

Procedimento Iterativo na Formulação Quase-Dual do Método dos Elementos de Contorno para Solução de Problemas Difusivo-Advectivos

Carlos Friedrich Loeffler

Universidade Federal do Espírito Santo, Depto. Engenharia Mecânica
Av Fernando Ferrari, 514, Vitória, ES – CEP 29075-910 – Brasil
carlosloeffler@bol.com.br

Resumo: *Este trabalho consiste numa tentativa de melhorar o desempenho da formulação Quase-Dual do Método dos Elementos de Contorno em problemas difusivos-advectivos bidimensionais. A proposição original da formulação apresenta deficiências na eleição de uma necessária função primitiva, quando o campo de variáveis a ser transformado não é conservativo e, portanto, não é integrável. Busca-se minimizar o problema e oferecer uma perspectiva de solução do mesmo através de um esquema iterativo, no qual o balanço de energia é verificado e sua obediência serve de base para a construção de uma melhor aproximação da função primitiva requerida. O esquema proposto não resolve completamente o problema, mas produz uma melhora significativa nos resultados. Um problema bidimensional típico é apresentado para comparação e avaliação dos resultados.*

Introdução

A formulação com Quase-Dupla Reciprocidade (Loeffler e Mansur, 2003) foi desenvolvida com o propósito de tornar mais acessível a solução de problemas de engenharia nos quais a equação de governo contenha derivadas espaciais de primeira ordem, como nos casos difusivos-advectivos e fisicamente heterogêneos. Usando um procedimento matemático similar à formulação do Método dos Elementos de Contorno com Dupla Reciprocidade (Partridge et al, 1992), que usa funções radiais para auxiliar a aproximação do campo de variáveis, a Quase-Dupla apresenta as mesmas facilidades operacionais e simplicidade matemática da formulação

precedente. Problemas unidimensionais e algumas situações bidimensionais já foram resolvidas satisfatoriamente, mas não se pode alcançar a generalidade do procedimento em duas ou mais dimensões, devido a ausência de condições que garantam a existência de uma função primitiva capaz de gerar o campo produzido pelo produto das temperaturas pelas velocidades. Em razão disso, foi proposto um esquema iterativo no qual se procura enriquecer a seqüência de funções radiais auxiliares e novamente aplicá-las na solução do problema com vistas a melhor aproximar esse campo.

Formulação Básica

A equação diferencial de governo para problemas difusivos-advectivos (Shames, 1973) é dada por:

$$K\theta_{,ii} - v_i\theta_{,i} = 0 \quad (1)$$

onde θ é a temperatura, K é um escalar que representa as propriedades térmicas de um fluido homogêneo em que v_i denota as suas componentes de velocidade. As condições de contorno essenciais e naturais são definidas ao longo do contorno $\Gamma = \Gamma_u + \Gamma_q$ respectivamente por:

$$\theta = \bar{\theta} \quad \text{em } \Gamma_u \quad (2)$$

$$K\theta_{,i}n_i - \theta v_i n_i = \bar{f} \quad \text{em } \Gamma_q \quad (3)$$

A aplicação da formulação com Quase-Dupla Reciprocidade (QDR) requer condições de escoamento potencial, ou seja, haja incompressibilidade do fluido, expressa por:

$$v_{i,i} = 0 \quad (4)$$

Desse modo, a equação (1) pode ser reescrita como:

$$K\theta_{,ii} - (v_i\theta)_{,i} = 0 \quad (5)$$

A QDR emprega uma solução fundamental difusiva (Brebbia, 1978), dada por:

$$\theta^*(\xi; X) = \left(\frac{-1}{2\pi}\right) \ln r(\xi; X) \quad (6)$$

Na equação (6), $r(\xi; X)$ é a distância euclidiana entre os pontos fonte ξ e os pontos campo X . Inicialmente, a equação de governo (5) deve ser posta numa forma integral forte, integrada sobre um volume de controle infinitesimal, com o auxílio da função $\theta^*(\xi; X)$:

$$K \int_{\Omega} \theta_{,ii} \theta^* d\Omega = \int_{\Omega} (v_i \theta)_{,i} \theta^* d\Omega \quad (7)$$

