

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO UNIDIMENSIONAL COM SOLUÇÃO SUAVE UTILIZANDO MALHA ADAPTATIVA

Gabriel Marcos Magalhães, Universidade Federal de Uberlândia, gabrielmarcosmag@gmail.com

Hélio Ribeiro Neto, Universidade Federal de Uberlândia, heliorine@hotmail.com

Aristeu da Silveira Neto, Universidade Federal de Uberlândia, aristeus@mecanica.ufu.br

Resumo: Em problemas de engenharia é comum que se tenha singularidades de propriedades: físicas, geométricas e na própria solução. Para a solução numérica desses problemas é necessário um determinado passo espacial para que se obtenha a acurácia pretendida. Nas demais regiões do domínio a utilização do mesmo passo espacial é desnecessária e indesejada, pois não existirão grandes ganhos na acurácia da solução e o custo computacional será elevado. Nesses casos, a utilização da metodologia de Refinamento Adaptativo de Malhas Estruturadas (RAME) é interessante, pois possibilita o elevado refinamento da malha em regiões de interesse, enquanto permite baixo nível de refinamento nas demais regiões do domínio numérico. No presente trabalho apresentam-se a solução da equação da difusão unidimensional e transiente com solução suave, imposta através do método de solução manufaturada, utilizando a metodologia RAME. Conhecendo as características da solução optou-se pelo posicionamento dos níveis de máximo refinamento em torno dos pontos de máxima derivada da função. O critério de remalhagem dinâmica adotado depende da velocidade com que a função se movimenta no domínio. A técnica de remalhagem utilizada no presente trabalho foi a h-refinement com número fixo de pontos ao longo do domínio computacional. O programa desenvolvido permite a utilização de quantos níveis e blocos de refinamento forem necessários. A decisão da topologia da malha inicial deve ser tomada pelo usuário. Dessa forma vários testes podem ser realizados e analisados. Foram feitas três simulações para se analisar os ganhos que a metodologia RAME pode proporcionar. Na primeira utilizou-se a metodologia RAME com dois níveis de refinamento: o base (passo espacial grosso) e o fino (passo espacial fino). Na segunda e na terceira foram utilizadas malhas uniformes com passo espacial grosso e fino, respectivamente. Os resultados mostram que houve um aumento da acurácia na solução do problema com a metodologia RAME, quando comparada com a da segunda simulação. Além disso, houve um ganho em tempo de execução quando comparado com o da terceira simulação.

Palavras-chave: Equação da difusão, h-refinement, malha com refinamento móvel, malha estruturada

1. INTRODUÇÃO

Muitos problemas que aparecem corriqueiramente na engenharia envolvem a análise da taxa de variação, ou seja, a análise da derivada, de uma ou mais propriedades físicas em relação ao tempo e/ou espaço. Por exemplo, em Mecânica de Fluidos, uma das áreas da Engenharia Mecânica, a modelagem matemática de fenômenos físicos conduz, em muitos casos, à Equações Diferenciais Parciais (EDPs).

Nesta área do conhecimento utilizam-se técnicas muito difundidas para solução numérica de equações diferenciais ordinárias e parciais, dentre as quais podemos destacar: Método dos Elementos Finitos, o Método de Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Volumes Finitos. No método dos volumes finitos os valores são calculados em razões discretas em uma malha espacial que representa o domínio. De acordo com Ferziger and Peric (2012), neste método as equações diferenciais são integradas em volumes de controle que formam a malha computacional, o que resulta em uma formulação fisicamente conservativa.

No presente trabalho utiliza-se uma malha estruturada composta por blocos de diferentes níveis que acompanham a solução. A técnica utilizada é baseada no que foi proposto por Berger and Olinger (1984) utiliza blocos de malhas retangulares, orientadas e organizadas de acordo com uma hierarquia de níveis de refinamento, devidamente aninhadas. Com a utilização desse método, há um alto ganho de custo computacional, pois não é preciso refinar todo o domínio para capturar informações que só são obtidas com o uso de malhas mais finas. O refinamento dinâmico bloco-estruturado utiliza esse método e identifica os locais nos quais são necessários o uso de menores espaçamentos. Isso possibilita a resolução de vários escoamentos, nos quais a região que requer refinamento é móvel.

