Equação de Difusão

PME5425 – Métodos de Elementos Finitos de Alta Ordem com Aplicações em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor

Prof. Bruno S. Carmo

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

2017

Sumário

A equação de difusão (1/2)

Procuramos a solução numérica da equação parabólica:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

onde α é a difusividade.

Discretizando esta equação no espaço, chegamos a uma versão semi-discreta (discreta no espaço e contínua no tempo):

$$\mathbf{M}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{u}}_g}{\mathrm{d}t} = \alpha \mathbf{L}\hat{\mathbf{u}}_g$$

A equação de difusão (2/2)

A discretização temporal pode ser implícita ou explícita. A formulação explícita impõe uma restrição no passo de tempo, que escala com o inverso do módulo do maior autovalor de $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{L}$. Este autovalor cresce numa taxa $\mathcal{O}(P^4)$ para métodos de alta ordem. Portanto é mais interessante usar um método implícito.

Exemplo de discretização implícita – Euler para trás:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \alpha \nabla^2 u^{n+1}$$

Rearranjando: $\nabla^2 u(x) - \lambda u(x) = f(x) \;\Rightarrow\;$ *Eq. de Helmholtz*

Discretização da equação de Helmholtz (1/2)

$$\nabla^2 u(x) - \lambda u(x) = f(x)$$

onde $\lambda = 1/\alpha\Delta t$ é uma constante positiva e $f(x) = -u^n(x)/\alpha\Delta t$.

Aplicando o método de Galerkin:

$$(v, \nabla^2 u)_\Omega - \lambda(v, u)_\Omega = (v, f)_\Omega$$

Utilizando o teorema da divergência para chegar à formulação fraca:

$$(\nabla v, \nabla u)_\Omega + \lambda(v, u)_\Omega = \langle v, \nabla u \cdot \boldsymbol{n} \rangle - (v, f)_\Omega$$

onde

$$\langle v, \nabla u \cdot \boldsymbol{n} \rangle = \int_{\partial\Omega} v \nabla u \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}x$$

Discretização da equação de Helmholtz (2/2)

Dividindo a solução em uma parcela que satisfaz as condições de contorno nas fronteiras de Dirichlet e a outra que é homogênea nessas fronteiras:

$$u(x) = u^{\mathcal{H}}(x) + u^{\mathcal{D}}(x)$$

onde $u^{\mathcal{H}}(\partial\Omega_{\mathcal{D}}) = 0$ e $u^{\mathcal{D}}(\partial\Omega_{\mathcal{D}}) = u(\partial\Omega_{\mathcal{D}}) = g_{\mathcal{D}}(\partial\Omega_{\mathcal{D}})$

Substituindo na equação de Helmholtz:

$$\begin{aligned}(\nabla v, \nabla u^{\mathcal{H}})_\Omega + \lambda(v, u^{\mathcal{H}})_\Omega = \langle v, g_{\mathcal{N}}\rangle - (v, f)_\Omega + \\ - (\nabla v, \nabla u^{\mathcal{D}})_\Omega - \lambda(v, u^{\mathcal{D}})_\Omega\end{aligned}$$

Representação matricial

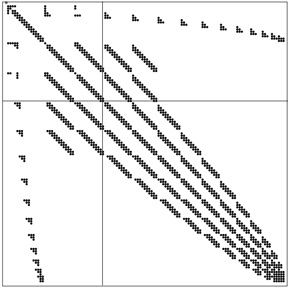
Contribuições elementares

$$\mathbf{L}^e\hat{\mathbf{u}}^e + \lambda \mathbf{M}^e\hat{\mathbf{u}}^e = -(\mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{f}^e$$

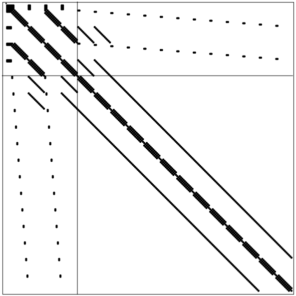
Lembrando que

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}^e &= (\mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{B}^e \\
\mathbf{L}^e &= (\mathbf{D}^e_{x_1}\mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{D}^e_{x_1}\mathbf{B}^e + (\mathbf{D}^e_{x_2}\mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{D}^e_{x_2}\mathbf{B}^e + \\
&\quad + (\mathbf{D}^e_{x_3}\mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{D}^e_{x_3}\mathbf{B}^e \\
\mathbf{D}^e_{x_1} &= \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_1} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_2} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_1}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_3} \\
\mathbf{D}^e_{x_2} &= \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_1} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_2} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_3} \\
\mathbf{D}^e_{x_2} &= \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_1} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_3}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_2} + \mathbf{\Lambda}^e \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_3}\right) \mathbf{D}^e_{\xi_3}
\end{aligned}$$

