

APLICAÇÃO DE ESQUEMAS W_p DE TERCEIRA ORDEM EM ANÁLISES TRANSIENTES PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Vicente Luiz Scalon

Depto. de Engenharia Mecânica, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: scalon@feb.unesp.br

Alcides Padilha

Depto. de Engenharia Mecânica, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: padilha@feb.unesp.br

Fernando Massucheto Jorge

Depto. de Engenharia Mecânica, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: fjorge20@yahoo.com

Marcos Paulo de Carvalho Oliveira

Depto. de Engenharia Mecânica, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: mpcoliveira@feb.unesp.br

Resumo. O desenvolvimento recente dos modelos numéricos aliado à grande evolução ocorrida nos processadores desencadearam um processo de desenvolvimento de uma técnica de formulação de problemas alternativa. Desse modo, de maneira totalmente diferente de 20 anos atrás, atualmente é muito mais econômico desenvolver um modelo numérico para estudo de um determinado fenômeno, do que realizar um estudo experimental a respeito do mesmo. Os problemas envolvendo o comportamento transitório de um dado fenômeno, são geralmente, complexos e o uso de intervalos de tempo menores implicam em um aumento significativo no tempo necessários para a obtenção da solução. Por conta disto, neste trabalho será realizada uma análise comparativa dos modelos de primeira, segunda e terceira ordem usando o esquema W_p para solução por elementos finitos. Neste tipo de implementação, para os sistemas parabólicos, estes são apresentados como sendo compostos por uma série de operadores integrais oriundos da mesma família com o objetivo específico de realizar a integração ao longo do tempo. Ao contrário dos métodos tradicionalmente utilizados, esta família de esquema de solução propõe o uso de uma função peso específica para o tempo na análise transiente. Segundo este esquema é possível obter um sistema de equações através de sucessivas integrações por partes de maneira que a dependência do tempo, passe para a função peso pré-estabelecida. Para verificação dos resultados, foi escolhido um problema de condução transiente unidimensional numa parede plana, do qual se conhece a solução analítica. Os resultados usando o esquema W_p de terceira ordem foram comparados à solução analítica do problema, e aos esquemas W_p de primeira e segunda ordem, e o desvio das soluções foram analisados em função do tempo e da malha utilizada.

Palavras chave: Análise transiente, Método dos Elementos Finitos, Esquemas transientes W_p .

1. Introdução

No passado, a grande maioria dos trabalhos realizados abordando fenômenos físicos, principalmente nas áreas de engenharia, se baseava na obtenção de dados experimentais que justificassem ou ajudassem a entender o como e o porque de tais fenômenos ocorrerem. O desenvolvimento recente dos modelos numéricos aliado à grande evolução ocorrida nos processadores desencadearam um processo de mudança de mentalidade. Desse modo, de maneira totalmente diferente de 20 anos atrás, atualmente é muito mais econômico desenvolver um modelo numérico para estudo de um determinado fenômeno, do que realizar um estudo experimental a respeito do mesmo. Os problemas envolvendo o comportamento transitório de um dado fenômeno, são geralmente são complexos e o uso de intervalos de tempo menores implicam em um incremento muito significativo no tempo necessário para a obtenção da solução. Neste sentido, um grande número de trabalhos publicados recentemente tem objetivado a melhoria dos modelos numéricos para a solução de problemas físicos, contando, inclusive, com uma série de periódicos dedicados exclusivamente a este assunto.

Além disso, existem outras vantagens do modelo matemático devem ser levadas em consideração como o fato de se tratar de uma técnica não invasiva, na qual não existe nenhum tipo de sensor físico que possa perturbar o fenômeno. Outro fator importante é que os resultados podem ser obtidos em qualquer parte do domínio do problema com bom nível de confiabilidade e, se houver necessidade, pode-se inclusive utilizar um maior refinamento nas áreas de interesse.

Uma série de trabalhos recentes tem abordado este tema e variações. Com relação aos novos esquemas de discretização, Zhong *et al.*, 1996 propuseram a utilização de um incremento na ordem da aproximação no tempo dos tradicionais

esquemas transientes. No trabalho, são tratadas uma série de considerações sobre as equações diferenciais parciais (EDP) e, com base nesta técnica, apresentaram um esquema explícito de elevada ordem baseando-se na solução analítica de equações diferenciais de primeira ordem.

Em outro trabalho, Tamma *et al.*, 1997 apresentaram uma compilação de uma série de metodologias para implementação de esquemas transientes utilizando um método similar ao esquema de resíduos ponderados. Neste trabalho, foram analisadas implementações tanto para esquemas de problemas transientes como para problemas dinâmicos, envolvendo termos de aceleração. O trabalho enfatizou muito a metodologia utilizada para a formulação do problema, além de sugerir possíveis esquemas de implementação. a aplicação de cada uma das metodologias é muito pouco explorada, apenas alguns exemplos simplificados são apresentados para ilustração. Nesta mesma linha, trabalhando com as funções peso para o tempo, cabe ressaltar os avanços recentes introduzidos por Tamma *et al.*, 2002.

Embora já seja conhecida há algum tempo, Smolinshi e Wu, 1998 apresentaram algumas inovações para a técnica conhecida como *subcycling* e sua inclusão em problemas de elementos finitos de primeira ordem. Esta técnica permite que diferentes incrementos de tempo sejam usados em diferentes regiões do mesmo problema, dependendo do tamanho dos elementos utilizados. A aplicação desta técnica só tem sentido em discretizações em que a solução não é incondicionalmente estável. Alguns detalhes sobre a implementação da técnica de *subcycling* para o ANSYS podem ser vistos em ANSYS, 2002.

Utilizando outra técnica, Donea *et al.*, 2000 apresentaram a proposta de um novo esquema de solução transiente em fenômenos que envolvem problemas altamente convectivos. Este esquema se baseia nas aproximações de Padé que podem ser usadas com alguma vantagem sobre as aproximações baseadas em Séries de Taylor. Este tipo de aproximação é bastante utilizada na elaboração de esquemas de solução para problemas parabólicos no tempo usando elementos do tipo C^0 . Foi verificada neste estudo grande similaridade entre a formulação obtida através das funções de aproximação de Padé e aquelas que seriam utilizadas no caso de aplicação de um método de Runge Kutta de mesma ordem.

Recentemente, Tamma *et al.*, 2003a explicaram o desenvolvimento fundamental teórico e o rigor de uma representação generalizada com respeito à estabilidade, precisão e, em Tamma *et al.*, 2003b, muita atenção foi dada às representações práticas dos operadores de segunda ordem, incluindo, também, seus atributos algorítmicos e suas extensões para situações não lineares.

