

Uma Solução para Problemas Convectivos com o Galerkin-FEM Convencional

Renato Barbieri

Pontifícia Universidade Católica do Paraná – PUCPR
Departamento de Engenharia Mecânica
Rua Imaculada Conceição, 1155 – Cx. Postal: 16210
Cep: 80215-901 - Curitiba – Pr
e-mail:barbieri@rla01.pucpr.br tel: (041) 3301321

Resumo. Uma das maneiras utilizadas atualmente com o método de Elementos Finitos para a solução de problemas convectivos é empregando técnicas de ortogonalização do resíduo que permitem tornar e/ou explorar as características de problemas auto-adjuntos e, conseqüentemente, a matriz oriunda da discretização torna-se simétrica. Outra alternativa também bastante utilizada é a ortogonalização dos resíduos com funções-pêso especiais (formulação Petrov-Galerkin, por exemplo). Neste trabalho usa-se o método de Galerkin convencional para formular um elemento finito e solucionar problemas convectivos. Embora a matriz final não apresente simetria, mostra-se numericamente que os seus autovalores são todos reais e que o caráter oscilatório da solução aproximada para número de Peclet (local) grande é praticamente eliminado.

Palavras-chave: Método de Galerkin, Problemas Convectivos, Elementos Finitos.

1. Introdução

Para análise unidimensional, alguns problemas condutivos-convectivos bem postos são governados pelas equações:

$$k \frac{d^2 u}{dx^2} + A \frac{du}{dx} + Q(x) = 0 \quad \forall x \in \Omega \quad (1)$$

onde Ω é o domínio, $u(x)$ é a variável de interesse, k e A são constantes e $Q(x)$ é a excitação externa. Para problemas bem postos acrescenta-se à Eq.(1) as devidas condições de contorno (Dirichlet, Neuman e/ou Cauchy-Robin).

Usando a discretização de elementos finitos e a ortogonalização do resíduo da equação diferencial com o método de Galerkin, a equação aproximada para um nó interno i de uma malha homogênea com elementos de comprimento h pode ser escrita como sendo:

$$K_{ij} u_j + f_i = 0 \quad (2)$$

onde

$$K_{ij} = \int_0^h \phi_i A \frac{d\phi_j}{dx} dx + \int_0^h \frac{d\phi_i}{dx} k \frac{d\phi_j}{dx} dx \quad e \quad (3)$$

$$f_i = \int_0^h \phi_i Q(x) dx + \text{termos no contorno} \quad (4)$$

sendo que $\phi_i(x) \in$ ao conjunto formado pelas funções de interpolação.

Para elementos finitos lineares, Zienkiewicz & Taylor (1991) mostram para malhas homogêneas que quando k , A e $Q(x)$ são constantes, a equação associada ao nó i pode ser expressa na seguinte forma:

$$(-Pe - 1)u_{i-1} + 2u_i + (Pe - 1)u_{i+1} + \frac{Qh^2}{k} = 0 \quad (5)$$

onde h é o comprimento do elemento e $Pe = Ah/2k$ é o número de *Peclet* local (ou da malha). Ainda, a equação acima é *idêntica* à obtida com o método de diferenças finitas central para as aproximações:

$$\frac{du}{dx} \cong \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \quad (6)$$

e

$$\frac{d^2u}{dx^2} \cong \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (7)$$

O sistema de equações algébricas oriundo destas discretizações é obviamente *não simétrico* e em complemento, sua precisão numérica deteriora bastante com o acréscimo do número de *Peclet* local, Pe ; Zienkiewicz & Taylor (1991). De fato, a formulação acima além de apresentar resultados ruins para *Peclet* local grande, apresenta também caráter oscilatório para $Pe > 1$.

Este caráter oscilatório foi estudado por diversos autores e um detalhamento pode ser visto no trabalho de Fletcher (1991). Analisando um problema específico (primeiro exemplo numérico deste trabalho), este autor mostra que o caráter oscilatório da solução esta associado à presença de autovalores complexos e que para $Pe \rightarrow \infty$ os autovalores desta formulação são puramente imaginários. Diversos esquemas de discretização e comparação de resultados numéricos são mostrados, tais como: diferença central, upwind, DuFort-Frankel, Lax-Wendroff, Crank-Nicolson, Three-Level fully implicit e outros.

