

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

## Análise Numérica para Um Problema de Difusão Termoelástica em Domínios Não-Cilíndricos

Rodrigo L. R. Madureira<sup>1</sup>

Instituto de Matemática, Programa de Pós-Graduação em Informática (PPGI), UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Mauro Antonio Rincon<sup>2</sup>

Instituto de Matemática, Departamento de Ciência da Computação, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

**Resumo.** Estudamos o problema de valor inicial e de contorno para um sistema unidimensional de equações lineares de difusão termoelástica em domínio não-cilíndrico. São mostrados três métodos para obtenção da solução numérica aproximada: acoplado, desacoplado com preditor-corretor e desacoplado. A simulação numérica é feita através do método dos elementos finitos no espaço e diferenças finitas no tempo. Além disso, são mostradas as taxas de convergência dos métodos aplicados.

**Palavras-chave.** Difusão termoelástica, Domínio não-cilíndrico, Elementos finitos, Diferenças finitas

### 1 Introdução

A difusão pode ser definida como um fenômeno de penetração, desde regiões de alta concentração até regiões de baixa concentração. O conceito de difusão está ligado ao de transferência de massa impulsionado por diferenças de concentração de diferentes regiões do material.

Problemas em domínios não-cilíndricos têm sido tratados por muitos autores e em várias direções. A existência e unicidade do problema é conhecido na literatura através dos trabalhos de M. Aouadi (ver [1–4]). Rincon et al. [5] analisaram o aspecto numérico do problema termoelástico em domínios não-cilíndricos.

### 2 Problema original no domínio não-cilíndrico

Considere o problema na forma homogênea:

---

<sup>1</sup>rodrigo.rangel@nce.ufrj.br

<sup>2</sup>rincon@dcc.ufrj.br

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \gamma_1 \frac{\partial \theta}{\partial x} + \gamma_2 \frac{\partial P}{\partial x} &= 0, \text{ em } \widehat{Q} \\ c \frac{\partial \theta}{\partial t} + d \frac{\partial P}{\partial t} - k \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \gamma_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} &= 0, \text{ em } \widehat{Q} \\ d \frac{\partial P}{\partial t} + \eta \frac{\partial \theta}{\partial t} - \hbar \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \gamma_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} &= 0, \text{ em } \widehat{Q} \end{aligned} \quad (1)$$

com as seguintes condições de fronteira:

$$u = \theta = P = 0, \text{ em } \widehat{\Sigma} \quad (2)$$

e condições iniciais:

$$u(x, 0) = u_0(x), \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = u_1(x), \theta(x, 0) = \theta_0(x), P(x, 0) = P_0(x), -K(0) < x < K(0) \quad (3)$$

onde  $\widehat{Q}$  é o domínio não-cilíndrico, contido no  $\mathbb{R}^2$ , definido por:

$$\widehat{Q} = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2; x = K(t)y, y \in ]-1, 1[, t \in ]0, T[\} \quad (4)$$

com fronteira lateral

$$\widehat{\Sigma} = \bigcup_{0 < t < T} \{ \{-K(t) \times \{t\}\} \cup \{K(t) \times \{t\}\} \} \quad (5)$$

onde a função real  $K(t)$  e as constantes  $\alpha, \beta, \gamma$  e  $k$  satisfazem certas condições:

- (i)  $K \in C^2([0, T]; \mathbb{R})$  com  $K_0 = \min_{0 \leq t \leq T} K(t) > 0$
- (ii)  $|KK''| < cK^2$ , onde  $c > 0$ .
- (iii) Existe uma constante positiva  $K_1$ , tal que  $1 - [K'(t)y]^2 > K_1$ ,  $0 \leq t \leq T, -1 \leq y \leq 1$ .
- (iv)  $\rho, \alpha, \gamma_1, \gamma_2, k$  e  $\hbar$  são estritamente positivas.
- (v) Assuma que as constantes positivas  $c, d$  e  $\eta$  satisfazem

$$c\eta - d^2 > 0 \quad (6)$$

O teorema de existência e unicidade a seguir do problema (1) pode ser encontrado nos trabalhos de Moncef Aouadi [1–4].

