



**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA
CENTRO TECNOLÓGICO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**

VITOR PANCIERI PINHEIRO

**FORMULAÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO
COM INTERPOLAÇÃO DIRETA EM PROBLEMAS DIFUSIVO-
ADVECTIVO-REATIVOS ESTACIONÁRIOS**

Vitória, ES
2023



**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
MECÂNICA
CENTRO TECNOLÓGICO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**

VITOR PANCIERI PINHEIRO

**FORMULAÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO
COM INTERPOLAÇÃO DIRETA EM PROBLEMAS DIFUSIVO-
ADVECTIVO-REATIVOS ESTACIONÁRIOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Friedrich Loeffler Neto

Coorientador: Prof. Dr. Luciano de Oliveira Castro Lara

Vitória, ES
2023



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
CENTRO TECNOLÓGICO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

FORMULAÇÕES DO MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO COM INTERPOLAÇÃO DIRETA EM PROBLEMAS DIFUSIVO-ADVECTIVO-REATIVOS ESTACIONÁRIOS

VITOR PANCIERI PINHEIRO

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Friedrich Loeffler Neto
(Orientador – PPGEM/UFES)

Prof. Dr. Luciano de Oliveira Castro Lara
(Coorientador – PPGEM/UFES)

Prof. Dr. Lucas Silveira Campos
(Examinador Interno – DEM/UFES)

Dr. André Bulcão
(Examinador Externo – CENPES/Petrobrás)

Prof. Dr. Eder Lima de Albuquerque
(Examinador Externo – UnB)

Prof. Dr. Julio Tomás Aquije Chacaltana
(Examinador Externo – PPGA/UFES)

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica da Universidade Federal do
Espírito Santo como parte dos requisitos necessários à
obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica



Vitória/ES, 15 de dezembro de 2023





Avaliação CAPES tese Vitor Pancieri Pinheiro

Data e Hora de Criação: 18/12/2023 às 15:33:14

Documentos que originaram esse envelope:

- Avaliação CAPES tese Vitor Pancieri Pinheiro.pdf (Arquivo PDF) - 2 página(s)
- Ata 25 TESE Vitor Pancieri Pinheiro (1).pdf (Arquivo PDF) - 1 página(s)
- Folha aprovação tese Vitor Pancieri Pinheiro.pdf (Arquivo PDF) - 2 página(s)



Hashs únicas referente à esse envelope de documentos

[SHA256]: 6a20d1b9eacb2d568ca755b882a91e0e0be74e82949d61519f109d9e0e448041

[SHA512]: 5a41f6a5764df0fc6c5f6342bc8f96c86b0d5f8093d472b31d0e9f660db39a09e143e5cb9fbc98e8814b11740ae6da91d6004d0ab558673e14c80c4b23b527b0

Lista de assinaturas solicitadas e associadas à esse envelope



ASSINADO - André Bulcão (bulcao@petrobras.com.br)

Data/Hora: 18/12/2023 - 18:25:53, IP: 201.9.193.51, Geolocalização: [-22.941053, -43.037541]

[SHA256]: 0480ab27683e5fe44cb98eb1057a7854703130893de1e62d2a426015798735b



ASSINADO - Eder Lima de Albuquerque (eder@unb.br)

Data/Hora: 20/12/2023 - 09:15:06, IP: 189.6.17.36

[SHA256]: 0385e6d47e73319c1abeee3f6ca9a67a73d7b427a2561c3c3bd438ca5cfa85e1



ASSINADO - Julio Tomás Aquije Chacaltana (julio.chacaltana@ufes.br)

Data/Hora: 18/12/2023 - 18:37:38, IP: 187.86.166.4

[SHA256]: 70d883b9c53d1960ab8567474ccc04a01cd46fea8d97314ca172450a13af5839



ASSINADO - Carlos Friedrich Loeffler Neto (loefflercarlos@gmail.com)

Data/Hora: 19/12/2023 - 11:57:57, IP: 200.137.65.107, Geolocalização: [-20.276218, -40.302550]

[SHA256]: 7eac9f7f1a17e1ba7751cac6210f789dcd9fc75c138fb8ce6ea30cfd6c4c347f



ASSINADO - Lucas Silveira Campos (lucas.s.campos@ufes.br)

Data/Hora: 18/12/2023 - 15:48:24, IP: 200.137.65.109

[SHA256]: 811ef526304b7bf3457e13936fb50d104e92a43692fbc020a0b263bd3c2da252



ASSINADO - Luciano de Oliveira Castro Lara (luciano.lara@ufes.br)

Data/Hora: 18/12/2023 - 19:26:11, IP: 177.157.148.28

[SHA256]: d1e5cc3d69c00415961dd5e253e253618b520733ad2755b90fe86580af3ffb60

Histórico de eventos registrados neste envelope

20/12/2023 09:15:06 - Envelope finalizado por eder@unb.br, IP 189.6.17.36

20/12/2023 09:15:06 - Assinatura realizada por eder@unb.br, IP 189.6.17.36

20/12/2023 09:15:05 - Envelope visualizado por eder@unb.br, IP 189.6.17.36

19/12/2023 11:57:57 - Assinatura realizada por loefflercarlos@gmail.com, IP 200.137.65.107

19/12/2023 11:57:40 - Envelope visualizado por loefflercarlos@gmail.com, IP 200.137.65.107

18/12/2023 19:26:11 - Assinatura realizada por luciano.lara@ufes.br, IP 177.157.148.28

18/12/2023 18:37:38 - Assinatura realizada por julio.chacaltana@ufes.br, IP 187.86.166.4

18/12/2023 18:37:28 - Envelope visualizado por julio.chacaltana@ufes.br, IP 187.86.166.4

18/12/2023 18:25:53 - Assinatura realizada por bulcao@petrobras.com.br, IP 201.9.193.51

18/12/2023 18:25:19 - Envelope visualizado por bulcao@petrobras.com.br, IP 201.9.193.51

18/12/2023 15:48:24 - Assinatura realizada por lucas.s.campos@ufes.br, IP 200.137.65.109

18/12/2023 15:39:18 - Envelope registrado na Blockchain por andreia.eyng@ufes.br, IP 200.137.65.106

18/12/2023 15:39:17 - Envelope encaminhado para assinaturas por andreia.eyng@ufes.br, IP 200.137.65.106

18/12/2023 15:33:16 - Envelope criado por andreia.eyng@ufes.br, IP 200.137.65.106

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de
Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

P654f Pinheiro, Vitor Pancieri, 1987-
 Formulações do Método de Elementos de Contorno com
 Interpolação Direta em Problemas Difusivo-Advectivo-Reativos
 Estacionários / Vitor Pancieri Pinheiro. - 2023.
 148 f. : il.

 Orientador: Carlos Friedrich Loeffler Neto.
 Coorientador: Luciano de Oliveira Castro Lara.
 Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) - Universidade
 Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

 1. Método de Elementos de Contorno. 2. Modelo Advectivo
 Difusivo-Reativo. 3. Interpolação Direta. 4. Dupla Reciprocidade.
 5. Efeitos Advectivos. I. Loeffler Neto, Carlos Friedrich. II.
 Lara, Luciano de Oliveira Castro. III. Universidade Federal do
 Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 621

Esta tese de doutorado é dedicada aos meus pais, Neidemar e Pedro, que foram o alicerce dos meus estudos e inspirações para formar minha filosofia de vida e conjunto de valores.

A vocês, meus amores, serei sempre grato.

Agradecimentos

A priori, gostaria de registrar um agradecimento geral a todos os professores do PPGEM/UFES e também do DEM/UFES, por seu trabalho em prol de difundir e compartilhar o conhecimento. A Universidade Federal do Espírito Santo, em especial o CT-III, é um local que tenho muito orgulho de considerar como casa e onde passei bons momentos durante o mestrado e doutorado.

Ao Prof. Dr. Carlos Friedrich Loeffler, orientador de mestrado e doutorado, sempre serei grato pelos ensinamentos e lições cujo valor não pode ser calculado. Seu exemplo profissional tornou-se motivo de admiração e me alegra muito ter você como parceiro de pesquisa e amigo.

Ao Prof. Dr. Luciano de Oliveira Castro Lara, coorientador deste trabalho, pelas enormes contribuições científicas, que em muito lapidaram a qualidade desta tese de doutorado.

Aos meus pais, Pedro e Neidemar, a qual esta tese é dedicada, pelo carinho e incentivo pelo qual sempre me motivaram a buscar o melhor de meu potencial.

Às minhas irmãs Laila e Lívia pela compreensão, apoio e suporte durante o longo percurso de minha formação acadêmica.

Ao amigo Dr. Bruno Borlini Duarte agradeço pelo constante apoio e incontável suporte durante toda minha jornada de formação acadêmica.

Ao amigo Me. Lucca Dalvi de Vargas Melo agradeço pelo incentivo e inúmeras discussões técnicas e filosóficas sobre os mais diversos assuntos.

Por fim, agradeço pelo financiamento por meio de bolsa de estudos concedidas pela Petrobrás/CENPES e pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) com foco no desenvolvimento desta tese de doutorado.

*"Pois não é suficiente ter o espírito bom, mas o principal é aplicá-lo bem."
(Discurso do Método - René Descartes)*

Resumo

A ocorrência de modelos advectivo-difusivo-reativos na descrição de fenômenos de engenharia é recorrente em setores industriais diversos, tais como óleo e gás, metalurgia, papel e celulose, energia, dispersão de poluentes, entre outros. No contexto do desenvolvimento de métodos numéricos capazes de lidar com tais modelos, o tratamento do termo de transporte advectivo ganha destaque, por configurar um obstáculo relevante ao desempenho da maior parte destas técnicas, que perdem significativamente sua precisão com o aumento da magnitude relativa deste termo. Há uma formulação clássica do método de elementos de contorno (MEC), que utiliza uma solução de Green associada ao operador diferencial correlato, e capaz de representar de forma consistente apenas problemas com campo de velocidade uniforme, embora com menos limitações relativas à intensidade dos efeitos advectivos. A formulação da dupla reciprocidade (MECDR), proposta posteriormente, retira a restrição do formato do campo de velocidade ao lidar com campos hidrodinâmicos variáveis, todavia com precisão satisfatória apenas para baixas magnitudes relativas à advecção. Mais recentemente, surgiu uma nova técnica, denominada de interpolação direta (MECID), que caracteriza-se, em principal, pela aproximação de todo o núcleo das integrais de domínio remanescentes e por um processo de regularização que evita singularidades geradas na coincidência entre pontos fonte e campo. O desempenho robusto da proposta MECID em diversos problemas de campo escalar relevantes, tais como problemas de Poisson, Helmholtz e propagação de ondas fundamentam o interesse em testes mais sistêmicos também em modelos advectivo-difusivos para determinar potencialidades e limitações. Para tanto, nesta tese propõe-se duas formulações do MECID para abordar os modelos advectivo-difusivo-reativos, uma clássica, como continuidade do formato já testado em outros problemas de campo escalar e uma proposta alternativa, que utiliza uma abordagem análoga a usada no MECDR para aproximar as derivadas do campo potencial. Ambas as formulações propostas são testadas e contrastadas com a técnica da dupla reciprocidade como referência relativa. Em linhas gerais, a formulação clássica do MECID mostra-se a mais precisa e robusta em casos de velocidade uniforme. Em casos de velocidade variável a formulação alternativa do MECID apresenta-se mais precisa que o MECID clássico e que o MECDR, concomitantemente, o que atesta a qualidade da nova formulação. Ambas as formulações do MECID propostas nesta tese, clássica e alternativa, exibiram precisão satisfatória, e configuram-se como ferramentas confiáveis no trato numérico de modelos advectivo-difusivo-reativos em cenários com efeitos advectivos moderados.

Palavras-chaves: Método de Elementos de Contorno. Modelo Advectivo-Difusivo-Reativo. Interpolação Direta. Dupla Reciprocidade. Efeitos Advectivos.

Abstract

The occurrence of advective-diffusive-reactive models in the description of engineering phenomena is recurrent in different industrial areas, such as oil and gas, metallurgy, paper and cellulose, energy, pollutant dispersion, among others. In the context of the development of numerical methods capable of dealing with such models, the treatment of the advective transport term stands out, as it constitutes a relevant obstacle to the performance of most of these techniques, which significantly lose their precision with the increase in the relative magnitude of this term. There is a classic formulation of the boundary element method (BEM), which uses a Green's solution associated with the correlated differential operator, which consistently represents only problems with a uniform velocity field, although with fewer limitations regarding the intensity of advective effects. The dual reciprocity formulation (DRBEM), proposed later, removes the restriction on the mathematical shape of the velocity field and is capable of dealing with variable hydrodynamic fields, however, with satisfactory precision only when advective effects are weak. More recently, a new technique has emerged, called direct interpolation (DIBEM), which is mainly characterized by the approximation of the entire kernel of the remaining domain integrals and by a regularization process that avoids singularities generated in the coincidence between source and field points. The robust performance of the DIBEM proposal in several relevant scalar field problems, such as Poisson, Helmholtz and wave propagation problems, underlies the interest in more systemic tests also in advective-diffusive models to determine potentialities and limitations. To this end, this thesis proposes two DIBEM formulations to approach advective-diffusive-reactive models, a classic one, as a continuation of the format already tested in other scalar field problems and an alternative proposal, which uses an approach analogous to that used in DRBEM to approximate the derivatives of the potential field. Both proposed formulations are tested and contrasted with the dual reciprocity technique as a relative reference. In general terms, the classic DIBEM formulation appears to be the most accurate and robust in cases of uniform velocity field. In cases of variable velocity field, the alternative DIBEM formulation is more accurate than the classic DIBEM and the DRBEM, concomitantly, which attests to the quality of the new formulation. Both DIBEM formulations proposed in this thesis, classic and alternative, exhibited satisfactory accuracy, and are considered reliable tools in the numerical treatment of advective-diffusive-reactive models in scenarios with moderate advective effects.

Keywords: Boundary Element Method. Advective-Diffusive-Reactive Models. Direct Interpolation. Dual Reciprocity. Advective Effects.

Lista de ilustrações

Figura 1 – C3 - Fenômenos Físicos	27
Figura 2 – C3 - Carga/Pulso atuando em Meio Infinito	34
Figura 3 – C3 - Transformação de Sistemas de Coordenadas	36
Figura 4 – C3 - Elemento Constante	37
Figura 5 – C3 - Elemento Linear	37
Figura 6 – C3 - Esquema de Coordenadas Polares	48
Figura 7 – C3 - Transformação de Coordenadas	48
Figura 8 – C3 - Quadratura Gaussiana Clássica vs Quadratura Adaptativa de Telles	57
Figura 9 – C5 - Esquema Global de Malha Estruturada	68
Figura 10 – C5 - Casos Testados	72
Figura 11 – C5 - Sequência de Testes Numéricos	73
Figura 12 – C6E1 - Domínio e Condições de Contorno	84
Figura 13 – C6E1 - Análise de Convergência	85
Figura 14 – C6E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	86
Figura 15 – C6E1 - Análise de Desempenho do MECID	86
Figura 16 – C6E2 - Domínio e Condições de Contorno	87
Figura 17 – C6E2 - Análise de Convergência	87
Figura 18 – C6E2 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	88
Figura 19 – C6E2 - Análise de Convecção MECDR - Costalonga & Loeffler (2012) .	89
Figura 20 – C6E2 - Análise de Desempenho do MECID	90
Figura 21 – C6E3 - Domínio e Condições de Contorno	90
Figura 22 – C6E3 - Análise de Convergência	91
Figura 23 – C6E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	92
Figura 24 – C6E3 - Análise de Desempenho do MECID - Fluxos no Contorno . . .	92
Figura 25 – C6E3 - Análise de Desempenho do MECID - Potenciais no Domínio . .	93
Figura 26 – C6E4 - Domínio e Condições de Contorno	93
Figura 27 – C6E4 - Análise de Convergência	94
Figura 28 – C6E4 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	95
Figura 29 – C6E4 - Análise de Desempenho do MECID	95
Figura 30 – C7E1 - Domínio e Condições de Contorno	103
Figura 31 – C7E1 - Análise de Convergência	103
Figura 32 – C7E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	104
Figura 33 – C7E1 - Análise de Disposição de Polos Internos: (a) MECID (b) MECDR	105
Figura 34 – C7E1 - Análise de Desempenho do MECID	105
Figura 35 – C7E1 - Esquemas de Integração - 80EC e 4NPG: (a) MECID (b) MECDR	106
Figura 36 – C7E2 - Domínio e Condições de Contorno	107

Figura 37 – C7E2 - (a) Campos de Velocidade (b) Divergente de Velocidade	107
Figura 38 – C7E2 - Análise de Convergência com Malhas: (a) Pobres (b) Intermediárias	108
Figura 39 – C7E2 - Análise Paramétrica (a) MECID (b) MECDR	109
Figura 40 – C7E2 - Análise de Desempenho do MECID	110
Figura 41 – C7E2 - Esquemas de Integração 160EC e 4NPG: (a) MECID (b) MECDR	110
Figura 42 – C7E3 - Domínio e Condições de Contorno	111
Figura 43 – C7E3 - Análise de Convergência	112
Figura 44 – C7E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR	112
Figura 45 – C7E3 - MECID vs Trabalho de Bayati, A.L. and Wrobel, L.C. (2018) .	113
Figura 46 – C7E3 - Curvas Físicas MECID - Paramétrica com k	114
Figura 47 – C7E3 - Análise de Desempenho do MECID	114
Figura 48 – C7E3 - Esquemas de Integração 160EC e 4 NPG: (a) MECID (b) MECDR	115
Figura 49 – C8E1 - Domínio e Condições de Contorno	123
Figura 50 – C8E1 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs MECID Alter- nativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	124
Figura 51 – C8E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	125
Figura 52 – C8E1 - Análise de Desempenho do MECID	126
Figura 53 – C8E2 - Domínio e Condições de Contorno	126
Figura 54 – C8E2 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	127
Figura 55 – C8E2 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	128
Figura 56 – C8E2 - Análise de Desempenho do MECID	128
Figura 57 – C8E3 - Domínio e Condições de Contorno	129
Figura 58 – C8E3 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	130
Figura 59 – C8E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	130
Figura 60 – C8E3 - Análise de Desempenho do MECID	131
Figura 61 – C8E4 - Domínio e Condições de Contorno	132
Figura 62 – C8E4 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	133
Figura 63 – C8E4 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR	134
Figura 64 – C8E4 - Análise de Desempenho do MECID	134

Lista de abreviaturas e siglas

MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Métodos dos Elementos Finitos
MRP	Métodos dos Resíduos Ponderados
MEC	Método dos Elementos de Contorno
MVF	Método dos Volumes Finitos
DFC	Dinâmica dos Fluidos Computacional
MECID	Método de Elementos de Contorno com Interpolação Direta
MECDR	Método de Elementos de Contorno com Dupla Reciprocidade
Pe	Número de Péclet
MIR	Método da Integração Radial
Re	Número de Reynolds
Pr	Número de Prandtl
EC	Elementos de Contorno
PI	Polos Internos
NPG	Número de Pontos de Gauss
NPI	Número de Polos Internos

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Introdução	15
1.2	Motivação da Pesquisa	17
1.2.1	Hipótese de Pesquisa	17
1.3	Objetivos da Pesquisa	18
1.4	Produção Científica	18
1.4.1	Artigos em Periódicos Restritos	18
1.4.2	Artigos em Congressos Internacionais	19
1.4.3	Artigos em Congressos Nacionais	19
1.4.4	Artigos em Congressos e Encontros Regionais	19
1.5	Estrutura da Tese	20
2	REVISÃO DA LITERATURA	21
3	FUNDAMENTOS DE ELEMENTOS DE CONTORNO	26
3.1	Teoria de Campo	26
3.1.1	Equação de Campo Escalar Generalizada	26
3.1.2	Modelos Matemáticos Particulares	28
3.1.2.1	Equação de Geral de Transporte	28
3.1.2.2	Equação da Onda Acústica	29
3.1.2.3	Equação da Difusão	29
3.1.2.4	Equação de Advecção-Difusão	29
3.1.2.5	Equação de Helmholtz	30
3.1.2.6	Equação de Poisson	30
3.1.3	Condições Impostas	31
3.1.3.1	Condições de Contorno	31
3.1.3.2	Condição de Contorno de Dirichlet	31
3.1.3.3	Condição de Contorno de Neumann	31
3.1.3.4	Condição de Contorno de Robin	31
3.1.3.5	Condições Iniciais	32
3.2	Filosofia do Método de Elementos de Contorno	32
3.2.1	Sentença Integral	32
3.2.2	Tipos de Elementos de Contorno e o Jacobiano	35
3.2.2.1	Sistema de Coordenadas Naturais	36
3.2.2.2	Elemento Constante	36
3.2.2.3	Elemento Linear	37

3.2.2.4	Determinação do Jacobiano	38
3.2.3	Discretização da Equação Integral	39
3.3	Técnicas de Transformação de Integrais de Domínio	41
3.3.1	Tensor de Galerkin	42
3.3.2	Múltipla Reciprocidade	43
3.3.3	Dupla Reciprocidade	45
3.3.4	Integração Radial	47
3.3.5	Interpolação Direta	49
3.4	Esquemas de Integração Numérica	53
3.4.1	Quadratura de Gauss Clássica	54
3.4.2	Quadratura de Telles	55
4	FORMULAÇÕES CLÁSSICAS DO MEC APLICADAS A MODELOS ADVECTIVO-DIFUSIVOS	59
4.1	Formulação Clássica do MEC	59
4.2	Formulação da Dupla Reciprocidade do MEC	62
5	METODOLOGIA GERAL	68
5.1	Domínio e Malha Computacional	68
5.2	Modelo de Governo e Termos de Transporte	69
5.3	Parâmetros de Discretização	69
5.4	Formulações do Método de Elementos de Contorno	69
5.5	Parâmetros de Simulação	70
5.6	Casos Físicos Testados	71
5.7	Intensidade dos Efeitos Advectivos	72
5.8	Sequência de Testes	73
6	FORMULAÇÃO CLÁSSICA DA INTERPOLAÇÃO DIRETA EM MODELOS DE VELOCIDADE CONSTANTE	75
6.1	Formulação Clássica MECID - Velocidade Constante	76
6.1.1	Procedimento de Regularização	77
6.1.2	Tratamento do Termo Regularizado	77
6.1.3	Tratamento do Termo Excedente	78
6.1.4	Sentença Integral Final	78
6.2	Discretização e Aspectos Matriciais	79
6.2.1	Determinação da Matriz $[\alpha]$	82
6.3	Simulações Numéricas	84
6.3.1	Primeiro Exemplo	84
6.3.2	Segundo Exemplo	87
6.3.3	Terceiro Exemplo	90

6.3.4	Quarto Exemplo	93
6.4	Conclusões do Capítulo	95
7	FORMULAÇÃO CLÁSSICA DA INTERPOLAÇÃO DIRETA EM MODELOS DE VELOCIDADE VARIÁVEL	98
7.1	Modelo Matemático Difusivo-Advectivo-Reativo	98
7.2	Formulação MECID Clássica - Velocidade Variável	98
7.2.1	Tratamento do Termo Difusivo	99
7.2.2	Tratamento do Termo Advectivo	100
7.2.3	Tratamento do Termo Reativo	101
7.3	Simulações Numéricas	102
7.3.1	Primeiro Exemplo	102
7.3.2	Segundo Exemplo	107
7.3.3	Terceiro Exemplo	111
7.4	Conclusões do Capítulo	115
8	FORMULAÇÃO ALTERNATIVA DA INTERPOLAÇÃO DIRETA EM MODELOS DE VELOCIDADE VARIÁVEL	118
8.1	Formulação MECID Alternativa - Velocidade Variável	118
8.1.1	Tratamento da Integral Regularizada	119
8.1.2	Tratamento da Integral Excedente	120
8.1.3	Determinação da Matriz α	120
8.1.4	Determinação do Produto Escalar b	122
8.2	Simulações Numéricas	123
8.2.1	Primeiro Exemplo	123
8.2.2	Segundo Exemplo	126
8.2.3	Terceiro Exemplo	129
8.2.4	Quarto Exemplo	132
8.3	Conclusões do Capítulo	135
9	CONCLUSÕES GERAIS	136
9.1	Continuidade de Linha de Pesquisa	138
	Referências	140

1 Introdução

1.1 Introdução

Há uma demanda robusta e crescente por modelos matemáticos mais assertivos e consequente solução dos mesmos associados a problemas industriais em diversas áreas da engenharia, dentre as quais destacam-se as de petróleo e gás, siderurgia, indústria química e nuclear, papel e celulose, alimentícias dentre outras. Todavia, tais desafios tecnológicos exibem complexidades que ultrapassam as capacidades analíticas conhecidas e desafiam toda a gama de métodos numéricos existentes com características como propriedades do meio material, não-linearidades geométricas e das equações, condições de contorno complicadas, geometrias desafiadoras além do próprio modelo matemático de base, constituído de uma ou mais equações diferenciais que podem apresentar níveis de complexidade e acoplamento físico e matemático variados.

Neste contexto há um crescimento exponencial no uso de códigos e ferramentas de simulação numérica comercial, com base nos principais métodos numéricos consolidados tais como método das diferenças finitas (MDF), elementos finitos (MEF), elementos de contorno (MEC), volumes finitos (MVF), entre outros. Com isso, configura-se aqui uma relação clara e fundamental entre a pesquisa científica e o desenvolvimento tecnológico, no qual as empresas responsáveis pela codificação e manutenção destes robustos códigos tem como força motriz de seu empreendimento o esforço contínuo de pesquisadores da área de métodos numéricos.

O provável precursor entre os principais métodos numéricos é a técnica das diferenças finitas (MDF) que possui uma filosofia simples e elegante de aproximar os operadores derivada diretamente do modelos matemático baseado em truncamentos de séries de Taylor (FORTUNA, 2000). Este método tem fácil expansão para duas e três dimensões do domínio computacional, com sua maior limitação no trato de geometrias irregulares, uma vez que há um desafio na interpolação de nós de contorno e nós internos do domínio (ÖZIŞIK et al., 2017). É interessante destacar como os conceitos de estabilidade e convergência são bem definidos para diversos problemas estacionários e transientes em abordagens por diferenças finitas, e portanto, dão base para pesquisas e novas propostas em outros métodos numéricos (PLETCHER; TANNEHILL; ANDERSON, 2012). Vale salientar que apesar da aparente simplicidade da proposta original de diferenças finitas, a escolha dos esquemas e formulações adequadas para um problema em específico é tarefa complexa e dependente de inúmeros fatores como a natureza da equação diferencial, sistema de coordenadas, regime estacionário ou transiente, tipo de condição de contorno dentre outros.

A proposta do método dos elementos finitos (MEF) (CLOUGH, 1960) tem como característica fundamental a divisão do domínio computacional em subdomínios interconectados denominados de elementos finitos e utilizar conceitos variacionais para construir uma solução aproximada (BECKER; CAREY; ODEN, 1981). Tal tratatamento já permite a superação de uma forte limitação do MDF até então, podendo o MEF lidar com geometrias complexas de forma muito mais flexível e eficiente (REDDY, 1993). Apesar de originalmente proposto para lidar com problemas de mecânica estrutural, o MEF poder ser aplicado com boa confiabilidade, teoricamente, em qualquer modelo matemático, o que demonstra a versatilidade imposta ao campo de pesquisa quando de sua proposição e desenvolvimento (ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2005). Além da vantagem estratégica em relação ao trato de geometrias não-triviais pode-se também destacar outras importantes vantagens do método como a capacidade de lidar com materiais não-homogêneos, interpretação física da sentenças integrais atreladas ao conceito de resíduo ponderado e também a geração de sistemas matriciais simétricos e esparsos, o que facilita de sobremaneira o armazenamento e solução dos sistemas lineares resultantes (BATHE, 1996).

O método dos elementos de contorno surge como uma eficiente alternativa ao MEF e ao MDF em diversos problemas de engenharia (BREBBIA, 1978). A característica mais importante do MEC é a demanda da discretização apenas do contorno em detrimento ao interior do domínio computacional, o que promove uma redução dimensional, e consequente simplicidade de entrada de dados em programas (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994). Ademais, o desempenho do MEC em problemas que apresentem singularidade física tal como mecânica da fratura e concentração de tensão ou problemas com domínios computacionais infinitos ou semi-infinitos é notória (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012). Como o MEC é baseado na sentença dos resíduos ponderados (MRP) inversa, uma função auxiliar se faz necessária, denominada, na formulação original do método, de solução fundamental ou função de Green correlata (GREEN, 1828). A dedução destas soluções fundamentais para diversos problemas tal como sua integração são tópicos desafiadores, que constituem limitações da forma original do método. Além disso, as matrizes finais geradas do MEC, diferentemente do MEF, são cheias, ou seja, não esparsas (KATSIKADELIS, 2016).

Uma alternativa ao MDF, de natureza diferencial, pode ser encontrada na proposta do método de volumes finitos (MVF), presente em boa parte dos códigos de dinâmica dos fluidos computacional (DFC) modernos (PATANKAR, 1980). Fundamentalmente, o MVF baseia-se na ideia de dividir o domínio em nós e estabelecer um volume de controle ao redor de cada um deles, chamado de célula (MAZUMDER, 2015). Desta forma a equação diferencial de cada nó é integrada no volume, o que fisicamente pode ser interpretado como a conservação de uma variável primal genérica transportada em cada volume de controle (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

Um desafio comum a todos os métodos numéricos anteriormente apresentados, em suas propostas originais, reside no trato de modelos advectivo-difusivos-reativos, principalmente no tocante à abordagem do termo de transporte advectivo. As técnicas de diferenças finitas (MDF) (ÖZIŞIK et al., 2017), volumes finitos (MVF) (PLETCHER; TANNEHILL; ANDERSON, 2012) e elementos finitos (MEF) (HUGHES; SCOVAZZI; TEZDUYAR, 2010) apresentam perda de precisão a medida que efeitos de advecção mais intensos tentam ser numericamente representados. O método de elementos de contorno (MEC) apresenta um diferencial, em sua formulação original (BREBBIA; WALKER, 1980), pois, utiliza uma solução de Green associada ao operador diferencial do modelo matemático advectivo-difusivo-reativo (AL-BAYATI, 2018) como uma função auxiliar. Este diferencial de proposta permite ao MEC abordar com robustez e precisão cenários físicos com campo hidrodinâmico uniforme e, virtualmente, sem restrições ao nível de intensidade relativa da parcela advectiva (WROBEL; FIGUEIREDO, 1991). Todavia, no contexto do desenvolvimento do MEC, o uso da solução fundamental do problema advectivo-difusivo-reativo é limitada, pois o tratamento de campos de velocidade variáveis, presentes fisicamente em diversas aplicações relevantes de engenharia, já não é possível com esta formulação pioneira. As propostas de hipótese e objetivos de pesquisa apresentados por esta tese, na sequência, tem como foco apresentar possíveis saídas, em termos de novas formulações, que abordem os modelos advectivo-difusivos-reativos em cenários de campo hidrodinâmico variável com maior precisão e resiliência numérica em relação aos efeitos advectivos, quando contrastadas com outras formulações já existentes na literatura.

1.2 Motivação da Pesquisa

A motivação central da presente tese é propor novas formulações do MEC para abordar problemas advectivo-difusivo-reativos estacionários bidimensionais com campo de velocidade constante e variável, em cenários de advecção moderada. Para tanto, utiliza-se como ferramenta central o método de elementos de contorno com interpolação direta (MECID) (LOEFFLER et al., 2015).

1.2.1 Hipótese de Pesquisa

A hipótese ampla desta tese é de que as novas formulações do método de elementos de contorno com interpolação direta (MECID) sejam relativamente mais robustas do que a formulação do método de elementos de contorno com dupla reciprocidade (MECDR) em cenários de advecção até moderada. Todavia, é interessante particionar esta hipótese em duas vertentes: (I) quanto ao formato equação de governo e campo hidrodinâmico (II) quanto a intensidade dos efeitos advectivos. Em relação a (I) são realizados testes em modelos advectivo-difusivos, com ou sem a presença de termo reativo, com velocidade constante ou variável, com termo fonte e também na ausência do mesmo. No tocante a

(II), a depender da intensidade dos efeitos advectivos no cenário físico simulado, o modelo matemático em questão pode apresentar natureza parabólica, no caso de processos dominados pelo transporte difusivo com efeitos advectivos até moderados, ou ainda, natureza hiperbólica, que tange a processos dominados pelo transporte convectivo, para cenários com advecção intensa. Nesta tese as formulações proposta do MECID e a MECDR são testados em cenários físicos com advecção fraca até moderada, ou seja, com comportamento parabólico por parte do modelo matemático (BOKOTA; ISKIERKA, 1995).

1.3 Objetivos da Pesquisa

No intuito de responder a hipótese de pesquisa, posta a priori, de forma consistente, os principais objetivos que norteiam a estrutura, desenvolvimento e exposição de resultados desta tese de doutorado são:

1. Levantar o comportamento da formulação clássica do MECID para problemas advectivo-difusivos de velocidade constante, em contraponto ao MECDR, em cenários de advecção de intensidade baixa a moderada, em quatro casos-teste.
2. Aplicar a formulação clássica do MECID para problemas advectivo-difusivo-reativos de velocidade variável, em contraponto com a MECDR, em cenários de advecção baixa a moderada. Aplicar a MECID a três casos-teste no intuito de inferir a influência do divergente do campo de velocidades e presença de termos reativo sobre a formulação proposta.
3. Propor uma formulação alternativa do MECID para problemas advectivo-difusivo-reativos de velocidade variável, em contraponto com a MECDR, em cenários de advecção baixa a moderada. Aplicar a MECID alternativa a quatro casos-teste no intuito de inferir a influência do divergente do campo de velocidades, presença de termos reativo e também da presença de termo fonte sobre a formulação proposta.

1.4 Produção Científica

1.4.1 Artigos em Periódicos Restritos

- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Mansur, W.J. Boundary Element Method Solution of Stationary Advective-Diffusive Problems: A Comparison between the Direct Interpolation and Dual Reciprocity Technique, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 142, pp. 39-51, 2022.

1.4.2 Artigos em Congressos Internacionais

- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Santos, G.A.R.; Balista, T.G. Efficacy of an Adaptative Integration Scheme on the Numerical Performance of DIBEM applied to the Solution of Compressible Diffusive-Advective Problems. *XLIII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE*, Foz do Iguaçu, 2022.
- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Melo, L.D.V.; Santos, A.J. Application of the Direct Interpolation Boundary Element Technique with Self-Adaptative Integration to Bidimensional Diffusive-Advective Problems. *XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE*, Rio de Janeiro, 2021.
- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Almeida, L.M. A Brief Performance Analysis of Direct Interpolation Technique applied on Bidimensional Advective-Diffusive Problems with Variable Velocity Fields. *XLI Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE*, Foz do Iguaçu, 2020.

1.4.3 Artigos em Congressos Nacionais

- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Lara, L.O.C. Uma Formulação Alternativa da Técnica de Interpolação Direta do Método de Elementos de Contorno aplicada a Problemas Advectivo-Difusivos com Campo Variável de Velocidade. *Encontro Nacional de Modelagem Computacional - ENMC*, 2022.
- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Sian, N.S.; Almeida, L.M. Técnica de Interpolação Direta de Elementos de Contorno aplicada a um Modelo Advectivo-Difusivo com Campo de Velocidade Variável Incompressível. *XL Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional- CNMAC*, Campo Grande, UFMS, 2021.

1.4.4 Artigos em Congressos e Encontros Regionais

- Pinheiro, V.P.; Loeffler, C.F.; Chacaltana, J.T.A. Modelagem Físico-Matemática de um Problema Térmico Difusivo-Advectivo-Reativo em Regime Estacionário. *Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional*, São Mateus, UFES, 2022.
- Santos, G.A.R.; Loeffler, C.F.; Pinheiro, V.P. Aplicação da Técnica de Interpolação Direta do Método de Elementos de Contorno a um Problema Advectivo-Difusivo Compressível com Fonte Energética. *Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional*, São Mateus, UFES, 2022.

1.5 Estrutura da Tese

O Capítulo 1 contempla uma breve introdução e a motivação para a execução desta pesquisa, expõe os objetivos visados pelo trabalho e, por fim, contempla de forma sucinta a estrutura sobre a qual está organizada esta tese de doutorado.

O Capítulo 2 apresenta, de forma sintética, porém rigorosa, o desenvolvimento da temática da vigente pesquisa, partindo-se das primeiras formulações do método de elemento de contorno disponíveis até a condução ao estado da arte e principais limitações do tema abordado.

O Capítulo 3 reúne, de forma robusta, o conjunto de conhecimentos e embasamento técnico necessários à tornar esta tese auto-contida.

O Capítulo 4 apresenta, de forma concisa, as formulações do método de elemento de contorno original ou clássica, que utiliza a solução fundamental correlata, e também a técnica de dupla (MECDR), ambas aplicadas a modelos difusivo-advectivos.

O Capítulo 5 apresenta, em detalhes, a metodologia geral adotada nesta tese, desde domínio físico e computacional até a sequência de testes realizados ao longo dos capítulos de resultados.

O Capítulo 6 apresenta a proposta matemática e os testes numéricos correlatos à uma formulação do método de elementos de contorno com interpolação direta (MECID) clássico aplicado a problemas com campo de velocidade uniforme.

O Capítulo 7 apresenta a formulação matemática e testes numéricos da proposta clássica do MECID aplicada a problemas com campo de velocidade variável.

O Capítulo 8 contém a apresentação de uma proposta alternativa do MECID, aplicada também a problemas físicos com campo hidrodinâmico variável.

O Capítulo 9 apresenta uma consolidação das principais conclusões globais desta tese de doutorado tal como sugestões de pesquisas futuras no tocante à continuidade da linha de pesquisa.

2 Revisão da Literatura

A solução numérica de modelos advectivo-difusivos é de grande relevância para a engenharia e ciências em geral, dada a presença dos fenômenos de transporte em diversas aplicações relacionadas a mecânica dos fluidos, convecção térmica e transferência de massa. Tanto a natureza matemática do termo de transporte convectivo quanto a estrutura acoplada das equações de governo impõe uma série de desafios ao desempenho dos métodos numéricos, dentre eles, o Método de Elementos de Contorno (MEC). Apesar do grande volume de trabalhos científicos já publicados, formulações do MEC para abordar modelos advectivo-difusivos ainda demandam estudos com foco em robustez e versatilidade numérica (PETTRES; LACERDA, 2017; CUNHA et al., 2016). Ademais, recentemente, novos artigos tem emergido neste interessante campo de pesquisa, com abordagens em temas desafiadores como escoamento em meios porosos (PETTRES; CIRILO, 2020), meios não-homogêneos (AL-BAYATI; WROBEL, 2019; CARRER et al., 2021) e campo de velocidade variável (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a), entre outros relevantes.

O Método de Elementos de Contorno (MEC) é uma técnica numérica vantajosa, que permite a solução de problemas físicos apenas com integrações de contorno, e com isso, uma menor demanda de variáveis nodais. Um grande volume de simulações confirmam a superioridade numérica desta técnica em diversas classes de problemas, nos quais ocorre uma redução substancial no esforço de discretização. Por exemplo, problemas de contato, mecânica da fratura, fronteiras móveis, regiões infinitas e semi-infinitas e problemas axissimétricos podem ser mencionados (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012). Desta maneira, o MEC é capaz de gerar um modelo numérico conciso, e que simplifica de sobremaneira os procedimentos de entrada de dados.

Há uma formulação consistente e elegante do MEC direcionada a solucionar problemas advectivo-difusivos em duas dimensões, que emprega a solução fundamental correlata ao problema, ou seja, uma fonte concentrada aplicada em um ponto, num domínio infinito (HONMA; TANAKA; KAJI, 1985; TANAKA et al., 1988; WROBEL; FIGUEIREDO, 1991). Esta formulação pode solucionar de forma precisa problemas com número de Péclet de arbitrário (QIU; WROBEL; POWER, 1998) e campo de velocidade uniforme. Entretanto, esta abordagem se torna inadequada se o campo de velocidade depende das coordenadas espaciais, devido a complexidade de deduzir uma solução fundamental correlata e pela mesma ser restrita para cada campo hidrodinâmico em questão, o que tornaria o processo inviável. Um outro ponto a destacar em relação a esta formulação está ligado a relativa complexidade da solução fundamental e também no que tange ao custo computacional em problemas transientes (RAMACHANDRAN, 1994), o que tende por desestimular o uso do MEC como uma ferramenta para resolver problemas industriais baseados neste modelo.

Por fim, destaca-se que na literatura não há um consenso na classificação quantitativa dos efeitos advectivos, no que tange ao número de Péclet ou a própria magnitude dos mesmos em baixos, médios e altos. Devido a lacuna apontada considera-se nesta tese que o número de Péclet ou módulo do campo de velocidade com magnitude de até 5 sejam considerados baixos ou fracos, de 5 a 20 sejam considerados moderados ou médios e acima de 20 sejam considerados intensos ou altos.

