

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS DOS MÍNIMOS QUADRADOS NA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CONVEÇÃO-DIFUSÃO BIDIMENSIONAL

Estaner Claro Romão

estaner23@yahoo.com.br

João Batista Campos Silva

jbcampos@dem.feis.unesp.br

João Batista Aparecido

jbaparecido@dem.feis.unesp.br

UNESP – Ilha Solteira, Depto. de Eng. Mecânica, Av. Brasil 56, 15385-000, Ilha Solteira – SP, Brasil

Resumo: Escoamentos com convecção dominante resultam em um sistema de equações hiperbólicas o qual quando discretizado leva a matrizes mal condicionadas e aproximações oscilatórias quando usado a formulação pelo Método dos Elementos Finitos de Galerkin. Neste trabalho o Método dos Elementos Finitos dos Mínimos Quadrados é apresentado para um estudo detalhado dos problemas convectivo-difusivos bidimensionais em regime permanente. A equação diferencial de segunda ordem que descreve o fenômeno convectivo-difusivo é transformada em um equivalente sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem o qual é discretizado utilizando a formulação dos elementos finitos dos mínimos quadrados, resultando em um sistema algébrico, simétrico e positivo definido. A performance de tal método é verificada através da solução de alguns problemas teste.

Palavras-chave: Elementos Finitos, Mínimos Quadrados, Galerkin, Convecção-Difusão.

1. INTRODUÇÃO

A partir da década de 50, alguns pesquisadores como Turner et al. (1956), Clough (1960) e Argyris (1963) começaram a utilizar o Método dos Elementos Finitos na sua forma padrão, Método de Galerkin, para a solução de problemas difusivos dominantes nos quais excelentes resultados foram alcançados. Mas grande parte dos problemas de Mecânica dos Fluidos e de Transferência de Calor e Massa são do tipo convectivo dominante. Vários autores apresentaram trabalhos nas últimas décadas demonstrando que a aplicação do Método de Galerkin na solução de problemas convectivos dominantes geram oscilações numéricas, por exemplo Camprub et al. (2000) e Romão et al. (2003), fato esse que só poderia ser evitado com um grande refinamento da malha o que para problemas bi e tridimensional seria computacionalmente e financeiramente caro.

Neste trabalho será apresentada a aplicação do Método dos Mínimos Quadrados na solução numérica de fenômenos convectivos dominantes definidos sobre um domínio bidimensional. A partir das características de apresentar soluções suaves e sua formulação gerar um sistema algébrico de equações simétrico e positivo definido, o objetivo desse trabalho é mostrar que Método dos Mínimos Quadrados pode ser usado com sucesso na solução de fenômenos convectivo dominantes.

Primeiramente, será apresentada a discretização das equações diferenciais parciais que modelam o fenômeno convectivo-difusivo, pelos Métodos de Galerkin e dos Mínimos Quadrados (*LSFEM – Least Square Finite Element Method*) da equação governante do fenômeno bidimensional escrita da forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial u}{\partial y} \right) + A_x \frac{\partial u}{\partial x} + A_y \frac{\partial u}{\partial y} + Bu + f = 0, \quad x \in [a, b] \quad (1)$$

na qual assume-se $k = \text{constante} \neq 0$, $u = u(x, y)$, $A_x = A_x(x, y)$, $A_y = A_y(x, y)$, $B = B(x, y)$, e $f = f(x, y)$ com $x, y \in \mathfrak{R}$ e condições de contorno de primeiro e segundo tipo.

Ao final, será apresentado duas aplicações numéricas e suas respectivas conclusões, uma puramente difusiva em uma geometria cartesiana multiplamente conexa e uma convectiva-difusiva com termo convectivo dominante.

2. DISCRETIZAÇÃO

Neste item será apresentada a discretização espacial da equação (1), pelas formulações de Galerkin e dos Mínimos Quadrados.