**Teorema 2.1.** *Suponha que as hipóteses (i)-(v) são válidas. Então, com os dados iniciais  $u_0 \in H_0^1(-1, 1), u_1 \in L^2(-1, 1), \theta \in L^2(-1, 1), P \in L^2(-1, 1)$  o problema envolvendo as equações 1-3 possui uma única solução fraca para  $u, \theta$  e  $P$ .*

### 3 Problema equivalente no domínio cilíndrico

Note que quando  $(x, t)$  varia em  $\widehat{Q}$ , o ponto  $(y, t)$ , com  $y = K^{-1}(t)x$ , varia no cilindro  $Q = ]-1, 1[ \times ]0, T[$ . Assim, a função  $\tau : \widehat{Q} \rightarrow Q$ , dada por  $\tau : (x, t) \rightarrow (y, t)$ , é um difeomorfismo. Sob as mudanças de variáveis  $v(y, t) = u(\underbrace{K(t)y, t}_x)$ ,  $\phi(y, t) = \theta(\underbrace{K(t)y, t}_x)$ ,

$\psi(y, t) = P(\underbrace{K(t)y, t}_x)$ , obtemos o problema equivalente:

$$\begin{cases}
 \rho \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - \rho \frac{\partial}{\partial y} \left( a_1(y, t) \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\rho b_2(y, t) \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial t} + \rho a_3(y, t) \frac{\partial v}{\partial y} \\
 + (\rho - \alpha) b_1(t) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \gamma_1 a_2(t) \frac{\partial \phi}{\partial y} + \gamma_2 a_2(t) \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \text{ em } Q \\
 \\
 c \frac{\partial \phi}{\partial t} + c b_2(y, t) \frac{\partial \phi}{\partial y} + d \frac{\partial \psi}{\partial t} + d b_2(y, t) \frac{\partial \psi}{\partial y} + \gamma_1 a_2(t) \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial t} \\
 + \gamma_1 \frac{\partial}{\partial y} \left( b_3(y, t) \frac{\partial v}{\partial y} \right) - k b_1(t) \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \text{ em } Q \\
 \\
 d \frac{\partial \psi}{\partial t} + d b_2(y, t) \frac{\partial \psi}{\partial y} + \eta \frac{\partial \phi}{\partial t} + \eta b_2(y, t) \frac{\partial \phi}{\partial y} + \gamma_2 a_2(t) \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial t} \\
 + \gamma_2 \frac{\partial}{\partial y} \left( b_3(y, t) \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \hbar b_1(t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0 \text{ em } Q \\
 \\
 v = \phi = \psi = 0, \text{ em } \Sigma \\
 \\
 v(y, 0) = v_0(y), \frac{\partial v}{\partial t}(y, 0) = v_1(y), \phi(y, 0) = \phi_0(y), \\
 \psi(y, 0) = \psi_0(y), -1 < y < 1
 \end{cases} \tag{7}$$

onde:

$$a_1(y, t) = \frac{1}{K(t)^2} - \left( \frac{K'(t)y}{K(t)} \right)^2; \quad a_2(t) = \frac{1}{K(t)}; \quad a_3(y, t) = -\frac{K''(t)y}{K(t)};$$

$$b_1(t) = \frac{1}{K(t)^2}; \quad b_2(y, t) = -\frac{K'(t)y}{K(t)}; \quad b_3(y, t) = -\frac{K'(t)y}{K(t)^2};$$

### 4 Sistema aproximado

Seja  $T > 0$ . Denotamos por  $V_m$  o subespaço gerado por  $w_1, w_2, \dots, w_m$ , onde  $(w_i)_{i \in \mathbb{N}} \in V_m$ . Para cada  $m \in \mathbb{N}$ , consideramos as seguintes soluções aproximadas  $v_m, \phi_m, \psi_m$  representadas por:

$$v_m(y, t) = \sum_{i=1}^m \lambda_i(t)w_i(y); \phi_m(y, t) = \sum_{i=1}^m \sigma_i(t)w_i(y); \psi_m(y, t) = \sum_{i=1}^m \xi_i(t)w_i(y); \quad (8)$$