A proposta da formulação de dupla reciprocidade (MECDR) (NARDINI; BREBBIA, 1983) expandiu consistentemente a aplicabilidade do MEC, para muitas classes de problemas (BREBBIA; WROBEL, 1988a; WROBEL; BREBBIA, 1988b; WROBEL; BREBBIA, 1987), entre eles problemas de potencial lineares (NOWAK; BREBBIA, 1992), elasticidade, análise transiente e dinâmica (KONTONI; BESKOS, 1993; LOEFFLER; MANSUR, 1987) e também problemas dependentes do tempo em meios infinitos (LOEFFLER; MANSUR, 1988; LOEFFLER; MANSUR, 1989), onde os esquemas clássicos de avanço no tempo baseados em diferenças finitas podem ser utilizados. No que se refere a fenômenos de transporte, com o MECDR, o uso de uma solução fundamental simples já permite transformar o termo advectivo em um termo fonte, que é resolvido via interpolação, usando funções de bases radiais (PARTRIDGE; BREBBIA, 1990). Ademais, o MECDR é capaz de lidar com problemas de campo de velocidade variável (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a; AL-BAYATI; WROBEL, 2018b), apesar de exibir certa instabilidade e falta de precisão em cenários dominados pelos efeitos advectivos. Todavia, alguns autores afirmam que o uso do MECDR é adequado para problemas advectivo-difusivos com altos números de Péclet contanto que o domínio seja particionado em sub-regiões, com diferentes velocidades médias (TAIGBENU, 1999; ŠKERGET; HRIBERŠEK; KUHN, 1999; POPOV; POWER, 1999). É interessante salientar uma certa escassez na literatura de estudos que utilizem exclusivamente o MECDR, especialmente em casos com Péclet moderado. Em geral, problemas de precisão correlatos a técnica MECDR podem ser atribuídos a dois fatores: primeiramente, ao reuso do procedimento de interpolação para escrever as derivadas direcionais como função do potencial (PARTRIDGE; BREBBIA, 1990); e também a ocorrência de oscilações numéricas se valores pequenos e grandes no domínio são aproximados simultaneamente por aproximações de bases radiais (LOEFFLER; MANSUR, 2003). Este último aspecto reflete a incapacidade do procedimento global de interpolação em lidar com altos gradientes. Esta tese também acaba por demonstrar que modelos advectivo-difusivo-reativos podem ser solucionados com ótima precisão, apenas com o MECDR, utilizando elementos lineares, em detrimento a maioria dos artigos publicados, que fazem uso de elementos constantes.

Ademais a literatura aponta outros procedimentos que permitem alargar o intervalo de número de Péclet com os quais se obtém boa precisão, por exemplo com o acoplamento do MECDR com a formulação clássica do MEC (RAMACHANDRAN, 1994; WROBEL; DEFIGUEIREDO, 1991). Assim, problemas com velocidade variável podem ser bem

solucionados, desde que se adote uma decomposição da velocidade em cada ponto por um valor médio adicionado de um desvio ou flutuação. O desvio da velocidade é abordado como uma fonte, e interpolado pelo MECDR, enquanto o valor médio é tratado com a solução fundamental do problema correlato. Na verdade, essa abordagem não se limita a problemas de transporte, e também pode ser aplicada para resolver problemas suavemente não-homogêneos, problemas de campos potenciais não uniformes relacionados com a solução das equações de Biot, que descrevem a saturação em meios poroelásticos (CAVALCANTI; TELLES, 2003). Por fim também é possível aplicar esta estratégia para cálculo de potenciais em meios heterogêneos tridimensionais com condições de contorno não-lineares (LUIZ; TELLES, 2008).

Apesar de múltiplos esforços de pesquisa as formulações do MEC disponíveis até então só são altamente eficientes e precisas para cenários dominados pelo transporte difusivo. Mesmo assim, recentes trabalhos vem sendo propostos para aplicações com baixo para moderado número de Péclet (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a), o que cria novas perspectivas no que tange a seleção do MEC como técnica mais apropriada, especialmente em problemas com fronteiras móveis. Este é o caso de problemas não-homogêneos de transferência de calor (PASQUETTI; CARUSO, 1990) e problemas metalúrgicos com comportamento advectivo-difusivo (SPITZER et al., 1992), uma vez que o processo transiente de solidificação pode ser modelado predominantemente como um escoamento unidimensional com número de Péclet baixo.

A importância da engenharia ambiental também é crescente e muitas situações relacionadas a engenharia hidráulica, como infiltração de água em solos irregulares e transporte de fluido em dutos e canais ganharam relevância central. Estudos recentes mostram também que a dispersão de poluentes na atmosfera, assunto sensível para controle de danos ambientais, pode ser apropriadamente representada por modelos advectivos-difusivos, apesar da compressibilidade do ar (HUGHES; SCOVAZZI; TEZDUYAR, 2010). Quando solucionado por métodos numéricos tradicionais de domínio, o fenômeno advectivo-difusivo normalmente demanda uma discretização fina, em especial para problemas que apresentem efeitos advectivos intensos, o que acarreta em significativo custo computacional (ROACHE, 1998). Ikeuchi, Onishi e Sakakihara mostraram em seus trabalhos (IKEUCHI; ONISHI, 1983; IKEUCHI; SAKAKIHARA, 1985) que o método dos elementos de contorno (MEC) pode ser utilizado como alternativa para reduzir o tamanho do problema computacional, sem perda de qualidade da solução. Por fim, no tocante a problemas de velocidade constante, os efeitos de *upwind*, na média do campo de velocidades, para uma grande parte das formulações propostas, já encontram-se contabilizados na solução fundamental correlata, o que permite uso de malhas menos refinadas, o que gera uma solução numérica mais eficiente e estável mesmo para altos números de Péclet (QIU; WROBEL; POWER, 1998).

Recentemente, uma nova abordagem para transformação de integrais de domínio em

integrais de contorno foi proposta, com objetivo de melhorar a precisão e condicionamento matricial final, e também utiliza funções de bases radiais. Esta abordagem, denominada de interpolação direta (MECID) (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015) é fundamentada numa aproximação de todo o núcleo das integrais de domínio, em detrimento à dupla reciprocidade (MECDR), cuja aproximação abrange apenas parte do núcleo. A proposta da técnica já foi aplicada a problemas relevantes de campo escalar em duas e três dimensões como modelos de Poisson (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015), Helmholtz (LOEFFLER et al., 2015), modelos dinâmicos (BARBOSA; LOEFFLER; LARA, 2019; BARBOSA; LOEFFLER, 2020), entre outros, e consistentemente com resultados mais precisos relativamente ao MECDR. Ademais, comparativamente à MECDR, o MECID elimina a necessidade de duas matrizes auxiliares (PARTRIDGE; BREBBIA, 1990) e sua similaridade estrutural com um procedimento clássico de interpolação implica numa maior robustez numérica. Em contraponto, a nova proposta tem maior sensibilidade ao quantitativo de pólos internos interpolantes (BARBOSA; LOEFFLER; LARA, 2019), (BARBOSA; LOEFFLER, 2020).

Uma ampla consolidação da técnica da interpolação direta demanda testes de desempenho em modelos advectivo-difusivo-reativos bidimensionais, dado que desempenhos consistentes já foram alcançados em diversos outros problemas de campo escalar. A formulação clássica ou original do MECID não requer aproximação das derivadas espaciais do potencial. Uma nuance matemática atrativa da interpolação direta reside no processo de regularização (LOEFFLER; MANSUR, 2017), que tem por foco principal o tratamento da singularidade presente na solução fundamental, que neste modelo apresenta uma ordem mais elevada.

A técnica do MECID é testada nesta tese em modelos advectivo-difusivos estacionários com velocidade constante, compondo a primeira contribuição técnica à literatura, com comparação cruzada com a MECDR para cenários de Péclet baixo para moderado (PINHEIRO; LOEFFLER; MANSUR, 2022). A MECDR foi pouco testada em modelos advectivo-difusivos estacionários de uma forma exclusiva, ou seja, sem utilizar a combinação com outras formulações, tanto para casos de velocidade constante como velocidade variável. Para casos de velocidade variável, especificamente, há disponíveis periódicos que utilizam uma engenhosa decomposição dos campos físicos de interesse em um valor médio adicionada de uma flutuação, tratando o primeiro com a formulação clássica que utiliza a solução fundamental e a flutuação aproximada via MECDR (WROBEL; DEFIGUEIREDO, 1991; AL-BAYATI; WROBEL, 2018a). Em detrimento a isto, nesta tese utilizam-se formulações do MEC puramente ancoradas em propostas de aproximação por bases radiais, a saber, MECID e MECDR, de forma a inferir acerca do desempenho relativo entre as técnicas. É relevante salientar que apenas os testes com MECDR, de forma isolada, para cenários de Péclet baixo para moderado já são, por si só, uma contribuição ao campo de pesquisa.

Um sequência natural da pesquisa neste tipo de problema é a proposta de novas

formulações MECID que contemplem situações físicas com campo variável de velocidade. Realiza-se nesta tese, um comparativo entre duas formulações distintas do MECID, a saber, clássica e alternativa, com o MECDR em modelos matemáticos convectivo-difusivo-reativos, de forma a avaliar, de forma isolada, os efeitos físicos desafiadores para as formulações baseadas em funções de base radiais: efeitos de convecção dominante, impacto do divergente de velocidade, e também da presença de termos reativo e fonte, na formulação.

3 Fundamentos de Elementos de Contorno

3.1 Teoria de Campo

O advento da Teoria de Campo caracterizou uma nova fase da pesquisa em engenharia, pois permitiu a unificação de uma abordagem matemática comum para distintos fenômenos físicos de interesse. A ideia conceitual de campo pode ser descrita, simplificada, como um mapeamento espacial das propriedades e variáveis de interesses do fenômeno físico, ao longo de um meio contínuo, através de funções matemáticas, que atribuem, a cada ponto no espaço, valores associados às variáveis de interesse. A ideia do campo se correlaciona com outros conceitos como o de potencial motriz, equipotenciais e linhas de fluxo, entidades estas que permitem interpretações mais amplas acerca de distintos fenômenos da engenharia, em comparação com a amplitude de representação mais simplificada de modelos mecanicistas clássicos ([MOON; SPENCER, 2012](#)).

A representação físico-matemática de forma mais generalizada fornecida pela Teoria de Campo permitiu o estabelecimento de analogias em forma de similaridade, uma vez que uma enorme gama de fenômenos físicos obedecem um mesmo conjunto de leis físicas de caráter conservativo, tal como balanços de massa, momentum e energia. Essa similaridade permitiu avanços para uma compreensão mais profunda dos fenômenos e um trabalho computacional mais eficiente onde uma estrutura de modelo pode governar um grupo de fenômenos ([LOEFFLER, 1988](#)).

A associação de cada ponto espacial do meio contínuo a um único valor ou magnitude caracteriza o que pode-se chamar de campo escalar enquanto a associação de entidades que necessitam de mais informações em cada ponto do espaço também podem caracterizar um campo vetorial ou mesmo campos de maior ordem tensorial. Nesta tese, o enfoque será dado na solução computacional de problemas da chamada Teoria de Campo Escalar, e portanto, é conveniente a proposta de um modelo matemático mais robusto que possa representar, a depender de simplificações, uma série de fenômenos de engenharia de forma simultânea, e a este modelo intrinsecamente matemático dá-se o nome de Equação de Campo Escalar Generalizada ([LOEFFLER, 1992](#); [BULCÃO, 1999](#)).

3.1.1 Equação de Campo Escalar Generalizada

A Equação de Campo Escalar Generalizada consiste na proposta de um modelo matemático versátil, e que permita, com pequenos ajustes, a representação de diversos fenômenos de interesse de engenharia. A Eq. (3.1), mostrada a seguir representa este modelo estritamente matemático em notação indicial ([LOEFFLER, 1992](#)).

$$[K_{ij}u_{,j}]_{,i} - \lambda_n D^n(u) = p \quad i, j = 1, 2 \quad n = 0, 1, 2 \quad (3.1)$$

As variáveis presentes na Eq. (3.1) podem ser bem definidas de acordo com a sequência e a equação é válida para representar problemas bidimensionais.

- u representa o campo potencial.
- K_{ij} é um diádico de propriedades físicas do meio contínuo.
- λ_n é um coeficiente escalar associado a derivada de ordem n
- D^n é um operador de derivada temporal de ordem n , no formato $D^n(u) = \frac{\partial^n(u)}{\partial t^n}$
- p função escalar de ação de domínio.

São diversos os problemas que podem ser representados pela Eq. (3.1) tais como difusão de calor, escoamento potencial, fluxo em meio poroso, difusão de massa, torção em barras prismáticas, deflexão de membranas, propagação de ondas acústicas, problemas de autovalor e autovetor, dentre muitos outros cujos exemplos podem ser visualizados na Figura 2, a seguir. Na seção a seguir são aplicadas algumas hipóteses e premissas que demonstram como a equação de caráter geral degenera-se em casos particulares.

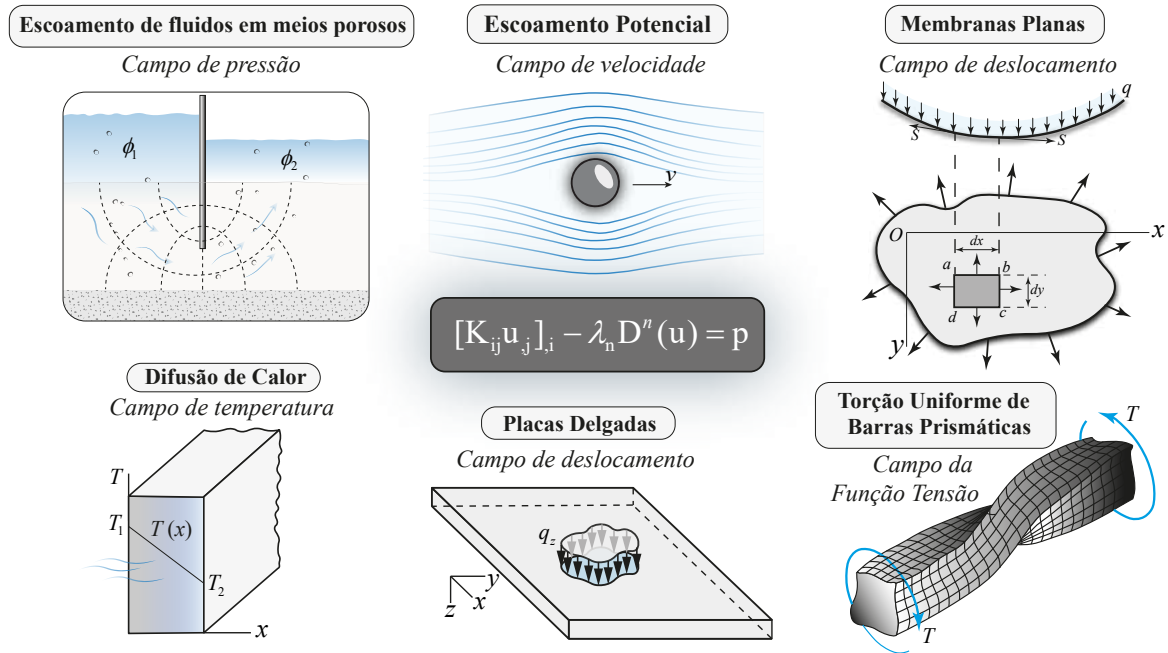


Figura 1 – C3 - Fenômenos Físicos

3.1.2 Modelos Matemáticos Particulares

Nesta seção pretende-se particularizar a Eq. (3.1) para alguns casos clássicos presentes na engenharia e ciências em geral. Entretanto, a priori é interessante analisar com um pouco mais de cautela a estrutura do modelo matemático em seu formato mais geral. Para melhorar um pouco a visualização expande-se a derivada do produto do primeiro termo da Eq. (3.1), desdobrando-o em dois termos, tal como a seguir na Eq. (3.2).

$$[K_{ij,i}u_{,j} + K_{ij}u_{,ji}] - \lambda_n D^n(u) = p \quad i, j = 1, 2 \quad n = 0, 1, 2 \quad (3.2)$$

3.1.2.1 Equação de Geral de Transporte

Ne sequência, na Eq. (3.2), assume-se como premissa que a derivada do diádico K_{ij} seja igual ao campo de velocidade v_j , no primeiro termo. Para além disto, o somatório no terceiro termo de equação, relacionado as derivadas temporais, pode ser expandido em seus primeiro termos de ordem zero e um outro somatório para as demais derivadas, que continua em escrita fechada. Com isso, chega-se a Eq. (3.3), chamada de Equação Geral de Transporte.

$$K_{ij}u_{,ji} + v_j u_{,j} - \lambda_o u - \lambda_n D^n(u) = p \quad i, j, n = 1, 2 \quad (3.3)$$

A equação geral de transporte é um tipo de escrita comum na literatura de métodos numéricos, para representar matematicamente um modelo geral contendo, na ordem em que aparecem na Eq. (3.3), transportes realizados por efeitos difusivos, advectivos e reativos, além de contemplar a possibilidade e avanço no tempo e também uma carga de domínio (MALALASEKERA, 2007; BECKER; CAREY; ODEN, 1981; ÖZİŞİK et al., 2017). Este tipo de representação matemática é útil para expor a formulação matemática de todo e qualquer método numérico, uma vez que, permite a abordagem matemática individualizada de cada termo de transporte, metodologia esta, utilizada também nesta tese, em proposta de novas formulações que solucionem modelos difusivo-advetivos com presença de termos reativos ou ações de domínio.

Na Eq. (3.3), a presença dos termos de derivadas temporais define se um modelo transiente ou estacionário será gerado. Além disso a natureza do diádico K_{ij} pode gerar problemas não-lineares ou lineares, de acordo com a dependência funcional do diádico com o campo potencial u . Por fim, modelos heterogêneos podem ser representados, desde que o diádico tenha dependência funcional com as coordenadas espaciais ou casos homogêneos, por sua vez, se o diádico for independente das variáveis espaciais. Por fim, fisicamente, o diádico caracterizar um meio contínuo anisotrópico, ortotrópico ou isotrópico (REDDY, 1993). Considere por simplicidade de exposição a adoção das premissas simplificadoras tais diádico K_{ij} com natureza linear, e meio contínuo homogêneo e isotrópico, e com isso,

pode-se escrever o diádico na equação de governo como simplesmente K . A Eq. (3.3) pode ser facilmente simplificada e degenera-se em alguns dos modelos matemáticos mais clássicos quando trata-se de física-matemática para engenharia. A seguir são feitas algumas exposições de alguns destes modelos.

3.1.2.2 Equação da Onda Acústica

A equação diferencial de governo que apresenta derivada temporal de segunda ordem, Eq. (3.4) tem capacidade de representar modelos dinâmicos. Este modelo por sua vez, tem natureza hiperbólica (KREYSZIG, 1967; TIKHONOV; SAMARSKII, 2013).

$$Ku_{,ii} - \lambda_2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = p \quad (3.4)$$

Este tipo de modelo matemático governa processos rápidos de transporte de energia, como por exemplo a propagação de ondas acústicas, motivo pela qual, de forma mais simples, dá-se o nome de Equação da Onda Acústica.

3.1.2.3 Equação da Difusão

O modelo diferencial que apresenta dependência no tempo em derivada de primeira ordem, tal como na Eq. (3.5), representa problemas transientes e aperiódicos, cuja classificação da equação diferencial é parabólica (LOEFFLER, 1992; TIKHONOV; SAMARSKII, 2013).

$$Ku_{,ii} - \lambda_1 \frac{\partial u}{\partial t} = p \quad (3.5)$$

Este tipo de equação descreve fisicamente processos lentos de transformação tais como transferência de calor por condução, fluxos através de meios porosos ou mesmo difusão viscosa.

3.1.2.4 Equação de Advecção-Difusão

Considere a ausência de transporte reativo na Eq. (3.3), tal como um regime estacionário. Então, pode-se escrever um modelo que só contabiliza transporte por difusão e advecção. Este tipo de modelo, da Eq. (3.6) é um desafio para todos os métodos numéricos mais clássicos como diferenças finitas (PLETCHER; TANNEHILL; ANDERSON, 2012), elementos finitos (BATHE, 1996) elementos de contorno (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012) e também volumes finitos (MALALASEKERA, 2007), por conta da perda de precisão e estabilidade frente a efeitos advectivos mais intensos. A natureza matemática deste modelo pode ser parabólica ou hiperbólica, a depender do número de Péclet (BOKOTA; ISKIERKA, 1995).

$$Ku_{,ii} + v_j u_{,j} = p \quad i, j = 1, 2 \quad (3.6)$$

Os exemplos físicos representados por este modelo são diversos, entre eles pode-se citar escoamentos com transferência de calor convectiva, escoamento isotérmico de fluídos viscosos dominados pela equação de Navier-Stokes e também transporte convectivo de massa como no caso de dispersão de poluentes. Este modelo tem relação estreita com o cerne desta tese, que pretende propor novas formulações do método de elementos de contorno que se comportem de forma precisa e estável frente efeitos de advecção com intensidade de fraca a moderada.

3.1.2.5 Equação de Helmholtz

Os modelos descritos por equações diferenciais de governo com derivada temporal de ordem zero, ou seja, transporte reativo, normalmente representam fisicamente problemas de configurações de equilíbrio independente do tempo, ou problemas estacionários. A natureza matemática da Eq. (3.7) é elíptica ([TIKHONOV; SAMARSKII, 2013](#)).

$$Ku_{,ii} - \lambda_o u = p \quad i = 1, 2 \quad (3.7)$$

A versão homogênea da Eq. (3.7) é denominada Equação de Helmholtz. Este clássico modelo pode ser interpretado como um problema de autovalores escalares, λ , e autovetores associados que representam configurações possíveis de um sistema, expressadas pelo campo potencial u , de modo a tornar a configuração do sistema auto-equilibrada, sem influência de ação de domínio.

3.1.2.6 Equação de Poisson

Na ausência de termos advectivos e reativos, tem-se um problema estacionário com a presença de fonte, fluxos ou forças de corpo no interior do domínio, representados pelo termo p , e o modelo é denominado de Equação de Poisson, que é um modelo matemático elíptico ([ÖZİŞİK et al., 2017](#); [BREBBIA](#); [TELLES](#); [WROBEL, 2012](#); [LOEFFLER, 1992](#)).

$$Ku_{,ii} = p \quad i = 1, 2 \quad (3.8)$$

A forma homogênea da Eq. (3.8) é chamada de Equação de Laplace, onde as ações externas atuam estreitamente via condições de contorno impostas junto ao contorno do domínio.

3.1.3 Condições Impostas

A completude dos modelos matemáticos governantes de interesse a engenharia normalmente tem seu fechamento com o estabelecimento de condições matemáticas adequadas, de acordo com a quantidade e tipo das equações diferenciais que compõe o modelo. Estas condições, por sua vez, podem ser de dois tipos: condições de contorno e condições iniciais. As primeiras dizem respeito a um fechamento matemático espacial do problema enquanto as seguintes são inerentes às condições do marco temporal zero do sistema para em seguida executar a marcha no tempo.

3.1.3.1 Condições de Contorno

No tocante a condições de contorno, há uma infinidade de propostas na literatura, entretanto, de forma inequívoca, as mais clássicas podem ser sintetizadas em três: condição de Dirichlet, condição de Neumann e condição de Robin (ÖZİŞIK et al., 2017). Uma breve explanação sobre cada uma das três é dada na sequência.

3.1.3.2 Condição de Contorno de Dirichlet

A condição de Dirichlet, também conhecida como condição essencial, ou de potencial prescrito se caracteriza por prescrever um valor $\bar{u}$ da variável de campo primal ao longo do contorno do domínio físico do problema. Algebricamente, escreve-se tal como na Eq. (3.9):

$$u(X) = \bar{u}(X) \quad (3.9)$$

3.1.3.3 Condição de Contorno de Neumann

A condição de Neumann, também denominada de condição natural ou de fluxo prescrito, pode ser conceituada como a imposição de um valor de fluxo conhecido $\bar{q}$ a uma parte do contorno do domínio físico. Neste modelo matemático, o fluxo imposto é sempre normal ao contorno, onde n é a direção do vetor externo normal ao contorno. Matematicamente, este tipo de condição de contorno representa-se tal como na Eq. (3.10), na sequência.

$$q(X) = \frac{\partial u(X)}{\partial n} = \frac{\bar{q}(X)}{K} \quad (3.10)$$

3.1.3.4 Condição de Contorno de Robin

A condição de Robin, também chamada de condição mista é caracterizada quando prescreve-se a ao contorno de uma porção do domínio físico uma combinação linear entre um fluxo e potencial. Na seara da engenharia, este tipo de condição pode ser encontrada, por exemplo, em modelos de transferência de calor convectiva. Esta condição híbrida pode

ser algebricamente escrita tal como na Eq. (3.11) a seguir.

$$\alpha \frac{\partial u(X)}{\partial n} + \beta u(X) = \phi \quad (3.11)$$

3.1.3.5 Condições Iniciais

Os modelos matemáticos que envolvem fenômenos com marcha ou avanço no tempo, necessitam de condições que reúnem o mínimo de informação sobre o estado inicial do sistema para serem bem postos matematicamente. Os modelos mais frequentes na física matemática envolvem derivadas temporais de primeira e segunda ordem, que demandam, respectivamente, condições no instante zero, do campo potencial e de sua derivada primeira, como mostrado na Eq. (3.12).

$$\begin{aligned} u(X, 0) &= u_0(X) \\ \dot{u}(X, 0) &= \dot{u}_0(X) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Tais fenômenos físicos com modelos correlatos de avanço no tempo podem ser encontrados em problemas ligados a difusão de calor, propagação de ondas, vibrações mecânicas dentre diversos outros (BUTKOV, 1988).

3.2 Filosofia do Método de Elementos de Contorno

O método dos elementos de contorno (MEC), em sua concepção mais clássica, tem como base de sua lógica a geração de uma sentença integral apenas no contorno do domínio físico, podendo representar um problema bidimensional com apenas uma dimensão, ou mesmo simplificar a solução de um problema tridimensional para uma discretização de uma superfície (WROBEL, 2002).

A dedução da sentença integral de contorno pode ser alcançada por diversas formas alternativas e equivalentes como pelo método dos resíduos ponderados, teorema de reciprocidade de Betti, terceira identidade de Green ou mesmo pelo princípio dos trabalhos virtuais (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994).

3.2.1 Sentença Integral

Para iniciar a exposição conceitual do MEC toma-se a equação de Laplace, dada pela Eq. (3.13), modelo de governo simples e de importância singular na engenharia.

$$u_{,ii} = 0 \quad (3.13)$$

Multiplica-se a Eq. (3.13) por uma função especial u^* , cuja definição detalhada é

dada mais a frente, e integra-se ao longo do domínio, gerando a Eq. (3.14), que é chamada de sentença integral forte do problema de Laplace.

$$\int_{\Omega} u_{,ii} u^* d\Omega = 0 \quad (3.14)$$

Aplica-se então a integração por partes duas vezes sobre o núcleo da integral anterior, e a seguinte sentença integral dada pela Eq. (3.15) pode ser escrita.

$$\int_{\Omega} u u^*_{,ii} d\Omega + \int_{\Omega} (u_{,i} u^*)_{,i} d\Omega - \int_{\Omega} (u u^*_{,i})_{,i} d\Omega = 0 \quad (3.15)$$

Uma observação atenta sobre a estrutura matemática de Eq. (3.15) revela que as operações de derivada segunda, originalmente sobre o campo potencial u , na equação de governo, já foram transferidas para a função especial u^* , no primeiro termo integral. O segundo e o terceiro termos integrais podem ser abordados pela Teorema da Divergência (KREYSZIG, 1967), de acordo com as igualdades da Eq. (3.16) e com isso devidamente conduzidos a uma escrita de contorno.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (u_{,i} u^*)_{,i} d\Omega &= \int_{\Gamma} u^* u_{,i} n_i d\Gamma \\ \int_{\Omega} (u u^*_{,i})_{,i} d\Omega &= \int_{\Gamma} u u^*_{,i} n_i d\Gamma \end{aligned} \quad (3.16)$$

Neste ponto, por maior facilidade na representação, define-se os fluxos ligados ao campo primal como sendo o produto do vetor normal ao contorno pela gradiente do campo potencial primal ou mesmo da função auxiliar especial, de acordo com a Eq. (3.17).

$$\begin{aligned} q &= u_{,i} n_i \\ q^* &= u^*_{,i} n_i \end{aligned} \quad (3.17)$$

Ao utilizar a as escritas de fluxo da Eq. (3.17), inserindo-as nas Eq. (3.16) e Eq. (3.15), tem-se a seguinte sentença matemática.

$$\int_{\Omega} u u^*_{,ii} d\Omega - \int_{\Gamma} u q^* d\Gamma + \int_{\Gamma} q u^* d\Gamma = 0 \quad (3.18)$$

Na Eq. (3.18), é possível constatar que apenas o primeiro termo integral ainda encontra-se escrito em termos de uma integral de domínio. Para o tratamento adequado deste termo e sua adequada condução a uma representação de contorno, faz-se necessária antes a definição mais detalhada da função especial u^* , denominada de solução fundamental do problema de Poisson.

A filosofia clássica do método de elementos de contorno, utiliza como função auxiliar ou função especial u^* , que é a resposta em termos de potencial, da aplicação de uma carga

de domínio pontual ou pulso, matematicamente representada pela função delta de Dirac, a um domínio infinito, situação esta denominada de problema fundamental (BUTKOV, 1988; BREBBIA; WALKER, 1980) e ilustrada pela Figura 2.

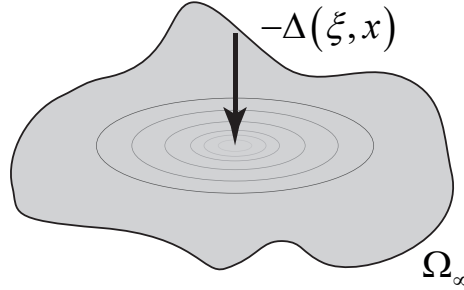


Figura 2 – C3 - Carga/Pulso atuando em Meio Infinito

Algebricamente, o problema fundamental de Poisson, pode ser representado pela Eq. (3.19), na sequência. A solução deste problema, dá-se o nome de solução fundamental u^* .

$$u_{,ii}^*(\xi; X) = -\Delta(\xi; X) \quad (3.19)$$

A Eq. (3.19) caracteriza-se, estritamente, como um modelo de Poisson, uma vez que tem-se o termo difusivo representado pela laplaciano da solução fundamental do lado esquerdo e o delta de Dirac, representando uma carga de domínio do lado direito. É interessante observar que todo problema fundamental tem como característica a presença da carga de domínio em forma pulso, independente do modelo correlato. As soluções fundamentais para os principais modelos de interesse na seara de elementos de contorno podem ser encontrados na literatura (BREBBIA; WALKER, 1980). No caso do problema de Poisson, a solução fundamental, u^* , e o fluxo correlacionado a ela, q^* , são dados abaixo pelas Eq. (3.20) e Eq. (3.21), respectivamente. A solução detalhada do problema fundamental de Poisson pode ser encontrada na literatura (LOEFFLER, 1988).

$$u^*(\xi; X) = -\frac{1}{2\pi} \ln[r(\xi; X)] \quad (3.20)$$

$$q^* = -\frac{1}{2\pi r(\xi; X)} \frac{\partial r(\xi; X)}{\partial n} \quad (3.21)$$

Retornando ao tratamento do termo de integral de domínio, na Eq. (3.18), substitui-se a função Delta de Dirac com sinal negativo no lugar do laplaciano da solução fundamental, de acordo com a sentença do problema fundamental da Eq. (3.19). Na sequência, faz-se valer de uma propriedade do Delta de Dirac (ZILL; CULLEN, 2009), para chegar a igualdade a seguir, da Eq. (3.22).

$$\int_{\Omega} u(X) u_{,ii}^*(\xi; X) d\Omega = - \int_{\Omega} u(X) \Delta(\xi; X) d\Omega = -u(\xi) \quad (3.22)$$

A propriedade supracitada estabelece que a integral ao longo do domínio do produto de uma função genérica pelo delta de Dirac, retorna a imagem desta função no ponto de aplicação do pulso, e por isso o resultado simplifica-se ao valor do potencial u no ponto ξ , que, no contexto do método de elementos de contorno, se caracteriza como ponto fonte, que por sua vez, interage com todos os outros nós, chamados de pontos campo X .

Para generalizar o resultado obtido na Eq. (3.22), é preciso considerar o posicionamento do ponto fonte ξ , ou seja, do pulso, em relação ao contorno e ao domínio interno do problema físico. Desta forma, insere-se uma constante de ajuste $c(\xi)$, conforme a Eq. (3.23), para conferir generalidade aos resultados da reescrita da primeira integral da sentença da Eq. (3.18).

$$- \int_{\Omega} u(X) \Delta(\xi; X) d\Omega = -c(\xi) u(\xi) \quad (3.23)$$

A determinação do valor da constante de posicionamento do ponto fonte ξ segue as premissas da Eq. (3.24), e demais detalhes podem ser encontrados na literatura clássica do MEC (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012; BREBBIA; WALKER, 1980; BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994).

$$c(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{se } (\xi \notin (\Omega + \Gamma)) \\ 1 & \text{se } ((\xi \in \Omega) \text{ e } (\xi \notin \Gamma)) \\ \alpha/2\pi & \text{se } (\xi \in \Gamma) \end{cases} \quad (3.24)$$

Por fim, a substituição da igualdade da Eq. (3.23), de volta na Eq. (3.18) permite escrever a formulação integral inversa do problema de Laplace, dada a seguir.

$$c(\xi) u(\xi) + \int_{\Gamma} u q^* d\Gamma - \int_{\Gamma} q u^* d\Gamma = 0 \quad (3.25)$$

A sentença integral da Eq. (3.25) é contínua e exata, e portanto, representa e governa o problema de Laplace tal como a forma da equação diferencial original, no formato da Eq. (3.13). Os próximos passos mostrados na sequência, dentro do contexto do Método de Elementos de Contorno, consistem em conduzir a Eq. (3.25) para o domínio discreto e permitir que o problema seja solucionado de forma aproximada.

3.2.2 Tipos de Elementos de Contorno e o Jacobiano

O processo de discretização consiste em subdividir um domínio contínuo em um número finito de partes ou mais comumente denominados de elementos. No tocante a

compreender melhor como fazer a transposição de uma sentença integral contínua para o domínio discreto e consequentemente até o sistema linear final, alguns tópicos fundamentais são abordados na sequência.

3.2.2.1 Sistema de Coordenadas Naturais

No intuito de facilitar todas as operações feitas a nível de elemento, utiliza-se uma transformação de coordenadas do sistema global X para um sistema de coordenadas naturais ou normais η . Tal sistema independe da forma do elemento de contorno, tendo a origem centrada no comprimento do elemento, $\eta = 0$, e as extremidades $\eta = -1$ e $\eta = +1$, como as extremidades esquerda e direita do elemento, respectivamente. Tal transformação tem duas vantagens principais: facilitar a padronização das funções de interpolação e facilitar a aplicação de métodos de integração numérica, que normalmente, trabalham com intervalos de integração normalizados entre -1 à $+1$ (BECKER; CAREY; ODEN, 1981).

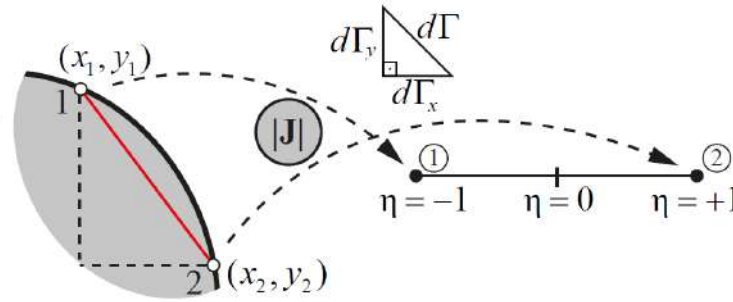


Figura 3 – C3 - Transformação de Sistemas de Coordenadas

A Figura 3 representa a transformação de coordenadas do sistema global X para o sistema natural η feita através do conceito do jacobiano da transformação (REDDY, 2010). Perceba que ao transformar as coordenadas para o sistema natural é efetuada uma normalização. Matematicamente, pode-se representar da seguinte maneira a normalização feita pelo jacobiano $|J|$, pela Eq. (3.26) que segue.

$$d\Gamma = |J|d\eta \quad (3.26)$$

3.2.2.2 Elemento Constante

O conceito de elemento de contorno constante é caracterizado pelos valores constantes das variáveis físicas de potencial e fluxo ao longo do comprimento do elemento, conforme pode ser visualizado na Figura 4 e algebricamente na Eq. (3.27). Este tipo de elemento é definido como hipoparamétrico (BATHE, 1996), uma vez que a geometria pode variar de forma linear e utilizar funções de forma lineares, enquanto as variáveis do problema utilizam função de interpolação constante, dada na Eq. (3.27).

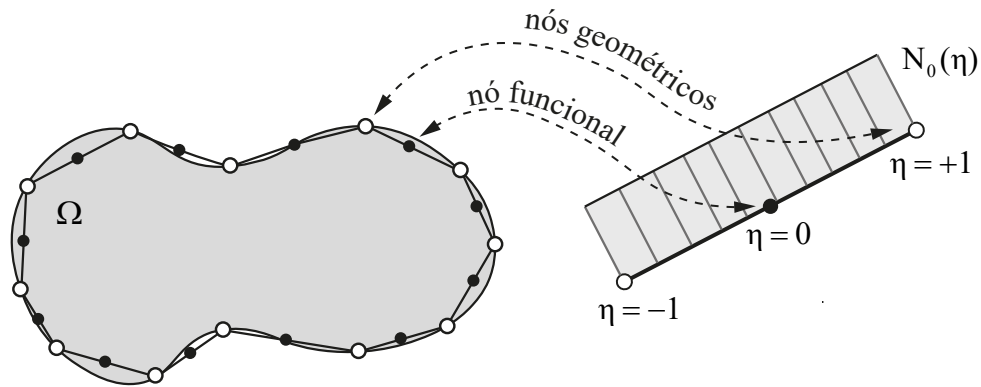


Figura 4 – C3 - Elemento Constante

$$N_0(\eta) = 1 \quad (3.27)$$

Por ser este o primeiro tipo de elemento de contorno a ser apresentado faz sentido delinear propriamente os conceitos de nós geométricos e nós funcionais. Nós geométricos, tal como posto na Figura 4, são os nós que definem as extremidades da geometria do elemento de contorno no sistema de coordenadas globais X . Por sua vez, os nós funcionais são aqueles pontos nodais onde são realizados os cálculos de valores incógnitos de fluxo e potencial do problema, ou seja estão diretamente ligados ao sistema matricial resultante do MEC.

3.2.2.3 Elemento Linear

Este tipo de elemento de contorno, mais elaborado que o anterior, é classificado como sendo isoparamétrico, ou seja, as variáveis do problema são aproximadas usando funções de interpolação da mesma ordem das funções de forma ligadas a representação aproximada da geometria. Com isso há uma coincidência entre nós funcionais e nós geométricos mostrada na Figura 5.