2.1 Método de Galerkin

Inicialmente deve-se fazer a discretização no espaço aproximando a função u descrita na Eq. (1) pela aproximação espacial \hat{u} , com segue

$$u \approx \hat{u}^e = \sum_{j=1}^{N_{nós}} N_j \hat{u}_j^e \quad (2)$$

e $N_{nós}$ é o número de nós em cada elemento, N_j são as funções de interpolação e \hat{u}_j^e são as aproximações de u no elemento. Com a aproximação descrita na Eq. (2) e usando a Eq. (1) define-se um resíduo na forma

$$R = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} \right) + A_x \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + A_y \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + B\hat{u} + f \quad (3)$$

Então é possível iniciar a introdução da aproximação pelo Método de Galerkin, na qual é necessário definir a formulação variacional do problema genérico (1), como segue: Deve-se encontrar $\hat{u}^e \in V^e$, $V^e \in C^2(\Omega)$, tal que

$$\int_{\Omega^e} R v_i^e d\Omega = 0, \quad \forall v_i^e \in V^e, \quad i = 1, 2, \dots, N_{nós} \quad (4)$$

no qual $\Omega \subset \mathfrak{R}^2$ é um domínio limitado e fechado.

A Eq. (4) será válida para qualquer $v_i^e = N_i$, $i = 1, 2, \dots, N_{nós}$, ou seja, no Método de Galerkin a função peso é assumida como igual a função de interpolação. Utilizando a Eq. (2), fazendo-se as devidas integrações e algebrismos obtém-se o seguinte sistema linear matricial

$$[K]\{\hat{u}^e\} = \{F\} \quad (5)$$

no qual

$$K_{ij} = \int_{\Omega^e} \left[-k \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} - k \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + A_x \frac{\partial N_i}{\partial x} N_j + A_y \frac{\partial N_i}{\partial y} N_j + B N_i N_j \right] d\Omega \quad (6)$$

$$F_j = - \oint_{\Gamma^e} N_j k \frac{\partial u}{\partial x} \cos \mathbf{q} \, d\Gamma - \oint_{\Gamma^e} N_j k \frac{\partial u}{\partial y} \sin \mathbf{q} \, d\Gamma - \int_{\Omega^e} f N_j \, d\Omega \quad (7)$$

com $i, j = 1, 2, \dots, N_{nós}$. Maiores detalhes sobre a formulação descrita anteriormente podem ser encontrados em Romão (2004).

2.2 Método dos Mínimos Quadrados

A aproximação pelo Método dos Mínimos Quadrados tem como característica inicial a adição de duas variáveis extras no problema através das seguintes equações

$$q_x = -k \frac{\partial u}{\partial x}, \quad q_y = -k \frac{\partial u}{\partial y} \quad (8a-b)$$

com isso o problema deixa de ser representado por uma equação diferencial parcial de segunda ordem para ser representado por uma sistema com três equações diferenciais parciais de primeira ordem. Sendo assim, e substituindo-se as Eqs. (8a-b) na Eq. (1), obtém-se

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} + A_x \frac{\partial u}{\partial x} + A_y \frac{\partial u}{\partial y} + Bu + f = 0, \quad (9)$$

$$q_x + k \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (10)$$

$$q_y + k \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad (11)$$

Assim como no Método de Galerkin deve-se, primeiramente, definir as aproximações espaciais, entretanto no Método dos Mínimos Quadrados utilizado neste trabalho três variáveis são aproximadas, no caso, as variáveis u , q_x e q_y , por \hat{u} , \hat{q}_x e \hat{q}_y , da seguinte maneira

$$u \approx \hat{u}^e = \sum_{j=1}^{N_{nós}} N_j \hat{u}_j^e \quad (12)$$

$$q_x = \hat{q}_x^e = \sum_{j=1}^{N_{nós}} N_j \hat{q}_{x_j}^e \quad (13)$$

$$q_y = \hat{q}_y^e = \sum_{j=1}^{N_{nós}} N_j \hat{q}_{y_j}^e \quad (14)$$

e como \hat{u} , \hat{q}_x e \hat{q}_y são aproximantes de u , q_x e q_y , então a partir das Eqs. (9), (10) e (11) pode-se definir os seguintes resíduos

$$R_1 = -\frac{\partial \hat{q}_x}{\partial x} - \frac{\partial \hat{q}_y}{\partial y} + A_x \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + A_y \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} + B\hat{u} + f \quad (15)$$

$$R_2 = \hat{q}_x + k \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \quad (16)$$

$$R_3 = \hat{q}_y + k \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} \quad (17)$$

