



ESQUEMAS DE ADAPTATIVIDADE TEMPORAL PARA A EQUAÇÃO DE CAHN-HILLIARD

TIME ADAPTIVITY SCHEMES FOR THE CAHN-HILLIARD EQUATION

Gabriel F. Barros (1)(P); Adriano M. A. Côrtes (2); Alvaro L. G. A. Coutinho (3)

(1) Mestrando, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.

(2) Dr. Prof., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.

(3) Dr. Prof., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.

Email para Correspondência: gabriel.barros@coc.ufrj.br; (P) Apresentador

Resumo: A equação de Cahn-Hilliard é uma das principais equações dos modelos de campo de fase e é frequentemente usada para problemas envolvendo decomposição espinodal, escoamento de fluidos multifásicos, modelagens de crescimento tumoral, entre outros. No caso da decomposição espinodal, a modelagem do campo de fase apresenta escalas temporais diversas em sua evolução. Portanto, soluções numéricas eficientes para esse tipo de problema envolvem esquemas de adaptatividade temporal adequados. O presente trabalho apresenta estratégias inovadoras para a adaptatividade temporal da equação de Cahn-Hilliard no intuito de diminuir o esforço computacional para essas simulações, sem comprometer a solução e suas quantidades de interesse. A adaptatividade temporal é baseada na teoria de controle, onde a grandeza a ser controlada é o erro de truncamento local. O erro de truncamento local é extrapolado por um método de integração temporal de ordem inferior ao utilizado na marcha temporal, que é posteriormente aproximado por um operador de diferença de segunda ordem. Utiliza-se um método de primeira ordem para a aproximação do erro de truncamento local. Controladores de passo de tempo são utilizados, no intuito de calcular o passo de tempo seguinte em função do erro de truncamento local calculado nos passos anteriores. Três controladores são utilizados e comparados: um controlador PID completo, um controlador básico contendo apenas a parcela integral do PID e um controlador preditivo. Grandezas como conservação de massa e decaimento energético são avaliadas, assim como a avaliação da física em todos os casos. As equações são aproximadas espacialmente pelo método dos elementos finitos e a equação de Cahn-Hilliard, por ser uma equação diferencial parcial de quarta ordem, é convertida em um sistema não-linear de equações diferenciais parciais de segunda ordem, a fim de ser resolvida por elementos lineares.

Palavras chaves: Cahn-Hilliard; Campo de fase; Adaptatividade temporal.



Abstract: : The Cahn-Hilliard equation is used in phase field modelling of spinodal decomposition, multiphase fluid flow, tumour growth and many others. In the case of the spinodal decomposition, the phase field modelling reveals different time scale in its evolution. Therefore, efficient numerical solutions involve adequate time adaptivity schemes. The present study present innovative strategies for the time adaptivity of the Cahn-Hilliard equation to lower the computational effort without compromising the solution accuracy and its quantities of interest. The time adaptivity schemes are based on the control theory, where the weighted local truncation error is controlled. The local truncation error is extrapolated by an integration method of lower order than the method used in time stepping, which is approximated by a second order backward difference formula. We consider a first order method to approximate the local truncation error. Then, time step controllers are used to calculate the next time step in function of the local truncation error of the previous time steps. Three controllers are used and compared: A complete PID controller, a basic controller containing only the integrating part of the PID and a predictive controller. Quantities of interest such as mass conservation and energy decay are evaluated.. The simulations are spatially approximated by the finite element method and the Cahn-Hilliard equation, being a fourth-order partial differential equation, is converted into a system of non-linear second-order equations to be solved by linear elements.

Keywords: Cahn-Hilliard; phase-field; time adaptivity.

1 INTRODUÇÃO

A equação de Cahn-Hilliard foi proposta para modelar a separação de fases que ocorre em ligas metálicas binárias em Cahn e Hilliard (1958). Sua representação matemática pode ser vista como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M(\phi) \nabla \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \phi} - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi \right) \right) \quad (1)$$

onde $\phi(x, t)$ é a concentração de um componente da mistura ou parâmetro de ordem de um campo de fase, $M(\phi)$ é a mobilidade da mistura em função da concentração, $\Psi(\phi)$ é a função densidade de energia livre considerando-se uma mistura homogênea e ε é um parâmetro relativo à interface entre os componentes.

Desde a sua descoberta até os dias atuais, a equação de Cahn-Hilliard foi amplamente utilizada em diversas aplicações físicas. Em Kim et al. (2016), os autores mostram o uso da equação para a formação de cadeias poliméricas, reconstrução digital de imagens, escoamento de fluidos binários, elasticidade envolvendo microestrutura não-homogênea, modelagem de crescimento tumoral e otimização topológica. Suas propriedades de decaimento energético e conservação de massa, quando submetida às condições de contorno periódicas ou de fluxo nulo, são fundamentais para a versatilidade da equação. Matematicamente, a equação de Cahn-Hilliard é uma equação diferencial parcial, parabólica, não-linear de quarta ordem. Sua aplicação em situações de separação de fases permite a captura de uma dinâmica de segregação inicial rápida, levando à formação de uma interface difusa entre os dois componentes da mistura, além de uma dinâmica lenta de difusão após a definição das fases. Essas duas etapas são caracterizadas por diferenças em escalas de tempo e espaço, tornando a equação de Cahn-Hilliard difícil de ser aproximada numericamente de forma precisa e computacionalmente eficiente.