Um esquema interessante para solucionar este problema e obter a super-convergência nodal de $u(x)$ foi apresentado por Guymon et al (1970). Nesta formulação o resíduo originado da aproximação de elementos finitos é ortogonalizado utilizando como *função peso* o produto $\phi_i(x)w^*$, onde w^* é uma função pertencente ao *núcleo do operador adjunto*. Esta operação além de proporcionar superconvergência nodal também torna a matriz final simétrica e, conseqüentemente, todos os seus autovalores são reais. Zienkiewicz & Taylor (1991) salientam que os sistemas de equações resultantes desta formulação são mal-acondicionados numericamente para Pe local grandes. Outro inconveniente deste método é a sua utilização em problemas não lineares, como a equação de Burgers por exemplo, ou problemas com coeficientes variáveis onde obter uma solução w^* pode ser tão complicado quanto obter a própria solução do problema.

Uma outra alternativa para obter soluções com super-convergência nodal é com o uso do método de Petrov-Galerkin, onde a *função peso* utilizada na ortogonalização do resíduo é diferente das funções de interpolação. Para elementos lineares de comprimento h a *função peso* pode ser tomada como sendo $w=\phi_i(x)+\alpha w^*$, onde o valor da integral de domínio (elemento) de w^* deve ser igual a $\pm h/2$, Zienkiewicz & Taylor (1991).

Diversos outros métodos de solução deste problema podem ser encontrados na literatura. Entretanto, neste trabalho, propõe-se a solução do problema com uso do método de *Galerkin convencional* com a seleção apropriada das funções de interpolação.

2. A Escolha das Funções de Interpolação

O método de Galerkin aproxima a solução de um conjunto de equações diferenciais e suas condições de contorno (problema bem posto) substituindo a solução analítica por uma série de funções de interpolação (aproximação) que a princípio satisfazem pelo menos as condições de Dirichlet do problema.

O passo crucial para a implementação do método de Galerkin é a escolha do conjunto das funções de interpolação. Entretanto, se o conjunto destas funções é completo, linearmente independente e cada uma satisfaz as condições de contorno de Dirichlet do problema, o resíduo tende a zero quando o número de funções tende a infinito e as condições de Neumann também são satisfeitas.

Esta mesma idéia é utilizada para gerar o conjunto das funções de interpolação para o elemento finito proposto. Aproxima-se a variável de interesse, $u(x)$, no domínio do elemento pela seguinte expressão:

$$u(x) \cong u^*(x) = \phi_i(\xi)q_i \quad i = 1,2,3,\dots,16 \quad (8)$$

onde $\phi_i(\xi) \in$ ao conjunto das funções de interpolação definidas no sistema de referência local do elemento, $-1 \leq \xi \leq 1$; veja Fig.1. As componentes q_i são os *deslocamentos generalizados* do elemento.

