

Uso de Malhas Não-Estruturadas na Resolução da Equação da Difusão

Gabriel Marcos Magalhães, Alessandro Alves Santana.

Laboratório de Mecânica dos Fluidos - MFLab, gabrielm@ufu.br

Palavras-chave

Método de reconstrução de alta ordem , método dos volumes finitos, malha não-estruturada

1. INTRODUÇÃO

Dentre os métodos de resolução numérica de EDPs, um bastante utilizado é o chamado Método dos Volumes Finitos (MVF) já que ele possui uma característica muito interessante na resolução de problemas de engenharia, além de outras áreas, que é a conservação da média da propriedade física envolvida na EDP em cada volume de controle. Utilizando o MVF há várias técnicas para se resolver uma EDP, entre elas estão os métodos de alta ordem. Os métodos de alta ordem têm o potencial de reduzir o esforço computacional requerido para um dado nível de precisão da solução mantendo ou aumentando a acurácia da solução.

Ollivier-Gooch and Van Altena (2002) propuseram um novo método chamado de Método de Reconstrução de Alta Ordem baseado em Mínimos Quadrados (MRAOMQ). A proposta de Gooch consiste em uma técnica de alta ordem que independe de qualquer tipo de topologia da malha, requerendo somente dados espaciais. A técnica usa estêncil fixo para uma dada ordem, pesos dependentes dos dados e a solução das equações de conservação. No que diz respeito ao MVF existem duas possibilidades de esquemas: *cell-vertex* e *cell-centered*. Quando se utiliza a primeira técnica as informações das propriedades físicas definidas pela função ϕ são armazenadas nos vértices dos triângulos da malha, já quando utiliza-se a segunda as informações são guardadas no centroide dos triângulos da malha. No presente trabalho foi usado o volume de controle centrado na célula (*cell-centered*). O presente trabalho visa resolver a Equação de Difusão. A resolução será realizada em geometrias com diferentes níveis de complexidade utilizando o MRAOMQ implementado em linguagem C.

2. MÉTODO DE RECONSTRUÇÃO DE SEGUNDA ORDEM

O MRAOMQ tem por essência a aproximação de uma função ϕ , em cada volume de controle, por um polinômio cujos coeficientes são baseados na série de Taylor da função e correspondem a valores de derivadas parciais. Esses coeficientes são obtidos de tal forma que se tenha garantia da conservação da média da propriedade ϕ em cada volume de controle. O polinômio obtido em cada volume de controle, nessa estratégia, é utilizado para calcular os fluxos nas faces de cada um dos mesmos. O procedimento detalhado para a obtenção dos sistemas lineares foi apresentado por Magalhães and Alves Santana (2015).

Nos volumes de controle internos da malha, que não tem nenhuma face na fronteira, o polinômio de reconstrução é obtido então resolvendo o sistema linear sobredeterminado.

$$\begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i \\ \omega_{i1} & \omega_{i1}\hat{x}_{i1} & \omega_{i1}\hat{y}_{i1} \\ \omega_{i2} & \omega_{i2}\hat{x}_{i2} & \omega_{i2}\hat{y}_{i2} \\ \omega_{i3} & \omega_{i3}\hat{x}_{i3} & \omega_{i3}\hat{y}_{i3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi \\ \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\phi}_i \\ \omega_{i1}\bar{\phi}_1 \\ \omega_{i2}\bar{\phi}_2 \\ \omega_{i3}\bar{\phi}_3 \end{bmatrix} \quad \text{com} \quad \omega_{ij} = \frac{1}{|\vec{x}_j - \vec{x}_i|^2} \quad (1)$$