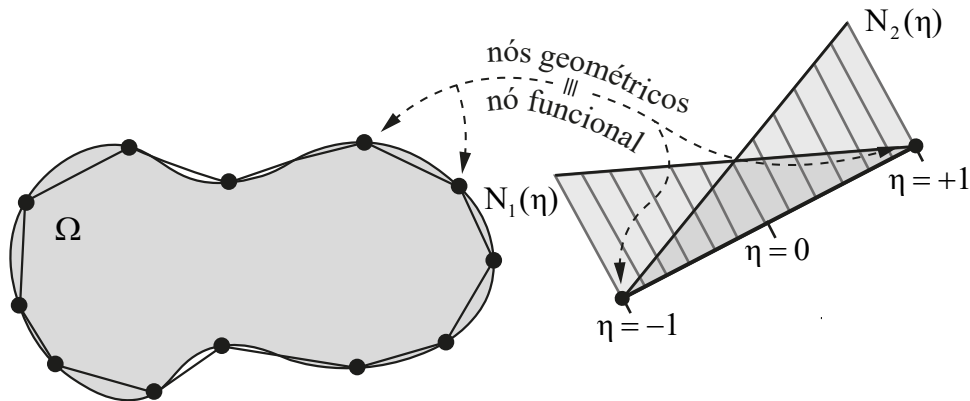


Figura 5 – C3 - Elemento Linear

Ainda na Figura 5, nota-se que há duas funções de interpolação $N_1(\eta)$ e $N_2(\eta)$, sobre o elemento, que são propriamente definidas algebricamente na Eq. (3.28) abaixo.

$$N_1(\eta) = \frac{1}{2}(1 - \eta) \quad N_2(\eta) = \frac{1}{2}(1 + \eta) \quad (3.28)$$

As aproximações dos campo potencial u e sua derivada q no interior das integrais de contorno são dadas pela Eq. (3.29). Perceba que no caso de elementos lineares as funções de interpolação são explicitadas e deverão ser também integradas, ao contrário da simplicidade do elemento constante, no qual as incógnitas simplesmente deixam as integrais por não terem dependência com a variável natural η .

$$\begin{aligned} u(\eta) &= N_1 u_1 + N_2 u_2 = [N_1 N_2] \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = \mathbf{N}^T \mathbf{u}^n \\ q(\eta) &= N_1 q_1 + N_2 q_2 = [N_1 N_2] \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} = \mathbf{N}^T \mathbf{q}^n \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.2.2.4 Determinação do Jacobiano

Para determinação do Jacobiano da transformação, considere o triângulo pitagórico na Figura 3. Aproxima-se aqui, com os princípios da geometria diferencial (KREYSZIG, 2013) a curvatura do contorno por sua secante e pode-se estabelecer a Eq. (3.30).

$$(d\Gamma)^2 = (d\Gamma_X)^2 + (d\Gamma_Y)^2 \quad (3.30)$$

Com álgebra simples pode-se constatar que a equação anterior pode ser reescrita incluindo os diferenciais em relação a coordenada normal η , de acordo com a Eq. (3.31) a seguir.

$$d\Gamma = \sqrt{\left(\frac{d\Gamma_X}{d\eta}\right)^2 + \left(\frac{d\Gamma_Y}{d\eta}\right)^2} d\eta \quad (3.31)$$

Comparando-se o conceito algebricamente exposto na Eq. (3.26) com a Eq. (3.31) apresentada anteriormente, pode-se concluir que o Jacobiano para o caso bidimensional é dado, de forma geral pela Eq. (3.32).

$$|J| = \sqrt{\left(\frac{\partial \Gamma_X}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial \Gamma_Y}{\partial \eta}\right)^2} \quad (3.32)$$

Levando em consideração que as mesmas funções de interpolação lineares são utilizadas para aproximar a geometria quanto as variáveis básicas, pode-se estabelecer os valores das derivadas que compõe o Jacobiano, de acordo com a Eq. (3.33).

$$\frac{\partial \Gamma_x}{\partial \eta} = \frac{\partial N_1}{\partial \eta} x_1 + \frac{\partial N_2}{\partial \eta} x_2 \quad \frac{\partial \Gamma_y}{\partial \eta} = \frac{\partial N_1}{\partial \eta} y_1 + \frac{\partial N_2}{\partial \eta} y_2 \quad (3.33)$$

Tanto no caso de elementos lineares quanto no caso de elementos constantes, a aproximação da geometria é feita por polinômios de Lagrange de primeira ordem, em outras palavras, as funções de forma são lineares. Ao executar as derivadas das funções de forma lineares que aparecem na Eq. (3.33) e substituí-la na Eq. (3.32), de formato geral, é possível chegar a seguinte expressão para o Jacobiano de elementos constante e lineares.

$$|J| = \frac{1}{2} \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} = \frac{l_e}{2} \quad (3.34)$$

Observe na Eq. (3.34), que o Jacobiano numericamente também equivale a metade do tamanho do elemento, e, portanto, tem um valor constante ao longo do elemento, não tendo dependência com a coordenada natural η .

3.2.3 Discretização da Equação Integral

O processo de discretização do método de elementos de contorno exige a seleção do tipo de elemento de contorno. No caso da vigente tese, apresenta-se sinteticamente o fluxo com elementos lineares, uma vez que, são estes os utilizados nos testes computacionais a posteriori. Reescreve-se a Eq. (3.25) agora com notação um pouco distinta para melhor apresentar o processo de discretização. A Eq. (3.35) ainda é contínua e exata.

$$c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} uq^* d\Gamma = \int_{\Gamma} qu^* d\Gamma \quad (3.35)$$

Com a discretização o contorno do domínio físico é dividido em N elementos de contorno lineares, e por isso as integrais de contorno presentes na sentença já passam a ser escritas em formato discreto na Eq. (3.36), que segue. A partir deste ponto o índice i representa o nó onde é colocado o ponto fonte ξ , enquanto j representa os pontos campo X que interagem com os anteriores.

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} uq^* d\Gamma = \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} u^* q d\Gamma \quad (3.36)$$

Por conveniência relembra-se aqui, na Eq. (3.37) a interpolação dos campos de potencial e fluxo usando as funções de interpolação lineares N_1 e N_2 , cujos formatos já foram expostos em seção anterior.

$$\begin{aligned}
u(\eta) &= N_1 u_1 + N_2 u_2 = [N_1 N_2] \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = N^T u^n \\
q(\eta) &= N_1 q_1 + N_2 q_2 = [N_1 N_2] \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} = N^T q^n
\end{aligned} \tag{3.37}$$

A priori vamos inserir a aproximação do campo potencial u na primeira integral de contorno da Eq. (3.36).

$$\int_{\Gamma_j} u q^* d\Gamma = \int_{\Gamma_j} [N_1 N_2] q^* d\Gamma \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} = [h_{ij}^1 h_{ij}^2] \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{Bmatrix} \tag{3.38}$$

Define-se h_{ij}^k como coeficiente de influência definindo a interação do nó i , onde aloca-se o ponto fonte ξ , com um nó particular k (nó 1 ou 2), em um elemento genérico j . A definição matemática dos dois coeficientes de influência para cada elemento é dada a seguir pela Eq. (3.39).

$$h_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 q^* d\Gamma \quad h_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 q^* d\Gamma \tag{3.39}$$

O tratamento dado a segunda integral de contorno na Eq. (3.40) é análogo, inserindo a aproximação da derivada do campo potencial, q . As definições dos coeficientes de influência g_{ij}^k , seguem estruturas análogas, tal como mostra a Eq. (3.41).

$$\int_{\Gamma_j} q u^* d\Gamma = \int_{\Gamma_j} [N_1 N_2] u^* d\Gamma \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} = [g_{ij}^1 g_{ij}^2] \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{Bmatrix} \tag{3.40}$$

$$g_{ij}^1 = \int_{\Gamma_j} N_1 u^* d\Gamma \quad g_{ij}^2 = \int_{\Gamma_j} N_2 u^* d\Gamma \tag{3.41}$$

Se cada elemento de contorno tem dois coeficientes de influência, e dois elementos adjacentes compartilham sempre um nó, este reflexo deve aparecer na montagem das matrizes locais e posteriormente na formação de um sistema matricial global. Aqui o procedimento executado para a montagem das matrizes globais através do acoplamento dos coeficientes de influência de cada elemento é análoga a procedimentos conhecidos do método de elementos finitos (BECKER; CAREY; ODEN, 1981; BATHE, 1996). O sistema global de uma linha de ponto fonte ξ , colocado em i é dada pela Eq. (3.42).

$$c_i u_i + [\hat{H}_{i1} \hat{H}_{i2} \dots \hat{H}_{iN}] \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{Bmatrix} = [G_{i1} \ G_{i2} \ \dots \ G_{iN}] \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \end{Bmatrix} \tag{3.42}$$

Os coeficientes globais $\hat{H}_{ij}$ e G_{ij} são obtidos somando as influências dos dois elementos adjacentes que contabilizam cada nó, de acordo com a álgebra da Eq. (3.43). Também é interessante colocar que a diferenciação dos coeficiente como $\hat{H}_{ij}$, deve-se a ausência da contabilização do coeficiente $c(\xi)$ até o momento.

$$\hat{H}_{ij} = h_{ij-1}^2 + h_{ij}^1 \quad G_{ij} = g_{ij-1}^2 + g_{ij}^1 \quad (3.43)$$

Com as influência de cada elemento é possível concatenar, através da Eq. (3.43), um sistema global com a estrutura da Eq. (3.44).

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^N \hat{H}_{ij} u_j = \sum_{j=1}^N G_{ij} q_j \quad (3.44)$$

Para gerar uma escrita mais compacta pode-se a partir dos valores determinados de c_i , acoplar estes termos a diagonal dos coeficientes $\hat{H}_{ij}$, transformando-os em H_{ij} , chegando-se ao formato discreto do sistema da Eq. (3.45).

$$\sum_{j=1}^N H_{ij} u_j = \sum_{j=1}^N G_{ij} q_j \quad (3.45)$$

A Eq. (3.45) em formato matricial é exposta abaixo na Eq. (3.46). Este sistema matricial com incógnitas em u e q é característico do método de elementos de contorno, que trabalha com determinação de potenciais e fluxos de forma unificada.

$$[H] [u] = [G] [q] \quad (3.46)$$

3.3 Técnicas de Transformação de Integrais de Domínio

Um dos principais desafios do método de elementos de contorno é lidar com integrais de domínio que façam parte da sentença integral e que não possam ser facilmente conduzidas a uma escrita de contorno. As principais técnicas de transformação de integrais de domínio estão listadas abaixo.

1. Integração Analítica
2. Expansão em Séries de Fourier
3. Tensor de Galerkin
4. Método da Múltipla Reciprocidade
5. Técnica da Dupla Reciprocidade

6. Técnica da Integração Radial

7. Técnica da Interpolação Direta

As primeiras duas opções, com enfoque analítico, ficam muito restritas ao nível de complexidade do modelo matemático, e portanto, não podem ser consideradas como técnicas de natureza generalista, pois são restritas a casos mais simples. As opções seguintes fazem parte do desenvolvimento do método de elementos de contorno e por isso são conceitualmente descritas na sequência.

3.3.1 Tensor de Galerkin

A estratégia do tensor de Galerkin consiste em uma das técnicas pioneiras na literatura de elementos de contorno a transformar uma integral ligada a ações de domínio em uma integral de contorno. A estratégia é elegante, e se utiliza de uma função biarmônica, w^* , para executar a transformação (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012) conforme mostrado sinteticamente a seguir.

A priori considera-se aqui que a ação de domínio b , do modelo de Poisson a ser solucionado pela Eq. (3.47), seja harmônica, ou seja, que odebeça a sentença de Laplace dada pela Eq. (3.48).

$$\int_{\Omega} u_{,ii} u^* d\Omega = \int_{\Omega} b u^* d\Omega \quad (3.47)$$

$$\nabla^2 b = 0 \quad (3.48)$$

Na sequência apresenta-se uma nova função w^* , que guarda uma correlação algébrica de primitiva com a solução fundamental do problema de Poisson, u^* , mostrada pela Eq. (3.49).

$$\nabla^2 w^* = u^* \quad (3.49)$$

Parte-se então da segunda identidade de Green, também chamada de princípio da reciprocidade, posto pela Eq. (3.50), que baseia-se em uma conversão de integrais de domínio para integrais de contorno.

$$\int_{\Omega} (b \nabla^2 w^* - w^* \nabla^2 b) d\Omega = \int_{\Gamma} \left(b \frac{\partial w^*}{\partial n} - w^* \frac{\partial b}{\partial n} \right) d\Gamma \quad (3.50)$$

Ao considerar a característica harmônica da ação de domínio b , dada pela Eq. (3.48), é possível simplificar a Eq. (3.50), tal como segue.

$$\int_{\Omega} bu^* d\Omega = \int_{\Gamma} b \frac{\partial w^*}{\partial n} d\Gamma - \int_{\Gamma} w^* \frac{\partial b}{\partial n} d\Gamma \quad (3.51)$$

A sentença integral da Eq. (3.51) já traz a integral de domínio correlata a ação da fonte reescrita em termos de duas integrais de contorno. Todavia, o formato da função especial w^* ainda continua incógnito. Para descobrir w^* , considere a escrita do Laplaciano da solução fundamental u^* , tal como abaixo na Eq. (3.52).

$$\nabla^2 u^* = \nabla^2 (\nabla^2 w^*) = \nabla^4 w^* = -\Delta_i \quad (3.52)$$

Substituindo a correlação de primitiva existente entre w^* e u^* na segunda igualdade da Eq. (3.52), deduz-se que a função w^* é, na verdade, a solução fundamental da equação bi-harmônica. Em duas dimensões w^* é bem conhecido (PARTRIDGE; BREBBIA; WROBEL, 1992) e dado por:

$$w^* = \frac{r^2}{8\pi} \left[\ln \left(\frac{1}{r} \right) + 1 \right] \quad (3.53)$$

Uma vez que a função w^* é conhecida, suas derivadas por consequência podem ser determinadas e a sentença integral da Eq. (3.51) torna-se completamente conhecida.

3.3.2 Múltipla Reciprocidade

O método da múltipla reciprocidade (MMR) pode ser considerado como uma técnica de transformação de integrais de domínio em integrais de contorno que generaliza o que foi exposto anteriormente na técnica do tensor de galerkin, uma vez que, aplica um conjunto de soluções fundamentais de alta ordem para aplicar a identidade de Green para cada termo que surge do processo iterativo. O MMR foi proposto inicialmente por Nowak (NOWAK, 1989) e extendido pela pesquisas de Brebbia e Nowak (NOWAK; BREBBIA, 1989) a uma série de problema, incluindo modelos de Helmholtz e casos transientes.

Para demonstrar a proposta de Nowak, considere novamente um modelo de Poisson, na Eq. (3.54), apenas com um subíndice 0 na fonte b , para diferencias-la de outros termos que surgem ao longo da aplicação da técnica.

$$\nabla^2 u = b_0 \quad \text{in } \Omega \quad (3.54)$$

Ao aplicar as integrações por partes sobre o modelo da Eq. (3.54) pode-se chegar a formulação integral inversa, tal como segue na Eq. (3.55). Observe que a solução fundamental de Poisson, dada anteriormente pela Eq. (3.20), é aqui denominada de u_0^* . Esta diferenciação é necessária porque outras soluções fundamentais com mais alta-ordem serão utilizadas.

$$c_i u_i + \int_{\Gamma} u q_0^* d\Gamma + \int_{\Omega} b_0 u_0^* d\Omega = \int_{\Gamma} q u_0^* d\Gamma \quad (3.55)$$

Para tratar a integral de domínio que resta na Eq. (3.55), utiliza-se a mesma lógica do tensor de Galerkin, admitindo uma função auxiliar u_1^* que tenha a seguinte relação com a solução fundamental u_0^* , dada abaixo pela Eq. (3.56).

$$u_0^* = \nabla^2 u_1^* \quad (3.56)$$

Substituindo a correlação da Eq. (3.56), na integral de domínio a ser tratada, aplica-se agora a identidade de Green, levando em consideração que b_0 possa não ser harmônica, ou seja com $\nabla^2 b_0$ distinto de zero. Com isso tem-se a seguinte igualdade dada pela Eq. (3.57).

$$\int_{\Omega} b_0 u_0^* d\Omega = \int_{\Omega} b_0 \nabla^2 u_1^* d\Omega = \int_{\Gamma} b_0 q_1^* d\Gamma - \int_{\Gamma} u_1^* \frac{\partial b_0}{\partial n} d\Gamma + \int_{\Omega} u_1^* \nabla^2 b_0 d\Omega \quad (3.57)$$

Como o termo fonte b_0 é uma função conhecida, o valor de seu laplaciano $\nabla^2 b_0$ também é sabido, então, pode-se assumir uma nova função b_1 que guarde a seguinte relação com a anterior, como trazido pela Eq. (3.58).

$$b_1 = \nabla^2 b_0 \quad (3.58)$$

A nova correlação da Eq. (3.58) pode ser substituída na última integral do lado direito da Eq. (3.57), e a integral pode ser reescrita novamente aplicando-se a identidade de Green.

$$\int_{\Omega} b_1 u_1^* d\Omega = \int_{\Gamma} b_1 q_2^* d\Gamma - \int_{\Gamma} u_2^* \frac{\partial b_1}{\partial n} d\Gamma + \int_{\Omega} u_2^* \nabla^2 b_1 d\Omega \quad (3.59)$$

Desta forma, observa-se que na Eq. (3.59) a integral de domínio remanescente que envolve o laplaciano de b_1 também pode ser reescrita novamente, usando a mesma lógica, tal como segue na Eq. (3.60).

$$b_2 = \nabla^2 b_1 \quad (3.60)$$

Este processo iterativo pode ser realizado quantas vezes for necessário ou desejado. No limite é possível obter a formulação exata apenas em termo de integrais de contorno. Todavia, a desvantagem da técnica é lidar com soluções fundamentais de ordem muito elevadas, o que adiciona uma certa complexidade matemática que pode tornar a técnica mais enfadonha a depender do formato algébrico da fonte.

A abordagem do MMR pode ser sintetizada, de forma geral, com os dois passos a seguir, pela Eq. (3.61) e Eq. (3.62), numa lógica de recorrência.

$$\begin{aligned} b_{j+1} &= \nabla^2 b_j \\ \nabla^2 u_{j+1}^* &= u_j^* \quad \text{for } j = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.61)$$

Com isso a integral de domínio pode ser expressa com o seguinte formato:

$$\int_{\Omega} b_0 u_0^* d\Omega = \sum_{j=0}^{\infty} \int_{\Gamma} \left(b_j q_{j+1}^* - u_{j+1}^* \frac{\partial b_j}{\partial n} \right) d\Gamma \quad (3.62)$$

$$q_{j+1}^* = \partial u_{j+1}^* / \partial n \quad (3.63)$$

Por fim, inserindo a Eq. (3.62) na sentença da formulação integral inversa original, pode-se gerar a seguinte expressão para a formulação exata apenas em termos de integrais de contorno a seguir, na Eq. (3.64).

$$c_i u_i + \int_{\Gamma} u q_0^* d\Gamma - \int_{\Gamma} q u_0^* d\Gamma = - \sum_{j=0}^{\infty} \int_{\Gamma} \left(b_j q_{j+1}^* - u_{j+1}^* \frac{\partial b_j}{\partial n} \right) d\Gamma \quad (3.64)$$

Uma ideia interessante do potencial da técnica de múltipla reciprocidade pode ser encontrada no recente artigo de Balista et. al. (2023), em que a técnica é comparada com a dupla reciprocidade e também com a interpolação direta na abordagem de problemas de Helmholtz bidimensionais (BALISTA et al., 2023).

3.3.3 Dupla Reciprocidade

A técnica da dupla reciprocidade, desenvolvida por Nardini e Brebbia (NARDINI; BREBBIA, 1983) conferiu grande generalidade a aplicação do MEC a problemas diversos de campo escalar, agora sem a necessidade de recorrer ao uso de uma solução correlata complexa.

Para explicar sinteticamente a técnica considere a formulação integral forte associada a diversos dos modelos matemáticos particulares mostrados no início do capítulo, tais como equação de Poisson, Helmholtz, Equação da Difusão e Equação da Onda Acústica possuem uma mesma estrutura matemática, que pode ser posto de forma geral tal como de acordo com o trabalho de Bulcão (1999) (BULCÃO, 1999).

$$\int_{\Omega} u_{,ii} u^* d\Omega = \frac{\lambda}{K} \int_{\Omega} \Phi u^* d\Omega \quad (3.65)$$

Na Eq. (3.65), pode-se particularizar Φ , conforme o caso que se deseje analisar.

No caso da equação de Poisson, por exemplo, basta atribuir $\Phi = p$. A representação dos outros modelos matemáticos de interesse segue a mesma lógica.

O lado esquerdo da equação integral da Eq. (3.65) já teve seu tratamento detalhado ao se descrever a parte de sentença integral do MEC no início deste capítulo. Volta-se agora o foco para o tratamento do lado direito da Eq. (3.65) segundo a proposta da dupla reciprocidade. Primeiramente, faz-se uma aproximação da função Φ através de uma combinação de funções de aproximação F^j e coeficientes a determinar α^j , conforme a Eq. (3.66).

$$\Phi(X, t) \cong \alpha^j(t) F^j(X) \quad (3.66)$$

Substitui-se a proposta de aproximação da Eq. (3.66), na sentença integral da Eq. (3.65), lembrando que como a integração é espacial os coeficientes α^j podem deixar a integral.

$$\int_{\Omega} \Phi u^* \, d\Omega \cong \alpha^j \int_{\Omega} F^j u^* \, d\Omega \quad (3.67)$$

Neste ponto, admite-se que a função de aproximação F^j selecionada possua uma função primitiva ψ , de forma que a relação entre as duas seja de acordo com a Eq. (3.68).

$$\psi_{,ii}^j = F^j \quad (3.68)$$

Introduz-se no lugar da função de aproximação F^j , o laplaciano de sua primitiva ψ , na sentença integral da Eq. (3.67).

$$\int_{\Omega} \Phi u^* \, d\Omega \cong \alpha^j \int_{\Omega} \psi_{,ii}^j u^* \, d\Omega \quad (3.69)$$

Uma observação cuidadosa sobre a Eq. (3.69), revela que seu lado direito possui exatamente a mesma estrutura da sentença integral forte da equação de Laplace, e portanto, matematicamente pode ser tratado da mesma forma. A observação desta simetria que deu origem ao nome da técnica, que foi batizada de dupla reciprocidade, pois pode-se aplicar o princípio da reciprocidade ou segunda identidade de Green em ambos os lados da Eq. (3.65). A Eq. (3.69), pode ser reescrita então da seguinte forma:

$$\int_{\Omega} \Phi u^* \, d\Omega \cong -\alpha^j \left\{ c(\xi) \psi^j(\xi) + \int_{\Gamma} \psi^j q^* \, d\Gamma - \int_{\Gamma} \eta^j u^* \, d\Gamma \right\} \quad (3.70)$$

Para sintetizar a notação matemática na Eq. (3.70), denomina-se η^j o seguinte produto escalar mostrado na Eq. (3.71).

$$\eta^j = \frac{\partial \psi^j}{\partial \mathbf{n}} = \psi^j_{,i} n_i \quad (3.71)$$

Por fim, a aplicação do princípio da reciprocidade em ambos os lados da Eq. (3.65), leva a seguinte formulação integral final.

$$c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u q^* d\Gamma - \int_{\Gamma} q u^* d\Gamma = \frac{\lambda}{K} \alpha^j \left(c(\xi) \psi^j + \int_{\Gamma} \psi^j q^* d\Gamma - \int_{\Gamma} \eta^j u^* d\Gamma \right) \quad (3.72)$$

Após o processo de discretização o sistema matricial final oriundo da Eq. (3.72) é dado abaixo pela Eq. (3.73). É possível perceber a simetria da formulação na presença das matrizes H e G em ambos os lados do sistema matricial final.

$$[H][u] - [G][q] = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} \alpha \quad (3.73)$$

3.3.4 Integração Radial

Para expor a técnica integração radial considere a equação de Helmholtz, dada pela Eq. (3.74), anteriormente apresentada no capítulo, oriunda da equação da onda acústica (BUTKOV, 1988). Neste modelo busca-se determinar a amplitude estacionária u produzida em um sistema por uma excitação variável, cuja frequência ω seja conhecida. Essencialmente o problema de Helmholtz é um problema de autovalores e autovetores, correlacionados às frequências de excitação e às amplitudes, respectivamente.

$$\nabla^2 u(\mathbf{X}) = -\frac{\omega^2}{k^2} u(\mathbf{X}) \quad (3.74)$$

Na Eq. (3.74), k representa a velocidade de propagação da onda acústica no meio contínuo. Multiplicando-se a Eq. (3.74) pela solução fundamental de Poisson, u^* , e integrando-se ao longo do domínio Ω , tem-se:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u(\mathbf{X}) u^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega = -\frac{\omega^2}{k^2} \int_{\Omega} u(\mathbf{X}) u^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega \quad (3.75)$$

A Eq. (3.75) representa a formulação integral forte do problema de Helmholtz. O lado esquerdo tem o tratamento clássico já exposto no capítulo, através de integrações por partes ou princípio da reciprocidade, e sua formulação inversa já é amplamente conhecida (BREBBIA; WALKER, 1980). O lado direito da Eq. (3.75), por sua vez, deve ser conduzido ao contorno, objetivo que o Método da Integração Radial (MIR) se propõe a alcançar.

O MIR baseia-se numa elegante mudança de coordenadas para transformar a integral de domínio alvo em uma integral de contorno (GAO, 2002). A integral de domínio

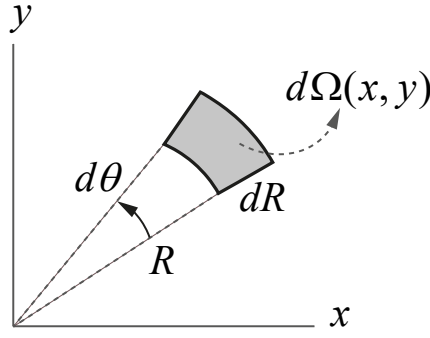


Figura 6 – C3 - Esquema de Coordenadas Polares

a ser aproximada, do lado direito (LD) da Eq. (3.75) pode ser escrita em coordenadas polares, conforme na Eq. (3.76) e de acordo com a Figura 6.

$$LD = \int_{\theta} \int_0^{R^{\Gamma}} u(R, \theta) u^*(\xi; R, \theta) R dR d\theta \quad (3.76)$$

Por conveniência, destaca-se a integral radial, núcleo da angular, como uma variável isolada, tal como a seguir, na Eq. (3.77).

$$H_{\Gamma}^{\xi}(\theta) = \int_0^{R^{\Gamma}} u(R, \theta) u^*(\xi; R, \theta) R dR \quad (3.77)$$

A partícula angular pode ser transferida para o contorno, utilizando um jacobiano, baseado na lógica na Figura 7.

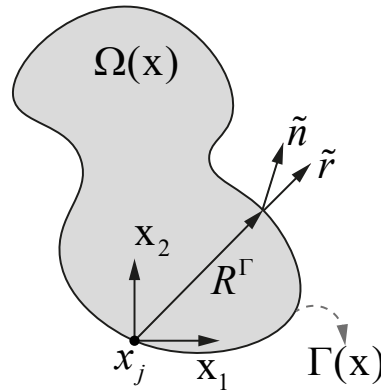


Figura 7 – C3 - Transformação de Coordenadas

A Figura 7 mostra a colocação de um ponto x_j de interpolação, cuja distância radial até o contorno é denominada de R^{Γ} . O vetor unitário na direção de R^{Γ} é chamado de $\tilde{r}$ e o vetor normal externo ao contorno de $\tilde{n}$. A transformação da partícula integradora angular, e automaticamente, a transferência da integral para o contorno se dá através da seguinte transformação, da Eq. (3.78).

$$d\theta = \frac{\tilde{n} \cdot \tilde{r}}{R^{\Gamma}} d\Gamma(\mathbf{X}) \quad (3.78)$$

O MIR gera integrais simples, porém que demandam um alto custo computacional, o que torna sua utilização isolada restrita a casos mais simples.

3.3.5 Interpolação Direta

No intuito de demonstrar os fundamentos que embasam a recente técnica de interpolação direta (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015) considere aqui um modelo de Helmholtz, trazido pela Eq. (3.79), onde $u(X)$ representa a resposta de amplitude estacionária do sistema e ω a frequência de excitação harmônica dos sistema.

$$\nabla^2 u(\mathbf{X}) = \frac{-\omega^2}{k^2} u(\mathbf{X}) \quad (3.79)$$

Multiplicando a Eq. (3.79), pela solução fundamental de Poisson u^* , e integrando ao longo do domínio físico $\Omega(X)$, tem-se:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u(\mathbf{X}) u^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega = \frac{-\omega^2}{k^2} \int_{\Omega} u(\mathbf{X}) u^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega \quad (3.80)$$

Na Eq. (3.80), a utilização de uma solução fundamental mais simples como a de Poisson, que não depende da frequência de excitação ao invés da solução correlata ao problema de Helmholtz (BREBBIA; WALKER, 1980), que é dependente da frequência ω , permite a geração de uma matriz de inércia explícita (LOEFFLER; MANSUR, 2017).

O lado esquerdo da Eq. (3.80) recebe tratamento com integração por parte e teorema de divergência, procedimentos largamente documentados na literatura (WROBEL; ALIABADI, 2002), dando origem a seguinte sentença integral:

$$c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(\mathbf{X})q^*(\xi; \mathbf{X})d\Gamma - \int_{\Gamma} q(\mathbf{X})u^*(\xi; \mathbf{X})d\Gamma = \frac{\omega^2}{k^2} \int_{\Omega} u(\mathbf{X})u^*(\xi; \mathbf{X})d\Omega \quad (3.81)$$

Na Eq. (3.81) resta a integral de domínio do lado direito, referente ao termo reativo a ser tratada. Para tanto a técnica da interpolação direta (MECID), propõe uma aproximação do núcleo completo da integral de domínio, ou seja, todo o núcleo é interpolado usando funções de base radial (BUHMANN, 2003), tal como colocado pela Eq. (3.82) a seguir.

$$u(\mathbf{X})u^*(\xi; \mathbf{X}) \cong \xi_{\alpha_i} F^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) \quad (3.82)$$

Observe que as funções de base radial $F^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X})$ tem como argumento a distância Euclideana $r^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X})$ entre os pontos fonte $\mathbf{X}^i$ e pontos genéricos do domínio $\mathbf{X}$. Ademais a integral do lado direito da Eq. (3.81) é imprópria e convergente, por conta da presença da solução fundamental u^* . Em técnicas como a dupla reciprocidade (MECDR), não havia

esta preocupação, pois a solução fundamental não era interpolada. Na MECID, por sua vez, a coincidência entre o ponto fonte e os pontos campo gera tendência ao infinito na função logarítmica, e portanto, uma preocupação central da formulação do MECID é evitar esta coincidência.

Após o exposto, substitui-se a proposta de aproximação do MECID, dada pela Eq. (3.82), na integral de domínio da Eq. (3.81), e pode-se reescrever a integral de domínio com o uso de uma função primitiva de interpolação, $\psi^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X})$, tal como feito na MECDR.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \xi \alpha^i F_i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) d\Omega &= \int_{\Omega} \xi \alpha_i \psi_{,jj}^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) d\Omega = \\ \int_{\Gamma} \xi \alpha_i \psi_{,j}^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) n_j(\mathbf{X}) d\Gamma &= \xi \alpha_i \int_{\Gamma} \eta^j(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) d\Gamma \end{aligned} \quad (3.83)$$

As integrais apresentadas na Eq. (3.83), já em escrita de contorno podem ser determinadas por integração numérica. Com base na Eq. 3.83 destaca-se que o produto no núcleo das integrais é condensado em $\eta^j = n_j \psi_{,j}$ da penúltima para a última integral da igualdade.

Neste ponto do desenvolvimento da técnica é preciso tomar alguma ação para evitar a coincidência entre pontos fonte e pontos campo, de acordo com já colocado a priori. A solução proposta aqui é implementar um elegante esquema de regularização, baseado no conceito da regularização de Hadamard (HADAMARD, 2003), de forma a excluir a singularidade na Eq. (3.82). Basicamente o procedimento consiste em somar e subtrair uma integral análoga à integral de domínio, todavia com uma função de ponto $u(\xi)$ no lugar do campo potencial $u(X)$. Com isso, agrupando-se a integral de sinal negativo, na integral de domínio original, tem-se o seguinte formato de sentença integral do problema, dado pela Eq. (3.84).

$$\begin{aligned} c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(\mathbf{X})q^*(\xi; \mathbf{X})d\Gamma - \int_{\Gamma} q(\mathbf{X})u^*(\xi; \mathbf{X})d\Gamma = \\ \frac{1}{k^2}\omega^2 \int_{\Omega} [u(\mathbf{X}) - u(\xi)] u^*(\xi; \mathbf{X})d\Omega + \frac{1}{k^2}\omega^2 \int_{\Omega} u(\xi)u^*(\xi; \mathbf{X})d\Omega \end{aligned} \quad (3.84)$$

A estrutura da Eq. (3.84) apresenta agora duas integrais de domínio. A primeira delas, no lado direito, apresenta uma diferença entre o ponto campo e o ponto fonte em seu núcleo, e portanto é chamada de integral regularizada. Esta integral regularizada, por sua vez, é capaz de eliminar a singularidade, pois anula-se na coincidência entre pontos campo e fonte.

A primeira integral do lado direito da Eq. (3.84), integral regularizada, será aproximada diretamente com a proposta da MECID, tal como mostrado abaixo na Eq. (3.85), enquanto a segunda integral, ou integral excedente é tratada um pouco mais a frente usando a abordagem do tensor de Galerkin, já exposta neste capítulo.

$$\frac{1}{k^2}\omega^2 \int_{\Omega} [u(\mathbf{X}) - u(\xi)] u^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega \approx \frac{1}{k^2}\omega^2 \left\{ \int_{\Omega} \xi \alpha^i F_i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) d\Omega \right\} \quad (3.85)$$

Inserindo a aproximação fornecida pela técnica da interpolação direta na sentença integral da Eq. (3.84), chega-se a Eq. (3.86), abaixo.

$$\begin{aligned} c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(\mathbf{X})q^*(\xi; X)d\Gamma - \int_{\Gamma} q(\mathbf{X})u^*(\xi; X)d\Gamma = \\ \frac{1}{k^2}\omega^2 \left\{ \xi \alpha_i \int_{\Gamma} \eta^i(\mathbf{X}^i; \mathbf{X}) d\Gamma \right\} + \frac{1}{k^2}\omega^2 \int_{\Omega} u(\xi)u^*(\xi; X)d\Omega \end{aligned} \quad (3.86)$$

Por simplicidade de exposição, no momento, desconsidera-se a integral de domínio excedente. Com isso, após o processo de discretização obtém-se o seguinte sistema matricial, dado pela Eq. (3.87).

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & \cdots & H_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{11} & \cdots & G_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n1} & \cdots & G_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \end{bmatrix} = \\ \frac{\omega^2}{k^2} \begin{bmatrix} {}^1\alpha_1 & \cdots & {}^1\alpha_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ {}^n\alpha_1 & \cdots & {}^n\alpha_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_m \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{k^2} \begin{bmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.87)$$

A variável N quantifica as integrais de η^i . Os coeficientes do vetor A mostrado no sistema linear da Eq. (3.87), podem ser calculados na seguinte forma:

$$A_{\xi} = (N_1 \dots N_2 \dots N_m) \begin{bmatrix} \xi \alpha_1 \\ \vdots \\ \xi \alpha_m \end{bmatrix} \quad (3.88)$$

Perceba que a matriz $[\alpha]$ de coeficientes ainda é desconhecida. Para então determiná-la, retorna-se à proposta da aproximação do MECID, da Eq. (3.82), e pré-multiplica-se a equação pela inversa da matriz de funções de bases radiais. Com isso é possível explicitar o vetor α , de acordo com a Eq. (3.89), que segue.

$$[\xi \alpha] = [F]^{-1} [\xi \Lambda] [F] \alpha = [F]^{-1} [\xi \Lambda] [u] \quad (3.89)$$

Substituindo a nova escrita do vetor α , da Eq. (3.89) na Eq. (3.88), pode-se chegar a seguinte expressão para o cálculo dos coeficientes A_{ξ} , segundo a Eq. (3.90).

$$A_\xi = (N_1 \dots N_n) \begin{bmatrix} F_1^1 & \dots & F_1^n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_n^1 & \dots & F_n^n \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \xi \Lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \xi \Lambda_n \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u(\xi) \\ \vdots \\ u(\xi) \end{bmatrix} \right\} \quad (3.90)$$

Numa tentativa de sintetizar o algebrismo, cria-se neste ponto uma nova variável S cujo vetor linha é dado pelo seguinte produto:

$$(S_1 \dots S_n) = (N_1 \dots N_n) \begin{bmatrix} F_1^1 & \dots & F_1^n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_n^1 & \dots & F_n^n \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.91)$$

Inserindo-se a nova variável da Eq. (3.91), na Eq. (3.90), é possível chegar ao formato a seguir.

$$A_\xi = (S_1 \dots S_n) \begin{bmatrix} \xi \Lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \xi \Lambda_n \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u(\xi) \\ \vdots \\ u(\xi) \end{bmatrix} \right\} \quad (3.92)$$

Considerando que n , na Eq. (3.92), seja o número total de pontos da malha e ξ o ponto fonte, pode-se expandir a escrita da Eq. (3.92) para toda a malha discreta, conforme segue na Eq. (3.93). Uma observação cuidadosa sobre a Eq. (3.93) revela que a coincidência entre pontos fonte e campo é anulada pela Delta de Kronecker presente nas diagonais, elemento este que é proveniente da procedimento de regularização mostrado alguns passos atrás.

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N [-S_{i1}\Lambda_i(1 - \delta_{i1})] & S_{21}\Lambda_2 & \dots & S_{N1}\Lambda_N \\ S_{12}\Lambda_1 & \ddots & \sum_{i=1}^N [-S_{i2}\Lambda_i(1 - \delta_{i2})] & \ddots & S_{N2}\Lambda_N \\ S_{1N}\Lambda_1 & S_{2N}\Lambda_2 & \dots & \sum_{i=1}^N [-S_{iN}\Lambda_i(1 - \delta_{iN})] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} \quad (3.93)$$

Vamos agora retornar ao tratamento da integral remanescente, da Eq. (3.84). A priori, coloca-se abaixo a definição do tensor de Galerkin, na Eq. (3.94) que é a segunda primitiva da solução fundamental.

$$G_{,ii}^*(\xi; X) = u^*(\xi; X) \quad (3.94)$$

A inserção do tensor de Galerkin, da Eq. (3.94), na integral excedente, permite levar

esta integral para uma escrita de contorno usando o teorema da Divergência, conforme a Eq. (3.95).

$$\int_{\Omega} u(\xi) G_{,ii}^*(\xi; \mathbf{X}) d\Omega = u(\xi) \int_{\Gamma} G_{,i}^*(\xi; \mathbf{X}) n_i(\mathbf{X}) d\Gamma \quad (3.95)$$

Uma vez que o tensor de Galerkin tem formato conhecido quando trata-se da solução fundamental de Poisson, e já mostrado anteriormente no capítulo, pode-se escrever o gradiente do tensor de Galerkin com facilidade, conforme a Eq. (3.96).

$$G_{,k}^*(\xi; \mathbf{X}) n_k(\mathbf{X}) = \xi P^{\mathbf{X}} = \frac{1}{4\pi} \{0.5 - \ln[r(\xi; \mathbf{X})]\} r_k n_k \quad (3.96)$$

Com a utilização da Eq. (3.96), o formato discreto da Eq. (3.95) pode ser escrito tal como a seguir na Eq. (3.97).

$$\begin{pmatrix} Z_1 \\ \vdots \\ Z_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \int_1^1 P_1 d\Gamma_1 + \cdots + \int_1^1 P_n d\Gamma_n & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \int_1^n P_1 d\Gamma_1 + \cdots + \int_1^n P_n d\Gamma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \quad (3.97)$$

A utilização do vetor Z , da Eq. (3.97) e também o formato do vetor A , dado pela Eq. (3.93), permite a escrita do sistema linear final do problema, dado pela Eq. (3.98) a seguir. A matriz $[M]$ gerada na parte direita da equação é a chamada matriz de inércia da interpolação direta e a qualidade de sua formação, precisão e condicionamento estão diretamente correlacionados com o desempenho da técnica, tal como ocorre na formulação de dupla reciprocidade.

$$\begin{bmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & \cdots & H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{11} & \cdots & G_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n1} & \cdots & G_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \end{bmatrix} = \frac{\omega^2}{k^2} \begin{bmatrix} (A_1 + Z_1) \\ \vdots \\ (A_n + Z_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & \cdots & M_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & \cdots & M_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \quad (3.98)$$

3.4 Esquemas de Integração Numérica

A precisão de método numéricos baseados em formulações integrais tais como o Método de Elementos de Contorno (MEC) passa necessariamente por uma determinação assertiva dos coeficientes matriciais que constituem o sistema linear discreto. Estes coeficientes matriciais, tal como no Método dos Elementos Finitos (MEF), são integrais que contém em seus núcleos funções de interpolação específicas dos elementos, e, especificamente no caso do MEC, são integrais singulares ou quase-singulares, devido às soluções

fundamentais utilizadas no método (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994). Dentre as diversas opções de técnicas de integração numérica disponíveis para uso nos algoritmos de MEC, a mais amplamente utilizado é a Quadratura de Gauss-Legendre, cujos detalhes podem ser coletados na literatura (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1999). Embora este tipo de quadratura apresente precisão e acurácia elevadas no tratamento de integrandos simples, como núcleos polinomiais, apresenta uma relevante desvantagem que reside nos posicionamentos fixos dos chamados pontos de Gauss, ou seja, o posicionamento destes pontos em nada depende da natureza do integrando.

No intuito de melhor aproximar as integrais singulares e quase-singulares que surgem nas formulações do método de elementos de contorno, o trabalho de (HAYAMI; BREBBIA, 1987) se destacou pelo pioneirismo, e propõe um método baseado em transformação de coordenadas, capaz de lidar com integrais singulares e quase-singulares, com boa precisão em problema tridimensionais e aplicado a elementos de contorno curvos. Telles (1987) propôs uma engenhosa transformação de coordenadas baseada em um polinômio de terceiro grau (TELLES, 1987a), onde o posicionamento dos pontos de Gauss são variáveis de acordo com a posição da singularidade, o que permite uma maior precisão na determinação das integrais de interesse. Telles e Oliveira (1994) em trabalho posterior expandiram a linha de pesquisa do artigo anterior com o acoplamento de um mecanismo adaptativo na proposta de integração original, que torna-a mais mais robusta com a consideração da distância entre o ponto fonte e ponto campo a serem integrados para calibrar os mecanismos da quadratura (TELLES; OLIVEIRA, 1994a). Há um grande volume de propostas de esquemas de integração na literatura baseadas em mudanças de coordenadas (MONEGATO; SLOAN, 1997) e (JOHNSTON; ELLIOTT, 2001).