A proposta apresentada ao longo do texto faz o uso de uma técnica de remalhagem para que os pontos de interesse do domínio sejam resolvidos sempre por um bloco de malha mais refinada. Existem diversas estratégias de reconstrução de malha sobre um domínio conforme abordado por Brito (1998) e por outros autores. A técnica escolhida é chamada de Método de Redistribuição Nodal Estática (MRNE) que pode acontecer com redistribuição nodal ou com refinamento de malha sendo que, no caso tratado será utilizada o primeiro.

A resolução da equação da difusão unidimensional será resolvida em duas configurações de malha diferentes, porém ambas utilizam apenas dois níveis de refinamento, variando apenas o número de blocos presentes no domínio.

2. PROBLEMA DE INTERESSE

O presente trabalho possui como objetivo uma abordagem puramente matemática de uma equação diferencial parcial (EDP) unidimensional com termo fonte, a qual é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f(x, t) \quad (1)$$

Na Equação (1), U é a propriedade a ser transportada, esta propriedade é dependente do tempo t e da localização espacial x no domínio unidimensional. O parâmetro α da EDP é uma constante que pode ser considerada como o coeficiente de difusividade, determinando a rapidez com que a propriedade se difunde no domínio, por fim, $f(x,t)$ é uma função chamada de termo fonte. O termo fonte do problema de interesse é determinado com base em uma técnica de verificação computacional chamada método da solução manufaturada, a qual é apresentada na seção a seguir.

3. MÉTODO DA SOLUÇÃO MANUFATURADA

O termo fonte da Eq.(1) faz parte de uma técnica de verificação de códigos computacionais chamado método da solução manufaturada ou *Method of Manufactured Solutions (MMS)*. Segundo Salari and Knupp (2000) esse método é bastante robusto pois permite a identificação de qualquer erro no código que afete a taxa de convergência do método numérico.

A solução manufaturada $U_e(x,t)$ utilizada no presente trabalho é dependente de x e t e se movimenta no domínio ao longo do tempo. Essa escolha foi realizada visando possibilitar a implementação de uma estratégia para a reconstrução da malha sobre o domínio, mantendo os blocos de malha mais refinados sobre os pontos mais críticos da função U_e ao longo do tempo. A solução manufaturada escolhida para o presente trabalho é apresentada na Eq. (2), onde U_o corresponde a amplitude de $U_e(x,t)$, L é o tamanho do domínio e c é a velocidade com a qual a função se movimenta.

$$U_e(x,t) = U_o \sin\left(\frac{2\pi x}{L} - \frac{c \cdot t}{L}\right) \quad (2)$$

Para a obtenção do termo fonte $f(x,t)$ parte-se da Eq.(1), realizando a substituição de U por U_e . Isolando $f(x,t)$ tem-se:

$$f(x,t) = \frac{\partial U_e}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 U_e}{\partial x^2} \quad (3)$$

Calculando a primeira derivada de $U_e(x,t)$ em relação a t e a segunda derivada em relação a x e substituindo-as na Eq.(3) chega-se a Eq.(4).

$$f(x,t) = -\frac{c}{L} \cos\left(\frac{2\pi x}{L} - \frac{c \cdot t}{L}\right) + \alpha \left[\frac{4\pi^2}{L^2} \sin\left(\frac{2\pi x}{L} - \frac{c \cdot t}{L}\right) \right] \quad (4)$$

Definindo-se $L = 2\pi[m]$, $\alpha = L^2$, $U_o = 1[m/s]$ e chamando c/L de b podemos reescrever a Eq.(4) como a forma final do termo fonte, que é apresentado na Eq.(5).

