INTRODUCCIÓN AL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

TRABAJO PRÁCTICO 6

PROBLEMA DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

Estudiante

FREDY ANDRÉS MERCADO NAVARRO
Pasaporte: 98´773.532
Maestría en Simulación Numérica y Control

Cuatrimestre: II-2011
19 de Enero de 2011

Universidad de Buenos Aires
Ciudad Autónoma de Buenos Aires
Argentina

PROBLEMA 1

Se evaluará la matriz de rigidez y el vector de fuerza para el siguiente problema de convección-difusión transitorio en 1D. Se utilizará el método de Galerkin sobre tres elementos isoparamétricos lineales iguales. Se llegará hasta el planteo del ensamble de matrices.

La ecuación diferencial que gobierna nuestro problema es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial c}{\partial x}\right) = f$$

El término v es el coeficiente convectivo, mientras que k es el coeficiente difusivo. Dado que ambos términos serán asumidos como constantes, nuestro problema permanece lineal. De lo contrario, éste se convertiría en un problema no lineal. La ecuación resulta:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} - k\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = f$$

Si tenemos en cuenta que el término fuente $f = 0$ obtenemos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} = k\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Ecuación 1

Condiciones de contorno:

$$c_{0,t} = c_1, \qquad \left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{L,t} = 0, \qquad para \quad t > 0$$

Condición inicial:

$$c_{x,0} = 0, \qquad para \quad 0 \leq x \leq L$$

DESARROLLO

Ecuación de Equilibrio

La formulación del método de Galerkin corresponde con la formulación utilizada habitualmente para los trabajos prácticos. La siguiente es la ecuación de equilibrio de elementos finitos en estado transitorio para análisis lineales.

$$M^{t+\Delta t}\dot{C} + \left(K^k + K^c\right)^{t+\Delta t}C = F$$

Si tenemos en cuenta que el término fuente f en la Ecuación 1 es igual a cero, concluimos que no existen aportes exteriores en la ecuación de equilibrio de nuestro problema. Por ello, nuestra ecuación de elementos finitos se reduce a:

$$M^{t+\Delta t}\dot{C} + \left(K^k + K^c\right)^{t+\Delta t}C = 0$$

Problema Transitorio - Aplicación del Método α

Debido a que el problema involucra el cambio de la variable C con respecto al tiempo, es necesario considerar un análisis transitorio para nuestro problema. Emplearemos para ello el Método Alpha (α) de integración en el tiempo, mismo método empleado en el Trabajo Práctico 5. Para su implementación se debe asumir lo siguiente:

$$^{t+\alpha\Delta t}\dot{C} = \frac{\left(^{t+\Delta t}C - \ ^{t}C\right)}{\Delta t}$$

$$^{t+\alpha\Delta t}C = (1-\alpha)\ ^{t}C + \alpha^{t+\Delta t}C$$

Sabemos que α es una constante escogida para alcanzar estabilidad y precisión óptimas. A continuación aplicamos las ecuaciones anteriores para obtener una expresión útil para resolver el problema en $t + \Delta t$. Reemplazando obtenemos:

$$M\left(\frac{\left(^{t+\Delta t}C - \ ^{t}C\right)}{\Delta t}\right) + \left(K^k + K^c\right)\left((1-\alpha)\ ^{t}C + \alpha^{t+\Delta t}C\right) = 0$$

Ahora, expandiendo los productos y factorizando los términos comunes a $^{t+\Delta t}C$ y ^{t}C se obtiene finalmente:

$$\left[M + \alpha\Delta t\left(K^k + K^c\right)\right]^{t+\Delta t}C = \left[M - \Delta t(1-\alpha)\left(K^k + K^c\right)\right]\ ^{t}C$$