O tratamento matemático do lado esquerdo da equação (7) é trivial; toda a atenção deve ser dada ao lado direito. Usando integração por partes, a seguinte identidade pode ser encontrada:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (v_i \theta)_{,i} \theta^* d\Omega = \\ \int_{\Omega} (v_i \theta \theta^*)_{,i} d\Omega - \int_{\Omega} v_i \theta \theta^*_{,i} d\Omega \end{aligned} \quad (8)$$

Usando-se o Teorema da Divergência:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (v_i \theta)_{,i} \theta^* d\Omega = \\ \int_{\Gamma} v_i n_i \theta \theta^* d\Gamma - \int_{\Omega} v_i \theta \theta^*_{,i} d\Omega \end{aligned} \quad (9)$$

Quase-Dupla Reciprocidade

O objetivo da QDR é transformar a integral de volume do lado direito da equação precedente numa integral de contorno. Para tanto, faz-se a seguinte aproximação:

$$b_i = v_i \theta \approx \alpha_p^j \Psi_{p,i}^j = \alpha_p^j \eta_{pi}^j \quad (10)$$

Na equação (10) α é um vetor de constantes a determinar, η é uma função de interpolação e ψ sua primitiva espacial. A forma diádica dessas funções, que contrasta com a forma vetorial usualmente empregada nas formulações tradicionais com reciprocidade deve-se a condições operacionais (Massaro e Loeffler, 2001). Assim sendo, pode-se escrever:

$$\int_{\Omega} v_i \theta \theta^*_{,i} d\Omega = \alpha_p^j \int_{\Omega} \Psi_{p,i}^j \theta^*_{,i} d\Omega \quad (11)$$

Uma vez mais, usando-se a integração por partes:

$$\begin{aligned} \alpha_p^j \int_{\Omega} \Psi_{p,i}^j \theta^*_{,i} d\Omega = \\ \alpha_p^j \int_{\Omega} (\Psi_{p,i}^j \theta^*)_{,i} d\Omega - \alpha_p^j \int_{\Omega} \Psi_{p,ii}^j \theta^* d\Omega \end{aligned} \quad (12)$$

Usando-se a solução fundamental difusiva (equação (6)) e as propriedades da função Delta de Dirac, tem-se:

$$\alpha_p^j \int_{\Omega} \Psi_{p,ii}^j \theta^* d\Omega = -\alpha_p^j c(\xi) \Psi_p^j(\xi) \quad (13)$$

Empregando-se o Teorema da Divergência uma vez mais e substituindo a equação (13) na equação (12), encontra-se:

$$\begin{aligned} \alpha_p^j \int_{\Omega} \Psi_{p,i}^j \theta^*_{,i} d\Omega = \\ \alpha_p^j \int_{\Gamma} \Psi_{p,i}^j \theta^*_{,i} n_i d\Gamma + \alpha_p^j c(\xi) \Psi_p^j(\xi) \end{aligned} \quad (14)$$

A equação integral completa na forma inversa fica:

$$\begin{aligned} K \left\{ c(\xi) \theta(\xi) + \int_{\Gamma} [\theta q^* - q \theta^*] d\Gamma \right\} = \\ - \int_{\Gamma} v_i n_i \theta \theta^*_{,i} d\Gamma + \\ \alpha_p^j \left[\int_{\Gamma} \Psi_{p,i}^j \theta^*_{,i} n_i d\Gamma + c(\xi) \Psi_p^j(\xi) \right] \end{aligned} \quad (16)$$

Nessa última equação, q e q^* significam respectivamente a derivada normal

da temperatura e a derivada normal da solução fundamental. O coeficiente $c(\xi)$ está associado a localização de ξ com relação ao domínio: se interno, externo ou posicionado no contorno. Essa equação pode ser discretizada segundo os procedimentos tradicionais do Método dos Elementos de Contorno (Wrobel e Aliabadi, 2002), resultando então na seguinte equação matricial:

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\theta} - \mathbf{G}\mathbf{Q} = -\mathbf{B}\boldsymbol{\theta} + \mathbf{H}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\alpha} \quad (17)$$

O próximo passo consiste na eliminação do vetor $\boldsymbol{\alpha}$ na equação (17). Isso pode ser conseguido a partir de:

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\eta}^{-1}\mathbf{b} = \boldsymbol{\eta}^{-1}[\mathbf{V}\boldsymbol{\theta}] \quad (18)$$

Então, na solução direta tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\boldsymbol{\theta} - \mathbf{G}\mathbf{Q} = \\ -\mathbf{B}\boldsymbol{\theta} + \mathbf{H}\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\eta}^{-1}\mathbf{V}\boldsymbol{\theta} = -\mathbf{B}\boldsymbol{\theta} + \mathbf{M}\boldsymbol{\theta} \end{aligned} \quad (19)$$

Esquema Iterativo

A idéia de se estabelecer um processo iterativo de solução se fundamenta em dois principais fatores.

Primeiramente, aproveitar a idéia de aproximar $v_i\theta$ por uma combinação linear de duas funções independentes, dada por:

$$v_i\theta = \alpha_p^j \eta_{p_i}^j + \beta_p^j \rho_{p_i}^j \quad (20)$$

Na equação (20), β é um vetor de coeficientes e ρ é uma função de interpolação diádica. A dificuldade de empregar esta expressão no método direto consiste em se encontrar informações para se calcular α e β . Já num processo iterativo, poderia se lançar mão de condições adicionais para esse intento.

Em segundo lugar, haveria melhor avaliação da integral de $v_i\theta$ (que pode ser uma integral inexata, caso não haja a função primitiva de $v_i\theta$) a partir da soma de uma função integrável e outra não integrável. O

emprego de uma equação de balanço de fluxo no esquema iterativo fornece as informações adicionais para uma aproximação relativamente consistente nesse sentido.

O ponto de partida é a seguinte integral:

$$\int v_i\theta dx_i = \alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j \quad (20)$$

onde:

$$\begin{aligned} v_i\theta = [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j]_{,i} = \\ \alpha_p^j \psi_{p,i}^j + \beta_p^j \phi_{p,i}^j = \alpha_p^j \eta_{p_i}^j + \beta_p^j \rho_{p,i}^j \end{aligned} \quad (21)$$

As funções ϕ_p^j não são integráveis, pois que a integral de $v_i\theta$ é inexata no caso geral. No processo iterativo proposto, processa-se inicialmente a solução do problema considerando que a integral (20) é exata, ou seja, admite-se que há uma primitiva para $v_i\theta$:

$$\int v_i\theta dx_i = \alpha_p^j \Psi_p^j \quad (22)$$

Naturalmente, nesse caso:

$$\beta_p^j = 0 \quad (23)$$

Por outro lado, define-se o vetor P_i como sendo:

$$P_i = v_i\theta - K\theta_{,i} \quad (24)$$

Na equação anterior pode-se associar claramente $v_i\theta$ ao fluxo de calor advectivo e $K\theta_{,i}$ ao fluxo de calor difusivo. Os casos em que o vetor P_i é nulo são aqueles em que a QDR funciona perfeitamente, e o balanço de energia aponta os fluxos difusivos e advectivos iguais em cada direção coordenada.

Uma hipótese aceitável, que é aqui empregada, consiste em se expressar:

$$\beta_p^j = \beta_p^j(P_i) \quad (25)$$

Evidentemente, a equação de governo se reescreveria como:

$$P_{i,i} = v_i \theta_{,i} - K \theta_{,ii} = 0 \quad (26)$$

O processo iterativo mencionado se principia considerando que P_i é nulo. O arranjo matricial fica obediente às equações (17) e (18), como de praxe no esquema direto. Todavia, após a solução do problema e ordenação dos valores de temperatura e fluxo difusivo, é preciso calcular as derivadas direcionais da temperatura. Para isso, faz-se:

$$v_i \theta = \eta_{pi}^j \alpha_p^j \quad (27)$$

Tal como num produto escalar, multiplicando-se a equação anterior por v_i :

$$v_i v_i \theta = v^2 \theta = \eta_{pi}^j v_i \alpha_p^j \quad (28)$$

No caso do campo de velocidades ser constante:

$$v^2 \theta_{,k} = \eta_{pi,k}^j v_i \alpha_p^j \quad (29)$$

ou melhor:

$$\theta_{,k} = \frac{1}{v^2} v_i \eta_{pi,k}^j \alpha_p^j \quad (30)$$

Naturalmente, existem outros procedimentos para determinação das derivadas direcionais; entretanto, este é mais ajustado à metodologia empregada, especialmente considerando-se que os elementos de contorno utilizados são constantes.