Esta série de trabalhos mostra como o assunto de modelos numéricos para problemas transientes têm ganho espaço na pesquisa recente sobre o assunto. Este trabalho, pretende avançar um pouco mais no tema realizando as implementações de primeira, segunda e terceira ordem usando "família W_p ", em um problema simples de condução de calor unidimensional transiente. Serão avaliados os esquemas cuja implementação é realizada via inclusão de novas funções pesos apresentadas em Tamma *et al.*, 1997.

Embora se trate de um problema unidimensional o mesmo será solucionado utilizando-se de elementos bidimensionais de quatro nós (biquadráticos) com as condições de contorno adequadas para resolução do problema. Para esta solução foi considerado ainda que no instante inicial, $\tau = 0$, o material se encontra a uma temperatura $\theta_0 = 0$. Os resultados obtidos são, então, confrontados com a solução analítica do problema para, assim, verificar como cada um dos modelos se comporta. Um esquema do problema e suas condições de contorno pode ser visto na fig.(1).

2. Metodologia

Tomando por base a discretização de um problema de condução transitória em geometria bidimensional com um termo fonte associado, a equação geral que rege o problema é dada por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) = f \tag{1}$$

que se discretizada em elementos finitos sem qualquer forma de aproximação para a derivada no tempo. O termo fonte f pode representar qualquer situação com possíveis termos fonte. A solução do problema dependeria ainda das inclusões das condições de contorno em nível de espaço e das condições iniciais do problema (θ_0).

Para este caso, será considerada uma discretização no espaço por resíduos ponderados da equação de condução bidimensional, sem nenhum tipo de termo fonte:

$$\int_{\mathcal{V}} W_e \left[\frac{\partial \theta}{\partial t} - \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \right] d\mathcal{V} = 0 \tag{2}$$

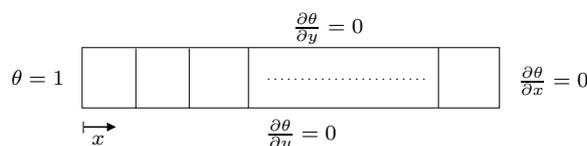


Figura 1: Esquema do problema proposto

Num primeiro momento não haverá preocupação com a discretização do termo transiente, entretanto, considerando-se que o termo está independente da posição, aplicando-se Galerkin, tem-se que:

$$\int_{\mathcal{V}} N_i \frac{\partial \theta}{\partial t} d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{V}} N_i d\mathcal{V} \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3)$$

mas considerando apenas o termo difusivo e aplicando para a sua discretização os procedimentos de redução de ordem (forma fraca), discretização por Galerkin e aproximação nodal, tem-se que:

$$\int_{\mathcal{V}} N_i \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) d\mathcal{V} = \oint_S N_i \frac{\partial \theta}{\partial n} dS - \int_{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\mathcal{V} \cdot \theta \quad (4)$$

Assim a equação geral para o problema em resíduos ponderados pode ser escrita na sua forma matricial:

$$[\mathbb{M}] \cdot \frac{\partial \vec{\theta}}{\partial t} + [\mathbb{K}] \cdot \vec{\theta} = [\mathbb{S}] \quad (5)$$

onde:

$$[\mathbb{M}] = \int_{\mathcal{V}} N_i d\mathcal{V}; \quad [\mathbb{K}] = \int_{\mathcal{V}} \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) d\mathcal{V}; \quad [\mathbb{S}] = \oint_S N_i \cdot \frac{\partial \vec{\theta}}{\partial n} dS$$

2.1. Aplicação do esquema usual de discretização

O esquema de discretização no tempo mais comumente utilizado pelos usuários do método dos elementos finitos foi herdado da técnica de diferenças finitas e consiste em utilizar a série de Taylor para aproximar o comportamento da derivada no tempo. Neste esquema:

$$\frac{\partial \vec{\theta}}{\partial t} = \frac{\vec{\theta}^{m+1} - \vec{\theta}^m}{\Delta t} \quad (6)$$

sendo que os valores de m e $m + 1$ representam, respectivamente, as temperaturas no instante atual e no próximo instante de tempo. Desse modo, a equação (5) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{\Delta t} [\mathbb{M}] \cdot (\vec{\theta}^{m+1} - \vec{\theta}^m) + [\mathbb{K}] \cdot \vec{\theta}^{m+k} = [\mathbb{S}] \quad (7)$$

sendo que de acordo com o valor de k , a formulação é realizada de maneira diferente. Para o esquema implícito, a temperatura é avaliada no instante posterior, ou seja, $k = 1$.

2.2. Implementação por função peso para o tempo (W_p)

Neste tipo de implementação para os sistemas parabólicos, estes são apresentados como sendo compostos por uma série de operadores integrais da mesma família, com o objetivo específico de realizar a integração ao longo do tempo. Ao contrário dos métodos tradicionalmente utilizados esta família de esquema de solução propõe o uso de uma função peso específica para o tempo na análise transiente. Segundo este esquema, é possível obter um sistema de equações através de sucessivas integrações por parte de maneira que a dependência do tempo, passe para a função peso pré-estabelecida. Talvez, a grande vantagem deste tipo de formulação seja justamente o fato de deixar inalterada a discretização da geometria do problema, ou seja, podem ser mantidas quaisquer tipos de características da discretização no espaço, seja no que tange a funções de aproximação, ou mesmo, esquemas adotados para função peso.

Aplicando as funções pesos anteriormente estabelecidas, na equação (5) e realizando a integração ao longo do tempo, têm-se que:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} [W]^T ([\mathbb{M}] \cdot \dot{\vec{\theta}} + [\mathbb{K}] \vec{\theta} - [F]) dt = 0 \quad (8)$$

Subdividindo a equação (8) em diversas integrais e integrando o primeiro termo por partes obtém-se:

$$\left([W]^T [\mathbb{M}] \vec{\theta} \right)_{t_n}^{t_{n+1}} - \int_{t_n}^{t_{n+1}} [W]^T [F] dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} [\dot{W}]^T [\mathbb{M}] \vec{\theta} dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} [W]^T [\mathbb{K}] \vec{\theta} dt \quad (9)$$

ou ainda:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} ([\dot{W}]^T [\mathbb{M}] - [W]^T [\mathbb{K}]) \vec{\theta} dt = \left([W]^T [\mathbb{M}] \vec{\theta} \right)_{t_n}^{t_{n+1}} - \int_{t_n}^{t_{n+1}} [W]^T [F] dt \quad (10)$$

2.2.1. Aproximação de Primeira Ordem

Fazendo uma aproximação linear para o tempo e o perfil de temperaturas:

$$W_1(\tau) = w_0 + w_1 \cdot \tau \tag{11}$$

$$\vec{\theta}_{n+1} = \vec{\theta}_n + \dot{\vec{\theta}} \cdot \Delta t \cdot \tau \tag{12}$$