Exemplos de matrizes elementares bidimensionais ($P = 14$)



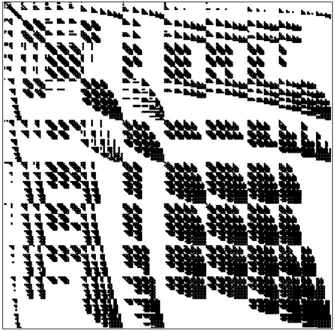
Triângulo – base modal



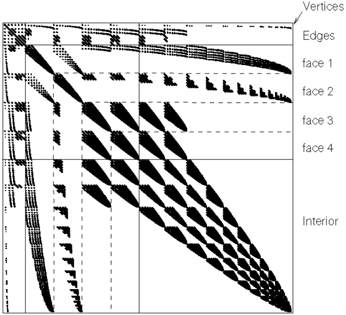
Quadrilátero – base modal

Obs: Expansões nodais geram matrizes laplacianas cheias.

Exemplos de matrizes elementares de Laplace para tetraedros



$P = 9$



$P = 19$

Montagem do sistema global

Considerando todos os elementos, e sabendo que $\hat{\mathbf{u}}_l = \underline{\hat{\mathbf{u}}}^e$ e $\mathbf{f}_l = \underline{\mathbf{f}}^e$,

$$[\underline{\mathbf{L}}^e + \lambda \underline{\mathbf{M}}^e]\hat{\mathbf{u}}_l = -(\underline{\mathbf{B}}^e)^\top \underline{\mathbf{W}}^e \mathbf{f}_l$$

Para impor continuidade C^0 da solução entre os elementos, pré multiplicamos por $\boldsymbol{\mathcal{A}}^\top$. Usando a notação $\hat{\mathbf{u}}_l = \boldsymbol{\mathcal{A}}\hat{\mathbf{u}}_g$, e representando por $\mathbf{\Gamma}$ os termos de integral de superfície não nulos,

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}^\top[\underline{\mathbf{L}}^e + \lambda \underline{\mathbf{M}}^e]\boldsymbol{\mathcal{A}}\hat{\mathbf{u}}_g = -\mathbf{\Gamma} - \boldsymbol{\mathcal{A}}^\top(\underline{\mathbf{B}}^e)^\top \underline{\mathbf{W}}^e \mathbf{f}_l$$

Portanto, para resolver este sistema, é preciso inverter a matriz de Helmholtz na forma fraca,

$$\mathbf{H} = \mathbf{L} + \lambda \mathbf{M} = \boldsymbol{\mathcal{A}}^\top[\underline{\mathbf{L}}^e + \lambda \underline{\mathbf{M}}^e]\boldsymbol{\mathcal{A}},$$

sujeita às condições de contorno apropriadas.

Cálculo dos termos de integral de superfície não nulos

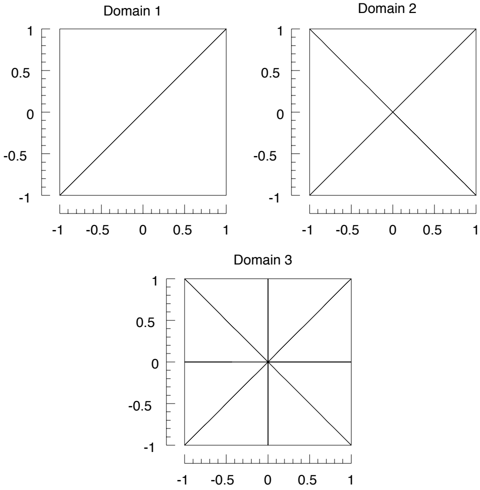
Esses termos aparecem quando temos condições de contorno naturais não nulas. Eles são da forma

$$\mathbf{\Gamma}^e[n(pqr)] = \int_{\partial\Omega^e \cap \partial\Omega_{\mathcal{N}}} \phi^e_{pqr} \nabla u \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}\mathbf{x}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{\Gamma} = \boldsymbol{\mathcal{A}}^\top \mathbf{\Gamma}^e$$