Para a avaliação de β , faz-se inicialmente a determinação de P_i , usando a equação (26); feito isso, propôs-se a seguinte aproximação:

$$P_i = S_{ip}^j \beta_p^j \quad (31)$$

Nesta última equação, a função S_{ip}^j foi arbitrada na forma:

$$S_{ip}^j = 3r r_i r_p - 4r^3 \delta_{ip} \quad (32)$$

Pode-se verificar que, obedecendo-se à equação (26), deve-se ter:

$$S_{ip,i}^j = 0 \quad (33)$$

Voltando-se à expressão integral, tem-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_i \theta \theta_{,i}^* d\Omega &= \int_{\Omega} [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j]_{,i} \theta_{,i}^* d\Omega = \\ &= \int_{\Omega} \{ [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j] \theta_{,i}^* \}_{,i} d\Omega - \int_{\Omega} [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j] \theta_{,ii}^* d\Omega = \\ &= \int_{\Gamma} [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j] \theta_{,i}^* n_i d\Gamma - \\ &= \int_{\Omega} [\alpha_p^j \psi_p^j + \beta_p^j \phi_p^j] \theta_{,ii}^* d\Omega \end{aligned} \quad (34)$$

Na forma matricial:

$$\mathbf{H}\Theta - \mathbf{GQ} = -\mathbf{B}\Theta + \mathbf{H}\Psi\alpha + \mathbf{H}\Phi\beta \quad (35)$$

Os vetores α e β são retirados das seguintes equações:

$$\alpha = \eta^{-1}\Theta \quad (36)$$

$$\beta = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{P} \quad (37)$$

As características da função ϕ são especiais, e ainda devem ser melhor estudadas. Uma possibilidade aqui empregada consiste em:

$$\phi_1^j = [x_2(X) - x_2(X^j)].C^e / k \quad (38)$$

$$\phi_2^j = [x_1(X) - x_1(X^j)].C^e / k \quad (39)$$

Nas expressões anteriores, C^e corresponde ao tamanho do elemento de contorno correspondente ao ponto nodal X , k é um fator de correção e X^j são os pontos escolhidos para a interpolação.

Em princípio, o esquema proposto visava uma única iteração; mas se percebeu que muitas vezes uma melhor eficiência era obtida com a acumulação de valores de $H\phi\beta$. Imaginou-se então que o procedimento iterativo continuado tinha relação com a necessidade de se gerar uma seqüência mais numerosa de funções base para melhor representar a integral inexata (20), mas experiências posteriores mostraram que essas múltiplas iterações se devem ao valor inadequado imposto ao quociente C^e/k . Valores superestimados da constante k reduzem a taxa de convergência do processo iterativo.

Considerando-se, então, a multiplicidade das iterações, tem-se:

$$\int v_i \theta dx_i = \alpha_p^j \psi_p^j + \sum_{m=1}^{\infty} \phi_p^{j,m} \beta_p^j \quad (40)$$

Após o processo de discretização, matricialmente tem-se:

$$\mathbf{H}\Theta - \mathbf{G}\mathbf{Q} = -\mathbf{B}\Theta + \mathbf{M}\Theta + \mathbf{H}\Phi\beta^1 + \mathbf{H}\Phi\beta^2 + \dots + \mathbf{H}\Phi\beta^m \quad (41)$$

Ressalta-se que também:

$$\beta^m = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{P}^m \quad (42)$$

onde:

$$\mathbf{P}_i^m = \mathbf{v}_i \theta^m - \mathbf{K}\theta_i^m \quad (43)$$

Exemplo-Teste

O esquema iterativo foi aplicado em um exemplo no qual um volume de controle bidimensional é atravessado por um campo de velocidades constante. A Figura 1 mostra as características físicas e geométricas desse caso. As componentes horizontal e vertical da velocidade são denotadas respectivamente por v e w .

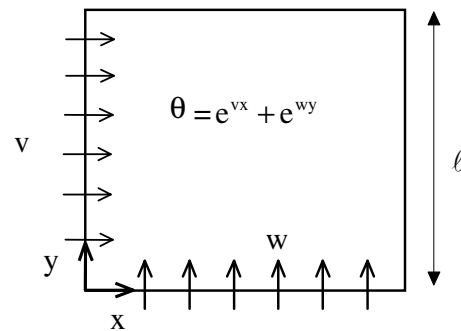


Figura 1 – Características geométricas e físicas do volume de controle examinado.

Condições de contorno exclusivamente do tipo essencial são prescritas nos quatro lados do domínio quadrado; a solução analítica desse caso é dada pela seguinte expressão:

$$\theta = e^{vx} + e^{wy} \quad (44)$$

Este problema não foi resolvido satisfatoriamente através do uso direto da QDR. Os resultados obtidos com o processo iterativo são apresentados juntamente com o resultado direto da formulação. Os valores numéricos obtidos, referentes ao fluxo difusivo de calor na direção normal, são comparados com a solução analítica, facilmente disponível pela derivação da equação (44). Inicialmente foram considerados valores unitários para as componentes de velocidade. O valor das arestas e de K também são unitários. Empregaram-se malhas de 16, 40, 80 e 160 elementos constantes uniformes.

A Tabela 1 mostra o erro médio percentual global, considerando todos os pontos nodais, na determinação dos fluxos difusivos de calor. O processo iterativo não funcionou para a malha menos refinada e a razão pode estar ligada à deficiência da QDR na determinação das derivadas espaciais (Equação 30). Assim, o procedimento requer um número mínimo de elementos constantes para convergir. Por outro lado, o enriquecimento demasiado da malha não produziu melhoras significativas: os

resultados usando 80 e 160 elementos constantes foram praticamente os mesmos.

	16BE	40 BE	80 BE	160 BE
1ª iteração:	13,78	11,37	10,52	10,06
2ª iteração:	42,48	8,92	3,62	3,72
3ª iteração:	14,54	7,57	3,62	3,61
4ª iteração:	28,37	7,68	3,62	3,61
5ª iteração:	21,51	7,67	3,62	3,61
6ª iteração:	24,91	7,67	3,62	3,61
7ª iteração:	23,23	7,67	3,62	3,61
8ª iteração:	23,78	7,67	3,62	3,61

Tabela 1 - Erro médio percentual no cálculo dos fluxos em função da quantidade de elementos de contorno

Verifica-se uma redução significativa nos valores do erro médio percentual, especialmente com a malha de 80 elementos de contorno. Nesses testes, o valor de k (veja equação (38)) foi considerado como sendo igual a 0,5. Na Tabela 2 o efeito de k é avaliado:

	$k=3$	$k=1$	$k=0,5$	$k=0,3$
1ª iteração:	11,37	11,37	11,37	11,37
2ª iteração:	8,02	3,92	8,92	22,2
3ª iteração:	5,71	4,37	7,57	5,41
4ª iteração:	4,66	6,15	7,68	16,81
5ª iteração:	3,88	6,07	7,67	3,69
6ª iteração:	3,58	7,35	7,67	13,37
7ª iteração:	3,60	7,52	7,67	3,82
8ª iteração:	3,92	7,60	7,67	11,11
9ª iteração:	4,48	7,64	7,67	5,07
10ª iteração:	5,06	7,65	7,62	9,77
11ª iteração:	5,53	7,66	7,67	6,01
12ª iteração:	5,91	7,67	7,67	9,00
20ª iteração:	7,61	7,67	7,67	7,39

Tabela 2 - Evolução do erro médio percentual no cálculo dos fluxos em função do valor do coeficiente k com 40 elementos de contorno

Percebe-se que nessas simulações o valor mais adequado de k foi 0,5. Valores maiores produziram baixa taxa de convergência e valores menores resultaram em oscilações no processo iterativo. Conforme exposto, o valor de k tem relação direta com a quantificação do vetor P_i em cada iteração, ou seja, k controla a intensidade da aplicação desse vetor no processo. Para valores altos, o processo torna-se demorado, mas alcança-se uma solução sem instabilidade. Talvez não houvesse necessidade de múltiplas iterações, caso k pudesse ser escolhido adequadamente.

Velocid. $v=w$	1.0	2.0	3.0
QDR direto	11,37	59,27	223,72
QDR iterativo	7,67	30,86	161,41
DRT	3,52	3,41	10,08

Tabela 3 - Erro médio percentual no cálculo dos fluxos em função velocidade do escoamento, com 40 elementos de contorno

Na Tabela 3 são apresentados os valores do erro médio percentual com a QDR para valores maiores de velocidade. Para melhor avaliação são apresentados também os valores obtidos com a formulação com Dupla Reciprocidade Tradicional (DRT). Todos os resultados referem-se a simulações feitas com malhas compostas de 40 elementos de contorno.

Percebe-se que com o aumento da velocidade do escoamento, os resultados da QDR, mesmo com o procedimento iterativo, tornam-se ainda mais insatisfatórios para velocidades maiores. O que significa que algum procedimento adicional deve ser implementado para viabilizar seu emprego como formulação competitiva.

Deve-se ressaltar que em todas as discretizações empregadas não foram usado pólos ou pontos internos interpolantes. Constatou-se que a QDR prescinde desse recurso, mas o desempenho da DRT seria melhorado caso fossem introduzidos esses pontos adicionais de interpolação.

Conclusões Parciais

O procedimento iterativo apresentado, baseado na idéia de se construir uma seqüência mais completa de funções para representação do campo produzido pelo produto das velocidades pela temperatura, e assim permitir a eleição de uma função primitiva integrável, mostrou possuir relativa consistência, pois uma melhoria de desempenho pode ser nitidamente observada nos resultados obtidos diretamente. Todavia, diante do desempenho ainda deficiente da QDR, os procedimentos matemáticos expostos ainda devem ser melhor investigados, especialmente o emprego das funções diádicas especiais, fundamental na formulação do esquema iterativo e relacionado diretamente ao bom desempenho numérico do esquema.

Embora não tenha sido apresentada, a simulação de outros problemas correlatos mostrou que o esquema proposto apresenta maior eficácia quando a extensão das condições de contorno naturais prescritas é maior, exatamente o oposto do que ocorre no exemplo teste mostrado, propositadamente escolhido por sua maior dificuldade de resolução, onde apenas temperaturas são prescritas em todo o contorno.

Apesar do nível ainda deficiente de precisão, as vantagens que o procedimento iterativo proposto oferece com relação às formulações do MEC vigentes justificam a continuidade dessa pesquisa.

Referências

- C.A. Brebbia, "The Boundary Element Method for Engineers", Pentech Press, London, 1978.
- C.A. Brebbia, J.C. Telles and L.C. Wrobel, "Boundary Element Techniques", Springer Verlag, Berlin, 1984.
- C.F. Loeffler, W. J. Mansur, Quasi-Dual Reciprocity Boundary Element Method for Incompressible Flow: Application to the Diffusive-Advective Equation, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 58, pp 1167-1186 (2003).
- C.A.M. Massaro, C.F. Loeffler, Boundary Element Formulation Applied in the Solution of Convective-Diffusive Heat Transfer Problems, "Proceedings of XVI COBEM", Uberlândia, 2001.
- P.W. Partridge, C.A. Brebbia, L.C. Wrobel, "The Dual Reciprocity, Boundary Element Method", Computational Mechanics Publications and Elsevier, London, 1992.
- I. H. Shames, "Mecânica dos Fluidos", Editora Edgard Blücher, São Paulo, 1973.
- L.C. Wrobel, M.H. Aliabadi, "The Boundary Element Method", Wiley, Chichester, 2002.