A idéia básica do Método dos Mínimos Quadrados é de determinar $\hat{u}^e \in V^e$ que seja um minimizador do funcional (Jiang, 1998)

$$I(R_1, R_2, R_3) = \int_{\Omega^e} R_1^2(x, y) d\Omega + \int_{\Omega^e} R_2^2(x, y) d\Omega + \int_{\Omega^e} R_3^2(x, y) d\Omega \quad (18)$$

ou seja, na primeira variação de \hat{u} , \hat{q}_x e \hat{q}_y resulte

$$\int_{\Omega^e} (\mathbf{d}R_1) R_1 d\Omega + \int_{\Omega^e} (\mathbf{d}R_2) R_2 d\Omega + \int_{\Omega^e} (\mathbf{d}R_3) R_3 d\Omega = 0. \quad (19)$$

Fazendo os devidos algebrismos e as devidas integrações, a Eq. (19) gera o seguinte sistema linear matricial,

$$\begin{bmatrix} A & B & C \\ B^T & D & E \\ C^T & E^T & G \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \hat{u}_i^e \\ \hat{q}_{xi}^e \\ \hat{q}_{yi}^e \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_{1i} \\ F_{2i} \\ F_{3i} \end{Bmatrix}, \quad i = 1, 2, \dots, Nnós, \quad (20)$$

no qual

$$A_{ij} = \int_{\Omega^e} \left\{ \left[A_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + A_y \frac{\partial N_i}{\partial y} + B N_i \right] \times \left[A_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + A_y \frac{\partial N_j}{\partial y} + B N_j \right] + k^2 \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + k^2 \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right\} d\Omega, \quad (21)$$

$$B_{ij} = \int_{\Omega^e} \left\{ \left[A_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + A_y \frac{\partial N_i}{\partial y} + B N_i \right] \times \left[-\frac{\partial N_j}{\partial x} \right] + k \frac{\partial N_i}{\partial x} N_j \right\} d\Omega, \quad (22)$$

$$C_{ij} = \int_{\Omega^e} \left\{ \left[A_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + A_y \frac{\partial N_i}{\partial y} + B N_i \right] \times \left[-\frac{\partial N_j}{\partial y} \right] + k \frac{\partial N_i}{\partial y} N_j \right\} d\Omega, \quad (23)$$

$$D_{ij} = \int_{\Omega^e} \left[\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + N_i N_j \right] d\Omega, \quad (24)$$

$$E_{ij} = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial y} d\Omega, \quad (25)$$

$$G_{ij} = \int_{\Omega^e} \left[\frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + N_i N_j \right] d\Omega, \quad (26)$$

$$F_{1i} = \int_{\Omega^e} \left[A_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + A_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \Phi_3 + B N_i \right] \times (-f) d\Omega, \quad (27)$$

$$F_{2i} = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i}{\partial x} f d\Omega, \quad (28)$$

$$F_{3i} = \int_{\Omega^e} \frac{\partial N_i}{\partial y} f d\Omega, \quad (29)$$

com $i, j = 1, \dots, N$ nós.

3. APLICAÇÕES NUMÉRICAS

Todos os coeficientes envolvidos nos sistemas matriciais (5) e (20), respectivamente de Galerkin e dos Mínimos Quadrados (LSFEM), estão descritos em função das coordenadas espaciais x e y . Neste trabalho será utilizado o Método de Quadratura de Gauss (Reddy, 1993) para calcular as integrais encontradas nos sistemas matriciais, para isso, é necessário reescrever as integrais em termos das coordenadas de referência \mathbf{x} e \mathbf{h} ($-1 \leq \mathbf{x}, \mathbf{h} \leq 1$), conforme descrito em Romão (2004). As funções de interpolação em coordenadas de referência para elementos quadrilaterais e triangulares podem ser encontradas em Dhatt et al. (1984).