Definindo as seguintes matrizes:

$$M_{ij} = (w_i, w_j); N_{ij} = \left( \frac{\partial w_i}{\partial y}, \frac{\partial w_j}{\partial y} \right); L_{ij} = \left( \frac{\partial w_i}{\partial y}, w_j \right); \quad (9)$$

$$S_{ij}(t) = \left( a_1(y, t) \frac{\partial w_i}{\partial y}, \frac{\partial w_j}{\partial y} \right) = \sum_{e=1}^m a_1^e(t)N_{ij}^e; U_{ij}(t) = \left( b_2(y, t) \frac{\partial w_i}{\partial y}, w_j \right) = \sum_{e=1}^m b_2^e(t)L_{ij}^e;$$

$$V_{ij}(t) = \left( a_3(y, t) \frac{\partial w_i}{\partial y}, w_j \right) = \sum_{e=1}^m a_3^e(t)L_{ij}^e; W_{ij}(t) = \left( b_3(y, t) \frac{\partial w_i}{\partial y}, \frac{\partial w_j}{\partial y} \right) = \sum_{e=1}^m b_3^e(t)N_{ij}^e$$

e substituindo as soluções aproximadas na formulação variacional de (7), obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho M \ddot{\lambda}(t) + 2\rho U^T(t) \dot{\lambda}(t) + (\rho(S(t) + V^T(t)) + (\alpha - \rho)b_1(t)N) \lambda(t) \\ + \gamma_1 a_2(t)L^T \sigma(t) + \gamma_2 a_2(t)L^T \xi(t) = 0 \\ \\ cM \dot{\sigma}(t) + (cU^T(t) + kb_1(t)N_{ij}) \sigma(t) + dM \dot{\xi}(t) + dU^T(t)\xi(t) \\ + \gamma_1 a_2(t)L^T \dot{\lambda}(t) - \gamma_1 W(t)\lambda(t) = 0 \\ \\ dM \dot{\xi}(t) + (dU^T(t) + \hbar b_1(t)N_{ij}) \xi(t) + \eta M \dot{\sigma}(t) + \eta U^T(t)\sigma(t) \\ + \gamma_2 a_2(t)L^T \dot{\lambda}(t) - \gamma_2 W(t)\lambda(t) = 0 \end{array} \right. \quad (10)$$

## 5 Métodos numéricos

Nesta seção, desenvolveremos três métodos numéricos do sistema de equações diferenciais ordinárias (10) e vamos compará-los.

### 5.1 Método numérico acoplado

Para a primeira equação do sistema, considere a seguinte aproximação de Newmark (Observação:  $a^n = a(t_n)$ , onde  $t_n$  é o tempo discreto) :

$$a^{*n} = (1/4)a^{n+1} + (1/2)a^n + (1/4)a^{n-1}, \text{ onde } a \text{ é } \lambda, \sigma \text{ ou } \xi \quad (11)$$

Além disso, para a primeira e segunda derivadas, tomamos as seguintes diferenças centradas no tempo:

$$\delta\lambda^n = \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^{n-1}}{2\Delta t}, \quad \delta^2\lambda^n = \frac{\lambda^{n+1} - 2\lambda^n + \lambda^{n-1}}{\Delta t^2} \quad (12)$$

Para a segunda e terceira equações, considere a aproximação por Crank-Nicolson:

$$a^{*n} = (1/2)a^{n+1} + (1/2)a^n, \text{ onde } a \text{ é } \lambda, \sigma \text{ ou } \xi \quad (13)$$

Além disso, para a primeira derivada, tomamos as seguintes diferenças progressivas no tempo:

$$\delta\sigma^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\sigma^{n+1} - \sigma^n}{\Delta t}, \quad \delta\xi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\xi^{n+1} - \xi^n}{\Delta t}, \quad \delta\lambda^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\lambda^{n+1} - \lambda^n}{\Delta t} \quad (14)$$

Aplicando ao sistema de equações (10), obtemos o seguinte sistema linear de blocos de matrizes:

$$\mathbf{R}\Psi^{n+1} = -\mathbf{S}_1\Psi^n - \mathbf{S}_2\Psi^{n-1} \quad (15)$$

Usando a recorrência de (15), obtemos os vetores  $\Psi^{n+1} = [\lambda^{n+1} \quad \sigma^{n+1} \quad \xi^{n+1}]^T$  para  $n = 1, 2, \dots, N$ .