$$f(x,t) = -b \cos(x - bt) + 4\pi^2 \sin(x - bt) \quad (5)$$

4. MÉTODO NUMÉRICO UTILIZADO

Para o desenvolvimento do trabalho foi utilizado o método dos volumes finitos com a formulação de diferenças centrais para avaliação dos fluxos. Utilizando a Eq.(1), faz-se a integral de superfície em um volume discreto, tanto o volume quanto os pontos utilizados nesse processo são ilustrados a seguir:



Figura 1: Representação dos pontos envolvidos na discretização.

Realizando a integração citada acima tem-se:

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_e^d \frac{\partial U}{\partial t} dx dt}_I = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_e^d \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} dx dt}_{II} + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_e^d f(x,t) dx dt}_{III} \quad (6)$$

É pertinente que se realize as seguintes observações a respeito dos termos I, II e III da Eq.(6):

- Termo I: a função integrada não é dependente de x ;
- Termo II: o parâmetro α é constante e, portanto, pode ser colocado fora da integral. Além disso, a parte restante da função não é dependente de t ;
- Termo III: considera-se o termo forçante constante dentro do volume de controle no tempo t , com valor definido em t e em x_i , onde x_i é o valor de x no centro da célula. Isso faz com que o valor da integral apresentada nesse termo seja aproximada por $\Delta x \Delta t f(x_i, t)^n$. Essa aproximação se torna exata, quando Δx e Δt tendem a zero.

Após tais considerações podemos reescrever a Eq.(6) como:

$$(U^{n+1} - U^n)\Delta x = \alpha \Delta t \left(\frac{\partial U}{\partial x} \Big|_d - \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_e \right)^n + \Delta x \Delta t f(x_i, t)^n \quad (7)$$

Fazendo uso da técnica de diferenças centradas nas derivadas parciais presentes na Eq.(7) tem-se:

$$(U_i^{n+1} - U_i^n)\Delta x = \alpha \Delta t \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{\Delta x} - \frac{U_i - U_{i-1}}{\Delta x} \right)^n + \Delta x \Delta t f(x_i, t)^n \quad (8)$$

onde o índice superior corresponde ao instante de tempo no qual a informação é avaliada, sendo que $n + 1$ corresponde a uma informação no tempo atual ($t + \Delta t$) e n corresponde ao tempo precedente (t). O índice inferior corresponde ao volume de controle no qual a função é avaliada, tomando como base a Fig.1, além disso, Δx e Δt são, respectivamente, o passo espacial e o passo temporal.

Para que se obtenha a equação explícita os termos obtidos no tempo atual são colocados do lado esquerdo da igualdade. Readequando a Eq.(8) segue

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n) + \Delta t f(x_i, t)^n \quad (9)$$

De posse da equação discretizada, antes de apresentar o critério de remalhagem e as interpolações utilizadas, são apresentadas as malhas utilizadas na obtenção dos resultados. Tal exposição é realizada na seção subsequente.

5. MALHAS UTILIZADAS

A proposta do trabalho é posicionar blocos mais refinados de malha sobre os pontos de máxima derivada da função ao longo do domínio. A princípio a solução manufaturada U_e está posicionada no domínio de modo que os valores a serem captados, seguindo o critério proposto, estão posicionados no início, no meio e no final do domínio.

Quanto ao passo espacial de cada nível, tem-se que o passo espacial do nível mais grosso ($k = 1$) deve ser definido pelo usuário e o passo espacial de um nível $k + 1$ será calculado como sendo a metade do passo espacial do nível k , conforme mostrado na Eq.(10).

$${}_{k+1}\Delta x = \frac{{}_k\Delta x}{2} \quad (10)$$

Em uma primeira tentativa, visando captar o comportamento da solução numérica à não conformidade com os critérios de posicionamento da malha utilizou-se uma configuração de malha conforme mostra a Fig.2. Nessa situação é usado somente um bloco do nível mais fino de malha, capturando somente o ponto de máxima derivada situado no meio do domínio. A segunda configuração de malha utilizada no domínio atende ao critério preestabelecido, posicionando três blocos do nível mais fino, localizados exatamente no início, no meio e no final do domínio, locais de ocorrência dos valores de máxima derivada da função U_e no instante t_o . A malha em questão, bem como a proporção do domínio tomada por cada bloco são apresentadas na Fig.3.