Logo a seguir, serão apresentadas duas aplicações numéricas: A primeira trata de um problema puramente difusivo e a segunda trata-se de um problema convectivo-difusivo com termos convectivo dominantes, com o objetivo de analisar a performance dos Métodos de Galerkin e dos Mínimos Quadrados para três tipos de malhas previamente determinadas.

Aplicação 1: Difusão Pura em domínio multiplamente conexo

Equação Governante: $\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = 0$

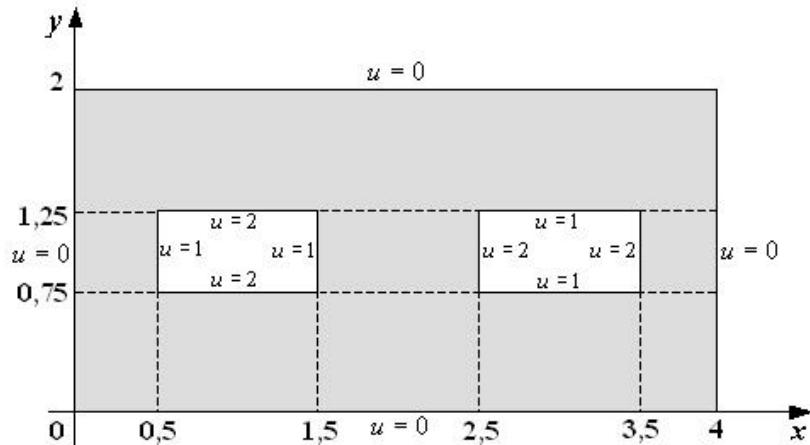


Figura 1 – Geometria cartesiana multiplamente conexa com condições de contorno de primeiro tipo

Esta aplicação tem como objetivo apresentar um caso de difusão pura em uma geometria cartesiana multiplamente conexa. Os resultados numéricos são comparados com a solução pelo software Ansys. A malha utilizada nesta aplicação possui 966 elementos triangulares com seis nós cada, Fig. 2.

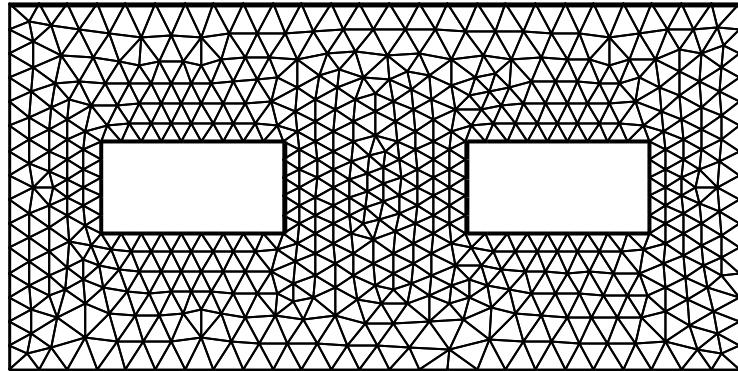


Figura 2 – Malha com 966 elementos triangulares

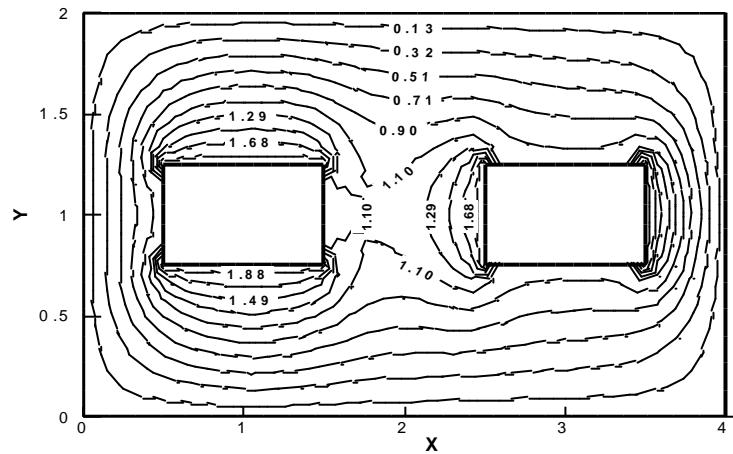


Figura 3 – Solução numérica de $u(x, y)$ pelo software Ansys.