## 5.2 Método numérico desacoplado com Preditor-Corretor

O método com preditor-corretor funciona da seguinte maneira: 1. Achamos normalmente  $\lambda^{n+1}$  na 1a. equação, usando como preditores  $\xi^{n+1P} = \xi^n$  e  $\sigma^{n+1P} = \sigma^n$ . 2. Resolvemos o sistema da segunda equação com  $\xi^{n+1P} = \xi^n$  e achamos  $\sigma^{n+1}$ . 3. Resolvemos o sistema da terceira equação com  $\sigma^{n+1}$  e achamos o corretor  $\xi^{n+1}$ . Dada uma tolerância  $\epsilon$ , enquanto  $\|\xi^{n+1} - \xi^{n+1P}\| < \epsilon$  e  $\|\sigma^{n+1} - \sigma^{n+1P}\| < \epsilon$ , o preditor  $\xi^{n+1P}$  recebe o valor de  $\xi^{n+1}$ , o preditor  $\sigma^{n+1P}$  recebe o valor de  $\sigma^{n+1}$  e retornamos aos passos 2 e 3.

## 5.3 Método numérico desacoplado

No método desacoplado, usamos na primeira equação a aproximação de Newmark somente para  $\lambda(t)$ , além das diferenças centradas para primeira e segunda derivadas. Na segunda e terceira equações, usamos o método de Crank Nicolson de forma análoga ao método acoplado.

## 6 Simulação numérica

Na simulação numérica que fizemos, não temos a solução exata para comparar com a numérica. Por isso, vamos considerar como solução “exata” a solução de uma malha com discretização suficientemente refinada. Vamos considerar esta malha com o número de elementos do espaço ( $nel_y$ ) igual a  $2^{10}$  e o número de elementos do tempo ( $nel_t$ ) igual a  $2^9$ . Em seguida, vamos compará-la com malhas menores para estimar as taxas de convergência e os erros associados às soluções numéricas.

**Exemplo:**

Sejam:

$v(y, 0) = (\pi^2/6)(y^2 - 1)$ ;  $v'(y, 0) = -(\pi^2/6)(y^2 - 1)$ ;  $\phi(y, 0) = -(\pi^2/4)\text{sen}((\pi/4)(y^2 - 1))$ ;  $\psi(y, 0) = (\pi^2/4)(y^2 - 1)$ ;  $K(t) = 1 + t/(2(t + 1))$  e as constantes:  $\rho = 10$ ;  $\alpha = 20$ ;  $\gamma_1 = 0,001$ ;  $\gamma_2 = 0,001$ ;  $d = 10^4$ ;  $k = 1$ ;  $\eta = 10^4$ ;  $\hbar = 1$ ;  $c = 2 \times 10^4$ .

Através da execução do nosso programa feito em MATLAB para o método acoplado, foi encontrada a seguinte tabela de erros e ordens de convergência para  $L^\infty(0, T, L^2(-1, 1))$  quando  $h = \Delta t$ :

Tabela 1: Acoplado - Erros e ordens de convergência -  $L^\infty(0, T, L^2(-1, 1))$ .

| $h = \Delta t$ | $E_v$    | $E_\phi$ | $E_\psi$ | $p_v$    | $p_\phi$ | $p_\psi$ |
|----------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1/64           | 0,022414 | 0,000969 | 0,000965 | 1,002032 | 1,819381 | 1,979074 |
| 1/128          | 0,011196 | 0,000237 | 0,000210 | 1,001384 | 2,033097 | 2,199279 |
| 1/256          | 0,005594 | 0,000044 | 0,000033 | 1,000964 | 2,423969 | 2,651475 |

O tempo de execução para o caso  $h = \Delta t = 1/256$  foi de 164,708 minutos.