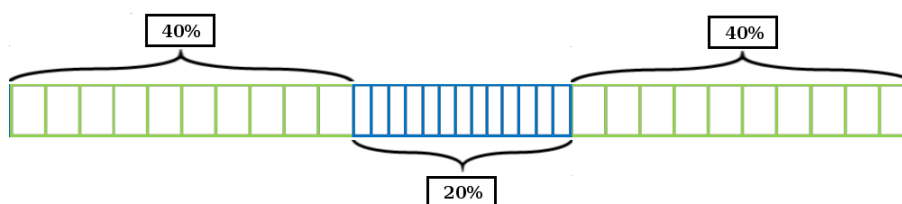


Figura 2: Configuração de malha 1: utilizando apenas um bloco de malha do nível mais fino.

Ao longo do presente trabalho, por questão de facilidade, a malha apresentada na Fig.2 será tratada por CM1 (configuração de malha 1), já a apresentada na Fig.3 será referenciada por CM2 (configuração de malha 2). Além disso, é muito importante ressaltar que a malha utilizada não faz uso de sobreposição de níveis.

Na resolução do problema as fronteiras do domínio foram submetidas a condição de Dirichlet.

6. REMALHAGEM DO DOMÍNIO

Dentre as várias estratégias de remalhagem existentes optou-se por utilizar o Método de Redistribuição Nodal Estática com Redistribuição Nodal (MRNERN), que também pode ser classificado como h-refinement com número de pontos constante no domínio. A estratégia trabalhada mantém o número de pontos constante no domínio e não precisa, necessariamente, trabalhar com uma equação governante da remalhagem, podendo simplesmente estabelecer um critério. Algumas características do MRNERN são: a movimentação da malha em intervalos de tempo previamente fixados, algoritmo de solução totalmente independente do algoritmo de remalhagem, reconstrução da malha por meio de interpolações

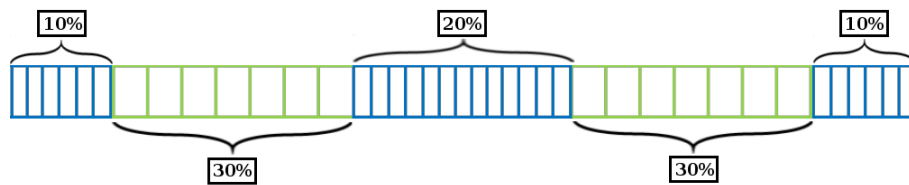


Figura 3: Configuração de malha 2: utilizando três blocos de malha do nível mais fino.

utilizando informações da configuração anterior e reposicionamento dos nós no domínio, mantendo o número de nós constante.

O critério de remalhagem adotado é dependente do parâmetro b , que corresponde ao valor de c/L , e do passo de tempo. Em suma, a malha é reconstruída todas as vezes que um determinado ponto discreto da função desloca uma distância correspondente a Δx . Obedecendo tal determinação os pontos de máxima derivada da função inicialmente envolvidos pelo nível fino não sairão do mesmo, partindo-se do pressuposto que o usuário coloque um número de células suficientes após o ponto crítico.