O presente trabalho apresenta soluções relativas à adaptatividade do passo de tempo de uma simulação de uma mistura binária submetida à separação de fases. O passo de tempo é calculado a partir do erro estimado *a posteriori* utilizando controladores derivados da teoria do controle, de forma que, quando a simulação se encontra em um processo envolvendo dinâmicas rápidas, o passo de tempo é reduzido para capturar os fenômenos físicos de forma precisa, enquanto em situações onde a dinâmica do sistema é lenta, o passo de tempo é aumentado para otimizar a performance das simulações, atingindo estágios mais longos de simulação com menor esforço computacional. Nas simulações presentes neste trabalho, o método dos elementos finitos é utilizado e a implementação é feita através da biblioteca FEniCS.

2 EQUAÇÕES GOVERNANTES

Nessa seção mostra-se a derivação física da equação de Cahn-Hilliard e do seu funcional de energia associado. A decomposição spinodal, definida em Cahn (1961), é um processo de separação de fases em que uma mistura, inicialmente homogênea, apresenta instabilidades termodinâmicas que promovem a separação de seus

componentes em regiões distintas com concentrações diversas, provocadas por um resfriamento súbito. Em casos envolvendo duas fases, o funcional de energia livre de Ginzburg-Landau descreve a energia total do sistema. A sua configuração usual consiste em dois termos e sua representação é mostrada na Eq. (2).

$$F(\phi) = \int_{\Omega} (\Psi(\phi) + \varepsilon^2 |\nabla \phi|^2) d\Omega \quad (2)$$

Os dois termos presentes no funcional são relativos à composição de cada partícula da mistura e sua vizinhança, respectivamente. A função densidade de energia livre homogênea $\Psi(\phi)$ corresponde à energia que cada partícula teria se estivesse cercada por material da mesma composição, enquanto o termo relativo ao gradiente espacial da concentração $\phi(x,t)$ computa a energia da região que circunda a partícula em questão.

2.1 Função densidade de energia livre

A função densidade de energia livre homogênea é derivada da teoria da mistura e corresponde à quantidade de energia necessária para a separação das fases. O diagrama de fases é função da concentração $\phi(x,t)$ e da temperatura absoluta T e pode ser visualizado na Figura 1. No entanto, para temperaturas da mistura abaixo de uma dada temperatura crítica T_C , as duas fases de uma mistura binária podem coexistir.

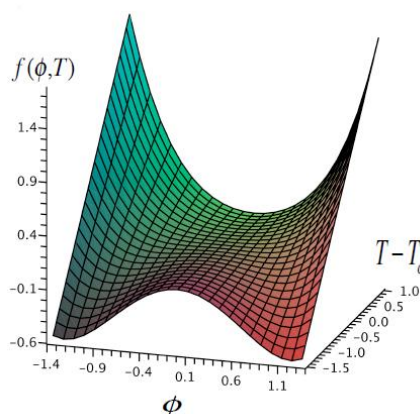


Figura 1. Função densidade de energia livre para uma mistura binária simples. Duas fases coexistem quando $T < T_C$.

Fonte: (Provatas and Elder, 2010)

Considerando uma situação isotérmica com temperatura abaixo da crítica T_C , a função densidade de energia livre homogênea passa a ser apenas função da concentração $\phi(x,t)$ e se comporta como uma função de poço-duplo. A derivação da função densidade de energia livre homogênea para essas condições, a partir das teorias da termodinâmica molecular e da mecânica estatística, leva a uma função logarítmica em função do parâmetro de ordem $\phi(x,t)$. No entanto, é comum na literatura ver a substituição da função densidade de energia livre logarítmica por uma função polinomial de quarta ordem, com o intuito de facilitar a solução numérica. A Figura 2 mostra que as duas funções, nesse intervalo, são qualitativamente equivalentes.

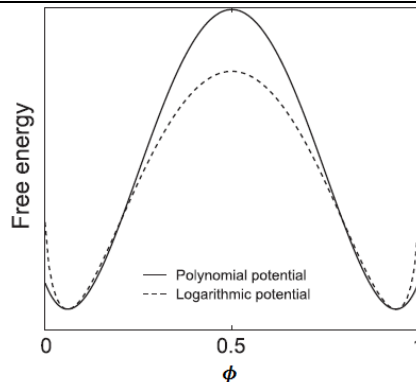


Figura 2. Comparação entre funções de poço-duplo polinomial e logarítmica.

Fonte: (Lee et al., 2014)

Uma forma polinomial muito usada na literatura é mostrada na Eq. (4), sendo:

$$\Psi(\phi) = \frac{\alpha}{4} \left(\phi - \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \right)^2 \left(\phi + \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \right)^2 \quad (4)$$

onde α e β são constantes positivas e as fases estáveis são definidas em $\phi_{\pm} = \pm \sqrt{\beta/\alpha}$. No presente trabalho, utilizaremos a forma definida na Eq. (4), com os parâmetros $\alpha = \beta = 100$, definindo as fases em $\phi = \pm 1$ e as interfaces em valores intermediários. O perfil de equilíbrio unidimensional (sob um eixo z ortogonal à interface) da equação de Cahn-Hilliard para a função densidade de energia livre homogênea utilizada nesse estudo é dado pela Eq. (5), em que

$$\phi_z = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \tanh\left(\frac{z}{\sqrt{2}\zeta}\right) \quad (5)$$

onde $\zeta = \sqrt{\epsilon^2/\beta}$ é uma constante relativa à espessura da interface, de forma que, quanto maior for seu valor, mais difusa será a interface. Com isso, é possível definir o perfil de equilíbrio a partir dos parâmetros α , β e ϵ .