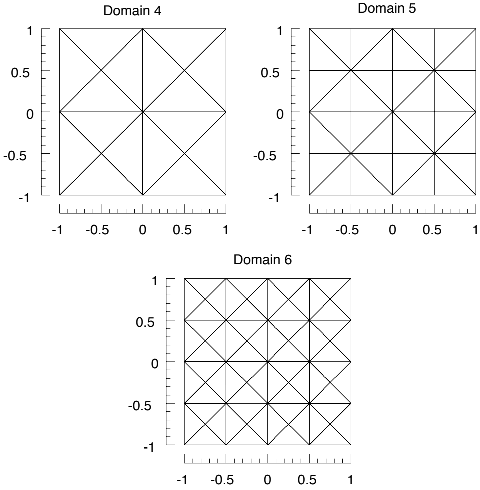
onde $n(pqr)$ representa o mapeamento dos índices p, q e r no sistema de numeração global e $\partial\Omega_{\mathcal{N}}$ as fronteiras onde condições do tipo Neumann são especificadas.

A maioria dos elementos não contribui para esta integral. Para aqueles que contribuem, a integral pode ser calculada discretamente projetando a função $g_{\mathcal{N}}$ nos pontos de quadratura e usando o jacobiano de superfície.

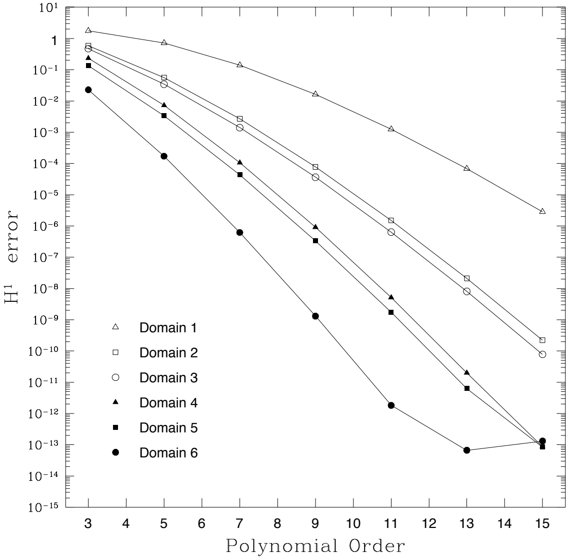
Malhas utilizadas nos exemplos numéricos



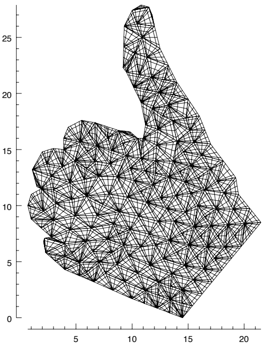
Malhas utilizadas nos exemplos numéricos

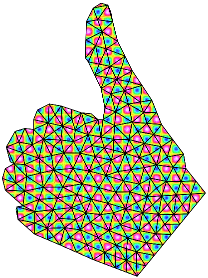


Resultados

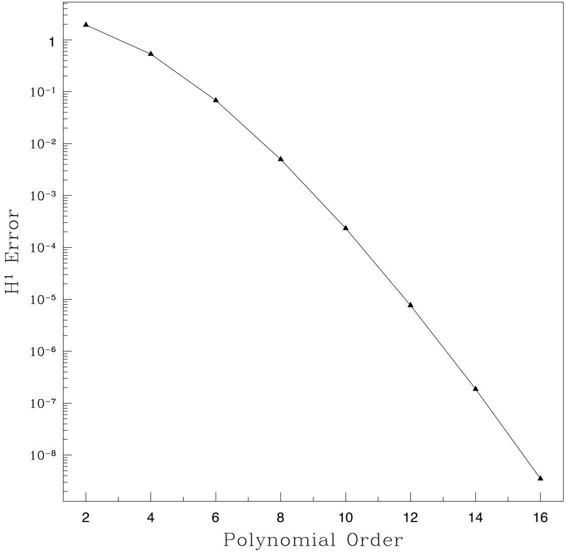

H^1 error
Polynomial Order
Domain 1
Domain 2
Domain 3
Domain 4
Domain 5
Domain 6
10^{1}
1
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}
10^{-9}
10^{-10}
10^{-11}
10^{-12}
10^{-13}
10^{-14}
10^{-15}
3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15

