Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería. Vol. 14,2, 145–166(1998)

INTEGRAÇÃO REDUZIDA PARA PROBLEMAS ADVECTIVOS–DIFUSIVOS ESCALARES DISCRETIZADOS PELA FORMULAÇÃO SUPG COM OPERADOR DE CAPTURA DE DESCONTINUIDADES

C.M. DIAS
e
A.L.G.A. COUTINHO

Programa de Engenharia Civil - COPPE/UFRJ
Cx. Postal 68506, Rio de Janeiro, RJ 21945-970, Brasil
Tel.: + 55-21-280 9993 , Fax: + 55-21-280 9545
E-mail: claudia@coc.ufrj.br

SUMÁRIO

Este trabalho apresenta uma técnica de controle das oscilações espúrias que podem surgir quando as integrais provenientes da discretização de problemas escalares advectivos-difusivos em regime permanente pela formulação SUPG com operador de captura de descontinuidades, são avaliadas utilizando-se um ponto de quadratura de Gauss. Os termos de correção são obtidos à partir do princípio variacional de Hu-Washizu. Diversos exemplos numéricos são apresentados de forma a validar a técnica proposta.

REDUCED INTEGRATION FOR STEADY ADVECTIVE-DIFFUSIVE PROBLEMS DISCRETIZED BY THE SUPG FORMULATION WITH DISCONTINUITY-CAPTURING

SUMMARY

This work presents a technique to control the spurious oscillations that may appear when the integrals arising from the discretization of scalar steady-state advective-diffusive problems by the SUPG formulation with discontinuity-capturing are evaluated using one-point Gaussian quadrature. The correction terms are derived from a Hu-Washizu variational formulation. Several numerical examples are shown, validating the proposed technique.

Recibido: Septiembre 1996

 ISSN 0213–1315

INTRODUÇÃO

Na solução de problemas advectivos-difusivos pelo Método dos Elementos Finitos surgem integrais que podem ser avaliadas utilizando-se uma regra de integração numérica, geralmente a quadratura de Gauss. O custo computacional da avaliação destas integrais é proporcional ao número de pontos de integração utilizados. Assim, a utilização da integração com um ponto de quadratura vem reduzir significativamente o custo destas avaliações. Atualmente muitos programas utilizam esta Integração Reduzida com sucesso em problemas de mecânica dos sólidos, cascas e difusão, reduzindo o número de avaliações do operador semi-discreto e das equações constitutivas. No entanto, tal procedimento pode provocar o aparecimento de oscilações espúrias conhecidas como modos *hourglass*, que podem comprometer os resultados. Desta forma, torna-se necessária a utilização de uma técnica de controle destas oscilações. Existem diversas técnicas capazes de permitir a utilização da Integração Reduzida com um ponto de quadratura em malhas de elementos quadriláteros e hexaedros lineares para estas classes de problemas. Dentre elas destaca-se a desenvolvida por Liu e Belytschko[10] e Belytschko *et al.*[1], onde os modos singulares espúrios que podem surgir com a Integração Reduzida são eliminados com a adição de uma parcela de estabilização à matriz de elemento. Mallet *et al.* [11] estendeu tal metodologia de estabilização à sistemas advectivos-difusivos. O presente trabalho voltado para a formulação SUPG (Brooks e Hughes[2]), acrescida de um operador de captura de descontinuidades (Codina[4], Galeão e Dutra do Carmo[8]), utiliza a Integração Reduzida com um ponto de quadratura, estabilizada a partir do princípio variacional de Hu-Washizu, em problemas advectivos-difusivos escalares em regime permanente, discretizados por elementos isoparamétricos quadriláteros bilineares.

O artigo é organizado da seguinte forma. Primeiramente é feita uma rápida revisão das equações envolvidas e sua discretização pelo Método dos Elementos Finitos para a formulação SUPG acrescida do operador de captura de choque. É apresentada a forma matricial do problema. O item seguinte discute a metodologia de estabilização empregada. Em seguida, apresentam-se alguns experimentos numéricos de validação, e por último são feitos comentários e conclusões sobre o trabalho.

EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO ESCALAR

Sendo Ω um domínio em $\mathcal{R}^2$ com contorno $\partial\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, a equação de advecção-difusão escalar em regime permanente é dada por

$$-\nabla(\mathbf{k}\nabla\phi) + \beta \cdot \nabla\phi = f \quad \text{em } \Omega \subset \mathcal{R}^2 \tag{1}$$

com condições de contorno

$$\phi = \phi^* \quad \text{em } \Gamma_1 \tag{2}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}\nabla\phi = \phi_n \quad \text{em } \Gamma_2 \tag{3}$$

onde f, ϕ^* e ϕ_n são funções conhecidas, β é a velocidade do fluido tal que $\nabla \cdot \beta = 0$, $\mathbf{k}$ é o tensor de difusividade, considerado muito pequena, $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal à fronteira e orientado para o exterior e ϕ a incógnita do problema. Utilizando-se o método SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkin) proposto por Brooks e Hughes[2], acrescido de um operador de captura de descontinuidades (Galeão e Dutra do Carmo[8], Codina[4]), chega-se à seguinte formulação de Elementos Finitos para a equação (1)

$$\begin{aligned} &\mathbf{B}(w^h,\phi^h)+\sum_{e=1}^{nel}\int_{\Omega^e}\tau_1\frac{\beta\nabla}{\|\beta\|}w^h\mathbf{L}(\phi^h)d\Omega+ \\ &+\sum_{e=1}^{nel}\int_{\Omega^e}\tau_2\frac{|\mathbf{L}(\phi^h)|}{|\nabla\phi^h|}\nabla w^h\left(\mathbf{I}-\frac{1}{\|\beta\|}\beta\otimes\beta\right)\nabla\phi^h d\Omega=0 \end{aligned} \tag{4}$$

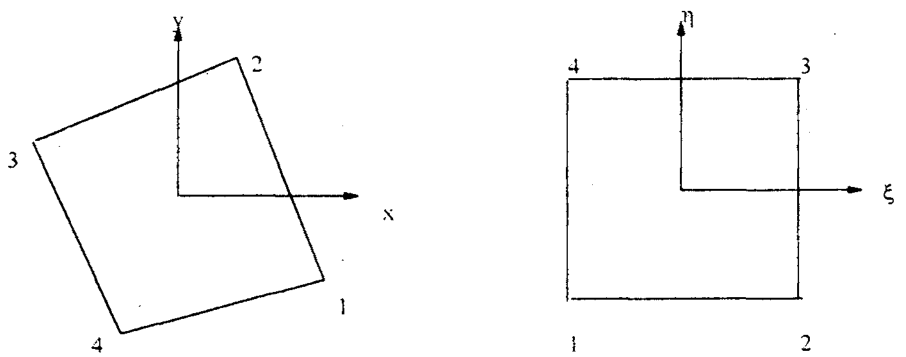
$$\mathbf{B}(w^h,\phi^h)=\int_{\Omega^e}w^h\mathbf{L}(\phi^h)d\Omega-\int_{\Omega^e}w^h\phi_n d\Omega \tag{5}$$

$$\mathbf{L}(\phi^h)=\beta\cdot\nabla\phi^h-\nabla(\mathbf{k}\nabla\phi^h)-f \tag{6}$$

onde $\phi^h=\sum_i^{nnos}N_i\phi_i$ é a forma discreta de ϕ; ϕ_i, $i=1,\ldots nnos$ são as incógnitas nodais; N_i são as funções de interpolação usuais de elementos finitos e w^h é a função discreta de ponderação. Assume-se que a malha possua $nnos$ pontos nodais. As funções de interpolação para elementos quadriláteros bilineares, restritas aos elementos são dadas por

$$N_a=\frac{1}{4}(1+\eta\eta_a)(1+\xi\xi_a),\ a=1,\ldots,4 \tag{7}$$

para o domínio de referência, $[\xi=-1,\ \xi=1]\times[\eta=-1,\ \eta=1]$, conforme mostrado na Figura 1. Na equação (4) o primeiro somatório corresponde à parcela de estabilização da formulação SUPG, enquanto que o segundo somatório representa à parcela do termo de captura de descontinuidades. A expressão (5) corresponde à parcela de Galerkin e o operador de resíduo discreto da equação de advecção-difusão é dado pela equação (6).



Plano físico (x,y) Plano de referência (ξ,η)

Figura 1. Elemento quadrilátero bilinear - plano físico e plano de referência

Na equação (4) nel é o número de elementos na malha, tais que

$$\Omega = \bigcup^{nel} \Omega^e \qquad \text{e} \quad \oslash = \Omega_i^e \cap \Omega_j^e, \quad i \neq j \quad \text{e} \quad i,j = 1,\ldots,nel \tag{8}$$

Considera-se que a contribuição descontínua à montante das linhas de corrente é calculada pela expressão assintótica (Brooks e Hughes[2])

$$\tau_1 = \frac{h^e}{2} \min\left(\frac{Pe}{3}; 1,0\right) \tag{9}$$

sendo Pe o número de Péclet do elemento, ou seja

$$Pe = \frac{||\beta||^3}{2} \frac{h^e}{\beta^t \mathbf{k} \beta} \tag{10}$$

O comprimento característico do elemento h^e, pode ser calculado segundo Codina *et al.*[3], isto é

$$h^e = 2\frac{||\beta||}{||\beta_\xi||} \tag{11}$$

onde $||\cdot||$ indica a norma euclidiana e β_ξ é a projeção de β no plano de referência. Para a parcela de captura de descontinuidades, as grandezas correspondentes são definidas como

$$\tau_2 = \frac{h_{II}^e}{2} \min\left(\frac{Pe_{II}}{3}; 0,7\right) \tag{12}$$

$$Pe_{II} = \frac{||\beta_{II}||^3}{2} \frac{h_{II}^e}{\beta_{II}^T \mathbf{k} \beta_{II}} \tag{13}$$

$$h_{II}^e = 2\frac{||\beta_{II}||}{||\beta_\xi||} \tag{14}$$

onde o subíndice II indica a projeção de β na direção paralela a $\nabla\phi$. A expressão (12) é uma aproximação assintótica obtida a partir da relação dada em Codina[4]. Substituindo-se as aproximações de Elemento Finitos em (4) à (6), chega-se a forma matricial do problema expressa por

$$\mathbf{Kd} = \mathbf{F} \tag{15}$$

$\mathbf{K}$ e $\mathbf{F}$ são obtidos de forma usual, a partir das contribuições dos elementos

$$\mathbf{K} = \sum_{e=1}^{nel} (\mathbf{K}_d^e + \mathbf{K}_{ag}^e + \mathbf{K}_{apg}^e + \mathbf{K}_{cd}^e) \tag{16}$$

$$\mathbf{F} = \sum_{e=1}^{nel} (\mathbf{f}_g^e + \mathbf{f}_{pg}^e) \tag{17}$$

Considerando-se as funções de interpolação bilineares dadas pela expressão (7) e o elemento quadrilátero da Figura 1, as parcelas de $\mathbf{K}$ presentes em (16) podem ser explicitadas como

- Matriz de difusão de Galerkin:

$$[\mathbf{K}_d^e] = \int_{\Omega^e} N_{b,j} k_{ij} N_{a,i} d\Omega, \quad a, b = 1, \ldots, 4; \; i, j = 1, 2 \tag{18}$$

- Matriz de advecção de Galerkin:

$$[\mathbf{K}_{ag}^e] = \int_{\Omega^e} N_b \beta \cdot \nabla N_a d\Omega, \quad a, b = 1, \ldots, 4 \tag{19}$$

- Matriz de advecção de Petrov-Galerkin:

$$[\mathbf{K}_{apg}^e] = \int_{\Omega^e} \frac{\tau_1}{||\beta||} N_{b,j} \beta_j \otimes \beta_i N_{a,i}, \quad a, b = 1, \ldots, 4; \; i, j = 1, 2 \tag{20}$$

- Operador de captura de descontinuidades:

$$[\mathbf{K}_{cd}^e] = \int_{\Omega^e} \tau_2 N_{b,j} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{||\beta||^2} \beta \otimes \beta \right) N_{a,i} d\Omega \tag{21}$$

onde A é a área do elemento dada por

$$A = \frac{1}{2}(x_{31} y_{42} + x_{24} y_{31}) \tag{22}$$

para

$$x_{IJ} = x_I - x_J \quad \text{e} \quad y_{IJ} = y_I - y_J, \quad I, J = 1, \ldots, 4 \tag{23}$$

Tais integrais podem ser avaliadas através da quadratura de Gauss com um ponto, conduzindo a

$$[\mathbf{K}_d^e]^{(1)} = A \mathbf{b}_i k_{ij} \mathbf{b}_j^T, \quad i, j = 1, 2 \quad \text{em} \quad \xi = \eta = 0 \tag{24}$$

$$[\mathbf{K}_{ag}^e]^{(1)} = \frac{A}{4} \mathbf{t}(\beta_i \mathbf{b}_i^T), \quad i = 1, 2 \quad \text{em} \quad \xi = \eta = 0 \tag{25}$$

$$[\mathbf{K}_{apg}^e]^{(1)} = \frac{A\tau_1}{||\beta||} (\mathbf{b}_j \beta_j \beta_i \mathbf{b}_i^T), \quad i, j = 1, 2 \quad \text{em} \quad \xi = \eta = 0 \tag{26}$$

$$[\mathbf{K}_{cd}^e]^{(1)} = A \tau_2 \mathbf{b}_j \bar{\beta}_j \bar{\beta}_i \mathbf{b}_i^T, \quad i = 1, 2 \quad \text{em} \quad \xi = \eta = 0 \tag{27}$$

onde, segundo Codina[4] tem-se

$$\bar{\beta} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\beta_1 \beta_1}{||\beta||^2} & -\frac{\beta_1 \beta_2}{||\beta||^2} \\ -\frac{\beta_1 \beta_2}{||\beta||^2} & 1 - \frac{\beta_2 \beta_2}{||\beta||^2} \end{bmatrix} \tag{28}$$

Observa-se que para o operador de captura do tipo CAU (Galeão e Dutra do Carmo[8]), $\bar{\beta} = \mathbf{I}$. Nas expressões acima, $\mathbf{b}_1$ e $\mathbf{b}_2$ são as parcelas de $\nabla \mathrm{N} = [\mathbf{b}_1 \ \mathbf{b}_2]$, dadas por

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2A}(y_{24} \ y_{31} \ y_{42} \ y_{13})^T \tag{29}$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{1}{2A}(x_{42} \ x_{13} \ x_{24} \ x_{31})^T \tag{30}$$

e o vetor $\mathbf{t}$ representa um movimento de corpo rígido

$$\mathbf{t} = (1 \ 1 \ 1 \ 1)^T \tag{31}$$

As matrizes integradas no ponto ($\xi = 0$, $\eta = 0$) sõ deficientes de posto, o que pode ocasionar oscilações espúrias (Hayes[9]). Desta forma, se faz necessária a utilização de uma metodologia capaz de anular os efeitos negativos da deficiência de posto das matrizes. Neste trabalho os termos de correção das oscilações espúrias serão desenvolvidos com base nos estudos de Liu e Belytschko[10] e Belytschko *et al.* [1] para a equação de difusão, e os trabalhos de Mallet *et al.* [11] e Dias[6] para problemas predominantemente convectivos. Tais termos são obtidos a partir de um princípio variacional do tipo Hu-Washizu, como será visto a seguir.

DESENVOLVIMENTO DOS TERMOS DE CORREÇÃO

Definindo-se as funções

$$\mathbf{g}^h = \nabla \phi^h \tag{32}$$

$$\mathbf{q}^h = -\mathbf{k}\mathbf{g}^h \tag{33}$$

A formulação fraca em cada elemento, pelo funcional de Hu-Washizu é

$$\int_{\Omega^e} \delta \mathbf{q}^h(\mathbf{g}^h - \nabla\phi) d\Omega + \int_{\Omega^e} \delta \mathbf{g}^h(\mathbf{q}^h + \bar{\mathbf{k}}\mathbf{g}^h) d\Omega - \int_{\Omega^e} \delta\phi(\beta \mathbf{g}^h + f) d\Omega + \int_{\Omega^e} \delta \nabla\phi \mathbf{q}^h d\Omega = 0 \tag{34}$$

onde δ indica a variação e $\bar{\mathbf{k}}$ é o tensor de difusividade somado à difusão artificial oriunda da formulação SUPG com operador de captura de descontinuidades.

A interpolação de ϕ pode ser escrita como

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 x + \phi_2 y + \phi_n h \tag{35}$$

onde a função h é dada por

$$h = \frac{1}{4} A \xi \eta \tag{36}$$

Pode-se provar que são válidas as seguintes propriedades de ortogonalização

$$\mathbf{b}_i^T\mathbf{t} = 0, \qquad i = 1,2 \tag{37}$$
$$\mathbf{b}_i^T\mathbf{h} = 0, \qquad i = 1,2 \tag{38}$$
$$\mathbf{t}^T\mathbf{h} = 0 \tag{39}$$

sendo o vetor $\mathbf{h}$, identificado como o modo *hourglass*, dado por

$$\mathbf{h} = (1\ -1\ 1\ -1)^T \tag{40}$$

Utilizando tais propriedades, juntamente com os valores nodais de ϕ, tomados a partir de (35) chega-se a expressão

$$\phi = \mathbf{c}^T\phi^e + \mathbf{b}_1^T\phi^e\mathbf{x} + \mathbf{b}_2^T\phi^e\mathbf{y} + \gamma^T\phi^e\mathbf{h} \tag{41}$$
$$\mathbf{c}^T = \frac{1}{4}(\mathbf{t}^T - (\mathbf{t}^T\mathbf{x}_i^e)\mathbf{b}_i^T), \qquad i = 1,2 \tag{42}$$
$$\gamma^T = \frac{1}{A}(\mathbf{h}^T - (\mathbf{h}^T\mathbf{x}_i^e)\mathbf{b}_i^T), \qquad i = 1,2 \tag{43}$$

onde o superíndice e indica que os valores são tomados em relação ao elemento e e o vetor γ é calculado segundo Belytschko *et al.*[1], de forma que o posto do gradiente discreto $\nabla\mathbf{N}$, seja 3. Definindo-se as aproximações

$$\mathbf{g}^h = \begin{pmatrix} g_1^{(1)} + \bar{g}h_{,1} \\ g_2^{(1)} + \bar{g}h_{,2} \end{pmatrix} \tag{44}$$

$$\mathbf{q}^h = \begin{pmatrix} q_1^{(1)} + \bar{q}h_{,1} \\ q_2^{(1)} + \bar{q}h_{,2} \end{pmatrix} \tag{45}$$

onde

$$h_{,1} = \frac{1}{4}A\eta \qquad \text{e} \quad h_{,2} = \frac{1}{4}A\xi \tag{46}$$

$$\bar{\mathbf{g}} = \gamma^T\phi^e \tag{47}$$

$$\bar{\mathbf{q}} = -\bar{k}\bar{\mathbf{g}} \tag{48}$$

onde $\bar{\mathbf{g}}$ e $\bar{\mathbf{q}}$ são as parcelas de estabilização do gradiente e do fluxo respectivamente.

Substituindo-se (41) em (34), e também as aproximações (44) e (45), vem

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega^e} \delta\phi^{eT}(\mathbf{c}^T + \mathbf{b}_j\mathbf{x}_j + \gamma\mathbf{h})(\beta_i(g_i^{(1)} + \bar{g}h_{,i}) - f)d\Omega - \\
&- \int_{\Omega^e} \delta\phi^{eT}(\mathbf{b}_i + \gamma h_{,i})(q_i^{(1)} + \bar{q}h_{,i})d\Omega + \\
&+ \int_{\Omega^e} (\delta q_i^{(1)T} + \delta\bar{q}^T h_{,i})(g_i^{(1)} + \bar{g}h_{,i} - \mathbf{b}_i^T\phi^e - \gamma^T\phi^e h_{,i})d\Omega + \\
&+ \int_{\Omega^e} (\delta g_i^{(1)T} + \delta\bar{g}^T h_{,i})(q_i^{(1)} + \bar{q}h_{,i} + k_{ij}g_j^{(1)} + k_{ij}\bar{g}h_{,j})d\Omega = 0, \qquad i = 1,2
\end{aligned} \tag{49}$$

A partir da primeira integral da equação (49) chega-se à expressão do fluxo advectivo em cada elemento, e a partir da segunda, do fluxo difusivo

$$f^e = \frac{A}{4}\mathbf{t}\beta_i g_i^{(1)} + \mathbf{b}_j\beta_i\bar{g}\int_{\Omega^e} x_j h_{,i}d\Omega - A\mathbf{b}_i q_i^{(1)} - \gamma\bar{q}\int_{\Omega^e} h_{,i}h_{,i}d\Omega \tag{50}$$

observa-se que as duas primeiras parcelas correspondem ao termo de advecção de Galerkin e as demais aos termos de difusão de Galerkin e difusão artificial oriunda dos termos do SUPG e do operador de captura de descontinuidades. Estas quando desmembradas, tornam possível a identificação das matrizes de correção da deficiência de posto provocada pela integração reduzida. Desta forma, tem-se

- Matriz de correção da difusão:

$$[\mathbf{K}_d^e]^{(\mathsf{stab})} = \gamma k_{ij}\gamma^T \int_{\Omega^e} h_{,i}h_{,i}d\Omega, \qquad i,j = 1,2 \tag{51}$$

- Matriz de correção da advecção:

$$[\mathbf{K}_{ag}^e]^{(\mathsf{stab})} = \mathbf{b}_j\beta_i\gamma^T \int_{\Omega^e} x_j h_{,i}d\Omega, \qquad i,j = 1,2 \tag{52}$$

- Matriz de correção da advecção de Petrov-Galerkin:

$$[\mathbf{K}_{apg}^e]^{(\mathsf{stab})} = \frac{\tau_1}{\|\beta\|}\gamma\beta\otimes\beta\gamma^T \int_{\Omega^e} h_{,i}h_{,i}d\Omega, \qquad i = 1,2 \tag{53}$$

- Matriz de correção para o operador de captura de descontinuidades:

$$[\mathbf{K}_{cd}^e]^{(stab)} = \tau_2\gamma[\bar{\beta}]\gamma^T \int_{\Omega^e} h_{,i}h_{,i}d\Omega \tag{54}$$

Assim, as parcelas da matriz $\mathbf{K}$ em (16) serão dadas pela soma dos termos provenientes da integração de Gauss com um ponto, equações (24) a (27), e as matrizes de estabilização, equações (51) a (54), isto é

$$\mathbf{K}_d^e = \mathbf{K}_d^{e(1)} + \mathbf{K}_d^{e(\mathsf{stab})} \tag{55}$$

$$\mathbf{K}^e_{ag} = \mathbf{K}^{e(1)}_{ag} + \mathbf{K}^{e(\mathrm{stab})}_{ag} \tag{56}$$

$$\mathbf{K}^e_{apg} = \mathbf{K}^{e(1)}_{apg} + \mathbf{K}^{e(\mathrm{stab})}_{apg} \tag{57}$$

$$\mathbf{K}^e_{cd} = \mathbf{K}^{e(1)}_{cd} + \mathbf{K}^{e(\mathrm{stab})}_{cd} \tag{58}$$

A forma explícita destas matrizes encontra-se no Apêndice.

Observações

- É importante notar que para o cálculo do resíduo no interior do elemento, $|\mathbf{L}(\phi^h)|$, toma-se os termos avaliados no ponto de coordenadas ($\xi = 0$, $\eta = 0$). Logo, este termo também deverá ser estabilizado, utilizando-se uma correção semelhante à empregada nos casos anteriores, onde

$$\mathbf{L}(\phi^h) = \beta^T \nabla \phi^h = \beta^T \nabla \tilde{\mathbf{N}}^T \phi \tag{59}$$

$$\nabla \bar{\mathbf{N}} = \{\mathbf{b}_1 \ \mathbf{b}_2 \ \gamma\} \tag{60}$$

- Nas equações (51) a (54), as integrais constituem os chamados parâmetros de estabilização

$$\bar{\varepsilon}_1 = \varepsilon \int_{\Omega^e} x_j h_{,i} d\Omega, \qquad i,j = 1,2 \quad \text{(para advecção de Galerkin)} \tag{61}$$

$$\bar{\varepsilon}_2 = \varepsilon \int_{\Omega^e} h_{,i} h_{,i} d\Omega, \qquad i = 1,2 \quad \text{(para os demais casos)} \tag{62}$$

O coeficiente livre ε que aparece nas equações (61) e (62) nos dá a possibilidade de ajustar a precisão dos resultados. Assim, quando $\varepsilon = 1$ verifica-se que $[\mathbf{K}^e]$ será exata para malhas de elementos retangulares e paralelogramos.

Com o objetivo de salientar o papel da escolha do coeficiente ε na qualidade das soluções obtidas, Liu e Belytschko[10] apresentaram uma tabela comparando as formulações de Elementos Finitos para diversos valores de ε com as correspondentes moléculas de Diferenças Finitas para a equação de difusão, considerando uma malha de 4 elementos quadrados de lado Δx e tomando-se os resultados em torno do nó central. Aquí, apresenta-se na Tabela I resultados semelhante aos citados anteriormente, desta vez tomando-se as moléculas correspondentes à montagem global em torno do nó central da mesma malha de 4 elementos citada acima para as parcelas da advecção obtidas com a formulação aqui apresentada, com $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 1$, para ângulos de escoamento de 45° e 0°. Verifica-se na Tabela I que as moléculas são idênticas as apresentadas por Swaminathan e Voller[13] para o método SUPG com integração 2×2.

$\theta = 45^\circ$	$\mathbf{K}_{ag}$	Molécula
$\varepsilon = 0$	$\begin{bmatrix} -3 & 0 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline 0 & 1 & 1 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline -1 & -1 & 0 \\ \hline \end{array}$
$\varepsilon = 1$	$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 2 & 1 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \\ -2 & -1 & 4 & -1 \\ -3 & 0 & 3 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline 0 & 4 & 2 \\ \hline -4 & 0 & 4 \\ \hline -2 & -4 & 0 \\ \hline \end{array}$
$\theta = 0^\circ$	$\mathbf{K}_{ag}$	Molécula
$\varepsilon = 0$	$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline -2 & 0 & 2 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$
$\varepsilon = 1$	$\begin{bmatrix} -2 & 2 & 1 & -1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline -4 & 0 & 4 \\ \hline -1 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$

Tabela Ia. Matriz de advecção de Galerkin: $\theta = 45^\circ$ e 0°

$\theta = 45^\circ$	$\mathbf{K}_{apg}$	Molécula
$\varepsilon = 0$	$\begin{bmatrix} 6 & 0 & -6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline -6 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 12 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -6 \\ \hline \end{array}$
$\varepsilon = 1$	$\begin{bmatrix} -7 & -1 & -5 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -5 & -1 & 7 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline 1 & -2 & -5 \\ \hline -2 & 16 & -2 \\ \hline -5 & -2 & 1 \\ \hline \end{array}$
$\theta = 0^\circ$	$\mathbf{K}_{apg}$	Molécula
$\varepsilon = 0$	$\begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline -1 & -2 & -1 \\ \hline 2 & 4 & 2 \\ \hline -1 & -2 & -1 \\ \hline \end{array}$
$\varepsilon = 1$	$\begin{bmatrix} 2 & -2 & -1 & 1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ 1 & -1 & -2 & 2 \end{bmatrix}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|} \hline -1 & 2 & -1 \\ \hline -4 & 8 & -4 \\ \hline -1 & 2 & -1 \\ \hline \end{array}$

Tabela Ib. Matriz de advecção de Petrov-Galerkin: $\theta = 45^\circ$ e 0°

EXEMPLOS NUMÉRICOS

Como testes de validação da metodologia reproduziu-se os exemplos de Brooks e Hughes[2] para a formulação SUPG e os de Codina[4] para o operador de captura de descontinuidades. Assim, implementaram-se as matrizes de elemento estabilizadas para a formulação SUPG em um código onde o sistema de equações não-simétrico resultante é solucionado pelo método iterativo GMRES (Saad e Shultz[12]). No caso da formulação com operador de captura, o sistema de equações não-lineares foi solucionado pelo método de Newton-Raphson, onde o sistema jacobiano é resolvido pelo método BI-CGSTAB com pré-condicionadores elemento-por-elemento Gauss-Seidel (Coutinho e Amorim[5]).

Problema de advecção pura

O problema de advecção pura apresentado na Figura 2, definido em $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, foi solucionado primeiramente para uma malha regular de 10×10 elementos, para o ângulo θ igual a 22,5°; 45° e 67,5° e com dois conjuntos de condições de contorno, reproduzindo as condições apresentadas por Brooks e Hughes[2]. No primeiro caso, identificado como caso A, considerou-se as condições de contorno essenciais apresentadas na Figura 2, e condições de contorno naturais homogêneas ao longo de $x = 1$ e $y = 1$. No segundo caso, identificado como caso B, assume-se ao invés de condições de contorno naturais, condições de contorno essenciais homogêneas ao longo de $x = 1$ e $y = 1$. Para um campo de velocidades constante, de módulo unitário, as soluções encontradas com integração com um ponto de quadratura das integrais, com e sem estabilização, $\varepsilon = 1$ e $\varepsilon = 0$, respectivamente, bem como as soluções com 2×2 pontos de integração, são apresentadas na Tabela II.

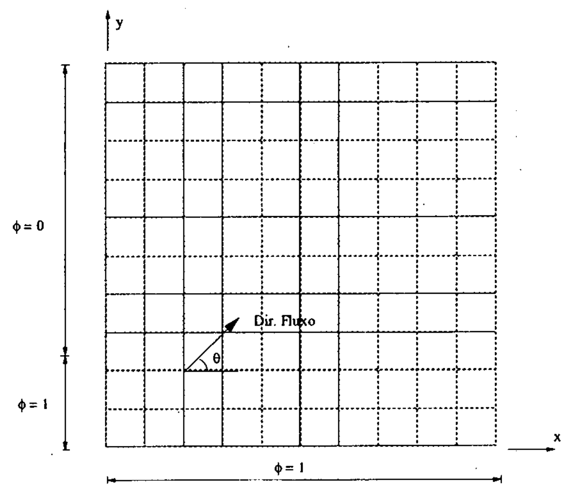


Figura 2. Problema de advecção pura

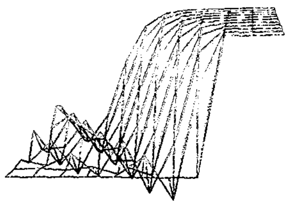
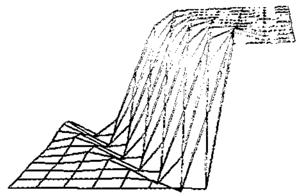
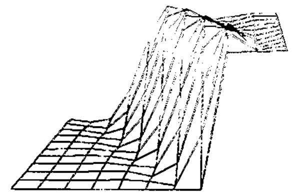
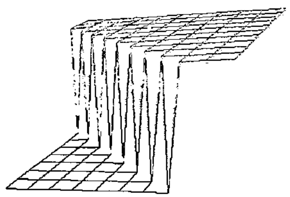
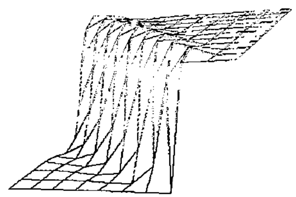
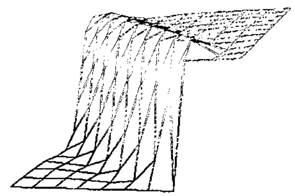
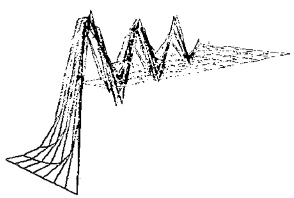
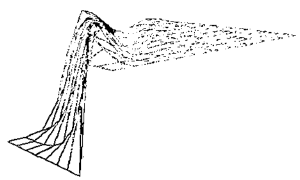
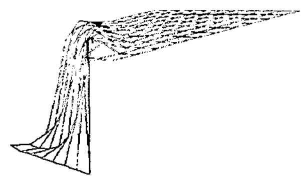
θ	$\varepsilon = 0$	$\varepsilon = 1$	2×2
22.5°			
45°			
67.5°			

Tabela IIa. Resultados do problema de advecção pura. (Caso A)

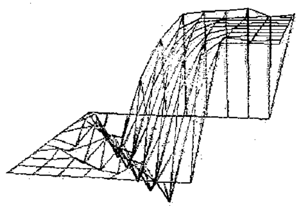
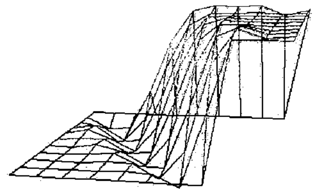
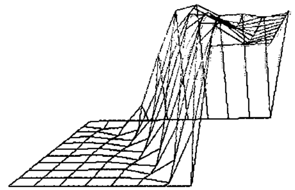
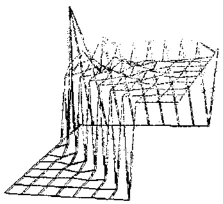
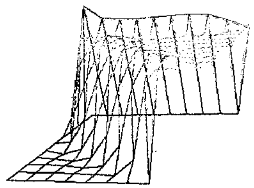
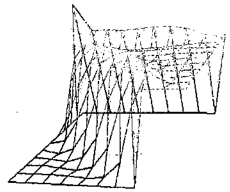
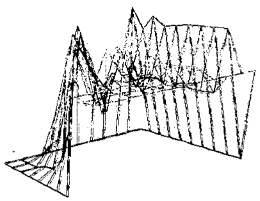
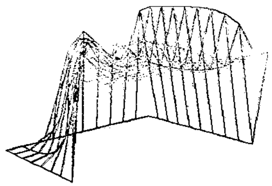
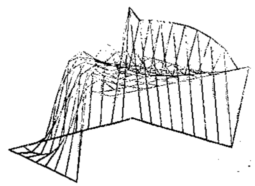
θ	ε = 0	ε = 1	2 x 2
22.5°			
45°			
67.5°			

Tabela IIb. Resultados do problema de advecção pura. (Caso B)

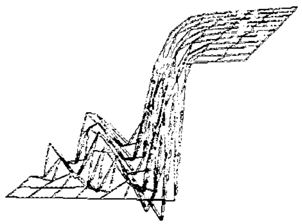
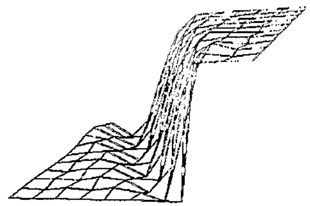
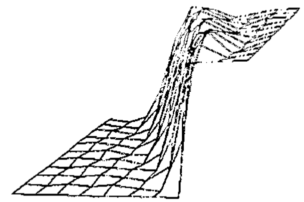
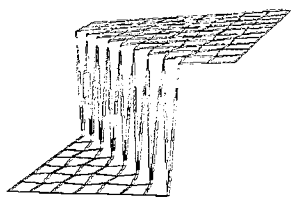
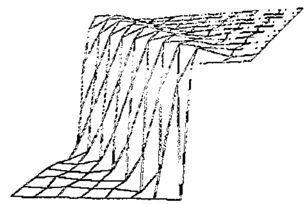
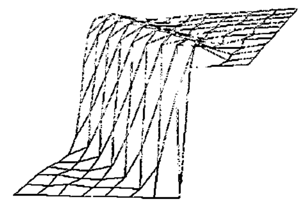
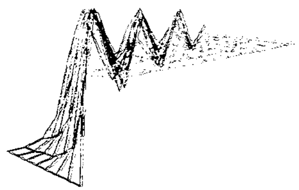
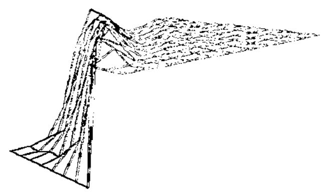
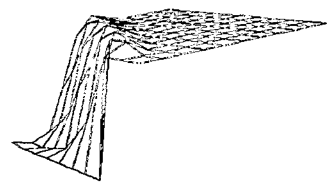
θ	ε = 0	ε = 1	2 x 2
22.5°			
45°			
67.5°			

Tabela IIIa. Resultados do problema de advecção pura com malha não-uniforme.
(Caso A)

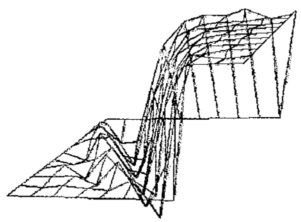
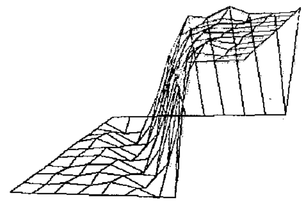
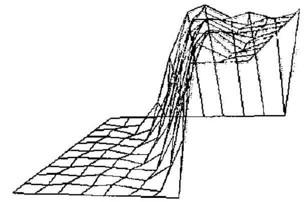
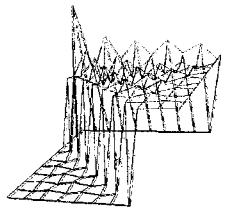
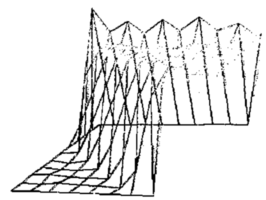
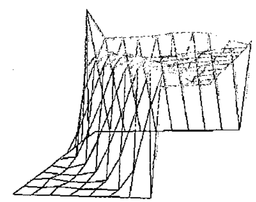
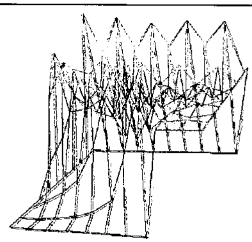
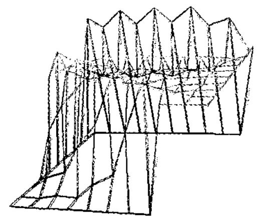
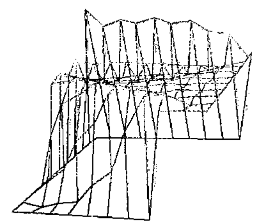
θ	$\varepsilon = 0$	$\varepsilon = 1$	2 x 2
22.5°			
45°			
67.5°			

Tabela IIIb. Resultados do problema de advevcção pura com malha não-uniforme. (Caso B)

Observa-se na Tabela II que as soluções obtidas com $\varepsilon = 0$, isto é, sem estabilização apresentam oscilações espúrias. Já as soluções obtidas com a metodologia de estabilização, considerando-se $\varepsilon = 1$, são similares aos resultados obtidos com a integração com 2×2 pontos de quadratura. Em seguida, o mesmo exemplo foi solucionado para os casos anteriores, porém com a malha não-uniforme da Figura 3. Os resultados correspondentes encontram-se na Tabela III. Estes resultados são bastante aceitáveis quando comparados com os obtidos com 2×2 pontos de quadratura.

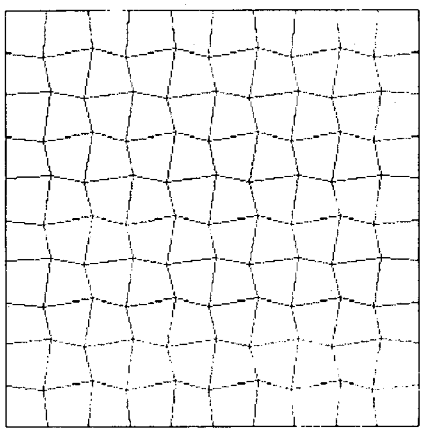


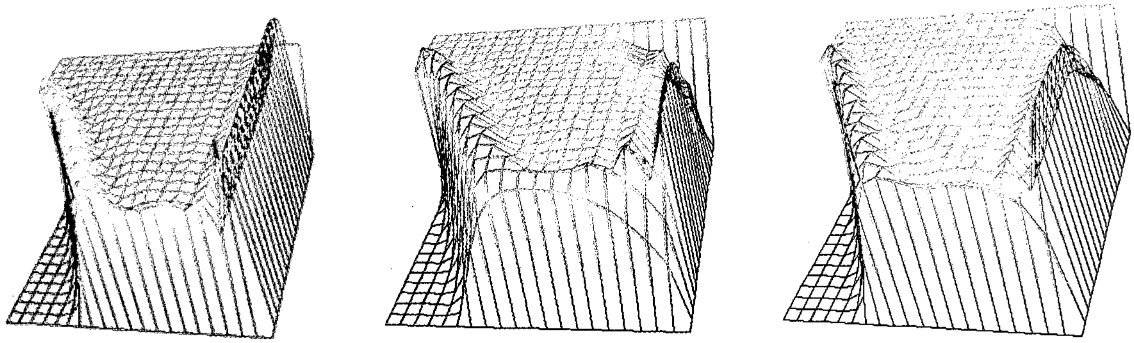
Figura 3. Problema de advecção pura com malha não-uniforme

Problema de advecção-difusão com operador de captura de descontinuidades

Considerando-se o mesmo domínio do exemplo anterior, com $k = 10^{-8}$ e velocidade constante de módulo unitário, para um ângulo $\theta = 26,5°$, o problema foi solucionado com uma malha regular de 20×20 elementos através das formulações estabilizadas com operador de captura de descontinuidades. Os resultados obtidos encontram-se na Figura 4, onde pode-se visualizar a solução da formulação SUPG, com o operador de captura de Codina[4] e com o operador CAU (Galeão e Dutra do Carmo[8]). Em todas as soluções considerou-se $\varepsilon = 1$.

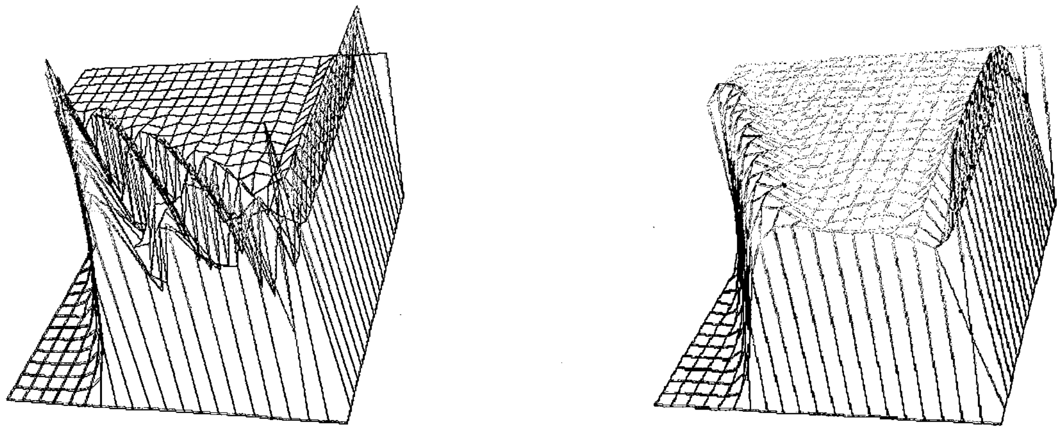
As soluções acima diferem entre si basicamente junto à camada limite. Nota-se que a introdução do operador de captura diminui significativamente as oscilações próximas às descontinuidades. Observa-se também que o operador CAU é visivelmente mais difusivo do que o operador dado com a equação (28).

Em seguida, o problema foi solucionado para outros valores do parâmetro de estabilização ε. Os resultados para $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$ são plotados na Figura 5, ambos para o operador CAU. Como pode ser visto os resultados com $\varepsilon = 0$ apresentam oscilações espúrias, enquanto que os resultados com $\varepsilon = 2$ são bastante satisfatórios.



SUPG com $\varepsilon = 1$ — SUPG + operador de Codina com $\varepsilon = 1$ — SUPG + operador CAU com $\varepsilon = 1$

Figura 4. Testes com operador de captura



$\varepsilon = 0$ — $\varepsilon = 2$

Figura 5. Testes com $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 2$

REFERÊNCIAS

1. T. Belytschko, J.S.J. Ong, W.K. Liu e J.M. Kennedy, "Hourglass Control in Linear and Non-Linear Problems", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **43**, pp. 251–276, (1984).
2. A.N. Brooks e T.J.R. Hughes, "Streamline Upwind Petrov-Galerkin Formulation for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.* , Vol. **32**, pp. 199–259, (1982).
3. R. Codina, E. Oñate e M. Cervera, "The Intrinsic Time for the Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulation Using Quadratic Elements", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **94**, pp. 239–262, (1992).
4. R. Codina, "A Discontinuity-Capturing Crosswind-Dissipation for the Finite Element Solution of the Convection-Diffusion Equation", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **110**, pp. 325–342, (1993).
5. A.L.G.A. Coutinho e R.B. Amorim, "Non-Symmetric CG-like Schemes for the Element-by-Element Solution of Finite Element Equations", Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, ABCM, SP, Brasil, pp. 309–311, (1994).
6. C.M. Dias, "Um estudo sobre a utilização da integração reduzida em problemas advectivos-difusivos", Tese de MSc., Programa de Engenharia Civil, COPPE/UFRJ, (1995).
7. FLOTRAN–Benchmark Manual, pp. 4.1–4.7, (1991).
8. A.C. Galeão e E.G. Dutra do Carmo, "A Consistent Approximate Upwind Petrov-Galerkin Method for Convection-Dominated Problems", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **68**, pp. 83–95, (1988).
9. L.J. Hayes, "Practical Stability Test for Finite Elements with Reduced Integration", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **17**, pp. 1689–695, (1981).
10. W.K. Liu e T. Belytschko, "Efficient Linear and Nonlinear Heat Conduction with a Quadrilateral Element", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **20**, pp. 931–948, (1984).
11. M. Mallet, C. Poirier e F. Shakib, "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: Development of an Hourglass Control Operator for Multidimensional Advective-Diffusive Systems", *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **94**, pp. 429–442, (1992).
12. Y. Saad e M.H. Schultz, "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Non-Symmetric Linear Systems", *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, Vol. **7**, pp. 856–869, (1986).
13. C.R. Swaminathan e V.R. Voller, "Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part I - Formulations", *Num. Heat Transfer, Part B*, Vol. **22**, pp. 95–107, (1992).
14. C.R. Swaminathan e V.R. Voller, "Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part II: Implementation and Comparison with the SUPG Finite Element Scheme", *Num. Heat Transfer, Part B*, Vol. **22**, pp. 109–124, (1992).

APÊNDICE

As matrizes de elemento para a equação de advecção-difusão escalar considerando-se um elemento quadrilátero bilinear, integradas com um ponto e estabilizadas com a metodologia do item 3, encontram-se à seguir. De forma geral, a primeira matriz representa o resultado da integração com um ponto, enquanto que a segunda matriz é o termo de estabilização.

- Advecção (Galerkin):

$$\mathbf{K}^e_{ag} = \frac{1}{8}\begin{bmatrix} a & b & -a & -b \\ a & b & -a & -b \\ a & b & -a & -b \\ a & b & -a & -b \end{bmatrix} + \frac{\varepsilon}{48\ A^2}\begin{bmatrix} t_1c_1 & t_1c_2 & t_1c_3 & t_1c_4 \\ t_2c_1 & t_2c_2 & t_2c_3 & t_2c_4 \\ -t_1c_1 & -t_1c_2 & -t_1c_3 & -t_1c_4 \\ -t_2c_1 & -t_2c_2 & -t_2c_3 & -t_2c_4 \end{bmatrix} \quad (A.1)$$

onde

$$a = y_{24}\beta_x + x_{42}\beta_y \quad (A.2)$$

$$b = y_{31}\beta_x + x_{13}\beta_y \quad (A.3)$$

$$ct1 = x_1 - x_2 + x_3 - x_4 \quad (A.4)$$

$$ct2 = y_1 - y_2 + y_3 - y_4 \quad (A.5)$$

$$t_1 = \beta_x y_{31} y_{42} x_{42} + \beta_y x_{24} x_{31} y_{24} \quad (A.6)$$

$$t_2 = \beta_x y_{31} y_{42} x_{13} + \beta_y x_{24} x_{31} y_{31} \quad (A.7)$$

$$c_1 = 2A - ct1 y_{24} - ct2 x_{42} \quad (A.8)$$

$$c_2 = -2A - ct1 y_{31} - ct2 x_{13} \quad (A.9)$$

$$c_3 = 2A - ct1 y_{42} - ct2 x_{24} \quad (A.10)$$

$$c_4 = -2A - ct1 y_{13} - ct2 x_{31} \quad (A.11)$$

- Difusão (Galerkin):

$$\mathbf{K}^e_{d} = \frac{1}{4\ A}\begin{bmatrix} c & d & -c & -d \\ d & e & -d & -e \\ -c & -d & c & d \\ -d & -e & d & e \end{bmatrix} + \frac{p_d}{4\ A^3}\begin{bmatrix} c_1c_1 & c_1c_2 & c_1c_3 & c_1c_4 \\ c_2c_1 & c_2c_2 & c_2c_3 & c_2c_4 \\ c_3c_1 & c_3c_2 & c_3c_3 & c_3c_4 \\ c_4c_1 & c_4c_2 & c_4c_3 & c_4c_4 \end{bmatrix} \quad (A.12)$$

$$c = k_x y_{24}^2 + k_y x_{42}^2 \quad (A.13)$$

$$d = k_x y_{31}^2 + k_y x_{13}^2 \quad (A.14)$$

$$e = k_x y_{24} y_{31} + k_y x_{42} x_{13} \quad (A.15)$$

$$p_d = \frac{\varepsilon}{24}[k_x(y_{31}^2 + y_{42}^2) + k_y(x_{13}^2 + x_{24}^2)] \tag{A.16}$$

- Advecção (Petrov-Galerkin):

$$\mathbf{K}^e_{apg} = \frac{1}{4\,A||\beta||}\begin{bmatrix} f & g & -f & -g \\ g & h & -g & -h \\ -f & -g & f & g \\ -g & -h & g & h \end{bmatrix} + \frac{\tau_1 p_d}{4\,A^3||\beta||}\begin{bmatrix} c_1c_1 & c_1c_2 & c_1c_3 & c_1c_4 \\ c_2c_1 & c_2c_2 & c_2c_3 & c_2c_4 \\ c_3c_1 & c_3c_2 & c_3c_3 & c_3c_4 \\ c_4c_1 & c_4c_2 & c_4c_3 & c_4c_4 \end{bmatrix} \tag{A.17}$$

onde

$$f = \beta_x y_{24}^2 + \beta_y x_{42}^2 + 2\beta_x\beta_y y_{24}x_{42} \tag{A.18}$$

$$g = \beta_x y_{24}y_{31} + \beta_y x_{42}x_{13} + \beta_x\beta_y(y_{24}x_{13} + x_{42}y_{31}) \tag{A.19}$$

$$h = \beta_x y_{31}^2 + \beta_y x_{13}^2 + 2\beta_x\beta_y y_{31}x_{13} \tag{A.20}$$

- Operador de captura de descontinuidades:

$$\mathbf{K}^e_{cd} = \frac{\tau_2}{4\,A}\begin{bmatrix} i & k & -i & -k \\ j & l & -j & -l \\ -i & -k & i & k \\ -j & -l & j & l \end{bmatrix} + \frac{\tau_2 p_{oc}}{4\,A^4}\begin{bmatrix} c_1c_1 & c_1c_2 & c_1c_3 & c_1c_4 \\ c_2c_1 & c_2c_2 & c_2c_3 & c_2c_4 \\ c_3c_1 & c_3c_2 & c_3c_3 & c_3c_4 \\ c_4c_1 & c_4c_2 & c_4c_3 & c_4c_4 \end{bmatrix} \tag{A.21}$$

onde

$$i = y_{24}m + x_{42}o \tag{A.22}$$

$$j = y_{31}m + x_{13}o \tag{A.23}$$

$$k = y_{24}n + x_{42}p \tag{A.24}$$

$$l = y_{31}n + x_{13}p \tag{A.25}$$

$$m = \left(1 - \frac{\beta_x^2}{||\beta||^2}\right)y_{24} - \left(\frac{\beta_x\beta_y}{||\beta||^2}\right)x_{42} \tag{A.26}$$

$$n = \left(1 - \frac{\beta_x^2}{||\beta||^2}\right)y_{31} - \left(\frac{\beta_x\beta_y}{||\beta||^2}\right)x_{13} \tag{A.27}$$

$$o = \left(1 - \frac{\beta_x^2}{||\beta||^2}\right)x_{42} - \left(\frac{\beta_x\beta_y}{||\beta||^2}\right)y_{24} \tag{A.28}$$

$$p = \left(1 - \frac{\beta_y^2}{||\beta||^2}\right)x_{13} - \left(\frac{\beta_x\beta_y}{||\beta||^2}\right)y_{31} \tag{A.29}$$

$$p_{oc}\frac{\varepsilon}{24}[\beta_x^2(y_{31}^2 + y_{42}^2) + \beta_y^2(x_{13}^2 + x_{24}^2) + 2\beta_x\beta_y(y_{24}x_{42} + y_{31}x_{13})] \tag{A.30}$$