2.2 A equação de Cahn-Hilliard

A equação de Cahn-Hilliard, vista na Eq. (1), pode ser deduzida através de argumentos físicos e matemáticos. Em Lee et al (2014), os autores apresentam a sua dedução utilizando as duas possibilidades. A equação de Cahn-Hilliard, com condições de contorno de fluxo nulo, apresenta as propriedades de conservação de massa e decaimento energético. Essas duas propriedades são provadas em Elliott (1989) e devem ser verificadas em simulações numéricas. Matematicamente as duas expressões são dadas pelas Eq. (6) e (7):

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi \, d\Omega = 0 \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (\Psi(\phi) + \epsilon^2 |\nabla \phi|^2) d\Omega \leq 0 \quad (7)$$

Quanto à mobilidade $M(\phi)$, o uso de valores de mobilidade constante pode levar a resultados imprecisos em uma série de fenômenos físicos, apesar de serem termodinamicamente corretos. Uma solução para este problema é o uso de mobilidades degeneradas, que limitam a existência de mobilidade apenas nas interfaces, alterando na dinâmica do sistema para problemas que não podem revelar dinâmicas rápidas, como, o amadurecimento de Ostwald. Em Abels et al. (2013), por exemplo, os autores destacam a necessidade de se utilizar mobilidades degeneradas em simulações de escoamentos de fluidos binários para evitar esse fenômeno.

3 METODOLOGIA NUMÉRICA

Na presente seção, detalhes sobre os métodos numéricos de discretização espacial, temporal e adaptatividade do passo de tempo para as simulações são mostrados. Eyre (1998) destaca a dificuldade de se resolver numericamente a equação de Cahn-Hilliard, pelo fato de ser uma equação diferencial rígida, envolvendo múltiplas escalas temporais. O autor também menciona a dificuldade em discretizar espacialmente as interfaces, que demandam malhas mais refinadas nessa região para a resolução com maior acurácia.

3.1 Discretização espacial

Sendo a equação de Cahn-Hilliard uma equação de quarta ordem, uma formulação de elementos finitos com alta ordem de continuidade é necessária. Diversos autores desenvolveram estratégias distintas para tanto, como a formulação variacional baseada em NURBS, visto em Gomez et al. (2008), ou o uso de elementos de continuidade C^1 mostrado em Stogner et al. (2008). No entanto, a estratégia de separação de variáveis (ou *splitting*), proposto por Elliott et al. (1989), permite a separação da equação de Cahn-Hilliard em duas equações acopladas, gerando um sistema não-linear que resolve dois campos: a concentração ϕ e o potencial químico μ . Com a separação de variáveis, as duas incógnitas passam a admitir elementos de continuidade C^0 , sob o custo de se resolver um grau de liberdade a mais em cada nó.

No presente trabalho, consideraremos simulações de decomposição espinodal, onde uma mistura entre dois componentes A e B encontra-se instável em seu estágio inicial. A mistura ocupa um domínio $\Omega \in \mathbb{R}^{n_{sd}}$ com fronteira Γ suficientemente contínua, equipados com a normal \mathbf{n} .

O sistema após a técnica de separação de variáveis, em sua forma forte, pode ser visto a seguir. As Eq. (8) e (9) são as equações acopladas para ϕ e μ , as Eq. (10) e (11) são as condições de contorno de fluxo nulo e a Eq. (12) corresponde à condição inicial do sistema. O problema em questão, então, pode ser definido como: encontre $\phi: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ e $\mu: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tais que:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (M(\phi) \nabla \mu) \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (8)$$

$$\mu = \frac{\partial \psi}{\partial \phi} - \epsilon^2 \nabla^2 \phi \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (9)$$



XIII SIMMEC

Simpósio de Mecânica Computacional

29 de Outubro a 1º de Novembro de 2018
UFES - Campus Goiabeiras - Vitória, ES



$$\nabla \mu \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma \times [0, T], \quad (10)$$

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma \times [0, T], \quad (11)$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega. \quad (12)$$

A forma fraca das equações é obtida a partir da ponderação de sua forma forte por funções teste $q, w \in H^1(\Omega)$, onde $H^1(\Omega)$ é o espaço de Sobolev das funções quadrado integráveis com primeira derivada fraca quadrado integrável, obtendo-se as Eq. (13) e (14), isto é,

$$\left(w, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) + (\nabla w, M(\phi) \nabla \mu) = 0 \quad (13)$$

$$\left(q, \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right) - (q, \mu) + (\nabla q, \epsilon^2 \nabla \phi) = 0 \quad (14)$$

onde (\cdot, \cdot) é o produto interno em $L^2(\Omega)$.

O método de Galerkin aproxima os campos incógnita através de funções em um espaço de dimensão finita. Esses espaços são definidos nas Eq. (15) e (16).

$$S^h = \{ \phi^h, \mu^h \mid \phi^h, \mu^h \in H^1(\Omega); \phi^h|_{\Omega_e}, \mu^h|_{\Omega_e} \in P^1(\Omega^e), \forall e \} \quad (15)$$

$$W^h = \{ w^h, q^h \mid w^h, q^h \in H^1(\Omega); w^h|_{\Omega_e}, q^h|_{\Omega_e} \in P^1(\Omega^e), \forall e \} \quad (16)$$

onde $P^1(\Omega^e)$ é o espaço das funções lineares de interpolação.

Após tais procedimentos e a discretização espacial padrão em elementos e nós, a formulação em elementos finitos para a equação de Cahn-Hilliard é: encontre $\phi^h, \mu^h \in S^h \times [0, T]$, $\forall w^h, q^h \in W^h$ valem:

$$\left(w^h, \frac{\partial \phi^h}{\partial t} \right) + (\nabla w^h, M(\phi) \nabla \mu^h) = 0 \quad (17)$$

$$\left(q^h, \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \right) - (q^h, \mu^h) + (\nabla q^h, \epsilon^2 \nabla \phi^h) = 0 \quad (18)$$

onde $q^h = \sum_{k=1}^{nós} q_k N_k$, $w^h = \sum_{k=1}^{nós} w_k N_k$, $\phi^h = \sum_{k=1}^{nós} \phi_k N_k$, e $\mu^h = \sum_{k=1}^{nós} \mu_k N_k$, sendo N_k as funções de interpolação e $nós$ o número de nós na discretização.