3.4.1 Quadratura de Gauss Clássica

A integração numérica é um tópico de grande relevância na classe de métodos numéricos com formulação integral, na qual se incluem o Método de Elementos Finitos e o Método de Elementos de Contorno. Este fato é facilmente justificável, uma vez que, os coeficientes de influência que formam o sistema linear discreto destes métodos, tal como aqueles que formam as matrizes H e G expostas na Eq. (3.46), são na verdade integrais a serem determinadas numericamente. No contexto do MEC, a importância da integração numérica se torna ainda mais crítica, uma vez que as integrais presentes nos coeficientes matriciais são singulares ou quase-singulares devido a presença da solução fundamental e suas variantes em seus núcleos, como pode ser visto na literatura (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994). Em casos mais simples, e dependendo da ordem da interpolação nos elementos, integrais impróprias ainda possuem solução analítica, todavia, para implementar algoritmos mais robustos é necessário utilizar técnicas aproximativas para qualificar tais integrais (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012).

Uma das técnicas mais utilizadas para a aproximação numérica destas integrais é a quadratura de Gauss-Legendre, cujas deduções mais formais podem ser encontradas em (KREYSZIG, 1967). O conceito unidimensional mais básico desta ferramenta é baseado numa aproximação que ocorre num domínio de $[-1, 1]$, onde a integral de uma função genérica $f(x)$, neste intervalo, pode ser aproximada como uma somatório de produtos entre as imagens da função em pontos específicos do cartesiano, chamados de pontos de Gauss x_n , ponderadas por valores escalares ω_n , chamados de pesos de Gauss, de acordo com a álgebra trazida pela Eq. (3.99) abaixo.

$$I = \int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{n=1}^{GPN} w_n f(x_n) \quad (3.99)$$

A quadratura gaussiana clássica acima exposta é largamente utilizada em algoritmos e pacotes computacionais do método de elementos de contorno, devido a sua acurácia e implementação relativamente simples, uma vez que os pontos e pesos de Gauss podem ser determinados usando um algoritmo simples ou mesmo coletados na literatura de referência (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1999). Uma análise um pouco mais atenciosa sobre a proposta desta quadratura revela que as coordenadas dos pontos de Gauss e os valores de seus pesos são constantes, uma vez selecionado o número de pontos de Gauss utilizados para executar a aproximação, e, não dependendo, portanto, do conteúdo do núcleo a ser integrado. Esta linha de raciocínio toma uma relevância especial ao se considerar funções que possuam alguma singularidade no intervalo de integração em voga, ou seja, que tendam para o infinito nas proximidades de uma coordenada específica, que, por conveniência, denomina-se aqui de ponto $\bar{\eta}$.

3.4.2 Quadratura de Telles

No intuito de definir a quadratura adaptativa de Telles, que se coloca como uma opção viável ao uso da quadratura gaussiana clássica, considere a integração de uma função $f(\eta)$ no intervalo de $[-1, 1]$, tal como representado pela Eq. (3.100).

$$I = \int_{-1}^1 f(\eta)d\eta \quad (3.100)$$

A priori, em seu artigo, Telles propôs uma transformação de coordenadas, baseada em um polinômio de terceiro grau para calcular integrais singulares, cuja variável independente é γ , mostrado em sua forma genérica na Eq. (3.101), cuja singularidade está localizada no ponto de coordenada $\bar{\eta}$ (TELLES, 1987a).

$$\eta(\gamma) = a\gamma^3 + b\gamma^2 + c\gamma + d \quad (3.101)$$

Na Eq. (3.101), o argumento γ corresponde aos pontos de Gauss alterados pós transformação de coordenadas e η representa os pesos associados aos pontos de integração γ . Para determinar os coeficientes a, b, c, d do polinômio, que são ajustados de acordo com a posição da singularidade, Telles propôs a imposição das seguintes condições de contorno:

$$\eta(1) = 1 \quad \eta(-1) = -1 \quad \frac{d\eta}{d\gamma}_{\gamma=\bar{\gamma}} = 0 \quad \frac{d^2\eta}{d\gamma^2}_{\gamma=\bar{\gamma}} = 0 \quad (3.102)$$

As condições de contorno mostradas pelo conjunto da Eq. (3.102) indicam, nas duas primeiras, que o intervalo da função transformada não é alterado e continua entre $[-1, 1]$, que coincide com uso dos elementos isoparamétricos em coordenadas naturais do MEC. A terceira condição implica que o Jacobiano da transformação proposta, deve preferivelmente reduzir a ordem da singularidade no ponto $\bar{\eta}$ (BULCÃO, 1999). A quarta condição impõe um ponto de valor mínimo do Jacobiano da transformação $J(\gamma)$. Em outras palavras, isso significa que o Jacobiano tem um ponto de mínimo coincidente com o ponto onde a função é singular, e portanto, aonde a mesma apresenta seus gradientes mais severos. A expressão do Jacobiano é mostrada a seguir pela Eq. (3.103).

$$I = \int_{-1}^1 f(\eta(\gamma)) J(\gamma) d\gamma \quad J(\gamma) = \frac{d\eta}{d\gamma} = \frac{3(\gamma - \bar{\gamma})^2}{1 + 3\bar{\gamma}^2} = 3a\gamma^2 + 2b\gamma + c \quad (3.103)$$

O uso puro e simples das condições de contorno da Eq. (3.102) para determinação dos coeficientes do polinômio de terceiro grau foi feita, e está disponível no trabalho de Telles (1987), todavia, estes coeficientes, calculados desta maneira, são restritos, se, no contexto de elementos de contorno, a coincidência do ponto fonte e do ponto campo estiver localizada sobre o intervalo do elemento, ou seja, se a singularidade ocorrer sobre o elemento, caracterizando uma integral singular (TELLES, 1987a).

Na Figura 8, um esquema representativo da proposta de quadratura adaptativa de Telles é apresentada. Inicialmente, na parte superior da figura, é possível visualizar um elemento de contorno quadrático e isoparamétrico em suas coordenadas naturais. Os pontos de Gauss são distribuídos ao longo do elemento em intervalos, e, por conceito, são simétricos em relação a $\eta = 0$, mas não entre si. No esquema da Figura 8, a singularidade pode ser encontrada no ponto fonte ξ , numa posição genérica, a uma distância R_{min} em relação ao nó $\eta = 1$ do elemento quadrático. Duas características da quadratura clássica de Gauss-Legendre merecem ser observadas: a posição dos pontos de Gauss não depende da natureza matemática do integrando, além disso, as posições dos pontos de Gauss também não dependem da distância entre a singularidade e o elemento, no caso de se tratar de uma integral quase-singular. Em contraste com as características colocadas, a primeira contribuição da quadratura de Telles foi promover um efeito de deslocamento ou concentração dos pontos de Gauss em direção a singularidade. Para exemplificar, suponha

que a posição da singularidade seja coincidente a do nó $\eta = 1$ do elemento (TELLES, 1987a). Para este caso, de integração singular com $R_{min} = 0$, que é o caso mais crítico para a proposta de Telles, o deslocamento dos ponto de Gauss para próximo da singularidade deve ser o máximo possível (TELLES; OLIVEIRA, 1994b). Esse efeito de concentração ou deslocamento está bem representado na Figura 8, onde a quadratura gaussiana clássica e a proposta de Telles são colocadas lado a lado.

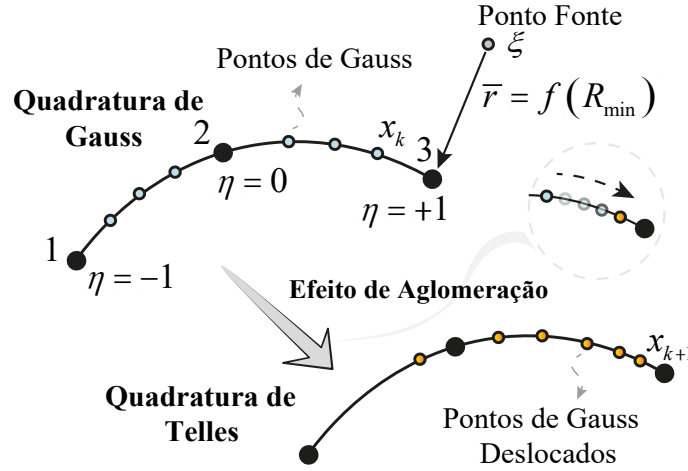


Figura 8 – C3 - Quadratura Gaussiana Clássica vs Quadratura Adaptativa de Telles

A segunda contribuição relevante de Telles foi parametrizar todo o modelo matemático da quadratura em função da distância R_{min} . Esta adaptação é necessária para o caso de integrais quase-singulares de qualquer intensidade, dependendo da distância entre o ponto fonte e o ponto interpolante. A sequência da chamada quadratura adaptativa inicia primeiramente pela determinação da mínima distância entre o ponto fonte ξ e o elemento, chamada R_{min} e sequencialmente com o cálculo do parâmetro D , com o uso da equação 3.104 (TELLES; OLIVEIRA, 1994b).

$$D = \frac{2R_{min}}{L} \quad (3.104)$$

Na Eq. (3.104), o parâmetro L , é considerado como sendo a distância entre os nós extremos do elemento. Como um exemplo, no esquema da Figura 8, esta distância é tomada como aquela entre os nós $\eta = -1$ e $\eta = 1$. De posse de D é possível determinar o parâmetro adaptativo $\bar{r}$, de acordo com os intervalos apresentados na literatura (TELLES, 1987a), e aqui reproduzidos pela Eq. (3.105).

$$\begin{aligned} \bar{r} &= 0 & 0.00 \leq D < 0.05 \\ \bar{r} &= 0.85 + 0.24 \ln(D) & 0.05 \leq D < 1.30 \\ \bar{r} &= 0.893 + 0.0832 \ln(D) & 1.30 \leq D < 3.618 \\ \bar{r} &= 1 & D \geq 3.618 \end{aligned} \quad (3.105)$$

Uma vez que o parâmetro adaptativo $\bar{r}$ é conhecido, é possível então calcular as variáveis auxiliares p e q representadas pela Eq. (3.106) e Eq. (3.107), respectivamente.

$$p = \frac{1}{3(1 + 2\bar{r})^2} \left[4\bar{r}(1 - \bar{r}) + 3(1 - \bar{\eta}^2) \right] \quad (3.106)$$

$$q = \frac{1}{2(1 + 2\bar{r})} \left[\left(\bar{\eta}(3 - 2\bar{r}) - \frac{2\bar{\eta}^3}{1 + 2\bar{r}} \right) \frac{1}{1 + 2\bar{r}} - \bar{\eta} \right] \quad (3.107)$$

Os parâmetros p e q , tal como a posição $\bar{\eta}$ da singularidade são usados pela Eq. (3.108), para determinar $\bar{\gamma}$, que é a posição da singularidade em termos da variável transformada. Este parâmetro é muito relevante, uma vez que a transformação de coordenadas executada pelo Jacobiano depende da distância entre cada ponto de Gauss em relação a posição da singularidade, como já mostrado pela Eq. (3.103).

$$\bar{\gamma} = \sqrt[3]{-q + \sqrt{q^2 + p^3}} + \sqrt[3]{-q - \sqrt{q^2 + p^3}} + \frac{\bar{\eta}}{1 + 2\bar{r}} \quad (3.108)$$

Finalmente, de posse do parâmetro de adaptação $\bar{r}$, os coeficientes a, b, c, d , inicialmente deduzidos no trabalho de Telles (1987) apenas para integrações singulares, podem ser generalizados e reajustados para qualquer posição de ponto fonte ξ , no elemento ou fora dele, pela Eq. (3.109).

$$a = \frac{(1 - \bar{r})}{Q} \quad b = -\frac{3\bar{\gamma}(1 - \bar{r})}{Q} \quad c = \frac{(\bar{r} + 3\bar{\gamma}^2)}{Q} \quad d = -b \quad (3.109)$$

4 Formulações Clássicas do MEC aplicadas a Modelos Advectivo-Difusivos

Este capítulo é dedicado a expor de forma concisa a formulação de problemas advectivo-difusivos via método de elementos de contorno. Para fazê-lo de forma metódica é necessário ressaltar a existência de duas formulações bem consolidadas, sendo a primeira denominada formulação clássica (MECC) por utilizar a solução fundamental correlata ao problema advectivo-difusivo, a segunda representada pela técnica da dupla reciprocidade (MECDR), onde já há o uso de funções de bases radiais e solução fundamental mais simples. Na sequência apresenta-se a estrutura matemática de cada uma destas duas formulações.

4.1 Formulação Clássica do MEC

É prudente seguir uma ordem cronológica na exposição das formulações disponíveis para problemas advectivos-difusivos e, portanto, inicia-se pela formulação clássica do método de elementos de contorno. Tal formulação baseia-se no uso da solução fundamental correlata ao problema, que pode ser apreciada em mais detalhes em na literatura (RAMACHANDRAN, 1994).

No objetivo de sempre manter a exposição da formulação numérica o mais simples e elegante possível, usa-se aqui a notação indicial, largamente presente na literatura do método de elementos de contorno e da física-matemática de forma geral. A equação de governo do problema advectivo-difusivo em notação indicial, com algumas simplificações é dada a seguir pela Eq. (4.1).

$$u_{,ii} = v_i u_{,i} \quad (4.1)$$

É perceptível na Eq. (4.1) que as propriedades termo-físicas no caso da versão dimensional na equação de governo ou mesmo o número de Peclet, no caso da equação adimensional, são aqui omitidos por simplicidade, por se tratarem de constantes e não variarem no domínio espacial Ω .

Multiplica-se agora ambos os lados da Eq. (4.1) pela solução fundamental correlata u^* , e integra-se ao longo do domínio genérico Ω .

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(\xi, X) d\Omega = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(\xi, X) d\Omega \quad (4.2)$$

Para a sequência da formulação é prudente denominar o lado esquerdo da Eq. (4.2)

de lado difusivo (LD) e o lado direito da mesma de lado advectivo (LA).

$$LD = \int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(\xi, X) d\Omega \quad (4.3)$$

$$LA = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(\xi, X) d\Omega \quad (4.4)$$

Na sequência o tratamento do lado difusivo, constituído por um operador laplaciano auto-adjunto, pode ser tratado com o uso das identidades de Green ou, analogamente, via integração por partes, seguido do uso do Teorema da Divergência para a conversão de integrais de domínio para o contorno, conforme largamente reportado na literatura correlata (BREBBIA, 1982), (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994), (KATSIKADELIS, 2016).

$$LD = \int_{\Gamma} q(X) u^*(\xi, X) d\Gamma - \int_{\Gamma} u(X) q^*(\xi, X) d\Gamma + \int_{\Omega} u_{,ii}^*(\xi, X) u(X) d\Omega \quad (4.5)$$

Parcialmente tratado o lado difusivo, parte-se para o tratamento do lado advectivo onde a integração por partes é novamente utilizada para desmembrar o núcleo da integral que compõe o lado advectivo da Eq. (4.4).

$$(v_i u u^*)_{,i} = (v_i u)_{,i} u^* + v_i u u_{,i}^* \quad \therefore \quad (v_i u u^*)_{,i} = [v_{i,i} u + v_i u_{,i}] u^* + v_i u u_{,i}^* \quad (4.6)$$

Na aplicação da integração por partes, conforme pode ser observado na Eq. (4.6), surge a entidade do divergente do campo de velocidade, que anula-se como consequência da hipótese de incompressibilidade do escoamento, conforme a Eq. (4.7) (SCHLICHTING; GERSTEN, 2003). Portanto, algebricamente tem-se:

$$v_{i,i} = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.7)$$

Desta maneira é possível anular um dos termos da decomposição exposta pela Eq. (4.6) e reescrever propriamente o núcleo da integral do lado advectivo tal como segue.

$$(v_i u u^*)_{,i} = v_i u_{,i} u^* + v_i u u_{,i}^* \quad \therefore \quad v_i u_{,i} u^* = (v_i u u^*)_{,i} - v_i u u_{,i}^* \quad (4.8)$$

A inserção da decomposição da Eq. (4.8) na Eq. (4.4) gera a seguinte integral.

$$\int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(X, \xi) d\Omega = \int_{\Omega} [v_i(X) u(X) u^*(X, \xi)]_{,i} d\Omega - \int_{\Omega} v_i(X) u(X) u_{,i}^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.9)$$

É possível neste ponto aplicar o Teorema da Divergência (KREYSZIG, 1967; ZILL; CULLEN, 2009; KAPLAN, 1952), para então converter a primeira integral de domínio do lado direito da Eq. (4.9) para uma escrita no contorno, tal como segue. Na Eq. (4.10), n_i representa o vetor normal ao contorno, oriundo da aplicação do Teorema da Divergência.

$$\int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(X, \xi) d\Omega = \int_{\Gamma} n_i(X) v_i(X) u(X) u^*(X, \xi) d\Gamma - \int_{\Omega} v_i(X) u(X) u_{,i}^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.10)$$

Substituindo então as expressões de tratamento da Eq. (4.5) e da Eq. (4.10), na Eq. (4.2), chega-se a formulação integral inversa do problema dada abaixo.

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} q(X) u^*(X, \xi) d\Gamma - \int_{\Gamma} u(X) q^*(X, \xi) d\Gamma + \int_{\Omega} u_{,ii}^*(X, \xi) u(X) d\Omega = \\ \int_{\Gamma} n_i(X) v_i(X) u(X) u^*(X, \xi) d\Gamma - \int_{\Omega} v_i(X) u(X) u_{,i}^*(X, \xi) d\Omega \end{aligned} \quad (4.11)$$

A sentença integral inversa representada na Eq. (4.11), pode ser reorganizada de maneira providencial como segue na Eq. (4.12), de forma a reconstruir uma expressão de governo baseada na solução fundamental, onde é possível evidenciar a equação de governo que caracteriza o problema fundamental correlato, tal como segue.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [u_{,ii}^*(X, \xi) + v_i(X) u_{,i}^*(X, \xi)] u(X) d\Omega = \\ \int_{\Gamma} u(X) q^*(X, \xi) d\Gamma - \int_{\Gamma} q(X) u^*(X, \xi) d\Gamma + \int_{\Gamma} n_i(X) v_i(X) u(X) u^*(X, \xi) d\Gamma \end{aligned} \quad (4.12)$$

O problema correlato ao advectivo-difusivo em um domínio infinito cuja excitação de campo é descrita por um pulso representado matematicamente pela função Delta de Dirac, é também chamado de problema fundamental. Para melhor visualização este problema é algebricamente posto abaixo.

$$u_{,ii}^* + v_i u_{,i}^* = -\Delta(X, \xi) \quad (4.13)$$

A solução da Eq. (4.13) não é trivial e pode ser melhor consultada na literatura (RAMACHANDRAN, 1994). É possível observar que tanto o campo potencial u^* , quanto seu fluxo correlato q^* ficam dependentes de funções de Bessel, cujo tratamento matemático na determinação das integrais não é tarefa simples, como citado e debatido em detalhes em (SINGH; TANAKA, 1998) e (MASSARO, 2001), devido a singularidades matemáticas. Nas Eq. 4.14 e 4.15, K_0 e K_1 representam funções de Bessel (ABRAMOWITZ; STEGUN, 1999; KREYSZIG, 1967) e k representa a condutividade térmica do domínio.

$$u^*(X, \xi) = \frac{1}{2\pi k} e^{-\mu r} K_o(\mu r) \quad \mu = \frac{\|V\|}{2k} \quad (4.14)$$

$$q^*(X, \xi) = \frac{1}{2\pi k} e^{-\mu r} \left[-\mu K_1(\mu r) \frac{\partial r}{\partial n} - \frac{V_n}{2k} K_o(\mu r) \right] \quad (4.15)$$

Utilizando-se então da Eq. (4.13), e inserindo-a então na Eq. (4.12), e aplicando-se convenientemente as propriedades inerentes ao Delta de Dirac, é possível então a seguinte escrita.

$$c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(X)q^*(X, \xi)d\Gamma - \int_{\Gamma} q(X)u^*(X, \xi)d\Gamma + \int_{\Gamma} n_i(X)v_i(X)u(X)u^*(X, \xi)d\Gamma = 0 \quad (4.16)$$

A escrita da Eq. (4.16) ainda encontra-se no domínio contínuo. O valor do coeficiente $c(\xi)$ depende da posição relativa o ponto fonte ξ em relação ao domínio físico Ω , conforme já mostrado no Capítulo 3. Ao realizar-se um processo de discretização, onde fixa-se o ponto fonte ξ em cada ponto da malha numérica e interpola-se com todos os demais pontos, inclusive o próprio ponto fonte, é possível gerar um sistema matricial com ordem igual ao número de pontos nodais. Tal discretização permite a escrita matricial, onde as matrizes $[G]$, $[H]$ e $[S]$ são determinadas diretamente das integrais correspondentes na sentença da Eq. (4.16), formando o seguinte sistema matricial discreto dado pelas Eq.(4.17) e Eq. (4.18).

$$[H] \{u\} - [G] \{q\} + [S] \{u\} = 0 \quad (4.17)$$

$$[H'] \{u\} = [G] \{q\} \quad [H'] = [H + S] \quad (4.18)$$

4.2 Formulação da Dupla Reciprocidade do MEC

A técnica da dupla reciprocidade (MECDR) proposta inicialmente por Nardini e Brebbia (NARDINI; BREBBIA, 1983) representou um avanço substancial no panorama de consolidação do método de elementos de contorno, uma vez que confere ao método uma versatilidade ao aproximar termos mais complexos por meio de funções de base radial, e flexibilizar o uso de uma solução fundamental mais simples em detrimento a solução fundamental correlata ao problema, que nem sempre é conhecida ou de dedução trivial. Tal flexibilidade permitiu a aplicação da dupla reciprocidade a diversos problemas complexos e relevantes no contexto da física matemática, como pode ser constatado em (PARTRIDGE; BREBBIA; WROBEL, 1992; PARTRIDGE; BREBBIA, 1990; LOEFFLER; MANSUR, 1988; LOEFFLER; MANSUR, 1989).

Segue-se aqui a mesma lógica da exposição utilizada para expor a proposta original do MEC, onde adota-se novamente como padrão a notação indicial para tornar mais dinâmica e leve a exposição dos pormenores da formulação da técnica de dupla reciprocidade. Inicia-se com a equação de governo do problema com a exclusão proposital dos coeficientes ou adimensionais correlatos por simplicidade, tal como segue.

$$u_{,ii} = v_i u_{,i} \quad (4.19)$$

Multiplica-se a Eq. (4.19) pela solução fundamental u^* de ambos os lados da sentença e integra-se ao longo do domínio Ω da geometria, e gera-se então a formulação integral forte relacionada ao problema.

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(X, \xi) d\Omega = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.20)$$

Já é possível aqui destacar, que a solução fundamental utilizada como função auxiliar na técnica da dupla reciprocidade é a solução fundamental de Poisson (BREBBIA; WALKER, 1980), que tem natureza matemática muito mais simples do que a solução fundamental correlata do problema advectivo-difusivo propriamente dito (RAMACHANDRAN, 1994).

Uma outra diferença fundamental inerente a técnica da dupla reciprocidade (MECDR) é a forma inicial de trato do termo advectivo contabilizado no lado direito da Eq. (4.20). O procedimento característico, mostrado em detalhes em (PARTRIDGE; BREBBIA; WROBEL, 1992), consiste em interpretar o termo de advecção como uma ação de domínio $p(X)$. Desta maneira todo o lado direito da equação de governo é substituído pela ação de domínio, e com isso a formulação integral forte, dada na Eq. (4.20), pode ser reescrita como a seguir.

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(X, \xi) d\Omega = \int_{\Omega} p(X) u^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.21)$$

Analogamente ao que foi feito a priori, na formulação antecedente, denomina-se o parte esquerda da Eq. (4.21) como lado difusivo (LD) e a parte direita como lado advectivo (LA), de acordo com o mostrado na sequência na Eq. (4.22) e na Eq. (4.23).

$$LD = \int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.22)$$

$$LA = \int_{\Omega} p(X) u^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.23)$$

Sequencialmente é necessário focar no tratamento do lado advectivo dado pela Eq. (4.23), uma vez que o lado difusivo tem simples trato, como já visto na formulação clássica

via integração por parte e teorema da divergência. A técnica da dupla reciprocidade preconiza a aproximação do termo de domínio $p(X)$ como um somatório de funções de bases radiais ponderadas por coeficientes a determinar α_ξ^j , tal como mostra a Eq. (4.24) abaixo. Uma vez escolhida a função de base radial a ser utilizada, sua primitiva ψ também é conhecida, coerentemente com a identidade conceitual mostrada abaixo.

$$p(X) \cong \alpha_\xi^j F^j(X; X^j) \quad \psi_{,ii} = F^j \quad (4.24)$$

Substituindo-se a aproximação por bases radiais proposta pela Eq. (4.24) no lado advectivo (LA), dado pela Eq. (4.23), tem-se:

$$\int_{\Omega} p(X) u^*(X, \xi) d\Omega \cong \int_{\Omega} \alpha_\xi^j F^j(X; X^j) u^*(X, \xi) d\Omega = \int_{\Omega} \alpha_\xi^j \psi_{,ii}(X; X^j) u^*(X, \xi) d\Omega \quad (4.25)$$

A integração por partes é aqui aplicada pela primeira vez, utilizada para descarregar o operador derivada de sobre a função primitiva ψ parcialmente para a solução fundamental u^* .

$$(\psi_{,i} u^*)_{,i} = \psi_{,ii} u^* + \psi_{,i} u_{,i}^* \quad \therefore \quad \psi_{,ii} u^* = (\psi_{,i} u^*)_{,i} - \psi_{,i} u_{,i}^* \quad (4.26)$$

A substituição da decomposição proposta pela Eq. (4.26) na Eq. (4.25) e posterior aplicação do Teorema da Divergência, levando possíveis integrais de domínio para o contorno, resulta no formato abaixo.

$$\int_{\Omega} \alpha_\xi^j [(\psi_{,i} u^*)_{,i} - \psi_{,i} u_{,i}^*] d\Omega = \int_{\Gamma} \alpha_\xi^j n_i \psi_{,i} u^* d\Gamma - \int_{\Omega} \alpha_\xi^j \psi_{,i} u_{,i}^* d\Omega \quad (4.27)$$

A estrutura da Eq. (4.27) revela uma das integrais já correlata ao contorno e uma integral de domínio remanescente. Para transferir esta segunda integral também ao contorno, aplica-se por uma segunda vez o procedimento de integração por partes tal como segue.

$$(\psi u_{,i}^*)_{,i} = \psi_{,i} u_{,i}^* + \psi u_{,ii}^* \quad \therefore \quad \psi_{,i} u_{,i}^* = (\psi u_{,i}^*)_{,i} - \psi u_{,ii}^* \quad (4.28)$$

Ainda por motivos de sintetizar a formulação, define-se neste ponto uma nova variável η^j dependente dos cossenos diretores e do gradiente da função primitiva ψ .

$$\eta^j = n_i \psi_{,i} \quad (4.29)$$

Substituindo então a decomposição da Eq. (4.28) e a definição da Eq. (4.29), na Eq. (4.27), e aplicando o Teorema da Divergência na integrais possíveis, é possível chegar ao seguinte formato.

$$\int_{\Gamma} \alpha_{\xi}^j \eta^j u^* d\Gamma - \int_{\Omega} \alpha_{\xi}^j [(\psi u_{,i})_{,i} - \psi u_{,ii}] d\Omega = \int_{\Gamma} \alpha_{\xi}^j \eta^j u^* d\Gamma - \int_{\Gamma} \alpha_{\xi}^j \psi n_i u_{,i}^* d\Gamma + \int_{\Omega} \alpha_{\xi}^j \psi u_{,ii}^* d\Omega \quad (4.30)$$

Uma análise da Eq. (4.30) revela duas integrais já endereçadas ao contorno e uma integral de domínio que ainda demanda tratamento. Entretanto, é perceptível o fato de que o operador laplaciano foi completamente transferido de sobre a primitiva da função radial ψ para a solução fundamental u^* . Desta forma pode-se tratar a integral de domínio em questão com a conveniente escrita do problema fundamental de Poisson mostrada a seguir.

$$u_{,ii}^* = -\Delta(X, \xi) \quad (4.31)$$

A solução correlata ao problema de Poisson é amplamente conhecida na literatura (BREBBIA, 1982), (WROBEL, 2002), (ZILL; TELLES; WROBEL, 2012), e dada abaixo, onde também define-se por conveniência o fluxo relacionado a solução fundamental, q^* .

$$u^*(X, \xi) = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \quad (4.32)$$

$$q^* = n_i u_{,i}^* = -\frac{1}{2\pi r(\xi; X)} \frac{\partial r(\xi; X)}{\partial n} \quad (4.33)$$

A inserção do problema fundamental dado pela Eq. (4.31) e da definição do fluxo correlato a solução fundamental dado pela Eq. (4.33), ambas na sentença da Eq. (4.30), e com uso apropriado da propriedades do Delta de Dirac, permitem a seguinte escrita do lado advectivo.

$$LA = \int_{\Omega} p(X) u^*(X, \xi) d\Omega = \alpha_{\xi}^j \left\{ -c(\xi) \psi(\xi) + \int_{\Gamma} \eta^j(X; X^J) u^*(X, \xi) d\Gamma - \int_{\Gamma} \psi(X; X^J) q^*(X, \xi) d\Gamma \right\} \quad (4.34)$$

A formulação integral final pode ser escrita alinhando o tratamento do lado advectivo recém escrito pela Eq. (4.34) com o tratamento clássico do lado difusivo, que consiste na manipulação de um operador auto-adjunto, resultando na seguinte expressão integral final no domínio contínuo.

$$c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(X)q^*(X, \xi)d\Gamma - \int_{\Gamma} q(X)u^*(X, \xi)d\Gamma = \quad (4.35)$$

$$\alpha_{\xi}^j \left\{ -c(\xi)\psi(\xi) + \int_{\Gamma} \eta^j(X; X^J)u^*(X, \xi)d\Gamma - \int_{\Gamma} \psi(X; X^J)q^*(X, \xi)d\Gamma \right\}$$

Pode-se neste ponto do algebrismo impor o processo de discretização sobre a Eq. (4.35), gerando assim um sistema matricial resultante, dado pela Eq. (4.36)

$$[H][u] - [G][q] = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} \alpha \quad (4.36)$$

Na sequência do desenvolvimento da técnica se faz ainda necessário determinar os coeficientes α . Para tanto vamos relembrar da definição da força artificial de campo p , colocado abaixo no formato de suas componentes em x e y .

$$p = v_i u_{,i} \quad \therefore \quad p_x = v_x \frac{\partial u}{\partial x} \quad p_y = v_y \frac{\partial u}{\partial y} \quad (4.37)$$

$$p = \alpha_j F_j \quad \therefore \quad \alpha_j = F_j^{-1} p \quad (4.38)$$

Percebe-se na Eq. (4.37) a presença das derivadas parciais ou gradientes correlatos ao campo potencial u . Estas derivadas ainda estão em formato contínuo e também precisam ser aproximadas a posteriori. Todavia antes disso, para uma visão mais geral da formulação discreta gerada até aqui, substituindo as definições da aproximação por bases radiais da ação de domínio reapresentada por comodidade na Eq. (4.38) acima, e as expressões da Eq. (4.37), na Eq. (4.36), tem-se:

$$[H][u] - [G][q] = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} F^{-1} (p_x + p_y) = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} F^{-1} \left(v_x \frac{\partial u}{\partial x} + v_y \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (4.39)$$

Neste ponto, para facilitar a escrita vamos definir uma matriz $[S]$, que tem componentes em duas direções de acordo com a estrutura algébrica a seguir.

$$[S_X] = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} F^{-1} [V_x] \quad \therefore \quad [S_Y] = \{[H][\psi] - [G][\eta]\} F^{-1} [V_Y] \quad (4.40)$$

Substituindo então as definições recém fixadas pela Eq. (4.40), na Eq. (4.39), podemos chegar a seguinte estrutura.

$$[H][u] - [G][q] = [S_X] \frac{\partial u}{\partial x} + [S_Y] \frac{\partial u}{\partial y} \quad (4.41)$$

A Eq. (4.41) contem as derivadas em relação as direções x e y , que carecem aproximação. A aproximação aqui será feita no próprio campo escalar u , utilizando-se uma segunda aproximação via bases radiais tal como mostrado na sequência.

$$u = \beta F \quad \therefore \quad \beta = F^{-1}u \quad (4.42)$$

Da aproximação estabelecida na Eq. (4.42), pode-se diferenciar em relação as duas direções espaciais, de forma a estabelecer uma aproximação para as derivadas parciais.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial x} \beta = F_x F^{-1}u \quad \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial y} \beta = F_y F^{-1}u \quad (4.43)$$

Substituindo as aproximações das derivadas parciais dadas pela Eq. (4.43), na Eq. (4.41), pode-se reescrever a equação matricial da seguinte forma:

$$[H][u] - [G][q] = [S_X F_x F^{-1} + S_Y F_y F^{-1}] \{u\} \quad (4.44)$$

Para uma representação algébrica ainda mais compacta pode-se ainda sintetizar através de uma matriz $[R]$, a exposição da expressão final, conforme visto nas definições abaixo.

$$[R_x] = S_X F_x F^{-1} \quad [R_y] = S_Y F_y F^{-1} \quad [R] = [R_x] + [R_y] \quad (4.45)$$

Com o uso da definição da Eq. (4.45), na Eq. (4.44), o sistema matricial discreto final do problema advectivo-difusivo via técnica na dupla reciprocidade pode ser compactado conforme abaixo na Eq. (4.46).

$$[H - R][u] = [G][q] \quad (4.46)$$

5 Metodologia Geral

Nesta seção pretende-se fornecer uma visão detalhada de todos os parâmetros, critérios, premissas e fluxo de passos utilizados para a geração dos resultados e posterior análise dos mesmo nesta tese. Para tanto, subdivide-se a exposição da metodologia adotada em alguns itens relevantes que seguem.

5.1 Domínio e Malha Computacional

O domínio computacional $\Omega(X)$ consiste em uma geometria quadrada de aresta unitária, ilustrada pela Figura 9. Selecionou-se uma geometria simples, pois o foco principal desta tese é a resposta das formulações de elementos de contorno (MEC) propostas em relação à parâmetros de malha e parâmetros físicos. Desta forma, testes com geometrias mais desafiadoras não foram abordados, por não serem o cerne da complexidade proposta para esta tese.

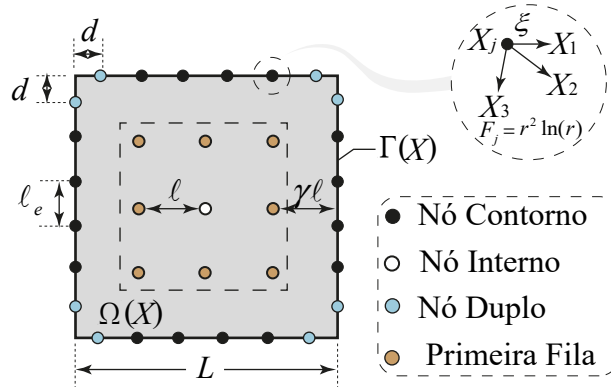


Figura 9 – C5 - Esquema Global de Malha Estruturada

De acordo com a Figura 9, a malha utilizada tem formato estruturado, e é feita por um malhador autoral codificado em linguagem Octave. Este malhador, por sua vez, tem a capacidade de gerar malhas com facilidade para qualquer problema de campo escalar desejado. A malha estruturada distribui os elementos de contorno com tamanho único l_e , possui uma quantitativo de polos internos com uma distância l , entre si, com exceção da primeira fileira de internos, que possui uma distância γl em relação ao contorno, onde γ é um parâmetro ajustável. A não ser que seja destacado ao contrário, as simulações numérica são executadas de forma padrão, ou seja, com o parâmetro γ unitário. Os nós duplos mostrados em cor azul na Figura 9, sofrem um afastamento padrão de 2% do l_e , em todos os casos.

5.2 Modelo de Governo e Termos de Transporte

O modelo de governo abordado, em linhas gerais, é o da equação geral de transporte, dado pela Eq. (3.3). A equação é reescrita aqui por conveniência, em alinhamento com os casos testados nesta tese, a saber, em sua versão estacionária, pela Eq. (5.1).

$$K_{ij}u_{,ii} + v_j u_{,j} - \lambda_o u = p \quad i, j = 1, 2 \quad (5.1)$$

O modelo de transporte representado pela Eq. (5.1), em seu lado esquerdo apresenta, a representação dos termos de transporte por difusão, advecção e reação. Já em seu lado direito contabiliza-se as ações de domínio.

Nesta tese, há a exposição das formulações integrais propostas a modelos difusivo-advectivo com presença de transporte reativo ou com presença de ações de domínio em alguns casos. Tal exposição a mais termos além da base do modelo difusivo-advectivo pretendem comprovar a robustez e resiliência das formulações propostas em relação a presença de múltiplos termos de transporte com naturezas físicas distintas. Cabe salientar, por fim, que o cerne difusivo-advectivo das equações governantes testadas continua a caracterizar o foco principal dos testes desta tese, uma vez que, os efeitos advectivos são sempre alvo de análise de sensibilidade como descrito na sequência deste capítulo.

5.3 Parâmetros de Discretização

Os elementos utilizados para discretização do contorno são lineares e nós duplos são utilizados nas quinas com condição de afastamento $d = 0.02L$. Quanto aos polos internos interpolantes, estes são distribuídos, conforme a Figura 9, de forma equidistante pelo domínio. No tocante ao trabalho da técnica de interpolação direta (MECID) com elementos de diversas ordens de interpolação destacam-se trabalho mais recentes sobre a técnica (SANTOS, 2021). Em paralelo, o comportamento da técnica da dupla reciprocidade (MECDR) com o uso de elementos constantes, lineares e quadráticos também já é conhecido em literatura para boa parte dos problema de campo escalar (BULCÃO, 1999). Por fim, cabe ressaltar que a seleção da interpolação linear se dá pelo balanço entre precisão entregue e simplicidade de implementação, quando comparada com seus pares, a saber, elementos constantes e quadráticos.

5.4 Formulações do Método de Elementos de Contorno

Esta tese propõe um total de três formulações distintas da técnica de interpolação direta (MECID), que são utilizadas no testes numéricos dos capítulos subseqüentes. São elas:

1. MECID Clássica - Campo de Velocidade Constante
2. MECID Clássica - Campo de Velocidade Variável
3. MECID Alternativa - Campo de Velocidade Variável

As supracitadas três contribuições desta tese são comparadas com a técnica da dupla reciprocidade ([NARDINI; BREBBIA, 1983](#)), dada sua importância na solução de diversos problema de campo escalar, no contexto de soluções para aproximação de integrais de domínio. Desta forma, a MECDR é utilizada como uma referência comparativa para as formulações do MECID.

5.5 Parâmetros de Simulação

Os algoritmos do MEC utilizados nesta tese foram todos implementado em linguagem Fortran. Os principais parâmetros de simulação presentes na configuração destes algoritmos está listados a seguir:

- Função de Base Radial da Interpolação Principal
- Função de Base Radial da Interpolação Secundária
- Esquema de Integração Numérica
- Método de Solução dos Sistemas Lineares

A interpolação principal, a saber, aquela referente a aproximação de parte ou todo o núcleo da integral de domínio, a depender da técnica do MEC selecionada, utiliza-se a função de base radial $F_j = r^2 \ln r$ ([BUHMANN, 2003](#)). No tocante a técnica da interpolação direta, o comportamento da mesma com a utilização de distintas funções de base radial é suficientemente conhecido ([LOEFFLER et al., 2017](#)).

Em relação a interpolação secundária, a saber, aquela feita sobre o campo potencial para então determinar a aproximação dos gradientes, no caso do modelo de difusão-advecção, utiliza-se a função auxiliar $F_j = r^3$, que já demonstrou ser efetiva em trabalhos científicos já estabelecidos na literatura ([PARTRIDGE; BREBBIA; WROBEL, 1992](#); [LOEFFLER et al., 2017](#)).

As integrações numéricas são aproximadas com quadratura de Gauss clássica com 20 pontos. Para alguns casos de formulação de velocidade variável é testada a Quadratura Adaptativa de Telles, que por sua vez, depende de menos pontos de Gauss para atingir bons patamares de precisão.

Por fim, os sistemas lineares gerados pelo método de elementos de contorno são resolvidos pelo método direto de eliminação de Gauss. Métodos iterativos de solução mais robustos também poderiam ser utilizados, entretanto, para o quantitativo de graus de liberdade (GDL) desta tese, não foram cogitados.