$$\phi_1(\xi) = \frac{1-\xi}{2} \quad (9.1)$$

$$\phi_2(\xi) = (1+\xi) \times \phi_1(\xi) \quad (9.2)$$

$$\phi_3(\xi) = (1+\xi) \times \phi_1^2(\xi) \quad \dots \quad (9.3)$$

$$\phi_8(\xi) = (1+\xi) \times \phi_1^7(\xi) \quad (9.4)$$

$$\phi_9(\xi) = \frac{1+\xi}{2} \quad (9.5)$$

$$\phi_{10}(\xi) = (1-\xi) \times \phi_9(\xi) \quad (9.6)$$

$$\phi_{11}(\xi) = (1-\xi) \times \phi_9^2(\xi) \quad \dots \quad (9.7)$$

$$\phi_{16}(\xi) = (1-\xi) \times \phi_9^7(\xi) \quad (9.8)$$

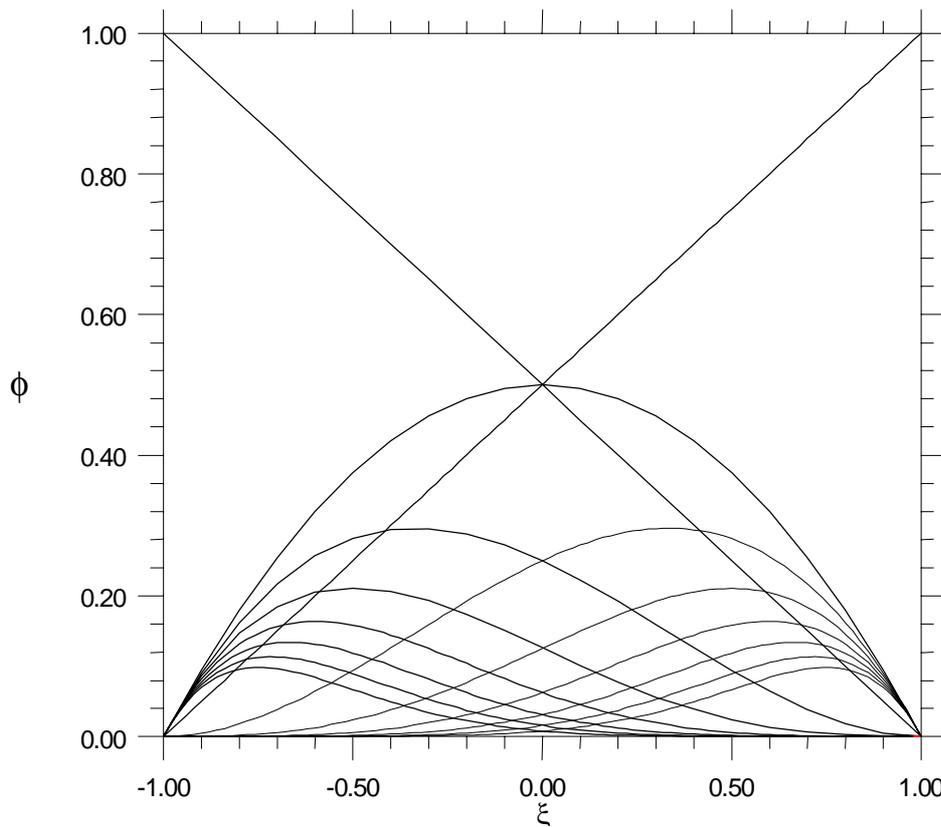


Fig.1-Funções de Interpolação.

Nesta aproximação, q_1 e q_9 representam os valores nodais da variável $u(x)$ nos nós 1 e 2 do elemento. Os outros *deslocamentos generalizados* apenas influenciam o valor da função no domínio do elemento (excluindo a fronteira), pois todas as outras funções de interpolação se anulam no contorno. Embora sejam definidos 8 *deslocamentos nodais generalizados*, note que à esquerda do nó todas as primeiras derivadas das funções de interpolação de ordem superior são negativas e à direita positivas e de *igual valor*, o que permite o pós-processamento nodal da solução bastante fácil.

Outra característica observada nesta aproximação é que o conjunto das funções de interpolação *não é ortogonal*.

3. Exemplos Numéricos

Exemplo 1: Encontrar a solução $u(x)$ para a equação diferencial,

$$k \frac{d^2 u}{dx^2} + A \frac{du}{dx} = 0 \quad \forall 0 \leq x \leq 1.$$

com condições de contorno $u(0)=0$ e $u(1)=1$. A solução analítica está mostrada na Fig.2 e sua expressão matemática é :

$$u(x) = \frac{1 - e^{Ax/k}}{1 - e^{A/k}} \quad \text{e} \quad \frac{du(x)}{dx} = - \frac{Ae^{Ax/k}}{k(1 - e^{A/k})}.$$

Este problema foi resolvido com malha homogênea de 10 elementos e com malha não uniforme com os nós dispostos segundo uma pg com razão igual a 0.65. Os resultados para $u(x)$ e sua derivada estão mostrados nas tabelas que seguem, sendo que para a derivada $du(x)/dx$ os valores ilustrados são calculados para o elemento à esquerda e à direita do nó com o objetivo de verificar a existência de saltos (jump).