3.2 Integração temporal

A equação de Cahn-Hilliard envolve diversas escalas temporais distintas. Em simulações de decomposição espinodal, existem estágios onde a dinâmica do sistema é rápida, exigindo passos de tempo pequenos, e estágios em que o sistema se comporta de forma lenta, tornando a simulação computacionalmente custosa. As várias escalas temporais da equação de Cahn-Hilliard fazem com que a escolha do método numérico de integração temporal seja uma tarefa complexa. Além disso, a propriedade de decaimento energético visto na Eq. (7) deve ser atendida pelo método de integração temporal independente do passo de tempo utilizado. Os métodos que respeitam a monotonicidade deste decaimento são ditos energeticamente estáveis.

Inicialmente, de acordo com Eyre (1998), o uso de métodos explícitos deve ser descartado, uma vez que os passos de tempo têm seu tamanho restrito pelas condições de

estabilidade provenientes da rigidez da equação, sendo da ordem de Δx^4 . Métodos implícitos possuem limites maiores para a estabilidade ou, até mesmo, estabilidade incondicional. No entanto, métodos implícitos mantêm o caráter não-linear da equação de Cahn-Hilliard, exigindo a solução de um sistema de equações não-lineares a cada passo de tempo.

É possível também utilizar métodos ditos semi-implícitos, onde parte da equação é tratada de forma explícita enquanto outra é tratada de forma implícita. Em Eyre (1998) e em Elliott e Stuart (1993), os autores propõem uma separação da função densidade de energia livre vista na Eq. (2) em uma parte côncava e outra convexa. A parte côncava é tratada explicitamente enquanto a parte convexa é resolvida de forma implícita. No entanto, o método proposto é de primeira ordem. A existência de métodos semi-implícitos de segunda ordem depende da forma da função densidade de energia livre $\Psi(\phi)$, não existindo um esquema geral para qualquer forma de $\Psi(\phi)$, segundo Shen (2011).

No presente trabalho, utilizaremos um método implícito proposto por Vignal et al. (2017), uma vez que o método apresenta estabilidade incondicional e a adaptatividade temporal proposta causa variações do passo de tempo em diversas ordens de magnitude. Além de incondicionalmente estável, o método é de segunda ordem e obedece o decaimento energético visto na Eq. (7) independente do passo de tempo ou da discretização espacial, sendo energeticamente estável. A última propriedade é provada a partir da expansão dos termos não-lineares em série de Taylor. Com isso, em sua forma totalmente discreta, a equação de Cahn-Hilliard se torna:

$$\left(w^h, \frac{[\phi_{n+1}^h]}{\Delta t_{n+1}} \right) + (\nabla w^h, M(\phi_{n+1}^h) \nabla \mu_{n+1}^h) = 0 \quad (19)$$

$$\left(q^h, \frac{\partial \tilde{\Psi}_{n+1}}{\partial \phi} \right) - (q^h, \mu_{n+1}^h) + (\nabla q^h, \epsilon^2 \nabla \{\phi_{n+1}^h\}) = 0 \quad (20)$$

onde $[\phi_{n+1}^h] = \phi_{n+1}^h - \phi_n^h$, $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$, $\{\phi_{n+1}^h\} = (\phi_{n+1}^h + \phi_n^h)/2$ e a função $\partial \tilde{\Psi}_{n+1} / \partial \phi$ corresponde a uma aproximação de $\partial \Psi / \partial \phi$ para garantir a estabilidade energética do problema. A aproximação pode ser vista na Eq. (21),

$$\frac{\partial \tilde{\Psi}_{n+1}}{\partial \phi} = \frac{\partial \Psi_{n+1}}{\partial \phi} - \frac{\partial^2 \Psi_{n+1}}{\partial \phi^2} \frac{[\phi_{n+1}^h]}{2} + \frac{\partial^3 \Psi_{n+1}}{\partial \phi^3} \frac{[\phi_{n+1}^h]^2}{6} \quad (21)$$

3.3 Adaptatividade temporal

A decomposição spinodal envolve diversas escalas temporais distintas. Em toda a sua extensão temporal, existem estágios rígidos por dinâmicas rápidas, exigindo passos de tempo menores, e estágios que possuem mudanças morfológicas lentas, permitindo passos de tempo maiores. Modelos contendo passos de tempo fixo demandam o uso de um passo de tempo pequeno para capturar todas as características físicas dos estágios de dinâmica rápida. Entretanto, o mesmo passo de tempo é utilizado em estágios em que a dinâmica é lenta, tornando o custo computacional da simulação alto. Existem estratégias de adaptatividade de passo de tempo para a captura da dinâmica física da simulação, permitindo a redução do passo de tempo em momentos necessários e o aumento quando possível. Em Zhang e Qiao (2012) e em Guillén-Gonzalez e Tierra (2014), os autores

criaram métodos que alteram o passo de tempo baseado na taxa de variação da energia livre do sistema. Nota-se, porém, que os métodos propostos apresentam baixa versatilidade, funcionando para tipos limitados de problema e as melhoras apresentadas foram pouco significativas. Uma estratégia baseada na teoria de controle para a adaptatividade de passo de tempo para equações diferenciais ordinárias é vista em Söderlind (2001). É possível dispor dessa estratégia para a adaptatividade temporal de modelagens numéricas de equações diferenciais parciais, como foi feito inicialmente em Valli et al. (2005). Relacionado à equação de Cahn-Hilliard, pode-se considerar que os métodos presentes em Cueto-Felgueroso e Peraire (2008), Gómez et al. (2008) e Wodo e Ganapathysubramanian (2011), ao serem trazidos para o contexto da teoria de controle, são traduzidos em controladores básicos de passo de tempo.