Note que neste caso foi necessário realizar uma mudança de variáveis, definindo-se uma variável τ de forma a:

$$\tau = \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} = \frac{t - t_n}{\Delta t} \tag{13}$$

onde pode-se ainda definir:

$$\mathbb{F} = \int_0^1 (w_0 + w_1 \tau) \cdot [F] d\tau, \tag{14}$$

Em seu trabalho, Tamma *et al.*, 1997, propõe uma expressão geral para obtenção dos coeficientes desta equação de maneira que:

$$W_{1,0} = \int_0^1 (w_0 + w_1 \tau) d\tau = w_0 + \frac{w_1}{2} \tag{15}$$

$$W_{1,1} = \int_0^1 (w_0 + w_1 \tau) \tau d\tau = \frac{w_0}{2} + \frac{w_1}{3} \tag{16}$$

e, desse modo, o valor de $\dot{\vec{\theta}}$ é dado pela equação:

$$\dot{\vec{\theta}} = \frac{\mathbb{F} - W_{1,0} \cdot [\mathbb{K}] \cdot \vec{\theta}_n}{W_{1,1} \cdot \Delta t \cdot [\mathbb{K}] + W_{1,0} \cdot [\mathbb{M}]} \tag{17}$$

De posse do valor de $\dot{\vec{\theta}}$ é possível encontrar facilmente os valores do perfil de temperatura no instante $n + 1$, usando-se a aproximação representada na equação (12) para $\tau = 1$.

É importante notar que, neste caso, o valor do termo fonte \mathbb{F} não foi descartado pois ele pode ser necessário na aplicação das condições de contorno. De acordo com a natureza do problema, principalmente nos casos envolvendo condições de contorno de 2ª e 3ª espécies, este torna-se fundamental para implementação das condições de superfície.

Tamma *et al.*, 1997 apresentaram uma série de expressões para se obter esquemas usuais de discretização de primeira ordem. Um resumo destes coeficientes estão apresentados na Tabela (1).

Tabela 1: Valores das funções de aproximação para os diversos algoritmos.

Algoritmo	Função de Aproximação
Crank-Nicolson	$W = 1 + 0 \cdot \tau = 1$
Euler Avançado	$W = 1 - 3/2\tau$
Euler Atrasado	$W = 1 - 3\tau$
Liniger	$W = 1 - 17/4\tau$
Galerkin	$W = 1 - \infty\tau$

Obs: $\tau = (t - t_n)/\Delta t$,

2.2.2. Aproximação de Segunda Ordem

Fazendo-se uma aproximação quadrática para o tempo e usando os três primeiros termos da série de Taylor para expressar o perfil de temperaturas, tem-se:

$$W_2(\tau) = w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot (\tau)^2 \tag{18}$$

$$\vec{\theta}_{n+1} = \vec{\theta}_n + \dot{\vec{\theta}} \cdot \Delta t \cdot \tau + 1/2 \cdot (\tau)^2 \cdot (\Delta t)^2 \ddot{\vec{\theta}} \tag{19}$$

Usando estas expressões na equação (8):

$$\int_{t_0}^{t_1} [(w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot (\tau)^2) [\mathbb{K} \cdot \vec{\theta}_n + (\mathbb{M} + \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \dot{\vec{\theta}} + (\mathbb{M} + 1/2 \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \cdot \ddot{\vec{\theta}}] - [F]] \cdot dt = 0 \tag{20}$$

Resolvendo a integração, nota-se que seriam necessários os seguintes termos:

$$W_{0,2} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot d\tau = \left[w_0\tau + \frac{w_1\tau^2}{2} + \frac{w_2\tau^3}{3} \right]_0^1 = w_0 + \frac{w_1}{2} + \frac{w_2}{3} \quad (21)$$

$$W_{2,1} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot \tau \cdot d\tau = \left[\frac{w_0\tau^2}{2} + \frac{w_1\tau^3}{3} + \frac{w_2\tau^4}{4} \right]_0^1 = \frac{w_0}{2} + \frac{w_1}{3} + \frac{w_2}{4} \quad (22)$$

$$W_{2,2} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot \tau^2 \cdot d\tau = \left[\frac{w_0\tau^3}{3} + \frac{w_1\tau^4}{4} + \frac{w_2\tau^5}{5} \right]_0^1 = \frac{w_0}{3} + \frac{w_1}{4} + \frac{w_2}{5} \quad (23)$$

$$\mathbb{F}_2 = \int_0^{\Delta t} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot [F] \cdot dt \quad (24)$$

Desta forma, a equação geral apresentada em (20) passa a ser expressa na forma rearranjada para se obter a solução da segunda derivada:

$$\ddot{\theta} = \frac{\mathbb{F}_2 - W_{2,0} \cdot \mathbb{K} \cdot \vec{\theta}_n - (W_{2,0} \cdot \mathbb{M} + W_{2,1} \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \dot{\theta}}{\Delta t \cdot (W_{2,1} \cdot \mathbb{M} + 1/2 \cdot W_{2,2} \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t)} \quad (25)$$

De posse do valor de $\ddot{\theta}$ é possível encontrar facilmente os valores para a primeira derivada utilizando-se o método de diferenças finitas:

$$\vec{\theta}_{n+1} = \vec{\theta}_n + \dot{\theta} \cdot \Delta t + \ddot{\theta} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} \quad (26)$$

$$\dot{\theta}_{n+1} = \dot{\theta} + \ddot{\theta} \cdot \Delta t \quad (27)$$

a partir do qual o procedimento de marcha se repete. Deve-se observar que se faz necessária uma primeira estimativa do valor inicial da primeira derivada $\dot{\theta}_0$, uma vez que em geral somente os valores de temperatura inicial são conhecidos.

Da mesma forma que para as expressões de primeira ordem, Tamma *et al.*, 1997 apresentam uma série de expressões para se obter esquemas usuais de discretização de segunda ordem. Um resumo destes coeficientes está apresentado na tabela (2).

2.2.3. Aproximação de Terceira Ordem

Fazendo-se uma aproximação de terceiro grau para o tempo e usando os quatro primeiros termos da série de Taylor para expressar o perfil de temperaturas, tem-se:

$$W_3(\tau) = w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot (\tau)^2 + w_3 \cdot (\tau)^3 \quad (28)$$

$$\vec{\theta}_{n+1} = \vec{\theta}_n + \dot{\theta} \cdot \Delta t + 1/2 \cdot (\tau)^2 \cdot (\Delta t)^2 \ddot{\theta} + 1/6 \cdot (\tau)^3 \cdot (\Delta t)^3 \ddot{\theta}^{(3)} \quad (29)$$

Usando estas expressões na equação (8):

$$\int_{t_0}^{t_1} [(w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2 + w_3 \cdot \tau^3) [\mathbb{K} \cdot \vec{\theta}_n + (\mathbb{M} + \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \dot{\theta} + (\mathbb{M} + 1/2 \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \cdot \ddot{\theta} + (1/2 \cdot \mathbb{M} + 1/6 \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2 \cdot \ddot{\theta}^{(3)}]] - [F]] \cdot dt = 0 \quad (30)$$

Tabela 2: Valores das funções de aproximação para os diversos algoritmos de 2ª ordem.