7. INTERPOLAÇÕES

As interpolações são parte fundamental do método pois são responsáveis pela comunicação entre níveis de malha diferentes e também pela transferência de informações durante o processo de remalhagem. No presente trabalho, utilizaram-se interpolações de terceiro grau em todos os casos nos quais existe a necessidade deste processo, para minimizar os erros, que são da ordem de Δx^n , onde n é a ordem do polinômio. Um polinômio de terceira ordem é suficiente para não influenciar nos erros inerentes ao MVF utilizado, pois a ordem do método de discretização espacial é 2, que implica em erros da ordem de Δx^2 , e a ordem do método de discretização temporal é 1, implicando em erros da ordem de Δt . Como Δt é calculado pela equação $\Delta t = CLF(\Delta x^2/\alpha)$, o erro da discretização temporal também é da ordem de Δx^2 . Para a determinação do polinômio interpolador no caso de comunicação entre níveis devem ser utilizados quatro pontos em torno da célula fantasma, sem levar em consideração outras células fantasmas que estejam na vizinhança. No processo de remalhagem são utilizados quatro pontos da malha anterior, conforme será melhor explicado posteriormente.

Todas as interpolações realizadas ao longo do processo de resolução utilizaram a formulação de Lagrange que pode ser encontrada em vários livros de cálculo numérico, como em Franco (2006). A interpolação de Lagrange utiliza, no caso da obtenção de um polinômio interpolador de terceiro grau, quatro pontos em torno da localização do domínio onde se deseja obter o valor da propriedade e o valor que a solução assume em tais pontos. A opção por tal método se deu pela generalidade e flexibilidade frente as situações ocorrentes.

7.1. Comunicação Entre Níveis

Sempre que acontece a transição entre níveis a distância entre o último nó de um e o primeiro nó do outro não obedece ao passo espacial de nenhum dos dois, e isso causa um problema já que o método de discretização utilizado exige a utilização de dois pontos igualmente espaçados em torno do ponto no qual se deseja obter o valor numérico da informação difundida. A solução utilizada para tal situação no presente trabalho foi a utilização de células fantasmas, ou seja, células que obedecem a exigência do método de diferenças finitas centradas mas que não fazem parte do domínio computacional e, dessa forma, não se sobrepõem as células existentes.

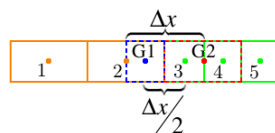


Figura 4: Células fantasmas utilizadas na comunicação entre níveis e os pontos envolvidos no cálculo das mesmas.

A Fig.4 mostra uma situação de comunicação entre níveis. Tomando como base os pontos mostrados tem-se que a distância entre os pontos 2 e 3 não é a mesma que ocorre entre os pontos 3 e 4, exigindo assim que se utilize uma célula ghost, no caso G1, para possibilitar a obtenção do valor da propriedade no nó 3. Para se obter o valor da informação em G1 são utilizadas as informações dos pontos 1, 2, 3 e 4 e, posteriormente, utiliza-se o valor de G1 para a realização do cálculo em questão. De maneira análoga, para a obtenção do valor no ponto 2 se faz necessária a utilização da célula fantasma G2, que é obtida por meio das informações dos pontos 2, 3, 4 e 5.

7.2. Remalhagem

O processo de remalhagem é uma parte importante já que necessita transferir informações de uma malha que estava sendo utilizada para uma outra configuração que foi gerada obedecendo ao critério imposto. Na Fig.5(a) e na Fig.5(b) são mostradas as situações de criação de uma célula grossa e de duas células finas na nova malha, respectivamente. Trata-se em ambas as figuras a situação (a) como a malha que estava sendo usada na resolução e (b) a malha atualizada.

Na Fig.5(a) duas células finas (3 e 4) da malha (a) são fundidas originando uma célula grossa (3) na malha (b). Projetando o ponto 3(b) na malha (a) usa-se os pontos 2, 3, 4 e 5 da malha (a) para se atualizar a informação no nó referido. Nas demais partes do domínio a informação de 1(a) é transferida para 1(b), bem como a de 2(a) para 2(b) e de 5(a) para 4(b). Em suma, quando os pontos possuem a mesma posição no domínio em ambas as configurações a informação pode ser transferida de forma direta, mas quando um ponto da nova malha não possui posição correspondente na configuração anterior é necessário interpolar.