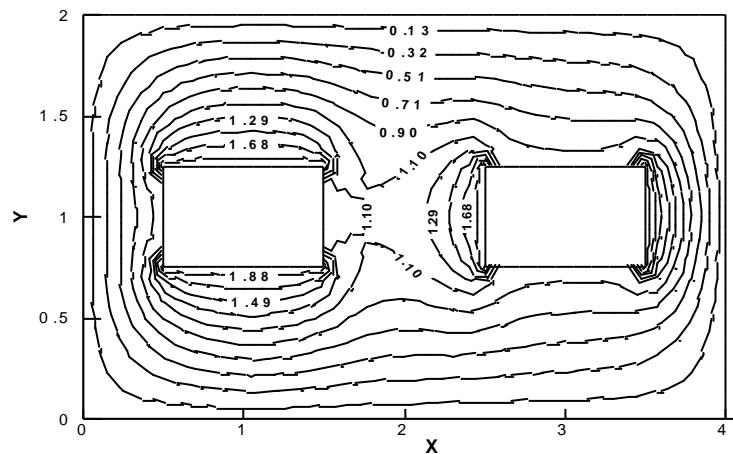


Figura 4 – Solução numérica de $u(x, y)$ pelo Método de Galerkin.

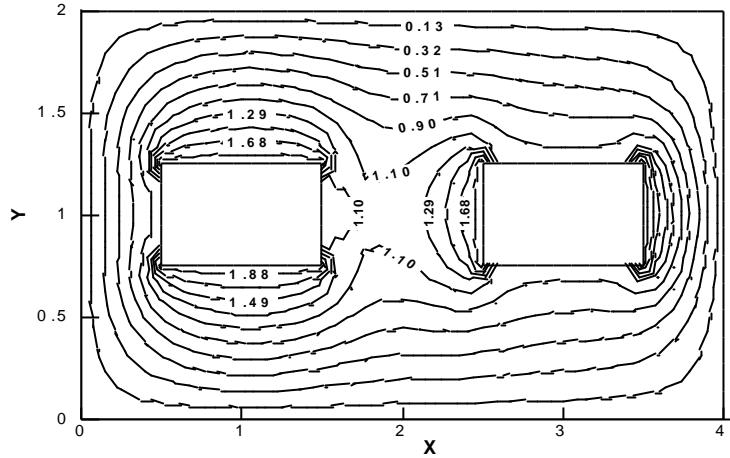


Figura 5 – Solução Numérica de $u(x, y)$ pelo Método dos Mínimos Quadrados.

Os resultados numéricos apresentados nas Figs. 4 e 5 comparados com a solução pelo Ansys, Fig. 3, mostram que os Métodos de Galerkin e dos Mínimos Quadrados apresentam resultados com boa concordância para a geometria cartesiana multiplamente conexa.

Aplicação 2: Convecção-Difusão em domínio simplesmente conexo

Essa aplicação tem como principal objetivo avaliar a melhoria na solução numérica de um problema convectivo-difusivo o quanto mais refina-se a malha. Para tal análise serão adotadas malhas com 100, 900 e 2500 elementos quadrilaterais com oito nós cada, sendo idênticos todos os elementos adotados em cada malha.

Equação Governante: $\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} + 30 \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} - 100 \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = 0$

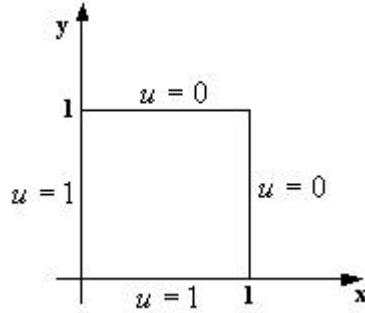


Figura 6 – Geometria cartesiana simplesmente conexa com condições de contorno de primeiro tipo.