No presente trabalho, nós utilizaremos três controladores de passo de tempo. Um controlador PID completo, um controlador preditivo, o PC11, e um controlador básico. A grandeza a ser controlada é o erro proveniente da integração numérica, no intuito de aumentar o passo de tempo quando o erro for suficientemente pequeno e reduzi-lo quando o erro for elevado. É importante reforçar que, caso o valor de erro calculado for superior a um determinado valor de segurança, o passo de tempo é rejeitado e um novo passo de tempo é calculado.

3.3.1 Estimador de erro

O estimador de erro temporal utilizado é encontrado em Vignal et al. (2017). O método consiste em estimar o erro local de truncamento *a posteriori* de um método de ordem inferior ao método utilizado na integração temporal, após armazenar as soluções nos tempos t_n e t_{n-1} . Essa estratégia evita o cálculo de múltiplas soluções para o mesmo passo de tempo, como é visto em Gómez et al. (2008). O método utilizado é de segunda ordem, fazendo com que a estimativa de erro seja feita usando-se um método de primeira ordem. No presente trabalho, o método Euler para trás é utilizado para este objetivo. Por expansão em série de Taylor, o erro de truncamento do método Euler para trás é visto na Eq. (22).

$$\tau^{EPT} = -\frac{\Delta t_{n+1}^2}{2} \phi''(t_{n+1}) + O(\Delta t^3) \quad (22)$$

Aproximando a segunda derivada temporal de ϕ na equação por uma diferenças finitas de segunda ordem com passo de tempo variado e desprezando o termo de ordem superior,

$$E_{n+1} = -\frac{1}{\eta} \phi_{n+1}^h + \frac{1}{\eta-1} \phi_n^h - \frac{1}{\eta(\eta-1)} \phi_{n-1}^h \quad (23)$$

onde ϕ_{n+1}^h , ϕ_n^h e ϕ_{n-1}^h são as soluções dos tempos t_{n+1} , t_n e t_{n-1} respectivamente, $\eta = (\Delta t_{n+1} + \Delta t_n) / \Delta t_{n+1}$, sendo $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$ e $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$. Com isso, o erro de truncamento ponderado local é calculado como,

$$e_{n+1} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{E_i}{TOL_i^{abs} + TOL_i^{rel} (|\phi_i^h| + |\phi_{i+E_i}^h|)} \right)^2} \quad (24)$$

onde $i = 1, 2, \dots, n$ ós corresponde ao índice nodal e $TOL_i^{abs} = TOL_i^{rel} = 10^{-4}$ são as tolerâncias ajustáveis absoluta e relativa, respectivamente.

Por definição, quando e_{n+1} é inferior a 1, os erros obtidos estão dentro dos valores prescritos pelas tolerâncias. Caso contrário, os erros são inaceitáveis, de forma que a solução é rejeitada e uma nova solução é calculada utilizando um passo de tempo menor.

3.3.2 Controladores de passo de tempo

Para cada passo de tempo da simulação, o erro de truncamento local é calculado conforme a eq. (24). Os passos de tempo calculados para as soluções no passo seguinte são obtidos através de controladores derivados da teoria de controle. No presente trabalho, três controladores são utilizados, de forma que todos partem da mesma expressão vista na Eq. (25).

$$\Delta t_{n+1} = \rho \left(\frac{e_n}{e_{n+1}} \right)^{k_P} \left(\frac{1}{e_{n+1}} \right)^{k_I} \left(\frac{e_n^2}{e_{n+1}e_{n-1}} \right)^{k_D} \Delta t_n \quad (25)$$

Os três controladores apresentam naturezas distintas. Em Söderlind (2001), o autor descreve e compara o comportamento dos três controladores em equações diferenciais ordinárias. O controlador PID corresponde à Eq. (25) em sua forma completa, em que os coeficientes k_P , k_I e k_D são diferentes entre si e maiores que zero. Isso faz com que o cálculo do próximo passo de tempo também carregue o erro de truncamento local obtido nos dois passos de tempo anteriores, aumentando sua robustez e tornando o método confiável para situações em que a natureza do problema é desconhecida. Os coeficientes $k_P = 0.075$, $k_I = 0.175$ e $k_D = 0.010$ são retirados de Valli et al. (2005), onde os autores realizaram uma rigorosa calibração de parâmetros para a utilização em outra equação com a mesma propriedade de conservação de massa, tornando-os ideais para este trabalho. Em Söderlind (2001), o autor define que, na situação em que $k_P = k_I$ e que $k_D = 0$, o controlador é dito preditivo, apresentando comportamento diferente dos demais e sendo ideal para equações rígidas, como é o caso da equação de Cahn-Hilliard. Os coeficientes $k_P = k_I = 0.333$ é retirado de Ahmed e John (2015), pelo mesmo motivo descrito para os parâmetros do PID, definindo o controlador PC11. Por fim, o controlador básico, em que apenas o termo integral atua no controle, corresponde à situação em que a Eq. (25) apresenta $k_P = k_D = 0$, fazendo com que o controlador leve em conta apenas o erro de truncamento local obtido no passo de tempo presente. Este controlador é o mais simples dentre os três apresentados. O parâmetro $k_I = 0.500$ para esse controlador é obtido nos trabalhos de Vignal et al. (2017), Gómez et al. (2008) e Wodo e Ganapathysubramanian (2011). O coeficiente $\rho = 0.9$ é um coeficiente de segurança utilizado para suavizar o crescimento do passo de tempo.

