UM ESTUDO SOBRE OPERADORES DE CAPTURA DE DESCONTINUIDADES PARA PROBLEMAS DE TRANSPORTE ADVECTIVOS

Carlos Alberto Alvarez Henao

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Luiz Landau, D.Sc.

Prof. Paulo Augusto Berquó De Sampaio, Ph.D.

Dr. André Adriano Bender, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL MAIO DE 2004 Alvarez Henao, Carlos Alberto

Um estudo sobre operadores de captura de descontinuidades para problemas de transporte advectivos [Rio de Janeiro] 2004

XIII, 106 p. 29,7 cm. (COPPE/UFRJ, M.Sc. Engenharia Civil, 2004)

Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

- 1. Elementos Finitos Estabilizados
- 2. Equação de convecção difusão
- 3. Operadores de Captura de Descontinuidades
 - I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

A minha grande Familia:

José de Jesús e Luz Elena, pais;

José Mauricio, Luz Angela e Diego Alejandro, irmãos;

Elizabeth, meu milagro de abril e mulher da minha vida!

Os seres mais queridos e amados, a força que precisei para lutar.

Agradecimentos

Ao Professor Alvaro Coutinho pela orientação no trabalho, assim como pelo grande esforço e paciência na revisão do "portunhol" e pela oportunidade brindada. Obrigado total.

A Jorge Calderon e Esperanza Hurtado, os grande amigos no Rio,

A Paula Sesini e Denis pela amizade, confiança e ajuda,

A Luciano pela grande amizade,

A Claudia M. Dias no LNCC pela colaboração e dedicação no momento preciso,

À turma colombiana: Mariana e Gabriel, Ully (quasi colombiana e irmã de coração), Gloria, Sergio e Cristina, Javier, Luz Marina, Ana, Luz Stella, ...

Ao Médico Paulo Marinho pela ajuda e amizade nos momentos fracos de saúde,

À turma Latino-americana: Christian e Magna, Roberta, Alberto e Jorge,

A Mara, Mirian, Marcos, Rubens, Enrique e Renato pela pronta colaboração,

A Isabel pela amizade, curta mas total,

Aos ingratamente esquecidos neste momento...,

E ao povo brasileiro pela oportunidade brindada. Obrigado BRASIL!

iv

Resumo da Tese apresentada a COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M. Sc.)

Um estudo sobre operadores de captura de descontinuidades para problemas de transporte advectivos

Carlos Alberto Alvarez Henao

Maio / 2004

Orientador: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Programa: Engenharia Civil

Este trabalho trata-se de um estudo comparativo entre diferentes esquemas de elementos finitos estabilizados para a equação de advecção – difusão. Apresentam-se os esquemas de estabilização propostos por Galeão e Do Carmo, Codina, Sampaio e Coutinho, Juanes e Patzek e Tezduyar. São feitos experimentos numéricos, em problemas em regime estacionário e transiente, utilizando elementos triangulares lineares e quadriláteros bi-lineares com uma técnica de integração reduzida. São realizadas comparações entre os diferentes esquemas, ressaltando-se suas vantagens e desvantagens. Os esquemas foram implementados na formulação estabilizada de elementos finitos SUPG. Para a integração no tempo foi utilizado o algoritmo implícito preditor/multi– corretor e o algoritmo GMRES para a resolução dos sistemas de equações lineares em cada passo de tempo. Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

A study of discontinuity capturing operators for finite element simulation of advection-dominated transport phenomena

Carlos Alberto Alvarez Henao

Maio / 2004

Advisor: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Department: Civil Engineering

This work reports a comparative study among several discontinuity capturing operators for the finite element simulation of advection-dominated transport problems. We consider the semi-discrete SUPG finite element formulation added with the discontinuity-capturing operators introduced by Galeão and Do Carmo, Codina, Sampaio and Coutinho, Juanes and Patzek and Tezduyar. Numerical experiments, in steady state and transient problems, using linear triangular elements and bilinear quadrilateral elements with reduced integration techniques are performed, trying to access their relative advantages and disadvantages. For time integration we use a predictor/multi-corrector algorithm, where the effective systems of linear equations are solved by preconditioned GMRES.

vi

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Formulação SUPG para a Equação de Transporte	5
2.1	Formulação SUPG semi-discreta	5
2.2	Formulação variacional	6
2.3	Formulação Matricial do Elemento Triangular Linear	8
2.3.1	Discretização	8
2.3.2	Determinação das matrizes ao nível do elemento	9
2.4	Elemento Quadrilátero Bi-Linear com Integração Reduzida	12
2.4.1	Preliminares	12
2.4.2	Matrizes de elemento quadrilátero	13
2.5	Integração no Tempo	17
3	Formulação dos Operadores de Captura de Descontinuidades	20
3.1	Formulação Geral	20
3.2	Operador CAU	23
3.3	Operador CD	24

3.4	Operador <i>ETV</i>	26
3.5	Operador ASGS	27
3.6	Operador DCDD	29
4	Exemplos de Validação da Implementação	34
4.1	Exemplo 1 Advecção pura em estado estacionario com elemento triangular	34
4.2	Exemplo 2 Advecção pura em estado estacionario com elemento quadrilâtero e integração reduzida	46
4.3	Exemplo 3 Advecção fluxo rotacional em estado estacionario	65
4.4	Exemplo 4 Advecção fluido em movimiento com elemento triangular	69
4.5	Exemplo 5 Advecção fluido em movimiento com elemento quadrilátero e integração reduzida	85
4.6	Exemplo 6 Advecção colina em forma de co-seno fluido em rotação	92
5	Conclusões e Trabalhos Futuros	99
	Referências bibliográficas	102

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1	Elemento quadrilátero bi-linear. Plano físico e plano de referência	13
Figura 3.1	Esquema do OCD	22
Figura 4.1	Convecção através do domínio com condições de contorno homogêneas	35
Figura 4.2	Fluxo à 45°, (a) $SUPG$, (b) $SUPG+CAU$, (c) $SUPG+CD$, (d) $SUPG+ETV$, (e) $SUPG+ASGS$, (f) $SUPG+DCDD$	37
Figura 4.3	Elementos triangulares lineares, fluxo à 45°, (a)Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b)Convergência da solução.	39
Figura 4.4	Fluxo à 67.5° , (a)SUPG, (b)SUPG+CAU, (c)SUPG+CD, (d)SUPG+ETV, (e)SUPG+ASGS, (f)SUPG+DCDD	41
Figura 4.5	Elementos triangulares lineares, fluxo à 67.5°, (a)Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b)Convergência da solução.	42
Figura 4.6	Fluxo à 22.5°, (a) $SUPG$, (b) $SUPG+CAU$, (c) $SUPG+CD$, (d) $SUPG+ETV$, (e) $SUPG+ASGS$, (f) $SUPG+DCDD$	44
Figura 4.7	Elementos triangulares lineares, fluxo à 22.5°, (a)Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b)Convergência da solução.	45
Figura 4.8	Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo à 45°, (a) <i>SUPG</i> , (b) <i>SUPG</i> + <i>CAU</i> , (c) <i>SUPG</i> + <i>CD</i> , (d) <i>SUPG</i> + <i>ETV</i> , (e) <i>SUPG</i> + <i>ASGS</i> , (f) <i>SUPG</i> + <i>DCDD</i>	48

- Figura 4.9 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, 48 fluxo à 45°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.
- Figura 4.10 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0, 51$ fluxo à 45°, (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*
- Figura 4.11 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, 51 fluxo à 45°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.
- Figura 4.12 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, 54 fluxo à 67.5°, (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*
- Figura 4.13 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, 55 fluxo à 67.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.
- Figura 4.14 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, 57 fluxo à 67.5°, (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*
- Figura 4.15 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, 58 fluxo à 67.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.
- Figura 4.16 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, 60 fluxo à 22.5°, (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*
- Figura 4.17 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, 61 fluxo à 22.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.
- Figura 4.18 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, 63 fluxo à 22.5°, (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*

Figura 4.19	Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, fluxo à 22.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.	64
Figura 4.20	Convecção em um escoamento circular	65
Figura 4.21	Fluxo rotacional, (a) $SUPG$, (b) $SUPG+CAU$, (c) $SUPG+CD$, (d) $SUPG+ASGS$, (e) $SUPG+ETV$, (f) $SUPG+DCDD$.	67
Figura 4.22	Fluxo rotacional, corte transversal	68
Figura 4.23	Fluxo rotacional, Convergência da solução	68
Figura 4.24	Advecção de um platô em um fluido em movimento uni- direcional	69
Figura 4.25	Advecção de um platô em um fluido em movimento uni- direcional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 1. (a) <i>SUPG</i> , (b) <i>SUPG</i> + <i>CAU</i> , (c) <i>SUPG</i> + <i>CD</i> , (d) <i>SUPG</i> + <i>ETV</i> , (e) <i>SUPG</i> + <i>ASGS</i> , (f) <i>SUPG</i> + <i>DCDD</i> .	71
Figura 4.26	Advecção de um platô em um fluido em movimento uni- direcional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 250. (a) <i>SUPG</i> , (b) <i>SUPG</i> + <i>CAU</i> , (c) <i>SUPG</i> + <i>CD</i> , (d) <i>SUPG</i> + <i>ETV</i> , (e) <i>SUPG</i> + <i>ASGS</i> , (f) <i>SUPG</i> + <i>DCDD</i> .	73
Figura 4.27	Advecção de um platô em um fluido em movimento uni- direcional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 501. (a) <i>SUPG</i> , (b) <i>SUPG</i> + <i>CAU</i> , (c) <i>SUPG</i> + <i>CD</i> , (d) <i>SUPG</i> + <i>ETV</i> , (e) <i>SUPG</i> + <i>ASGS</i> , (f) <i>SUPG</i> + <i>DCDD</i> .	75
Figura 4.28	Fluxo movimento unidireccional, perfil avanço no tempo.	78
Figura 4.29	Esquema sem congelamento	80
Figura 4.30	Esquema time-lagging (Tezduyar)	81
Figura 4.31	Esquema time-lagging modificado	83

- Figura 4.32 Platô em movimento diagonal, quadrilâtero bi-linear com 88 integração reduzida, passo de tempo 1; (a)SUPG, ε =0.0; (b)SUPG, ε =1.0; (c)CAU, ε =0.0; (d)CAU, ε =0.05; (e)CD, ε =0.0; (f)CD, ε =0.05; (g)ETV, ε =0.0; (h)ETV, ε =1.0; (i)ASGS, ε =0.0; (j)ASGS, ε =0.05.
- Figura 4.33 Platô em movimento diagonal, quadrilâtero bi-linear com 92 integração reduzida, passo de tempo 29, (a)SUPG, ε =0.0; (b)SUPG, ε =1.0; (c)CAU, ε =0.0; (d)CAU, ε =0.05; (e)CD, ε =0.0; (f)CD, ε =0.05; (g)ETV, ε =0.0; (h)ETV, ε =1.0; (i)ASGS, ε =0.0; (j)ASGS, ε =0.05.
- Figura 4.34 Advecção de uma colina em forma de co-seno em um fluido 93 em rotação
- Figura 4.35 Advecção colina em forma de co-seno de um fluido em 95 rotação, passo de tempo 1. (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*.
- Figura 4.36 Advecção colina em forma de co-seno de um fluido em 97 rotação, passo de tempo 126. (a)*SUPG*, (b)*SUPG*+*CAU*, (c)*SUPG*+*CD*, (d)*SUPG*+*ETV*, (e)*SUPG*+*ASGS*, (f)*SUPG*+*DCDD*.

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 4.1	Comparação esquemas de congelamento para o OCD-CAU	83
Tabela 4.2	Comparação esquemas de congelamento para o OCD-CD	83
Tabela 4.3	Comparação esquemas de congelamento para o OCD-ASGS	83
Tabela 4.4	Comparação esquemas de congelamento para o OCD- DCDD	84

Capítulo 1

Introdução

O Método dos Elementos Finitos, *MEF*, é uma ferramenta numérica desenvolvida para resolver, de maneira aproximada, problemas de valores de contorno (*Boundary Value Problems, BVP*) e problemas de valor inicial que envolvem equações diferenciais em derivadas parciais. O *MEF* foi implementado, inicialmente, para a resolução de problemas da mecânica dos sólidos e foi tanto o êxito desta metodologia nesta área, que rapidamente foram desenvolvidas novas aplicações num contexto mais geral da mecânica dos fluidos computacional (por exemplo, dispersão de poluentes no ar e na água, simulação de reservatórios, injeção de traçadores, fluxo em meios porosos, irrigação, drenagem), eletromagnetismo, transferência de calor, entre outras.

Na discretização espacial, empregada na mecânica dos sólidos, é utilizado o método de *Galerkin*, assim como também nos problemas predominantemente difusivos. Contudo, na presença do termo convectivo, esta formulação não é satisfatória, apresentando oscilações espúrias que não pertencem ao problema físico, mas devidas à falta de estabilidade da formulação empregada. De fato, a aplicação do método de *Galerkin* a problemas de advecção-difusão é muito semelhante ao uso de diferenças finitas centradas, o que, quando a advecção é dominante conduz a soluções completamente não físicas. O remédio clássico de diferenças finitas é tratar-se o termo advectivo por uma aproximação de primeira ordem com um ponto à montante. Os primeiros esforços para se obter soluções fisicamente aceitáveis com o métodos dos elementos finitos concentraram-se em mimetizar de alguma forma os efeitos da discretização

com um ponto à montante. Porém verificou-se que este enfoque não era variacionalmente consistente e pouco preciso. Para maiores detalhes sobre a evolução dos métodos de elementos finitos para problemas predominantemente convectivos, veja por exemplo, *Sampaio* e *Coutinho* [8].

Dentre as formulações de estabilização de elementos finitos variacionalmente consistentes desenvolvidas na busca de suprimir essas oscilações temos: *Streamline/Upwind Petrov-Galerkin, SUPG* [1] e *Galerkin Least-Squares, GLS* [2]. A formulação seguida neste trabalho é a *SUPG*, onde a correção introduzida atua na direção das linhas de corrente, conseguindo diminuir apreciavelmente as oscilações apresentadas na formulação original de *Galerkin*. Porém, continuam aparecendo oscilações espúrias nas direções perpendiculares às linhas de corrente e na vizinhança das camadas limite devido à presença de fortes gradientes.

Como alternativa de controlar essas oscilações, foram e estão sendo desenvolvidas pesquisas na implementação de um termo adicional nas formulações de estabilização. Esse termo é o *Operador de Captura de Descontinuidades*, que, transforma em não-linear a formulação *SUPG*.

As primeiras abordagens, como veremos adiante, na determinação de uma formulação tipo *OCD* foram dadas por *Hughes* e *Mizukami* [4] em *1985* e *Hughes*, *Mallet* e *Mizukami* [5] em 1986. Nestes artigos mostra-se que a direção das linhas de corrente nem sempre é a mais apropriada. A idéia básica dos diferentes métodos que vem sendo desenvolvidos é introduzir uma correção numa direção apropriada.

O trabalho apresentado por *Galeão* e *Do Carmo* [6] em *1988* utiliza a idéia de uma "*Direção aproximada à montante*" para desenvolver o método *CAU* (*Consistent Approximate Upwind*), utilizado com sucesso para resolução de problemas de transporte de uma grandeza escalar apresentando boas características de estabilidade, mas quando na presença de uma solução suave observa-se uma difusão transversal não desejada. Foram desenvolvidas duas variações deste método que contornassem a desvantagem apresentada: *VCAU* (*Variational CAU*) e *CCAU* (*Controle CAU*)[23], que incorporam uma

modificação do parâmetro upwind no primeiro e uma função de retroalimentação que controla o termo de perturbação de acordo com a regularidade apresentada pela solução aproximada, no segundo. Codina [7] em 1993, propõe um método que mantém inalterada a correção na direção das linhas de corrente e modifica unicamente a difusão transversal (crosswind diffusion) nessa direção. Sampaio e Coutinho [8] em 2001 apresentam uma formulação que leva a uma derivação imediata do OCD, e que não precisa do termo adicional, que pode ser facilmente adicionada a diferentes formulações, tais como, Lax-Wendroff, Taylor-Galerkin e Least-Squares. Nesse mesmo ano, é publicado o trabalho de Juanes e Patzek [9] que utilizam a formulação multiescala, proposta por *Hughes* [10], para resolver o problema de transporte aplicando-a ao contexto da indústria do petróleo. Tezduyar [3,11-13] apresenta uma nova formulação na determinação do termo OCD. É originalmente desenvolvida para problemas onde o contorno muda no tempo (interação fluido-estrutura, por exemplo) e baseada nas formulações estabilizadas: SUPG, Galerkin Least Squares (GLS) e Presure-Stabilizing/Petrov-Galerkin (PSPG). Mais recentemente, em 2003, Do Carmo e Alvarez [28] desenvolveram um novo método onde a idéia principal é resolver os problemas apresentados pelas formulações SUPG perto da camada limite e CAU, com a queda na precisão em problemas com solução suave, mediante a modificação da função peso original da formulação SUPG. Outros estudos vem sendo desenvolvidos para caracterizar oscilações espúrias na equação de transporte [29-30]. Neste trabalho vamos nos restringir a examinar os OCD de Galeão e Do Carmo, Codina, Sampaio e Coutinho, Juanes e Patzek, e Tezduyar.

Estudou-se uma série de exemplos propostos na literatura, para comparar os resultados antes e depois da implementação dos diferentes tipos de *OCD*. Todos os operadores foram implementados em um único programa e são usados para a resolução dos problemas escalar de advecção – difusão em regimes estacionário e transiente, seguindo a implementação *SUPG* [14]. A resolução do sistema de equações resultante é feito mediante o algoritmo *GMRES* [15] com pré-condicionamento elemento-por-elemento Gauss-Seidel. A implementação dos diferentes operadores foi feita utilizando dois tipos diferentes de elementos, o triângulo linear e o quadrilátero bi-linear com

3

integração reduzida, seguindo a metodologia proposta por *Dias* [16] e *Dias* e *Coutinho* [17].

A formulação *SUPG* acrescida com o termo *OCD* transforma o sistema de equações lineares num sistema não-linear. Foi utilizado um esquema tipo iterações sucessivas para a solução do problema não-linear resultante. Para a integração no tempo, na formulação transiente, segue-se o esquema preditor multicorretor de [*27*]

O restante desta tese é organizado da seguinte forma:

No capítulo 2, apresenta-se a formulação *SUPG* para o problema de transporte, também conhecida como equação de advecção – difusão. São desenvolvidas as matrizes ao nível do elemento tanto para os elementos triangular linear quanto para o quadrilátero bi-linear utilizando uma técnica de integração reduzida. Por último se apresenta uma breve descrição do algoritmo implícito para integração no tempo.

No capítulo 3, faz-se uma descrição detalhada dos diferentes *OCD's* pesquisados, apresentando-se a respectiva formulação matricial.

No capítulo 4, mostram-se vários exemplos de avaliação das formulações estudadas, tanto para o regime estacionário quanto para o transiente, utilizando os elementos triangular linear e quadrilátero bi-linear com integração reduzida. São feitas comparações da convergência e precisão das soluções obtidas em diversos casos testes.

No capítulo 5, tem-se as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Formulação SUPG para a Equação de Transporte

Neste capítulo apresenta-se a formulação *Streamline–Upwind / Petrov–Galerkin, SUPG*, para a equação de transporte em regime transiente e em duas dimensões. São desenvolvidas as matrizes de elemento para o triângulo linear e para o elemento quadrilátero bi-linear com integração reduzida. Por último, é apresentado o algoritmo implícito para a integração no tempo.

2.1 Formulação SUPG semi-discreta

Seja $\Omega \subset \Re^2$, é a dimensão do espaço, com contorno Γ , em um intervalo de tempo [0, T], $\mathbf{x} = (x, y)$, um ponto genérico em Ω e $\mathbf{n} = \{n_i\}$ a direção normal externa à Γ . Suponha que o contorno Γ seja tal que, $\overline{\Gamma_g \cup \Gamma_q} = \Gamma$, $\overline{\Gamma_g \cap \Gamma_q} = 0$. A equação diferencial que governa o problema de transporte é dada por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \phi = f \quad \text{em } \Omega \times [0, T]$$
(2.1)

A equação (2.1) é submetida às condições de contorno essenciais e naturais:

 $\phi = g \qquad \text{em } \Gamma_{\rm g} \tag{2.2}$

 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} \nabla \phi = q \quad \text{em } \Gamma_{q} \tag{2.3}$

e condição inicial:

 $\phi(\mathbf{x},0) = \phi_0(\mathbf{x}) \tag{2.4}$

onde *g* e *q* são funções conhecidas, $\Gamma_g \in \Gamma_q$ são subconjuntos complementares de Γ , ϕ é a função a ser conhecida (temperatura, concentração, etc.), β é o campo de velocidades conhecido e variável no tempo, isto é,

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, t) \tag{2.5}$$

Além disso, assume-se que o campo de velocidades é solenoidal, isto é, $\nabla \cdot \mathbf{\beta} = 0$. O tensor **D**, é de segunda ordem e contém os coeficientes de difusão do material. Assume-se que o meio é anisotrópico e heterogêneo, isto é,

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} \\ k_{yx} & k_{yy} \end{bmatrix}$$
(2.6)

Adotando-se a hipótese de material ortotrópico, o tensor D fica definido como,

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0\\ 0 & k_{yy} \end{bmatrix}$$
(2.7)

o termo fonte conhecido é dado por f.

2.2 Formulação Variacional

A equação (2.1) está na sua forma forte. Para obter a formulação variacional equivalente define-se duas classes de funções: a primeira é a correspondente às funções teste, ϕ , que devem satisfazer as condições de contorno e uma outra classe dada pelas funções peso, w, que satisfazem condições nulas no contorno. Então o problema fica enunciado como: Achar $\phi \in S$ e $w \in V$ tal que:

$$S = \left\{ \phi \mid \phi \in H^1, \phi = g(t) \quad em \quad \Gamma \times [0, T] \right\}$$

$$V = \left\{ w \mid w \in H^1, w = 0 \quad em \quad \Gamma \right\}$$

(2.8)

A formulação variacional tipo *Galerkin* é obtida multiplicando a forma forte por uma função peso $w \in V$ e integrando-se, resultando na seguinte equação,

$$\int_{\Omega} w \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \beta \nabla \phi + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \phi) - f \right) d\Omega = 0$$
(2.9)

A formulação *SUPG* com o termo *OCD* para o problema dado pelas equações (2.1–2.4) é:

$$\underbrace{\int_{\Omega} w^{h} L(\phi^{h}) d\Omega}_{Galerkin} + \sum_{e=1}^{Nel} \underbrace{\int_{\Omega^{e}} \tau_{SUPG} \beta \cdot \nabla w^{h} L(\phi^{h}) d\Omega}_{SUPG} + \sum_{e=1}^{Nel} \underbrace{\int_{\Omega^{e}} \delta_{OCD} \nabla w^{h} \nabla \phi^{h} d\Omega}_{OCD} = 0 \quad (2.10)$$

Nesta equação, a primeira parcela corresponde à formulação de *Galerkin*, a segunda à formulação *SUPG* e a terceira ao *Operador de Captura de Descontinuidades*, com:

$$L(\phi^{h}) = \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} + \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi^{h} + \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \phi) - f$$
(2.11)

sendo o resíduo no interior do elemento. O super-índice "h" refere-se à associação de *S* e *V* a uma malha de elementos finitos.

O parâmetro de estabilização SUPG é dado por:

$$\tau_{SUPG} = \frac{1}{2} \frac{\alpha_{up} h^e}{\|\boldsymbol{\beta}^e\|}$$
(2.12)

onde

$$\alpha_{up} = \min\left(\frac{Pe^e}{3}, 1\right) \tag{2.13}$$

$$Pe^{e} = \frac{\left|\boldsymbol{\beta}^{e}\right|^{3} h^{e}}{\boldsymbol{\beta}^{e^{T}} \mathbf{D} \boldsymbol{\beta}^{e}}$$
(2.14)

$$h^e = \sqrt{2A} \tag{2.15}$$

onde α_{up} é o parâmetro de *upwind*, h^e é o tamanho característico do elemento, Pe^e é o número de *Peclet* do elemento, que é uma quantidade adimensional que mede a importância da advecção relativa à difusão.

O parâmetro δ_{OCD} , é chamado parâmetro do *Operador de Captura de Descontinuidades*, *OCD*. Este parâmetro torna não–linear a formulação resultante, como veremos adiante.

Note que (2.10) é uma formulação variacional consistente, onde à medida que $h \rightarrow 0$, a solução aproximada tende à solução do problema.

2.3 Formulação Matricial do Elemento Triangular Linear

A seguir apresentam-se a discretização espacial da formulação *SUPG* e a determinação das matrizes para o elemento triangular linear.

2.3.1 Discretização

A solução ϕ^h e a função de peso w^h são aproximadas pelas seguintes expressões:

$$\phi^{h} = \sum_{i=1}^{Nnos} N_{i}(\mathbf{x}) d_{i}(\mathbf{t})$$
(2.16)

$$w^{h} = \sum_{i=1}^{N_{nos}} N_{i}(\mathbf{x}) c_{i}$$
(2.17)

onde Nnos é o número de nós da malha de elementos finitos e N é a matriz contendo as funções de interpolação para o elemento, dependentes somente de x, dada por:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 \end{bmatrix}$$
(2.18)

Substituindo-se a aproximação de elementos finitos dada por (2.10) em (2.16) e (2.17) obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias não-linear, representado como:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{d}} + \mathbf{K}(\mathbf{d})\mathbf{d} = \mathbf{F}$$
(2.19)

onde M, é a matriz de massa, K é chamada de "*Matriz de Rigidez*" em analogia à mecânica dos sólidos, \dot{d} é um vetor dependente somente do tempo. As matrizes M e K são construídas através do "*assembling*", representados por **A**, de todos os elementos da malha de elementos finitos. As matrizes resultantes são dadas por:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_{G} + \mathbf{M}_{PG}$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_{DG} + \mathbf{K}_{CG} + \mathbf{K}_{DPG} + \mathbf{K}_{OCD}$$
(2.20)
$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{G} + \mathbf{F}_{PG}$$

onde os sub-índices *G*, *PG* e *OCD* são correspondentes respectivamente às contribuições de *Galerkin*, *Petrov-Galerkin* e do *Operador de Captura de Descontinuidades*. Já os sub-índices *D* e *C* são correspondentes às parcelas da *Difusão* e *Convecção*, respectivamente.

2.3.2 Determinação das matrizes ao nível do elemento

- Matriz de massa de Galerkin:

$$\mathbf{M}_{G} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{m}_{G}^{e}$$
(2.21)

$$\mathbf{m}_{G}^{e} = \left[m_{G}^{e} \right]_{ij} \tag{2.22}$$

$$\left[m_{G}^{e}\right]_{ij} = \int_{\Omega^{e}} w^{h} \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} d\Omega = \int_{\Omega^{e}} N_{i} N_{j} d\Omega \approx \sum_{l=1}^{n_{\text{int}}} \left(N_{i} N_{j}\right)_{l} j_{l} w_{l}$$
(2.23)

$$\mathbf{m}_{G}^{e} = \frac{A}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$
(2.24)

onde *j* é o jacobiano do elemento dado por:

$$j = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi_1} & \frac{\partial y}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x}{\partial \xi_2} & \frac{\partial y}{\partial \xi_2} \end{bmatrix}$$
(2.25)

- Matriz de difusão de *Galerkin*:

$$\mathbf{K}_{DG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}^e \tag{2.26}$$

$$\mathbf{k}_{e} = \int_{\Omega^{e}} \mathbf{B}^{\mathrm{T}} \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega = \int_{\Omega^{e}} \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_{11} & 0 \\ 0 & k_{22} \end{bmatrix} \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} d\Omega \quad (2.27)$$

onde:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial y} \end{bmatrix}$$
(2.28)

é o operador gradiente discreto.

- Matriz de convecção de Galerkin:

$$\mathbf{K}_{CG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}_{CG}^{e}$$
(2.29)

$$\mathbf{k}_{CG}^{e} = \left[k_{CG}^{e}\right]_{ij} \tag{2.30}$$

$$\begin{bmatrix} k_{CG}^{e} \end{bmatrix}_{ij} = \int_{\Omega^{e}} w^{h} \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi^{h} d\Omega$$

=
$$\int_{\Omega^{e}} N_{i} \left(\beta_{x} \frac{\partial N_{j}}{\partial x} + \beta_{y} \frac{\partial N_{j}}{\partial y} \right) d\Omega$$
 (2.31)

Aproximando a integral por integração numérica, se obtém:

$$\left[k_{CG}^{e}\right]_{j} \approx \sum_{l} \left\{ Ni \left(\beta_{x} \frac{\partial N_{j}}{\partial x} + \beta_{y} \frac{\partial N_{j}}{\partial y}\right) \right\}_{l} j_{l} w_{l}$$
(2.32)

que, integrando-se com um único ponto resulta na matriz:

$$\mathbf{k}_{CG}^{e} = \frac{\beta_{x}^{b}}{6} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ y_{23} & y_{31} & y_{12} \end{bmatrix} + \frac{\beta_{y}^{b}}{6} \begin{bmatrix} x_{32} & x_{13} & x_{21} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix}$$
(2.33)

- Matriz de massa de Petrov-Galerkin:

$$\mathbf{M}_{PG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{m}_{PG}^{e}$$
(2.34)

$$\mathbf{m}_{PG}^{e} = \left[m_{PG}^{e}\right]_{j} \tag{2.35}$$

$$\begin{bmatrix} m_{PG}^{e} \end{bmatrix}_{j} = \int_{\Omega^{e}} \tau \frac{\mathbf{\beta}}{6} \cdot \nabla w^{h} \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} d\Omega$$

$$= \int_{\Omega^{e}} \tau \left(\beta_{x} \frac{\partial w^{h}}{\partial x} + \beta_{y} \frac{\partial w^{h}}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} d\Omega$$

$$= \int_{\Omega^{e}} \tau \left(\beta_{x} \frac{\partial N_{i}}{\partial x} + \beta_{y} \frac{\partial N_{i}}{\partial y} \right) N_{j} d\Omega$$
 (2.36)

Aproximando a integral por integração numérica, se obtém:

$$\left[\mathbf{m}_{PG}^{e}\right]_{j} \approx \sum_{l} \left\{ \tau \left(\beta_{x} \frac{\partial N_{i}}{\partial x} + \beta_{y} \frac{\partial N_{i}}{\partial y} \right) N_{j} \right\}_{l} j_{l} w_{l}$$
(2.37)

que, avaliada com um ponto resulta na matriz,

$$\mathbf{m}_{PG}^{e} = \frac{\tau^{b} \beta_{x}^{b}}{6} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{23} & y_{23} \\ y_{31} & y_{31} & y_{31} \\ y_{12} & y_{12} & y_{12} \end{bmatrix} + \frac{\tau^{b} \beta_{y}^{b}}{6} \begin{bmatrix} x_{32} & x_{32} & x_{32} \\ x_{13} & x_{13} & x_{13} \\ x_{21} & x_{21} & x_{21} \end{bmatrix}$$
(2.38)

- Matriz de difusão de Petrov-Galerkin:

$$\mathbf{K}_{DPG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}_{DPG}^{e}$$
(2.39)

$$\mathbf{k}_{DPG}^{e} = \left[k_{DPG}^{e}\right]_{ij} = \int_{\Omega^{e}} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla w^{h} \mathbf{D} \nabla^{2} \phi^{2} d\Omega$$
(2.40)

Para elementos lineares o Laplaciano da solução é nulo, portanto:

$$\mathbf{k}_{DPG}^{e} = \mathbf{0} \tag{2.41}$$

- Matriz de convecção de Petrov-Galerkin:

$$\mathbf{K}_{CPG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}_{CPG}^{e}$$
(2.42)

$$\mathbf{k}_{CPG}^{e} = \left[k_{CPG}^{e}\right]_{ij} = \int_{\Omega^{e}} \tau^{b} \mathbf{\beta} \cdot \nabla w^{h} \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi^{h} d\Omega$$
(2.43)

$$\mathbf{k}_{CPG}^{e} = \tau^{b} \mathbf{B}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \beta_{x}^{b} \beta_{x}^{b} & \beta_{x}^{b} \beta_{y}^{b} \\ \beta_{y}^{b} \beta_{x}^{b} & \beta_{y}^{b} \beta_{y}^{b} \end{bmatrix} \mathbf{B} A$$
(2.44)

As matrizes correspondentes à parcela *OCD* serão estudadas no capítulo seguinte.

2.4 Elemento Quadrilátero Bi-Linear com Integração Reduzida

2.4.1 Preliminares

O custo computacional para avaliar as integrais resultantes da formulação *SUPG+OCD* é proporcional ao número de pontos de integração utilizados na regra de integração numérica escolhida, geralmente a *quadratura de Gauss*. Até agora, a formulação foi feita sobre o elemento triangular linear e somente precisamos de um ponto de integração, no baricentro. Para avaliar as integrais ao nível do elemento utilizando um elemento quadrilátero bi-linear, são necessários quatro pontos de integração por elemento. Utilizando uma técnica de integração reduzida somente precisa-se de um ponto e o ganho computacional é direto. No entanto, esse tipo de técnica apresenta oscilações espúrias indesejáveis na solução, devido ao fato de que o gradiente discreto não consegue ter controle sobre estes modos pela deficiência de posto das matrizes do elemento. Por isto, é preciso utilizar uma técnica que controle estas oscilações. Na tese de *Dias* [16] e no trabalho de *Coutinho* e *Dias* [17], utilizou-se um principio variacional semelhante àquele da mecânica dos sólidos [26].

As funções de interpolação para o elemento quadrilátero bi-linear são dadas por:

$$N_{a} = \frac{1}{4} (1 + \eta \eta_{a}) (1 + \xi \xi_{a}), a = 1, 2, 3, 4$$
(2.45)

Onde $-1 \le \xi \le 1, -1 \le \eta \le 1$, conforme mostrado na figura 2.1.



Figura 2.1: Elemento quadrilátero bi-linear. Plano físico e plano de referência.

2.4.2 Matrizes de elemento quadrilátero

As matrizes integradas no ponto ($\xi = \eta = 0$) apresentam deficiência de posto o que pode ocasionar oscilações espúrias, ou também modos hourglass [26]. Então, torna-se necessário utilizarse uma técnica que consiga corrigir os efeitos dessas oscilações. Na literatura aparecem varias propostas para contornar o problema e neste trabalho segue-se o esquema apresentado em [16, 17] para obter os termos de estabilização a serem acrescentados mas matrizes do elemento.

Agindo do mesmo modo que no caso do elemento triangular linear, mas considerando as funcões de interpolação própias do elemento quadrilátero bilinear daddas pela equação (2.45), as parcelas de K e M em (2.20) avaliadas através da quadratura de *Gauss* com um ponto de itnegração no baricentro ($\xi = \eta = 0$), ficam:

$$\mathbf{M}_{G}^{e} = \mathbf{M}_{G}^{e} + \mathbf{M}_{G}^{e(stab)}$$

$$\mathbf{M}_{PG}^{e} = \mathbf{M}_{PG}^{e} + \mathbf{M}_{PG}^{e(stab)}$$

$$\mathbf{K}_{DG}^{e} = \mathbf{K}_{DG}^{e} + \mathbf{K}_{DG}^{e(stab)}$$

$$\mathbf{K}_{CG}^{e} = \mathbf{K}_{CG}^{e} + \mathbf{K}_{CG}^{e(stab)}$$

$$\mathbf{K}_{CPG}^{e} = \mathbf{K}_{CPG}^{e} + \mathbf{K}_{CPG}^{e(stab)}$$

$$\mathbf{K}_{OCD}^{e} = \mathbf{K}_{OCD}^{e} + \mathbf{K}_{OCD}^{e(stab)}$$
(2.46)

onde os sub-índices *CG*, *CPG* e *OCD*, tem o mesmo significado que os apresentados na equação (2.20). O super-índice "*stab*" refere-se aos termos de estabilização.

- Matriz de Massa de Galerkin

$$\mathbf{M}_{G} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{m}_{G}^{e}$$

$$\left[m_{G}^{e}\right]_{ab} = \int_{\Omega^{e}} N_{a} N_{b} d\Omega \qquad (2.47)$$

$$\left[\mathbf{m}_{G}^{e}\right] = \int_{\Omega^{e}} \mathbf{B} \mathbf{B}^{\mathrm{T}} = A \mathbf{b}_{a} \mathbf{b}_{b}^{\mathrm{T}}, a, b = 1, ..., 4$$

- Matriz de Massa de Petrov – Galerkin

$$\mathbf{M}_{PG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{m}_{PG}^{e}$$

$$\left[m_{PG}^{e}\right]_{ab} = \int_{\Omega^{e}} \tau \nabla N_{a} \cdot \mathbf{\beta} N_{b} d\Omega \qquad (2.48)$$

$$\left[\mathbf{m}_{PG}^{e}\right]_{ab} = \frac{A}{4} \mathbf{t} \left(\beta_{i} \mathbf{b}_{a}^{T}\right), a, b = 1, ..., 4, i = 1, 2$$

- Matriz de difusão de Galerkin

$$\mathbf{K}_{DG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}^e$$

$$\begin{bmatrix} k_{DG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = \int_{\Omega^{e}} N_{b,j} k_{ij} N_{a,i} d\Omega$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{DG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = \int_{\Omega^{e}} \mathbf{B} \mathbf{D} \mathbf{B}^{\mathrm{T}} = A \mathbf{b}_{a} \mathbf{D} \mathbf{b}_{b}^{\mathrm{T}} \ a, \ b = 1, ..., 4, \ i = 1, 2$$

$$(2.49)$$

- Matriz de convecção de Galerkin

$$\mathbf{K}_{CG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}_{CG}^{e}$$

$$\begin{bmatrix} k_{CG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = \int_{\Omega^{e}} w^{h} \mathbf{\beta} \cdot \nabla u^{h} d\Omega = \int_{\Omega^{e}} N_{a} \beta_{i} \nabla N_{b} d\Omega \qquad (2.50)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{CG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = \frac{A}{4} \mathbf{t} \left(\beta_{i} \mathbf{b}_{a}^{\mathrm{T}} \right)$$

- Matriz de convecção de Petrov - Galerkin

$$\mathbf{K}_{CPG} = \bigwedge_{e=1}^{nel} \mathbf{k}_{CPG}^{e}$$

$$\begin{bmatrix} k_{CPG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = \int_{\Omega^{e}} \tau \mathbf{\beta}_{j} \cdot \nabla w^{h} \mathbf{\beta}_{i} \cdot \nabla u^{h} d\Omega$$

$$= \int_{\Omega^{e}} \tau N_{b,j} \mathbf{\beta}_{j} \otimes \mathbf{\beta}_{i} N_{a,i} d\Omega$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{CPG}^{e} \end{bmatrix}_{ab} = A \tau \left(\mathbf{b}_{j} \mathbf{\beta}_{j} \mathbf{\beta}_{i} \mathbf{b}_{i}^{\mathrm{T}} \right)$$
(2.51)

- Matriz de estabilização da difusão

$$\left[\mathbf{K}_{DG}^{e}\right]_{j}^{(stab)} = \gamma \mathbf{D} \boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{T}} \int_{\Omega^{e}} \boldsymbol{\vartheta}_{,i} \boldsymbol{\vartheta}_{,i} d\Omega$$
(2.52)

- Matriz de estabilização de advecção

$$\left[\mathbf{K}_{CG}^{e}\right]_{jj}^{(stab)} = b_{j}\beta_{i}\boldsymbol{\gamma}^{T}\int_{\Omega^{e}}\boldsymbol{x}_{,j}\boldsymbol{\vartheta}_{,i}d\boldsymbol{\Omega}$$
(2.53)

- Matriz de estabilização da advecção de Petrov- Galerkin

$$\left[\mathbf{K}_{CPG}^{e}\right]_{j}^{(stab)} = \tau \gamma \boldsymbol{\beta} \otimes \boldsymbol{\beta} \gamma^{\mathrm{T}} \int_{\Omega^{e}} \boldsymbol{\vartheta}_{,i} \boldsymbol{\vartheta}_{,i} d\Omega$$
(2.54)

Nas equações (2.47 – 2.53), *i*, *j* = 1,2 em $\xi = \eta = 0$, *A* é a área do elemento, dada por:

$$A = \frac{1}{2} \left(x_{31} y_{42} - x_{24} y_{31} \right) \tag{2.55}$$

As parcelas $\mathbf{b}_1 \in \mathbf{b}_2$, são as parcelas de $\nabla N = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 \end{bmatrix}$, em $\xi = \eta = 0$, isto é,

$$\mathbf{b}_{1} = \frac{1}{2A} \begin{pmatrix} y_{24} & y_{31} & y_{42} & y_{13} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$
(2.56)

$$\mathbf{b}_{2} = \frac{1}{2A} \begin{pmatrix} x_{42} & x_{13} & x_{24} & x_{31} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$
(2.57)

O vetor t representa o movimento de corpo rígido, definido como,

$$\mathbf{t} = (1 \ 1 \ 1 \ 1)^{\mathrm{T}}$$
(2.58)

Pode-se verificar as seguintes propriedades de ortogonalização:

$$\mathbf{b}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{t} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{b}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{h} = \mathbf{0}, \ i = 1,2$$

$$\mathbf{t}^{\mathrm{T}} \mathbf{h} = \mathbf{0}$$

(2.59)

Sendo h é o vetor dos modos hourglass, definido como,

$$\mathbf{h} = \{1 \ -1 \ 1 \ -1\}^{\mathrm{T}}$$
(2.60)

onde o vetor γ é um vetor adicionado ao operador gradiente discreto de modo que a matriz de rigidez, **K**^{*e*}, passará a ter posto igual a 3, assim,

$$\overline{\mathbf{B}}^{\mathrm{T}} = \left\{ b_{1}^{\mathrm{T}} \quad b_{2}^{\mathrm{T}} \quad \boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{T}} \right\}$$
(2.61)

A construção do vetor γ é feita mediante uma combinação linear dos vetores \mathbf{b}_i , t e h.

A função \mathcal{G} é dada por,

$$\mathcal{G} = \frac{1}{4} A \xi \eta \tag{2.62}$$

Nas equações (2.52) a (2.54), as integrais constituem os chamados parâmetros de estabilização,

$$\overline{\varepsilon}_1 = \varepsilon \int_{\Omega^c} x_j \vartheta_{,i} d\Omega$$
, $i,j = 1,2$, para advecção de *Galerkin* (2.63)

$$\overline{\varepsilon}_{2} = \varepsilon \int_{\Omega^{\varepsilon}} \vartheta_{,i} \vartheta_{,i} d\Omega, \quad i,j = 1,2, \text{ para os demais casos}$$
(2.64)

O parâmetro ε é o parâmetro de estabilização dos modos *hourglass*, e é utilizado para ajustar a precisão dos resultados. Quando $\varepsilon = 1$, \mathbf{K}^{e} será exata para malhas de elementos retangulares e paralelogramos.

Uma descrição mais detalhada desta implementação, assim como as matrizes desenvolvidas termo-a-termo, pode-se encontrar em [16, 17 e 31].

2.5 Integração no Tempo

Para resolver a equação (2.19) foi utilizado o algoritmo implícito preditor multicorretor, como apresentado por *Hughes* [27]. A formulação matricial resulta em um sistema não simétrico de equações em cada passo de tempo que é resolvido mediante o algoritmo *GMRES* com precondicionamento à esquerda [14, 15].

De forma geral, podemos enunciar o problema na seguinte forma: dada uma equação semi-discreta

$$\mathbf{M}\mathbf{v} + \mathbf{K}\mathbf{d} = \mathbf{F} \tag{2.65}$$

com condições iniciais,

$$\mathbf{d}(0) = \mathbf{d}_0; \ \mathbf{v}(0) = \dot{\mathbf{d}}_0 \tag{2.66}$$

o esquema de solução é dado pelas seguintes equações:

$$\mathbf{Mv}_{n+1} + \mathbf{Kd}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} \tag{2.67}$$

$$\mathbf{d}_{n+1} = \mathbf{d}_n + \Delta t \mathbf{v}_{n+\theta} \tag{2.68}$$

$$\mathbf{v}_{n+\alpha} = (1-\theta)\mathbf{v}_n + \theta \mathbf{v}_{n+1} \tag{2.69}$$

onde n+1 é o passo de tempo atual, n o passo de tempo anterior, $\mathbf{d}_n \in \mathbf{v}_n$ são as aproximações de $\mathbf{u} \in \dot{\mathbf{u}}$, θ é um parâmetro dentro do intervalo [0,1], Δt é o passo de tempo e \mathbf{F}_{n+1} o vetor dos termos fonte.

O algoritmo assim descrito pertence à família da regra trapezoidal generalizada, cujos membros são diferenciados pela escolha do parâmetro θ . Se $\theta = \frac{1}{2}$, o método é equivalente ao método da *regra trapezoidal* ou *Crank*-*Nicholson*. Se $\theta = 1$, o método é equivalente ao método de diferenças finitas para atrás.

O avanço no tempo pode ser implementado na forma preditor – multicorretor onde o valor preditor é definido como:

$$\widetilde{\mathbf{d}}_{n+1} = \mathbf{d}_n + (1 - \theta) \Delta t \mathbf{v}_n \tag{2.70}$$

$$\mathbf{d}_{n+1}^{(i)} = \widetilde{\mathbf{d}}_{n+1} \tag{2.71}$$

Avaliando os resíduos

$$\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{F}_{n+1} - \left(\mathbf{M}^{e} \mathbf{v}^{e} + \mathbf{K}^{e} \mathbf{d}^{e}\right)^{(i)}$$
(2.72)

Obtendo-se a solução Δv_{n+1} do sistema de equações efetivo,

$$\Delta \mathbf{v}_{n+1}^{(i)} = (\mathbf{M} *)^{-1} \Delta \mathbf{F}_{n+1}^{(i)}$$
(2.73)

onde,

$$\mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \theta \Delta t \mathbf{K} \tag{2.74}$$

É chamada de matriz de massa efetiva, que é esparsa e não simétrica.

Uma vez conhecido o valor de v_{n+1} pode-se corrigir o valor de d_{n+1} assim:

$$\mathbf{v}_{n+1}^{(i+1)} = \mathbf{v}_{n+1}^{(i)} + \Delta \mathbf{v}_{n+1}^{(i)}$$
(2.75)

$$\mathbf{d}_{n+1}^{(i+1)} = \mathbf{d}_{n+1}^{(i)} + \theta \Delta t \mathbf{v}_{n+1}^{(i)}$$
(2.76)

CAPÍTULO 3

Formulação dos Operadores de Captura de Descontinuidades

Neste capítulo apresentam-se várias formulações propostas na literatura para contornar o problema da aparição de oscilações espúrias em direções que não são as direções das linhas de corrente. Dentre os estudos feitos neste problema, optou-se por examinar os esquemas propostos por *Galeão* e *Do Carmo* [6], *Codina* [7], *Sampaio* e *Coutinho* [8], *Juanes* e *Patzek* [9], e *Tezduyar* [3,11–13] por serem os mais utilizados e referenciados na literatura pesquisada.

3.1 Formulação Geral

Como enunciado no capítulo 1, é sabido que a formulação de elementos finitos tipo *SUPG* aplicada à equação de convecção-difusão não consegue atingir satisfatoriamente a solução naquelas regiões de forte gradiente. Oscilações espúrias aparecem nas vizinhanças da ocorrência de frentes ou fortes descontinuidades. Isto acontece devido ao fato que o método *SUPG* não satisfaz o *princípio de máximo discreto* [4]. Nos trabalhos de *Hughes* e *Mizukami* [4] e *Hughes*, *Mallet* e *Mizukami* [5] demonstrou-se que a direção a montante (*upwind*) das linhas de corrente (*streamlines*) não é sempre a mais apropriada para a estabilização das oscilações em regiões de forte gradiente da solução. Mostra-se um primeiro estudo deste problema e apresenta-se uma formulação tipo *Petrov–Galerkin* que é conservativa e satisfaz o *principio de máximo discreto* [32].

O *principio de máximo discreto*, assegura a monotonicidade da solução aproximada nas vizinhanças das regiões de forte gradiente. Um método

numérico é *monótono* se a solução numérica para todo passo de tempo retém o sinal do passo de tempo prévio em todos os nós da malha espacial. A formulação *SUPG* não é um método monótono. O teorema de *Godunov* estabelece que um método linear que preserva a monotonicidade é, no máximo, de primeira ordem de precisão [4]. Com tudo, a idéia básica de um método *OCD* é de aumentar a estabilidade da solução nas vizinhanças de forte gradiente da solução.

Retomando a equação de transporte (2.10) na sua forma variacional,

$$\underbrace{\int_{\Omega} w^{h} L(\phi^{h}) d\Omega}_{Galerkin} + \sum_{e=1}^{Nel} \underbrace{\int_{\Omega^{e}} \tau \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla w^{h} L(\phi^{h}) d\Omega}_{SUPG} + \sum_{e=1}^{Nel} \underbrace{\int_{\Omega^{e}} \delta_{OCD} \nabla w^{h} \nabla \phi^{h} d\Omega}_{OCD} = 0 \quad (3.1)$$

a parcela que ainda não foi definida é a terceira e que corresponde ao termo do *Operador de Captura de Descontinuidades*, *OCD*.

A metodologia proposta por *Hughes*, *Mallet* e *Mizukami* [5] leva em conta a inclusão de um vetor v que é a projeção de β na direção $\nabla \phi$:

$$\mathbf{v} = \begin{cases} \frac{\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \phi}{\left| \nabla \phi \right|^2} \nabla \phi & se \quad \nabla \phi \neq 0\\ \boldsymbol{\beta} & se \quad \nabla \phi = 0 \end{cases}$$
(3.2)

onde β é o campo de velocidade conhecido e $\nabla \phi$ é o gradiente da solução.

É imediato obter a seguinte relação:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \phi = \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi \tag{3.3}$$

de uma forma mais geral, definindo a direção $\beta_{\prime\prime}$ como:

$$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_{//} + \mathbf{w} \tag{3.4}$$

onde w é perpendicular a $\nabla \phi$, mas arbitrário, pode-se generalizar a projeção (3.3) para:

$$\boldsymbol{\beta}_{\parallel} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi} \tag{3.5}$$

Esquematicamente tem-se



Figura 3.1: Esquema do OCD.

Isto sugere que a direção das linhas de corrente nem sempre é a mais apropriada, mas deixa aberta a possibilidade de construir um novo método que satisfaça o *princípio de máximo discreto* mediante a escolha de uma direção apropriada. Encontrar essa direção não é fácil e varias pesquisas vêm sendo desenvolvidas para encontrar uma formulação que satisfaça os requerimentos do *principio de máximo discreto*. Não existe uma formulação "*melhor*", umas apresentam vantagens sobre as outras em um problema específico, mas não conseguem os mesmos resultados em outros problemas.

Note que o termo *OCD* resulta numa *difusividade artificial* na direção escolhida. A inclusão deste termo torna não-linear a formulação *SUPG*, já que o termo depende do gradiente da solução. Diz-se *artificial* porque o termo não corresponde ao problema físico, mas sim, ao problema numérico. É importante também que o termo *OCD* seja variacionalmente consistente.

3.2 Operador CAU

O operador *CAU* foi formulado por *Galeão* e *Do Carmo* [6], seguindo basicamente o esquema apresentado por [4,5]. A estabilidade na solução consegue-se modificando as funções peso da formulação *SUPG*, que passam a agir na direção do gradiente aproximado. Este termo introduz, de forma consistente, uma difusividade artificial que é proporcional ao resíduo da solução aproximada. O resultado é uma formulação capaz de contornar as oscilações presentes na solução.

O operador *CAU* é definido mediante o tensor:

$$\mathbf{C} = \left(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{//}^{h}\right) \otimes \left(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{//}^{h}\right)$$
(3.6)

onde β_{II} é um campo vetorial auxiliar, cujo objetivo é agir na direção do gradiente aproximado, $\nabla \phi^h$. Sua determinação requer [23]:

- A satisfação da equação de transporte aproximada em cada elemento, isto é:

$$\frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} + \mathbf{\beta}_{//}^{h} \cdot \nabla \phi^{h} - \nabla \mathbf{D} \nabla \phi^{h} - f = 0 , \text{ em cada } \Omega_{e}.$$
(3.7)

- A minimização da quantidade:

$$\left\|\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{\prime\prime}^{h}\right\|_{0,\Omega_{e}}^{2} = \int_{\Omega_{e}} \left(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{\prime\prime}^{h}\right) \cdot \left(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{\prime\prime}^{h}\right) d\Omega$$
(3.8)

Nesta expressão, $\|\cdot\|_{0,\Omega_e}$ representa a norma em $L_2(\Omega_e)$, isto é, o espaço das funções quadrado integráveis com produto interno $(\psi, \chi) = \int_{\Omega} \psi \chi d\Omega$.

Estas condições garantem que se $\phi^h \rightarrow \phi$ quando $h \rightarrow 0$, então, $\beta_{ll}^h \rightarrow \beta$ quando $h \rightarrow 0$ conduzindo ao seguinte resultado:

$$\left(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{//}^{h} \right) = \begin{cases} \frac{L^{h}(\phi^{h})}{|\nabla\phi^{h}|} \frac{\nabla\phi^{h}}{|\nabla\phi^{h}|} & se \quad |\nabla\phi^{h}| \neq 0 \\ \mathbf{0} & se \quad |\nabla\phi^{h}| = 0 \end{cases}$$

$$(3.9)$$
O parâmetro do Operador de Captura de Descontinuidades tipo *CAU*, δ_{CAU} , é dado pela seguinte equação:

$$\delta_{CAU} = \frac{1}{2} \alpha_c h^e \frac{\left| L^h(\phi^h) \right|}{\left\| \nabla \phi^h \right\|}$$
(3.10)

onde

$$\alpha_c = \min\left(\frac{1}{4}Pe_{//}^e, 1\right) \tag{3.11}$$

$$Pe_{\parallel}^{e} = \frac{1}{2}h^{e} \frac{\left\|\boldsymbol{\beta}_{\parallel}^{e}\right\|^{3}}{\left(\boldsymbol{\beta}_{\parallel}^{e}\right)^{T} \mathbf{D}\boldsymbol{\beta}_{\parallel}^{e}}$$
(3.12)

$$\boldsymbol{\beta}_{\prime\prime}^{e} = \frac{\boldsymbol{\beta} \nabla \boldsymbol{\phi}}{\left\| \nabla \boldsymbol{\phi} \right\|^{2}} \nabla \boldsymbol{\phi}$$
(3.13)

onde $\boldsymbol{\beta}_{ll}^{e}$ é a velocidade do elemento na direção paralela ao gradiente da solução, como mostrado na figura 3.1, Pe_{ll} é o número de *Peclet* correspondente à $\boldsymbol{\beta}_{ll}^{e}$ e $\left|L^{h}(\phi^{h})\right|$ é o modulo do resíduo no interior do elemento.

Uma discussão mais completa referente ao OCD-CAU encontra-se em [23].

3.3 Operador CD

Este operador foi proposto por *Codina* [7] e segue o mesmo esquema apresentado nas equações (3.1) e (3.2). No entanto, apresenta uma diferença na escolha da direção apropriada. A idéia principal deste método é a de manter inalterada a difusão na direção das linhas de corrente e modificar unicamente a difusão transversal às linhas de corrente (*crosswind dissipation*).

O terceiro termo na equação (3.1) pode também ser escrito como:

$$\sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} \delta_{OCD} \nabla w^h \cdot \overline{\mathbf{v}}^h \cdot \nabla \phi^h d\Omega$$
(3.14)

onde,

$$\delta_{OCD} = \begin{cases} \frac{1}{2} \alpha_c^e h \frac{\left| L(\phi^h) \right|}{\left| \nabla \phi^h \right|} & se \quad \left| \nabla \phi^h \right| \neq 0 \\ 0 & se \quad \left| \nabla \phi^h \right| = 0 \end{cases}$$
(3.15)

$$\overline{\mathbf{v}}^{h} = \left(\mathbf{I} - \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|^{2}} \boldsymbol{\beta} \otimes \boldsymbol{\beta}\right)$$
(3.16)

com

$$L(\phi^{h}) := \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \phi^{h} - \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \phi^{h} - f$$
(3.17)

a função α_c^e é dada por

$$\alpha_c^e = \max\{0, T - 1/Pe_{ll}^e\}$$
(3.18)

segundo experimentos feitos pelo autor, $T \approx 0.7$ para elementos lineares e bilineares. Calcula-se $Pe_{//}$ como em (3.12).

O termo de captura de descontinuidades, CD, fica definido como:

$$\sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} \frac{1}{2} \alpha_c^e h^e \frac{\left| L(\phi^h) \right|}{\left| \nabla \phi^h \right|} \nabla \phi^h \cdot \left(\mathbf{I} - \frac{1}{\left\| \boldsymbol{\beta} \right\|^2} \boldsymbol{\beta} \otimes \boldsymbol{\beta} \right) \cdot \nabla \phi^h d\Omega$$
(3.19)

onde I é o tensor unitário.

A parcela $\overline{\mathbf{v}}^h$ na formulação *CAU*, se reduz simplesmente ao tensor unitário I e é nesta modificação que se encontra a diferença entre ambas as formulações.

Segundo *Codina* [7], o operador *CD* evita amortecimentos excessivos (*overdamping*) e permite uma pequena quantidade de difusividade nos lugares onde os efeitos advectivos não são importantes, que é onde $|\mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi^h|$ é pequeno ou quase nulo.

3.4 Operador *ETV*

A seguinte formulação foi proposta por *Sampaio* e *Coutinho* [8]. Nesse trabalho a equação (3.1) foi reformulada como se segue.

Considere o campo de velocidade w alinhado com a direção do gradiente da função a conhecer, ϕ . Esse campo de velocidade, chamado de *Velocidade Efetiva de Transporte (Effective Transport Velocity, ETV*), é definido da seguinte forma:

$$\mathbf{w} = \left(\frac{\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \phi}{\|\nabla \phi\|}\right) \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|}$$
(3.20)

O nome Velocidade Efetiva de Transporte resulta do fato que,

$$\mathbf{w} \cdot \nabla \phi = \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi \tag{3.21}$$

Também se define o campo de velocidade v, combinando o campo de velocidade real, β , e a velocidade w assim:

$$\mathbf{v} = \lambda \boldsymbol{\beta} + (1 - \lambda) \mathbf{w} \tag{3.22}$$

onde $0 \le \lambda \le 1$. Observe-se que $\lambda = 1$ se $\|\nabla \phi\| = 0$, assegurando que o campo de velocidade v sempre fica bem definido.

Das equações (3.20) e (3.21), conclui-se que $\mathbf{v} \cdot \nabla \phi = \mathbf{\beta} \cdot \nabla \phi$, então se pode reescrever a equação (2.1) assim:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla \phi = f$$
(3.23)

Com isto, a formulação SUPG torna-se,

$$\int_{\Omega} N_i \mathbf{v} \cdot \nabla \phi^h d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{D} \nabla N_i \nabla \phi^h d\Omega + \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} \tau \mathbf{v}^e \cdot \nabla N_i \Big[\mathbf{v}^e \cdot \nabla \phi^h \Big] d\Omega = 0$$
(3.24)

onde \mathbf{v}^{e} é a restrição de \mathbf{v} ao domínio do elemento.

Note-se que, na equação acima, somente tem-se três parcelas. A última parcela corresponde tanto ao parâmetro *SUPG* quanto ao operador de captura, isto porque o termo convectivo foi modificado na equação diferencial original. Reescrevendo-se a equação (3.24) chega-se a,

$$\sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} \tau \mathbf{v}^e \cdot \nabla N_i \mathbf{v}^e \cdot \nabla \phi d\Omega^e = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} \tau \nabla N_i \mathbf{v}^e \otimes \mathbf{v}^e \nabla N_j d\Omega^e$$
(3.25)

onde,

$$\tau = \theta_{SUPG} \Delta t \lambda = 1.0 \frac{\alpha_v h}{\|\mathbf{v}^e\|} \lambda$$
(3.26)

Realizando vários experimentos numéricos, como relatado adiante, encontrouse que o valor de $\theta_{SUPG} = 1.0$, apresenta um melhor comportamento na resposta.

$$\Delta t = \frac{\alpha_{\mathbf{v}} h}{\|\mathbf{v}\|}$$

$$\alpha_{\mathbf{v}} = \min\left(\frac{Pe_{\mathbf{v}}}{3}, 1\right)$$
(3.27)

O valor 1.0 para α_v , é uma aproximação assintótica e,

$$Pe_{\mathbf{v}} = h \frac{\left\|\mathbf{v}^{e}\right\|}{\left\|\mathbf{D}\right\|}$$
(3.28)

é o número de Peclet do elemento associado à velocidade efetiva de transporte v^{e} .

3.5 Operador ASGS

O operador *Algebraic SubGrid Scale*, *ASGS*, foi desenvolvido por *Juanes* e *Patzek* [9] e apresentado amplamente em [24]. Com esta nova implementação, os métodos de elementos finitos estabilizados foram reinterpretados do ponto de

vista do fenômeno da multiescala, surgindo naturalmente do método variacional de multiescala [10].

A decomposição *multiescala* foi proposta por *Hughes* [10] e o principio fundamental desta aproximação manifesta que a presença das escalas finas não pode ser capturada pela malha de elementos finitos, não entanto, a influencia das sub-escalas na escala da malha não pode ser desprezível. Isto é particularmente importante para os problemas predominantemente advectivos, onde a solução apresenta camadas que requerem uma malha com uma resolução impraticável.

Uma contribuição original desta formulação é a implementação no formalismo da multiescala para problemas não lineares, quer dizer, a formulação não-linear surge diretamente após a discretização variacional na forma fraca. Este esquema é diferente dos anteriores, os quais primeiramente fazem a linearização e logo após é feita à inclusão do termo não linear.

A idéia dessa formulação é considerar os espaços contínuos V, espaço das funções teste e V_0 , espaço das funções peso, como a soma direta de dois subespaços:

$$V = V_h \oplus \widetilde{V} , \ V_0 = V_{h,0} \oplus \widetilde{V}$$
(3.29)

onde V_h e $V_{h,0}$ são os sub-espaços das escalas resolvidas (*resolved scales*) e \tilde{V} é o espaço das escalas da sub-malha (*subgrid scales*).

A formulação é baseada na decomposição da variável de interesse, $\phi \in V[8]$:

$$\phi = \phi^h + \widetilde{\phi} \tag{3.30}$$

onde ϕ^h , é a parte que pode ser resolvida pela malha e $\tilde{\phi}$ a parte não resolvida.

A função ϕ pode ser calculada utilizando a seguinte aproximação proposta por *Juanes* e *Patzek* [9]:

$$\widetilde{\phi} = \tau_{ASGS} R(\phi^h) \tag{3.31}$$

O parâmetro τ_{ASGS} , chamado de tempo de relaxação, (*relaxation time*) será apresentado um pouco mais na frente.

As formulações *SUPG* e *ASGS* são muito similares [22], a diferença encontra-se principalmente na escolha do parâmetro δ_{OCD} . Na formulação *ASGS* de *Juanes* e *Patzek* o parâmetro δ_{OCD} é dado por:

$$\delta_{OCD} = C_{sc} \frac{\left|\tau_{ASGS} R(\phi^{h})\right|}{U_{sc}} h|\mathbf{\beta}|$$
(3.32)

onde $R(\phi^h)$ é o resíduo dado por:

$$R(\phi^{h}) = L(\phi^{h}) - f^{h}$$
(3.33)

e C_{sc} é um coeficiente constante, U_{sc} é o valor característico da solução perto das descontinuidades. Neste trabalho esses valores adotados são: $C_{sc} = 1.0$ e $U_{sc} = 1.0$.

Com isto, o parâmetro τ_{ASGS} é dado por:

$$\tau_{ASGS} = \left(c_1 \frac{\|\mathbf{D}\|}{h^2} + c_2 \frac{|\mathbf{\beta}|}{h}\right)^{-1}$$
(3.34)

onde *h* é o comprimento característico do elemento e $c_1=4$ e $c_2=2$ para elementos lineares [9].

3.6 Operador *DCDD*

Os parâmetros de estabilização propostos por *Tezduyar* [3,11–13] foram apresentados para as formulações semi-discretas e espaço-temporais das equações de *advecção-difusão* e *Navier-Stokes incompressíveis*. Esses parâmetros são desenvolvidos ao nível das matrizes e vetores dos elementos.

A formulação estabilizada *SUPG* neste casso pode ser re-escrita da seguinte maneira:

$$\int_{\Omega} w^{h} R(\phi^{h}) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla w^{h} \cdot \mathbf{D} \nabla \phi^{h} d\Omega + \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^{e}} \tau_{SUPG} \boldsymbol{\beta}^{h} \cdot \nabla w^{h} R(\phi^{h}) d\Omega + S_{DCDD} = 0$$
(3.35)

onde,

$$R(\phi^{h}) = \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} + \boldsymbol{\beta}^{h} \cdot \nabla \phi^{h}$$
(3.36)

A quarta parcela é o termo correspondente ao operador de captura de descontinuidades tipo *DCDD* (*Discontinuity-Capturing Directional Dissipation*) dado por:

$$S_{DCDD} = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} v_{DCDD} \nabla w^h : \left[\left[\mathbf{rr} - (\mathbf{rs})^2 \mathbf{ss} \right] \cdot \nabla \phi^h \right] d\Omega$$
(3.37)

onde,

$$\mathbf{s} = \frac{\boldsymbol{\beta}^{h}}{\|\boldsymbol{\beta}^{h}\|} \quad \mathbf{e} \quad \mathbf{r} = \frac{\nabla |\boldsymbol{\phi}|}{\|\nabla |\boldsymbol{\phi}\|\|} \tag{3.38}$$

sendo s o vetor unitário na direção do campo de velocidades conhecido e r é o vetor unitário na direção do módulo da grandeza (concentração, temperatura, etc.).

Definindo as matrizes ao nível do elemento:

$$\mathbf{c}_{r} = \int_{\Omega^{e}} w^{h} \cdot \left(\mathbf{r} \cdot \nabla \phi^{h} \right) d\Omega$$
(3.39)

$$\widetilde{\mathbf{k}}_{r} = \int_{\Omega^{e}} \left(\mathbf{r} \cdot \nabla w^{h} \right) \cdot \left(\mathbf{r} \cdot \nabla \phi^{h} \right) d\Omega$$
(3.40)

o parâmetro de estabilização, v_{DCDD} , também chamado viscosidade DCDD, é dado por:

$$v_{DCDD} = \left| \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\beta}^{h} \right| \frac{\left\| \mathbf{c}_{r} \right\|}{\left\| \widetilde{\mathbf{k}}_{r} \right\|} \approx \left| \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\beta}^{h} \right| \frac{h_{RGN}}{2}$$
(3.41)

onde,

$$h_{RGN} = 2 \left(\sum_{a=1}^{nen} \left| \mathbf{r} \cdot \nabla N_a \right| \right)^{-1}$$
(3.42)

sendo N_a é a função de interpolação associada ao nó *a*, *nen* é o número de nós do elemento. Neste trabalho, tem-se a aproximação $h = \sqrt{2A}$, onde *A* é a área do elemento.

Ainda falta determinar o parâmetro τ_{SUPG} . Definindo as seguintes matrizes de elemento,

$$\mathbf{m} : \int_{\Omega} w^{h} \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} d\Omega$$

$$\mathbf{c} : \int_{\Omega^{e}} w^{h} \mathbf{\beta}^{h} \cdot \nabla \phi^{h} d\Omega$$

$$\mathbf{k} : \int_{\Omega^{e}} \nabla w^{h} \cdot \mathbf{D} \nabla \phi^{h} d\Omega$$

$$\mathbf{\tilde{k}} : \int_{\Omega^{e}} \mathbf{\beta}^{h} \cdot \nabla w^{h} \mathbf{\beta}^{h} \cdot \nabla \phi^{h} d\Omega$$

$$\mathbf{\tilde{c}} : \int_{\Omega} \mathbf{\beta}^{h} \cdot \nabla w^{h} \frac{\partial \phi^{h}}{\partial t} d\Omega$$
(3.43)

Note que estas matrizes são as mesmas apresentadas no capítulo 2 item 2.3.2, mas sem o parâmetro de estabilização τ .

Os números de grupo adimensionais ou equivalentes aos números de *Peclet* e *Courant* ao nível do elemento são definidos como:

$$\Re e = \frac{\left\|\boldsymbol{\beta}^{h}\right\|^{2}}{\nu} \frac{\left\|\mathbf{c}\right\|}{\left\|\mathbf{\widetilde{k}}\right\|}$$
(3.44)

$$Cr = \frac{\Delta t}{2} \frac{\|\mathbf{c}\|}{\|\mathbf{m}\|}$$
(3.45)

O número de *Courant* calculado acima, serve também para determinar o tamanho para o passo do tempo na formulação transiente.

Tezduyar [11 – 13] propõe como parâmetro τ_{SUPG} a seguinte construção:

$$\tau_{s1} = \frac{\|\mathbf{c}\|}{\|\mathbf{\tilde{k}}\|}$$

$$\tau_{s2} = \frac{\Delta t}{2} \frac{\|\mathbf{c}\|}{\|\mathbf{\tilde{c}}\|}$$

$$\tau_{s3} = \tau_{s1} \Re e = \frac{\|\mathbf{c}\|}{\|\mathbf{\tilde{k}}\|} \Re e$$

$$\tau_{sUPG} = \left(\frac{1}{\tau_{s1}^{r}} + \frac{1}{\tau_{s2}^{r}} + \frac{1}{\tau_{s3}^{r}}\right)^{-\frac{1}{r}}$$

$$(3.46)$$

$$(3.46)$$

$$(3.47)$$

onde o valor de *r* é um parâmetro inteiro que determina a suavidade da transição entre os dois limites dos parâmetros *SUPG*. Neste trabalho, *r*=2 e a norma utilizada é a norma infinita, definida como $\|\mathbf{A}\|_{\infty} = \max_{i} \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|$

A formulação matricial resultante é similar à mostrada nas formulações anteriores, só muda a determinação dos parâmetros τ_{SUPG} e v_{DCDD} . A formulação matricial fica igual à apresentada no capítulo 2, somente mudam na formulação as novas matrizes auxiliares e a matriz correspondente ao *OCD*. Essas matrizes são:

- Matrizes auxiliares:

$$\mathbf{c}_{r} = \int_{\Omega^{e}} w^{h} \cdot \left(\mathbf{r} \cdot \nabla \phi^{h} \right) d\Omega = \int_{\Omega^{e}} \mathbf{N}^{\mathrm{T}} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) d\Omega$$
(3.48)

$$\widetilde{\mathbf{k}}_{r} = \int_{\Omega^{e}} \left(\mathbf{r} \cdot \nabla w^{h} \right) \cdot \left(\mathbf{r} \cdot \nabla \phi^{h} \right) d\Omega = \int_{\Omega^{e}} \mathbf{B}^{T} (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \mathbf{B} d\Omega$$
(3.49)

- Matriz OCD-DCDD

$$\mathbf{S}_{DCDD} = \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} v_{DCDD} \nabla w^h \cdot \left(\left[\mathbf{r} \mathbf{r} - (\mathbf{r} \mathbf{s})^2 \mathbf{s} \mathbf{s} \right] \nabla \phi^h \right) d\Omega$$

$$= \sum_{e=1}^{Nel} \int_{\Omega^e} v_{DCDD} \mathbf{B}^T \cdot \left(\left[\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})^2 \mathbf{s} \otimes \mathbf{s} \right] \mathbf{B} \right) d\Omega$$
(3.50)

Capítulo 4

Exemplos de Validação da Implementação

Neste capítulo apresentam-se uma série de exemplos utilizados na literatura para uma avaliação dos diferentes operadores de captura de descontinuidades. Os exemplos 4.1–4.3 são problemas em regime estacionário, já os exemplos 4.4–4.6, em regime transiente. Faz-se uma comparação dos esquemas: *SUPG*, *SUPG+CAU, SUPG+CD, SUPG+ETV, SUPG+ASGS* e *SUPG+DCDD*, tanto para elementos triangulares quanto para elementos quadriláteros bi-lineares com integração reduzida. Mostram-se os gráficos com elevação da variável incógnita (concentração, temperatura, p.ex.), vista de perfil mediante um corte transversal sobre a diagonal da malha e convergência da solução. Todos os exemplos são em advecção pura onde o tensor da difusão é nulo ($k_{xx} = k_{yy} = 0$).

Todas as figuras são feitas utilizando o programa *GnuPlot* [34] de livre distribuição na internet.

4.1 Exemplo 1 Advecção pura em estado estacionário com elemento triangular

Seja o problema de advecção pura ($\mathbf{D} = 0.0$) proposto em [1] e dado na figura 4.1, com uma malha de 21 x 21 nós, 800 elementos triangulares lineares. Executaram-se exemplos para diferentes ângulos na direção do campo de velocidade (45°, 67.5° e 22.5°,) e fluxo unidirecional constante, $\|\mathbf{\beta}\| = 1.0$.

Na resolução do sistema linearizado, utilizou-se o algoritmo *GMRES* com 5 vetores na base do sub-espaço de *Krylov*. Experimentos numéricos mostraram

que a variação relativa da solução $\left(\left\|\mathbf{d}^{i+1} - \mathbf{d}^{i}\right\| / \left\|\mathbf{d}^{i+1}\right\|\right)$ em todos os casos, fica estagnada para valores próximos de 10^{-3} , após 3 - 5 iterações não lineares. Tendo em conta esta situação, o critério de parada neste exemplo foi o número de iterações igual a *5*.



Figura 4.1 Convecção através do domínio com condições de contorno homogêneas



(a)

SUPG+CAU triangulo linear, Fluxo a 45 graus

Concentracao

Concentracao



(b)

(c)

SUPG+CD, triangulo linear, Fluxo a 45 graus



SUPG+ETV, triangulo linear, Fluxo a 45 graus, Gamma=0.75 Concentracao



(d)

SUPG+ASGS, triangulo linear, Fluxo a 45 graus

Concentracao

Concentracad



(e)

(f)

SUPG+DCDD, triangulo linear, Fluxo a 45 graus



Figura 4.2 Fluxo à 45°, (a) SUPG, (b) SUPG+CAU, (c) SUPG+CD, (d) SUPG+ETV, (e) SUPG+ASGS, (f) SUPG+DCDD

Na figura 4.2.(a) observa-se o comportamento da solução com a formulação *SUPG*. Note as oscilações espúrias discutidas nos capítulos 1 e 2.

Nas figuras 4.2.(b) - 4.2.(f) apresentam-se os resultados obtidos com a formulação *SUPG* acrescida com os *OCD* implementados. Percebe-se claramente que os operadores *CAU* e *CD* conseguem contornar de maneira satisfatória as oscilações apresentadas na formulação *SUPG* original. As formulações *ASGS* e *DCDD* conseguem também um resultado satisfatório. Já a formulação *ETV*, embora melhore a resposta apresentada pela formulação

SUPG, não consegue reduzir as oscilações e ainda perturba o valor da solução para valores negativos.

Na formulação *ETV* foram feitos experimentos numéricos modificando o valor do parâmetro λ entre 1.0 e 0.0, para tentar melhorar a resposta. Quando $\lambda = 1.0$, o resultado foi idêntico à formulação *SUPG* original, já para valores iguais ou menores do que 0.5 apareceram valores negativos nos elementos da diagonal e foi preciso eliminar o pré-condicionamento pela diagonal usado no algoritmo *GMRES*. Nestes casos não se obteve uma resposta satisfatória, pelo qual, adotou-se um valor intermediário de $\lambda=0.75$. Uma outra modificação feita, diferentemente do trabalho apresentado em [8], foi no parâmetro θ . Ao invés do valor original $\theta=\frac{1}{2}$, foi adotado o valor de $\theta=1.0$, obtendo-se a resposta apresentada na figura 4.2.(d).

Para o esquema *CAU* foram feitos experimentos numéricos mudando o parâmetro δ_{CAU} para tentar uma melhoria na resposta, especialmente com respeito ao tamanho característico do elemento *h*, alterando seu valor de *h*/2 para *h*. Esse experimento foi feito sem ganho considerável na solução, pelo que o valor *h*/2 foi mantido.



(a)



Figura 4.3 Elementos triangulares lineares, fluxo à 45° (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

Na figura 4.3.(a) mostra-se um perfil feito na diagonal do domínio comparando as diferentes respostas obtidas. Percebe-se claramente que das seis formulações a *CAU* e a *CD* são as que melhor controlam as oscilações. Não entanto as formulações ASGS e *DCDD* conseguem respostas aceitáveis. A formulação *ETV* apresenta uma oscilação com valores negativos assim como um deslocamento paralelo da resposta comparativamente às outras formulações.

Na figura 4.3.(b) apresenta-se o comportamento da convergência da solução. Observa-se que a variação relativa da solução para os diferentes OCD's fica estagnada a partir da segunda iteração em valores próximos de 10^{-2} , somente o esquema DCDD consegue atingir o valor de 10^{-3} . Verifica-se que o incremento no número de iterações não proporciona melhoria nas respostas, desta maneira justifica-se ter somente, no máximo, 5 iterações para o processo iterativo sem perda significativa na precisão da resposta. Em seguida analisou-se este problema para os ângulos de 67.5° e 22.5° . Os resultados obtidos encontram-se nas figuras 4.4 à 4.7.

(b)

SUPG, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus

Concentracao

Concentracao

Concentracao



(a)

SUPG+CAU, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus



SUPG+CD, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus

1.2 1 0.8 0.6 0.4 0.2 0 -0.2 0.2 0.4 0.8 1.2 1.2 -0.2 y -0.2 5 0.2 0 0.4 0.6 0.8

(b)

(c)

SUPG+ETV, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus, Gamma=0.75

Concentracao

Concentracao



SUPG+ASGS, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus



SUPG+DCDD, triangulo linear, Fluxo a 67.5 graus Concentracao



(f)

(d)

(e)

Figura 4.4 Fluxo a 67.5°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+ *CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



Figura 4.5 Elementos triangulares lineares, fluxo a 67.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

SUPG, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus

Concentracao



(a)

SUPG+CAU, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus



SUPG+CD, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus

Concentracao

Concentracao



(c)

(b)

SUPG+ETV, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus, Gamma=0.75

Concentracao

Concentracao



(d)

(e)

SUPG+ASGS, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus



SUPG+DCDD, triangulo linear, Fluxo a 22.5 graus Concentracao



(f)

Figura 4.6 fluxo a 22.5°, (a) *SUPG*, b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*



Figura 4.7 Elementos triangulares lineares, fluxo a 22.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

O comportamento mostrado nas figuras 4.4–4.7, é muito similar ao observado nas figuras 4.2–4.3. Não se apreciam mudanças significativas no comportamento das soluções com a variação no ângulo do fluxo. Em geral, todos os esquemas conseguem reduzir satisfatoriamente as oscilações.

4.2 Exemplo 2 Advecção pura em estado estacionário com elemento quadrilátero e integração reduzida

Para este exemplo utiliza-se uma malha de 21x21 nós e 400 elementos quadriláteros bi-lineares com integração reduzida e diferentes valores para o parâmetro de estabilização dos modos *hourglass*, ε . Executam-se para os mesmos ângulos de direção do campo de velocidade (45°, 67.5° e 22.5°), iguais condições de contorno e mesmos operadores de captura de descontinuidades utilizados no exemplo 4.1. Os resultados obtidos para as diferentes direções encontram-se a seguir.



SUPG+CRU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=0.0 Concentracao



(b)

(a)

SUPG+CD quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=0.0 Concentracao



(c)

SUPG+ETV quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=0.0, Gamma=0.75 Concentracao



(d)

SUPG+ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=0.0 Concentracao



(e)

SUPG+DCDD quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=0.0 Concentracao



Figura 4.8 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo à 45°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



Figura 4.9 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo à 45°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

48

(f)

Neste exemplo, com fluxo à 45° e com o parâmetro de estabilização dos modos *hourglass* nulo, $\varepsilon = 0.0$, é interessante observar que as diferentes respostas obtidas coincidem com a resposta exata, como apresentado nas figuras 4.8.

Na figura 4.9.(a) apresenta-se uma vista de perfil sobre a diagonal e verifica-se novamente o comportamento dos diferentes OCD's. Na figura 4.9.(b) observase s convergência das diferentes soluções. Cabe ressaltar que as formulações ASGS e ETV somente conseguem atingir uma precisão de 10^{-5} . As outras formulações conseguem atingir uma precisão de 10^{-15} , sendo novamente o esquema DCDD que consegue o melhor comportamento.



SUPG+CAU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=1.0 Concentracao



(b)

(a)

SUPG+CD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=1.0 Concentracao



(c)

(d)

SUPG+ETV quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=1.0, Gamma = 0.75 Concentracao



SUPG+ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=1.0

Concentracao



(e)

SUPG+DCDD quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 45 graus, epsi=1.0 Concentracao



(f)

Figura 4.10 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, fluxo à 45°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



Figura 4.11 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 1.0$, fluxo à 45°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

Com a presença do parâmetro de estabilização, $\varepsilon = 1.0$, observa-se nas figuras 4.10, que a implementação *ETV* mostra um melhor comportamento. As outras formulações apresentam uma oscilação que não tinham quando $\varepsilon = 0.0$, isto pelo fato do termo de estabilização proporcionar uma sobre difusão nos outros esquemas. Contudo, os modos *hourglass* não aparecem, seja pela relação particular que existe neste exemplo entre o ângulo do fluxo com a solução exata, ou pela presença do termo de estabilização. Neste caso optou-se por fixar o valor de $\varepsilon = 1.0$ para todos os operadores, devido à que a melhor resposta é dada para $\varepsilon = 0.0$, porém, para os seguintes exemplos cada um dos operadores apresenta melhores resultados com valores de ε diferentes entre eles, portanto, não existe um único valor de ε que faz com que a solução seja a melhor para todos os *OCD*'s.

Na figura 4.11 (a) tem-se o perfil das diferentes formulações onde aparecem claramente as oscilações de *hourglass*. Na figura 4.11 (b) pode-se apreciar que todas as formulações após 5 iterações só reduziram a variação da solução a 10^{-2} . Note que a solução obtida pela formulação *DCDD* é aquela com o menor número de iterações.



(a)

SUPG+CAU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(b)

SUPG+CD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



SUPG+ETV quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0, Ganna=0.75 Concentracao



(d)

(c)

SUPG+ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(e)

(f)

SUPG+DCDD quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



Figura 4.12 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo a 67.5°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.







Figura 4.13 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo a 67.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

Neste exemplo, na figura 4.12, observam-se os modos *hourglass* em todas as formulações. Na figura 4.13 (a), pode-se ver claramente a coincidência na solução para todas as formulações, onde a aparição dos modos *hourglass* faz com que este comportamento seja predominante.



(a)

(b)

CAU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.05 Concentracao



(b)

(c)

CD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.05 Concentracao



ETV quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=2.0, Gamma = 0.75 Concentracao



(d)

ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.20 Concentracao



(e)

DCDD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.05 Concentracao



Figura 4.14 Elementos quadriláteros com integração reduzida, fluxo a 67.5°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



(a)



Figura 4.15 Elementos quadriláteros com integração reduzida, fluxo a 67.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

Nas figuras 4.14 e 4.15, avalia-se o comportamento dos diferentes esquemas estudados. Pode-se verificar que o valor ε é diferente para cada um deles, variando amplamente no intervalo $0 \le \varepsilon \le 2.0$. Fizeram-se vários testes numéricos para tentar encontrar os valores que conseguem uma melhor resposta.

Para cada um dos diferentes *OCD*'s foi encontrado um valor diferente de ε . Para o esquema *SUPG* sem *OCD* esse valor foi de ε =0.75, para o *CAU* ε =0.05, para o *CD* ε =0.05, para o *ETV* ε =2.0, para o *ASGS* ε =0.25 e para o *DCDD* ε =0.15. Com esses valores, pode-se encontrar uma boa resposta para os esquemas *SUPG*, *CD*, *CAU* e *ETV*, sendo este último o melhor de todos. Já os esquemas *ASGS* e *DCDD* não conseguem contornar a sobre-difusão apresentada depois da inclusão do parâmetro de estabilização.

(b)

SUPG quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(a)

SUPG+CAU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



SUPG+CD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(c)

(b)
SUPG+ETV quadrilatero con integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0, Ganna=0.75 Concentracao



(d)

SUPG+ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(e)

SUPG+DCDD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.0 Concentracao



(f)





Figura 4.17 Elementos quadriláteros com integração reduzida, $\varepsilon = 0.0$, fluxo a 22.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.



SUPG quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.75

Concentracao

(a)

SUPG+CAU quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.05



SUPG+CD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.05 Concentracao



SUPG+ETV quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=1.0, Gamma = 0.75 Concentracao



(d)

(c)

SUPG+ASGS quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.25



(e)

(f)

SUPG+DCDD quadrilatero com integracao reduzida, Fluxo a 67.5 graus, epsi=0.15 Concentracao



Figura 4.18 Elementos quadriláteros com integração reduzida, fluxo a 22.5°, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



(a)



Figura 4.19 Elementos quadriláteros com integração reduzida, fluxo a 22.5°, (a) Corte transversal sobre a diagonal do domínio, (b) Convergência da solução.

Nas figuras 4.16 e 4.18 tem-se, da mesma forma que nas figuras 4.12-4.15, a presença dos modos *hourglass*, nesta vez na base da figura, sem o termo de estabilização. Com valores de $\varepsilon \neq 0.0$, esses modos desaparecem, mas aparecem novamente oscilações devidas à sobre-difusão, contornadas consideravelmente com valores de $\varepsilon < 1.0$. Nas figuras 4.17 (a) e 4.19 (a), observam-se os comportamentos das soluções, sendo as melhores *CAU* e *CD*, apesar de que os resultados das formulações *DCDD* e *ASGS* são muito aceitáveis.

Um fato importante de perceber-se nestes exemplos é a coincidência nas respostas entre dois grupos de formulações. Nas formulações *CAU*, *CD* e *ASGS*, a determinação do *OCD* foi feita seguindo o mesmo esquema apresentado por [5], que consiste principalmente na avaliação do resíduo, e nas formulações *ETV* e *DCDD* o esquema de estabilização vem de uma formulação diferente. Isto conduz a uma similitude na obtenção da resposta final.

(b)

4.3 Exemplo 3 Advecção fluxo rotacional em estado estacionário

Este problema trata de advecção num campo de fluxo rotacional com condições de contorno $\phi_n = 0.0$ e condições prescritas nos nós internos em forma de co-seno no intervalo (-0.5 < x < 0.5). A malha é de 21x21 nós e 800 elementos triangulares lineares. O campo de velocidades rotacional é dado por $\beta_x = -y$, $\beta_y = x$. A solução exata deste problema é uma rotação rígida do co-seno em torno da origem.

O problema foi resolvido utilizando os mesmos parâmetros para o exemplo 1, com 5 vetores na base do sub-espaço de *Krylov* e 5 iterações no processo não-linear.



Figura 4.20 Convecção pura de uma co-senóide.



SUPG+CAU, Fluxo rotacional, malha 21×21 nos



SUPG+CD, Fluxo rotacional, malha 21x21 nos



(c)

(a)

(b)





SUPG+ASGS, Fluxo rotacional, malha 21×21 nos



SUPG+DCDD, Fluxo rotacional, malha 21×21 nos



(f)

(d)

(e)

Figura 4.21 Fluxo rotacional, (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ASGS*, (e) *SUPG*+*ETV*, (f) *SUPG*+*DCDD*.



Figura 4.22 Fluxo rotacional, corte transversal.



Figura 4.23 Fluxo rotacional, Convergência da solução.

Na figura 4.21 apresentam-se resultados semelhantes aos encontrados no trabalho de *Hughes* e *Brooks* [1]. Observe que os esquemas *SUPG* e *ASGS* conseguem obter satisfatoriamente a solução. Já nos outros esquemas aparecem os efeitos de uma sobre-difusão transversal que não consegue ser suavizada, perturbando a solução.

Na figura 4.22 tem-se a vista de perfil de uma seção onde se notam os efeitos da sobre-difusão, fazendo com que surja um decaimento na solução após de um giro de 180°. A formulação *SUPG* sem *OCD* junto com a formulação *ASGS* apresentam melhor comportamento neste tipo de problemas onde a solução é suave. Os esquemas *CAU* e *CD*, perdem algo em torno de um 20% da solução e verifica-se na formulação *ETV* um fenômeno de corrimento lateral além da queda na amplitude da solução, apresentando uma sobre-difusão excessiva.

Na formulação *DCDD* acontece um fenômeno similar, com sobres saltos na solução. Todos os efeitos são devidos à sobre-difusão na direção transversal das linhas de corrente, como explicado nos capítulos 1 e 3.

4.4 Exemplo 4 Advecção fluido em movimento com elemento triangular

Neste exemplo apresenta-se o problema de advecção de um platô em um fluido em movimento unidirecional com condições essenciais homogêneas e regime transiente. A malha adotada compreende 41x41 nós e 3200 elementos triangulares lineares. Apresentam-se os resultados para os passos de tempo 1, 20 e 40. A direção do vetor velocidade é de 45° e fluxo unidirecional constante, $\|\mathbf{\beta}\| = 1.0$.

Para este exemplo, em estado transiente, foi utilizada uma condição CFL=1.0, o algoritmo para integração no tempo implícito e um tempo máximo igual à $t_{max}=0.7071$. Utilizaram-se 5 vetores no sub-espaço de *Krylov* no algoritmo de solução do sistema de equações pelo algoritmo *GMRES*. Na figura 4.24 mostram-se as condições de contorno e as condições iniciais.



Figura 4.24 Advecção de um platô em um fluido em movimento unidirecional

Adveccao pura patamar - SUPG passo no tempo 1



Adveccao pura patamar - SUPG+CAU passo no tempo 1



Adveccao pura patamar - SUPG+CD passo no tempo 1

Concentracao

1 0.8 0.6 0.4 0.2 0 0.2 0.4 y 0.6 0.1 0 0.2 0.4 0.6 0.8 1 ×

(c)

(b)

(a)

Adveccao pura patamar - SUPG+ETV passo no tempo 1

Concentracad 1.2 1 0.8 0.6 0.4 0.2 0 -0,2 -0.4 -0.2 0 0.2 0.4 ч 0.6 0.8 -0.2 1 8.2 1.2 1.2

(d)

Adveccao pura patamar - SUPG+ASGS passo no tempo 1



Adveccao pura patamar - SUPG+DCDD passo no tempo 1



(f)

(e)

Figura 4.25 Advecção de um platô em um fluido em movimento unidirecional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 1. (a) SUPG, (b) SUPG+CAU, (c) SUPG+CD, (d) SUPG+ETV, (e) SUPG+ASGS, (f) SUPG+DCDD.

Adveccao pura patamar - SUPG passo no tempo 20



(a)

(b)

Adveccao pura patamar - SUPG+CAU passo no tempo 20



Adveccao pura patamar - SUPG+CD passo no tempo 20

Concentracao



(c)

Adveccao pura patamar - SUPG+ETV passo no tempo 20

Concentraca



Adveccao pura patamar - SUPG+ASGS passo no tempo 20



Adveccao pura patamar - SUPG+DCDD passo no tempo 20



(f)

(e)

(d)

Figura 4.26 Advecção de um platô em um fluido em movimento unidirecional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 20. (a) SUPG, (b) SUPG+CAU, (c) SUPG+CD, (d) SUPG+ETV, (e) SUPG+ASGS, (f) SUPG+DCDD.

73

Adveccao pura patamar - SUPG passo no tempo 40



(a)

Adveccao pura patanar - SUPG+CAU passo no tempo 40



Adveccao pura patamar - SUPG+CD passo no tempo 40



(c)

(b)

Adveccao pura patamar - SUPG+ETV passo no tempo 40



(d)

Adveccao pura patamar - SUPG+ASGS passo no tempo 40



Adveccao pura patamar - SUPG+DCDD passo no tempo 40



(f)

(e)

Figura 4.27 Advecção de um platô em um fluido em movimento unidirecional, elementos triangulares lineares, passo de tempo 40. (a) SUPG, (b) SUPG+CAU, (c) SUPG+CD, (d) SUPG+ETV, (e) SUPG+ASGS, (f) SUPG+DCDD.

Nas figuras 4.25 - 4.27, mostra-se o avanço do frente da solução no domínio. Note que o esquema *CAU* consegue obter uma solução satisfatória sem adição de uma sobre-difusão excessiva, como apresentada no *DCDD*, onde os efeitos da sobre-difusão pioram a solução. Já os esquemas *CD* e *ASGS* conseguem atingir uma boa resposta somente na frente da solução, sem conseguir o mesmo efeito na parte detrás. Já o esquema *ETV*, com um valor de γ =0.75, não consegue uma resposta satisfatória.



(a)

(b)



(c)

(d)

(e)



Na figura 4.28 observa-se o avanço no tempo dos perfis para as diferentes formulações implementadas. Na figura 4.28 (a) tem-se o perfil produzido pela formulação SUPG sem a presença do OCD. Observe as fortes oscilações com valores acima de 1 e abaixo de 0. Na figura 4.28 (b) note que a formulação CAU consegue uma boa aproximação, onde tanto a frente de avanço quanto a parte detrás preservam os valores máximo e mínimos das condições de contorno originais. Nos passos 20 e 40, apreciam-se claramente os efeitos da difusão fazendo com que o perfil não consiga contornar completamente o patamar apresentado pela solução exata. Na figura 4.28 (c), para o OCD-CD, observa-se que na frente de avanço a solução fica aceitável mas na parte posterior aparecem oscilações, contudo a solução é em geral, aceitável. Na figura 4.28 (d) temos a formulação ETV onde apreciam-se oscilações tanto na parte do patamar quanto na base, atingindo valores negativos e não conseguindo uma resposta aceitável. A formulação ASGS, figura 4.28 (e), apresenta o mesmo comportamento mostrado pela formulação CD, mas com resultados menos aceitáveis, já que as oscilações resultantes ficam maiores. Na última figura, 4.28 (f), temos a formulação DCDD apresentando um resultado similar ao OCD-CAU, mas com um maior conteúdo de difusão, fazendo com que em cada passo de tempo a solução figue mais estreita, sem contornar satisfatoriamente o contorno da solução exata.

(f)

Nos problemas transientes foi observado o fenômeno de estagnação da norma relativa ao resíduo após poucas iterações para todas as formulações. Para evitar este fenômeno, foi utilizada uma técnica de controle de estagnação proposta por Tezduyar [33]. A idéia é avaliar o parâmetro OCD unicamente na primeira iteração do processo multicorretor, evitando assim a presença de valores muito elevados. Com isto obriga-se a uma linearização do problema precisando somente de duas iterações não-lineares ao invés das 20-50 iterações requeridas para os esquemas originais sem congelamento. Este método é chamado de time-lagging pelo autor. Também foi testada uma outra idéia do congelamento, chamado de time-lagging modificado, mas desta vez a avaliação do parâmetro δ_{OCD} foi feita unicamente para o primeiro passo de tempo e ficando constante para todos os demais.



(a)

(b)



Figura 4.29 Esquema sem congelamento

Na figura 4.29 apresentam-se os perfis para os passos de tempo 1, 20 e 40 sem esquema de congelamento da norma relativa ao resíduo. No primeiro passo, figura 4.29 (a), o comportamento dos OCD's CAU, CD, ASGS e DCDD é muito similar, conseguindo reduzir as oscilações encontradas no esquema SUPG original. Já na figura 4.29 (b), aparecem grandes diferenças em todos os esquemas, sendo o de melhor comportamento o CD. Nos OCD's DCDD e CAU apreciam-se um estreitamento da solução. No esquema ASGS consegue-se um bom resultado na frente, mas aparece uma oscilação na parte detrás do avanço. Na figura 4.29 (c), os efeitos de uma sobre-difusão são muito mais apreciáveis onde o esquema CD consegue a melhor resposta, os esquemas CAU, CD, ASGS e DCDD mostram os mesmos fenômenos apresentados no passo de tempo 20, todos devidos à presença de efeitos sobre difusivos.



Figura 4.30 Esquema time-lagging (Tezduyar)

81

Na figura 4.30 apresentam-se os resultados obtidos para o esquema de congelamento *time–lagging*. Aprecia-se que para o passo de tempo 40, figura 4.30 (c), os efeitos da sobre difusão fizeram com que a solução obtida na formulação *CAU* cair em 10% a 15%, além do mesmo fenômeno de estreitamento. Para a formulação *CD*, que no esquema sem congelamento foi melhor, agora se aprecia o fenômeno de estreitamento considerável na solução. Para os *OCD's ASGS* e *DCDD* o comportamento é similar ao observado no esquema sem congelamento.



82



Figura 4.31 Esquema time-lagging modificado

Na figura 4.31, tem-se o esquema de congelamento *time-lagging modificado* onde se apreciam para todos os passos de tempo que as soluções para os diferentes *OCD's* acompanham de perto a solução obtida no esquema *SUPG*. Se bem o ganho na solução não é apreciável, o ganho de tempo computacional sim, como vai ser mostrado nas tabelas seguintes.

Observa-se que para todos os casos o esquema *ETV* apresenta um comportamento igual, isto porque ele não é sensível ao congelamento devido à ausência do termo *OCD*.

	Iter NL / Passos de Tempo	Iter GMRES / Solução
Normal	20.7	6.6
Tezduyar	2	4.0
Tezduyar modificado	2	5.0

Tabela 4.1 Comparação esquemas de congelamento para o OCD-CAU

	Iter NL / Passos de Tempo	Iter GMRES / Solução
Normal	13.7	7.4
Tezduyar	2	4.5
Tezduyar modificado	2	5.4

Tabela 4.2 Comparação esquemas de congelamento para o OCD-CD

	Iter NL / Passos de Tempo	Iter GMRES / Solução
Normal	5.1	4.9
Tezduyar	2	5.1
Tezduyar modificado	2	5.4

Tabela 4.3 Comparação esquemas de congelamento para o OCD-ASGS

	Iter NL / Passos de Tempo	Iter GMRES / Solução
Normal	50	5.0
Tezduyar	48.9	5.0
Tezduyar modificado	11	5.0

Tabela 4.4 Comparação esquemas de congelamento para o OCD-DCDD

Nas tabelas 4.1 - 4.4, apresentam-se as relações encontradas entre o número de iterações não-linear e o passo de tempo, assim como também o número de iterações no solucionador *GMRES* com a quantidade de vezes que ele é chamado (solução).

Na primeira coluna apreciam-se as medias na quantidade de iterações não lineares que precisam ser feitas para cada esquema antes de atingir a tolerância desejada, que nestes exemplos foi de 10⁻³. No *OCD-CAU*, tabela 4.1, foram necessárias 21 iterações em média. Já com os esquemas de congelamento a quantidade de iterações não linear é de 2, isto porque o esquema faz uma "*linearização fictícia*" quando o parâmetro *OCD* não precisa ser recalculado a cada passo de tempo.

Na segunda coluna temos a relação entre o número de iterações feitas pelo solucionador *GMRES* e a quantidade de vezes que ele é chamado. Esse valor da uma idéia do quanto pode ser o ganho computacional obtido quando se utiliza um esquema de congelamento ou não. Quanto menor o valor o ganho computacional é maior, sendo para o *OCD-CAU* o esquema *time-lagging* quem apresenta uma maior vantagem.

Resultados similares são encontrados para os *OCD's CD* e *ASGS*, onde o esquema *time-lagging* apresenta um ganho maior para ambos os casos.

É interessante observar o comportamento do *OCD-DCDD*, onde o esquema de congelamento não consegue "linearizar" o processo iterativo, requerendo as 50 iterações não lineares tanto no esquema sem congelamento quanto no esquema *time-lagging*. No esquema *time-lagging modificado* ainda são necessárias 11 iterações não lineares em média.

4.5. Exemplo 5 Advecção fluido em movimento com elemento quadrilátero e integração reduzida

Similar ao exemplo 4.4, mas desta vez a malha adotada compreende 41x41 nós e 1600 elementos quadriláteros bi-lineares com integração reduzida. As condições iniciais e de contorno são as mesmas. As figuras abaixo mostram os resultados obtidos pelas diferentes formulações para os passos de tempo 1 e 29.



SUPG quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=1.0, iter 001



(b)

(a)

CAU quadrilatero integracao reduzida, patamar em novimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 001



(c)

CAU quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 001



CD quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 001



(e)

CD quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 001



ETV quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 001



ETV quadrilatero integracao reduzida, patamar em novimento a 45 graus, epsi=1.0, iter 001



(h)

(f)

ASGS quadrilatero integracao reduzida, patanar en novimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 001



ASGS quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 001



Figura 4.32 Platô em movimento diagonal, quadrilátero bi-linear com integração reduzida, passo de tempo 1; (a) *SUPG*, ε =0.0; (b) *SUPG*, ε =1.0; (c) *CAU*, ε =0.0; (d) *CAU*, ε =0.05; (e) *CD*, ε =0.0; (f) *CD*, ε =0.05; (g) *ETV*, ε =0.0; (h) *ETV*, ε =1.0; (i) *ASGS*, ε =0.0; (j) *ASGS*, ε =0.05.

Na figura 4.32, onde o parâmetro de estabilização é zero (figuras (a), (c), (e), (g), (i)), apreciam-se umas pequenas oscilações na parte traseira da frente de avanço. Já com valores no parâmetro de estabilização dos modos *hourglass* diferentes de zero a solução apresenta algumas oscilações nos cantos, piorando a resposta inicial.

(i)

SUPG quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 501



(a)

SUPG quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=1.0, iter 501



CAU quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 501



(c)

CAU quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 501



(d)

(e)

CD quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 501



CD quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 501



(f)

ETV quadrilatero integracao reduzida, patamar em novimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 501



(g)

ETV quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=1.0, iter 501



ASGS quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.0, iter 501



(i)

ASGS quadrilatero integracao reduzida, patamar em movimento a 45 graus, epsi=0.05, iter 501



Figura 4.33 Platô em movimento diagonal, quadrilátero bi-linear com integração reduzida, passo de tempo 29, (a) *SUPG*, ε =0.0; (b) *SUPG*, ε =1.0; (c) *CAU*, ε =0.0; (d) *CAU*, ε =0.05; (e) *CD*, ε =0.0; (f) *CD*, ε =0.05; (g) *ETV*, ε =0.0; (h) *ETV*, ε =1.0; (i) *ASGS*, ε =0.0; (j) *ASGS*, ε =0.05.

Na figura 4.33, ultimo passo de tempo sem a presença do parâmetro de estabilização a solução apresenta na base os modos *hourglass*, identificados como oscilações na direção do fluxo. Com a presença do termo de estabilização conseguem-se contornar satisfatoriamente esses modos, mas somente os esquemas *CAU* e *CD* conseguem contornar os efeitos da sobredifusão. O esquema *ASGS* apresenta ainda oscilações espúrias e o esquema *ETV* não alcança uma resposta satisfatória.

4.6 Exemplo 6 Advecção colina em forma de co-seno fluido em rotação

Este exemplo, ilustrado na figura 4.34 trata da advecção de uma colina em forma de co-seno em um fluido em rotação rígida, $\beta_x = -y$, $\beta_y = x$ e módulo unitário, $\|\mathbf{\beta}\| = 1.0$, com condições iniciais $u_0 = 1.0$ e condições de contorno nulas. A malha utilizada compreende 41x41 nós e 3200 elementos triangulares lineares. A solução deste problema é uma rotação rígida de condição inicial.

Para este exemplo foi utilizada uma condição CFL=1.0, com algoritmo para integração no tempo implícito e um tempo máximo igual à $t_{max}=6.28$ s, resultante

(j)

em 252 passos de tempo. Utilizaram-se 5 vetores no sub-espaço de *Krylov* no algoritmo de solução do sistema de equações pelo algoritmo *GMRES*.



Figura 4.34 Advecção de uma colina em forma de co-seno em um fluido em rotação.

As figuras a seguir mostram as elevações das soluções obtidas nos passos 1 e 126 (rotação de 180°) para as diferentes formulações.



(a)





(b)

Adveccao colina co-seno - SUPG+CD passo no tempo 1 Concentracao



Adveccao colina co-seno - SUPG+ETV passo no tempo 1 Concentracao



(c)



(e)

(f)

Adveccao colina co-seno - SUPG+DCDD passo no tempo 1 Concentracao



Figura 4.35 Advecção colina em forma de co-seno de um fluido em rotação, passo de tempo 1. (a) *SUPG*, (b) *SUPG*+*CAU*, (c) *SUPG*+*CD*, (d) *SUPG*+*ETV*, (e) *SUPG*+*ASGS*, (f) *SUPG*+*DCDD*.
Adveccao colina co-seno - SUPG passo no tempo 126 Concentracao



Adveccao colina co-seno - SUPG+CAU passo no tempo 126 Concentracao



Adveccao colina co-seno - SUPG+CD passo no tempo 126 Concentracao



(c)

(a)



Adveccao colina co-seno - SUPG+ASGS passo no tempo 126 Concentracao



Adveccao colina co-seno - SUPG+DCDD passo no tempo 126 Concentracao



(f)

(d)

(e)

Figura 4.36 Advecção colina em forma de co-seno de um fluido em rotação, passo de tempo 126. (a) *SUPG*, (b) *SUPG+CAU*, (c) *SUPG+CD*, (d) *SUPG+ETV*, (e) *SUPG+ASGS*, (f) *SUPG+DCDD*.

As figuras 4.35 e 4.36, evidenciam os efeitos de uma sobre-difusão quando se tem uma solução suave para todos os *OCD*, ainda incluso para a formulação *SUPG* original como apresentado em [1]. Nenhum deles consegue uma boa resposta após 126 passos de tempo, o que corresponde à metade do trajeto (180°). Neste exemplo acontece o mesmo fenômeno encontrado no exemplo 3, onde se tem uma resposta suave e uma sobre-difusão transversal que faz com que se apresente um decaimento considerável na solução.

Observa-se que nos *OCD's CD* e *ASGS* a resposta decai em um 60%, nos *OCD's CAU*, *ASGS* e *DCDD* decai em um 80% e no *ETV* a resposta decai para um 100% apresentando valores negativos inexistentes.

Foi feito um outro exemplo para o problema da colina em forma de co-seno, não apresentado, onde a única mudança foi no campo de velocidades considerado dado por $\beta_x = 0.0$, $\beta_y = -1.0$, encontrando-se resultados similares aos obtidos em [1] para a formulação *SUPG*. Para todos os *OCD*'s a queda na solução foi semelhante ao exemplo 4.6.

Capítulo 5

Conclusões e Trabalhos Futuros

Neste trabalho estudamos *Operadores de Captura de Descontinuidades* apresentados por *Galeão* e *Do Carmo*, *Codina*, *Sampaio* e *Coutinho*, *Juanes* e *Patzek* e *Tezduyar*. Todos eles, em termos gerais, conseguem contornar satisfatoriamente as oscilações apresentadas pela formulação *SUPG*. Uns atingem melhor a resposta para um tipo de problema, mas para um outro tipo a resposta obtida não é tão boa. Contudo, não existe um "*melhor*" operador, e a qualidade da resposta depende do tipo de problema tratado. Os testes serviram para avaliar quantitativa e qualitativamente as respostas obtidas por cada um deles.

Os *OCD's* apresentados por *Galão* e *Do Carmo* e *Codina*, continuam sendo os que obtém resultados mais satisfatórios para todos os problemas tratados, além da simplicidade na formulação e implementação computacional.

A grande vantagem observada pelo *OCD-ETV* é que este não precisa do terceiro termo adicional correspondente à parcela do *OCD*, incluindo-o naturalmente a partir da formulação original. Contudo, segundo o trabalho de *Sampaio* e *Coutinho*, a derivação deste *OCD* foi desenvolvida seguindo uma formulação *Petrov-Galerkin* de mínimos quadrados, onde todas as matrizes resultantes são simétricas. Os resultados nesta tese indicam que a formulação *ETV* associada à formulação *SUPG* clássica pode conduzir a matrizes com coeficientes negativos na diagonal, o que acarreta problemas durante a solução dos sistemas de equações lineares resultantes pelo algoritmo *GMRES* com precondicionamento elemento-por-elemento Gauss-Seidel. Devido a este

problema, o parâmetro γ foi fixado em 0.75 para todos os exemplos. É necessário uma maior investigação desta formulação para se tentar contornar estas dificuldades.

O *OCD-DCDD*, apresentado por *Tezduyar*, mostra uma visão interessante de calcular tanto o parâmetro de estabilização *SUPG*, τ_{SUPG} , quanto o parâmetro do operador de captura de descontinuidades, v_{DCDD} , a partir do cálculo das normas das matrizes, apresentando resultados aceitáveis e uma boa taxa de convergência.

Para o *OCD-ASGS*, de *Juanes* e *Patzek*, tem-se resultados muito próximos a os encontrados pelo *OCD-CD* de *Codina*.

Nos exemplos realizados com o elemento quadrilátero bilinear com integração reduzida encontraram-se resultados muito aceitáveis. Vale a pena ressaltar o fato de termos obtidos estes resultados utilizando valores muito próximos de zero para o parâmetro de estabilização dos modos *hourglass* em vários dos *OCD's*. Isto faz pensar que o comportamento particular da resposta nestes exemplos coincidem com os resultados obtidos com técnicas de subintegração.

Nos exemplos em estado estacionário o valor do parâmetro ε apresentado varia dependendo do esquema *OCD* utilizado, assim: $\varepsilon_{SUPG}=0.75$, $\varepsilon_{CAU}=0.05$, $\varepsilon_{CD}=0.05$, $\varepsilon_{ETV}=2.0$, $\varepsilon_{ASGS}=0.25$, $\varepsilon_{DCDD}=0.15$. Nos exemplos em estado transiente, esses valores foram: $\varepsilon_{SUPG}=1.0 \varepsilon_{CAU}=0.05$, $\varepsilon_{CD}=0.05$, $\varepsilon_{ETV}=1.0$, $\varepsilon_{ASGS}=0.05$

O algoritmo implícito para integração no tempo e algoritmo *GMRES* com precondicionamento elemento-por-elemento Gauss-Seidel para resolução do sistema de equações resultantes, mostraram-se eficientes nos problemas tratados, precisando somente de poucas iterações para encontrar uma resposta satisfatória.

Na elaboração de trabalhos futuros sugere-se:

- Utilizar malhas não estruturadas nos exemplos propostos.

- Implementação dos OCD's para problemas em 3D.

- Implementação para elementos de alta ordem (triangulares e quadriláteros quadráticos, cúbicos, etc.)

- Continuar na busca de novas formulações como as apresentadas por *Do Carmo* e *Alvarez* [28] e *Masud* e *Khurram* [35].

- Estudo dos diferentes OCD's para as equações de Euler e Navier – Stokes.

Referências Bibliográficas

- BROOKS, A.N., HUGHES, T.J.R., "Streamline Upwind/Petrov–Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 32, 199 – 259, 1982.
- HUGHES, T.J.R. FRANCA, L.P., HULBERT, G.M., "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/leastsquares method for advective-diffusive equations", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 73, 173 – 189, 1989.
- TEZDUYAR, T.E., "Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations", Advances in Applied Mechanics, v. 28, pp. 1–42, 1992.
- 4. HUGHES, T.J.R. MIZUKAMI, A., "A Petrov–Galerkin finite element method for convection dominated flows: An accurate upwinding technique for satisfying the maximum principle", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 50, 181 – 193, 1985.
- HUGHES, T.J.T.R., MALLET, M., MIZUKAMI, A., "A new Finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 54, 341 – 355, 1986.
- GALEÃO, A.C., CARMO, E.G.D., "A consistent approximate Upwind Petrov–Galerkin method for convection–dominated Problems", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 68, 83 – 95, 1988.

- CODINA, R., "A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection-diffusion equation", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 110, 325 – 342, 1993.
- SAMPAIO, P.A.B., COUTINHO, A.L.G.A., "A natural derivation of discontinuity capturing operator for convection-difusion problems", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 190, 6291 – 6308, 2001.
- JUANES, R., PATZEK, T.W., "Multiple-scale stabilized finite elements for the simulation of tracer injections and waterflood", SPE Journal, 75231, 2001.
- 10.HUGHES, T.J.R., "Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 127, 387 – 401, 1995.
- **11.TEZDUYAR, T.E.,** "Stabilization parameters and local length scales in SUPG and PSPG formulations", Fifth World Congress on Computational Mechanics, 2002.
- 12.TEZDUYAR, T.E., SATHE, S., "Stabilization parameters in SUPG and PSPG formulations", Journal of Computational and Applied Mechanics, v. 4, pp. 71 – 88, 2003.
- 13.TEZDUYAR, T.E., "Calculation of the stabilization parameters in finite element formulations of flow problems", Journal of Computational Methods in Science and Engineering, v. 2, pp. 1–19, 2003.
- 14. AMORIM, R.B., COUTINHO, A.L.G.A., "Non Symmetric CG-Like Schemes for the Element-by-Element Solution of Finite Element Equations", V Encontro Nacional de Ciências Térmicas, Vol. 1, pp. 309 311, 1994, São Paulo, SP.

- **15.SAAD, Y., SCHULTZ, M. H.**, "GMRES: Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Non-Symmetric Systems". *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, v. 7, pp. 856-869, 1996.
- 16.DIAS, C.M., "Técnicas de integração reduzida para simulação de problemas não-lineares de transporte pelo método dos elementos finitos", Tese de Doutorado COPPE-UFRJ, novembro, 2001.
- 17. DIAS, C.M., COUTINHO, A.L.G.A., "Integração reduzida para problemas advectivos – difusivos escalares discretizados pela formulação SUPG com operador de captura de descontinuidades", Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, vol. 14,2, pp. 145 – 166, 1998.
- 18. ELIAS, R.N., "Métodos tipo-newton inexatos para a solução de problemas não-lineares resultantes da formulação SUPG/PSPG das equações de *navier-stokes* incompressíveis em regime permanente", Tese de Mestrado COPPE-UFRJ, maio, 2003.
- 19. SOUZA, D.A.F., "Algoritmo adaptativo implícito/explícito por arestas para solução de problemas de transporte tridimensionais", Tese de Mestrado COPPE-UFRJ, agosto, 2002.
- 20. MIZUKAMI, A., "An implementation of the streamline-upwind/Petrov-Galerkin method for linear triangular elements", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 49, 357 – 364, 1985.
- 21.CATABRIGA, L. "Soluções implícitas das equações de Euler empregando estrutura de dados por arestas", Tese de Doutorado COPPE-UFRJ, maio, 2000.
- 22. COUTINHO, A.L.G.A., SESINI, P.A., SOUZA, D.A.F., "Comparison of stabilization finite element schemes to simulate two-phase flows and miscible displacements in porous media", Mecánica Computacional, Vol. XXII, Bahía Blanca, Argentina, Novembro, 2003.

- **23. ALMEIDA, R.C.C.,** "Uma formulação de Petrov-Galerkin para a resolução das equações de Euler e Navier-Stokes compressível usando técnicas adaptativas", Tese de Doutorado COPPE-UFRJ, 1993.
- 24. JUANES, R., "Displacement theory and multiscale numerical modeling of three-phase flow in porous media", Tese de Doutorado University of California, Berkeley, 2003.
- 25. CODINA, R., "On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 188, 61 – 82, 2000.
- **26.BELYTSCHKO, T., ONG, J.S.J., LIU, W.K., KENNEDY, J.M.,** "Hourglass control in linear and non-linear problems", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 43, 251 – 276, 1984.
- 27.HUGHES, T.J.R., "The Finite Element Method Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis", Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, 1987.
- 28. DO CARMO, E.G.D., ALVAREZ, G.B., "A new stabilized finite element formulation for scalar convection–diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov–Galerkin method", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 192, 3379 – 3396, 2003.
- 29. ELMAN, H.C., RAMAGE, A., "A characterization of oscillations in the discrete two-dimensional convection-diffusion equation", CS-TR#4118 / UMIACS TR#2000-15, Institute of Advanced Computer Studies, Department of Computer Science, University of Maryland, 2000.
- 30. ELMAN, H.C., RAMAGE, A., "An analysis of smoothing effects of upwinding strategies for the convection-diffusion equation", CS-TR#4160
 / UMIACS TR#2000-50, Institute of Advanced Computer Studies, Department of Computer Science, University of Maryland, 2000.
- **31.DIAS, C.M., COUTINHO, A.L.G.A.,** "Stabilized finite element methods with reduced integration techniques for miscible displacements in porous

media", International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 59, pp. 475 – 492, 2004.

- 32.IKEDA, T., "Maximum principle in finite element models for convectionduffusion phenomena", Lecture Notes in Numerical and Applied Analysis, v. 4, Mathematics Studies 76, North Holland, 1983.
- **33. TEZDUYAR, T.E.,** "Lecture Notes of the Shortcourse on Finite Elements in Fluids", Computational Mechanics Division, v. 99-77, Japan Society of Mechanical Engineers, Tokyo, Japan, 1999.
- 34. GnuPlot versão 3.7, disponível em http://www.gnuplot.info/, 1998.
- 35.MASUD, A., KHURRAM, R.A., "A multiscale/stabilized finite element method for the advection – diffusion equation", Computer Methods in applied Mechanics and Engineering, v. 193, 1997 – 2018, 2004.