Analizando a Fig. 7, nota-se que o Método de Galerkin apresenta grandes oscilações numéricas, principalmente nas regiões dos contornos $x = 0$ e $y = 0$, oscilações essas suavizadas pelo Método dos Mínimos Quadrados. Vale ressaltar que a malha com 100 elementos triangulares apresenta um $h = 0,1\sqrt{2} \approx 0,1414$, no qual h é a maior aresta do elemento.

Para a malha com 900 elementos, Fig. 8, percebe-se que as oscilações numéricas dos dois métodos começam a diminuir, tendo como maior destaque a solução numérica pelo Método dos Mínimos Quadrados que já não apresenta oscilações numéricas. Por fim, para a malha com 2500 elementos, Fig. 9, os Métodos de Galerkin ainda não fornece bons resultados, enquanto isso, é notável que o Método dos Mínimos Quadrados melhora expressivamente seus resultados o quanto mais refinada é a malha.

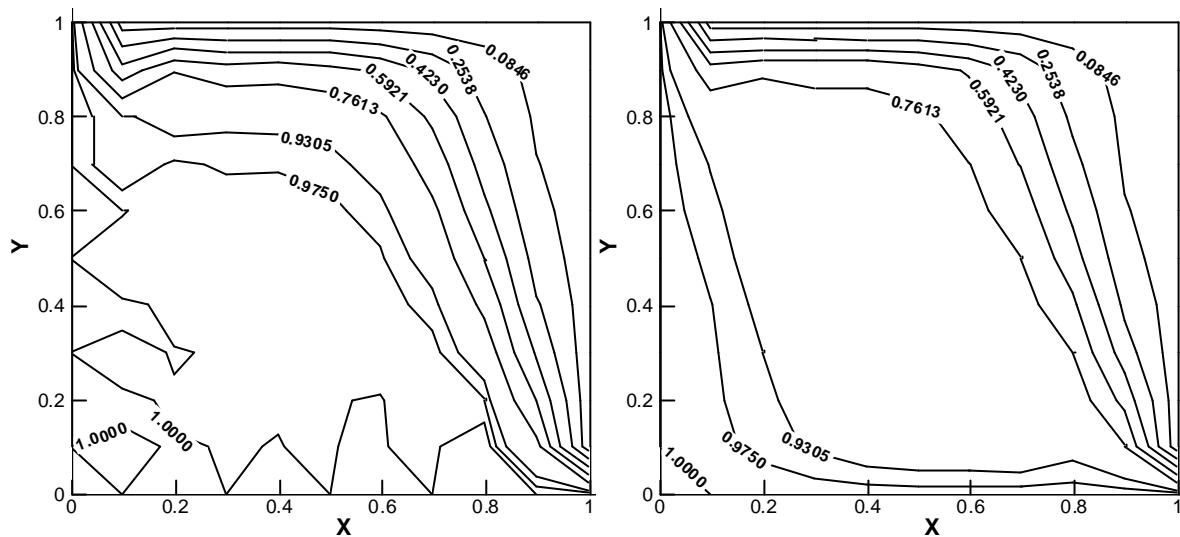


Figura 7a-b – Soluções numéricas de $u(x, y)$ obtidas pelos Método de Galerkin (à esquerda) e dos Mínimos Quadrados (à direita) para uma malha com 100 elementos quadrilaterais com 8 nós cada.

