamma = \frac{l_{j}}{2} \sum_{g=1}^{NG} u^{*}(\underline{\xi}, \underline{x}) |G(\gamma)| G(\gamma) |\omega_{g}|$$
(26)

Para o elemento constante o jacobiano da transformação de Γ por η do elemento de geometria reta é constante e igual a $l_j/2$; γ_g são as coordenadas de Gauss e ω_g os pesos correspondentes.

Comportamento da Solução Fundamental da Difusão e da Difusão-Advecção Transiente Bidimensional

A fim de melhor entender os fenômenos sendo modelados matematicamente realizamos um estudo destes isoladamente, analisando seu comportamento com a variação de alguns parâmetros.



Figura 1

Figura 2

A figura 1 mostra o gráfico da solução fundamental ao longo do tempo para distâncias variáveis do ponto fonte ao elemento campo. Já a figura 2 contém o gráfico da solução fundamental para tempos de medição variáveis para uma posição fixa.



A figura 3 mostra o gráfico da solução fundamental da equação da Difusão–Advecção ao longo do tempo para diversas distâncias fixas do ponto fonte ao elemento campo. Já a figura 4 contém o gráfico da solução fundamental da Difusão – Advecção para tempos de medição variáveis ao longo do espaço.

Comparação entre os Resultados da Integração Analítica e a Numérica para Difusão Transiente Bidimensional

Como não possuíamos a integração analítica da solução fundamental da equação da Difusão-Advecção transiente bidimensional, comparamos os resultados da integração analítica e a numérica para equação da Difusão, obtendo-se uma boa aproximação, como mostra a tabela abaixo, posteriormente estendemos esse tipo de integração para resolver problemas de Difusão – Advecção, devido a ordem da singularidade ser a mesma da difusão.

	DCC	DCCNR	DCC	DCCNR	DCC	DCCNR
X(m)	U* nível 1	U* nível 1	U* nível 5	U* nível 5	U* nível 10	U* nível 10
0,083	0,948	0,947	1,078	1,078	1,084	1,084
0,25	0,756	0,756	1,044	1,044	1,056	1,056
0,417	0,582	0,582	0,933	0,933	0,946	0,946
0,583	0,439	0,439	0,765	0,765	0,779	0,779
0,75	0,31	0,31	0,541	0,541	0,552	0,552
0,917	0,15	0,15	0,237	0,237	0,242	0,242
1	0	0	0	0	0	0

Tabela 2 – Comparação entre a integração analítica (DCC) e integração numérica (DCCNR).

Obs. DCC é o programa de Difusão com integração analítica, ver EFFREN(1997) DCCNR é o programa de Difusão com integração numérica, ver SOUZA(1999)

4. **RESULTADOS**

A implementação computacional aqui desenvolvida foi aplicada a um exemplo de condução – convecção de calor bidimensional obtido em LIM et alli (1994), onde as soluções numéricas obtidas pelo Método dos Elementos de Contorno, utilizando elementos retilíneos, constantes no tempo e no espaço são comparadas com os resultados analíticos.

Neste exemplo estuda-se a difusão - advecção térmica para uma chapa quadrada de lado unitário. O contorno da região é discretizada em 40 elementos constantes de mesmo comprimento pelo (M.E.C). Utilizou-se um incremento de tempo $\Delta t=0,01$, com discretização espacial de $\Delta X=0,1$, onde a condição inicial é u=0 em t=0 e cujas condições de contorno são as seguintes: u=1, x1=0, 0≤x2≤1; u=0,x1=1, 0≤x2≤1; p=0, x2=0, 0≤x1≤1; p=0, x2=1, 0≤x1≤1 Foram analisados os resultados para duas situações:

 $Pe=20; \Delta t=0,01; \Delta X=0,1; e Pe=5; \Delta t=0,01; \Delta X=0,1.$

A solução analítica correspondente é determinada por:

$$u = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\pi \left(1 - e^{\left(-\left(Pe^{2}/4\right) + n^{2}\pi^{2}\right)t}\right) e^{\left(Pe^{x/2}\right)} seno(n\pi x)}{(Pe^{2}/4) + n^{2}\pi^{2}}$$
(27)

Os valores calculados são comparados com os obtidos analiticamente e mostrados nas figuras 5 e 6, bem como na tabela 3.