4 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Para se estudar o desempenho dos controladores considerados, simulações numéricas são feitas. O domínio das simulações é um quadrado unitário, discretizado em uma malha de 192^2 elementos triangulares lineares. As simulações consistem em uma separação de

fases de uma mistura com condição inicial $\phi_0 = \bar{\phi} + r$, onde $\bar{\phi} = 0.3$ é uma concentração média e $r = U(-0.01, 0.01)$ é um número aleatório com função densidade de probabilidade uniforme. Dada a função densidade de energia livre mostrada na Eq. (4), com os parâmetros $\alpha = \beta = 100$, todos os valores possíveis de ϕ_0 se encontram na região espinodal do diagrama de fase, ou seja, a mistura se encontra instável e apresenta energia suficiente para se decompor espontaneamente em duas fases estáveis, descritas por $\phi_{\pm} = \pm 1$. O parâmetro $\epsilon^2 = 0.01$ também é escolhido, de forma que a espessura da interface entre as duas fases agora se torna definida. Considera-se uma mobilidade degenerada, ou seja, o processo de difusão só acontece nas interfaces. A mobilidade utilizada neste trabalho é:

$$M(\phi) = \begin{cases} (1 - \phi^2) & \text{se } -1 < \phi < 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (26)$$

A equação de Cahn-Hilliard é numericamente resolvida pelo *FEniCS*, uma biblioteca em Python/C++ contendo diversas funções relativas à resolução de equações diferenciais parciais pelo método dos elementos finitos, registrada em Alnæs et al. (2015). O sistema não-linear descrito pelas Eq. (19) e (20) é resolvido pelo método de Newton-GMRES. Os resultados são pós-processados pelo *software* ParaView e por códigos em MATLAB.

Quatro simulações são feitas. Inicialmente, uma simulação é feita contendo um passo de tempo fixo $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$, de forma que 5000 passos de tempo são calculados. A escolha do passo de tempo fixo é definida na literatura como sendo o máximo visto para métodos implícitos sem perda de precisão, de forma que todas as dinâmicas, mesmo as mais rápidas, podem ser capturadas com esse valor. As três simulações restantes apresentam adaptatividade de passo de tempo onde cada simulação dispõe de um método proposto. Para a adaptatividade temporal, o passo de tempo inicial é de $\Delta t_0 = 1 \times 10^{-9}$.

Inicialmente, é necessário validar a adaptatividade temporal verificando se as físicas entre todas as quatro simulações são consistentes entre si, ou seja, acontecem ao mesmo tempo. É comum verificar, devido à rigidez da equação de Cahn-Hilliard, múltiplas soluções para a equação caso os passos de tempo sejam muito grandes. Como o método de integração temporal é incondicionalmente estável, as múltiplas soluções acontecem por uma precisão ineficiente. As Figuras 3 mostram as quatro simulações para o mesmo passo de tempo. Nota-se que as soluções apresentam grande semelhança. A Figura 4 mostra o comportamento do passo de tempo ao longo das simulações. É importante mostrar que, ao identificar uma dinâmica de amadurecimento de Ostwald, os controladores imediatamente reduzem os passos de tempo para capturar a rápida dinâmica das bolhas em seu estágio final de redução. Tais reduções dos passos de tempo são da ordem de 10^{-6} s. Ou seja, a adaptatividade temporal também valida o passo de tempo fixo, de forma que o passo de tempo utilizado na simulação de passo de tempo fixo é capaz de capturar as rápidas dinâmicas da simulação.