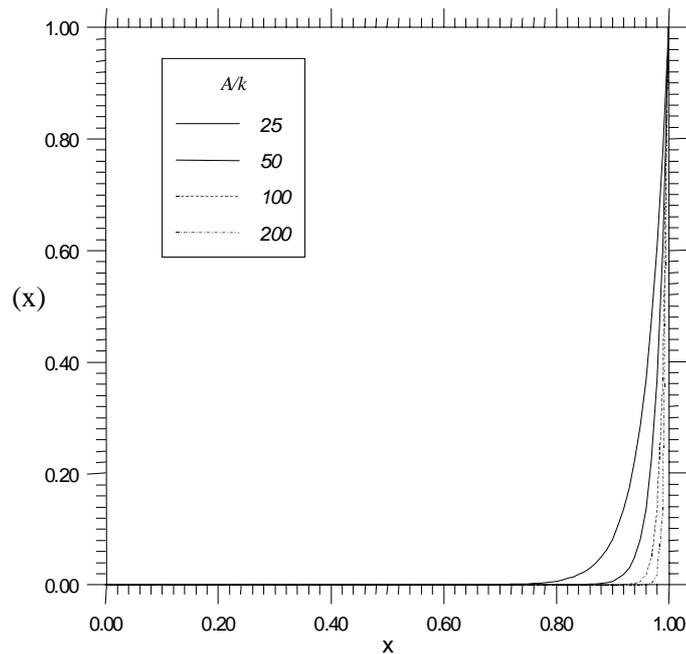


Fig.2- Solução Analítica para diversos valores de A/k .

Tabela 1. Análise de $u(x)$ para malha homogênea. $A=100$, $k=1$ e $Pe=5$.

x	$u(x)$ Analítico	$u(x)$ Numérico	Erro = Anal.–Num.
0.0	.000000000000E+00	.888622508910E-47	-.888622508910E-47
0.1	.819364061639E-39	.421183844138E-13	-.421183844138E-13
0.2	.180485138413E-34	-.221600514809E-13	.221600514809E-13
0.3	.397544973591E-30	-.112724644434E-12	.112724644434E-12
0.4	.875651076270E-26	.752805225564E-13	-.752805225564E-13
0.5	.192874984796E-21	.319818245960E-13	-.319818244032E-13
0.6	.424835425529E-17	-.339587617286E-12	.339591865640E-12
0.7	.935762296884E-13	.297613785468E-12	-.204037555779E-12
0.8	.206115362244E-08	.245325072109E-08	-.392097098649E-09
0.9	.453999297625E-04	.495313620436E-04	-.413143228110E-05
1.0	.100000000000E+01	.100000000000E+01	.000000000000E+00

Tabela 2. Análise de $u(x)$ para malha variável. $A=100$, $k=1$ e Pe =variável

x	$u(x)$ Analítico	$u(x)$ Numérico	Erro = Anal.–Num.
.000000000000E+00	.000000000000E+00	.186693716042E-46	-.186693716042E-46
.354776261757E+00	.951237775869E-28	-.257172006263E-13	.257172006263E-13
.585380831899E+00	.984732610351E-18	-.243352451998E-13	.243362299324E-13
.735273802491E+00	.318483781119E-11	.333880357669E-11	-.153965765501E-12
.832704233376E+00	.542546755814E-07	.542555606274E-07	-.885045957507E-12
.896034013451E+00	.305361706245E-04	.305361708456E-04	-.221099146749E-12
.937198370500E+00	.187309534847E-02	.187309534846E-02	.102825734039E-13
.963955202582E+00	.272015929837E-01	.272015929837E-01	.181729631343E-13
.981347143435E+00	.154851969095E+00	.154851969095E+00	.165423230669E-13
.992651904990E+00	.479596812964E+00	.479596812964E+00	.810462807976E-14
.100000000000E+01	.100000000000E+01	.100000000000E+01	.000000000000E+00

A análise dos autovalores (método QR) da matriz resultante de elementos finitos foi realizada com o objetivo de detectar autovalores imaginários, que acusam a presença do caráter oscilatório da solução numérica. Mesmo para $A=1000$ e $k=1$, verificou-se que todos os autovalores são reais e que todos autovalores não nulos estão associados aos graus de liberdade de *deslocamento* nodal (q_1 e q_9). Estes cálculos foram realizados com malha homogênea, Pe (local)=50; e malha com nós dispostos em progressão geométrica, pg, 177.315 $\leq Pe$ (local) \leq 3.675.

