

Resumo

Esta tese tem como objecto de estudo uma classe de problemas de evolução, definidos, quer em domínios de $\mathbb{R}$, quer em domínios de $\mathbb{R}^2$, que são caracterizados por apresentarem soluções com regiões de elevada actividade espacial, móveis no tempo. Na resolução destes problemas é adoptado o método dos elementos finitos móveis numa formulação que se baseia em aproximações seccionalmente polinomiais de grau arbitrário. Após uma síntese bibliográfica, apresenta-se e desenvolve-se a formulação do método para problemas de evolução em 1-D, que constitui uma extensão do trabalho de Sereno [68] a sistemas implícitos do tipo

$$G(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial t} + F(x,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + H(x,t,u,\frac{\partial u}{\partial x})$$

Esta formulação é caracterizada por se fazer aproximar a solução por uma função seccionalmente polinomial de grau arbitrário. Para cada uma das variáveis dependentes associa-se uma malha espacial. Embora a escolha de malhas múltiplas acarrete alguns custos computacionais adicionais, ela permite obter com grande precisão e economia de nós, perfis descritos por ondas que se deslocam com diferentes velocidades. Este facto, aliado à técnica desenvolvida para o cálculo dos integrais que envolvem segundas derivadas espaciais, tornam o código computacional elaborado com base nesta formulação do método dos elementos finitos móveis, um poderoso instrumento para a resolução de uma vasta classe de problemas. Vários exemplos numéricos ilustram esta afirmação. É de realçar ainda que o facto de se possuir um código eficiente permitiu validar numericamente alguns modelos, comparando modelos mais complexos com modelos simplificados.

Seguidamente é apresentada e desenvolvida a formulação do método para problemas de evolução em 2-D caracterizados por

$$\frac{\partial u}{\partial t} + F_1(x,y,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F_2(x,y,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + H(x,y,t,u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial u}{\partial y})$$

Nesta formulação a solução é aproximada por uma função seccionalmente polinomial de grau superior ao das aproximações lineares, tradicionalmente usadas. É apresentado um resultado que possibilita a avaliação das derivadas da solução em ordem à variação das posições nodais e à variação da solução num ponto da malha global. O modo de calcular os integrais envolvendo derivadas espaciais de segunda ordem da solução é inovador e eficiente. Se bem que as ideias e a estrutura sejam similares às desenvolvidas para 1-D, a implementação dessas ideias em 2-D torna-se bastante mais complexa. Uma dificuldade fundamental é a que diz respeito à distorção da malha. Para evitar as singularidades da matriz de massa foram introduzidas funções de penalização dependentes da área de cada elemento. São funções que não interferem na qualidade da solução e têm o efeito acrescido de regularizar o movimento dos nós. O tratamento das condições de fronteira e a escolha da malha inicial são também pontos delicados que determinam o desempenho do método.

O código desenvolvido com base no método proposto foi aplicado à resolução de alguns problemas cuja solução apresenta frentes abruptas móveis. São resolvidos vários problemas em 1-D e em 2-D provenientes da Engenharia Química estudados no Laboratório de Processos de Separação e de Reacção (LSRE). Os resultados numéricos são comparados, quer com os experimentais, quer com os fornecidos pela literatura, evidenciando a eficácia e potencialidade do método e do algoritmo computacional desenvolvidos.

Abstract

The objective of the thesis is the study a class of problems of evolution defined on Ω and Ω^2 domains that present solutions with great spatial activity in some regions of space, moving in time. To solve these problems we adopt the moving finite element method in a formulation based on piecewise polynomials approximation of arbitrary degree. After a bibliographic review, we present and develop the formulation of the method for problems of evolution in 1-D that constitute an extension of the work of Sereno [68] to implicit systems described by

$$G(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial t} + F(x,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + H(x,t,u,\frac{\partial u}{\partial x}) = 0$$

This formulation is characterized by the approximation of the solution that is a piecewise polynomial approximation of arbitrary degree. For each one of dependent variables we associate a space grid. Although the choice of several grids has some extra computational costs, it allows great accuracy and economy of nodes in problems of moving profiles with different velocities. This fact and the technique developed to compute integrals involving second spatial derivatives, make the computational code based on this formulation of the moving of finite element method a powerful tool to compute the numerical solution of a large class of problems. Several numerical examples are given.

Then the formulation of the method for problems of evolution in 2-D characterized by

$$\frac{\partial u}{\partial t} + F_1(x,y,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F_2(x,y,t,u)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + H(x,y,t,u,\frac{\partial u}{\partial x},\frac{\partial u}{\partial y}) = 0$$

is presented and developed. In this formulation the solution is approximated by a piecewise polynomials approximation of higher degree than the linear approximations usually used. A result that allows the evaluation of the derivatives of the solution with respect to the variation of the nodes position and to the variation of the value of the solution at a global node is presented. The way to calculate the integrals involving second spatial derivatives is innovative and efficient. The ideas and structure are similar to those developed in 1-D, but the implementation of those ideas in 2-D is more complex. One basic difficulty has to do with the grid distortion. To overcome the singularity of the mass-matrix penalty functions depending on the area of each element were introduced. These functions do not interfere on the solution and the additional effect is to regularize the nodes

movements. The treatment of boundary conditions and the choice of initial grid are also sensitive points in determining the performance of the method.

The computational code developed was applied to the resolution of same problems whose solutions present sharp moving fronts. Various problems from Chemical Engineering in 1-D and 2-D studied in the Laboratory of Separation and Reaction Engineering (LSRE) are solved. The numerical results are compared with the experimental results as well as those given in the literature, and show the efficiency of the method and computational algorithm developed.