Malha e resultado – exemplo 2

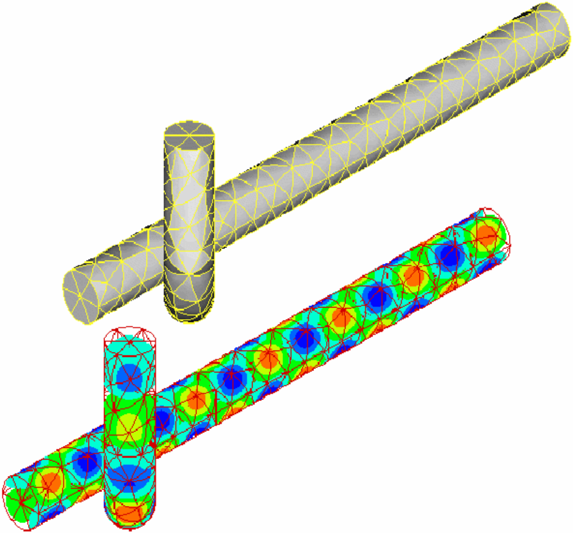




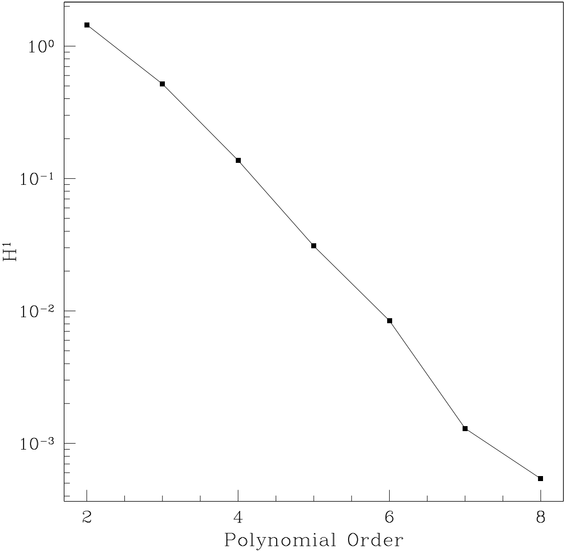
Exemplo 2 – convergência



Exemplo 3d - malha e resultado



Exemplo 3d - convergência



Discretização temporal

Sistema de equações diferenciais ordinárias semidiscretas:

$$\mathbf{M}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{u}}_g}{\mathrm{d}t} = \alpha\mathbf{L}\hat{\mathbf{u}}_g \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{u}}_g}{\mathrm{d}t} = \alpha\mathbf{M}^{-1}\mathbf{L}\hat{\mathbf{u}}_g$$

Este sistema pode ser integrado no tempo utilizando dois tipos de métodos:

- Métodos de múltiplos estágios: esquemas de Runge-Kutta
- Métodos de múltiplos passos:
  - Métodos com integração para frente
  - métodos com diferenciação para trás

Métodos de múltiplos estágios: Runge-Kutta

São métodos onde passos intermediários são dados para obter uma aproximação de maior ordem. Toda a informação gerada num passo é descartada ao se avançar ao próximo passo.

Exemplo – método de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4): Sendo $\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, t)$, a integração numérica usando RK4 num passo de tempo Δt, de $\mathbf{u}^n$ para $\mathbf{u}^{n+1}$ é:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= \Delta t\, \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n, t^n\right) \\
\mathbf{k}_2 &= \Delta t\, \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \frac{\mathbf{k}_1}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right) \\
\mathbf{k}_3 &= \Delta t\, \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \frac{\mathbf{k}_2}{2}, t^n + \frac{\Delta t}{2}\right) \\
\mathbf{k}_4 &= \Delta t\, \mathbf{F}\left(\mathbf{u}^n + \mathbf{k}_3, t^n + \Delta t\right) \\
\mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^n + \frac{\mathbf{k}_1}{6} + \frac{\mathbf{k}_2}{3} + \frac{\mathbf{k}_3}{3} + \frac{\mathbf{k}_4}{6} + \mathcal{O}(\Delta t^5)
\end{aligned}
$$

Métodos de múltiplos estágios *vs.* métodos de múltiplos passos

- Em métodos de múltiplos estágios, é necessário avaliar o lado direito da equação semidiscreta várias vezes num mesmo passo de tempo. Para métodos de alta ordem, esta é uma operação relativamente cara.