Efetuada a mesma análise de autovalores para as formulações com elementos *lagrangeanos* verificou-se que o aparecimento de autovalores complexos para elementos de baixa ordem estão de acordo com os valores ilustrados na Tab.6. Entretanto, para elementos de ordem elevada, 8 por exemplo, os autovalores complexos aparecem mesmo para Pe muito baixo, o que não significa um caráter *fortemente* oscilatório da solução numérica para este tipo de elemento. O caráter oscilatório esta presente para Pe baixo, porem a amplitude da oscilação é bastante reduzida.

Na realidade, o caráter *fortemente* oscilatório para o elemento *lagrangeano* de oitava ordem só aparece para Pe alto, 10 por exemplo.

Tabela 3. Análise de du/dx para malha homogênea. $A=100$, $k=1$ e $Pe=5$.

x	du/dx Analítico	du/dx Numérico	Erro = Anal.–Num.
0.0	.372007597602E-41	-.122270193970E-09	.122270193970E-09
0.1	.819401262399E-37	-.939621713769E-10	.939621713769E-10
		-.123691279441E-08	.123691279441E-08
0.2	.180485138785E-32	.707295555458E-09	-.707295555458E-09
		-.613880501987E-09	.613880501987E-09
0.3	.397544973591E-28	.566227953414E-09	-.566227953414E-09
		.152022039401E-08	-.152022039401E-08
0.4	.875651076270E-24	-.926185350636E-09	.926185350636E-09
		-.998625182547E-09	.998625182547E-09
0.5	.192874984796E-19	.554798873509E-09	-.554798873490E-09
		-.307909431285E-08	.307909431287E-08
0.6	.424835425529E-15	.247391085395E-08	-.247391042912E-08
		.658855014990E-08	-.658854972506E-08
0.7	.935762296884E-11	-.331661098585E-08	.332596860882E-08
		-.398438260163E-08	.399374022460E-08
0.8	.206115362244E-06	.246200787757E-06	-.400854255130E-07
		-.138977661663E-04	.141038815286E-04
0.9	.453999297625E-02	.493898987354E-02	-.398996897292E-03
		-.280628979144E+00	.285168972120E+00
1.0	.100000000000E+03	.997144178851E+02	.285582114949E+00

Tabela 4. Análise de du/dx para malha variável. $A=100$, $k=1$ e Pe =variável.

x	du/dx Analítico	du/dx Numérico	Erro = Anal.–Num.
.000000000000E+00	.372007597602E-41	-.103581587751E-10	.103581587751E-10
.354776261757E+00	.951237775869E-26	.399139055141E-11	-.399139055141E-11
		.967226299053E-12	-.967226299053E-12
.585380831899E+00	.984732610351E-16	.472843986188E-11	-.472834138862E-11
		.811972711290E-11	-.811962863964E-11
.735273802491E+00	.318483781119E-09	.331038807477E-09	-.125550263580E-10
		-.134240281113E-07	.137425118924E-07
.832704233376E+00	.542546755814E-05	.541178406810E-05	.136834900410E-07
		.453618745055E-05	.889280107585E-06
.896034013451E+00	.305361706245E-02	.305272774150E-02	.889320949751E-06
		.304924752384E-02	.436953861736E-05
.937198370500E+00	.187309534847E+00	.187305165248E+00	.436959921327E-05
		.187305699978E+00	.383486958380E-05
.963955202582E+00	.272015929837E+01	.272015546354E+01	.383482872479E-05
		.272015822474E+01	.107363655388E-05
.981347143435E+00	.154851969095E+02	.154851958358E+02	.107367179325E-05
		.154851967678E+02	.141640555285E-06
.992651904990E+00	.479596812964E+02	.479596811549E+02	.141507904061E-06
		.479596812851E+02	.113173115324E-07
.100000000000E+01	.100000000000E+03	.999999999886E+02	.114403064799E-07

Tabela 5. Análise de du/dx para malha variável. A=200, k=1 e Pe=variável.