5.6 Casos Físicos Testados

Os casos físicos testados ao longo dos Capítulos 6, 7 e 8 podem ser divididos em:

- Casos com Campo de Velocidade Constante
- Casos com Campo de Velocidade Variável

A priori para o casos de velocidade constante, presentes nos testes numéricos do Capítulo 6, os casos foram escolhidos variando a complexidade das condições de contorno, com dois casos fisicamente unidimensionais, com distintas quantidade de condições de contorno não homogêneas, e dois casos apenas com condições essenciais, que apresentam desafios em relação aos efeitos de quinas.

No tocante a casos físicos com velocidade variável a seleção foi feita de uma forma estratégica, devido a toda complexidade inserida pela variação espacial do campo de velocidades. O racional de seleção iniciou-se considerando os dois principais efeitos conectados ao campo hidrodinâmico: efeitos advectivos e efeitos de compressibilidade. Os primeiros estão relacionados à magnitude dos componentes do campo de velocidade, enquanto que, os subsequentes, tem relação com o divergente do campo de velocidade. A Figura 10 ilustra com clareza os possíveis casos físicos, de acordo com o divergente de velocidade.

Primeiramente, observa-se que é possível haver divergente nulo não apenas em casos de velocidade constante, mas também em casos especiais de velocidade variável, tal como ilustrado na parte esquerda do fluxograma da Figura 10. Em contraponto, em casos de divergente não-nulo, tem-se o caso de divergente constante ou variável no espaço. Estas variedades de casos ensejam uma investigação mais profunda, pois, muito provavelmente o comportamento numérico das formulações propostas para cada tipo de configuração supracitada tende a ser distinto. As formulações do MEC propostas para campo de velocidade variável são testadas então para as três possíveis configurações a seguir: divergente nulo, divergente constante e divergente variável.

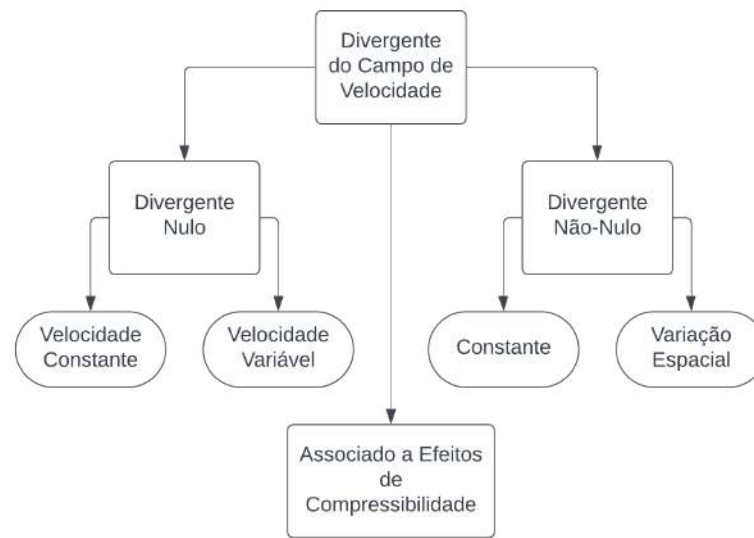


Figura 10 – C5 - Casos Testados

5.7 Intensidade dos Efeitos Advectivos

A intensidade dos efeitos advectivos é um dos focos de teste deste trabalho, todavia, se faz necessário reforçar o entendimento da classificação quantitativa desses efeitos e os termos utilizados para denominá-los ao longos dos Capítulos 6, 7 e 8 que apresentam os resultados da tese. No Capítulo 6 os efeitos advectivos são contabilizados no adimensional de Peclet, matematicamente igual ao módulo da velocidade para os casos testados. Já nos Capítulos 7 e 8 os efeitos advectivos e reativos são controlados pelos parâmetros matemáticos de referência que aparecem no próprio campo hidrodinâmico, em cada caso testado. Para todo efeito, também é interessante reforçar a classificação destes efeitos advectivos como baixos, médios ou altos, ou ainda, analogamente, como fracos, moderados e intensos. Considera-se como efeitos advectivos fracos ou baixos àqueles associados números de Peclet ou valores do parâmetro de referência até 5. Como efeitos advectivos moderados ou médios entende-se aqueles representados por números de Peclet ou valores do parâmetro de referência entre 5 e 20. Por fim, entende-se como efeitos advectivos intensos ou altos, aqueles ligados a um quantitativo de número de Peclet ou valores do parâmetro de referência acima de 20.

5.8 Sequência de Testes

Nesta seção expõe-se sucintamente o fluxo de testes numéricos executados, conforme a Figura 11, para cada caso presente na vigente tese. A priori, cabe destacar que, esta é a sequência de testes padrão, ou, em outras palavras, estes são os testes presentes em todas as análises de resultados, sem prejuízo a outros resultados extras que são apresentados por conveniência.

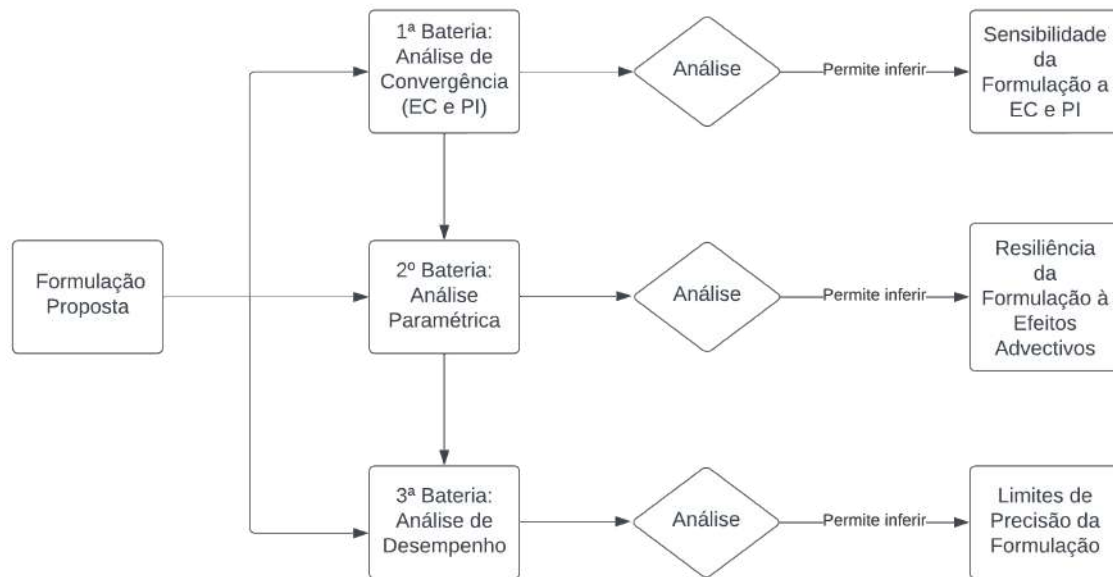


Figura 11 – C5 - Sequência de Testes Numéricos

A primeira bateria de testes efetuada diz respeito a inferir sobre a convergência das formulações do MEC propostas em relação aos principais parâmetros da malha computacional, a saber, número de elementos de contorno (EC) e quantidade de polos internos interpolantes (PI). Esta bateria de teste é feita com parâmetros advectivos e difusivos de mesma ordem de magnitude, ou, fisicamente com número de Péclet unitário. A definição do número de Péclet é dependente de uma velocidade e comprimento característicos tal como da difusividade térmica do meio contínuo (PLETCHER; TANNEHILL; ANDERSON, 2012; INCROPERA et al., 2008; BURMEISTER, 1993). Como a aresta do domínio e a difusividade térmica são unitárias, na presente tese, o número de Péclet pode ser escrito apenas em função de uma velocidade característica, que é selecionada como o módulo do campo de velocidade imposto. Relevante ressaltar que a depender do capítulo de testes numéricos, a saber, Capítulos 6, 7 e 8, os efeitos advectivos são controlados pelo número de Péclet ou simplesmente por parâmetros de referência ligados ao campo de velocidade.

Sequencialmente, a segunda bateria de testes é caracterizada por uma análise paramétrica dos efeitos do transporte advectivo, e, quando presentes, também dos efeitos ligados à compressibilidade. Desta forma, através de um ou mais parâmetros do modelo

de governo, intensifica-se a magnitude do transporte advectivo e observa-se a resposta das formulações propostas em termos de precisão e manutenção da aderência com a física do problema. Para tanto, elege-se uma malha de contorno suficientemente robusta e avalia-se os resultados numéricos para um conjunto de três nuvens distintas de pontos internos, enquanto os parâmetros de referência que controlam a advecção são amplificados.

A terceira e última bateria de testes pode ser definida como uma análise de desempenho limítrofe, onde uma malha refinada de contorno e domínio é utilizada para tentar obter das formulações propostas algo próximo a sua melhor performance, frente ao aumento dos efeitos convectivos e efeitos de compressibilidade.

Quanto a mensuração do erro numérico cometido em termos de potencial ou derivada do potencial utiliza-se o critério de erro da Eq. (5.2) que segue.

$$e = \frac{|u_{\text{numérico}} - u_{\text{exact}}|}{\max |u_{\text{exact}}|} \quad (5.2)$$

Este critério de erro utiliza o máximo valor analítico para normalizar os valores de desvios em relação ao valor exato nodal e com isso erros artificiais nas quinas são devidamente atenuados, e proporcionando também um tratamento adequado para nós cujo valor analítico seja nulo.

6 Formulação Clássica da Interpolação Direta em Modelos de Velocidade Constante

A descrição da modelagem matemática generalizada de um fenômeno convectivo envolve necessariamente, os princípios fundamentais da mecânica do contínuo (FUNG, 1977). O modelo escalar conhecido como advectivo-difusivo é derivado diretamente do princípio da conservação de energia, que em forma conservativa e notação indicial é dado na sequência já com algumas premissas simplificadoras.

$$\frac{k}{\rho c_p} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2} = v_j \frac{\partial u}{\partial x_j} \quad (6.1)$$

Na Eq. (6.1), $u(x, y)$ é a variável primal ou potencial, ρ representa o campo de massa específica do fluido, c_p , o calor específico a pressão constante, k é a condutividade térmica do meio, e o vetor v_j é o campo de velocidade do escoamento, que assume-se ser incompressível. A validade da equação acima é limitada a regime estacionário, com um meio fluido newtoniano isotrópico com propriedades termo-físicas constantes, dissipação viscosa desprezível e desconsiderando efeito de forças de corpo (SCHLICHTING; GERSTEN, 2003).

É possível reescrever a Eq. (6.1) usando um formato ainda mais sintético de notação indicial, tal como mostrado na Eq. (6.2), onde λ é a difusividade térmica do meio contínuo. Este formato além de elegante é conveniente para os algebrismos mostrados na sequência.

$$\lambda u_{,ii} = v_i u_{,i} \quad (6.2)$$

O termo do lado direito da Eq. (6.2) contabiliza o transporte advectivo, enquanto o termo no lado esquerdo da mesma representa os efeitos difusivos. Desta forma, a Eq. (6.2) representa um balanço entre os efeitos de transporte pelo campo de velocidade do escoamento e transporte difusivo no meio contínuo. Uma interessante versão adimensional da Eq.(6.1) é dada por:

$$v'_j \frac{\partial u'}{\partial x'_j} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u'}{\partial x'^2_j} \quad Pe = \frac{v_c l_c}{\lambda} = Re_{l_c} Pr_{l_c} \quad (6.3)$$

A Eq. (6.3) contém aspectos físicos interessantes a serem expostos. O conceito associado ao adimensional de Péclet (Pe) impõe a escolha de uma velocidade característica v_c e um comprimento característico l_c , e também é dependente da difusividade térmica λ do meio. A razão entre os efeitos difusivo e advectivo é condensada no número de Péclet, e

portanto, a dominância de um efeito sobre o outro pode ser indentificada por uma análise paramétrica, e em casos extremos, assintótica, deste grupamento. É possível também destacar o papel central do número de Péclet como um elo entre a a hidrodinâmica e a parte térmica, dentro de problemas convectivos, uma vez que, pode ser equacionado em função do número de Reynolds e Prandtl de acordo com a literatura pertinente (BURMEISTER, 1993), em alinhamento com a Eq. (6.3).

A formulação de interpolação direta (MECID) inicia-se com escrita da equação de governo, Eq. (6.2), em um formato integral, usando para isso a solução fundamental do problema de Poisson como função auxiliar (KATSIKADELIS, 2016), como exposto na Eq. (6.4). Durante o desenvolvimento matemático seguinte, a difusividade térmica λ é considerada unitária para evitar aglomerações algébricas desnecessárias.

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X)u^*(\xi, X)d\Omega(X) = \int_{\Omega} v_i(X)u_{,i}(X)u^*(\xi, X)d\Omega(X) \quad (6.4)$$

Ainda no intuito de evitar algebrismos extensos, é conveniente separar a Eq. (6.4), em um lado difusivo (LD), na esquerda, e um lado advectivo (LA), na direita. O tratamento matemático dado ao lado difusivo, mostrado na Eq. (6.5), é amplamente presente na literatura correlata ao MEC (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012).

$$LD = c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(X)q^*(\xi, X)d\Gamma - \int_{\Gamma} q(X)u^*(\xi, X)d\Gamma \quad (6.5)$$

Sequencialmente, o termo advectivo é reescrito, usando a regra do produto sucessivamente e considerando nulo o divergente do campo de velocidade, como consequência algébrica do conceito de incompressibilidade (SCHLICHTING; GERSTEN, 2003). Assim, a integral original de domínio, do lado direito da Eq. (6.4), quebra-se em duas partes (PINHEIRO, 2018), na qual a primeira parte pode ser conduzida ao contorno via Teorema da Divergência, e a segunda permanece em escrita de domínio, de acordo com a Eq. (6.6) a seguir.

$$LA = \int_{\Gamma} v_i(X)n_i(X)u(X)u^*(\xi, X)d\Gamma - \int_{\Omega} v_i(X)u(X)u_{,i}^*(\xi, X)d\Omega \quad (6.6)$$

6.1 Formulação Clássica MECID - Velocidade Constante

Apesar de alguma similaridade, a proposta da MECID difere significativamente do MECDR, uma vez que a primeira interpola todo o núcleo da integral proveniente do termo advectivo da equação de governo, Eq. (6.1), inclusa a solução fundamental. Os mesmos tipos de funções de bases radiais usadas pelo MECDR, podem ser utilizadas pelo MECID, no entanto, a função radial cúbica e a função radial de placa fina são duas que demonstraram, em testes preliminares, os melhores resultados (LOEFFLER et al.,

2017). O melhor comportamento relativo do MECID no tocante ao uso de diversos outros tipos de funções de bases radiais foi também constatado e mostrado em outros artigos no domínio tridimensional (BARBOSA; LOEFFLER; LARA, 2019). Todavia o MECID também possui outras características particulares que são discutidas na sequência.

6.1.1 Procedimento de Regularização

No intuito de evitar singularidades geradas pela coincidência entre as coordenadas de pontos fonte e pontos campo, um procedimento de regularização similar ao proposto por Hadamard é aplicado (HADAMARD, 2003). A ideia central aqui é somar e subtrair um mesmo termo específico a integral, de forma a manter a o valor matemático intacto como mostrado na Eq. (6.7) (LOEFFLER; MANSUR, 2017).

$$LA = \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u(X) u^*(\xi, X) d\Gamma - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) u(X) d\Omega + \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) u(\xi) d\Omega - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) u(\xi) d\Omega \quad (6.7)$$

Comparativamente a outros problemas de potencial nos quais a regularização foi aplicada, neste caso, a singularidade apresenta maior ordem. Entretanto, apesar disso, o processo mostra-se eficiente, como pode-se observar no resultados obtidos. Assim, o termo advectivo pode ser reescrito como:

$$LA = \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u(X) u^*(\xi, X) d\Gamma - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) u(\xi) d\Omega \quad (6.8)$$

Equação (6.8) ainda contém duas integrais de domínio, que são chamadas na ordem que são exibidas na equação, respectivamente, de termo regularizado (TR) e termo excedente (TE). Ambas podem ser transformadas em integrais de contorno, como mostrado a seguir.

6.1.2 Tratamento do Termo Regularizado

O tratamento do termo regularizado (TR), de acordo com a técnica de interpolação direta (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015), consiste em aproximar todo o núcleo da integral de domínio por funções de bases radiais (BUHMANN, 2003), tal como segue.

$$TR = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega \cong \int_{\Omega} \alpha_j^{\xi} F_j(X_j, X) d\Omega \quad (6.9)$$

A aproximação do núcleo da integral na Eq. (6.9) é formado por produtos entre as funções de bases radiais F_j com coeficientes α constantes, ainda não determinados, e que podem sair das integrais. Assim, o núcleo das integrais, constituído por funções de bases radiais conhecidas, pode ser matematicamente tratado com o uso funções primitivas ψ . Este tratamento é mostrado na sequência, passo a passo, e exposto pela Eq. (6.10) abaixo.

$$TR \cong \int_{\Omega} \alpha_j^{\xi} F_j(X_j, X) d\Omega = \alpha_j^{\xi} \int_{\Omega} \psi_{,i}^j d\Omega = \alpha_j^{\xi} \int_{\Gamma} (\psi_{,i} n_i)^j d\Gamma = \alpha_j^{\xi} \int_{\Gamma} \eta_j d\Gamma \quad (6.10)$$

Equação (6.10) representa o termo regularizado, agora já aproximado como uma integral de contorno, e que pode ser facilmente calculado por métodos de integração numérica apropriados, mostrados no Capítulo 3. O procedimento para a determinação dos coeficientes desconhecidos α é mostrado em momento oportuno, na seção 6.2.1.

6.1.3 Tratamento do Termo Excedente

O procedimento de regularização mostrado anteriormente insere um novo termo na formulação chamada aqui de integral de domínio excedente (TE), como mostrado na Eq. (6.11) abaixo.

$$TE = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) u(\xi) d\Omega \quad (6.11)$$

A função de ponto $u(\xi)$ não depende das coordenadas espaciais, e pode deixar a integral da Eq. (6.11). Com o uso da regra do produto, e considerando a nulidade do divergente do campo de velocidade (PINHEIRO, 2018), rearranja-se a álgebra, de forma que o teorema da divergência possa ser aplicado, transformando a integral do domínio para o contorno. Assim, o termo excedente (TE) pode ser reescrito de acordo com a Eq. (6.12).

$$TE = u(\xi) \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u^*(\xi, X) d\Gamma \quad (6.12)$$

6.1.4 Sentença Integral Final

O tratamento matemático do lado advectivo está concluso. A equação final de governo em formato integral é dada por:

$$c(\xi) u(\xi) + \int_{\Gamma} u(X) q^*(\xi, X) d\Gamma - \int_{\Gamma} q(X) u^*(\xi, X) d\Gamma = \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u(X) u^*(\xi, X) d\Gamma + \alpha_j^{\xi} \int_{\Gamma} \eta_j d\Gamma + u(\xi) \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u^*(\xi, X) d\Gamma \quad (6.13)$$

A sentença integral final mostrada na Eq. (6.13) é quase exata, exceto pela aproximação por bases radiais presente no termo regularizado pela MECID. Existe uma vasta gama de funções de bases radiais que podem ser utilizadas tal como estudos consistentes de avaliação de desempenho das mesmas em problemas de campo escalar (LOEFFLER et al., 2017).

6.2 Discretização e Aspectos Matriciais

O procedimento de discretização da equação integral final inicia-se aqui pelo termo difusivo, uma vez que este tratamento já é largamente difundido na literatura (KATSIKADELIS, 2016), veja Eq. (6.14). Cada linha que forma o sistema linear está correlacionada a um ponto fonte ξ fixado em um nó, e executando a integração nos elementos de contorno:

$$LD = c(\xi)u(\xi) + \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Gamma_j} u_j(X)q^*(\xi, X)d\Gamma_j \right\} - \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Gamma_j} q_j(X)u^*(\xi, X)d\Gamma_j \right\} \quad (6.14)$$

A representação algébrica mostrada aqui já utiliza a notação das matrizes G e H , clássicas dos procedimentos em elementos de contorno, conforme detalhado no Capítulo 3 (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012). Os vetores-linha e vetores-coluna do lado difusivo são exibidos a seguir pela equação Eq. (6.15):

$$LD = c(\xi)u(\xi) + (H_{\xi 1} \dots H_{\xi 2} \dots H_{\xi N}) \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} - (G_{\xi 1} \dots G_{\xi 2} \dots G_{\xi N}) \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_N \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

O lado advectivo demanda um processo de discretização um pouco mais detalhado, que divide-se aqui em setores, para melhor entendimento. O lado advectivo é constituído por três partes, e pode ser revisado na Eq. (6.8). Uma visão geral dos três termos a serem discretizados é dada abaixo, denominados de T_1 , T_2 and T_3 , por conveniência, na Eq. (6.16).

$$\begin{aligned} T_1 &= \int_{\Gamma} (v_i n_i)^j u^j u^*(\xi, X) d\Gamma & T_2 &= \alpha_j^\xi \int_{\Gamma} \eta_j d\Gamma \\ T_3 &= u(\xi) \int_{\Gamma} v_i(X) n_i(X) u^*(\xi, X) d\Gamma \end{aligned} \quad (6.16)$$

O procedimento inicia-se pela forma discreta do termo T_1 , mostrado na Eq. (6.17), já numa escrita de integral de contorno. O produto escalar entre o vetor velocidade e o

cosseeno diretor, chamado aqui de β^j , varia apenas ao longo do elemento, e não dependem do contorno. Portanto, o termo pode ser escrito do lado de fora da integral.

$$T_1 = \sum_{j=1}^N \left((v_i n_i)^j \int_{\Gamma_j} u^j(X) u^*(\xi, X) d\Gamma_j \right) \quad \beta^j = (v_i n_i)^j \quad (6.17)$$

Fixa-se um ponto fonte ξ , e com a varredura dos nós adjacentes, pode-se formar a linha referente a este termo no sistema linear de equações, com a seguinte estrutura da Eq. (6.18).

$$T_1 = \left\{ (v_i n_i)^1 u^1 G_{\xi 1} + \dots + (v_i n_i)^N u^N G_{\xi N} \right\} \quad (6.18)$$

Sequencialmente, é possível executar um tratamento parcial no termo regularizado T_2 , que utiliza aproximação do MECID usando funções de bases radiais. Neste estágio, demais manipulações deste termo não são possíveis, uma vez que os coeficientes α ainda são desconhecidos. Desta maneira, a expansão de uma linha do sistema linear gerada por este termo pode ser devidamente representada pela Eq. (6.19).

$$T_2 \cong \alpha_j^\xi N_j = \alpha_1^\xi N_1 + \dots + \alpha_N^\xi N_N \quad (6.19)$$

O termo excedente de domínio T_3 pode também ser discretizado, bastando para tanto remover o produto escalar β^j da integral, e observando que a função de ponto $u(\xi)$ gera uma estrutura de matriz diagonal.

$$T_3 = u(\xi) \left\{ \sum_{j=1}^N \left((v_i n_i)^j \int_{\Gamma_j} u^*(\xi, X) d\Gamma_j \right) \right\} \quad (6.20)$$

Expandindo o termo T_3 , da Eq. (6.20) para o formato de uma linha matricial, exposta a seguir, revela-se a estrutura, que também baseia-se nas matrizes G , análogo ao que ocorre no termo T_1 , vide Eq. (6.21).

$$T_3 = u(\xi) \left\{ (v_i n_i)^1 G_{\xi 1} + \dots + (v_i n_i)^N G_{\xi N} \right\} \quad (6.21)$$

Uma vez que os três termos foram individualmente discretizados, é possível organizá-los em uma estrutura única que represente uma linha do lado advectivo, de uma forma mais compacta, dado pela Eq. (6.22), e também em termos de vetores-linha e vetores-coluna, dado pela Eq. (6.23).

$$AS = \left\{ (v_i n_i)^1 u^1 G_{\xi 1} + \dots + (v_i n_i)^N u^N G_{\xi N} \right\} + \alpha_1^\xi N_1 + \dots + \alpha_N^\xi N_N \\ + u(\xi) \left\{ (v_i n_i)^1 G_{\xi 1} + \dots + (v_i n_i)^N G_{\xi N} \right\} \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned}
AS = (G_{\xi 1} \dots G_{\xi 2} \dots G_{\xi N}) \begin{pmatrix} \beta^1 u_1 \\ \vdots \\ \beta^N u_N \end{pmatrix} + (\xi \alpha_1 \dots \xi \alpha_2 \dots \xi \alpha_N) \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_N \end{pmatrix} \\
+ \left\{ (G_{\xi 1} \dots G_{\xi 2} \dots G_{\xi N}) \begin{pmatrix} \beta^1 \\ \vdots \\ \beta^N \end{pmatrix} \right\} u(\xi) \quad (6.23)
\end{aligned}$$

Finalmente, o formato de uma linha expandida do sistema no lado advectivo, Eq. (6.23), é análogo a sua equivalente no lado difusivo, dado pela Eq. (6.15). Uma vez com ambos os lados da equação de governo já foram expostos no formato de linha expandida é possível prever a estrutura do sistema linear como um todo, apresentado na configuração a seguir.

$$[H][u] - [G][q] = [G'][u] - [\alpha][N] - [D][u] \quad (6.24)$$

A representação matricial da Eq. (6.24), revela que o lado difusivo traz as conhecidas matrizes H e G , características do método dos elementos de contorno (KATSIKADELIS, 2016). No lado advectivo, tem-se uma matriz α contendo coeficientes ainda desconhecidos e duas novas matrizes conhecidas, mostradas na sequência na Eq. (6.25) e (6.26). Essas novas matrizes são G' , oriunda de uma primeira integral de contorno, e uma matriz diagonal D originada do termo excedente de domínio, durante o procedimento de regularização (PINHEIRO, 2018).

$$[G'] = \begin{pmatrix} \beta^1 G_{11} & \beta^2 G_{12} & \beta^3 G_{13} \\ \beta^1 G_{21} & \beta^2 G_{22} & \beta^3 G_{23} \\ \beta^3 G_{31} & \beta^3 G_{32} & \beta^3 G_{33} \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

A estrutura da matriz G' exibe diferenças quando comparada a matriz G original, devido as projeções do campo de velocidade do escoamento, representadas por β^j .

$$[D] = \begin{bmatrix} (\beta^1 G_{11} + \dots + \beta^N G_{1N}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & (\beta^1 G_{N1} + \dots + \beta^N G_{NN}) \end{bmatrix} \quad (6.26)$$

Deve também ser ressaltado que os pontos fonte sofrem um pequeno deslocamento nas quinas quando nós duplos são necessários ao método. Desta forma, todas as matrizes de elementos de contorno, incluindo a Eq. (6.25) e Eq. (6.26) usadas neste modelo são construídas a partir de equações linearmente independentes, com exceção da matriz H .

Esta última matriz é singular, isto devido a condição que permite que as derivadas do potencial do campo sejam nulas (KYTHE, 1995).

A matriz D apresenta uma estrutura diagonal devido a função de ponto $u(\xi)$, correlacionada aos pontos fonte. D também é uma matriz que vai contribuir para alterar a matriz H clássica posteriormente. O formato do sistema matricial pode ser representado algebricamente como segue pela Eq. (6.27).

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \cdots & H_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} G_{11} & \cdots & G_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{N1} & \cdots & G_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_N \end{bmatrix} = \\ & \begin{bmatrix} \beta^1 G_{11} & \cdots & \beta^N G_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta^1 G_{N1} & \cdots & \beta^N G_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} {}_1\alpha_1 & \cdots & {}_1\alpha_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ {}_N\alpha_1 & \cdots & {}_N\alpha_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_N \end{bmatrix} \\ & - \begin{bmatrix} (\beta^1 G_{11} + \dots + \beta^N G_{1N}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & (\beta^1 G_{N1} + \dots + \beta^N G_{NN}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (6.27)$$

6.2.1 Determinação da Matriz $[\alpha]$

A matriz composta pelos coeficientes a determinar α , no segundo termo do lado direito da Eq. (6.24) precisa ser agora reescrita em função da variável primal $u(X)$. Para simplificar a exposição algébrica, o produto entre o vetor velocidade e o gradiente da solução fundamental é computado numa nova variável denominada Λ^ξ , ou seja:

$$\alpha_j^\xi F_j(X, X_j) \simeq v_i(X) u_{,i}^*(\xi, X) [u(X) - u(\xi)] \quad (6.28)$$

É conveniente também escrever a Eq. (6.28) em um formato matricial. Para fazer isto, um ponto fonte é alocado sobre cada nó funcional e a varredura de interpolação é realizada, gerando o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} F_1^1 & \cdots & F_1^N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_N^1 & \cdots & F_N^N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi\alpha_1 \\ \vdots \\ \xi\alpha_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi\Lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \xi\Lambda_N \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u(\xi) \\ \vdots \\ u(\xi) \end{bmatrix} \right\} \quad (6.29)$$

Dois aspectos merecem ser ressaltados: A característica diagonal da matriz Λ , oriunda das derivadas da solução fundamental (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994) e o tratamento da singularidade feito através do procedimento de regularização (LOEFFLER; MANSUR, 2017).

Uma análise da Eq. (6.29) revela que o vetor α , que compõe cada linha da matriz $[\alpha]$, pode ser determinado pré-multiplicando essa equação pela inversa da matriz F , formada pelas funções de bases radiais. De forma explícita o vetor α , pode ser escrito na formato da Eq. (6.30).

$$\begin{bmatrix} {}_{\xi}\alpha_1 \\ \vdots \\ {}_{\xi}\alpha_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1^1 & \cdots & F_1^N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_N^1 & \cdots & F_N^N \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} {}_{\xi}\Lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & {}_{\xi}\Lambda_N \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u(\xi) \\ \vdots \\ u(\xi) \end{bmatrix} \right\} \quad (6.30)$$

Um novo vetor A pode ser introduzido para sintetizar a representação, de acordo com o formato algébrico a seguir (LOEFFLER et al., 2015):

$$A_{\xi} = (N_1 \dots N_N) \begin{bmatrix} F_1^1 & \cdots & F_1^N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_N^1 & \cdots & F_N^N \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} {}_{\xi}\Lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & {}_{\xi}\Lambda_N \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u(\xi) \\ \vdots \\ u(\xi) \end{bmatrix} \right\} \quad (6.31)$$

Para condensar a Eq. (6.31), a entidade matemática S é então criada, que está correlacionada com variáveis já expostas tal como mostrado a seguir na Eq. (6.32).

$$(S_1 \dots S_N) = (N_1 \dots N_N) \begin{bmatrix} F_1^1 & \cdots & F_1^N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_N^1 & \cdots & F_N^N \end{bmatrix}^{-1} \quad (6.32)$$

A substituição desta no variável S , dada pela Eq. (6.32), na Eq. (6.31), juntamente com alguma manipulação matemática resulta em um vetor A no formato da Eq. (6.33), abaixo.

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N [-S_{i1}\Lambda_i(1 - \delta_{i1})] & S_{21}\Lambda_2 & \cdots & S_{N1}\Lambda_N \\ S_{12}\Lambda_1 & \ddots & \sum_{i=1}^N [-S_{i2}\Lambda_i(1 - \delta_{i2})] & \ddots & S_{N2}\Lambda_N \\ S_{1N}\Lambda_1 & S_{2N}\Lambda_2 & \cdots & \sum_{i=1}^N [-S_{iN}\Lambda_i(1 - \delta_{iN})] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} \quad (6.33)$$

Na Eq. (6.33), o tratamento da singularidade promovido pelo procedimento de regularização fica representado algebricamente pela presença do Delta de Kronecker, δ_{ij} , que anula os termos da diagonal quando há coincidência entre pontos fonte e pontos de interpolação.

É possível representar de forma mais consisa a Eq. (6.33). Faz-se isso no formato matricial da Eq. (6.34) na sequência. Ao observar a Eq. (6.34), nota-se que todo o esforço

algébrico foi na intenção de escrever o termo regularizado como função da variável primal, tal como dito a priori no desenvolvimento.

$$[A] = [Z][u] \quad (6.34)$$

Por fim, depois de todo este tratamento matemático é possível escrever o sistema matricial final do MECID para um modelo advectivo-difusivo estacionário com campo de velocidade uniforme, dado pela Eq. (6.35) a seguir.

$$\{[H'] - [G'] + [Z] + [D]\} [u] = [G] [q] \quad (6.35)$$

6.3 Simulações Numéricas

6.3.1 Primeiro Exemplo

O primeiro exemplo consiste em um escoamento unidimensional que incide sobre um domínio quadrado, com fluxos nulos impostos nas arestas horizontais, um fluxo não-homogêneo na aresta direita e potencial nulo prescrito na aresta esquerda do domínio, de acordo com a Figura 12.

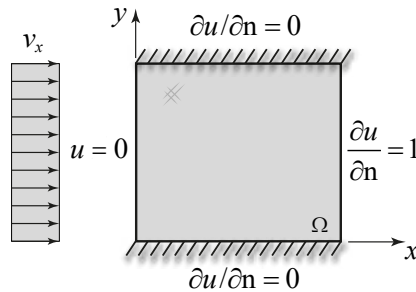


Figura 12 – C6E1 - Domínio e Condições de Contorno

Por simplicidade, apenas os valores de potencial calculados na aresta vertical direita são sujeitos a análise, isto porque espera-se destes uma grande variação de magnitude, especialmente ao aumentar-se a velocidade do escoamento, fato devido à natureza exponencial da solução analítica, mostrada a seguir na Eq. (6.36).

$$u(x) = \frac{e^{v_x x} - 1}{v_x e^{v_x}} \quad (6.36)$$

A análise de convergência é executada considerando inicialmente dois parâmetros de malha: o número de elementos de contorno e o número de pólos internos. No gráfico que segue, um destes parâmetro é fixado enquanto o outro varia, no intuito de verificar se a formulação é convergente para ambos. Os resultados são exibidos na Figura 13, e revelam um erro médio sistemicamente decrescente com o refinamento da malha de contorno

utilizada na MECID. O mesmo comportamento é observado ao aumentar o número de pólos internos da malha.

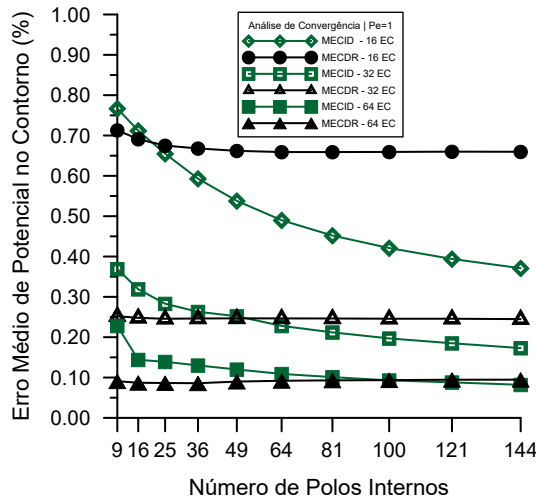


Figura 13 – C6E1 - Análise de Convergência

Problemas anteriormente resolvidos indicam que o desempenho do MECID está ligado a um equilíbrio entre o número de pontos nodais de contorno e o número de pólos internos interpolantes, como mostram testes de convergência já publicados (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015), (LOEFFLER et al., 2015). Este comportamento característico é também confirmado aqui, na solução de problemas advectivo-difusivos com velocidade constante. É importante destacar que a técnica MECID, devido a interpolação de todo o núcleo da integral de domínio correlata aos efeitos advectivos, demanda um número razoavelmente maior de pólos internos que modelos resolvidos pela técnica da Dupla Reciprocidade (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015). A monotonicidade das curvas exibidas do MECID também demonstra que a inserção de um grande número de pólos internos não causa problemas de mau condicionamento matricial ou questões de instabilidades, o mesmo sendo válido para o MECDR neste caso.

Ainda na Figura 13, também pode ser observado que o resultado do MECDR praticamente não se altera com o aumento no número de pólos internos interpolantes, o que configura um aspecto positivo na ótica de custo computacional. Desta forma, o desempenho do MECDR só pode ser melhorado, com o refinamento da malha de contorno. Entretanto, uma melhor aproximação para os efeitos advectivos é necessária se o número de Péclet for sucessivamente elevado. Isto é mostrado na Figura 14, na qual uma malha com 64 elementos de contorno é selecionada para as simulações numéricas. Agora, uma maior sensibilidade ao número de pólos internos implica num melhor desempenho do MECID comparativamente ao MECDR. Como já observado previamente, o MECDR não requer muitos pólos internos; os gráficos que comparam MECID e MECDR na Figura 14(a) e 14(b) utilizam malhas rigorosamente iguais por questão de critério.

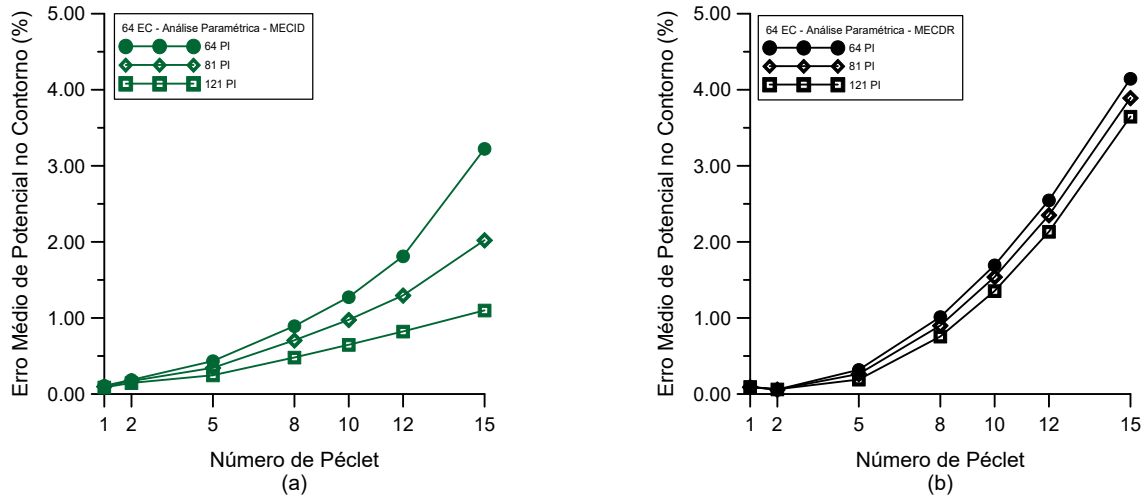


Figura 14 – C6E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

Por fim para oferecer uma melhor noção da robustez do MECID, o grau de discretização é aumentado de forma sensível, utilizando-se uma malha mais fina com 320 elementos de contorno e duas nuvens distintas de pólos internos (PI), 324 PI e 625 PI. Erros médios de potenciais baixos podem ser mantidos até valores de Péclet indo até 25, valores considerados altos, como mostrado nos resultados da Figura 15. Destaca-se também que a testagem de um esquema de integração adaptativo tem potencial de melhorar ainda mais a qualidade das soluções numéricas. (TELLES, 1987b).

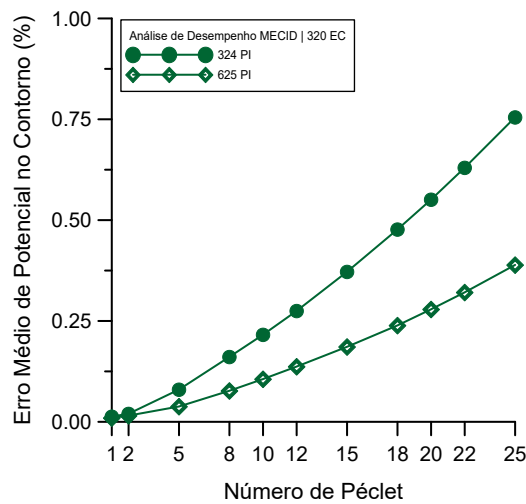


Figura 15 – C6E1 - Análise de Desempenho do MECID

6.3.2 Segundo Exemplo

O segundo exemplo testado consiste em um problema bidimensional com condição de contorno essencial variável aplicada a todas as arestas do domínio, como mostrado na Figura 16. A condição de contorno é imposta por uma função de duas variáveis com natureza exponencial, o que adiciona mais uma complexidade numérica ao presente exemplo. É relevante notar que este mesmo problema foi resolvido por Partridge (PARTRIDGE; BREBBIA, 1990) via MECDR, entretanto com Péclet apenas unitário.