- Métodos de múltiplos passos usam informações dos passos de tempo anteriores e não avançam em passos intermediários.

- Podem ser mais eficientes do que métodos de múltiplos estágios porque guardam e reusam informações de passos de tempo anteriores.

- Métodos de múltiplos passos devem atender ao critério de estabilidade de Dahlquist.

Critério de estabilidade de Dahlquist

Teoremas de estabilidade de Dahlquist, que governam os esquemas multi-passos:

1. Para um esquema implícito estável de s passos, a ordem J da aproximação é menor do que $s+3$ para s par e menor que $s+2$ para s ímpar. Para um esquema explícito estável a ordem J da aproximação é menor do que $s+1$.

2. Não há métodos multi-passos explícitos que sejam incondicionalmente estáveis, e não há métodos multi-passos implícitos de ordem maior do que 2 que sejam incondicionalmente estáveis.

Estabilidade de métodos multi-passos

Considere o problema escalar onde $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \lambda u$ $(\lambda \leq 0)$. Considerando por exemplo o esquema de Euler para frente, então podemos escrever

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \lambda u^n \quad \Rightarrow \quad u^{n+1} = (1 + \Delta t \lambda) u^n.$$

Neste exemplo, o esquema será estável se $|1 + \Delta t \lambda| \leq 1$, o que no plano complexo corresponde ao círculo de raio unitário centrado em $\lambda \Delta t = -1$. Esta análise pode ser estendida para esquemas de alta ordem $(J > 1)$ repetindo-a em termos dos autovalores da matriz que opera sobre um vetor da forma $\mathbf{v}^{n+1} = [u^{n+1}, u^n, \ldots, u^{n-J}]^\top$.

Métodos com integração para frente I

Os métodos com integração para frente são os métodos da família Adams. Os métodos explícitos são conhecidos como métodos de *Adams-Bashfort* e os implícitos como métodos de *Adams-Moulton*.

Os métodos com integração para frente baseiam-se na integração no tempo da equação semidiscreta:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, t) \quad \Rightarrow \quad \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t = \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{u}, t)\mathrm{d}t$$

Para calcular a integral no lado direito, aproximamos $\mathbf{F}(\mathbf{u}, t)$ por uma interpolação polinomial e calculamos a integral deste polinômio.

Métodos com integração para frente II

O valor de $\mathbf{F}(\mathbf{u}, t)$ calculado nos passos de tempo anteriores são os pontos usados para a interpolação polinomial no método explícito.

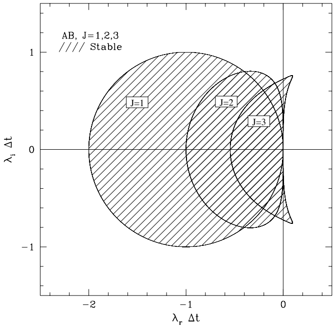
Para o método implícito, incluímos também o valor de $\mathbf{F}(\mathbf{u}, t)$ calculado no passo de tempo t^{n+1}, que formará, junto com o termo $\mathbf{u}^{n+1}$ do lado esquerdo da equação semidiscreta, a matriz de coeficientes do sistema linear.

Coeficientes dos métodos da família Adams

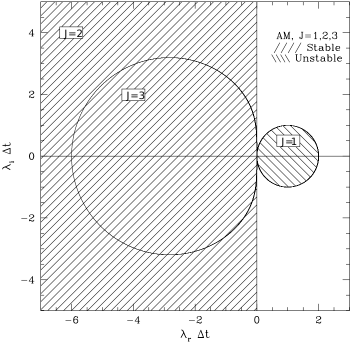
$$\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n} = \left(\sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \mathbf{F}^{n+1-q} \right) \Delta t$$

Coeficiente	1ª ordem	2ª ordem	3ª ordem
	Adams-Bashforth		
β_0	0	0	0
β_1	1	3/2	23/12
β_2	0	-1/2	-16/12
β_3	0	0	5/12
	Adams-Moulton		
β_0	1	1/2	5/12
β_1	0	1/2	8/12
β_2	0	0	-1/12
β_3	0	0	0

Regiões de estabilidade dos métodos com integração para frente



Adams-Bashfort



Adams-Moulton

Matrizes simétricas, como é o caso de $\mathbf{M}$, $\mathbf{L}$ e $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{L}$ geradas por formulação de Galerkin, têm todos os autovalores reais puros.