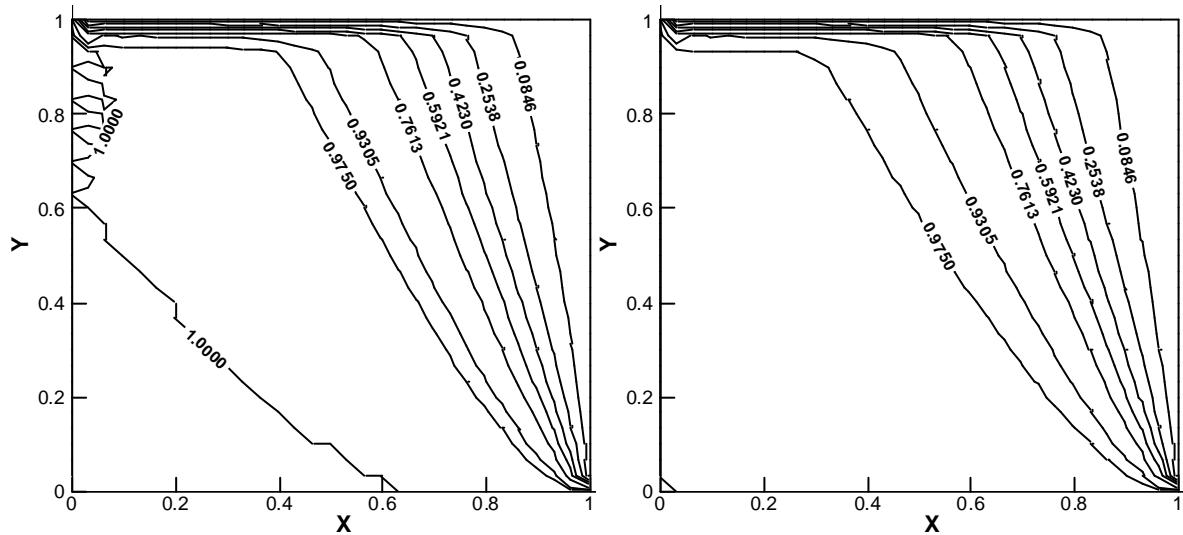


Figura 8a-b – Soluções numéricas de $u(x, y)$ obtidas pelos Método de Galerkin (à esquerda) e dos Mínimos Quadrados (à direita) para uma malha com 900 elementos quadrilaterais com 8 nós cada.

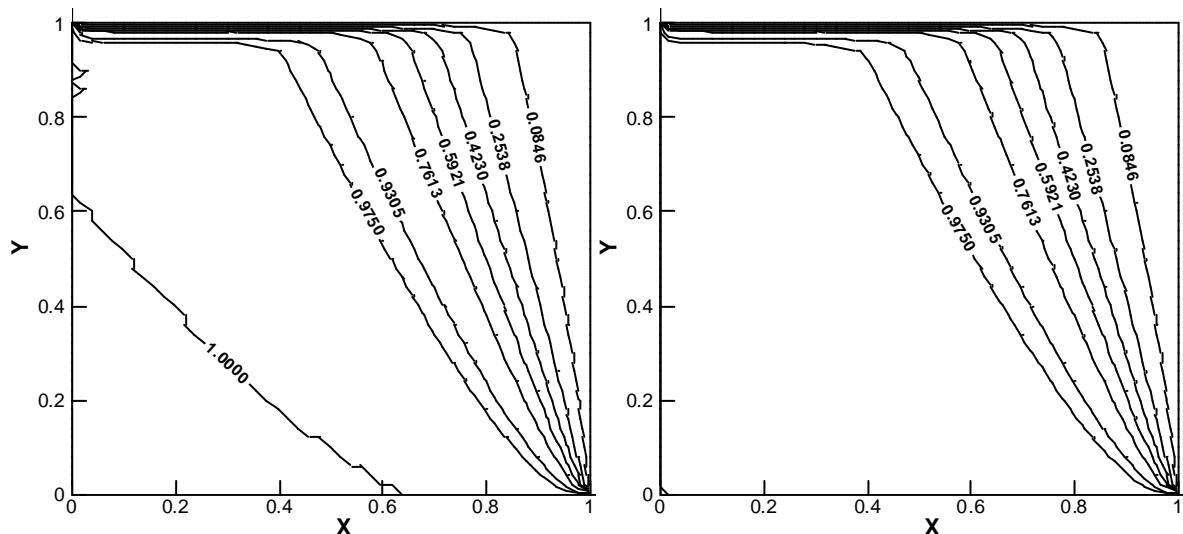


Figura 9a-b – Soluções numéricas de $u(x, y)$ obtidas pelos Método de Galerkin (à esquerda) e dos Mínimos Quadrados (à direita) para uma malha com 2500 elementos quadrilaterais com 8 nós cada.