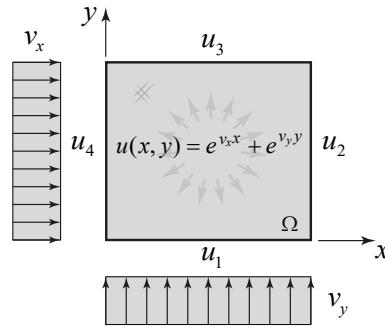


Figura 16 – C6E2 - Domínio e Condições de Contorno

O problema apresenta uma simetria diagonal, devido ao formato da solução analítica e com isso apenas o fluxo na aresta vertical direita é calculado e analisado, pois apresenta maior magnitude. Analogamente ao primeiro exemplo, faz-se uma análise de convergência preliminar para determinar a sensibilidade em relação aos principais parâmetros de malha. Os resultados são mostrados graficamente na Figura 17 e a solução analítica dos potenciais e fluxos dada pela Eq. (6.37).

$$u(x, y) = e^{v_x x} + e^{v_y y} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = v_x e^{v_x x} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = v_y e^{v_y y} \quad (6.37)$$

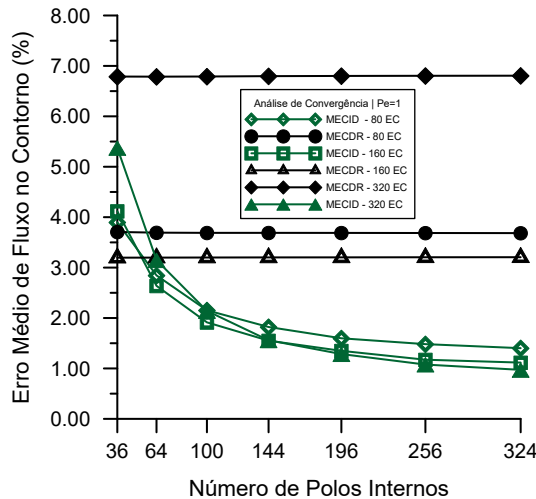


Figura 17 – C6E2 - Análise de Convergência

A maior dificuldade imposta ao método numérico por casos bidimensionais, comparado a problemas unidimensionais é claramente notada por um aumento nos níveis de erros médios já neste exemplo, que são agora de maior magnitude e por certas particularidades numéricas, discutidas na sequência.

A análise da Figura 17 permite constatar que no tocante ao MECID, a ineficiência no refinamento da malha de contorno, sem que se introduza pontos internos é clara. Apesar de um maior custo computacional envolvido, a inserção crescente de pólos internos reduz os erros de forma consistente no MECID, diferentemente do comportamento da MECDR, que não apresenta sensibilidade significativa a este parâmetro nos intervalos testados. No geral o desempenho do MECID é melhor que o do MECDR.

Entretanto, o aspecto mais curioso a respeito do MECDR é relacionado aos valores médios de erro de fluxo na malha mais refinada, com 320 EC, que apresenta erro superior a malhas mais pobres com 80 e 160 EC, devido ao surgimento de erros de quina de grande magnitude.

Na sequência dos testes, uma análise paramétrica é feita com aumento progressivo da intensidade dos efeitos advectivos via número de Péclet. Uma malha com 160 EC é fixada, e o número de pólos internos variado. Os erros percentuais médios de fluxo da aresta vertical direita são mostrados na Figura 18 (a) e 18 (b) para o MECID e MECDR, respectivamente.

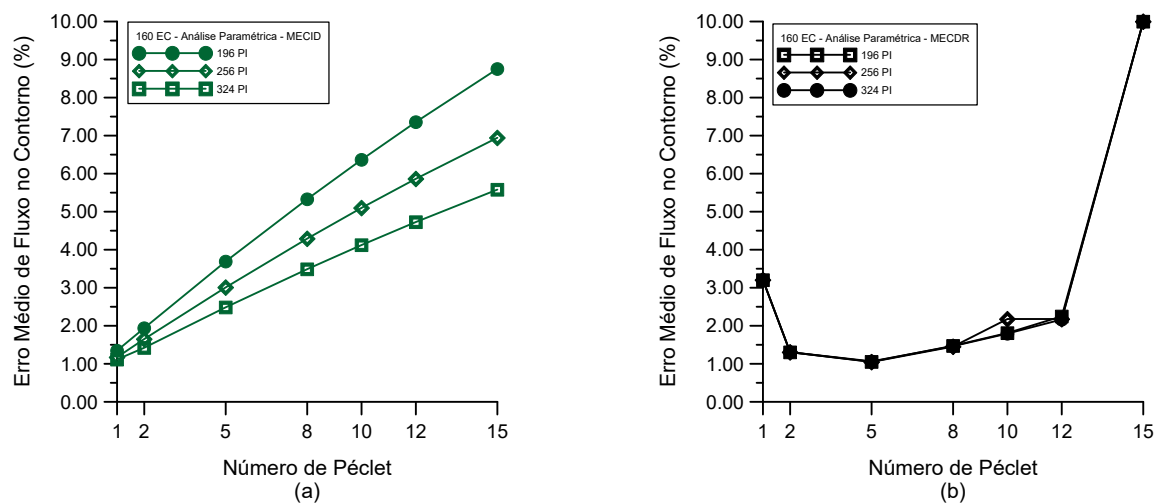


Figura 18 – C6E2 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

Conforme já esperado, o modelo MECDR não se mostra sensível a inserção de pólos internos, em detrimento ao MECID, no qual os níveis de erros são bastante reduzidos, uma vez que os efeitos advectivos são melhor aproximados com uma maior nuvem de pólos internos. Todavia, um dos aspectos mais surpreendentes relativo ao MECDR se caracteriza em um crescimento não monotônico com aumento de Péclet; os erros reduzem para um valor mínimo antes de crescerem intensamente, até indicarem uma perda completa de precisão a partir de valor de Péclet acima de 12. De fato, o nível de precisão da MECDR

é melhor que o da MECID para o intervalo de Péclet entre 2 e 12, mas a ausência de monotonicidade na curva de comportamento é preocupante.

É notável a melhoria de desempenho do MECDR com o uso de elementos lineares no vigente trabalho, comparativamente ao uso de elementos constantes, como podem ser observados nos resultados trazidos pela Figura 19, relativos a este mesmo exemplo resolvido em trabalhos anteriores (LOEFFLER; COSTALONGA, 2012). Assim como no modelo da MECDR com elementos lineares, o efeitos dos pólos internos é inefetivo e apenas um quantitativo único de nove deles foi considerado.

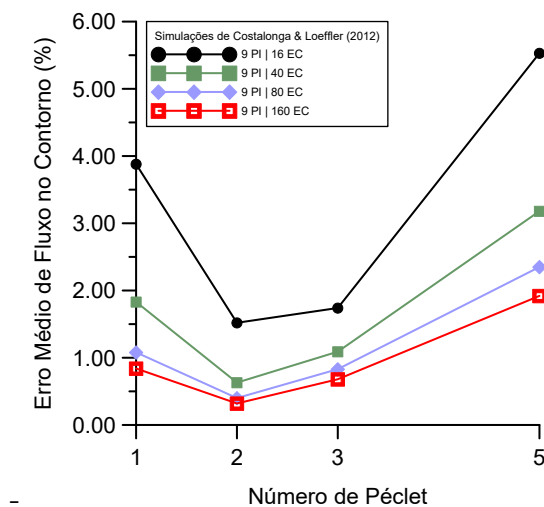


Figura 19 – C6E2 - Análise de Convecção MECDR - Costalonga & Loeffler (2012)

Parcialmente, esse pior comportamento do MECID pode ser creditado à melhor aproximação das derivadas direcionais dada pelo modelo MECDR, no qual uma nova interpolação é feita para reescrever a equação em função dos potenciais (PARTRIDGE; BREBBIA, 1990).

Em uma simulação final neste exemplo, mostrada pela Figura 20, o intervalo testado do número de Péclet é aumentado usando uma malha mais refinada com 320 EC e considerando 324 e 625 pólos internos. Resultados razoáveis são alcançados até $Pe=25$. Este valor é adequado para a maioria das aplicações de fluxo de fluido incompressível em duas dimensões, como dispersão de contaminantes em lagos, bacias hidrográficas e foz de rios. Deve-se destacar que os resultados do MECID podem ser melhorados utilizando malhas de contorno mais finas e introduzindo um número crescente de polos interpolantes, o que nem sempre acontece com o MECDR.

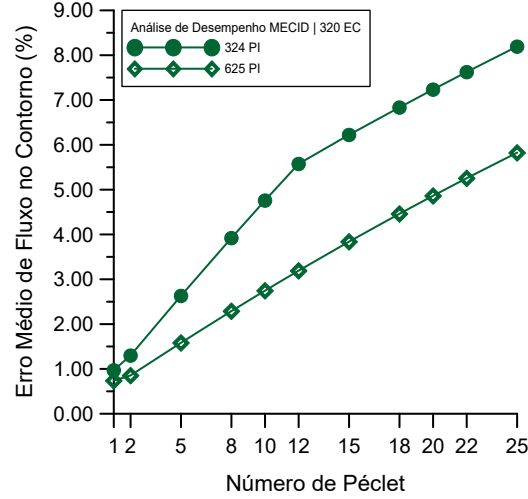


Figura 20 – C6E2 - Análise de Desempenho do MECID

6.3.3 Terceiro Exemplo

O terceiro exemplo também consiste em um problema bidimensional, sujeito exclusivamente a condições de contorno essenciais impostas a todas as arestas, ao longo das quais o campo de velocidade do escoamento é uniforme, tal como mostra a Figura 21.

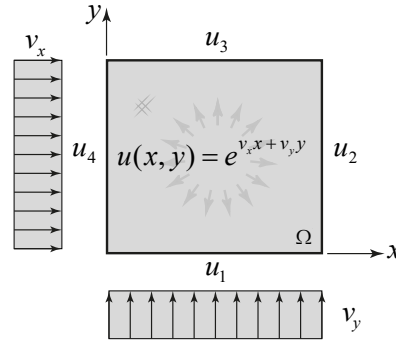


Figura 21 – C6E3 - Domínio e Condições de Contorno

Este problema, tal como o anterior, também apresenta simetria diagonal, e portanto, os valores de fluxo das arestas superior e direita são dominantes em ordem de grandeza. De tal forma que apenas a precisão dos fluxos calculados nestas duas arestas é avaliado. A diferença entre este problema e o anterior é dada por uma maior dependência dos fluxos em relação ao campo de velocidade. A solução analítica deste problema é dada pela Eq. (6.38) tal como segue.

$$u(x, y) = e^{v_x x + v_y y} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = v_x e^{v_x x + v_y y} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = v_y e^{v_x x + v_y y} \quad (6.38)$$

Neste exemplo, assim como no anterior, considerando a Figura 22, as simulações com MECIDR indicam um maior nível de erros médios de fluxo para a malha mais refinada de 320 EC quando comparada a malhas mais pobres de 80 e 160 EC, o que deve-se aos

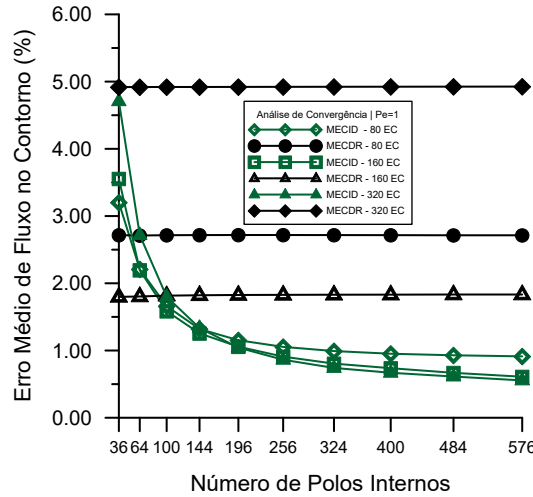


Figura 22 – C6E3 - Análise de Convergência

altos valores de erros nas quinas. Ainda em relação ao MECDR, o refinamento da malha de contorno é efetivo apenas até a malha de 160 EC, e a insensibilidade à inserção de pólos internos está bem caracterizada. A técnica MECID, por sua vez, apresenta curvas monotônicas em relação aos três níveis de malhas de contorno testadas, e exibe, como esperado, uma considerável sensibilidade em relação ao refinamento no número de pólos internos interpolantes.

Com o aumento do número de Péclet, as curvas de MECDR continuam a apresentar uma inicial redução de erros médios já observada anteriormente, e depois, subitamente, crescem abruptamente, perdendo a totalmente precisão como mostrado na Figura 23 (b). O comportamento do MECID mostra um crescimento de erros médios na medida que os efeitos advectivos se tornam mais dominantes, vide Figura 23 (a), mas sem perder precisão ou aderência com a física do problema no intervalo testado. O desempenho do MECID pode então ser otimizado com um balanço adequado entre um refinamento razoável de contorno com a inserção de um valor suficiente de pólos internos.

Uma análise da robustez da técnica MECID agora é realizada, onde seleciona-se uma malha mais refinada de contorno com 320 EC e nuvens distintas de pólos internos com refinamento crescente. Esta análise é feita a medida que se aumenta gradualmente o número de Péclet como mostrado na Figura 24. Nestes testes, o nível de erros médios cresce drasticamente para números de Péclet maiores que 15, como efeito desestabilizador da dominância completa dos efeitos advectivos. De fato, o modelo numérico do MECID, tal como qualquer outro fundamentado em aproximações por funções de bases radiais associado ao uso da solução fundamental de Poisson, possui severas limitações quanto a cenários com alto número de Péclet.

É oportuno destacar a melhor precisão do MEC na determinação dos potenciais internos, ou seja no domínio. O cálculo destes valores de variáveis internas, implica pela

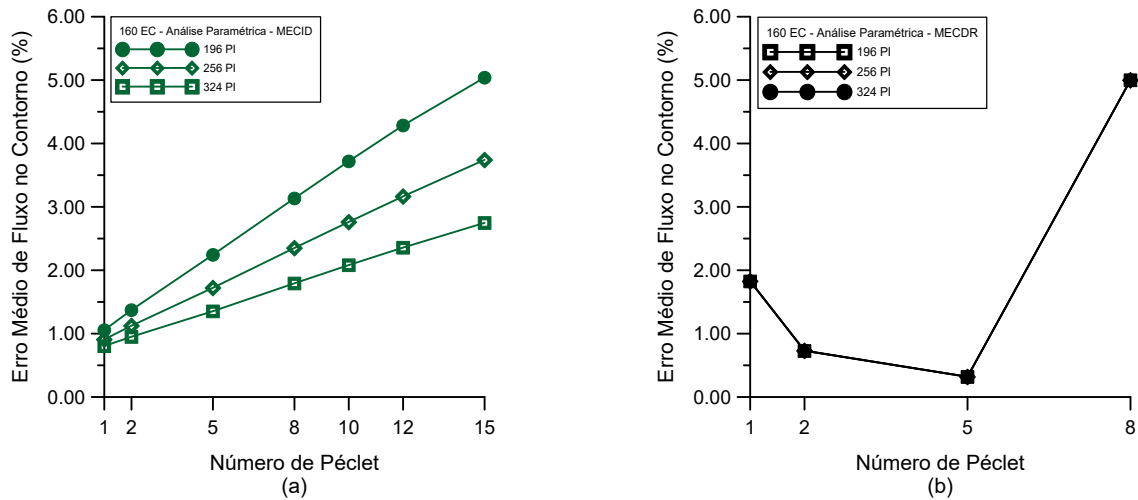


Figura 23 – C6E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

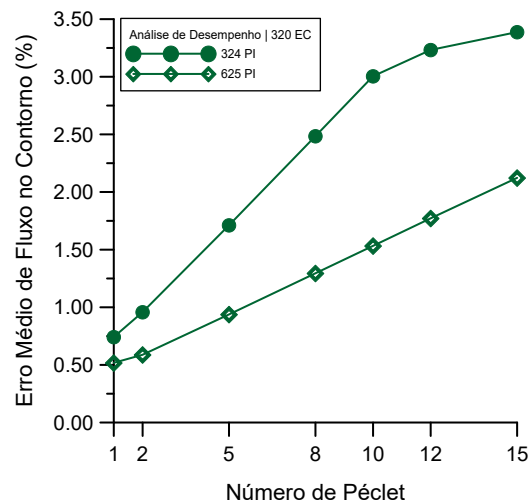


Figura 24 – C6E3 - Análise de Desempenho do MECID - Fluxos no Contorno

lógica do MEC no reuso da sentença de resíduos ponderados (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994). Isto produz uma minimização nos erros quando da determinação destas variáveis internas, um fato que é largamente conhecido e demonstrado em pesquisas anteriores (LOEFFLER; CRUZ; BULCÃO, 2015), (LOEFFLER et al., 2015), (LOEFFLER et al., 2017). Brevemente, esta superioridade de desempenho na aproximação de potenciais internos é mostrada neste exemplo, pela Figura 25. Ademais, o intervalo de resultados satisfatórios alcança faixa de Péclet de até 18.

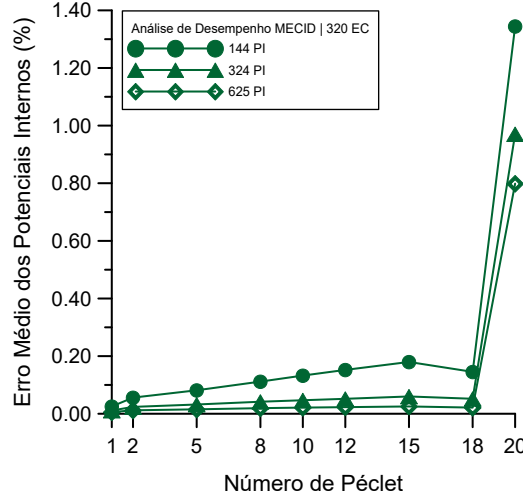


Figura 25 – C6E3 - Análise de Desempenho do MECID - Potenciais no Domínio

6.3.4 Quarto Exemplo

O quarto e último exemplo deste capítulo consiste em um problema bidimensional com velocidade uniforme, mas sujeito a condições de contorno não-homogêneas de Dirichlet e Neumann, nas arestas verticais esquerda e direitas, respectivamente, como mostra a Figura 26. Neste exemplo as análises são restritas aos valores de potencial calculados na aresta vertical direita.

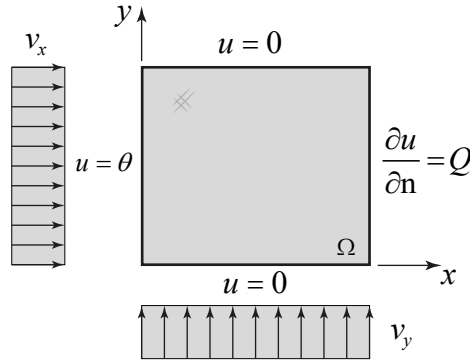


Figura 26 – C6E4 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica para este exemplo é de natureza mais complexa comparativamente aos exemplos prévios. O campo de potencial analítico é dado a seguir.

$$u(x, y) = \left\{ \left[\frac{e^{v_x x} - 1}{v_x} \right] + 1 \right\} + \sum_{i=1}^{\infty} G_i e^{\frac{v_x}{2} x} \sin(q_i x) \left\{ \frac{e^{\lambda_i^2 a} - 1}{1 - e^{\lambda_i^1 a}} e^{\lambda_i^1 y} + e^{\lambda_i^2 y} \right\} \quad (6.39)$$

Em relação a Eq. (6.39), G_i and $\lambda_i^{1,2}$ são variáveis que dependem do campo de velocidade e dos autovalores q_i . No tocante a geometria, a representa a dimensão da aresta do domínio quadrado, que é considerado unitário nas simulações deste exemplo. Para mais detalhes sobre esta solução fechada, vide (PINHEIRO, 2018).

Neste exemplo há fluxos anormalmente altos, que induzem discontinuidades nos valores dos potenciais nas quinas, e consequentemente, níveis artificiais de erros nestas regiões. Ademais, para uma determinação realística dos patamares de erro, os dois pontos extremos da aresta direita são retirados, evitando distorções na medida de desempenho da formulação do MECID proposta. Seguindo a mesma lógica estabelecida dos exemplos anteriores, um teste de convergência em relação a dois relevantes parâmetros de malha é mostrado a seguir, na Figura 27.

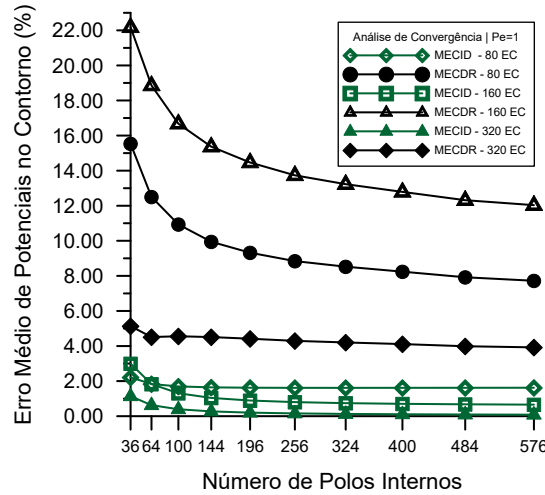


Figura 27 – C6E4 - Análise de Convergência

Assim como nos exemplos anteriores, há uma redução nos níveis de erro notória relativa ao modelo MECID, cujas curvas de erro decaem monotonicamente, indicando um comportamento de convergência satisfatório por parte da formulação. Surpreendentemente, a introdução dos pólos internos foi efetiva para malha menos refinadas usando o MECDR, mas tendo melhor desempenho da malha de 80 EC em relação a testes com malha de 160 EC. Os resultados exibidos pelo MECID são claramente superiores que o MECDR para a condição com Péclet unitário.

Na sequência, a análise paramétrica da Figura 28, baseada no adimensional de Péclet, é apresentada, no intuito de determinar o comportamento da formulação proposta em problemas com maior magnitude dos efeitos advectivos, com a utilização de 160 EC. Neste teste, o MECID também apresenta um declínio inicial nos níveis de erro com o aumento do número de Péclet, antes de um crescimento contínuo na medida que os efeitos advectivos dominam, conforme Figura 28 (a). Já na Figura 28 (b), no intervalo compreendido a número de Péclet entre 5 e 12, o MECDR apresenta níveis de erros surpreendentemente baixos. Após estes valores, a precisão do MECDR é completamente perdida, enquanto no mesmo cenário, a precisão da técnica MECID permanece com comportamento aceitável até valores Péclet iguais a 25.

No último teste, no que diz respeito a técnica MECID, uma malha refinada com

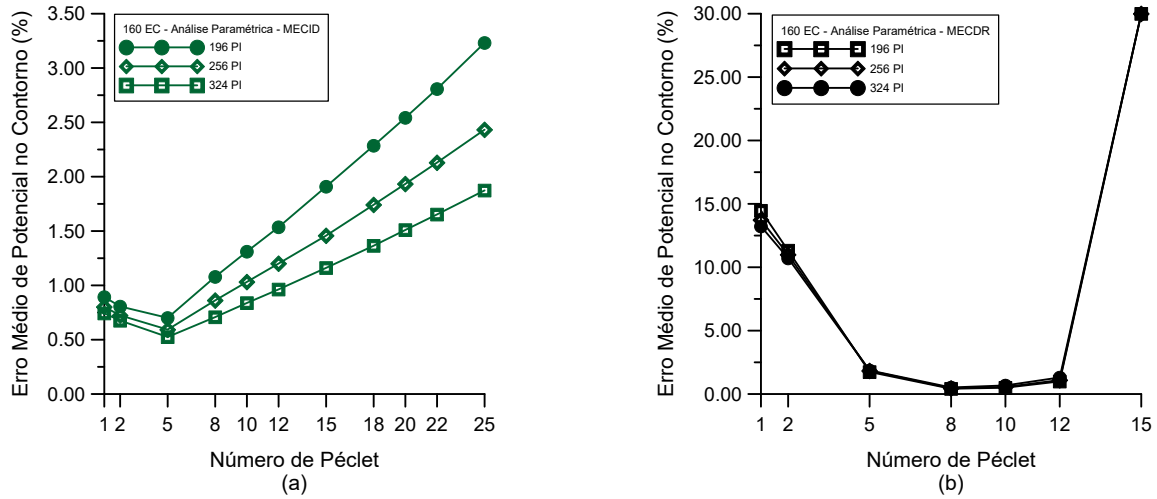


Figura 28 – C6E4 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

320 EC é resolvida com dois arranjos densos de pólos internos. Pode ser observado, na Figura 29, que um nível satisfatório de níveis de erro foi alcançado pela formulação, para número de Péclet até igual a 25.

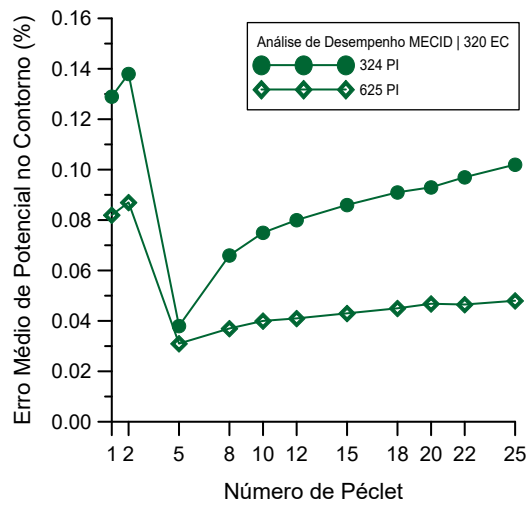


Figura 29 – C6E4 - Análise de Desempenho do MECID

6.4 Conclusões do Capítulo

A crescente relevância dos modelos advectivo-difusivos em aplicações industriais e acadêmicas motivaram a comparação entre a formulação clássica da dupla reciprocidade (MECDR) e a formulação da interpolação direta (MECID) para solução deste tipo de modelos, assumindo velocidade constante e com número de Péclet de baixo a moderado, indo até valores altos em alguns testes. O primeiro objetivo da tese foi atingido, consolidando a formulação para velocidade constante do MECID frente a uma referência numérica bem consolidada, a saber, a MECDR, e mostrando sólida superioridade. Ademais o desempenho do MECDR também foi analisado rigorosamente e documentado, o que até agora era

também uma região não explorada na literatura correlata, tanto pela aplicação isolada da técnica, uso de elementos lineares e também quanto pelo intervalo de número de Péclet moderado testado nesta tese.

Em relação ao MECID, em todos os exemplos utilizados para inferir sobre a robustez da formulação, os erros relativos decaíram quando o número de elemento de contorno ou pólos internos foi aumentado. Ademais, a convergência monotônica para os valores esperados de potenciais e derivadas normais foi observado, apesar das aproximações de bases radiais. Estas funções podem perturbar suavemente a solução numérica em aplicações específicas, dependendo do arranjo dos pólos no domínio. Os resultados sugerem a consistência matemática da MECID e sugerem que esta técnica pode ser uma atrativa alternativa para abordar modelos de advecção-difusão. Entretanto, devido a semelhança da MECID a um procedimento de interpolação clássico, esta requer a inserção de mais pólos internos que o MECDR, o que implica em maior custo computacional, que é compensado por resultados precisos em um maior intervalo de números de Péclet. Naturalmente, apenas o aumento no número de pólos internos interpolantes não é suficiente para promover uma melhoria de precisão do modelo discreto associado ao MECID. Esta abordagem é efetiva apenas se um número apropriado de nós de contorno é utilizada na discretização.

No referente aos resultados apresentados pela técnica MECDR, alguns aspectos na sequência devem ser ressaltados. Primeiramente, poucos artigos utilizam exclusivamente o MECDR para a solução de problemas advectivo-difusivos, uma vez que, provavelmente, os resultados não eram satisfatórios para Péclet moderado, com elementos constantes. De fato, foi observado que a técnica MECDR perde precisão para números de Péclet menores, quando comparada à MECID em todos os exemplos testados. Além do mais, os resultados também indicam dificuldades da MECDR em manter o comportamento monotônico na presença de efeitos advectivos mais intensos. Finalmente, em todos os exemplos bidimensionais, o comportamento das curvas de erro do MECDR em função do aumento do número de Péclet indica a existência de um valor ótimo, que precede uma abrupta perda de precisão. A técnica MECID também apresenta este comportamento, mas apenas no último exemplo; entretanto, a perda de estabilidade e precisão é gradual. A aproximação por bases radiais deve ser responsável por quebrar esta monotonicidade uma vez que um fenômeno similar ocorre na solução de problemas de Helmholtz para cálculo de autovalores, usando MECID ou ainda em modelos de elementos finitos sem malha.

Para ambos os modelos, MECID e MECDR, se os efeitos advectivos se tornam mais relevantes, a interpolação global usando funções de bases radiais prioriza altos valores em detrimento aos valores menores. Nestes casos, se os valores pequenos não são desprezíveis, o domínio deve ser dividido por técnicas como sub-regiões ou similares. As quinas também produzem altos níveis de erros em ambas as técnicas, o que justifica o uso de nós duplos, mas este tipo de comportamento é observado até em problemas de interpolação clássica.

Entre os maiores desafios imposto às formulações do MEC pelos modelos advectivo-difusivos podem ser destacados os efeitos de advecção dominante, campo de velocidade variável e trato de potenciais efeitos de compressibilidade. Os resultados apresentados pela técnica MECID ao modelar efeitos advectivos moderados tem desempenho satisfatório no tocante ao primeiro desafio técnico colocado e demandando testes mais sistêmicos para investigar e lidar com os outros dois. A literatura correlata ao MECDR apresenta testes em situações físicas com campo variável de velocidade, que é uma direção natural para comparações com o MECID em outros testes. Um outro aspecto provável é testar a técnica MECID sob a influência de efeitos de compressibilidade, o que também pode ser uma contribuição ao MECDR. Finalmente, modelos reativos e não-homogêneos também constituem importantes segmentos de pesquisa para abordagens do MECID.

7 Formulação Clássica da Interpolação Direta em Modelos de Velocidade Variável

7.1 Modelo Matemático Difusivo-Advectivo-Reativo

A equação de governo de um problema difusivo-advectivo-reactivo em meio isotrópico sem presença de fonte externa é dada pela Eq. (7.1), e tem como origem primária a sentença de conservação de energia da mecânica do contínuo (REDDY, 1993). A Eq. (7.1) também pode, de forma mais direta, ser interpretada como uma simplificação puramente matemática do modelo de equação de campo escalar generalizada, dada no Capítulo 3 e lá denominada de equação geral de transporte.

$$\sigma \nabla^2 u - \mathbf{v} \cdot \nabla u - ku = 0 \quad (7.1)$$

Na Eq. (7.1), em seu lado esquerdo, o primeiro termo contabiliza o transporte difusivo ligado ao laplaciano do campo potencial, seguido pelo termo do transporte advectivo ligado ao gradiente do campo primal, e por um terceiro termo reativo, diretamente proporcional ao campo u . Em termos de coeficientes, σ representa a difusividade térmica do meio contínuo, $\mathbf{v}$ o campo vetorial de velocidade e k o coeficiente reativo de primeira ordem.

7.2 Formulação MECID Clássica - Velocidade Variável

Inicia-se aqui a exposição da formulação clássica do MECID para problemas de velocidade variável com a equação de governo do modelo difusivo-advectivo-reactivo, Eq. (7.1), escrita em notação indicial, tal como segue na Eq. (7.2).

$$\sigma u_{,ii} - v_i u_{,i} - ku = 0 \quad (7.2)$$

A formulação integral forte associada ao problema pode ser gerada multiplicando-se a Eq. (7.2), pela solução fundamental do problema de Poisson, u^* , e integrando-se no domínio Ω .

$$\int_{\Omega} \sigma u_{,ii}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) - \int_{\Omega} k u(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = 0 \quad (7.3)$$

O tratamento da sentença integral da Eq. (7.3) é extenso e no intuito de organizar a exposição, a abordagem dos termos difusivo, advectivo e reativo é feita separadamente de agora em diante.

7.2.1 Tratamento do Termo Difusivo

Inicia-se o tratamento do termo difusivo com uma primeira aplicação da regra do produto, no intuito de, gradualmente, transferir as derivadas do campo primal u para a solução fundamental u^* . Para não poluir o algebrismo, o termo α , que não depende das coordenadas espaciais, foi omitido.

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} (u_{,i}(X) u^*(\xi; X))_{,i} d\Omega(X) - \int_{\Omega} u_{,i}(X) u^*_{,i}(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.4)$$

Após a aplicação da primeira regra do produto, a primeira integral do lado direito da Eq. (7.4), pode ser conduzida ao contorno via Teorema da Divergência, e reescreve-se a expressão como:

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Gamma} n_i u_{,i}(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) - \int_{\Omega} u_{,i}(X) u^*_{,i}(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.5)$$

Agora, é preciso aplicar novamente a regra do produto na integral de domínio restante no lado direito da Eq. (7.5).

$$\int_{\Omega} u_{,i}(X) u^*_{,i}(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} (u(X) u^*_{,i}(\xi; X))_{,i} d\Omega(X) - \int_{\Omega} u(X) u^*_{,ii}(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.6)$$

Na Eq. (7.6), a primeira integral de domínio do lado direito pode ser levada ao contorno, novamente pelo Teorema da Divergência.

$$\int_{\Omega} u_{,i}(X) u^*_{,i}(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Gamma} n_i u^*_{,i}(\xi; X) u(X) d\Gamma(X) - \int_{\Omega} u(X) u^*_{,ii}(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.7)$$

Todavia, ainda resta uma integral de domínio na Eq. (7.7). Esta integral pode ser tratada ao utilizar a estrutura do problema fundamental de Poisson (BREBBIA; WALKER, 1980), já trabalhado, no Capítulo 3, juntamente com propriedades da função Delta de Dirac (KREYSZIG, 2001), tal como segue na Eq. (7.8)

$$\int_{\Omega} u(X) u^*_{,ii}(\xi; X) d\Omega(X) = -c(\xi) u(\xi) \quad (7.8)$$

Ao substituírmos a Eq. (7.7) e Eq. (7.8) na Eq. (7.5), pode-se obter a escrita integral final do termo difusivo, de acordo com a Eq. (7.9) a seguir.

$$c(\xi)u(\xi) - \int_{\Gamma} n_i u_{,i}(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) + \int_{\Gamma} n_i u^*_{,i}(\xi; X) u(X) d\Gamma(X) = 0 \quad (7.9)$$

7.2.2 Tratamento do Termo Advectivo

O termo advectivo na formulação integral forte na Eq. (7.3) é exposto isoladamente por conveniência abaixo na Eq. (7.10), no intuito de expor as relações funcionais.

$$TA = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.10)$$

Estruturalmente já se percebe que há um termo a mais, dependente do espaço, no núcleo da integral do termo advectivo, quando compara-se com o termo difusivo. Aplica-se a primeira regra do produto na sequência, e devido a um núcleo mais robusto a integral já é tripartida.

$$\begin{aligned} TA = \int_{\Omega} \{v_i(X) [u(X) u^*(\xi; X)]\}_{,i} d\Omega(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u^*_{,i}(X) u(X) d\Omega(X) \\ - \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) \end{aligned} \quad (7.11)$$

Na Eq. (7.11), a primeira integral já poder ser conduzida ao contorno Γ pelo Teorema da Divergência. As outras duas integrais de domínio seguintes vão ser submetidas ao procedimento de regularização, já explicado em detalhes no Capítulo 6. A reescrita dos formatos já regularizados são trazidos pelas Equações (7.12) e (7.13).

$$\int_{\Omega} v_i(X) u^*_{,i}(X) u(X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} v_i(X) u^*_{,i}(X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) + \int_{\Omega} v_i(X) u^*_{,i}(X) u(\xi) d\Omega(X) \quad (7.12)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) \\ + \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) u(\xi) d\Omega(X) \end{aligned} \quad (7.13)$$

Ao utilizar as Equações (7.12) e (7.13) e levar a primeira integral na Eq. (7.11) ao contorno, o termo advectivo é reescrito como:

$$\begin{aligned}
TA &= \int_{\Gamma} n_i v_i(X) u(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) \\
&\quad - \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(X) u(\xi) d\Omega(X) \quad (7.14) \\
&\quad - \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) u(\xi) d\Omega(X)
\end{aligned}$$

Neste ponto é importante analisar a estrutura da Eq. (7.14), que contém uma primeira integral já no contorno, duas integrais de domínio subsequentes regularizadas que vão ser aproximadas pela técnica MECID, e na sequência duas integrais excedentes, que sobram do procedimento de regularização. Neste ponto, escolhe-se a última integral excedente, que está em função do divergente do campo de velocidade, $v_{i,i}$, e aplica-se nela uma nova regra do produto, tal como segue.

$$\int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) u(\xi) d\Omega(X) = \int_{\Omega} (v_i(X) u^*(\xi; X))_{,i} u(\xi) d\Omega(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(X) u(\xi) d\Omega(X) \quad (7.15)$$

A primeira integral do lado direito na Eq. (7.15) contém em seu núcleo uma derivada e uma função de ponto $u(\xi)$. Uma vez que este função de ponto pode deixar a integral por não depender das coordenadas espaciais X , a integral pode ser levada ao contorno via Teorema da Divergência, o que gera a Eq. (7.16).

$$\int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) u(\xi) d\Omega(X) = u(\xi) \int_{\Gamma} n_i v_i(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(X) u(\xi) d\Omega(X) \quad (7.16)$$

Na Eq. (7.16) a primeira integral do lado direito já encontra-se no contorno. A integral de domínio subsequente, curiosamente, é idêntica a integral excedente gerada pela regularização da integral dependente da velocidade, e estrategicamente irá promover a anulação da mesma. Desta maneira, inserindo a Eq. (7.16) na Eq. (7.14), tem-se uma versão final do termo advectivo, dado pela Eq. (7.17) a seguir.

$$\begin{aligned}
TA &= \int_{\Gamma} n_i v_i(X) u(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) - u(\xi) \int_{\Gamma} n_i v_i(X) u^*(\xi; X) d\Gamma(X) \\
&\quad - \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}^*(X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) \quad (7.17) \\
&\quad - \int_{\Omega} v_{i,i}(X) u^*(\xi; X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X)
\end{aligned}$$

7.2.3 Tratamento do Termo Reativo

O último termo a ser tratado no modelo integral do problema é aquele referente a reação, cuja origem física já foi citada na seção 7.1. Por conveniência o termo reativo é

exposto de forma isolada abaixo, considerando o coeficiente reativo unitário, por questão de simplicidade, na Eq. (7.18).

$$TR = \int_{\Omega} u(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) \quad (7.18)$$

O tratamento deste termo é mais simples, uma vez que ele envolve o próprio potencial, e não suas derivadas, como no caso do termo difusivo ou termo advectivo. Inicia-se o tratamento do termo com o processo de regularização já conhecido de aplicações anteriores. A versão regularizada pode ser escrita tal como segue.

$$TR = \int_{\Omega} u^*(\xi; X) [u(X) - u(\xi)] d\Omega(X) + \int_{\Omega} u^*(\xi; X) u(\xi) d\Omega(X) \quad (7.19)$$

Na Eq. (7.19) a primeira integral do domínio do lado direito, já regularizada pode ser aproximada via técnica MECID, conforme já feito na seção 6.1.2, enquanto a segunda integral, excedente do processo de regularização, pode ser tratada com Tensor de Galerkin, como mostra a Eq. (7.20).

$$u(\xi) \int_{\Omega} u^*(\xi; X) d\Omega(X) = u(\xi) \int_{\Omega} G_{,ii}^* d\Omega(X) = u(\xi) \int_{\Gamma} n_i G_{,i}^* d\Gamma(X) \quad (7.20)$$

7.3 Simulações Numéricas

A nova formulação proposta neste capítulo é testada na solução numérica de três exemplos com distintos níveis de complexidade: dois de natureza advectivo-difusiva e um com natureza advectivo-difusivo-reativa. O primeiro exemplo possui um divergente do campo de velocidade nulo, o segundo exemplo um divergente não-nulo e o terceiro com campo de velocidade acoplado ao coeficiente reativo, retirado do trabalho de AL-Bayati e Wrobel (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a), também com divergente não-nulo. Os resultados paralelos deste primeiros dois exemplos visam explicitar as dificuldades numéricas e performances das técnicas testadas frente a efeitos advectivo e também possíveis efeitos de compressibilidade, ligados ao formato do divergente de velocidade. Já o último caso pretende expor a formulação da MECID proposta à uma equação de governo que contenha também o transporte por reação, no intuito de testar sua consistência e capacidade de representar fenômenos mais complexos.

7.3.1 Primeiro Exemplo

O primeiro exemplo consiste em um escoamento bidimensional que varia linearmente ao longos das arestas de ataque com condição de contorno de potencial imposta em todas as arestas de acordo com a representação da Figura 30. O campo de velocidade neste caso é especialmente selecionado de forma que seu divergente seja nulo.

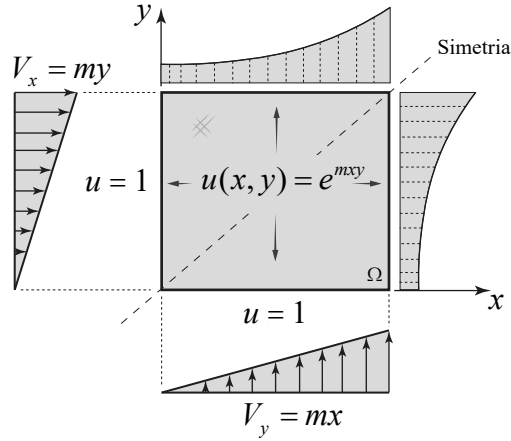


Figura 30 – C7E1 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial e suas derivadas direcionais para o caso é dada pela Eq. (7.21), a seguir.

$$u(x, y) = e^{mxy} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = mye^{mxy} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = mxe^{mxy} \quad (7.21)$$

Uma análise de convergência é apresentada na Figura 31 para ambas as técnicas, MECID e MECDR, em três níveis de refinamento de contorno (EC), parametrizado pelo número de polos internos (NPI).