sendo ω_{ij} parâmetros de ponderação baseados no inverso da distância do volume de controle i para o volume de controle vizinho j para levar em consideração a influência pela distância deste último na obtenção da solução. Com relação a reconstrução dos volumes de controle da fronteira, é necessário um tratamento especial para levar em consideração o tipo de condição de fronteira, as quais, no presente trabalho, podem ser Dirichlet ou Neumann. Para garantir que a ordem seja preservada no contorno, são adicionadas mais restrições na formação do sistema, já que os triângulos da fronteira possuem apenas um ou dois vizinhos no estêncil da reconstrução de segunda ordem. Tais adições são equações aplicadas nos pontos de Gauss da fronteira. Esses pontos, nada mais são que, as coordenadas dos pontos médios dos lados de cada triângulo na fronteira quando se trata de uma reconstrução de segunda ordem, porém, o número de pontos vai depender da ordem desejada para a reconstrução. Os sistemas obtidos para os volumes de controle posicionados nas fronteiras tanto sob condição de Dirichlet quanto de Neumann são apresentados a seguir:

Dirichlet

$$\begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i \\ 1 & \Delta x_g & \Delta y_g \\ \omega_{i1} & \omega_{i1}\hat{x}_{i1} & \omega_{i1}\hat{y}_{i1} \\ \omega_{i2} & \omega_{i2}\hat{x}_{i2} & \omega_{i2}\hat{y}_{i2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi \\ \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\phi}_i \\ \phi_g \\ \omega_{i1}\phi_1 \\ \omega_{i2}\phi_2 \end{bmatrix}$$

Neumann

$$\begin{bmatrix} 1 & \bar{x}_i & \bar{y}_i \\ 0 & (n_x)_g & (n_y)_g \\ \omega_{i1} & \omega_{i1}\hat{x}_{i1} & \omega_{i1}\hat{y}_{i1} \\ \omega_{i2} & \omega_{i2}\hat{x}_{i2} & \omega_{i2}\hat{y}_{i2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi \\ \phi_x \\ \phi_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\phi}_i \\ (\nabla \phi \cdot \vec{\eta})_g \\ \omega_{i1}\phi_1 \\ \omega_{i2}\phi_2 \end{bmatrix}$$

Nos sistemas lineares sobredeterminados apresentados acima tem-se que $\Delta x_g = x_g - x_i$, $\Delta y_g = y_g - y_i$, $\vec{\eta}_g = (n_x, n_y)$ (coordenadas da normal em relação aos ponto de Gauss na fronteira) e $\nabla \phi_g = (\phi_x(x_g, y_g), \phi_y(x_g, y_g))$ sendo (x_g, y_g) o ponto de Gauss na face da fronteira. Os pontos de Gauss no caso da reconstrução de segunda ordem são os pontos médios da respectiva face do volume de controle que está na fronteira.

3. RESOLUÇÃO DA EDP

Considere a equação da difusão com termo fonte no estado estacionário, a qual é dependente apenas das variáveis x e y e não varia com o tempo. Desse modo, se é adicionado ϕ_t no primeiro membro da equação a relação de igualdade é mantida, já que ϕ_t é zero.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) = f \quad (2)$$

Realiza-se a integração do termo transiente, do fluxo difusivo e do termo fonte da Eq. (2), em cada VC do domínio discretizado Ω . O termo transiente da Eq. (2) pode ser aproximado considerando o seu valor médio no volume de controle, denotando por A_Ω a área do domínio Ω e discretizando-o por diferenças progressivas. Sobre o termo do fluxo difusivo pode-se aplicar o Teorema de Gauss. Seguindo os passos mencionados e readequando a equação segue que

$$\bar{\phi}^{(n+1)} = \bar{\phi}^{(n)} - \frac{\alpha_k \Delta t}{A_\Omega} \left[\oint_{\partial \Omega} [-\nabla \cdot (\kappa \nabla \phi)] \cdot n ds - \iint_{\Omega} f d\Omega \right] \quad k = 1, 2, \dots, np \quad (3)$$

sendo np o número de estágios e α_k os parâmetros do método de Runge-Kutta time-stepping scheme que foi utilizado.