4. CONCLUSÕES

O Método dos Mínimos Quadrados mostrou-se uma poderosa ferramenta na solução de problemas convectivo-difusivos. Quando o mesmo foi aplicado a um problema puramente difusivo em uma geometria cartesiana multiplamente conexa apresentou resultados semelhantes aos apresentados pelo Método de Galerkin e aos resultados obtidos usando o software Ansys. Entretanto, quando o Método dos Mínimos Quadrados foi aplicado ao problema convectivo dominante proposto, apresentou resultados mais suaves até mesmo para uma malha com 100 elementos, considerada grosseira. Para a mesma malha o Método de Galerkin apresentou grandes oscilações, as quais não foram totalmente suavizadas com o refinamento da malha. Para o mesmo refinamento da malha citado, 900 e 2500 elementos, o Método dos Mínimos Quadrados apresentou excelentes resultados.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem os apoios da Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP, da Fundação de Desenvolvimento da Unesp – FUNDUNESP e da CAPES para realização deste trabalho.

6. REFERÊNCIAS

- Argyris, J. H., (1963), "Recent Advances in Matrix Methods of Structural Analysis", Pergamon Press, Elmsford, New York.
- Camprub, N., Colominas, I., Navarrina, F. and Casteleiro, M., (2000), 'Galerkin, Least-Squares and G.L.S. numerical approaches for convective-diffusive transport problems in engineering', European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering.
- Clough, R. W., (1960) "The Finite Element Method in Plane Stress Analysis", Proceedings of 2nd Conf. on Electronic Computation, American Society of Civil Engineers, Pittsburgh, Penn., 345-378.
- Dhatt, G. & Touzot, G., (1984), The Finite Element Method Displayed, John Wiley & Sons.
- Jiang, Bo-nan, (1998), The Least-Squares Finite Element Method. Theory and Applications in Computational Fluid Dynamics and Electromagnetics, Springer.
- Reddy, J. N., (1993), An Introduction to the Finite Element Method, Second Edition, McGraw-Hill.
- Romão, E. C., Aparecido J. B., Silva, J. B. C., (2003), Variantes do Método de Elementos Finitos para solução de problemas Convectivo-Difusivos Unidimensionais, XXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, code CIL198-31.
- Romão, E. C., (2004), "Variantes do Método dos Elementos Finitos para Solução de Fenômenos Convectivo-Difusivos Bidimensional", Dissertação de Mestrado, UNESP-FEIS.
- Turner, M. J., Clough, R. W., Martin, H. C., and Topp, L. P., (1956), "Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures", J. Aeron. Sci., 23, nº 9, 805-823.

APPLICATION OF LEAST SQUARES FINITE ELEMENT METHOD FOR SOLVING THE CONVECTION -DIFFUSION EQUATION

Estaner Claro Romão

estaner23@yahoo.com.br

João Batista Campos Silva

jbcampos@dem.feis.unesp.br

João Batista Aparecido

jbaparecido@dem.feis.unesp.br

UNESP – Ilha Solteira, Depto. de Eng. Mecânica, Av. Brasil 56, 15385-000, Ilha Solteira – SP, Brasil

Abstract: Convection dominated flows result in a hyperbolic system of equations which leads to ill-conditioned matrices and oscillatory approximations when using the classical Galerkin finite element formulation. In this work a Least-Square Finite Element Method, LSFEM, is presented for a detailed study of steady-state convective-diffusive problems in two dimensions. The second-order differential equation describing the convection-diffusion phenomenon is transformed into an equivalent system of first-order partial differential equations which is discretized by a least-squares finite element formulation, resulting in a algebraic system, symmetrical and positive defined. The performance of such LSFEM is verified by solving some test problems.

Keywords: Finite Element, Least Squares, Galerkin, Convection-Difusion.