Ecuación 2

Donde:

$$M = \sum_m \int_{V^{(m)}} H^{(m)^T} H^{(m)} dV^{(m)}$$

$$K^k = \sum_m \int_{V^{(m)}} B^{(m)^T} k\, B^{(m)} dV^{(m)}$$

$$K^c = \sum_m \int_{S_c{}^{(m)}} H^{S(m)^T} vB^{S(m)} dS^{(m)}$$

Ecuaciones 3, 4 y 5

$$F = \ ^{t+\Delta t}F + \ ^{t+\Delta t}F^e$$

$$^{t+\Delta t}F = \ ^{t+\Delta t}F_B + \ ^{t+\Delta t}F_S + \ ^{t+\Delta t}F_C$$

$$0 \leq \alpha \leq 1$$

Luego, M corresponde a la matriz de masa, K^k es la matriz difusiva, K^c es la matriz de convección, ${}^{t+\Delta t}F$ es el vector de ingreso del flujo nodal y ${}^{t+\Delta t}F^e$ es una contribución similar a ${}^{t+\Delta t}F$ debida a las condiciones de borde convectivas (el superíndice e busca relacionar este símbolo con el flujo aportado por el medio en el que se halla el dominio del problema). La cantidad ${}^{t+\Delta t}F_B$, corresponde al aporte de flujo debido a generación interna del cuerpo y su valor depende de $f^{B(m)}$, ${}^{t+\Delta t}F_S$ corresponde al aporte superficial y su valor depende de $f^{S(m)}$ y ${}^{t+\Delta t}F_C$ es un vector que corresponde al aporte concentrado en los nodos.

Acerca del Método α

Para $0 \leq \alpha < 1/2$, la formulación es condicionalmente estable, mientras que para $1/2 \leq \alpha \leq 1$, el método es incondicionalmente estable. Para $\alpha = 0$, la formulación corresponde al método explícito de Euler en adelanto (Euler Forward), el cual es de primer orden de precisión en Δt, y $\alpha = 1/2$, corresponde al método implícito de Crank-Nicolson, el cual posee orden de precisión 2 en Δt. Para $\alpha = 1$ corresponde el método de Euler en atraso (Euler Backward), que al igual que Euler en Adelanto, posee precisión de primer orden.

Elementos Isoparamétricos lineales

Para resolver la ecuación utilizando 3 elementos isoparamétricos lineales debemos definir primero lo siguiente:

- Matriz de funciones de forma

$$H = [h_1 \quad h_2], \qquad H^T = \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix}$$

$$h_1 = \frac{1}{2}(1-r), \qquad h_2 = \frac{1}{2}(1+r)$$

$$H = \frac{1}{2}[(1-r) \quad (1+r)], \qquad H^T = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} (1-r) \\ (1+r) \end{bmatrix}$$

- Matriz gradiente

$$B = \nabla H = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_2}{\partial x} \end{bmatrix}, \qquad B^T = \nabla H^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} \\ \frac{\partial h_2}{\partial x} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial h_i}{\partial x} = \frac{\partial h_i}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x}$$

$$\frac{\partial h_1}{\partial r} = -\frac{1}{2}, \qquad \frac{\partial h_2}{\partial r} = \frac{1}{2}$$

$$x = h_1 x_1 + h_2 x_2$$

$$\frac{\partial x}{\partial r} = \frac{\partial h_1}{\partial r} x_1 + \frac{\partial h_2}{\partial r} x_2$$

$$\frac{\partial x}{\partial r} = -\frac{1}{2} x_1 + \frac{1}{2} x_2 = \frac{1}{2}(x_2 - x_1) = \frac{\Delta x}{2} \rightarrow \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{2}{\Delta x}$$

De la expresión anterior notamos que Δx es la longitud del elemento.

$$\frac{\partial h_1}{\partial x} = \frac{\partial h_1}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{1}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial h_1}{\partial x} = \frac{\partial h_2}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{\Delta x}$$

Finalmente,

$$B = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad B^T = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