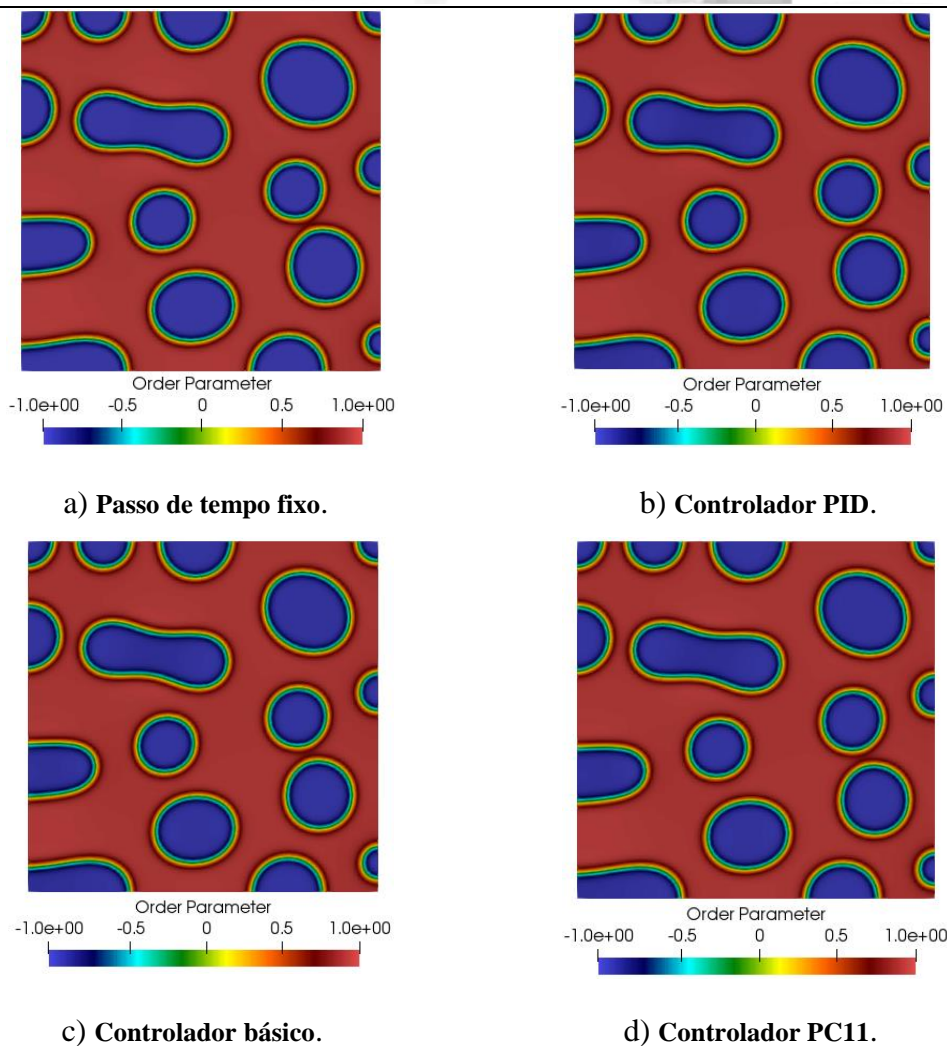


Figura 3. Soluções para as quatro simulações em $t = 0.007$ s. Nota-se que todas as simulações são semelhantes.

A sobreposição das três curvas relativas aos métodos adaptativos no gráfico da Figura 4 reforça a observação retirada da Figura 3: as físicas estão sendo igualmente representadas no mesmo tempo de simulação em todos os três métodos. A Figura 4 também mostra o quanto o passo de tempo pode ser aumentado sem alterar a precisão da solução. Nos estágios finais da simulação, a relação entre o passo de tempo fixo e o adaptativo pode chegar a 10^4 , de forma que um passo de tempo nas simulações adaptativas seriam equivalentes a mil passos de tempo na simulação com passo de tempo fixo. Tal aumento de performance possibilita, por exemplo, o alcance do equilíbrio entre as fases, definindo a solução do regime permanente da equação de Cahn-Hilliard. O equilíbrio foi alcançado no tempo de 17,25 s. Para alcançar esse tempo, a simulação que utiliza passos de tempo fixos necessitaria de 8.625×10^6 passos de tempo, refletindo em

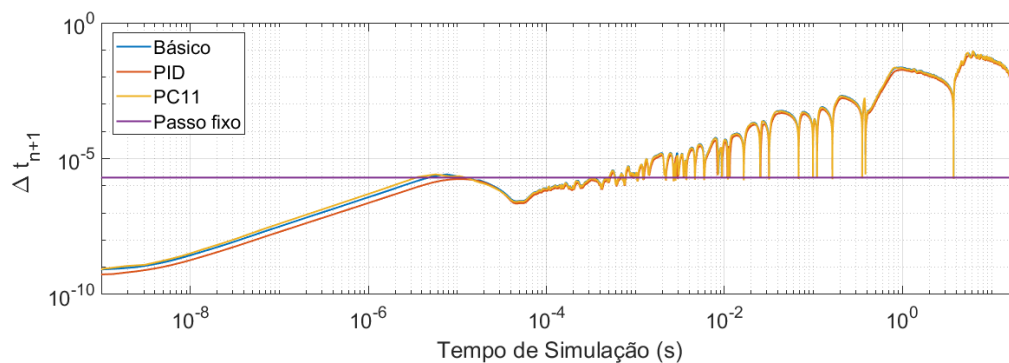


Figura 4. Evolução do passo de tempo de cada simulação em relação ao avanço da simulação. Os controladores reduzem os passos de tempo para uma ordem de 10^{-6} quando dinâmicas rápidas são verificadas.

um custo computacional alto quando comparado com a performance obtida pelas simulações de passos de tempo adaptativos, da ordem de 5×10^3 passos de tempo. Quanto à comparação entre os controladores, a Tabela 1 mostra o desempenho de cada controlador em comparação à simulação de tempo fixo. É possível verificar pela tabela que, com aproximadamente o mesmo número de sistemas resolvidos, as simulações com adaptatividade temporal apresentaram tempo final de simulação muito maior que a simulação de passo de tempo fixo, atingindo 20 s de física simulada. Como mencionado anteriormente, o equilíbrio foi atingido em 17,25 s, de forma que todas as simulações envolvendo controle do passo de tempo atingiram esse estágio. Dentre essas simulações, é possível avaliar a diferença de comportamento entre elas. O controlador básico, por ser o mais simples dentre os controladores e apenas levar em conta o erro relativo ao passo presente, leva a maiores erros de truncamento local, e, conseqüentemente, apresenta maior número de passos de tempo rejeitados. O controlador PID chegou ao fim da simulação com maior número de passos de tempo. Isso se deve ao fato que, por levar em conta os erros dos passos presente, passado e anterior ao passado, sua estrutura permite um controle mais rigoroso. No entanto, esse maior controle permite que o PID apresente menos passos rejeitados, quando comparado a um controlador de mesma estrutura, como o controlador básico.

Tabela 1. Comparação do desempenho entre as simulações.