Para o método desacoplado com preditor-corretor, temos a seguinte tabela:

Tabela 2: Preditor-Corretor - Erros e ordens de convergência -  $L^\infty(0, T, L^2(-1, 1))$ .

| $h = \Delta t$ | $E_v$    | $E_\phi$ | $E_\psi$ | $p_v$    | $p_\phi$ | $p_\psi$ |
|----------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1/32           | 0,000817 | 0,003421 | 0,003805 | 1,819109 | 1,703515 | 1,771199 |
| 1/64           | 0,000229 | 0,000969 | 0,000965 | 1,835780 | 1,819351 | 1,979079 |
| 1/128          | 0,000062 | 0,000237 | 0,000210 | 1,877835 | 2,032367 | 2,198805 |

O tempo de execução para  $h = \Delta t = 1/256$  e  $\epsilon = 10^{-6}$  foi de 25,7059 minutos.

Finalmente, para o método desacoplado, temos a seguinte tabela:

Tabela 3: Desacoplado - Erros e ordens de convergência -  $L^\infty(0, T, L^2(-1, 1))$ .

| $h = \Delta t$ | $E_v$    | $E_\phi$ | $E_\psi$ | $p_v$    | $p_\phi$ | $p_\psi$ |
|----------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1/64           | 0,000229 | 0,000969 | 0,000965 | 1,835780 | 1,819381 | 1,979074 |
| 1/128          | 0,000062 | 0,000237 | 0,000210 | 1,877835 | 2,033097 | 2,199279 |
| 1/256          | 0,000015 | 0,000044 | 0,000033 | 2,039196 | 2,423969 | 2,651475 |

O tempo de execução para o caso  $h = \Delta t = 1/256$  foi de 19,7317 minutos.

Os gráficos para o problema original gerados no caso  $h = \Delta t = 1/32$  foram:

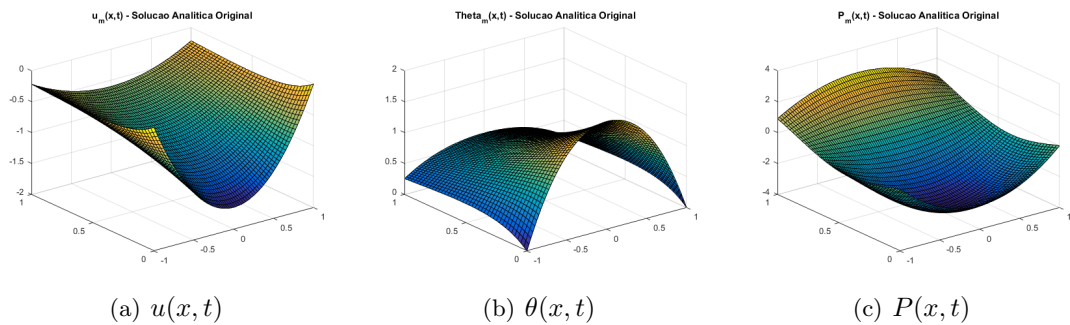


Figura 1: Gráficos - Problema original -  $nel_x = 64, nel_t = 32$ .

## 7 Conclusões

No exemplo apresentado aqui, o método acoplado torna-se o mais lento por apresentar uma matriz de tamanho  $9m^2$  (enorme para valores muito grandes de  $m$ ) e ordem linear na convergência de  $\lambda^n$  para  $n = 0, 1, 2, \dots$ . O método numérico desacoplado com predictor-corretor apresentou ordem de convergência quadrática para todas as variáveis do problema, mas foi mais lento que o método desacoplado propriamente dito.

## Agradecimentos

Agradecemos aos professores e alunos do curso de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Informática da UFRJ (PPGI/UFRJ) que colaboraram conosco.

## Referências

- [1] M. Aouadi. Theory of generalized micropolar thermoelastic diffusion under lord-shulman model. *J. Thermal Stresses*, (32):923–942, 2009.
- [2] M. Aouadi. Qualitative results in the theory of thermoelastic diffusion mixtures. *J. Thermal Stresses*, (33):595–615, 2010.
- [3] M. Aouadi. A theory of thermoelastic diffusion materials with voids. *ZAMP*, (61):357–379, 2010.
- [4] M. Aouadi. Stability aspects in a nonsimple thermoelastic diffusion problem. *Appl. Anal.*, 2012.
- [5] B. L. J. Rincon, M.A.; Santos. Numerical method, existence and uniqueness for thermoelasticity system with moving boundary. *Comput. Appl. Math.*, (24):439–460, 2005.