Figura 5 - Resultado numérico da temperatura, utilizando número de Péclet = 5.



Figura 6 - Resultado numérico, utilizando número de Péclet = 20.

Tempo(s)	DESVIO PADRÃO
0,01	0,0208
0,03	0,0123
0,05	0,00856
0,07	0,00762
0,09	0,00715

Tabela 3 – Desvio padrão associada a cada passo de tempo para Pe = 5.

5. CONCLUSÕES

A formulação do M.E.C. em duas dimensões para problemas de difusão-advecção transiente foi desenvolvida neste trabalho. A formulação do M.E.C é baseada nas soluções dependentes do tempo . A equação diferencial parcial parabólica governante é reduzida a uma equação integral de contorno evitando a discretização de domínio. O algoritmo implementado é estável e não introduz difusão falsa.

A inclusão dos termos advectivos na equação da difusão transiente bidimensional gerou um sistema de equações similar ao do regime permanente. Foi adotada uma integração no tempo numérica da solução fundamental dada a complexidade da integração analítica. Antes da implementação na difusão-advecção, este esquema foi comparado na equação da difusão com integração analítica e os resultados coincidiram.

O algoritmo do M.E.C. bidimensional é aplicado para resolver um problema bidimensional cuja solução analítica é conhecida da literatura LIM et alli (1994). Observou-se que o M.E.C. provê uma solução bastante precisa quando se obedece às relações da tabela (1).

A integração de Telles, mostrou-se eficaz e eficiente para retirar a singularidade logarítmica existente quando o ponto fonte coincide com o elemento campo no primeiro intervalo de tempo e na redução do número de pontos de Gauss necessários para integração numérica por quadratura de Gauss.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 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.
- LIM, J., CHAN, C.L., and CHANDRA, A ., 1994, "A Bem Analisys For Transient Conduction
 Convection Problems", International Journal Numerical Methods Heat Fluid Flow, v.4, pp.31-45.
- MANSUR, W.J., PRODANOFF, J.H.A. e AZEVEDO, J.P.S., 1995, "Método dos Elementos de Contorno". Em: Silva, R.V., Métodos Numéricos em Recursos Hídricos II, 2 ed., Capítulo 1, Rio de Janeiro, Brasil, Associação Brasileira de Recursos Hídricos.
- SOUZA, M.D.S., 1999, Implementação Computacional do Método dos Elementos de Contorno para Solução Numérica de Problemas de Difusão-Advecção Transiente Bidimensional, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ Rio de Janeiro.
- TELLES, J.C.F., 1987, "A Self Adaptive Coordinate Transformation for the Efficient Evaluation of General Boundary Element Integrals", International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 24, pp. 937-959.
- WROBEL, L. C., 1981, Potencial and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method, Ph.D. Thesis, Southampton University.

COMPUTER IMPLEMENTATION OF THE BOUNDARY ELEMENT FOR NUMERICAL SOLUTION OF TWO-DIMENSIONAL TRANSIENT ADVECTION – DIFUSION PROBLEMS.

Key - Words: Numerical Method, Boundary Elements, Problems Advection - Difusion

In the present work the Boundary Element Method is used for the numerical solution of the Two-dimensional advection-difusion equation employing time-dependent fundamental solutions. The boundary integral equation is approximated by discretizing in space and time using constant elements.

Developed the programs consider that in every boundary element either a potential value or its normal derivative is known over time. We make use of a time stepping process to compute the potential values and its normal derivative along the time. In time level potential values and its normal derivative become known on the boundary, allowing for the computation the potential and its gradient in internal points of the domain.

Singularity the that appears in the first step of time when the point source belongs to the field element is removed analytically. The computer implementation is validated comparing the numerical results with results from the literature.