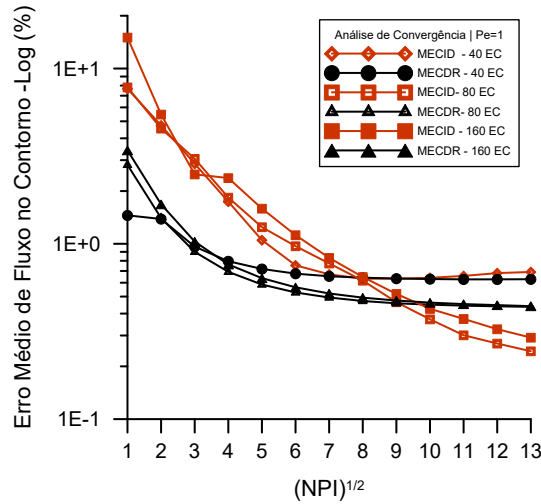


Figura 31 – C7E1 - Análise de Convergência

Uma análise da Figura 31 em relação ao refinamento de contorno (EC), revela que para ambas as técnicas, MECID e MECDR, só há uma melhora significativa nos níveis de erro médio, até 80 BE. Já em relação a inserção de polos internos há diversos aspectos interessantes a serem destacados. Primeiramente, para a malha mais pobre com 40 EC o comportamento das duas técnicas numéricas é rigorosamente o mesmo, a saber, uma pequena melhora nos erros médios para poucos polos internos e uma insensibilidade a

inserção de mais deles na sequência, que é uma característica esperada para a MECDR, mas surpreendente para a MECID, que ao que tudo indica, precisa de um refinamento mínimo no contorno maior que este, para dar gatilho a sensibilidade aos polos internos interpolantes. Na análise para malha intermediária, com 80 EC e a mais refinada com 160 EC nota-se o comportamento padrão esperado de cada técnica, a MECDR com pouca resposta ao enriquecimento da malha de polos no domínio e a MECID com comportamento monotônico de queda de erros à medida que os polos internos são inseridos com um contorno minimamente bem representado, apresentando erros menores que a MECDR se a quantidade de polos suficientes for inserida.

Uma análise paramétrica é realizada na sequência, na Figura 32 com uma malha de 80EC e três níveis de refinamento de pólos no domínio. Ao comparar os resultados da MECID, Figura 32(a) com os gerados pela técnica MECDR da Figura 32(b), de forma geral, já percebe-se uma maior sensibilidade do MECID ao número de pólos internos, visualizado pelo maior descolamento das curvas frente a curvas totalmente colapsadas da dupla reciprocidade. É interessante ressaltar nos gráficos, que para $m = 5$ a MECDR já perdeu aderência física, em detrimento ao MECID, que mantém a aderência com o problema físico no mesmo intervalo. No intervalo do parâmetro m , diretamente relacionando com Péclet, de 1 a 4 percebe-se uma precisão parelha da dupla reciprocidade e da interpolação direta. Ademais, a formulação MECID é mais resiliente, apresentando resultados fisicamente compatíveis até $m = 6$, em testes feitos em paralelo e não mostrados aqui, intervalo este de estabilidade que provavelmente poder ser aumentado, enriquecendo de antemão a malha de contorno, uma vez que 80 EC é ainda uma malha intermediária, vide (PINHEIRO et al., 2021a).

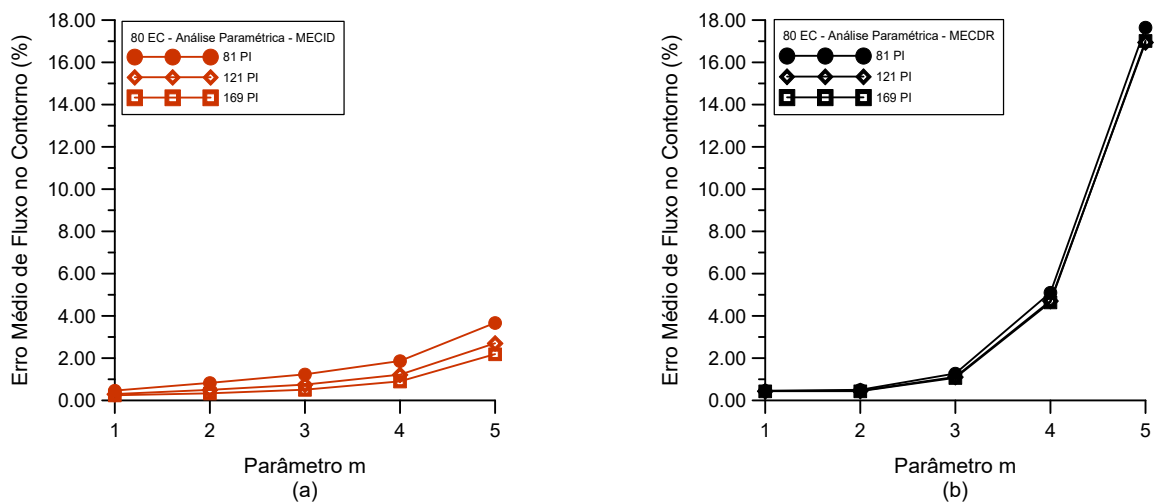


Figura 32 – C7E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

Uma interessante análise diz respeito a sensibilidade das técnicas discretas testadas quanto ao posicionamento dos pólos internos do domínio, por meio do parâmetro γ , já apresentado graficamente no esquema de malha do Capítulo 5. Para tanto, fixa-se $m = 1$ e

testam-se três malhas com distintos pares de refinamento de contorno e domínio tal como mostrado na Figura 33, onde o gráfico (a) traz os resultados para o MECID e (b) para o MECDR.

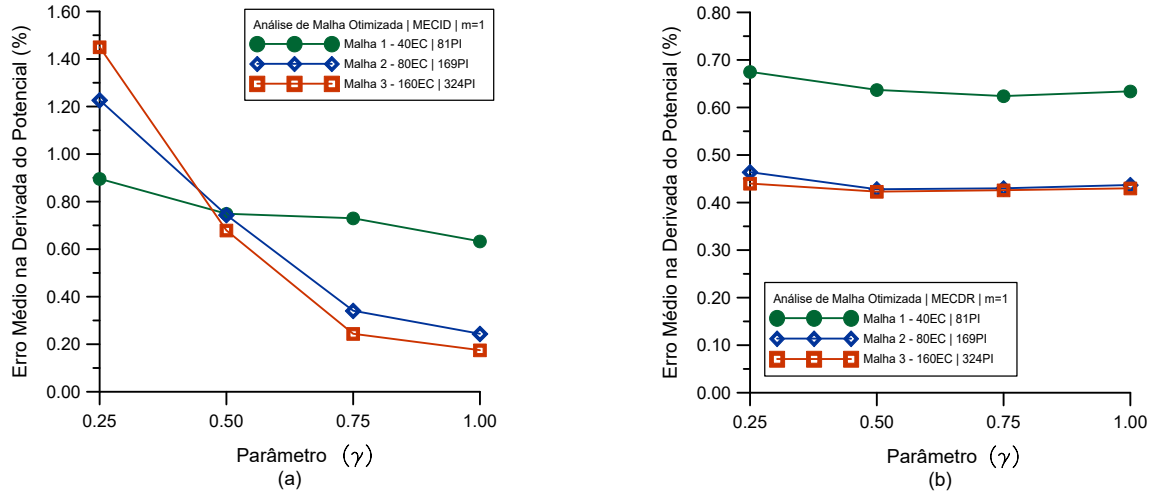


Figura 33 – C7E1 - Análise de Disposição de Polos Internos: (a) MECID (b) MECDR

Os resultados da MECID na Figura 33 (a) demonstram uma alta sensibilidade da técnica em relação ao posicionamento da primeira fileira (PINHEIRO et al., 2020), mostrando que os erros médios podem ser significativamente reduzidos ao utilizar distintos valores de γ . Já a MECDR, na Figura 33 (b), exibe uma clara insensibilidade quanto ao parâmetro de posição da primeira fileira, o que indica que a técnica como um todo aponta para uma menor sensibilidade em relação a disposição espacial da malha da região de domínio.

Faz-se a seguir uma análise de performance da MECID com uma malha mais refinada, com 320 EC e duas nuvens mais robustas de pontos internos, tal como pode ser observado na Figura 34 na sequência.

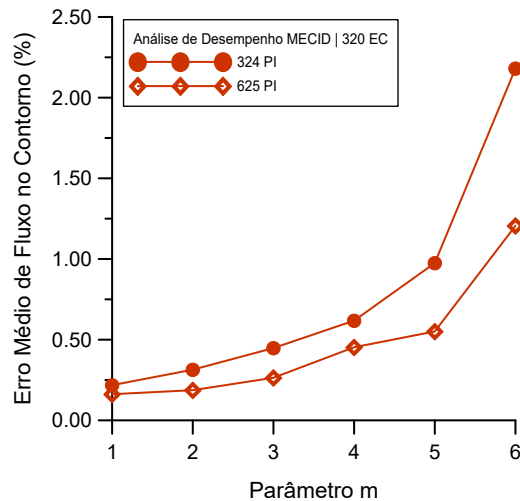


Figura 34 – C7E1 - Análise de Desempenho do MECID

É possível observar que a técnica MECID se mostra sensível ao refinamento da quantidade de polos internos, comportamento já amplamente conhecido. Quanto aos níveis de erro médio, pode-se dizer que a precisão é satisfatória, uma vez que os as derivadas dos potenciais estão sendo aproximadas com erros na ordem de 1% para a melhor malha submetida a moderada convecção, com $m = 6$.

Quanto a integração numérica, a aderência da técnica da dupla reciprocidade ao esquema de integração de Telles é razoavelmente bem conhecido da literatura (TELLES, 1987b; TELLES; OLIVEIRA, 1994b). Ao utilizar a integração especial associada a MECDR, há uma tendência de melhora substancial nos resultados contanto que se utilizem de poucos pontos de Gauss. Ademais, o efeito de ganho de precisão da quadratura também é reconhecidamente melhor quanto maior for a ordem de interpolação dos elementos de contorno utilizados (PINHEIRO et al., 2021b). Todavia, o comportamento conjunto da quadratura de Telles com a técnica MECID ainda é preliminar, com uma grande contribuição inicial no trabalho de Santos (SANTOS, 2021), que apesar de amplo, no que tange a testar diversos problemas de campo escalar, apresenta testes em modelos advectivo-difusivos apenas com campo de velocidade uniforme. Com isso, faz-se necessário aqui, testar o impacto da quadratura de forma mais padronizada. Para tanto seleciona-se um quantitativo de 4 pontos de Gauss, 80 EC e duas nuvens distintas de polos internos.

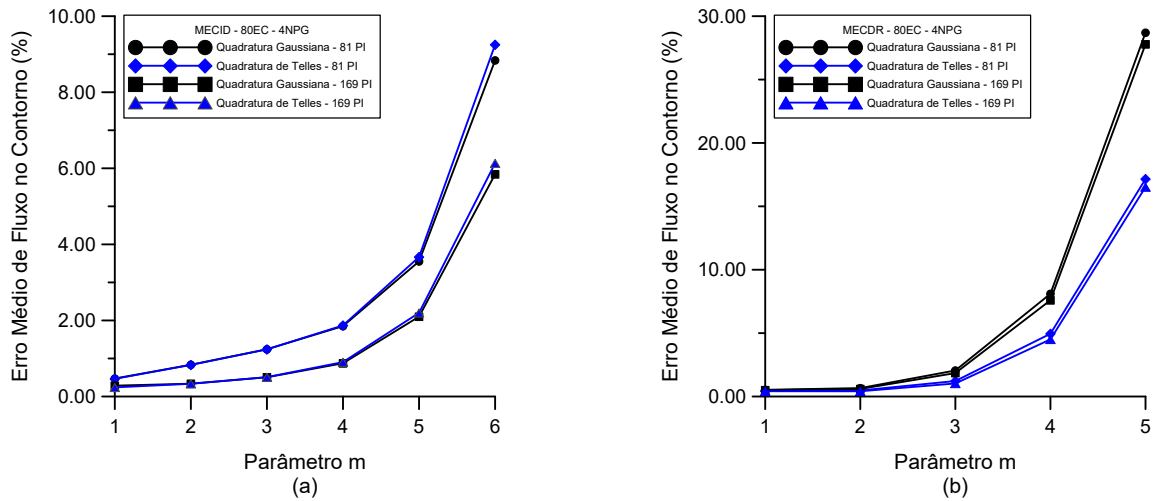


Figura 35 – C7E1 - Esquemas de Integração - 80EC e 4NPG: (a) MECID (b) MECDR

O gráfico da Figura 35 (a) representa os resultados para o MECID, enquanto o gráfico da Figura 35 (b) traz os resultados de testes com a MECDR. Os testes são padronizados variando o parâmetro m . Os resultados exibidos mostram que a MECID se mostrou insensível a mudança no esquema na quadratura, ao contrário da MECDR que teve seu desempenho melhorado de forma consistente, o que provavelmente, deve-se a uma melhor determinação das matrizes $[H]$ e $[G]$, que surgem, na técnica da dupla reciprocidade, tanto no lado difusivo, quanto no lado advectivo, no sistema final (PINHEIRO et al., 2022).

7.3.2 Segundo Exemplo

O segundo exemplo consiste em um caso geometricamente bidimensional, mas fisicamente unidimensional, vide Figura 36, governado por um modelo advectivo-difusivo, com um campo de velocidade mais desafiador, cujo divergente não é nulo (MASSARO, 2001). Este fato introduz efeitos de compressibilidade além da dificuldade numérica da dominância dos efeitos advectivos.

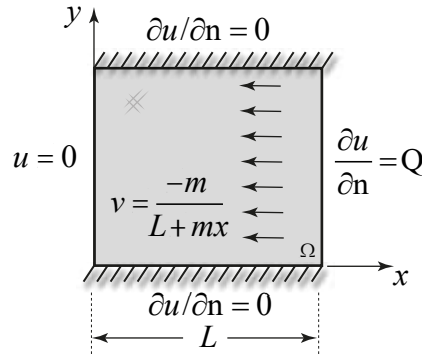


Figura 36 – C7E2 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial para o caso é dada pela Eq. (7.22), a seguir e pode ser encontrada em literatura pertinente (DAN; LOEFFLER; MANSUR, 2012).

$$u(x) = \frac{QL(1+m)}{m} \left[\ln \left(\frac{L+mx}{L} \right) \right] \quad (7.22)$$

Um melhor entendimento da variação espacial dos campos hidrodinâmicos é dada abaixo com os gráficos da Figura 37. A esquerda, na Figura 37 (a) é representado o campo de velocidade, enquanto seu divergente é representado ao lado na Figura 37 (b).

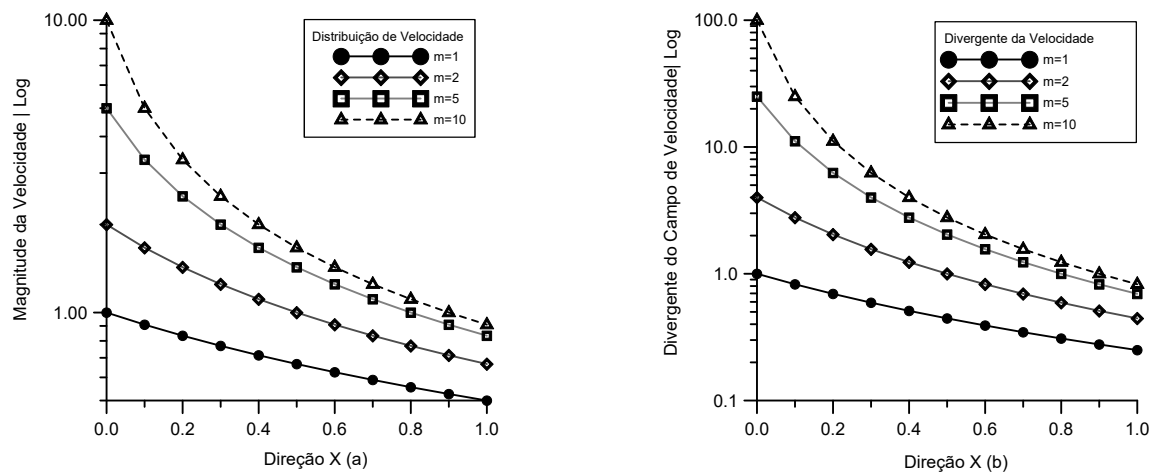


Figura 37 – C7E2 - (a) Campos de Velocidade (b) Divergente de Velocidade

É possível perceber que os dois campos físicos tem um decaimento ao longo da direção x , tendo seus maiores valores na aresta esquerda do domínio e decaindo para

os valores mínimos na aresta direita. Tal desbalanceio de ordem de grandeza dentre os valores das arestas verticais opostas pode dificultar de sobremaneira a performance das aproximações de bases radiais, uma vez que geram maior dificuldade de interpolação.

Também é relevante destacar que o aumento do parâmetro m impacta muito mais fortemente o campo divergente do que o campo de velocidade propriamente dito, o que direciona para uma maior importância dos efeitos de compressibilidade neste caso. Em contraste a estas peculiaridades físicas a formulação discreta do MECID apresenta explicitamente uma integral dependente do divergente da velocidade, que será mostrada na sequência. Em contrapartida, este termo correlato ao divergente de velocidade não surge de forma explícita na proposta do MECDR.

Inicialmente uma análise de convergência é trazida pela Figura 38 para ter uma noção de performance global das duas técnicas avaliadas. Uma particularidade aqui é a apresentação de uma análise de convergência com malhas mais pobres, na Figura 38 (a) e uma análise com malhas mais enriquecidas, na Figura 38 (b).

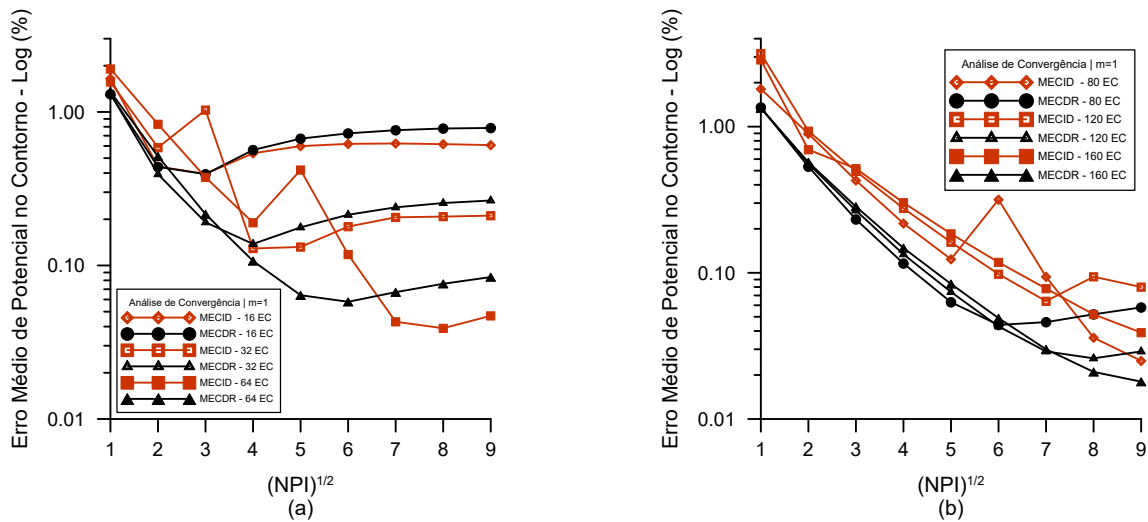


Figura 38 – C7E2 - Análise de Convergência com Malhas: (a) Pobres (b) Intermediárias

Uma observação na Figura 38 (a), releva que para as malhas mais pobre analisadas, com 16 EC e 32 EC os comportamentos da MECDR e MECID são análogos, com um pouco menos de suavidade por parte do MECID. A insensibilidade a inserção de polos internos é um comportamento que se assemelha ao apresentado pelo primeiro exemplo, para o qual o divergente de velocidade era nulo, e cuja presença, pelo menos em relação a MECDR, já era aguardado. Na última malha analisada com 64 EC, a MECDR ainda mantém o mesmo formato de curva, enquanto o MECID, com uma curva mais perturbada parece iniciar uma transição de comportamento, na qual a inserção dos polos internos começa a influenciar na queda de erros, como será confirmado na Figura 38 (b).

Em paralelo, na Figura 38 (b) são mostradas curvas bem mais monotônicas por parte de ambas as formulações. As formulações tem níveis de precisão parecidos, entretanto

com suave vantagem para a técnica de dupla reciprocidade. Aqui vale ressaltar que, no experimento numérico vigente a MECDR apresenta uma sensibilidade similar ao MECID em relação a inserção de pólos internos, fato que não se apresenta nas análise de convergência do primeiro exemplo, e ausente também em resultados da dupla reciprocidade em casos advectivo-difusivos com campo de velocidade uniforme.

A seguir, na Figura 39 apresenta-se uma análise paramétrica em função do parâmetro de referência m com malhas de contorno fixas de 160 EC para ambas as técnicas e três níveis de refinamento de domínio. Qualitativamente, já observa-se, confirmando a análise de convergência, uma sensibilidade muito clara tanto do MECID quanto do MECDR com o refinamento do número de polos internos.

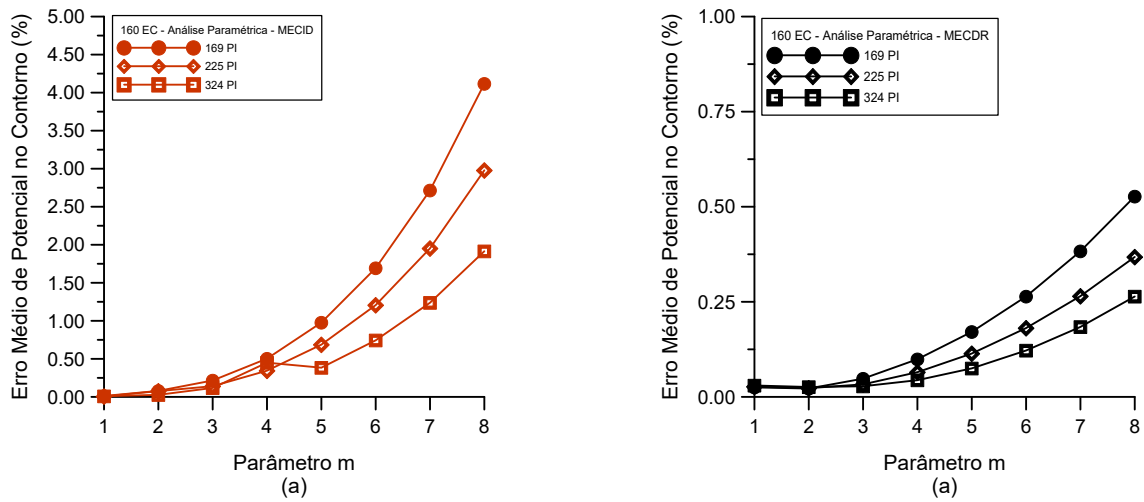


Figura 39 – C7E2 - Análise Paramétrica (a) MECID (b) MECDR

Nota-se que a dupla reciprocidade, na Figura 39 (b), é substancialmente mais precisa quando comparada a interpolação direta, na 39 (a), neste caso. Uma hipótese consistente para explicar a considerável diferença de precisão entre as técnicas reside no fato da natureza explícita com a qual o divergente da velocidade se apresenta na formulação da MECID, vide Eq. 7.17. De certa forma, este fato parece tornar a formulação mais sensível aos efeitos compressivos intensos e portanto, exigindo da mesma uma malha mais refinada em comparação com a MECDR.

Por fim, para consolidar a formulação MECID como alternativa viável para a solução deste tipo de caso, apresenta-se na Figura 40 sua performance individual com malhas mais refinadas, com 320 EC e dois níveis de refinamento de domínio.

Comparando-se o gráfico da Figura 40 com o da Figura 39 (b), para uma curva de 324IP, constata-se que a técnica MECID demanda o dobro do refinamento de contorno para alcançar resultados tão precisos quanto os da técnica MECDR. Isto posto, prova que a técnica MECID é viável e consistente, entretanto, necessita de uma nível de refinamento maior que o MECDR, neste caso-teste.

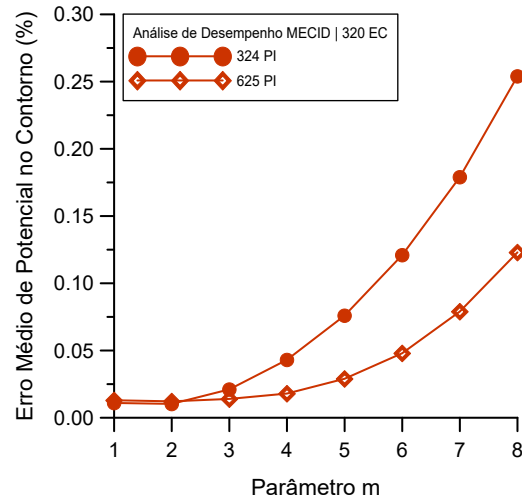


Figura 40 – C7E2 - Análise de Desempenho do MECID

Por fim, analisa-se na sequência o impacto do uso da quadratura de Telles, frente a quadratura Gaussiana clássica para um quantitativo de 4 pontos de Gauss, tal como no exemplo anterior. É possível notar, na Figura 41 (a), referente a MECID, que para a nuvem de 169 polos internos os resultados são quase idênticos, enquanto, para 324 polos internos, há até mesmo uma piora com o uso da integração especial. Já na Figura 41 (b), inerente a MECDR, nota-se uma melhoria clara e sólida para os dois níveis de refinamento de polos internos, o que consolida mais uma vez a boa aderência que a MECDR tem com quadratura de Telles, principalmente para quantitativos baixo de pontos de Gauss (NPG).

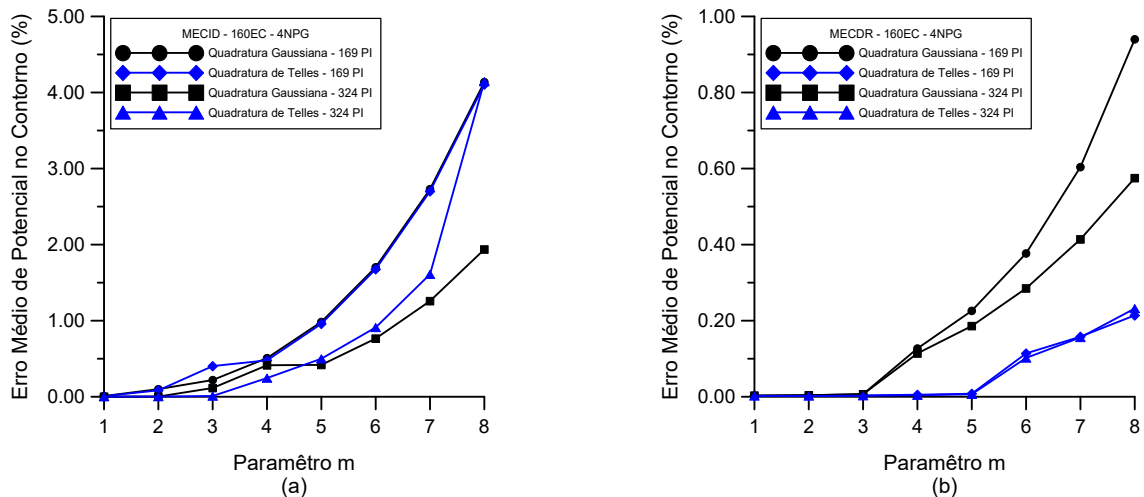


Figura 41 – C7E2 - Esquemas de Integração 160EC e 4NPG: (a) MECID (b) MECDR

7.3.3 Terceiro Exemplo

O vigente exemplo visa testar as formulações do MEC em um modelo advectivo-difusivo-reativo em um caso fisicamente unidimensional com campo de velocidade variando linearmente na direção do escoamento e divergente de velocidade constante, de acordo com a Figura 42. Desta forma, neste experimento numérico, retirado do trabalho de AL-Bayati e Wrobel (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a), além dos efeitos de advecção e efeitos de compressibilidade também há o termo reativo que está algebricamente ligado ao campo de velocidade. Os resultados do MECDR e MECID são analisados na aresta inferior horizontal do domínio.

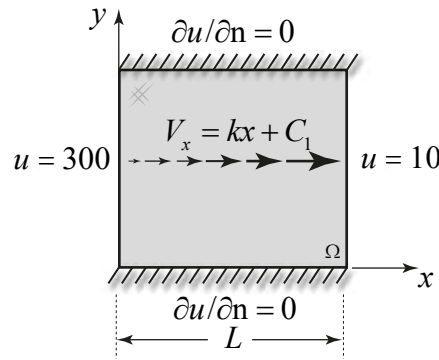


Figura 42 – C7E3 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial para o caso é dada pela Eq. (7.23), a seguir na literatura (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a).

$$u(x) = 300e^{\left(\frac{k}{2}\right)x^2 + c_1x} \quad c_1 = \ln\left(\frac{10}{300}\right) - \frac{k}{2} \quad (7.23)$$

De forma geral os teste de convergência da Figura 43 revelam um melhor desempenho da técnica MECDR no intervalo de pólos internos testados. Os pólos internos só melhoram o desempenho da dupla reciprocidade até um quantitativo reduzido de pontos internos, enquanto de forma de geral o MECID continua com redução mais consistente do erro médio com a discretização mais robusta do domínio. É interessante também perceber que as curvas do MECID, em especial a de 80 EC, não são exatamente monotônicas e apresentam picos de erros em nuvens específicas de pólos internos, o que pode sugerir algum condicionamento matricial atípico. Este tipo de comportamento também é observado em problemas de dinâmica em simulações do MECID (BARBOSA; LOEFFLER; LARA, 2019). As curvas do MECDR mostram uma transição de formato com o refinamento do contorno, e, ao que parece vão se tornando mais sensíveis ao adensamento dos polos internos. Em relação ao MECID, é interessante observar que desde a malha mais pobre, de 40 EC, o comportamento é monotônico, não havendo mais uma insensibilidade inicial, como nos exemplos anteriores para então, haver uma mudança de comportamento, devido ao refinamento de contorno.

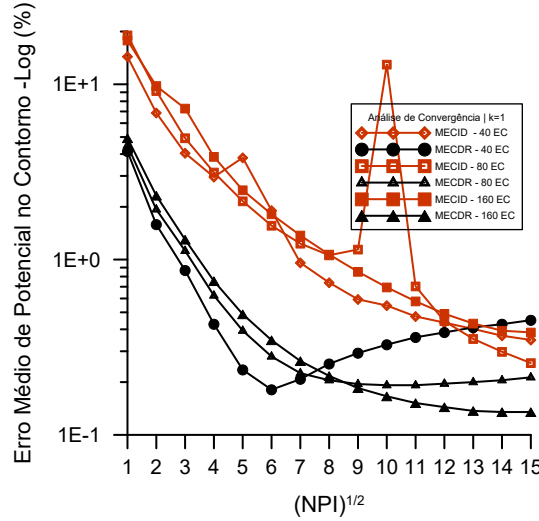


Figura 43 – C7E3 - Análise de Convergência

Na sequência realiza-se uma análise paramétrica em relação a k , cujo incremento gradual nos gráficos da Figura 44 intensifica três fatores: efeitos de advecção, efeitos de compressibilidade e também importância do termo reativo na equação de governo do problema. Os testes da análise paramétrica são realizados com 160 EC para discretizar o contorno.

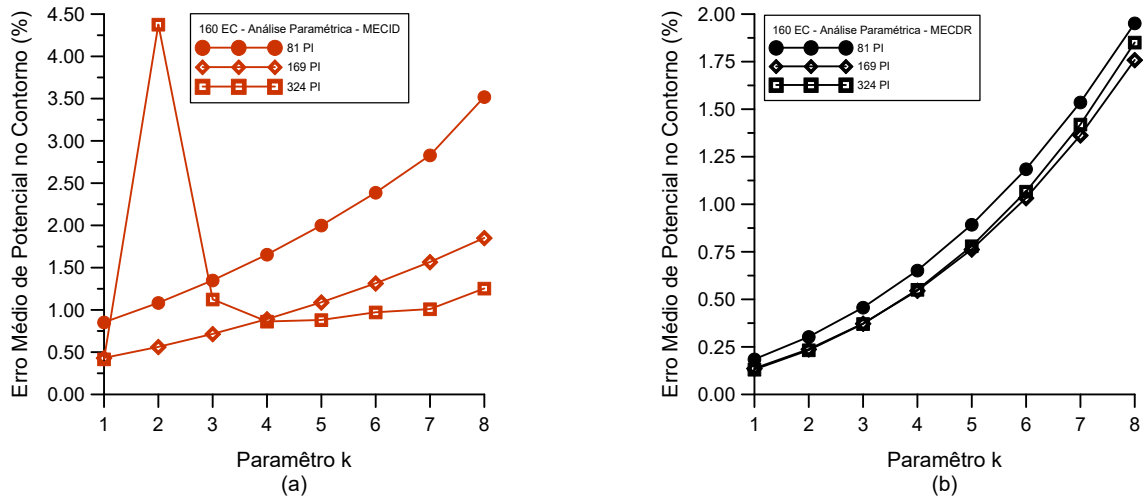


Figura 44 – C7E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID (b) MECDR

Os resultados da técnica MECID, na Figura 44 (a) sugerem uma melhoria substancial nos níveis de erros dos potenciais calculados com o aumento do número de pólos internos. Para praticamente todas as malhas apresentadas, o MECID tem resultados inferiores ao MECDR, de forma global, entretanto, para efeitos mais moderados de advecção, ou seja, k mais alto, mostra-se mais resiliente, e com erros menores. Aqui também é importante destacar um pico de erro existente para um coeficiente reativo $k = 2$, que também pode indicar algum mal condicionamento matricial.

Em relação a MECDR, na figura 44 (b), observa-se um desempenho muito satisfa-

tório mas que não varia substancialmente com o refinamento do número de pólos internos. É válido aqui ressaltar que este comportamento, praticamente invariante com o refinamento de domínio, curiosamente, também se apresenta no primeiro exemplo, cujo divergente de velocidade é nulo. O vigente exemplo e o primeiro exemplo tem em comum divergentes de velocidade com magnitude constante, respectivamente, nulo e igual à magnitude do coeficiente reativo. Para reforçar o argumento, observa-se no segundo exemplo, cujo divergente de velocidade é uma função variável da posição, que a formulação MECDR responde significativamente ao aumento da discretização de domínio, o que alinha-se com a hipótese levantada.

Na Figura 45 expõe-se uma comparação sintética com resultados da literatura (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a), na qual os autores utilizam uma lógica de decompor o campo de velocidade instantâneo em uma média adicionada de uma flutuação, onde, respectivamente, a média é tratada via solução fundamental do problema correlato e a flutuação abordada pela técnica da dupla reciprocidade. No artigo citado, utilizam-se 720 elementos constantes para a geração dos resultados aqui apresentados e função de base radial de plana fina, idêntica a utilizada no presente trabalho. A solução analítica do problema, já posta anteriormente pela Eq. (7.23), é graficada como referência.

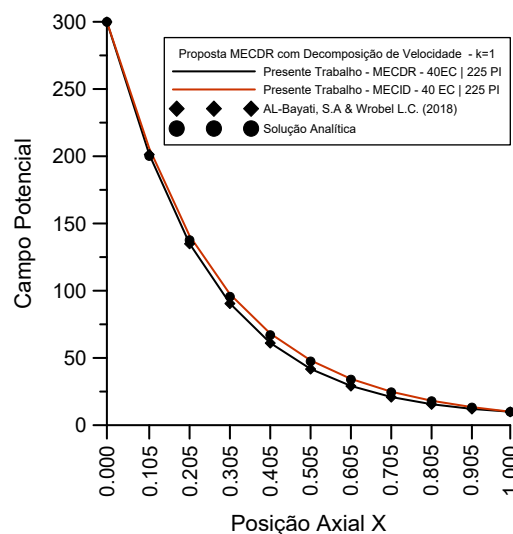


Figura 45 – C7E3 - MECID vs Trabalho de Bayati, A.L. and Wrobel, L.C. (2018)

Ainda observando a Figura 45, é interessante ressaltar que a solução analítica e os resultados do artigo (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a) são colocados em formato de marcadores livres, enquanto que as simulações feitas no presente trabalho utilizando uma malha com 40 BE e 225 IP, são representadas por linhas sólidas. Há uma aderência evidente entre a curva da técnica MECID e a solução analítica, enquanto a curva da técnica MECDR, mais descolada da solução exata, tem maior proximidade com a simulação de Wrobel e AL Bayati (2018). É interessante destacar que o uso de elementos de contorno lineares no vigente trabalho consegue igualar com facilidade as simulações com elementos constantes

muito mais numerosos, o que mostra o impacto relevante na melhoria da interpolação na técnica MECDR.

A apresentação das curvas do campo potencial físico também mostra-se interessante para demonstrar a capacidade da técnica MECID de aderir qualitativamente às previsões analíticas. Na Figura 46, simulações com coeficiente k variando de 1 a 20 são exibidos nas curvas sólidas enquanto os marcadores representam a solução exata. Observa-se uma aderência satisfatória da técnica de interpolação direta para todos os níveis do parâmetro k testado.

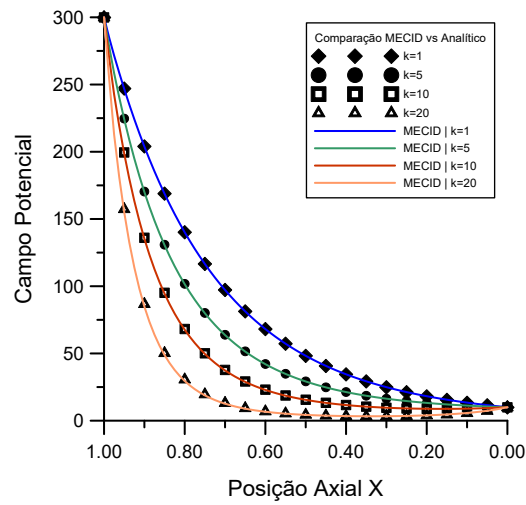


Figura 46 – C7E3 - Curvas Físicas MECID - Paramétrica com k

A robustez da nova formulação da MECID proposta neste capítulo é testada numa malha de contorno mais refinada, de 320 EC, com dois níveis de refinamento de pólos internos, veja Figura 47.

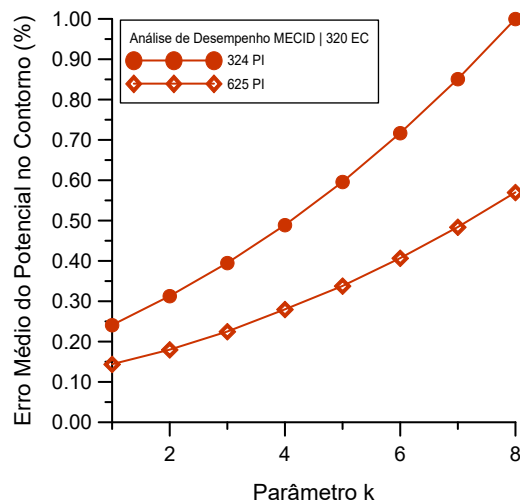


Figura 47 – C7E3 - Análise de Desempenho do MECID

Observa-se nos resultados da Figura 47 que a técnica MECID apresenta baixos níveis de erro médio, e que o refinamento dos pólos internos continua a impactar consistentemente

na queda dos erros, característica que diferencia o MECID do MECDR em relação a certos problemas, como é o caso deste, com divergente de velocidade constante.

Por fim, analisa-se o impacto dos esquemas de integração no desempenho das técnicas numéricas, MECID e MECDR, para uma malha com 160 EC e usando 4 pontos de Gauss (NPG) nas integrações, mostrado pela Figura 48. Nota-se que a insensibilidade do MECID ao esquema de quadratura utilizado, mantém-se tal como nos exemplos anteriores. Já em relação ao MECDR, tem-se como novidade erros médios muito elevados com 4 NPG usando a quadratura clássica, quantidade esta suficiente, em exemplos anteriores, para gerar resultados mais satisfatórios. Ademais, a quadratura de Telles continua mostrando uma aderência muito sólida com a técnica MECDR, com uma melhoria impressionante em relação aos resultados com quadratura clássica.