De la definición de operador Jacobiano obtengo la siguiente expresión:

$$\frac{\partial c}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial c}{\partial x} = J\frac{\partial c}{\partial x}$$

$$dV = dS = dx$$

$$\frac{dx}{dr} = J \rightarrow dx = Jdr$$

Cálculo de Matrices Elementales

A partir de este punto podemos calcular las matrices elementales de masa, convección y difusión:

$$M = \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & h_2 \end{bmatrix} Jdr = \frac{1}{8}\Delta x \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} 1-r \\ 1+r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1-r & 1+r \end{bmatrix} dr$$

$$M = \Delta x \begin{bmatrix} 1/3 & 1/6 \\ 1/6 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$$K^k = \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial h_1}{\partial x} \\ \dfrac{\partial h_2}{\partial x} \end{bmatrix} k \begin{bmatrix} \dfrac{\partial h_1}{\partial x} & \dfrac{\partial h_2}{\partial x} \end{bmatrix} Jdr = \frac{1}{2}\frac{k}{\Delta x}\int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} dr$$

$$K^k = \frac{k}{\Delta x}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$K^c = \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} v \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_2}{\partial x} \end{bmatrix} J dr = \frac{1}{4} v \int_{-1}^{1} \begin{bmatrix} 1-r \\ 1+r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix} dr$$

$$K^c = \frac{v}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Ensamble de matrices elementales

A continuación se tomarán las matrices elementales y se conformarán las matrices globales. Para esto, se definirá la matriz de conectividad como:

Tabla 1. Matriz de Conectividad

	Nodo Global	
Elemento	**Nodo local 1**	**Nodo local 2**
1	1	2
2	2	3
3	3	4

Teniendo en cuenta la matriz de conectividad, el ensamble de matrices elementales resultante es:

$$M = \Delta x \begin{bmatrix} 1/3 & 1/6 & 0 & 0 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 & 0 \\ 0 & 1/6 & 2/3 & 1/6 \\ 0 & 0 & 1/6 & 1/3 \end{bmatrix}$$

$$K^k = \frac{k}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$K^c = v \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Solución

El procedimiento para la solución numérica es similar al desarrollado para el Trabajo Práctico 5 para el problema transitorio. Se debe tener en cuenta que el esquema con $\alpha = 0$ es condicionalmente estable, de tal forma que el valor de Δt debe seleccionarse de modo que cumpla con el criterio de estabilidad.

Determinar una solución para un problema de Convección-Difusión implica tener en cuenta que ello depende de los valores de los números de Peclet y Courant, o de cuán difusivo o cúan convectivo es un problema. Algunas ideas a tener en cuenta son:

1. Elementos finitos lineales en la formulación estándar de Galerkin no se combinan idealmente con la metodología de segundo orden de Crank-Nicolson en situaciones altamente convectivas. [2]
2. En la literatura se encuentran varios métodos que buscan estabilizar las soluciones, debido a dificultades como la ilustrada en el numeral anterior.
3. Para el método de Galerkin, con $|Pe| > 1$ se producen soluciones oscilatorias.
4. Para la formulación de elementos finitos de Galerkin el número de Peclet es:

$$Pe^e = \frac{v\Delta x}{k}, \qquad k = \frac{k_d}{\rho c_p}(caso\ térmico)$$

Para valores altos de Pe^e se obtienen resultados poco realistas con el método de Galerkin, es decir, cuando la velocidad $v \to \infty$ y $k \to 0$ (problema puramente convectivo). En la práctica, se requiere resolver flujos con números de Peclet muy altos, así que el esquema de discretización de elementos finitos de Galerkin debe ser corregido para que sea aplicable a estos problemas. Es aquí donde se introduce la formulación de Petrov-Galerkin, con miras a resolver este problema. [1]

PROBLEMA 2

Se resolverá el mismo Problema 1 considerando la formulación de elementos finitos de Petrov-Galerkin. La formulación de Galerkin emplea funciones de peso iguales a las funciones de forma, mientras que el método de Petrov-Galerkin emplea funciones de peso diferentes a las funciones de forma.