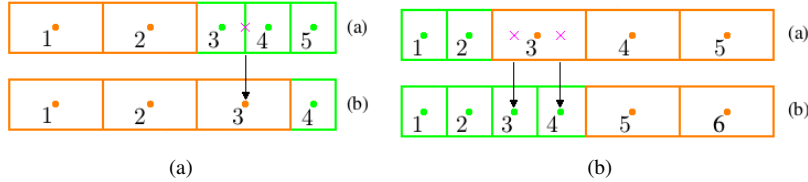


Figura 5: Atualização da malha com criação de (a) célula grossa e (b) célula fina.

De forma análoga, quando existe a criação de pontos do nível mais fino, existem nós na nova malha que podem ter a informação transferida de maneira direta por possuírem a mesma posição de pontos da configuração anterior mas agora dois pontos necessitam ter o valor da função determinado via interpolação. Na Fig.5(b) os pontos que podem ter a informação transferida de maneira direta na nova malha são 1, 2, 5 e 6, os pontos 3 e 4 devem ser determinados utilizando a técnica de Lagrange.

8. VERIFICAÇÃO COMPUTACIONAL

A verificação computacional é uma etapa fundamental para a implementação da técnica numérica, pois através deste processo é possível verificar se a solução aproximada está com erros da ordem de discretização do método. No presente trabalho a ordem de precisão obtida é determinada utilizando-se um gráfico $\log_2(\Delta x) \times \log_2(L_2)$, onde o cálculo da norma L_2 , que é dado pela Eq. (11), sendo n o número de células no domínio, x_{num} é o valor obtido numericamente e $x_{analítico}$ é o valor dado pela Eq.(2) no volume de controle i .

$$L_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_{num} - x_{analítico})^2}{n}} \quad (11)$$

Logo após a determinação do valor da norma L_2 , no instante t_f (tempo final), em malhas progressivamente refinadas sobre o domínio, é realizada uma regressão linear dos pontos no gráfico. O coeficiente angular da reta de ajuste (m) irá fornecer a ordem de precisão do método. Na Fig.6(a), onde é apresentada a taxa de convergência para a CM1, pode-se observar que $m = 2.00496$ e na Fig.6(b), a qual mostra o resultado da convergência para CM2, tem-se $m = 1.99081$, confirmando que, conforme pretendido, o método implementado apresenta taxa de convergência 2 para ambas as configurações de malha utilizadas.

Além da análise da taxa de convergência apresentada pelo método se faz importante a análise do comportamento de outra norma, a L_∞ , cujo valor é dado pela Eq.(12). Esta norma informa o maior valor de erro presente no domínio em dado instante de tempo, além de possibilitar junto ao código computacional determinar o ponto de ocorrência de tal valor.

$$L_\infty = \max_{i=1}^n |x_{num} - x_{analítico}| \quad (12)$$

A seguir é apresentado o comportamento da norma L_∞ para 4 configurações de malha, sendo as duas primeiras configurações compostas por malha uniforme com 100 nós na Fig.7(a) e 200 pontos na Fig.7(b). Os dois casos restantes fazem uso de malha adaptativa conforme CM1(Fig.7(c)) e CM2(Fig.7(d)). É importante ressaltar que todos os resultados apresentados são para $t_f = 57[s]$ e $b = 2.0[s^{-1}]$

A figura 7(a) apresenta a norma L_∞ para o caso em que se usa uma malha uniforme com 100 pontos, tendo-se um passo espacial $\Delta x = 0.0628318$. O gráfico da norma L_∞ mostrado na Fig.7(b) é também para uma situação de malha uniforme, porém utilizando 200 pontos sobre o domínio, levando a um passo espacial $\Delta x = 0.0314159$.