Métodos com diferenciação para trás I

Relembrando a eq. diferencial: $\dfrac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, t)$

Nestes métodos, a função $\mathbf{u}$ é aproximada por uma interpolação polinomial feita a partir dos valores da função em passos de tempo anteriores e no passo de tempo futuro. A derivada $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}^{n+1}$ é então aproximada pela derivada deste polinômio no instante de tempo t^{n+1}.

O resultado é uma expressão do tipo:

$$\frac{\gamma_0 \mathbf{u}^{n+1} - \sum_{q=0}^{J-1} \alpha_q \mathbf{u}^{n-q}}{\Delta t} = \mathbf{F}^{n+1},$$

que é um esquema implícito.

Métodos com diferenciação para trás II

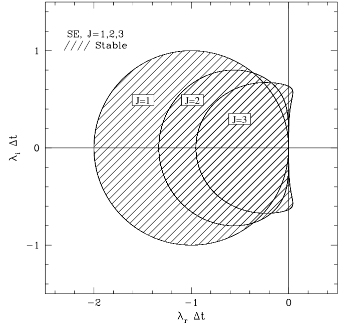
Um esquema explícito pode ser construído aproximando o termo $\mathbf{F}^{n+1}$ por uma extrapolação polinomial do valor deste termo em passos de tempo anteriores.

$$\mathbf{F}^{n+1} \approx \sum_{q=0}^{J-1} \beta_q \mathbf{F}^{n-q}$$

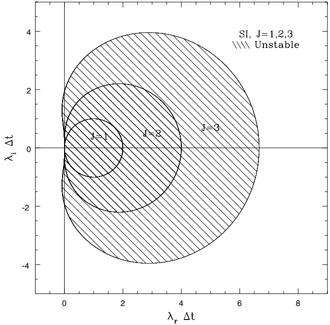
Os coeficientes do método são:

Coeficiente	1ª ordem	2ª ordem	3ª ordem
γ_0	1	3/2	11/6
α_0	1	2	3
α_1	0	-1/2	-3/2
α_2	0	0	1/3
β_0	1	2	3
β_1	0	-1	-3
β_2	0	0	1

Regiões de estabilidade dos métodos com diferenciação para trás



Explícito



Implícito

Espectro do operador Laplaciano fraco

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{u}}_g}{\mathrm{d}t} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{L}\hat{\mathbf{u}}_g = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}$$

Pré-multiplicando por $\mathbf{Q}$ e fazendo $\hat{\mathbf{v}}_g = \mathbf{Q}\hat{\mathbf{u}}_g$:

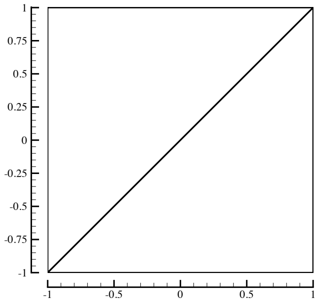
$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{v}}_g}{\mathrm{d}t} = \mathbf{\Lambda}\hat{\mathbf{v}}_g$$

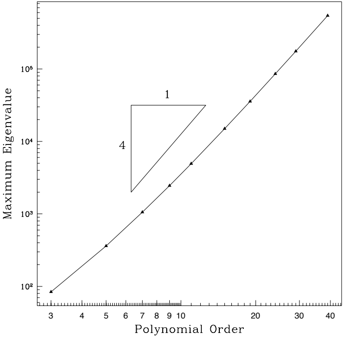
que é um sistema desacoplado de EDOs.

Portanto a estabilidade do método de integração no tempo vai depender o maior autovalor do operador, λ_{max}.

Os exemplos a seguir mostram que o maior autovalor escala com $\mathcal{O}(P^4)$.

Autovalor máximo *vs.* ordem do polinômio – 2d





Autovalor máximo *vs.* ordem do polinômio – 3d