Introducción

Aplicando el método de diferencias finitas centradas al MEF para la discretización espacial, se obtuvieron resultados similares a los otorgados por el método de Galerkin, sin embargo, las soluciones mejoraron notablemente introduciendo el método de diferencias finitas “aguas arriba” (Upwinding), el cual sugiere que los valores de u estarán más influenciados por los valores de u_{izq} que por los valores de u_{der}, siempre que el flujo convectivo se dé de izquierda a derecha. Corrigiendo con Upwinding se halló que el comportamiento oscilatorio de las soluciones de Galerkin había sido solucionado. [1]

Formulación de Petrov-Galerkin

Para la formulación de Galerkin teníamos:

$$c = \sum_{i=1}^{n} h_i \hat{c}_i$$

Donde h_i son las funciones de peso que para la formulación de Galerkin equivalen a las funciones de forma, y $\hat{c}_i$ son las incógnitas nodales de cada elemento.

Ahora, para implementar la formulación de Petrov-Galerkin se aproximará con:

$$c = \sum_{i=1}^{n} w_i \hat{c}_i$$

$$w_i = h_i + \alpha \widetilde{w}_i$$

Donde w_i son las funciones de peso, α es una constante que define el grado en que la función w_i se desviará del método de Galerkin. Así con $\alpha = 0$ se obtendrá de nuevo la formulación de Galerkin y con $\alpha = 1$ la formulación de diferencias finitas Upwind aplicada a la discretización espacial del FEM (Full Upwinding).

Para elementos unidimensionales (1D), la función $\widetilde{w}_i$ está definida como:

$$\widetilde{w}_i = \frac{\partial h_i}{\partial r}$$

Luego:

$$\widetilde{W} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial r} & \frac{\partial h_2}{\partial r} \end{bmatrix}$$

$$\widetilde{W} = [-1/2 \quad 1/2], \qquad \widetilde{W}^T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Ecuación de Equilibrio

Partimos de la misma ecuación que en el Problema 1.

$$M^{t+\Delta t}\dot{C} + \left(K^k + K^c\right)^{t+\Delta t}C = F$$

La forma de introducir el método de Petrov-Galerkin depende de las siguientes definiciones:

$$M = M^G + M^P$$

$$K^k = K^{kG} + K^{kP}$$

$$K^c = K^{cG} + K^{cP}$$

$$F = F^G + F^P$$

M^G: matriz de masa de Galerkin.
M^P: matriz de masa de Petrov.

K^{kG}: matriz de difusiva de Galerkin.
K^{kP}: matriz de difusiva de Petrov.

K^{cG}: matriz de convectiva de Galerkin.
K^{cP}: matriz de convectiva de Petrov.

F^G: vector de fuerzas de Galerkin.
F^P: vectpr de fuerzas de Petrov.

Las matrices M^G, K^{kG}, K^{cG} y el vector F^G son las matrices de masa, difusiva y convectiva, y vector de fuerza tratados en el Problema 1. Las matrices M^P, K^{kP}, K^{cP} y el vector F^P serán definidos a continuación:

$$M^P = \sum_e \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T H d\Omega$$

$$K^{kP} = \sum_e \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T \nabla(k \nabla H) d\Omega$$

$$K^{cP} = \sum_e \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T v \nabla H d\Omega$$

$$F^P = \sum_e \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T Q d\Omega$$

Dado que nuestro problema es el mismo Problema 1, tenemos que $F = 0$.

Cálculo de matrices de Petrov

Las siguientes matrices serán calculadas para un solo elemento.

$$M^P = \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T H d\Omega = \int_\Omega \alpha \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{(1-r)}{2} & \frac{(1+r)}{2} \end{bmatrix} \frac{\Delta x}{2} dr$$

$$M^P = \frac{\alpha \Delta x}{4} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$K^{kP} = \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T \nabla(k\nabla H) d\Omega = \int_\Omega \alpha \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} k\nabla \begin{bmatrix} -\frac{1}{\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} \end{bmatrix} \frac{\Delta x}{2} dr = 0$$

$$K^{cP} = \int_\Omega \alpha \widetilde{W}^T v \nabla H d\Omega = \int_\Omega \alpha v \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} \end{bmatrix} \frac{\Delta x}{2} dr$$