x	du/dx Analítico	du/dx Numérico	Erro = Anal.-Num.
.000000000000E+00	.276779305347E-84	.358035823211E-10	-.358035823211E-10
.354776261757E+00	.180970661248E-53	-.833596386363E-11 .761968266261E-11	.833596386363E-11 -.761968266261E-11
.585380831899E+00	.193939662778E-33	-.104619438113E-10 .184532389369E-10	.104619438113E-10 -.184532389369E-10
.735273802491E+00	.202863837672E-20	-.165304853139E-10 -.703073155250E-10	.165304853159E-10 .703073155271E-10
.832704233376E+00	.588713964489E-12	.200535976713E-10 -.137871403183E-08	-.194648837068E-10 .137930274579E-08
.896034013451E+00	.186491543282E-06	.185387730445E-06 -.614022709122E-06	.110381283749E-08 .800514252404E-06
.937198370500E+00	.701697236896E-03	.700896913026E-03 .685000707723E-03	.800323869216E-06 .166965291731E-04
.963955202582E+00	.147985332170E+00	.147968635013E+00 .147946879745E+00	.166971571625E-04 .384524258402E-04
.981347143435E+00	.479582646650E+01	.479578801419E+01 .479580607284E+01	.384523073551E-04 .203936592849E-04
.992651904990E+00	.460026206011E+02	.460026002074E+02 .460026165061E+02	.203937203835E-04 .409498247933E-05
.100000000000E+01	.200000000000E+03	.199999995905E+03	.409500773912E-05

Tabela.6- Pe Local para Oscilação forte na Solução Numérica.

Elemento Lagrangeano	Pe (aproximado)
Linear	1,000
Quadrático	1,525
Cúbico	2,500
4 ^a -ordem	3,075

$h=0,1$ (homogêneo) e $k=1,0$.

Com relação à derivada de $u(x)$, os elementos *lagrangeanos* apresentam saltos (jumps) nos nós internos da malha, mesmo para o elemento *lagrangeano* de ordem 8. A descontinuidade da derivada aumenta com o aumento do número de Peclet.

Exemplo 2: Encontrar a solução no tempo para o problema:

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + A \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} + k \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = 0$$

com condições iniciais $T(0,0)=1$ e $T(1,0)=0$. As condições para qualquer instante de tempo são $T(0,t)=1$ e $T(1,t)=0$.

Para o cálculo de $T(x,t)$ foi utilizada malha homogênea com 10 elementos.

Após a discretização de elementos finitos e uso do método de Galerkin convencional, a equação diferencial acima pode ser reescrita como sendo:

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}\mathbf{q} = \mathbf{0}$$

onde $\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}$, \mathbf{C} e \mathbf{K} são as matrizes características de elementos finitos, ver detalhes em Zienckiewicz & Taylor (1991).

A solução para no instante de tempo $n+1$ é obtida com processo iterativo descrito por Zienckiewicz & Taylor (1991) em função do passo no tempo, Δt , e do parâmetro Θ que define o esquema de integração no tempo (Crank-Nicolson=1/2, Euler=0, Galerkin=2/3 e Backward difference=1). A comparação da convergência destes métodos também é feita com detalhes por estes autores.

A relação recursiva para obter a solução no instante de tempo t^{n+1} é dada por:

$$\mathbf{q}_{n+1} = [\mathbf{C} + \Delta t \Theta \mathbf{K}]^{-1} [(\mathbf{C} - \Delta t(1 - \Theta) \mathbf{K}) \mathbf{q}_n]$$

onde \mathbf{q}_{n+1} é o vetor formado com o valor nodal das coordenadas generalizadas no instante de tempo t^{n+1} e \mathbf{q}_n no instante t^n .

Resultados para $k=1$ e $A=50$ estão mostrados na Fig.3 e foram obtidos com $\Delta t=0.001$ e $\Theta=2/3$.