Percebe-se que, no desenvolvimento, a derivada de ϕ em relação ao tempo foi acrescentada com a finalidade de se montar um processo de integração temporal. O método de Runge-Kutta multistágio é um método de evolução temporal. Assim sendo, por ser um problema pseudotransiente, a integração temporal deverá ser realizada até atingir um estado estacionário. Dessa forma, a partir de uma solução inicial, a solução irá evoluir no tempo, e em cada iteração do processo de integração temporal, a solução será reconstruída com as aproximações nodais obtidas em cada volume de controle. Essas reconstruções, que são polinômios, são então utilizadas para calcular as integrais dos fluxos. No presente trabalho optou-se pela utilização do método de Runge-Kutta com 5 estágios e, baseado nisso, foram utilizados os parâmetros propostos por Gooch, os quais são dados por $\alpha_1 = 1/15$, $\alpha_2 = 7/45$, $\alpha_3 = 2/7$, $\alpha_4 = 1/2$ e $\alpha_5 = 1$.

O termo da integral dos fluxos difusivos envolve o cálculo de uma integral de linha em torno do VC. O contorno de um dado VC faz comunicação, tem intersecção, com outros volumes de controle. Assim sendo, considere-se um volume de controle I que tem uma face AB em comum com um volume de controle J, para calcular a integral na face AB, são realizadas algumas considerações.

A ordem do polinômio de reconstrução determina o número e a localização dos pontos de Gauss nas faces dos volumes de controle. As derivadas dos polinômios (que são as aproximações dos fluxos) são avaliadas nesses pontos localizados sobre a face AB ao se realizar o cálculo da integral de contorno. Os fluxos difusivos nos pontos de Gauss da face AB são calculados tomando as médias ponderadas pelas áreas dos volumes de controle ϕ_I e ϕ_J em cada ponto de Gauss. No caso do presente trabalho, que aborda o MRAOMQ de segunda ordem, foi utilizado um único ponto de Gauss em cada face do VC para cálculo dos fluxos das integrais de contorno. Para o cálculo do termo fonte foram utilizados os valores para os pontos e pesos de Gauss propostos por Dunavant visando a obtenção de uma aproximação de ordem 7.

Para calcular o termo a integral do termo fonte da Eq. (3) utiliza-se a seguinte fórmula para o caso de segunda ordem:

$$IF = \sum_{i=1}^3 \left[-\kappa(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) \nabla \phi_m^R(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) \right] \cdot n_g^{(i)} \quad (4)$$

onde $(x_g^{(i)}, y_g^{(i)})$ são os pontos de Gauss em uma dada face AB que está na intersecção de um volume de controle I com outro J, $n_g = (n_x, n_y)$ são as componentes das normais nos pontos de Gauss e $\nabla \phi_m^R(x_g^{(i)}, y_g^{(i)})$ é a média do gradiente na face que, tomando por AVC a área do volume de controle, é dada por:

$$\nabla \phi_m^R(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) = \frac{\kappa_I(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) \nabla_I \phi^R(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) AVC_I + \kappa_J(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) \nabla_J \phi^R(x_g^{(i)}, y_g^{(i)}) AVC_J}{AVC_I + AVC_J} \quad (5)$$

4. TESTES COMPUTACIONAIS

Para a exemplificação do método e de seu comportamento quando utilizado na resolução da equação da difusão são apresentados dois testes visando explorar diferentes parâmetros. Na primeira situação foi utilizada uma geometria com um nível de complexidade não tão alto. No domínio apresentado apenas a base foi submetida a condição de Dirichlet, com as demais fronteiras sob condição de Neumann. A função teste utilizada foi $\phi = 100e^{-y}\sin(\pi x)$ e o coeficiente de difusão $\alpha = 0.01$. No segundo teste a reconstrução foi realizada sobre uma geometria complexa com uma função teste que possui alta variação ao longo do domínio. A função utilizada foi $\phi = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ e todos os lados da geometria se encontram sob condição de fronteira de Dirichlet.