Algoritmo	Função de Aproximação
Dupont	$W = 1 - 19/3 \cdot \tau + 20/3 \cdot \tau^2$
Gear	$W = 1 - 36/5 \cdot \tau + 8 \cdot \tau^2$
Lees	$W = 1 - 60/11 \cdot \tau + 60/11 \cdot \tau^2$
Liniger-1	$W = 1 - 146,82 \cdot \tau - 279,091 \cdot \tau^2$
Liniger-2	$W = 1 - 8,88424 \cdot \tau + 10,0961 \cdot \tau^2$
Runge-Kutta	$W = 1 - 8 \cdot \tau - 10 \cdot \tau^2$
Zlamal	$W = 1 - 236/39\tau - 80/13 \cdot \tau^2$

Obs: $\tau = (t - t_n)/\Delta t$,

Resolvendo a integração, nota-se que seriam necessários os seguintes termos:

$$W_{3,0} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2 + w_3 \cdot \tau^3) \cdot d\tau = w_0 + \frac{w_1}{2} + \frac{w_2}{3} + \frac{w_3}{4} \quad (31)$$

$$W_{3,1} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2 + w_3 \cdot \tau^3) \cdot \tau \cdot d\tau = \frac{w_0}{2} + \frac{w_1}{3} + \frac{w_2}{4} + \frac{w_3}{5} \quad (32)$$

$$W_{3,2} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot \tau^2 \cdot d\tau = \frac{w_0}{3} + \frac{w_1}{4} + \frac{w_2}{5} + \frac{w_3}{6} \quad (33)$$

$$W_{3,3} = \int_{t_0}^{t_1} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2) \cdot \tau^3 \cdot d\tau = \frac{w_0}{4} + \frac{w_1}{5} + \frac{w_2}{6} + \frac{w_3}{7} \quad (34)$$

$$\mathbb{F}_3 = \int_0^{\Delta t} (w_0 + w_1 \cdot \tau + w_2 \cdot \tau^2 + w_3 \cdot \tau^3) \cdot [F] \cdot dt \quad (35)$$

Desta forma, a equação geral apresentada em (30) passa a ser expressa na seguinte forma, sendo rearranjada para se obter a solução da terceira derivada:

$$\vec{\theta}^{(3)} = \frac{F_3 - W_{3,0} \cdot \mathbb{K} \cdot \vec{\theta}_n + (W_{3,0} \cdot \mathbb{M} - W_{3,1} \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \dot{\vec{\theta}} - (W_{3,1} \cdot \mathbb{M} + 1/2 \cdot W_{3,2} \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \cdot \ddot{\vec{\theta}}}{(1/2 \cdot W_{3,2} \cdot \mathbb{M} + 1/6 \cdot W_{3,3} \cdot \mathbb{K} \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2} \quad (36)$$

De posse do valor de $\vec{\theta}^{(3)}$ é possível encontrar facilmente os valores para a primeira e a segunda derivada utilizando-se o método de diferenças finitas:

$$\vec{\theta}_{n+1} = \vec{\theta}_n + \dot{\vec{\theta}} \cdot \Delta t + \ddot{\vec{\theta}} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \vec{\theta}^{(3)} \cdot \frac{\Delta t^3}{6} \quad (37)$$

$$\dot{\vec{\theta}}_{n+1} = \dot{\vec{\theta}} + \ddot{\vec{\theta}} \cdot \Delta t + \vec{\theta}^{(3)} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} \quad (38)$$

$$\ddot{\vec{\theta}}_{n+1} = \ddot{\vec{\theta}} + \vec{\theta}^{(3)} \cdot \Delta t \quad (39)$$

a partir do qual o procedimento de marcha se repete. Deve-se observar que se faz necessária uma primeira estimativa do valores iniciais da primeira e da segunda derivada ($\dot{\vec{\theta}}_0$ e $\ddot{\vec{\theta}}_0$, respectivamente), uma vez que em geral somente os valores de temperatura inicial são conhecidos.

Da mesma forma que para as expressões de primeira ordem, Tamma *et al.*, 1997 apresentam uma série de expressões para se obter esquemas usuais de discretização de terceira ordem. Um resumo destes coeficientes está apresentado na tabela (3).

Tabela 3: Valores das funções de aproximação para os diversos algoritmos.

Algoritmo	Função de Aproximação
Houbolt	$W = 1 - 615/46 \cdot \tau + 825/23 \cdot \tau^2 - 1155/46 \cdot \tau^3$
Wilson- θ	$W = 1 - 1829/137 \cdot \tau + 4925/137 \cdot \tau^2 - 3465/137 \cdot \tau^3$
Bossak-Newmark	$W = 1 - 180/13 \cdot \tau + 495/13 \cdot \tau^2 - 350/13 \cdot \tau^3$
Hilber-Hughes-Taylor	$W = 1 - 44478/3229 \cdot \tau + 120990/3229 \cdot \tau^2 - 85680/3229 \cdot \tau^3$

Obs: $\tau = (t - t_n)/\Delta t$,

2.3. Solução Analítica

Segundo Incropera e Dewit, 2003 a solução analítica, fundamental para efeitos de comparação, é composta por uma série de infinitos termos, obtida com base no método da separação de variáveis. Ela pode ser facilmente encontrada em qualquer livro texto de transmissão de calor e é constituída pelas seguintes equações:

$$\theta = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \cdot \exp(-\zeta_i^2 \cdot \tau) \cdot \cos(\zeta_i \cdot x) \quad \text{onde} \quad \zeta_i \cdot \tan(\zeta_i) = Bi \quad \text{e} \quad C_i = \frac{4 \cdot \sin(\zeta_i)}{2\zeta_i + \sin(2\zeta_i)} \quad (40)$$

sendo, ainda que para o caso onde a temperatura da parede é especificada a solução da equação (40), deve ser obtida para quando $Bi \rightarrow \infty$.

Com todas estas informações, pode-se facilmente plotar a solução analítica do problema e, embora seja impossível usar os infinitos termos, pode-se representar a solução analítica com boa precisão. Para efeito de comparação neste trabalho, foram utilizados os 90 primeiros termos da série.

3. Resultados

Com base neste procedimento uma série de resultados para os modelos de primeira a terceira ordem foram obtidos e comparados com a solução analítica. Os resultados obtidos para o caso estudado podem ser vistos nas fig. (2) a (5). Nestas figuras são apresentadas a solução com base em todos os esquemas apresentados anteriormente na metodologia, de todas as ordens para as mesmas condições de malha e incremento de tempo. Desta forma, é possível uma análise comparativa mais clara do comportamento de cada uma das soluções para problema apresentado.