A figura 7(c) mostra a norma L_∞ para um caso da CM1, no qual cada bloco possui 40 pontos, levando aos passos espaciais ${}_1\Delta x = 0.0628318$ e ${}_2\Delta x = 0.0314159$ para os blocos de malha grossa e malha fina, respectivamente. Por fim, a Fig.7(d) mostra a norma L_∞ para um caso da CM2 no qual os blocos posicionados nos extremos do domínio possuem 20 pontos, os blocos de nível grosso 30 pontos e o bloco central de nível fino 40 pontos. O passo espacial de cada nível é ${}_1\Delta x = 0.0628318$ e ${}_2\Delta x = 0.0314159$ nessa situação.

Todos os resultados apresentados tanto para a norma L_∞ foram obtidos através da análise de todo o domínio, já para a norma L_2 o cálculo foi realizado levando em conta somente os blocos de malha mais refinada.

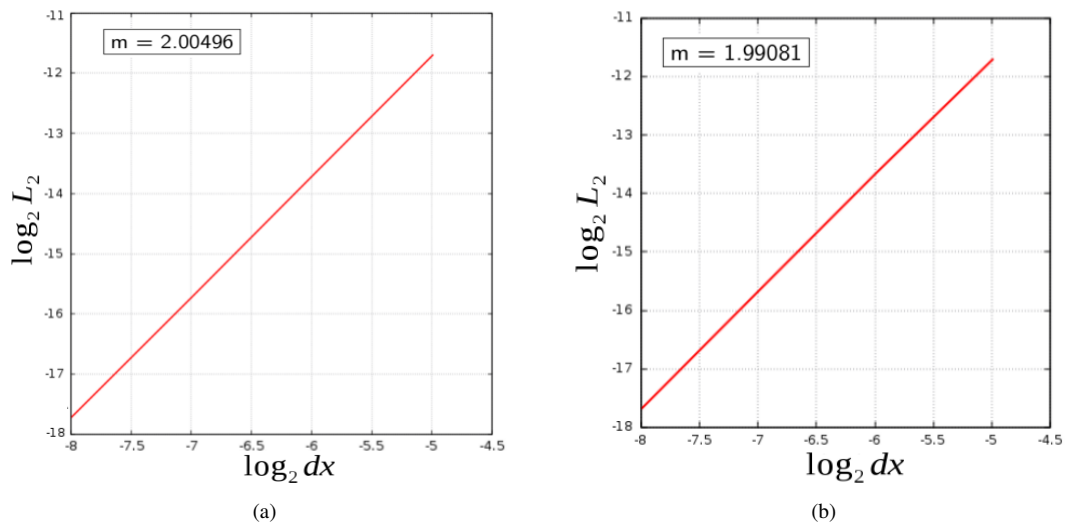


Figura 6: Gráfico da taxa de convergência para (a)CM1 e (b)CM2.