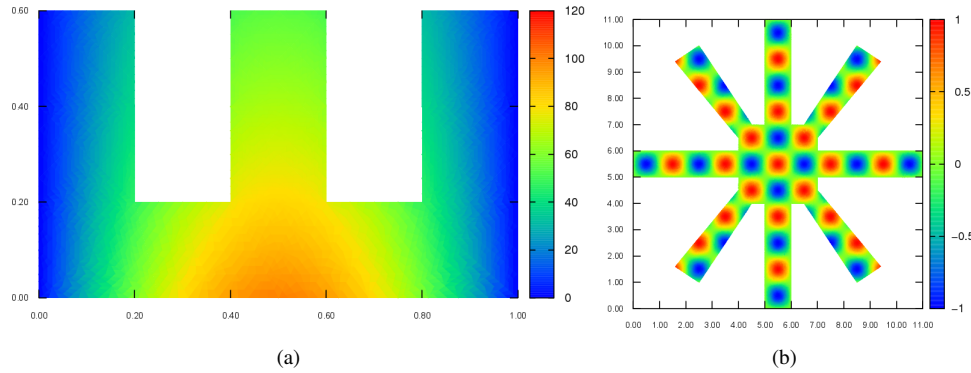


Figura 1: Gráfico gerado para o teste 1 (a) e para o teste 2 (b).

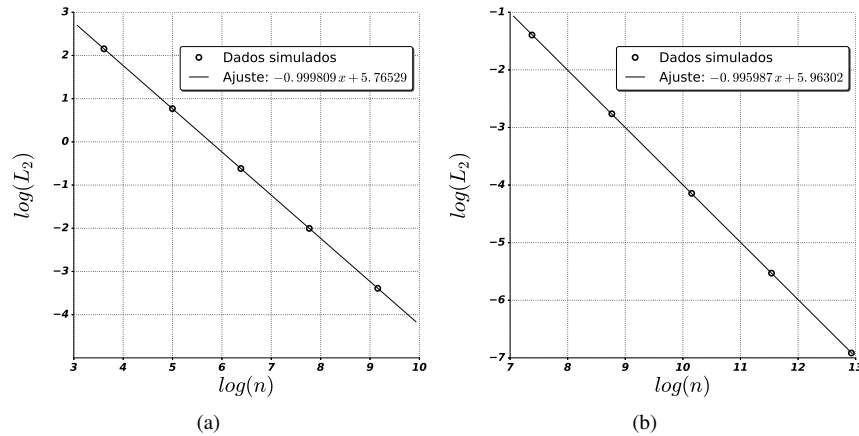


Figura 2: Gráfico da taxa de convergência para o teste 1 (a) e para o teste 2 (b).

5. CONCLUSÃO

O coeficiente angular de ambas as retas de ajuste é negativo e o dobro de seu valor, em módulo, irá fornecer a ordem de precisão do método. Realizando-se tais operações obtêm-se 1.999618 para o primeiro caso e 1.991974 para o segundo, verificando assim que o método é de segunda ordem para ambos os testes apresentados. O presente trabalho aplica o MRAOMQ a resolução da equação da difusão em geometrias com diferentes níveis de complexidade e diferentes combinações de condições de contorno. Apesar de ter demonstrado a resolução de uma EDP relativamente simples é possível observar que o MRAOMQ é uma ferramenta que pode ser utilizada para lidar com outras EDPs pela acurácia nos resultados e a flexibilidade quanto a diversas geometrias.

6. DIREITOS AUTORAIS

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

REFERÊNCIAS

- Magalhães, G. M. and Alves Santana, A. Método de reconstrução para funções definidas em malhas não-estruturadas. 2015.
- Ollivier-Gooch, C. and Van Altena, M. A high-order-accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection–diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, 181(2):729–752, 2002.