Os resultados para a solução do problema obtidos a partir da implementação de esquemas de primeira ordem podem ser vistos na fig.(2). Nestes gráficos, estão mostrados o desenvolvimento das temperaturas para o ponto $x^* = 0,5$, fig.(2a), e o desvio entre cada solução numérica e a solução analítica nos tempos analisados, fig.(2b). A comparação da solução analítica com cada um dos modelos apresentados foi realizada usando valores para $\Delta x^* = 0,1$ e $\Delta \tau = 0,1$. Nota-se claramente através da análise destes gráficos que a qualidade do resultado obtido pode ser melhorada, de forma significativa, em função do esquema a ser utilizado.

Com base nesta análise os métodos que apresentaram melhor precisão do problema estudado: Ímplicito (Euler avançado), Liniger, Galerkin e Crank-Nicholson, de acordo com a fig.(2). Para cada caso, foram estudados o comportamento do desvio em relação à solução analítica em função da variação nos incrementos de tempo e na malha utilizada. Maiores detalhes dos desenvolvimentos deste estudo podem ser encontrados em Scalon *et al.*, 2005b, onde diversos gráficos do comportamento da solução com refinamento da malha foram analisados e discutidos. Entretanto, a conclusão mostra o que pode ser visto neste gráfico de que, para o problema de difusão de calor proposto, o esquema de Crank-Nicholson foi o que apresentou os melhores resultados.

De maneira análoga, a fig.(3) apresenta um comparativo entre os modelos de segunda ordem e a solução analítica para os 90 primeiros termos da série e $\Delta x^* = 0,1$ e $\Delta t = 0,1$ e a fig.(4) apresenta um comparativo de desvios entre os modelos numéricos de segunda ordem e a solução analítica. A análise é feita para a evolução transiente do mesmo ponto $x^* = 0,5$ que o desenvolvido para o esquema de primeira ordem. Uma análise da comparação apresentada mostra que os modelos de Gear e de Dupont foram os que apresentaram os melhores resultados.

De maneira geral, não se percebe nos modelos de segunda ordem menores desvios em relação à solução analítica que os apresentados nos modelos de primeira ordem. Nota-se que a convergência se deu através de um processo oscilatório em torno da solução analítica, o que não foi verificado nos modelos de primeira ordem. Principalmente nos estágios iniciais as técnicas de segunda ordem apresentaram piores resultados que as de primeira ordem e tenderam a melhorar com o desenvolvimento do trabalho. Para esta aproximação, o critério adotado para estimar o valor da primeira derivada e dar partida da solução foi o de utilizar uma malha com Δx^* muito pequeno e tentar avaliar a derivada com maior precisão.

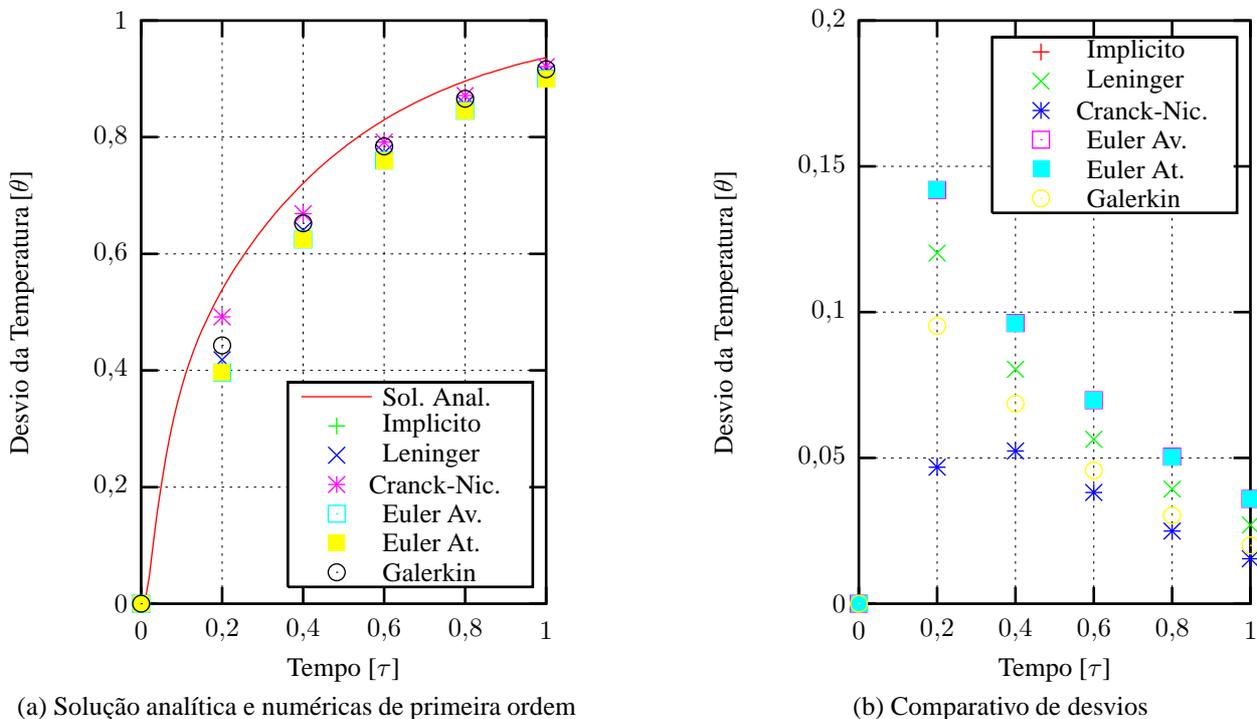


Figura 2: Comparativo entre a solução analítica e numéricas de primeira ordem e seus respectivos desvios.

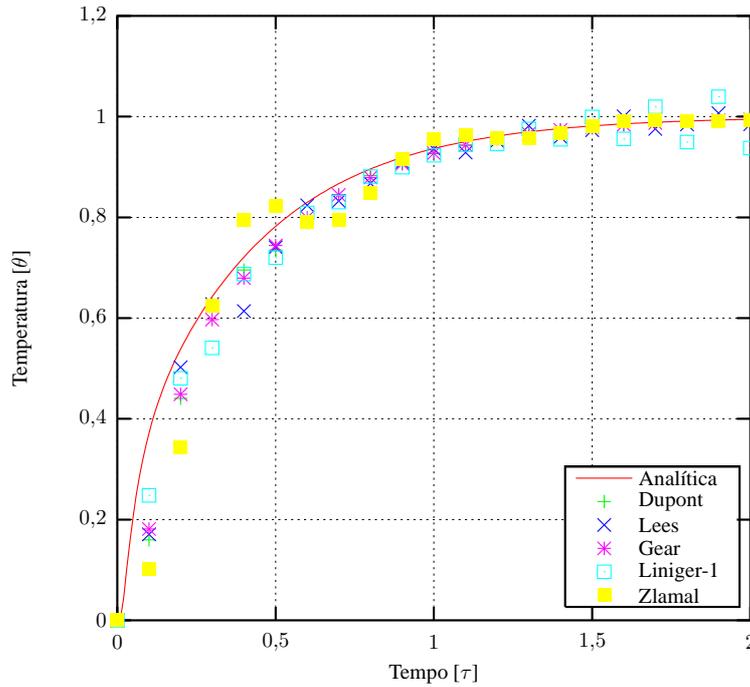


Figura 3: Comparativo entre a solução analítica e numéricas de segunda ordem.

Maiores detalhes sobre o comportamento dos esquemas mais importantes com a malha podem ser encontrados em Scalon *et al.*, 2005a.

O mesmo procedimento adotado para os esquemas de primeira e segundas ordem foi repetido para os de terceira ordem. As condições de análise foram as mesmas, $\Delta x^* = 0,1$ e $\Delta t = 0,1$, assim como o ponto analisado: $x^* = 0,5$. Desta forma, a fig.(5) apresenta um comparativo entre os modelos de terceira ordem e a solução analítica e o seu respectivo desvio, fig.(6). Da análise deste gráfico é possível notar que os modelos de Wilson, de Houbolt e de Hilber-Hughes-Taylor apresentaram os melhores resultados. Cabe ressaltar ainda que o esquema de Bossak-Newmark para estas mesmas condições não conseguiu alcançar a convergência da solução. Por conta disto o modelo foi descartado e não aparece nas

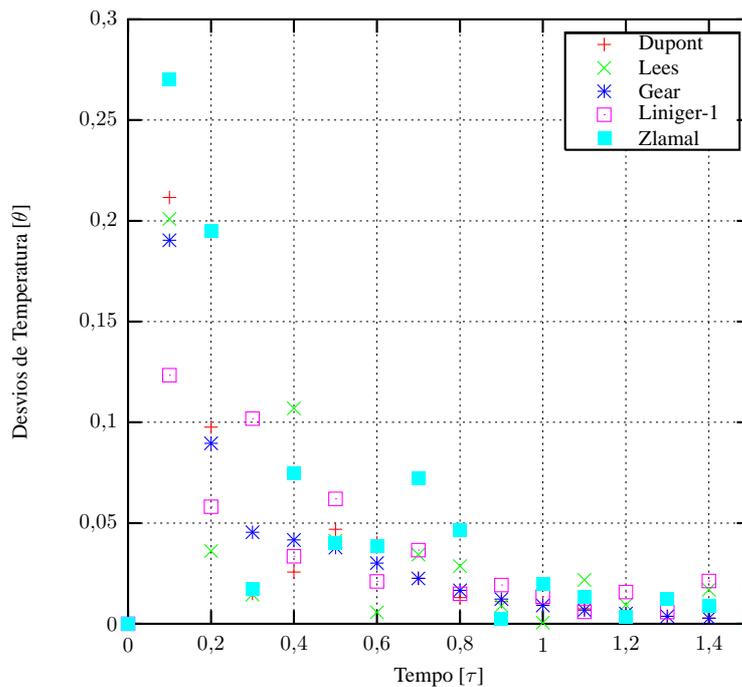


Figura 4: Desvios entre a solução analítica e numéricas de segunda ordem.

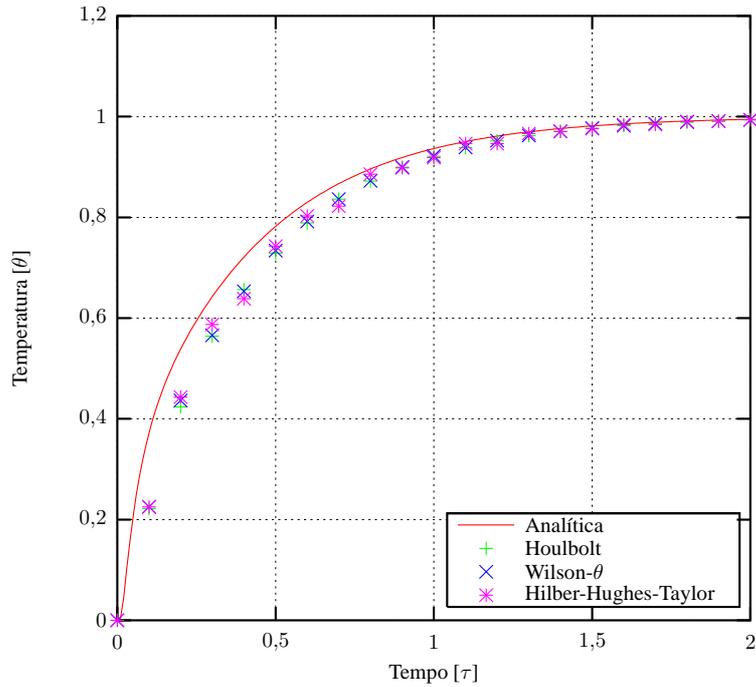


Figura 5: Comparativo entre a solução analítica e numéricas de terceira ordem.

referidas figuras. Outro fato que merece destaque é que, embora tenha convergido, o método de Hilber-Hughes-Taylor apresentou oscilações em torno da solução analítica como pode ser visto claramente na fig.(6).

As fig.(7), (8) e (9) mostram as as implementações de terceira ordem utilizadas e o comportamento dos desvios em função da da malha e incremento de tempo. Todos os esquemas: Houlbolt, Wilson- θ e Hilber-Hughes-Taylor, apresentam comportamento similar e portanto a discussão será feita para todos os modelos globalmente. É possível notar, em todos os casos, que o refinamento no tempo, por se tratar de um método de alta ordem, não apresentou variação perceptível na solução obtida para a malha $\Delta x^* = 0,1$. Entretanto, em todos os esquemas foi possível notar uma melhora com o

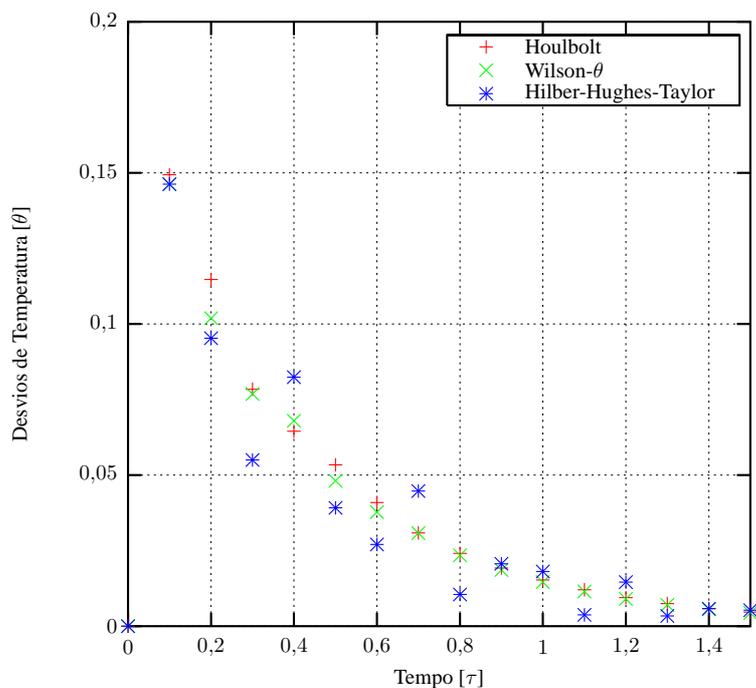


Figura 6: Desvios entre a solução analítica e numéricas de terceira ordem e seus respectivos desvios.

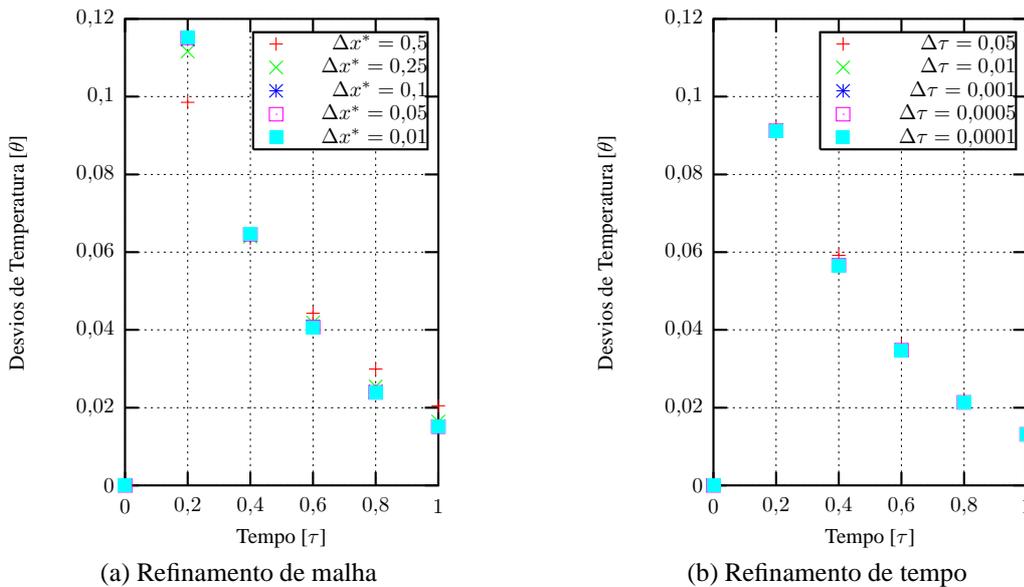


Figura 7: Desvios em relação à solução analítica para o esquema Houbolt.

refinamento da malha em tempos avançados mantendo-se $\Delta\tau = 0,1$. Desta forma, nota-se claramente que o refinamento da malha é a única forma de conseguir melhorar a precisão do modelo nas condições estabelecidas.

Com relação às diversas possíveis implementações e o seu comportamento na resolução do problema pode se observar que os métodos alternativos de Houbolt, Wilson- θ e Hilber-Hughes-Taylor de terceira ordem podem ser boas alternativas para a solução de problemas transitórios, destacando-se pela maior precisão, os dois últimos.

4. Conclusão

Com base nos estudos desenvolvidos neste trabalho, pode-se afirmar que os esquemas baseados na família de funções peso para o tempo W_p , apresentaram boa concordância com a solução analítica mesmo trabalhando com valores relativamente altos de incremento de tempo.

Esta implementação é, em termos de resultados equivalente à implementação tradicional. Entretanto, pode-se dizer que a implementação W_p apresenta uma facilidade muito maior de troca do esquema utilizado: bastando para isto que se substitua os coeficientes do polinômio. Pode-se dizer que a grande vantagem deste tipo de formulação seja, justamente, o fato de deixar inalterada a discretização da geometria do problema. Desta forma, podem ser mantidas quaisquer tipos

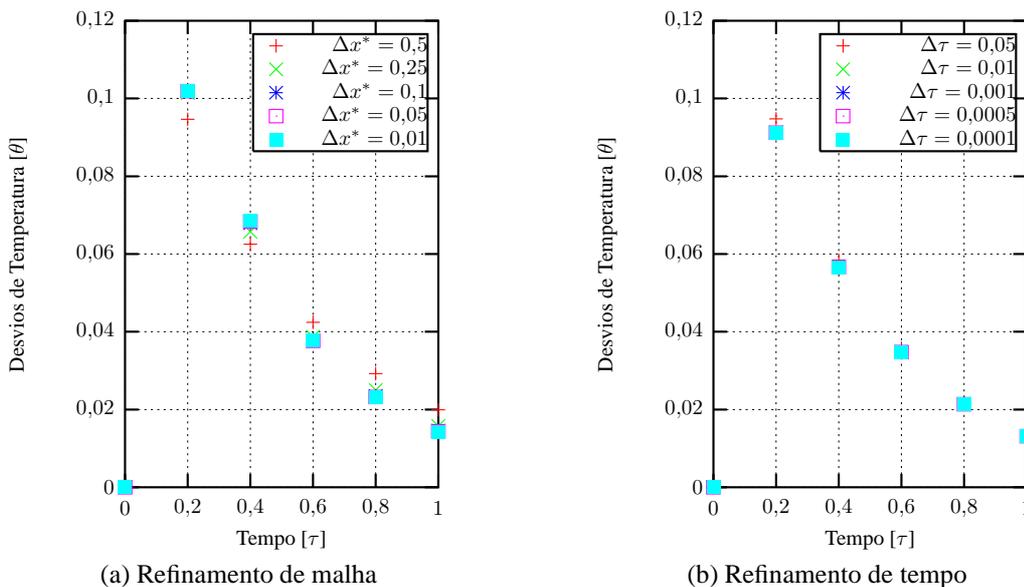


Figura 8: Desvios em relação à solução analítica para o esquema Wilson- θ .

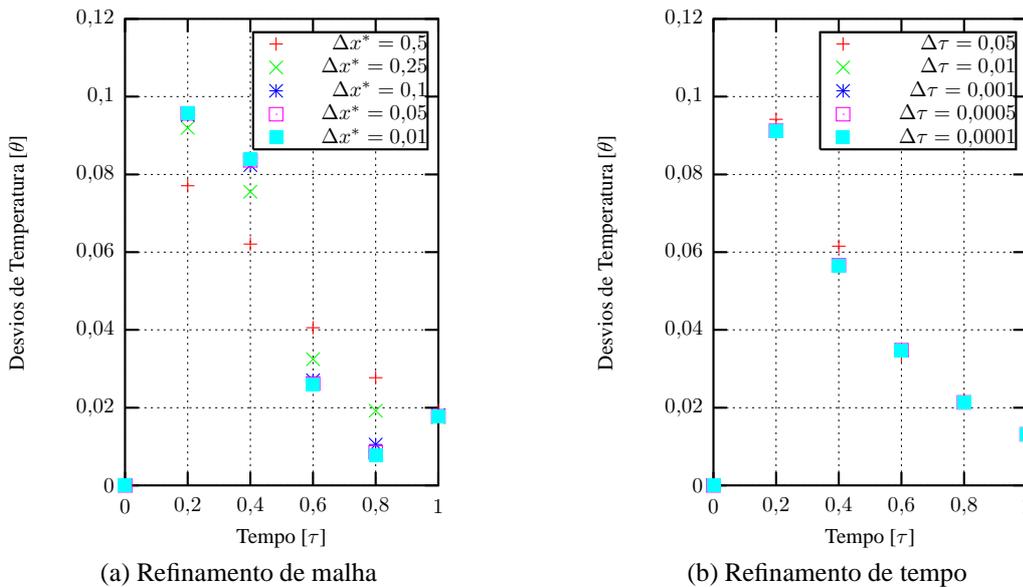


Figura 9: Desvios em relação à solução analítica para o esquema Hilber-Hughes-Taylor.

de características da discretização no espaço, seja no que tange a funções de aproximação, ou mesmo, esquemas adotados para função peso e, com pequenas alterações, mudar a discretização no tempo.

Entretanto, pode-se afirmar com base nos resultados apresentados que o aumento da ordem do esquema no tempo diminui o desvio em relação à solução analítica, principalmente para tempos afastados do instante inicial. Além disto, em função de sua própria natureza, os problemas de terceira ordem apresentaram comportamento praticamente independente dos valores utilizados como incremento de tempo.

Foi possível, ainda, verificar ainda que a utilização de malhas muito refinadas para a estimativa da primeira e segundas derivadas, quando isto é necessário, com esquemas de ordem mais baixa induziu oscilações na solução. Estimativas feitas da mesma forma mas com a malha utilizada na solução apresentaram melhores resultados.

Para finalizar, os resultados mostraram que para o problema proposto, os métodos de terceira ordem de Wilson- θ e Hilber-Hughes-Taylor apresentaram excelentes resultados na faixa considerada, embora este último tenha apresentado convergência oscilante.

5. Agradecimentos

Agradecimentos à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP, que financia a bolsa do aluno Fernando Massucheto Jorge (processo nº 04/13477-0), que muito auxiliou na complementação deste trabalho.

6. Referências

- ANSYS, 2002, ANSYS 5.7.1 Help, http://www.nmt.edu/ansys/ansys5.71/ansyshelp/H1p_UI_ANSYS_Rev.html.
- Donea, J., Roig, B., and Huerta., A., 2000, High-Order Accurate Time-Stepping Schemes For Convection-Diffusion Problems,, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg”, Vol. 182, pp. 249–275.
- Incropera, F. P. and Dewit, D. P., 2003, “Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa”, Ed. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, Brasil, 5th edition.
- Scalon, V. L., Padilha, A., and Jorge, F., 2005a, Aplicação de Esquemas de Primeira e de Segunda Ordem em Análises Transientes pelo Método dos Elementos Finitos, “Proceedings of XXVI Iberian Latin American Congress of Computational Methods in Engineering - CILAMCE”.
- Scalon, V. L., Padilha, A., and Jorge, F., 2005b, Aplicação de Esquemas de Primeira em Análises Transientes pelo Método dos Elementos Finitos, “Proceedings of VI Congresso Temático de Dinâmica, Controle e suas Aplicações - DINCON”.
- Smolinshi, P. and Wu, Y., 1998, Stability of Explicit Subcycling Time Integration With Linear Interpolation For First-Order Finite Element Semidiscretizations, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg”, Vol. 151, pp. 311–324.
- Tamma, K. K., D.Sha, and Zhou, X., 2003a, Time Discretized Operators. Part I: Towards the Theoretical Design of a New Generation of a Generalized Family of Unconditional Stable Implicit and Explicit Representation of Arbitrary Order, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg”, Vol. 192, pp. 257–290.
- Tamma, K. K., D.Sha, and Zhou, X., 2003b, Time Discretized Operators. Part II: Towards the Theoretical Design of a New Generation of a Generalized Family of Unconditional Stable Implicit and Explicit Representation of Arbitrary

Order, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg”, Vol. 192, pp. 291–329.

Tamma, K. K., Zhou, X., and Kanapady, R., 2002, The Time Dimension and a Unified Mathematical Framework for First-Order Parabolic Systems, “Numerical Heat Transfer, Part B”, Vol. 41, pp. 239–262.

Tamma, K. K., Zhou, X., and Valasutean, R., 1997, Computational algorithms for transient analysis: the burden of weight and consequences towards formalizing discrete numerically assigned [DNA] algorithmic markers: W_p -family, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.”, Vol. 149, pp. 153–188.

Zhong, W., Zhu, J., and Zhong, X. X., 1996, On a new time integration method for solving time dependant partial differential equations, “Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.”, Vol. 130, pp. 163–178.

APPLICATION OF THIRD ORDER W_p SCHEMES IN TRANSIENT ANALYSIS USING THE FINITE ELEMENT METHOD

Vicente Luiz Scalon

Dept. of Mechanical Engineering, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: scalon@feb.unesp.br

Alcides Padilha

Dept. of Mechanical Engineering, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: padilha@feb.unesp.br

Fernando Massucheto Jorge

Dept. of Mechanical Engineering, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: fjorge20@yahoo.com

Marcos Paulo de Carvalho Oliveira

Dept. of Mechanical Engineering, FEB, UNESP,17033-360, Bauru, SP
e-mail: mpcoliveira@feb.unesp.br

Abstract

The development of numerical methods associated to the evolution of computers processors leads to a new alternative for physical formulation. So, in a different way of 20 years ago, the numerical model for study physical phenomenon is much more cheap than realize an experimental study. Physical problems with transient analisys are usually complex and the use of lowers time increments leads to a long time to achieve the complete solution. Thus, in this paper a comparative analysis of first, second and third order W_p schemes for solution by finite elements methods will be done. This implementation for parabolic systems were presented as an integral operators series with the objective to achieve the time integration. In a different way of the tradidional methods, this family schemes uses also a weight function for the time in the transient analysis. In this scheme, it's possible obtain a equation system through integrations by parts. The advantage of this formulation is the maintenance of the problem geometry and any other characteristics of the discretization in space: approximation functions and schemes for the weighting functions. For the results validation, it was chosen a one-dimensional transient conduction problem in a plain wall, which the analytical solution is known. The results using the W_p scheme of first, second and third orders and the errors of these solutions were analyzed as function of time and mesh.

Keywords: Transient Analysis, Finite Element Method, W_p Transient Schemes.