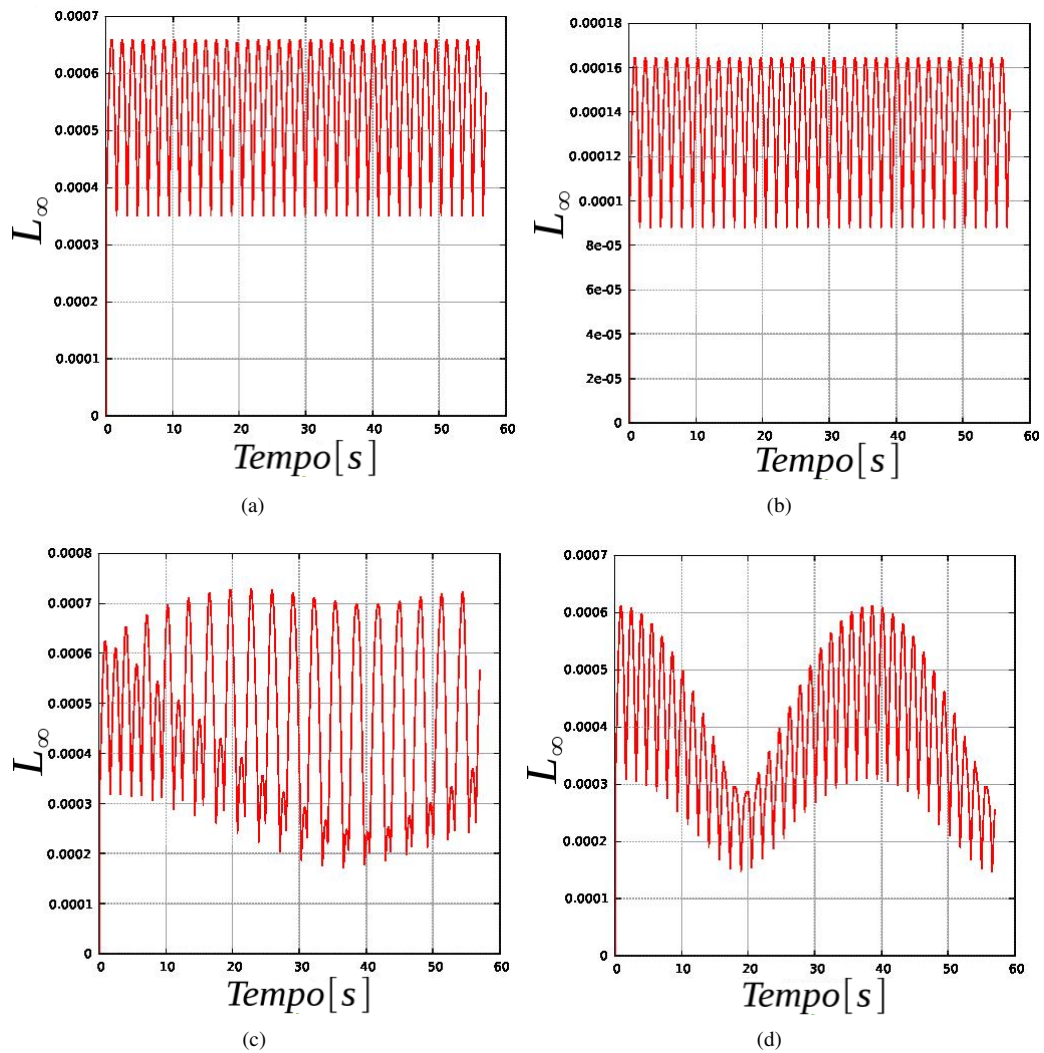


Figura 7: Gráfico da norma L_∞ para um domínio com malha uniforme de (a)100 pontos, (b)200 pontos e para os casos de (c)CM1 e (d)CM2.

9. CONCLUSÃO

O presente trabalho tem como objetivo avaliar a utilização da malha adaptativa em um problema unidimensional de difusão, utilizando o método da solução manufaturada para avaliar o erro e a taxa de convergência do método. Como esperado, observou-se que não houve ganhos de acurácia do método. O ganho em se utilizar a malha adaptativa é em tempo computacional. Propõe-se estudar em trabalhos futuros o ganho computacional da malha adaptativa.

10. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer à Petrobras, CAPES, FAPEMIG, CNPq, MFLab e à FEMEC/UFU pelo suporte no desenvolvimento do presente trabalho.

11. REFERÊNCIAS

- Berger, M. J. and Oliger, J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of computational Physics*, 53(3):484–512, 1984.
- Brito, P. M. P. d. Aplicação de métodos numéricos adaptativos na integração de sistemas algébrico-diferenciais caracterizados por frentes abruptas. 1998.
- Ferziger, J. H. and Peric, M. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- Franco, N. B. *Cálculo numérico*. Pearson, 2006.
- Salari, K. and Knupp, P. Code verification by the method of manufactured solutions. Technical report, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (US); Sandia National Labs., Livermore, CA (US), 2000.

12. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho.