DESAFIOS EM ELEMNTOS FINITOS: PARTE I – EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

Prof. Gustavo Benitez Alvarez

Departamento de Ciências Exatas EEIMVR/UFF, Brasil

benitez.gustavo@gmail.com

AGENDA ACADÊMICA 2010

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

O SEMINÁRIO

- O Problema
- O Desafio
- A Equação da Difusão-Convecção-Reação
  (Formulação Forte, Fraca e Aproximação)
- Método de Elementos Finito de Galerkin
- Método de Elementos Finito de Galerkin Mínimos Quadrados GLS
- Método de Elementos Finito de Captura tipo CAU
- Outros Métodos de Captura
- Voltando ao Desafio
- Conclusão

O PROBLEMA!

- Equações em Derivadas Parciais (EDP) lineares de segunda ordem modelam uma variedade de fenômenos físicos e problemas que aparecem na engenharia.

- A equação da difusão convecção reação (transporte) é um exemplo de EDP que modela fenômenos de transferência de calor, transporte de sustâncias em meios, etc.

$$\underbrace{-\nabla \cdot D\nabla \phi}_{\text{Difusão}} + \underbrace{v \cdot \nabla \phi}_{\text{Convecção}} + \underbrace{\sigma\phi}_{\text{Reação}} = \underbrace{f}_{\text{Fonte}} \quad \text{em } \Omega$$

- Usualmente, o método de elementos finito clássico (MEF) ou método de Galerkin é usado para obter soluções numéricas destes problemas.

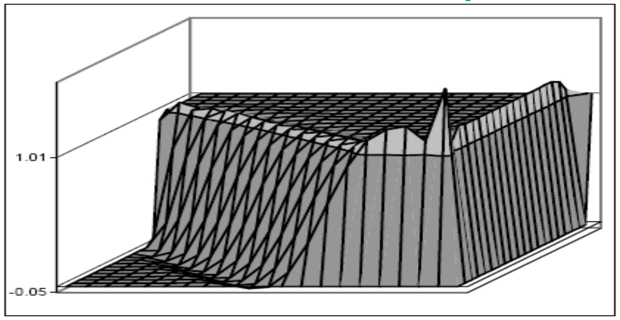
- Apenas para problemas puramente difusivos a solução do método de Galerkin é ótima.

$$\underbrace{-\nabla \cdot D\nabla \phi}_{\text{Difusão}} = \underbrace{f}_{\text{Fonte}} \quad \text{em } \Omega$$

O DESAFIO!

- Há mais de três décadas se sabe que o método de Galerkin é instável e impreciso para alguns problemas descritos por EDP lineares de segunda ordem. Sua solução apresenta oscilações espúrias que não correspondem com a solução exata do problema.
- Brooks, A. N. and Hughes, T. J. R., Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 32:199-259, 1982.
- A equação da Difusão Convecção Reação é um exemplo representativo do deterioro das propriedades de estabilidade e precisão do método de Galerkin.

Método Galerkin
+
Mínimos Quadrados
(GLS)



- Como alternativa a este método tem surgido varias estratégias dentro do contexto de elementos finitos (GLS, SUPG, CAU, etc).
- Desenvolver um MEF cuja solução numérica seja estável e precisa para esta equação continua sendo um grande desafio para os pesquisadores nesta área do conhecimento.

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

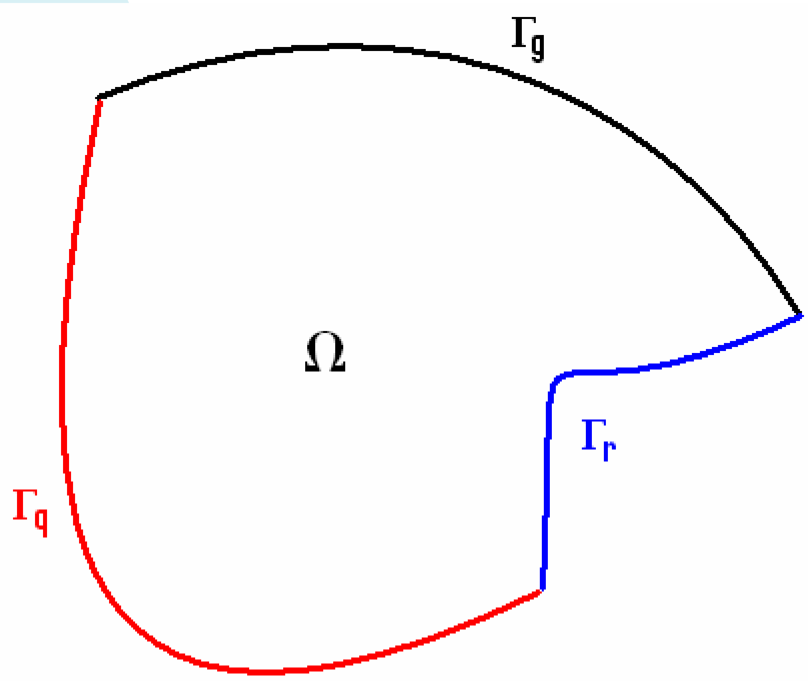
- **Problema de Valor de Contorno:**

$$L(\phi) \equiv \underbrace{-\nabla \cdot (D \nabla \phi)}_{\text{Difusão}} + \underbrace{u \cdot \nabla \phi}_{\text{Advecção}} + \underbrace{\sigma \phi}_{\text{Reação}} = \underbrace{f}_{\text{Fonte}} \quad \text{em } \Omega$$

$$\phi = g \quad \text{em } \Gamma_g$$

$$D \nabla \phi \cdot \hat{n} = q \quad \text{em } \Gamma_q$$

$$D \nabla \phi \cdot \hat{n} + \alpha \phi = r \quad \text{em } \Gamma_r$$



Formulação Forte do Problema

ou

Equação Diferencial Parcial

(EDP)

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

- **Como passar de uma formulação forte do problema para outra formulação mais fraca? (menos exigências para as funções envolvidas no problema)**

Formulação Forte ⇔ Formulação Fraca

ou

Equação Diferencial Parcial ⇔ Equação Variacional

Passo 1: Multiplicar a EDP por funções admissíveis (teste $\eta \in C_0^\infty(\Omega)$) e integrando a equação sobre todo o domínio Ω.

Passo 2: Integração por partes (ou usar a formula de Green) para reduzir o maior ordem das derivadas parciais presentes na EDP.

$$\int_\Omega \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \eta \, d\Omega = -\int_\Omega \phi \frac{\partial \eta}{\partial x_i} d\Omega + \int_\Gamma \phi \, \eta \, \mathbf{n}_i \, d\Gamma$$

Passo 3: Usando a condição de que as funções teste se anulam no contorno o termo de contorno da formula de Green é eliminado.

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

Formulação Variacional: Encontrar $\phi \in S$ que satisfaz a equação:

$$A(\phi,\eta) \equiv \int_{\Omega} [D\nabla\phi\cdot\nabla\eta + u\cdot\nabla\phi\eta]\,d\Omega + \int_{\Gamma_r} \alpha\phi\eta\;d\Gamma$$

$$= \int_{\Omega} f\eta\,d\Omega + \int_{\Gamma_q} q\,\eta\,d\Gamma + \int_{\Gamma_r} r\,\eta\,d\Gamma \equiv F(\eta) \qquad \forall\ \eta \in V$$

$$S = \left\{\varphi \in H^1(\Omega) : \varphi = g \text{ em } \Gamma_g\right\} \qquad V = \left\{\eta \in H^1(\Omega) : \eta = 0 \text{ em } \Gamma_g\right\}$$

Os espaços de funções S e V são de dimensão infinita. Ou seja, a solução exata deste problema depende de encontrar "infinitas incógnitas", que nem sempre é possível. Galerkin (1871-1945) estudo a solução aproximada do problema em espaços de funções de dimensão finita. O método de Galerkin é baseado em seqüência de subespaços de dimensão finita $\{V_n\}_{n=1}^{\infty} \subset V$, $V_n \subset V_{n+1}$, que converge para o espaço V no limite. Pode ser provado, sob certas condições, que a seqüência de soluções aproximadas $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$, $\phi_n \in S_n$ converge para a solução exata do problema.

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

- **Formulação Variacional Aproximada Correspondente:** Encontrar $\phi_n \in S_n$ que satisfaz

$$A(\phi_n, \eta_m) \equiv \int_\Omega [D \nabla \phi_n \cdot \nabla \eta_m + u \cdot \nabla \phi_n \eta_m] \, d\Omega + \int_{\Gamma_r} \alpha \phi_n \eta_m \, d\Gamma$$

$$= \int_\Omega f \eta_m \, d\Omega + \int_{\Gamma_q} q \eta_m \, d\Gamma + \int_{\Gamma_r} r \eta_m \, d\Gamma \equiv F(\eta_m) \qquad \forall \; \eta_m \in V_m$$

- Como os espaços são de dimensão finita N a solução aproximada pode ser escrita como combinação linear das funções bases com coeficientes a determinar

$$\phi_N = \sum_{i=1}^{N} c_i B_i$$

1 – Base Global ⇔ Método de Galerkin Original

2 – Base Local ⇔ Método de Elementos Finitos de Galerkin

- Como resultado transformamos o problema acima em um sistema linear de equações algébricas

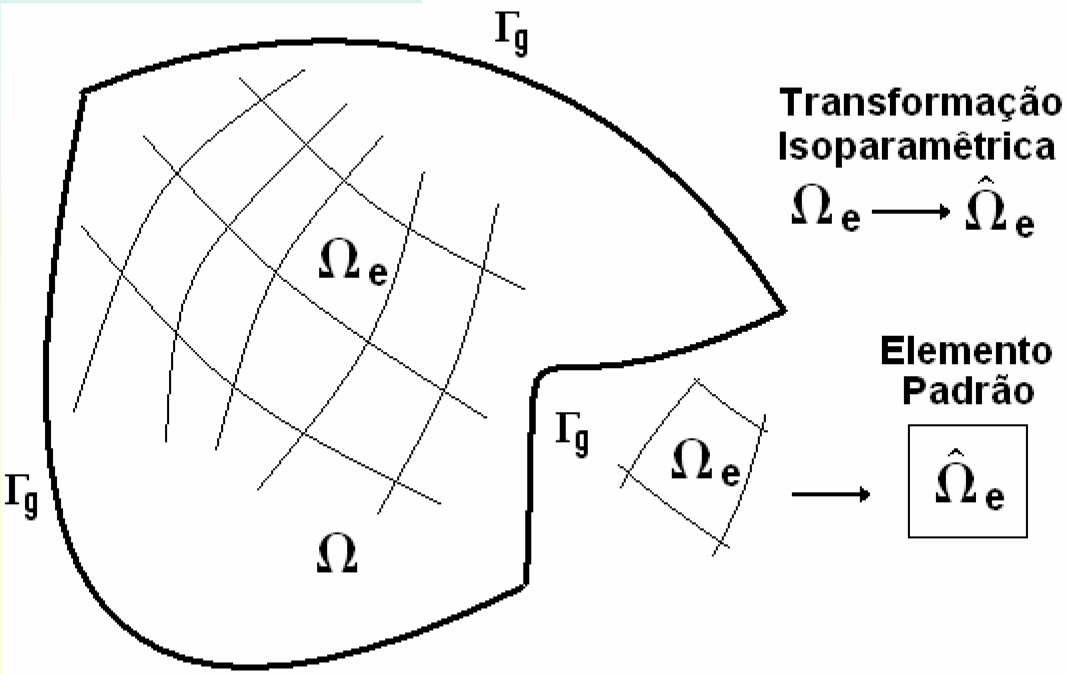
$$\sum_{m=1}^{N} A_{nm} C_m = F_n, \quad n = 1, \dots, N$$ ou $$\begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{NN} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{1N} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_N \end{bmatrix}$$

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

- **O MEF de Galerkin:** Seja $M^h = \{\Omega_1, \ldots, \Omega_{ne}\}$ uma partição de Ω . Encontrar $\phi^h \in S^{h,k}$ que satisfaz $\forall \eta^h \in V^{h,k}$:

$$A_G(\phi^h, \eta^h) \equiv \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} [D\nabla \phi_e^h \cdot \nabla \eta_e^h + u \cdot \nabla \phi_e^h \eta_e^h] d\Omega = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} f \eta_e^h d\Omega \equiv F_G(\eta^h)$$

$$\phi_e^h(x, y, z) = \sum_{i=1}^{nne} \phi_e^h(i) \eta_i(x, y, z), \text{ onde } \eta_i \text{ são os Polinômios de Lagrange}$$



A instabilidade do método de Galerkin se deve a falta de controle no gradiente da solução.

Quando a CONVECÇÃO e/ou REAÇÃO é dominante o método de Galerkin apresenta oscilações espúrias. Nestes casos o método é instável a menos que a malha seja refinada.

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

- **O MEF Galerkin Mínimos Quadrados GLS:** Encontrar $\phi^h \in S^{h,k}$ que satisfaz a equação $\forall \eta^h \in V^{h,k}$

$$A_G(\phi^h,\eta^h) + A_{LS}(\phi^h,\eta^h) = F_G(\eta^h) + F_{LS}(\eta^h)$$

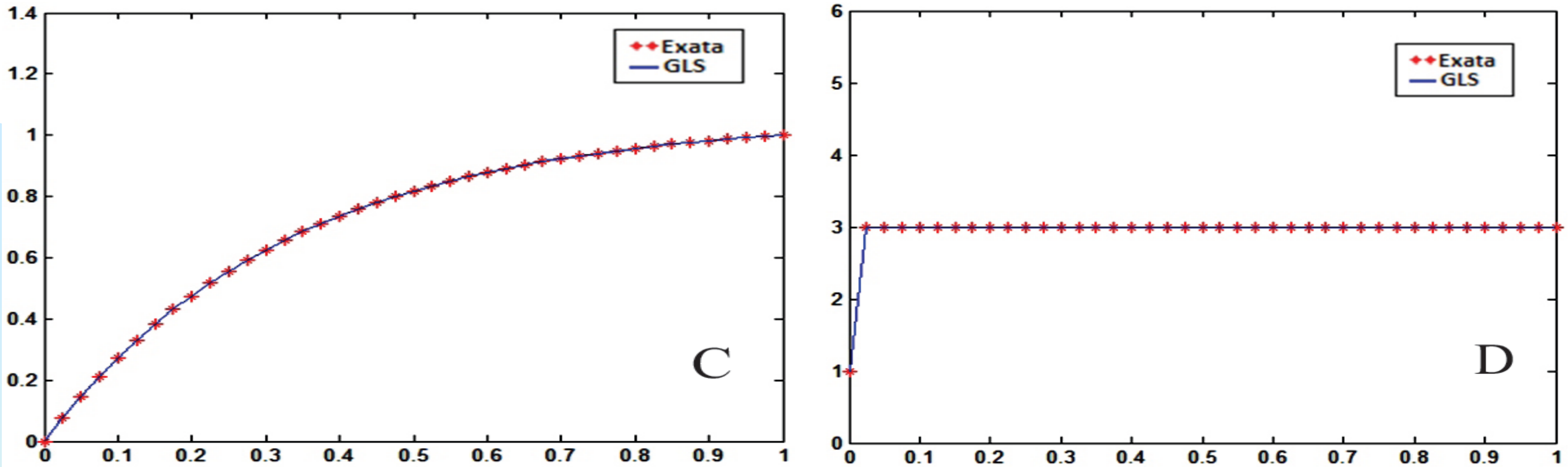
$$A_G = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} [D\nabla\phi_e^h \cdot \nabla\eta_e^h + u\cdot\nabla\phi_e^h\eta_e^h]\, d\Omega, \quad F_G = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} f\,\eta_e^h\, d\Omega$$

$$A_{LS} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} [-\nabla\cdot(D\nabla\phi_e^h) + u\cdot\nabla\phi_e^h]\, p_e^h\, d\Omega_e, \quad F_{LS} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} f_e\, p_e^h\, d\Omega_e$$

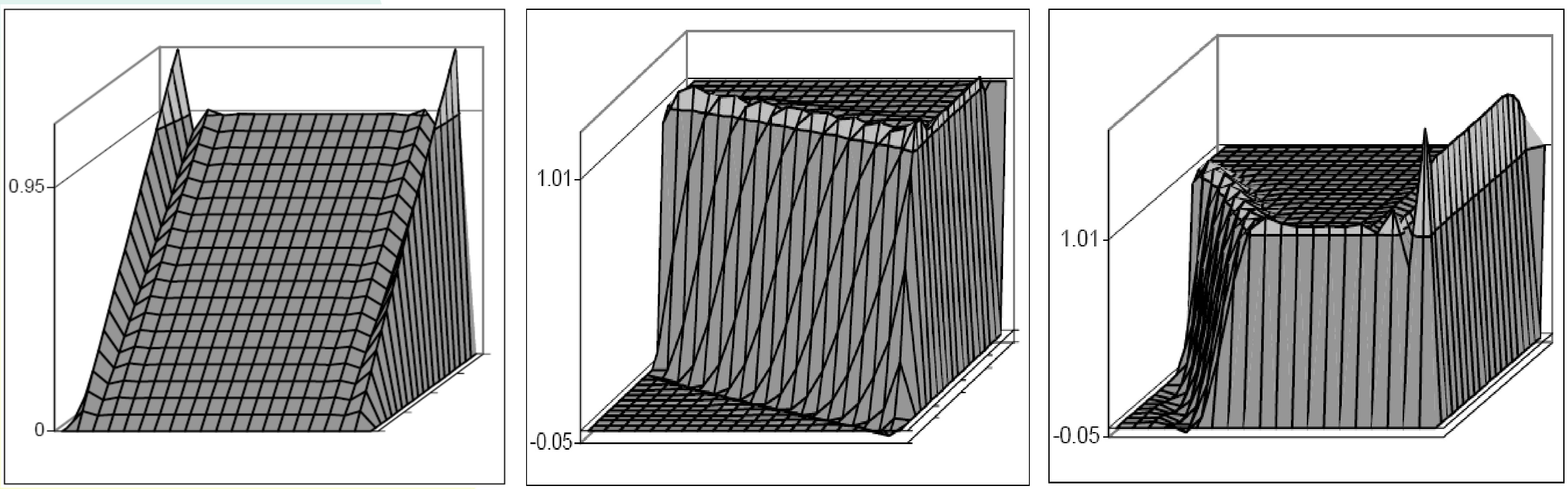
$$p_e^h = \frac{\tau_e h_e}{2|u_e|}\left[-\nabla\cdot(D\nabla\eta_e^h) + u\cdot\nabla\eta_e^h\right], \quad h_e = 2\frac{|u_e|}{|b_e|}, \quad b_{e,i} = \sum_{j=1}^{\dim}\frac{\partial\xi_i}{\partial x_j}u_{e,j}$$

$$\tau_e = \max\left\{0, 1 - \frac{c_1}{c_2\mathbf{P}_e}\right\}, \quad \mathbf{P}_e = \frac{h_e|u_e|}{2D}$$

- Problemas 1D a solução do método GLS coincide com a solução exata.
- Problemas 2D e 3D o método GLS se mostra instável e impreciso quando os termos convectivo e/ou reativo são dominantes.
- Como alternativa aos métodos Galerkin, GLS e SUPG surgiram outras estratégias dentro do contexto de elementos finitos. Por exemplo, métodos baseados em operadores de captura como o método CAU.



Soluções do método GLS e Exata em Problemas 1D com difusão dominante (C) e convecção dominante (D).



Soluções do método GLS em Problemas 2D com convecção dominante.

EQUAÇÃO DA DIFUSSÃO CONVECÇÃO REAÇÃO

- **O MEF com operadores de captura tipo CAU:** Encontrar $\phi^h \in S^{h,k}$ que satisfaz a equação $\forall \eta^h \in V^{h,k}$

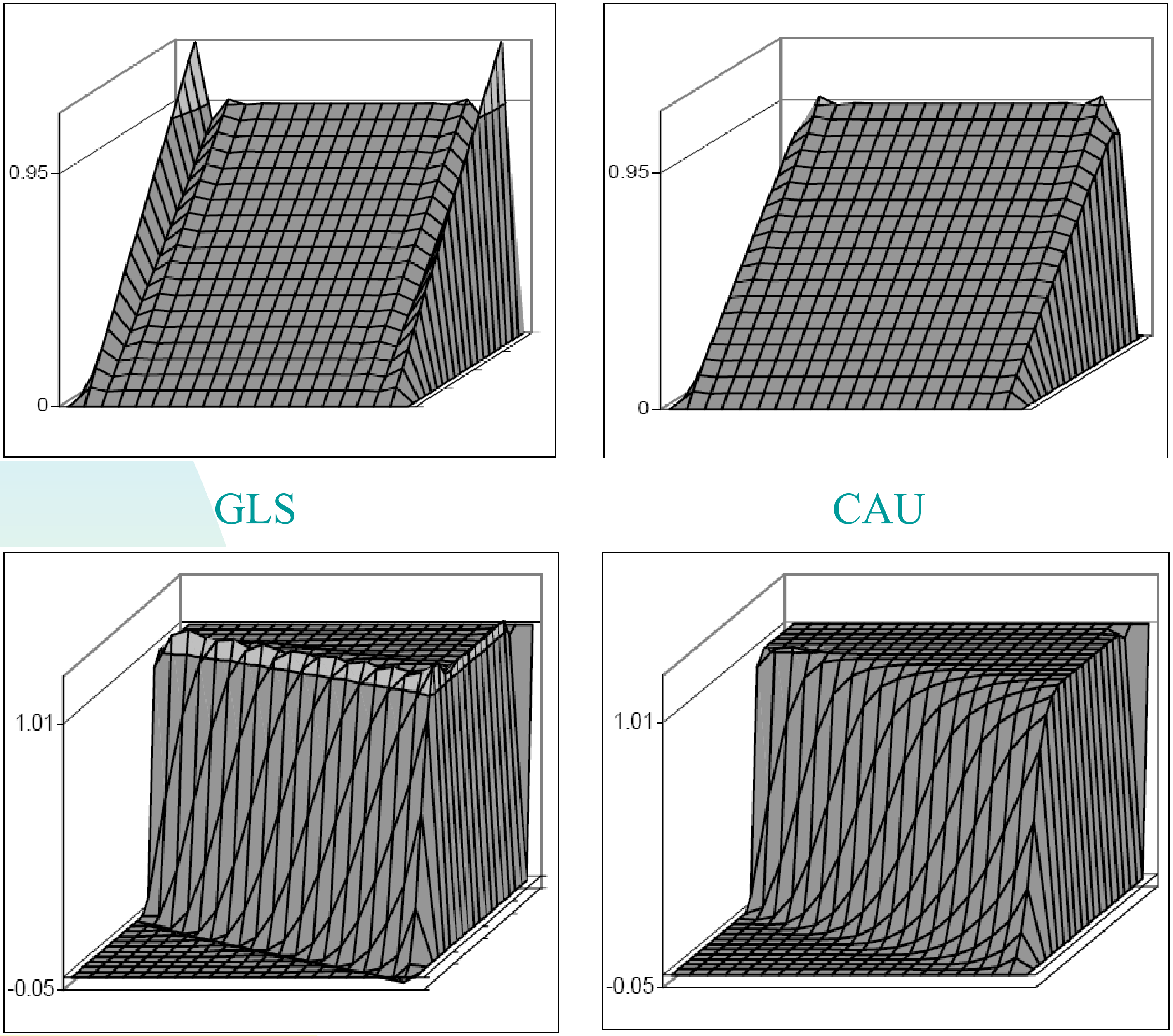
$$A_G(\phi^h,\eta^h) + A_{SUPG}(\phi^h,\eta^h) + A_{CAU}(\phi^h;\phi^h,\eta^h) = F_G(\eta^h) + F_{SUPG}(\eta^h)$$

$$A_{CAU}(\phi^h;\phi^h,\eta^h) = \sum_{e=1}^{ne}\int_{\Omega_e} C_e(\phi_e^h)\nabla\phi_e^h \cdot \nabla\eta_e^h \, d\Omega,$$

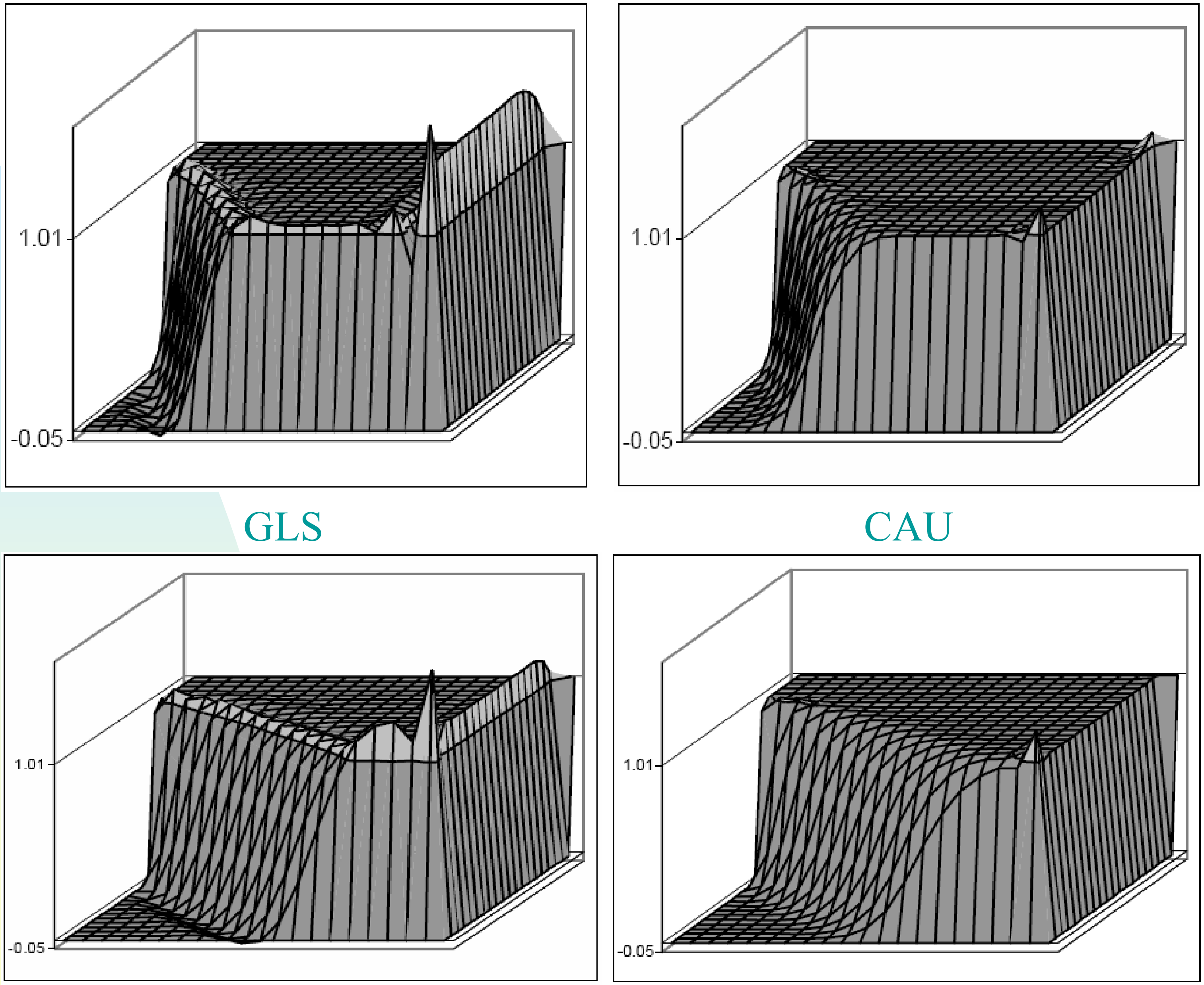
$$C_e(\phi_e^h) = \begin{cases} 0, & \text{se } \dfrac{\left|\mathrm{Re}(\phi_e^h)\right|}{\left|u_e\right|\left|\nabla\phi_e^h\right|} \geq \dfrac{\tau_e^c h_e^c}{\tau_e h_e} \\[2ex] \dfrac{\tau_e h_e}{2}\left[\dfrac{\tau_e^c h_e^c}{\tau_e h_e} - \dfrac{\left|\mathrm{Re}(\phi_e^h)\right|}{\left|u_e\right|\left|\nabla\phi_e^h\right|}\right]\dfrac{\left|\mathrm{Re}(\phi_e^h)\right|}{\left|\nabla\phi_e^h\right|}, & \text{se } \dfrac{\left|\mathrm{Re}(\phi_e^h)\right|}{\left|u_e\right|\left|\nabla\phi_e^h\right|} < \dfrac{\tau_e^c h_e^c}{\tau_e h_e} \end{cases}$$

$$\mathrm{Re}(\phi_e^h) = \left[-\nabla\cdot(D\nabla\eta_e^h) + u\cdot\nabla\eta_e^h - f_e\right], \quad h_e^c = 2\frac{\left|u_e - v_e^h\right|}{\left|b_e^c\right|}, \quad b_{e,i}^c = \sum_{j=1}^{\dim}\frac{\partial\xi_i}{\partial x_j}(u_{e,j} - v_{e,j}^h)$$

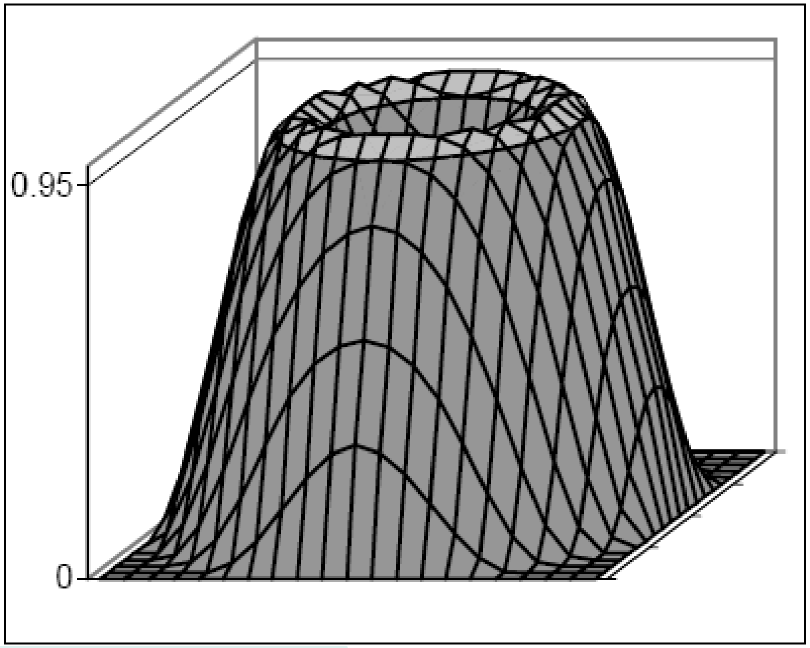
$$v_e^h = \begin{cases} u_e, & \text{se } \left|\nabla\phi_e^h\right| = 0 \\[1ex] u_e - \dfrac{\mathrm{Re}(\phi_e^h)}{\left|\nabla\phi_e^h\right|^2}\nabla\phi_e^h, & \text{se } \left|\nabla\phi_e^h\right| \neq 0 \end{cases}, \quad \tau_e^c = \max\left\{0, 1 - \frac{c_1}{c_2\mathbf{P}_e^c}\right\}, \quad \mathbf{P}_e^c = \frac{h_e\left|u_e - v_e^h\right|}{2D}$$

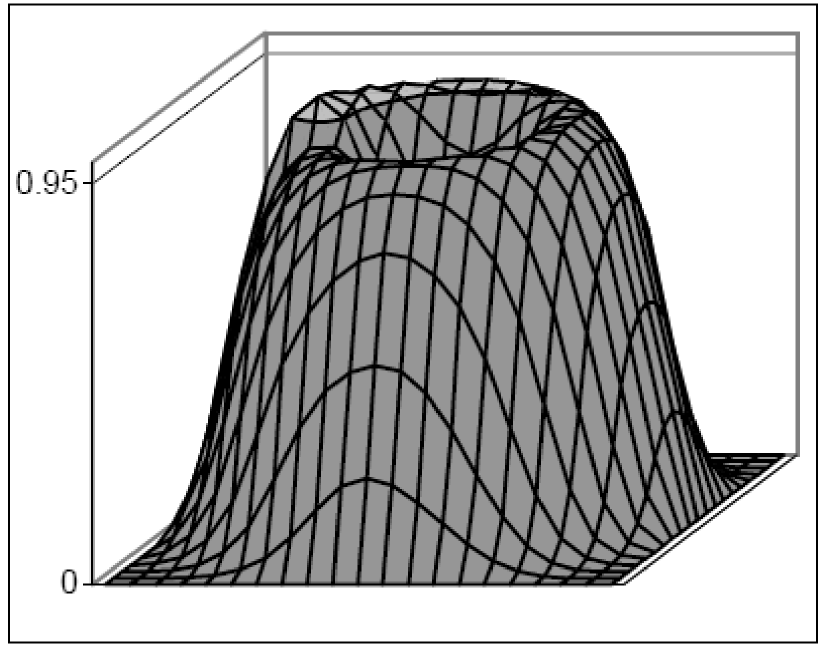


Soluções dos método GLS e CAU em Problemas 2D com convecção dominante.



Soluções dos método GLS e CAU em Problemas 2D com convecção dominante.





GLS CAU

Soluções dos método GLS e CAU em Problemas 2D com convecção dominante.

- Brooks, A. N. and Hughes, T. J. R., Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 32:199-259, 1982.
- Galeão, A. C. and Do Carmo, E. G. D., A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 68:83-95, 1988.

- Hughes, T. J. R., Franca, L. P. and Hulbert, G. M., A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The Galerkin-least-squares method for advective-diffusive equations. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 73:173-189, 1989.

- Em problemas 2D e 3D com termos convectivo e/ou reativo dominantes os métodos de captura, tipo CAU, se mostram:

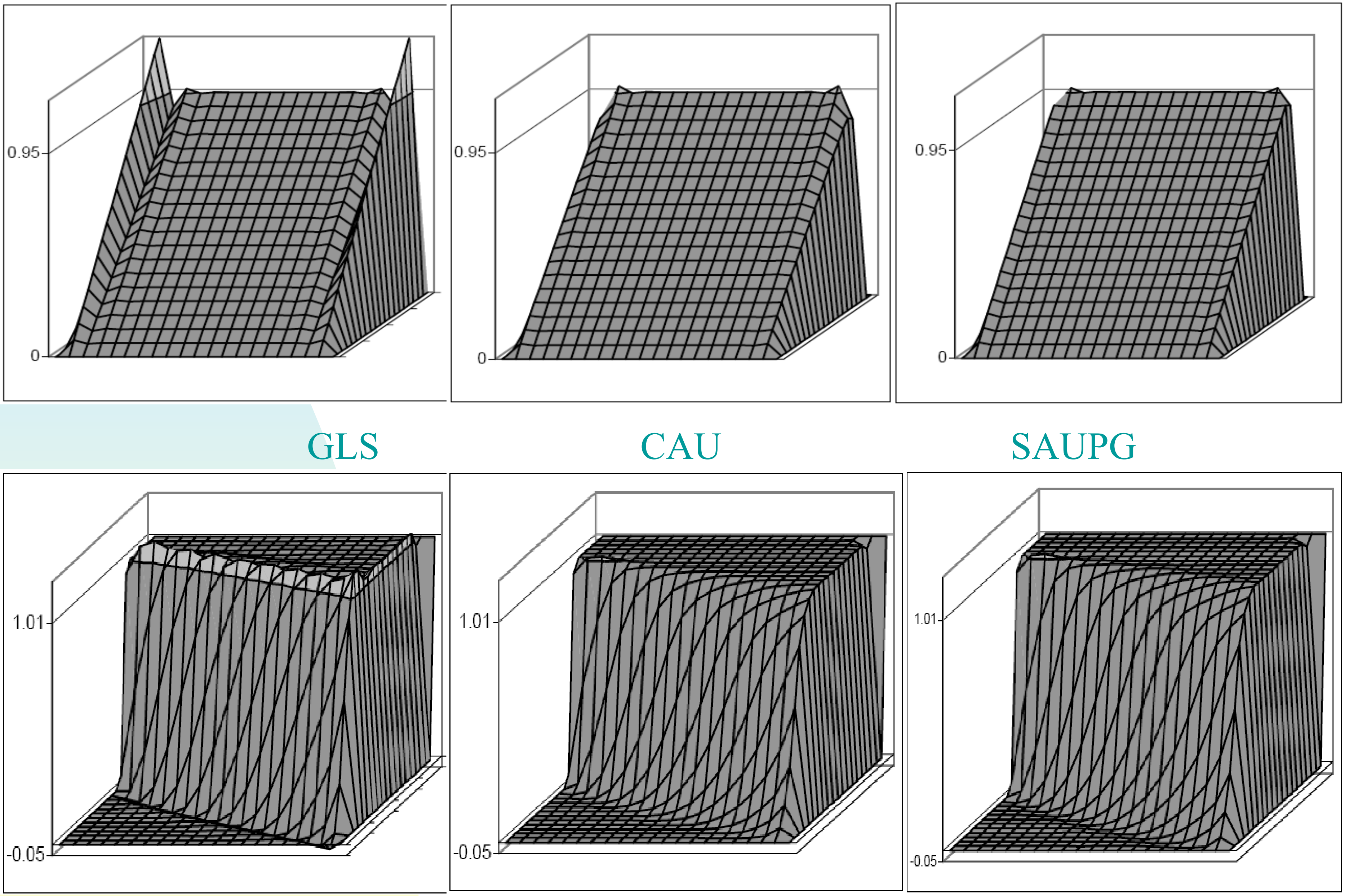
- mais estável quando a solução exata possui altos gradientes,

- mais impreciso quando a solução exata é suave.

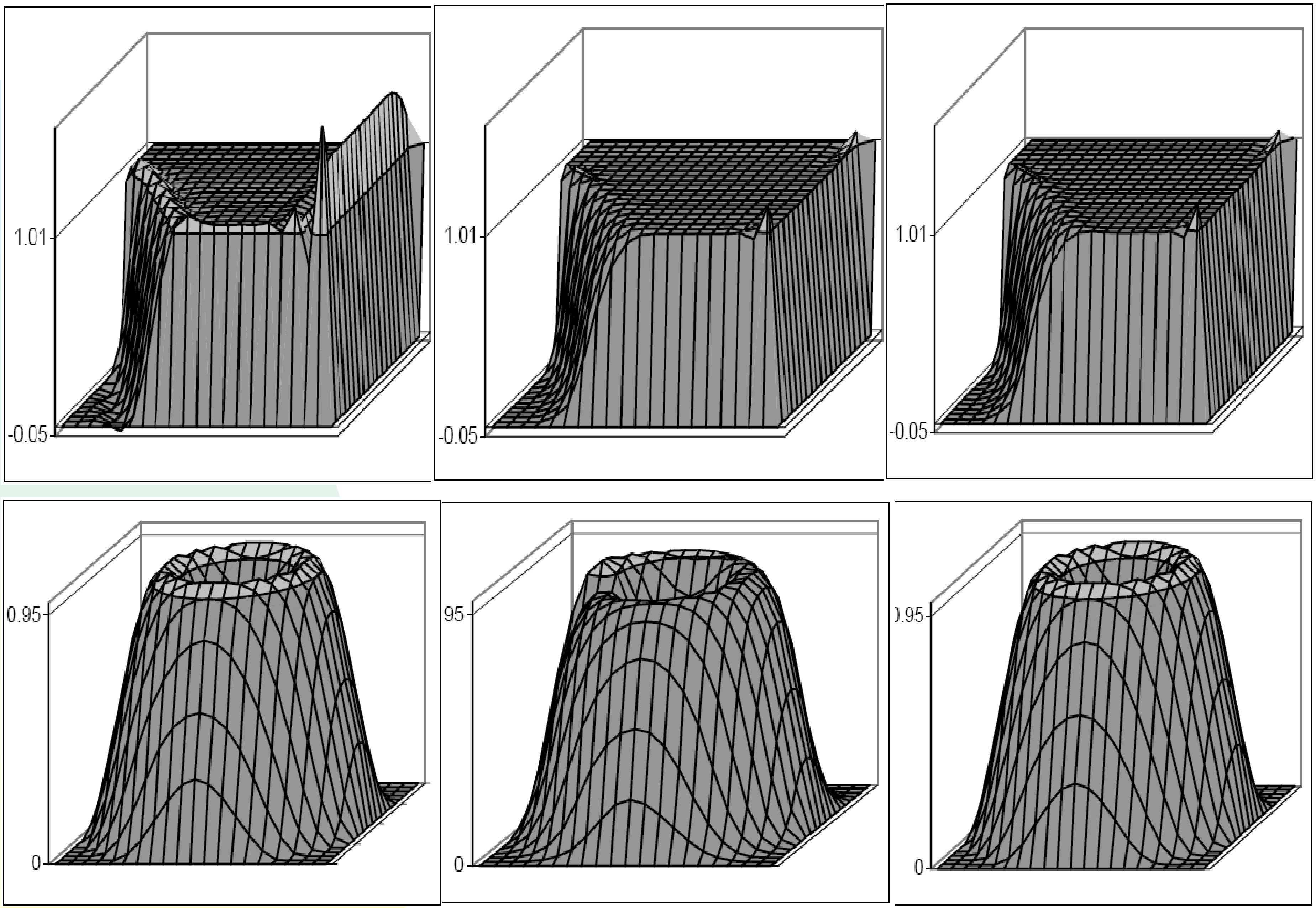
- Como alternativa surgiram modificações dos métodos de captura.

- Dutra do Carmo, E. G. and Alvarez, G. B., A new stabilized finite element formulation for scalar convection-diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov-Galerkin method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 192:3379-3396, 2003.

- Este método se propõe suprimir as oscilações espúrias sem uma excessiva suavização das camadas limites. Isto pode ser feito com uma melhor escolha da função $C_e(\phi_e^h)$ que depende do resíduo da EDP $\mathrm{Re}(\phi_e^h)$.



Soluções dos método GLS, CAU e SAUPG para convecção dominante.



GLS CAU SAUPG

- Outras modificações dos métodos de captura tem surgido para:

- manter a estabilidade quando a solução exata possui altos gradientes,

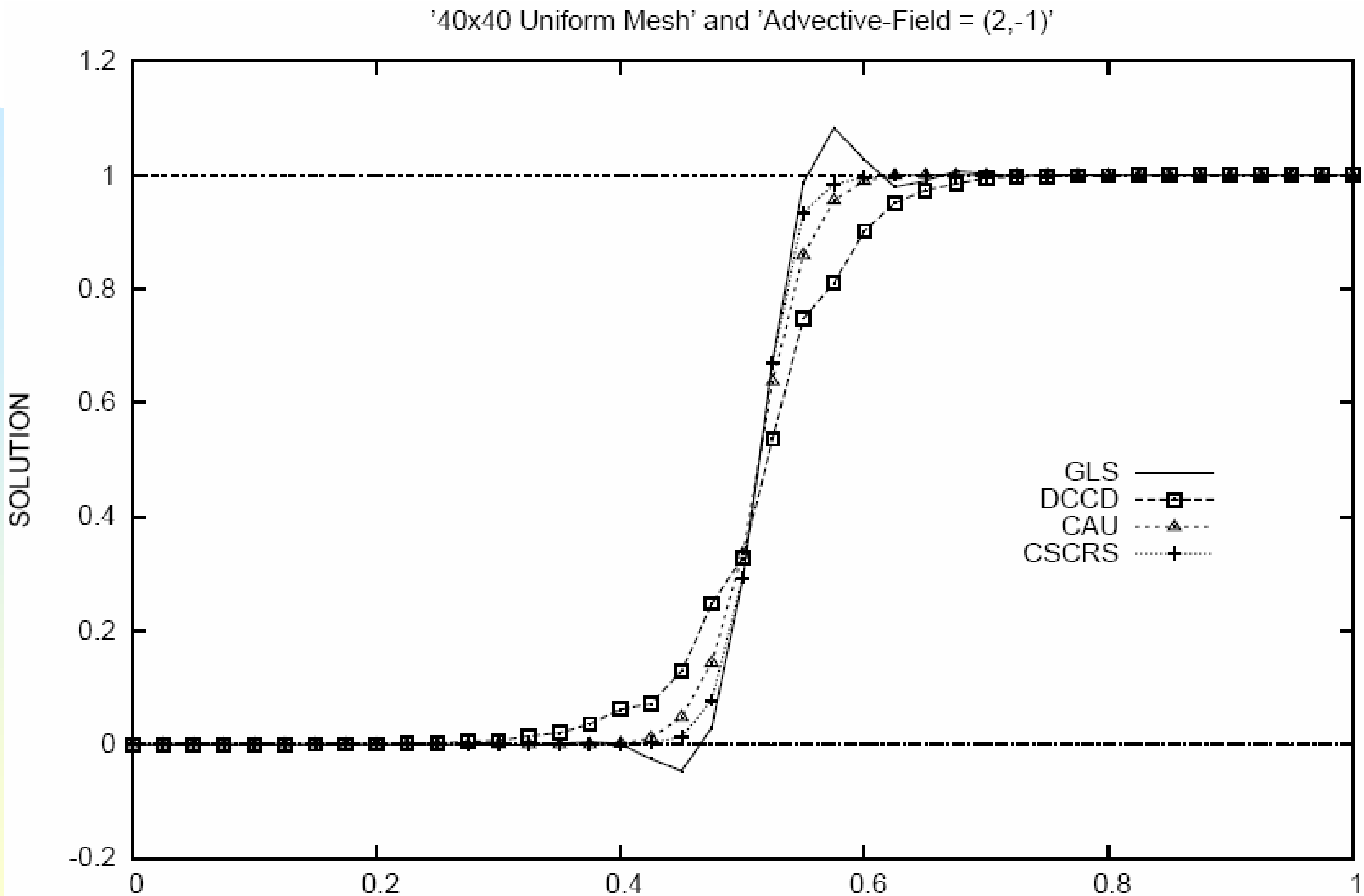
- manter a precisão quando a solução exata é suave,

- melhorar a precisão quando a solução exata possui altos gradientes.

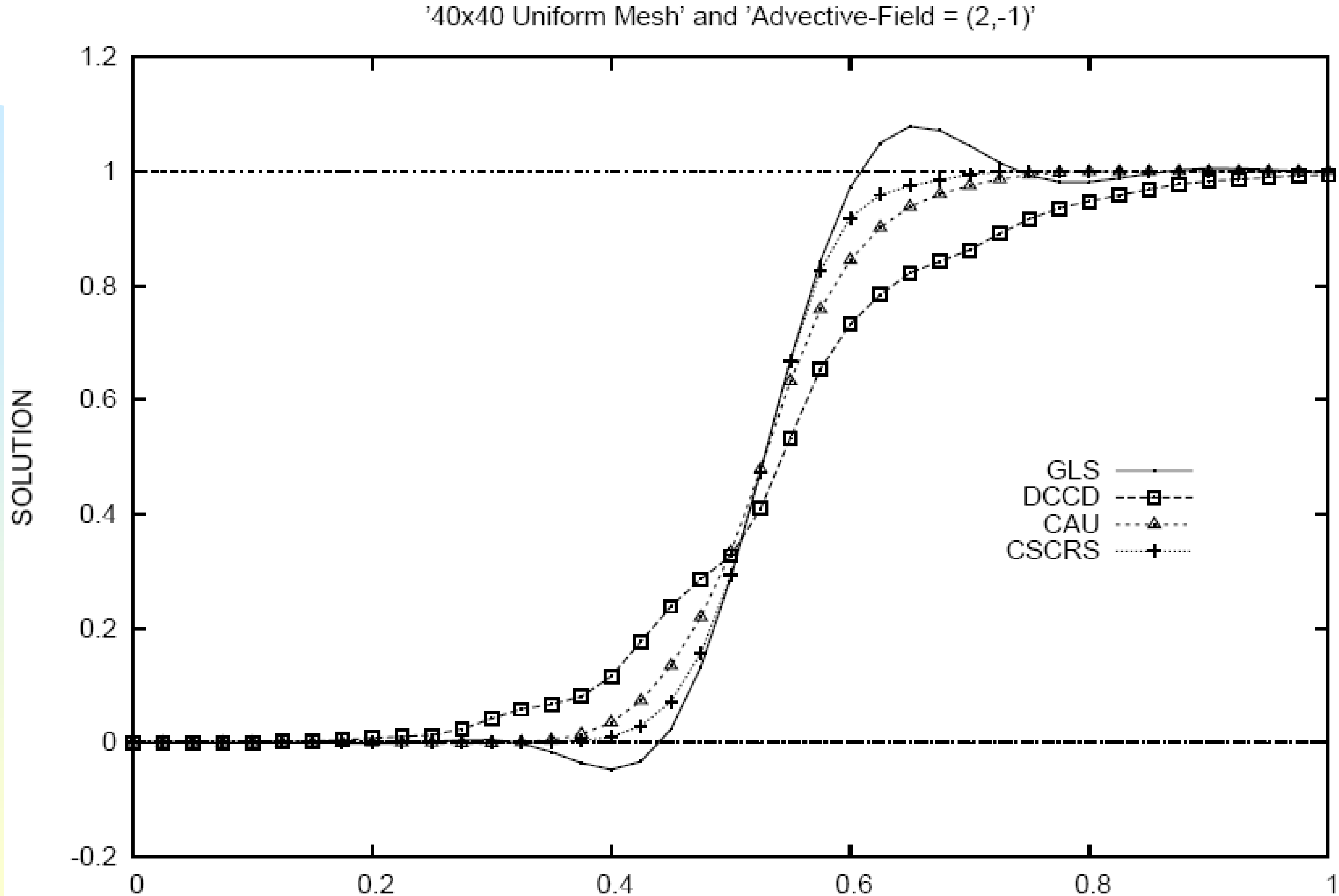
- Dutra do Carmo, E. G. and Alvarez, G. B., A non-linear stabilized finite element method with shock capturing and reduced smearing for advection problems: the Consistent Shock Capturing with Reduced Smearing Method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, submetido, 2010.

(método CSCRS)

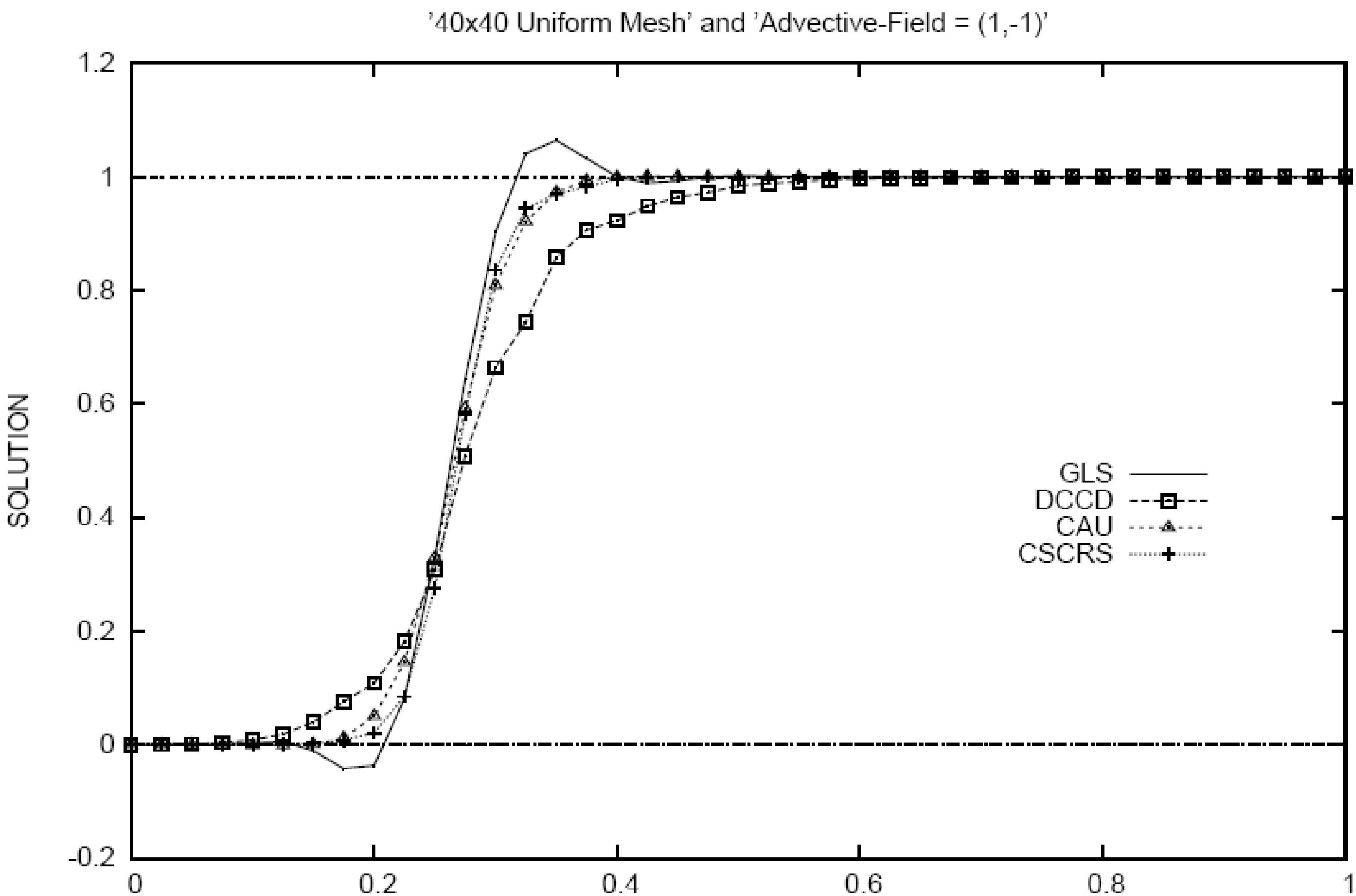
- Este método se propõe suprimir as oscilações espúrias sem uma excessiva suavização das camadas limites. Isto pode ser feito com uma melhor escolha da função $C_e(\phi_e^h)$ que depende do resíduo da EDP $\mathrm{Re}(\phi_e^h)$.



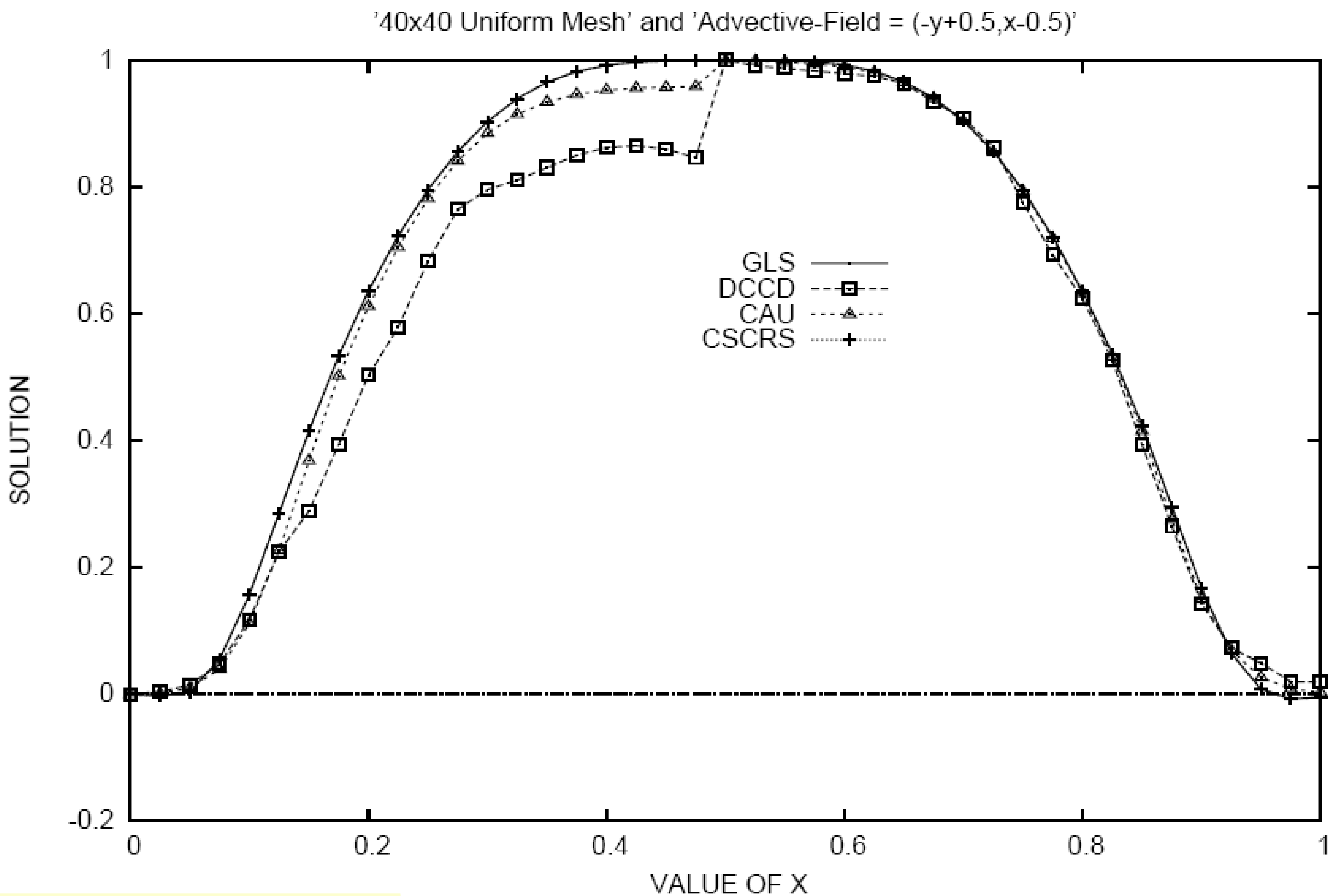
Soluções dos método GLS, CAU e CSCRS em Problemas 2D com convecção dominante: projeção em x=0.5.



Soluções dos método GLS, CAU e CSCRS em Problemas 2D com convecção dominante: projeção em y=0.5.



Soluções dos método GLS, CAU e CSCRS em Problemas 2D com convecção dominante: projeção em y=0.5.



Soluções dos método GLS, CAU e CSCRS em Problemas 2D com convecção dominante: projeção em y=0.5.

O DESAFIO!

- Desenvolver um Método de Elementos Finitos linear ou não para a Equação da Difusão-Convecção-Reação com Convecção e/ou Reação Dominante que seja:

  - estável quando a solução exata possui camadas limites (grande derivada),

  - preciso quando a solução exata é suave (pequena derivada),

  - preciso quando a solução exata possui camadas limites (camadas pouco suavizadas).

- Este desafio, para os pesquisadores nesta área do conhecimento, é um problema que continua em aberto atualmente. Prova disto são a grande quantidade de:

  - Artigos Científicos publicado sobre o tema,
  - Teses de Doutorado e Dissertações de Mestrado sobre o tema.

Alguns Artigos Científicos

- E. G. Dutra do Carmo, G. B. Alvarez, F. A. Rochinha and A. F. D. Loula, Galerkin projected residual method applied to diffusion–reaction problems, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 197 (2008) 4559–4570.
- J. Principe, R. Codina, On the stabilization parameter in the subgrid scale approximation of scalar convection diffusion reaction equations on distorted meshes, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 199 (2010) 1386–1402.
- V. John, P. Knobloch, On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection–diffusion equations: Part I – A review, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 196 (2007) 2197–2215.
- V. John, P. Knobloch, On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection–diffusion equations: Part II – Analysis for P1 and Q1 finite elements, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 197 (2008) 1997–2014.
- L. Tobiska, On the relationship of local projection stabilization to other stabilized methods for one-dimensional advection–diffusion equations, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 198 (2009) 831–837.
- P.H. Chiu, Tony W.H. Sheu, On the development of a dispersion-relationpreserving dual-compact upwind scheme for convection–diffusion equation, Journal of Computational Physics 228 (2009) 3640–3655.
- P-W. Hsieh, S-Y. Yang, On efficient least-squares finite element methods for convection dominated problems, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 199 (2009) 183–196.
- M.-C. Hsu, Y. Bazilevs, V.M. Calo, T.E. Tezduyar, T.J.R. Hughes, Improving stability of stabilized and multiscale formulations in flow simulations at small time steps, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 199 (2010) 828–840.
- V. Ramakkagari, J. E. Flaherty, A new stable method for singularly perturbed convection–diffusion equations, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 197 (2008) 1507–1524.
- V. John, E. Schmeyer, Finite element methods for time-dependent convection–diffusion–reaction equations with small diffusion, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 198 (2008) 475–494.

Algumas Teses e Dissertações

- Revanth Reddy Garlapati, Reduced Basis Method for Boltzmann Equation, Master of Science in Computation for Design and Optimization, Massachusetts Institute of Technology, 2006.
- Carlos Alberto Alvarez Henao, Um Estudo sobre Operadores de Captura de Descontinuidades para Problemas de Transporte Advectivos, Mestre em Ciências em Engenharia Civil, COPPE/UFRJ, 2004.
- Denise A. Krueger, Stabilized Finite Element Methods for Feedback Control of Convection Diffusion Equations, Doctor of Philosophy in Mathematics, Faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University, 2004.
- M. Elie HACHEM, Stabilized Finite Element Method for Heat Transfer and Turbulent Flows Inside Industrial Furnaces, Docteur de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - Spécialité «Mécanique Numérique», MINES PARISTECH, 2009.
- Isaac Pinheiro dos Santos, Métodos Submalhas Não Lineares para o Problema de Convecção-Difusão-Reação, Doutor em Modelagem Computacional, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2007.
- Amilton Ferreira da Silva Junior, Estudo Numérico da Equação de Convecção e Difusão usando Métodos de Elementos Finitos e Volumes Finitos, Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, EEIMVR/UFF, Previsão de Defesa 2011.

Conclusão

- Apresentamos para a Equação da Difusão-Convecção-Reação os MEF de Galerkin, GLS – Galerkin Mínimos Quadrados e CAU – Upwind Aproximado Consistente.

- Métodos de Galerkin, GLS e SUPG são lineares, enquanto métodos de captura como o CAU são não lineares.

- Métodos lineares são mais instáveis que os métodos não lineares.

- Métodos lineares são menos difusivos que os métodos não lineares.

Muito Obrigado.

– ***Agradecimentos***

O autor agradece à Agência Brasileira de Fomento à Pesquisa FAPERJ pelo suporte a este trabalho.