$$K^{cP} = \frac{\alpha v}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Luego, las matrices elementales para la formulación de Petrov-Galerkin son:

$$M = M^G + M^P = \Delta x \begin{bmatrix} 1/3 & 1/6 \\ 1/6 & 1/3 \end{bmatrix} + \frac{\alpha \Delta x}{4} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \Delta x \begin{bmatrix} \frac{1}{3} - \frac{\alpha}{4} & \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{4} \\ \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{4} & \frac{1}{3} + \frac{\alpha}{4} \end{bmatrix}$$

$$K^k = K^{kG} + K^{kP} = \frac{k}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + 0 = \frac{k}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$K^c = K^{cG} + K^{cP} = v \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{bmatrix} + \frac{\alpha v}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{v}{2} \begin{bmatrix} -1+\alpha & 1-\alpha \\ -1-\alpha & 1+\alpha \end{bmatrix}$$

Ensamble de matrices elementales

Utilizando la matriz de conectividad de la Tabla 1, desarrollamos el ensamble global de las matrices elementales, así:

$$M = \Delta x \begin{bmatrix} \frac{1}{3} - \frac{\alpha}{4} & \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{4} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{4} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{4} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{4} & \frac{1}{3} + \frac{\alpha}{4} \end{bmatrix}$$

$$K^k = \frac{k}{\Delta x}\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$K^c = \frac{v}{2}\begin{bmatrix} -1+\alpha & 1-\alpha & 0 & 0 \\ -1-\alpha & 2\alpha & 1-\alpha & 0 \\ 0 & -1-\alpha & 2\alpha & 1-\alpha \\ 0 & 0 & -1-\alpha & 1+\alpha \end{bmatrix}$$

Problema Transitorio - Aplicación del Método α

Tenemos la misma ecuación de equilibrio que en el Problema 1:

$$M^{t+\Delta t}\dot{C} + \left(K^k + K^c\right)^{t+\Delta t}C = F$$

Dado que $F = 0$ resulta:

$$M^{t+\Delta t}\dot{C} + \left(K^k + K^c\right)^{t+\Delta t}C = 0$$

Aplicamos el Método α como se observó en el Problema 1. Cambiamos la variable α por θ debido a que ya fue utilizada antes en la formulación de Petrov-Galerkin. Así, obtenemos:

$$\left[M + \theta\Delta t\left(K^k + K^c\right)\right]^{t+\Delta t}C = \left[M - \Delta t(1-\theta)\left(K^k + K^c\right)\right]\ {}^{t}C$$

Solución

Se deben tener en cuenta las ideas del Problema 1 en cuanto a la solución. Además, se expondrá lo siguiente:

1. Con $\alpha = 0$ se recobra la aproximación de Galerkin estándar, la cual solo resultará en soluciones exactas en los nodos para problemas puramente difusivos, mientras que con $\alpha = 1$ se trabajará con Full Upwinding, y resultará en valores exactos para problemas puramente convectivos.

2. La variable α puede ser evaluada de tal forma que los valores nodales exactos son obtenidos para cualquier valor del número de Peclet, de modo que para cada valor de Peclet se posee un valor de α que otorga soluciones exactas en los nodos. Esto solo aplica para problemas 1D. La formula es:

$$\alpha = coth\left(\frac{Pe^e}{2}\right) - \frac{2}{Pe^e}, \qquad v > 0$$

3. La siguiente condición garantiza la ausencia de oscilaciones en la solución, las cuales se presentan con la formulación de Galerkin. Se debe seleccionar: [3]

$$|\alpha| > \alpha_{crit} = 1 - \frac{1}{|Pe|}$$

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BATHE, Klaus-Jurgen. Finite Element Procedures. Prentice-Hall. 1996. PP 160.
2. DONEA, Jean. Huerta, Antonio. Finite Element Methods for Flow Problems. Jhon Wiley & Sons Ltd. 2003. PP 243.
3. ZIENKIEWICS, O.C. TAYLOR, R.L. The Finite Element Method. Volume III: Fluid Dynamics. Fifth Edition. 2000. PP 19.