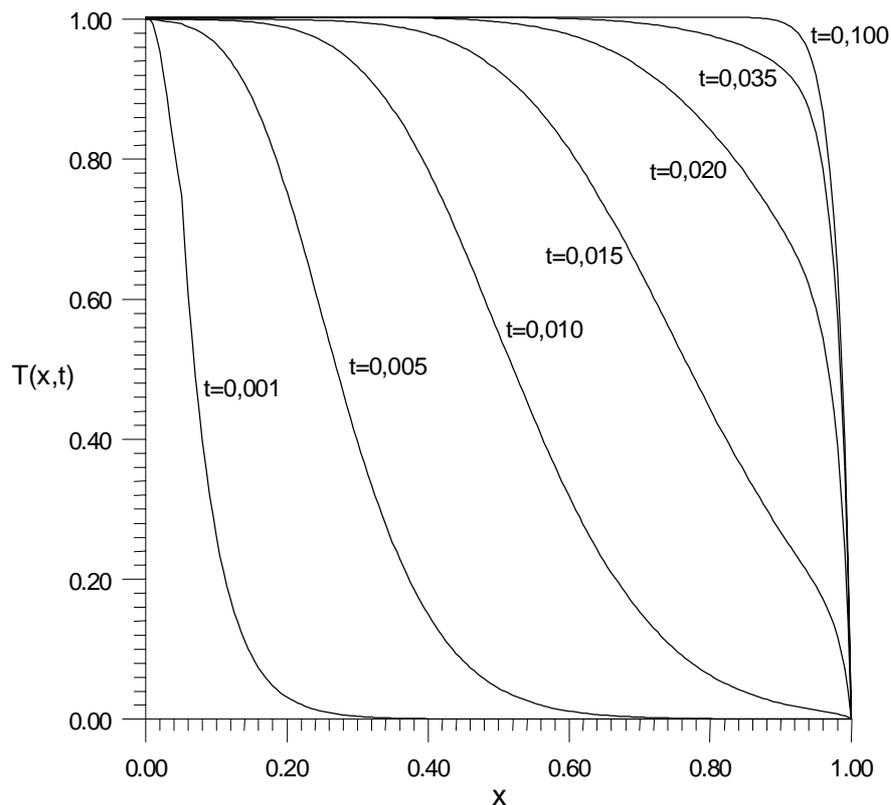


Fig.3- Solução T(x,t) para t variável com malha homogênea de 10 elementos.

4. Conclusão

O elemento finito proposto apresenta boas características de convergência nodal de deslocamento. O erro nodal da variável de interesse é *praticamente* nulo nos nós. Nas Tabs. 1 e 2 nota-se este erro cresce percentualmente para valores muito próximos de zero (da ordem de 10^{-8} para malha homogênea e 10^{-11} para malha não homogênea). Entretanto, jump significativo aparece no fluxo para problemas com Pe grande e malhas homogêneas, Tab.3. Porém, na Tab.4, nota-se melhora sensível deste comportamento quando a malha é não homogênea, indicando que o *refino h* é relevante para a análise de fluxo nestes casos.

A ortogonalização do resíduo com o método de Galerkin convencional explica estes resultados. O erro é ponderado na média e a convergência de fluxo é alcançada com o aumento de termos na série.

Vale a pena salientar que todos os cálculos foram efetuados em dupla precisão e com métodos clássicos de solução de sistema de equações lineares.

A mesma técnica pode ser aplicada para problemas bidimensionais e tridimensionais. O inconveniente é o alto número de graus de liberdade do elemento e a forma final do sistema matricial que não é simétrico.

5. Referências.

- C.A.J. Fletcher. 1991 (3^a reimpressão 1997). Computational Techniques for Fluid Dynamics 1 – Fundamental and General Techniques. 2^a Ed. Springer Seris in Computational Physics. Springer.
- G.L.Guymon, V.H. Scott and L.R. Hermann. 1970. A general Numerical solution of the two dimensional diffusion-convection equation by the finite element method. Water Resouces Res., 6, 1611-17.
- O.C.Zienkiewicz & R.L.Taylor. 1991. The Finite Element Method. Vol.2 – Solid and Fluid Mechanics Dynamics and Non-Linearity. 4^a Ed. Mc Graw-Hill Book Company Europe (UK).

CONVENTIONAL GALERKIN FINITE ELEMENT FOR CONVECTION DIFFUSION EQUATION SOLUTION

Abstract. Using the Finite Element Method, the convection diffusion equation are commonly solved using weighted residual techniques that allows to turn or explore the characteristics of self-adjoint problems and, consequently, the properties of final symmetric matrix. Another alternative used is the ortogonalization of the residues with special weight function (formulation Petrov-Galerkin, for example). In this work the conventional Galerkin method is used to formulate a finite element and to solve the unidimensional convection diffusion equation. Although the final algebraic equations are non-symmetric, numerical applications shown that its eigenvalues are real and that the oscillatory character of the approached solution are practically eliminated when the mesh Peclet (Pe) number increase.

Keywords: Convection-Diffusion, Finite Element Method