Simulação	Passos de tempo	Tempo de simulação	Passos rejeitados	Sistemas resolvidos
Passo de tempo fixo	5000	0.01	-	5000
Controlador básico	4801	20.00	390	5191
Controlador PID	5211	20.00	208	5419
Controlador PC11	4990	20.00	83	5073

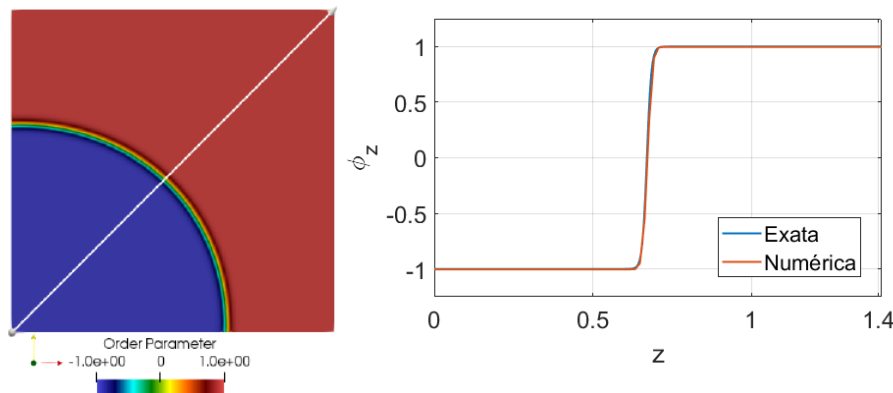


Figura 5. Equilíbrio das fases e seu perfil projetado sob um eixo z . O eixo é representado pela seta branca na solução. A solução é projetada e comparada à solução exata relativa à Eq. (5).

Com relação ao PC11, por ser um controlador preditivo, o número de passos rejeitados foi muito menor que os demais, uma vez que esse controlador apresenta um controle melhor para equações rígidas (Söderlind, 2001). Analisando o número de sistemas resolvidos, o PC11 apresentou maior performance com relação aos demais. Por fim, a Figura 5 mostra o perfil de equilíbrio e compara a solução numérica com a solução exata, mostrada na Eq. (5), validando a discretização espacial do problema.

5 CONCLUSÕES

O uso de adaptatividade temporal para a equação de Cahn-Hilliard em simulações de separação de fases se revela importante, já que o tempo de física simulada utilizando passo de tempo fixo foi muito inferior àquele visto na adaptatividade temporal. O uso de passos de tempo maiores em simulações de passo de tempo fixo não é indicado, posto que a equação de Cahn-Hilliard envolve diversas dinâmicas distintas e o uso de um passo de tempo reduzido é necessário para certos estágios da decomposição espinodal. Dentre os controladores comparados, o PC11 apresentou melhores resultados, uma vez que atingiu o maior tempo de simulações com menos sistemas não-lineares resolvidos. É importante ressaltar que uma nova calibração de parâmetros pode ser feita, no intuito de otimizar ainda mais o desempenho das simulações.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à CAPES, CNPq e FAPERJ pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- Abels, H., Depner, D. & Garcke, H., 2013. On an incompressible Navier-Stokes/Cahn-Hilliard system with degenerate mobility, *Annales de l'Institut Henri Poincaré (C) Analyse Non Lineaire*. vol. 30, n. 6, pp. 1175-1190.
- Alnæs, M. S. *et al.*, 2015. The FEniCS Project Version 1.5, *Archive of Numerical Software*, vol. 3, n. 100, pp. 9–23.



- Cahn, J. W., 1961. On spinodal decomposition, *Acta Metallurgica*, vol. 9, n. 9, pp. 795–801.
- Cueto-Felgueroso, L. & Peraire, J., 2008. A time-adaptive finite volume method for the Cahn-Hilliard and Kuramoto-Sivashinsky equations, *Journal of Computational Physics*, vol. 227, n. 24, pp. 9985-10017.
- Elliott, C. M., 1989. The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation, *Mathematical Models for Phase Change Problems*, vol. 88, pp. 35-73.
- Elliott, C. M., French, D. A. & Milner, F. A., 1989. A second order splitting method for the Cahn-Hilliard equation, *Numerische Mathematik*. vol. 54, n. 5, pp. 575-590.
- Eyre, D. J., 1998. Unconditionally gradient stable time marching the Cahn-Hilliard equation, *MRS Proceedings*, vol. 529, pp. 39-46.
- Gómez, H. *et al.*, 2008. Isogeometric analysis of the Cahn-Hilliard phase-field model, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 197, n. 49-50, pp. 4333-4352.
- Kim, J. *et al.*, 2016. Basic principles and practical applications of the Cahn–Hilliard equation, *Mathematical Problems in Engineering*. Artigo ID 9532608, 11 páginas.
- Lee, D. *et al.* 2014. Physical, mathematical, and numerical derivations of the Cahn-Hilliard equation, *Computational Materials Science*, vol. 81, pp. 216-225.
- Söderlind, G., 2002. Automatic control and adaptive time-stepping, *Numerical Algorithms*, vol. 31, n. 1-4, pp. 281-310.
- Shen, J., 2011. Modeling and numerical approximation of two-phase incompressible flows by a phase-field approach, *Multiscale Modeling and Analysis for Materials Simulation*, vol. 22, pp. 147-195.
- Stogner, R. H., Carey, G. F. & Murray, B. T., 2008. Approximation of Cahn-Hilliard diffuse interface models using parallel adaptive mesh refinement and coarsening with C1 elements, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 76, n. 5, pp. 636-661.
- Valli, A. M. P., Carey, G. F. & Coutinho, A. L. G. A. (2005). Control strategies for timestep selection in finite element simulation of incompressible flows and coupled reaction-convection-diffusion processes, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 47, n. 3, pp. 201-231.
- Vignal, P. *et al.*, 2017. An energy-stable time-integrator for phase-field models, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 316, pp. 1179-1214.
- Wodo, O. & Ganapathysubramanian, B., 2011. Computationally efficient solution to the Cahn-Hilliard equation: Adaptive implicit time schemes, mesh sensitivity analysis and the 3D isoperimetric problem, *Journal of Computational Physics*, vol. 230, n. 15, pp. 6037-6060.
- Zhang, Z. & Qiao, Z., 2012. An adaptive time-stepping strategy for the Cahn-Hilliard equation, *Communications in Computational Physics*. vol. 11, n. 4, pp. 1261-1278.