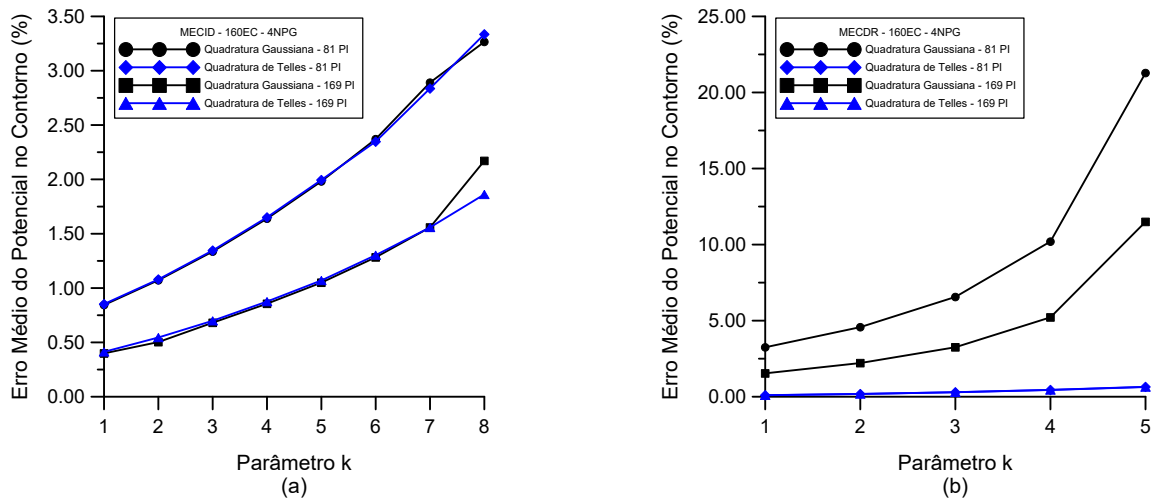


Figura 48 – C7E3 - Esquemas de Integração 160EC e 4 NPG: (a) MECID (b) MECDR

7.4 Conclusões do Capítulo

O objetivo central deste capítulo foi atingido com êxito, a saber, testar a formulação clássica do MECID em modelos advectivo-difusivo-reativos com campo de velocidade variável. De forma geral, os três exemplos-testes foram consistentemente resolvidos pela nova formulação proposta do MECID, e devidamente comparados com uma técnica de referência, a MECDR, cujos resultados com o uso de elementos lineares na literatura não são tão difundidos. Ainda em termos mais globais é interessante relembrar que os principais desafios encontrados durante a proposta de novas formulações podem ser sintetizados em lidar com o formato variável do campo de velocidade, com a tendência de desestabilização e perda de precisão por parte das técnicas com o aumento dos efeitos advectivos, e por fim, o formato algébrico do divergente da velocidade, que mostrou-se um parâmetro-chave nestes problemas.

No tocante a formulação clássica do MECID, proposta neste capítulo, pode-se

destacar algumas características relevantes. A primeira delas é a sensibilidade da formulação com a inserção de polos internos, que já era conhecida de testes em problemas advectivo-difusivos com campo uniforme de velocidade, e que confirmou-se solidamente nos testes numéricos vigentes com campos hidrodinâmicos variáveis. Todavia, foi observado que, para um refinamento insuficiente em termos de elementos de contorno, a formulação proposta não apresenta sensibilidade aguçada ao adensamento de domínio. Ao passo que, ao enriquecer o contorno numa proporção adequada, a característica de maior sensibilidade e demanda por pontos internos torna-se presente. Um segundo ponto de destaque é a sensibilidade da formulação não apenas com o número de polos internos, mas também sua disposição espacial, testados neste capítulo através do deslocamento da primeira fileira de pontos internos adjacentes ao contorno para mais próximo do mesmo. Estas disposições distintas de polos internos mostram-se capazes, por testes feitos no primeiro exemplo, de variar a ordem de magnitudes dos erros médios, podendo até mesmo, definir se a formulação logra um desempenho melhor ou pior que seus pares, no caso a MECDR neste trabalho, em testes cruzados. Em sequência, também vale destacar a influência do formato algébrico do divergente da velocidade no desempenho global da formulação MECID. Os testes numéricos nos três exemplos indicam um comportamento mais preciso e consistente da formulação MECID para casos nos quais o divergente da velocidade é constante, podendo ser nulo ou não-nulo. No caso de divergente da velocidade variável, a técnica parece demandar um maior nível de discretização para alcançar os níveis de precisão da MECDR, pelo menos para a configuração de malha perfeitamente estruturada testada, ou seja, com espaçamento uniforme. A dificuldade da MECID em lidar com divergente que varia no espaço deve-se, provavelmente, a forma explícita com que este termo aparece nas integrais de domínio da formulação proposta, distintamente da MECDR, na qual o divergente fica algebricamente implícito. Em relação a intensidade dos efeitos advectivos, pode-se dizer que a MECID é mais precisa, em linhas gerais para casos de velocidade uniforme, e casos de divergente nulo, enquanto que para casos onde o divergente é não-nulo, há uma paridade com a MECDR, que mostra-se superior em alguns dos testes realizados. Já em relação a resiliência a efeitos advectivos, há uma tendência de melhor desempenho por parte da MECID, todavia, mais testes são necessários, principalmente para divergente com formato matemático mais exigente, ou seja, com variações mais abruptas com relação as coordenadas espaciais. Por fim, destaca-se que a formulação do MECID não se mostrou sensível ao esquema de integração adaptativa de Telles, testado em todos os casos para diferentes cenários de intensidade de advecção.

Paralelamente, em relação a MECDR, não obstante ao nível de consolidação da técnica, também houve várias constatações importantes. Em linha geral, vale destacar uma melhora consistente da técnica com o uso de elementos lineares, uma vez que, a maior parte da literatura mais clássica da técnica e até mesmo trabalhos atuais, expõe seu desempenho com o uso de elementos constante. Primeiramente, em relação a discretização

de domínio, os testes realizados neste capítulo partindo de um polo interno unitário com gradual adensamento, mostram que a MECDR só é sensível, via de regra, até uma quantidade pequena de polos internos interpolantes, a partir da qual, não há mais efeito positivo no ganho de precisão. Todavia, este comportamento, mostrou-se relativo, uma vez que para o segundo exemplo testado, a saber, com divergente de velocidade com variação espacial, a técnica surpreendentemente reage a inserção de polos internos de forma contínua, assemelhando-se ao comportamento nativo da MECID. Quanto ao esquema de integração, a MECDR mostra uma aderência já esperada, apresentando melhoria de precisão apreciável em todos os casos testados, muito provavelmente devida ao formato final do sistema discreto da formulação, que promove um espelhamento das matrizes clássicas $[H]$ e $[G]$ no lado advectivo do sistema.

Em síntese, baseado nos testes até então realizados, a filosofia MECID baseada em aproximar todo o núcleo da integral de domínio, parece gerar uma maior resiliência em relação aos efeitos de advecção, mesmo utilizando uma solução fundamental mais simples, em cenários de advecção fraca para moderada. Todavia, ao voltar a atenção para campos de velocidade cujo divergente não é constante ou nulo, a MECDR parece responder melhor, com uma formulação que trabalha este termo de forma implícita. Além disso, esquema de integração adaptativos, dentre eles o proposto por Telles, se adaptam melhor a estrutura da MECDR. Por fim, pode-se inferir que uma nova proposta de formulação alternativa do MECID, que utilize a robustez da aproximação total do núcleo das integrais de domínio associada a uma aproximação das derivadas do potencial análoga à MECDR, pode ser considerada promissora e mereça ser devidamente elaborada e testada como sequência natural de desenvolvimento.

8 Formulação Alternativa da Interpolação Direta em Modelos de Velocidade Variável

8.1 Formulação MECID Alternativa - Velocidade Variável

A equação de governo de um modelo advectivo-difusivo em regime estacionário em meio isotrópico é proveniente, fisicamente, da sentença de conservação de energia provinda da mecânica do contínuo (REDDY, 2010) e pode ser algebrizada em notação indicial, conveniente no formato da Eq. (8.1) a seguir.

$$\sigma u_{,ii}(X) = v_i(X)u_{,i}(X) \quad (8.1)$$

Na Eq. (8.1), σ representa a difusividade térmica do meio contínuo u , o campo de escalar de interesse ou variável primal e v_i o campo de velocidade imposto ao domínio. As estratégias do método de elemento de contorno que se baseiam em aproximações por funções de bases radiais utilizam-se de uma solução de Green mais simples, no caso, a solução fundamental do problema de Poisson (BREBBIA; DOMINGUEZ, 1994). Desta forma, para simplificar o algebrismo, vamos considerar as propriedades do meio unitárias ($\sigma = 1$) e pode-se então escrever a formulação integral forte do problema na seguinte maneira.

$$\int_{\Omega} u_{,ii}(X)u^*(\xi, X)d\Omega(X) = \int_{\Omega} v_i(X)u_{,i}(X)u^*(\xi, X)d\Omega(X) \quad (8.2)$$

A Eq. (8.2) pode ser analisada como composta de um lado difusivo (LD), a esquerda da igualdade, cujo tratamento já conhecido, e um lado direito, que contabiliza os efeitos de advecção (LA) de tratamento mais desafiador. As formulações baseadas em aproximações via bases radiais só destoam acerca do tratamento do lado advectivo (LA). Desta forma o lado difusivo tem sua formulação integral inversa já bastante conhecida na literatura de elementos de contorno (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012), e dada pela Eq. (8.3).

$$LD = c(\xi)u(\xi) + \int_{\Gamma} u(X)q^*(\xi, X)d\Gamma(X) - \int_{\Gamma} q(X)u^*(\xi, X)d\Gamma(X) \quad (8.3)$$

Os resultados de testes preliminares da formulação clássica da MECID auferidas (PINHEIRO; LOEFFLER; MANSUR, 2022) motivaram a proposição de uma formulação que potencialmente possa responder melhor em casos de divergente não-nulo (PINHEIRO et al., 2020). A natureza explícita do divergente na formulação clássica da MECID aparenta gerar dificuldades numéricas e uma proposta onde haja contabilização implícita deste

termo, tal como faz a dupla reciprocidade, talvez possa responder melhor a alguns tipos de casos físicos.

A demonstração da nova proposta inicia-se por reescrever o lado advectivo que deve ser tratado pela definição de uma variável $b = v_i u_{,i}$, caracterizada pelo produto escalar entre o vetor de velocidade e o gradiente do campo primal, tal como na Eq. (8.4).

$$LA = \int_{\Omega} v_i(X) u_{,i}(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} b(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) \quad (8.4)$$

Para o modelo advectivo-difusivo a definição deste produto escalar, de certa forma, já remete ao algoritmo da dupla reciprocidade, que aproximaria este termo por funções de bases radiais (PARTRIDGE; BREBBIA; WROBEL, 1992). Este fato dá origem a algumas semelhanças estruturais entre as formulações da MECDR clássica e a MECID alternativa aqui proposta.

Na proposta vigente procede-se por outro caminho, entretanto parcialmente conhecido. Utiliza-se o procedimento de regularização (LOEFFLER; MANSUR, 2017), tal como na versão da MECID clássica, mas desta vez, aplicado ao produto escalar $b(X)$. Com isso pode-se chegar a seguinte expressão.

$$\int_{\Omega} b(X) u^*(\xi; X) d\Omega(X) = \int_{\Omega} [b(X) - b(\xi)] u^*(\xi; X) d\Omega(X) + \int_{\Omega} b(\xi) u^*(\xi; X) d\Omega(X) \quad (8.5)$$

A Eq. (8.5) reescreve o lado advectivo em termos de uma integral regularizada de domínio, seguida de uma integral excedente. A primeira será alvo de aproximação por bases radiais pela MECID, já a segunda será conduzida ao contorno usando tensor de Galerkin. Os passos do tratamento de cada integral são expostos na sequência.

8.1.1 Tratamento da Integral Regularizada

Todo o núcleo da primeira integral de domínio do lado direito da Eq. (8.5), conforme a técnica de interpolação direta, é aproximado por funções de bases radiais, conforme a Eq. (8.6).

$$[b(X) - b(\xi)] u^*(\xi; X) = \xi_j \alpha F^j (X^j; X) \quad (8.6)$$

Inserindo a aproximação da MECID, da Eq. (8.6) na primeira integral do lado direito da Eq. (8.5), tem-se então:

$$\int_{\Omega} [b(X) - b(\xi)] u^*(\xi; X) d\Omega(X) \cong \int_{\Omega} \xi_j \alpha F^j (X^j; X) d\Omega(X) \quad (8.7)$$

Agora, adotando-se uma primitiva ψ da função de base radial selecionada, tal que $F^j = \psi_{,jj}$, e inserindo esta igualdade na aproximação na Eq. (8.7) é possível chegar a seguinte simplificação, que gera a Eq. (8.8).

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \xi_j \alpha F^j d\Omega(X) &= \int_{\Omega} \xi_j \alpha \psi_{,jj} d\Omega(X) = \int_{\Omega} \left(\xi_j \alpha \psi_{,j} \right)_{,j} d\Omega(X) = \xi_j \alpha \int_{\Gamma} n_j \psi_{,j} d\Gamma(X) \\ &= \xi_j \alpha \int_{\Gamma} \eta^j (X^j; X) d\Gamma(X) \end{aligned} \quad (8.8)$$

Desta, forma as integrais de η^j podem ser facilmente calculadas com procedimentos de integração numérica, restando apenas como incógnitos os valores dos coeficientes α , que serão determinados na seção 8.1.3.

8.1.2 Tratamento da Integral Excedente

A segunda integral do lado direito da Eq. (8.5) é conduzida ao contorno utilizando o conceito do Tensor de Galerkin (G^*), que é a segunda primitiva da solução de Green (u^*). Desta forma adotando-se $G^*_{,kk}(\xi; X) = u^*(\xi; X)$, e substituindo na integral, tem-se:

$$\begin{aligned} b(\xi) \int_{\Omega} u^*(\xi; X) d\Omega(X) &= b(\xi) \int_{\Omega} G^*_{,kk} d\Omega(X) = b(\xi) \int_{\Omega} (G^*_{,k})_{,k} d\Omega(X) \\ &= b(\xi) \int_{\Gamma} n_k G^*_{,k} d\Gamma(X) \end{aligned} \quad (8.9)$$

Na Eq. (8.9), a derivada direcional do tensor de Galerkin $G^*(\xi; X)$ é dada por (LOEFFLER; MANSUR, 2017):

$$G^*_{,k}(\xi; X) n_k(X) = \xi P^X = \frac{1}{4\pi} \{0.5 - \ln[r(\xi; X)]\} r_k n_k \quad (8.10)$$

O processo de discretização aplicado a Eq. (8.9), levando em conta a derivada direcional na Eq. (8.10), conduz a escrita do vetor (Z), no formato da Eq. (8.11)

$$\begin{pmatrix} Z_1 \\ \vdots \\ Z_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \int_1^1 P_1 d\Gamma_1 + \cdots + \int_1^1 P_n d\Gamma_n & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \int_1^n P_1 d\Gamma_1 + \cdots + \int_1^n P_n d\Gamma_n \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix} \quad (8.11)$$

8.1.3 Determinação da Matriz α

A discretização em elementos e expansão da aproximação da Eq. (8.6) para um sistema discreto com n graus de liberdade, e pré-multiplicado por $[F]^{-1}$ resulta na Eq. (8.12).

$${}^\xi\{\alpha\} = [F]^{-1}{}^\xi[\Lambda] \{b'\} \quad (8.12)$$

A integral de domínio aproximada pela técnica MECID resulta no sistema discreto formado pelo produto de dois vetores N e ${}^\xi\{\alpha\}$, que adota-se aqui chamar de A_ξ , conforme pode ser apreciado no artigo de Loeffler e Mansur (LOEFFLER; MANSUR, 2017). Uma vez que N é o vetor formado pelas integrais de η^j , da Eq. (8.8), é possível com a sentença dos coeficientes α , Eq. (8.12), escrever a integral aproximada no domínio discreto da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_\xi &= \begin{pmatrix} N_1 & N_2 & \cdots & N_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^\xi_1\alpha \\ \vdots \\ {}^\xi_n\alpha \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} N_1 & N_2 & \cdots & N_n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} F^{11} & \cdots & F^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F^{n1} & \cdots & F^{nn} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} {}^\xi_1\Lambda \\ \ddots \\ {}^\xi_n\Lambda \end{bmatrix} \{b'\} \end{aligned} \quad (8.13)$$

Pode-se agrupar todo o produto de termos, excluindo-se o vetor b' , no lado direito na Eq. (8.13) em um vetor ${}^\xi\{S\}$, da seguinte forma, da Eq. (8.14).

$${}^\xi\{S\} = \begin{pmatrix} S_{\xi_1} & S_{\xi_2} & \cdots & S_{\xi_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & N_2 & \cdots & N_n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} F^{11} & \cdots & F^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F^{n1} & \cdots & F^{nn} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} {}^\xi_1\Lambda \\ \ddots \\ {}^\xi_n\Lambda \end{bmatrix} \quad (8.14)$$

A expansão do sistema discreto com a varredura dos pontos fonte ξ , leva a formação da seguinte matriz $[S]$ que multiplica o vetor $\{b'\}$, descrita pela Eq. (8.15).

$$[S] = [N][F]^{-1}{}^\xi[\Lambda] \quad (8.15)$$

Neste ponto é interessante notar que, a integral aproximada pela interpolação direta, torna-se o produto da matriz $[S]$, definida na Eq. (8.15) com o vetor $\{b'\}$, que será tratado matematicamente em momento oportuno. Pode-se escrever então que o vetor $[A]$, na Eq. (8.16) que segue.

$$[A] = [S]\{b'\} \quad (8.16)$$

8.1.4 Determinação do Produto Escalar b

Retorna-se agora ao produto escalar b destacado no começo da exposição da formulação proposta. Por questão de facilidade visual evidencia-se o mesmo aqui na Eq. (8.17).

$$b = v_{,i} u_{,i} \quad (8.17)$$

Para melhor tratar a Eq. (8.17), recorre-se a um processo idêntico ao usado na técnica da dupla reciprocidade (MECDR) para aproximar as derivadas do campo primal $u(X)$ (BREBBIA; TELLES; WROBEL, 2012). Para isso propõe-se que o campo possa ser aproximado, tal como na Eq. (8.18) pelo produto de um coeficiente β por uma função de base radial F , escolhida a critério. Desta forma o coeficiente β pode ser determinado pré-multiplicando por F^{-1} .

$$u = \beta F \quad \therefore \quad \beta = F^{-1} u \quad (8.18)$$

Agora, de posse da aproximação do campo, pode-se então diferenciar a Eq. (8.18) em relação as coordenadas espaciais, obtendo-se as derivadas direcionais $u_{,i}$, e utilizando-se da expressão do coeficiente β , obter uma expressão final para as derivadas em função do campo primal $u(X)$ e da função de base radial escolhida tal como evidencia a Eq. (8.19).

$$u_{,i} = F_{,i} \beta \quad \therefore \quad u_{,i} = F_{,i} F^{-1} u \quad (8.19)$$

A expansão da Eq. (8.19) após a discretização com n graus de liberdade resulta em um vetor b , formado por componentes escalares, no seguinte formato da Eq. (8.20):

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^1 & & \\ & \ddots & \\ & & v_1^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{,1}^{11} & \dots & F_{,1}^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{,1}^{n1} & \dots & F_{,1}^{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F^{11} & \dots & F^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F^{n1} & \dots & F^{nn} \end{bmatrix}^{-1} \\ + \begin{bmatrix} v_2^1 & & \\ & \ddots & \\ & & v_2^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{,2}^{11} & \dots & F_{,2}^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{,2}^{n1} & \dots & F_{,2}^{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F^{11} & \dots & F^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F^{n1} & \dots & F^{nn} \end{bmatrix}^{-1} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix} \quad (8.20) \end{aligned}$$

Para facilitar a escrita matemática, vamos chamar de $[M']$ a matriz que pré-multiplica o vetor dos valores incógnitos do campo, $\{u\}$, na Eq. (8.20). Desta forma, de maneira mais simples, pode-se dizer que o vetor $\{b\}$, pode ser escrito tal como na Eq. (8.21):

$$\{b\} = [M'] \{u\} \quad (8.21)$$

Com isso a formulação matricial final na nova formulação do MECID pode ser escrita como:

$$[H] \{u\} - [G] \{q\} = \{A + Z\} = [M]_{ID} \{u\} \quad (8.22)$$

A matriz $[M]_{ID}$, da Eq. (8.22), aqui chamada de matriz de transporte, pois está ligada ao lado advectivo da equação do governo do fenômeno. A técnica da dupla reciprocidade chega a um sistema discreto final de mesmo formato, dado abaixo pela Eq. (8.23). Um dos focos deste capítulo é determinar qual das matrizes de transporte tem melhor constituição, e, portanto, melhor representação de domínio.

$$[H] \{u\} - [G] \{q\} = [H\psi - G\eta] \{b\} = [M]_{DR} \{u\} \quad (8.23)$$

8.2 Simulações Numéricas

8.2.1 Primeiro Exemplo

O primeiro caso selecionado para testar a formulação alternativa do MECID é uma situação especial onde tem-se um problema de campo de velocidade variável, entretanto com divergente nulo do campo de velocidades, cuja geometria, campo hidrodinâmico e condições de contorno impostas são mostrados abaixo na Figura 49. Os resultados de erros médios são avaliados com base nas arestas direita e inferior, levando em conta a simetria matemática do problema.

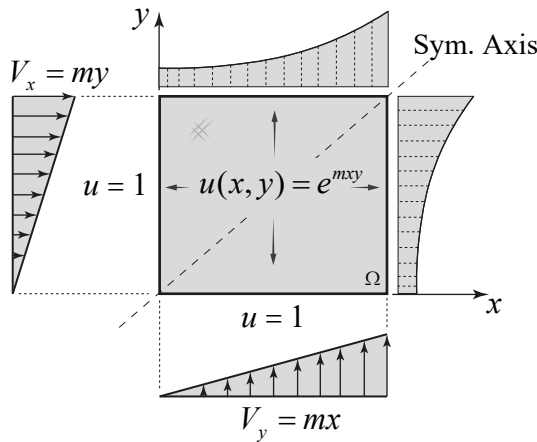


Figura 49 – C8E1 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial e suas derivadas direcionais para o caso é dada pela Eq. (8.24), a seguir.

$$u(x, y) = e^{mxy} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = mye^{mxy} \quad \frac{\partial u}{\partial y} = mxe^{mxy} \quad (8.24)$$

O primeiro teste realizado é uma análise de convergência entre as três formulações testadas, com malhas de contorno de 40, 80 e 160 elementos de contorno (EC) e distintos conjuntos de pontos internos. No gráfico da Figura 50 (a) é mostrado um paralelo entre a MECID clássica e a MECID alternativa enquanto na Figura 50 (b), a formulação da MECID alternativa é comparada com a MECDR. Na Figura 50 (a) observa-se que a formulação alternativa apresenta um decaimento dos erros a patamares mais reduzidos com menos polos interpolantes, em geral, quando comparada com a formulação clássica do MECID. Ademais, ainda neste gráfico, observa-se que com o refinamento dos polos internos e também das malhas de contorno o desempenho da formulação alternativa tende a ser superior.

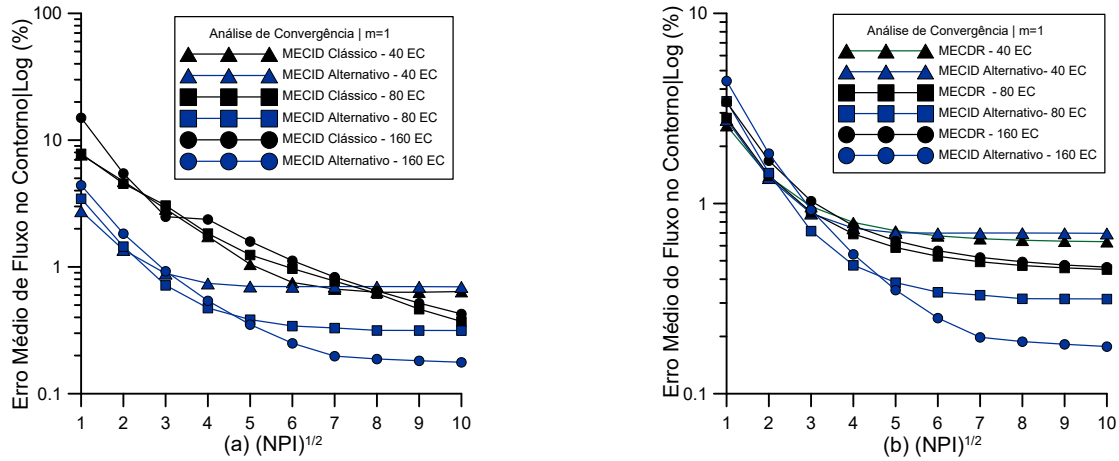


Figura 50 – C8E1 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs MECID Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

Já na Figura 50 (b) observa-se que a formulação alternativa tem comportamento parecido com a dupla reciprocidade em malha mais pobre, de 40 EC, e que, ao adensar o contorno, passa a ser mais precisa, apresentando níveis de erros menores. Ademais, ainda sobre a Figura 50 (b) é interessante observar que os gráficos tem formatos assemelhados, ou seja, a efetividade de adensamentos de pontos internos, dada uma malha de contorno, apresenta um claro ponto de saturação, o que já é uma característica bem conhecida da MECDR e que também se mostra presente da MECID alternativa nestes resultados.

Sequencialmente realiza-se uma análise paramétrica das três formulações com a intensificação da magnitude do campo hidrodinâmico, via aumento do parâmetro de referência m . Para tanto seleciona-se uma malha de 160 EC com três nuvens distintas de pontos internos, enquanto a advecção é acrescida gradualmente. Na Figura 51 (a) observa-se que para todas as malhas testadas e valores do parâmetro de advecção (m) a formulação alternativa mostra-se razoavelmente mais precisa, e, de forma geral, resiliente

em termos de precisão até graus moderados de advecção. É curioso observar que a MECID alternativa não mostra tanta sensibilidade ao adensamento de pólos internos com baixa magnitude de advecção, ao contrário da MECID clássica, entretanto, ao aumentar-se a intensidade da advecção as curvas se tornam mais espaçadas e a formulação parece passar a responder mais efetivamente ao refinamento de polos interpolantes.

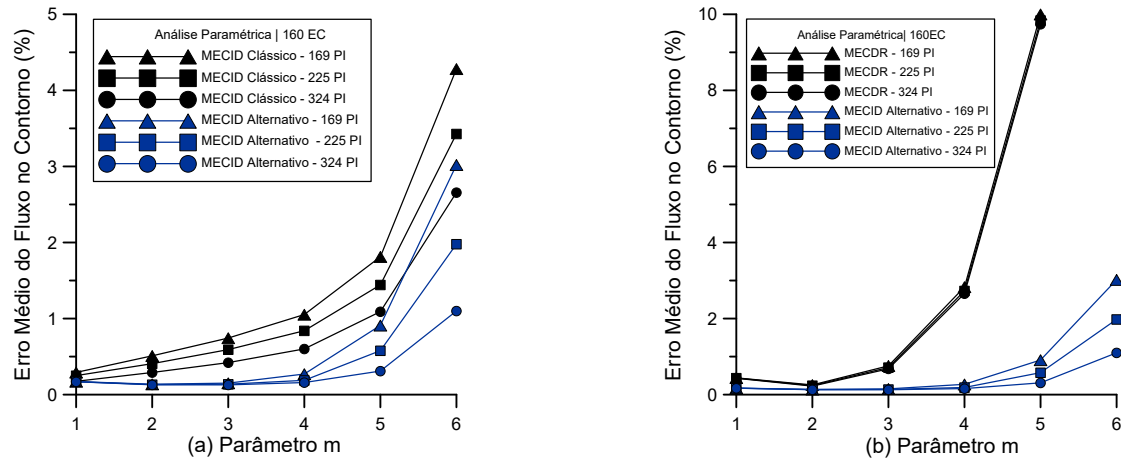


Figura 51 – C8E1 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

Na Figura 51 (b) a formulação MECID alternativa é contraposta com a MECDR. Os resultados obtidos aqui, por sua vez, apontam para um desempenho consistentemente superior da MECID, enquanto a dupla reciprocidade parece perder a precisão para baixas intensidades de advecção. Este comportamento de perda de precisão precoce da MECDR, com consequente descolamento dos resultados numéricos dos comportamentos físicos esperados já foi observado no capítulo de formulação do MECID para campos de velocidade constante.

Por fim, o último teste realizado é uma análise com malhas mais robustas de 320 EC com a formulação MECID alternativa com relação à formulação da MECID clássica. O foco aqui é extrair o nível de precisão que as formulações conseguem alcançar com uma melhor qualidade do domínio discreto.

Como resultados, na Figura 52 tem-se que ambas as formulações da MECID apresentam níveis de erros substancialmente baixos, mesmo para patamares moderados do parâmetro m . Adicionalmente, observa-se que para todos os conjuntos de malhas e situações físicas há uma superioridade evidente da formulação alternativa, que consegue manter-se com erros em patamares abaixo de 1,5% para todos os cenários testados, o que caracteriza um resultados razoável quando trata-se de erros de fluxo.

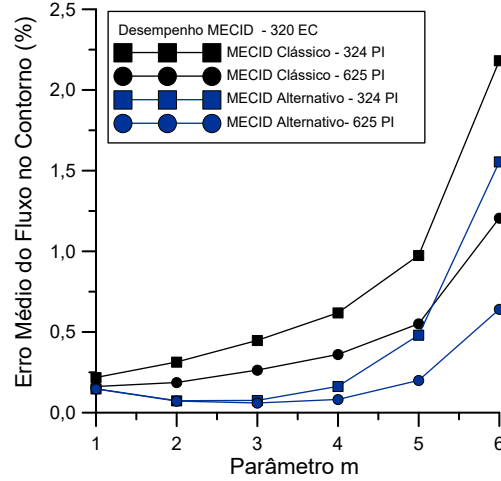


Figura 52 – C8E1 - Análise de Desempenho do MECID

8.2.2 Segundo Exemplo

O segundo exemplo apresentado a seguir é um modelo advectivo-difusivo compressível, com campo de velocidade variável e divergente de velocidade não-nulo. Para que o problema compressível possa ser adequadamente representado por uma equação de advecção-difusão simples, tal como a Eq. (8.1), foi necessário um procedimento de transformação de coordenadas mostrado em detalhes no trabalho de Loeffler e Dan (LOEFFLER; DAN, 2004). As condições de contorno, e campo de velocidade imposto no domínio são mostrados abaixo pela Figura 53.

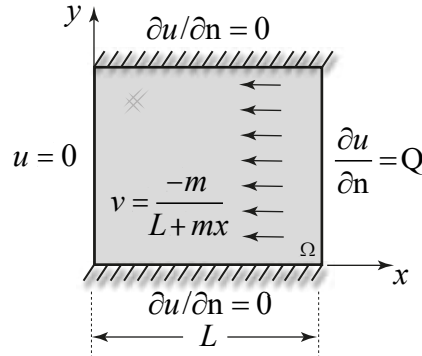


Figura 53 – C8E2 - Domínio e Condições de Contorno

A precisão dos testes numéricos realizados é mensurada com a solução analítica do campo potencial, dada abaixo pela Eq. (8.25) (DAN; LOEFFLER; MANSUR, 2012). O parâmetro de referência m , presente no campo de velocidades da Figura 53 e na solução analítica da Eq. (8.25), na sequência, serve para controlar a intensidade relativa dos efeitos advectivos.

$$u(x) = \frac{QL(1+m)}{m} \left[\ln \left(\frac{L+mx}{L} \right) \right] \quad (8.25)$$

O primeiro teste numérico realizado consiste em uma análise de convergência onde fixam-se malhas de contorno com 80, 120 e 160 elementos de contorno (EC) e gradualmente inserem-se polos internos (PI) no intuito de enriquecer a aproximação por funções de bases radiais das formulações testadas.

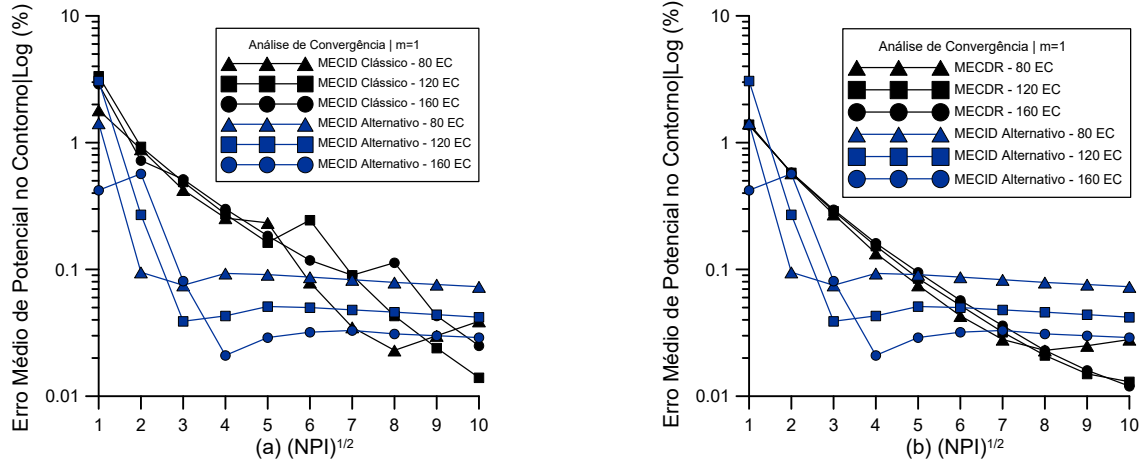


Figura 54 – C8E2 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

No gráfico da Figura 54 (a) compara-se os resultados gerados pela formulação clássica versus alternativa do MECID. Observa-se um comportamento interessante da nova formulação proposta, onde os níveis erros decaem rapidamente a patamares baixos mesmo com uma pequena quantidade de polos interpolantes. No gráfico na Figura 54 (b) compara-se a nova formulação do MECID com a MECDR. Os níveis de erros são parecidos para um domínio mais enriquecido de polos internos, entretanto há uma vantagem relevante com o uso de poucos polos internos para a nova formulação. O comportamento demonstrado pela nova proposta assemelha-se muito ao do MECDR em problemas advectivo-difusivos com campo de velocidade constante. Entretanto, no contexto de situações com campo variável de velocidade a dupla reciprocidade aparentemente demanda mais polos internos para uma melhor precisão. Nesta linha, esta formulação demanda testes em mais situações físicas, mas, ao que parece, demonstra uma menor necessidade de polos internos para atingir baixos patamares de erro.

Na sequência realiza-se uma análise paramétrica com o parâmetro m , que controla a intensidade relativa dos efeitos advectivos no modelo de governo. Este tipo de análise é de grande importância, pois um desafio central para as formulações que utilizam aproximações via bases radiais é a de manter precisão frente a efeitos moderados e intensos do termo de transporte advectivo. Neste caso, no gráfico da Figura 55 (a) compara-se a formulação clássica da MECID com sua formulação alternativa. Já na Figura 55 (b) compara-se esta formulação alternativa com a técnica da dupla reciprocidade (MECDR).

Primeiramente, numa visão geral da Figura 55 (a) e Figura 55 (b) a fim de comparar a formulação clássica do MECID com o MECDR, a saber, curvas pretas, já se percebe

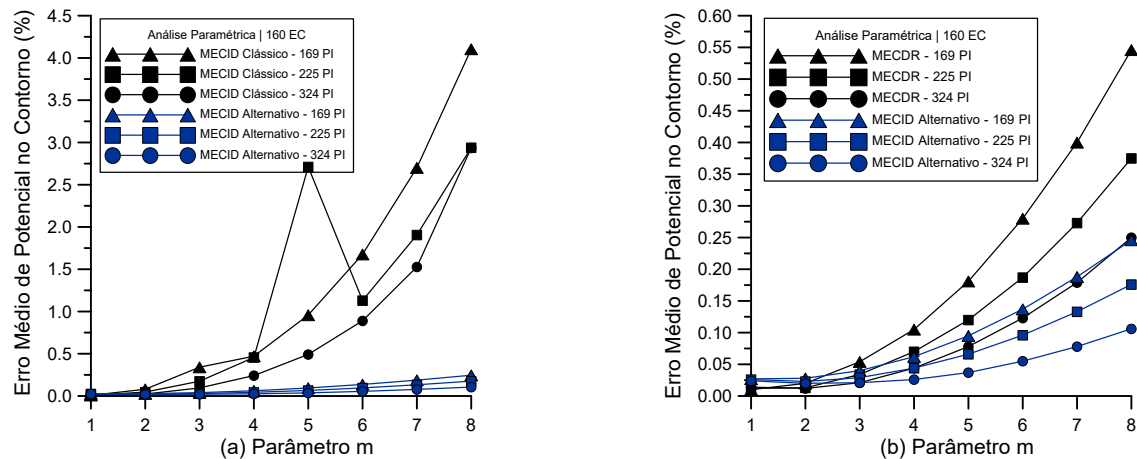


Figura 55 – C8E2 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

que nesse caso a MECDR leva ampla vantagem em relação a MECID em sua versão clássica. Mesmo com a maior sensibilidade do MECID a quantidade e disposição de polos internos, a dupla reciprocidade mostra superioridade no caso testado. Todavia, ao avaliar a formulação alternativa, esta mostra-se consistentemente superior a formulação clássica da interpolação direta como exposto na Figura 51 (a), e, também mais precisa que a MECDR como demonstram as curvas na Figura 51 (b).

Por fim neste caso, testa-se a robustez das formulações de interpolação direta (MECID) enriquecendo substancialmente a malha de contorno, com 320 EC, e a nuvem interna interpolante afim de determinar o comportamento paralelo entre as formulações propostas, segundo a Figura 56. Ambas as formulações do MECID geram níveis de erros de fluxo bem reduzidos, todavia, a formulação alternativa do MECID mostra-se a mais precisa, para os dois quantitativos de pontos internos testados, com erros médios nos fluxos menores que 0.1% mesmo com advecção moderada.

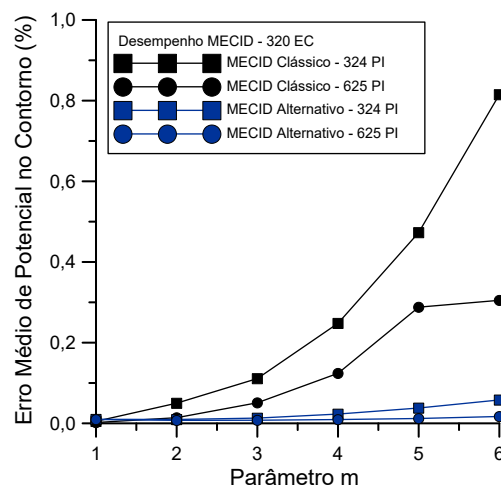


Figura 56 – C8E2 - Análise de Desempenho do MECID

8.2.3 Terceiro Exemplo

O terceiro exemplo testado tem como equação de governo um modelo difusivo-advectivo-reativo. O campo de velocidades apenas, na direção x está correlacionado com o termo reativo da equação de governo, uma vez que o campo hidrodinâmico é linear e seu coeficiente angular coincide com o coeficiente de reação k . Este problema-modelo foi retirado do trabalho de Al-Bayati e Wrobel (2018) (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a) e seu domínio geométrico e condições de contorno são mostrados na Figura 57.

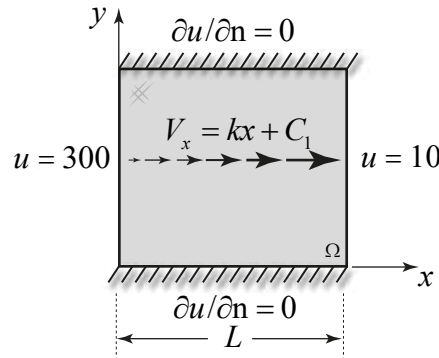


Figura 57 – C8E3 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial para o caso é dada pela Eq. (8.26), a seguir na literatura (AL-BAYATI; WROBEL, 2018a).

$$u(x) = 300e^{\left(\frac{k}{2}\right)x^2 + c_1x} \quad c_1 = \ln\left(\frac{10}{300}\right) - \frac{k}{2} \quad (8.26)$$

Inicia-se a exposição dos resultados com uma análise de convergência, entre as formulações do MECID, a saber, clássica e alternativa na Figura 58 (a) e entre a MECID alternativa e MECDR na Figura 58 (b). Esta análise é feita com três malhas de contorno com 80, 120 e 160 elementos de contorno e para diversos adensamentos de pontos internos (NPI), na abscissa. Na Figura 58 (a), de forma geral, observa-se que os níveis de erros gerados pela formulação alternativa tendem a ser substancialmente menores que a formulação clássica do MECID. Todavia, é interessante de destacar que algumas oscilações presentes nas curvas de convergência da MECID alternativa podem ser fruto de algum mal condicionamento matricial específico gerado pela combinação do número de polos internos interpolantes e sua distribuição, que nesta tese foi mantida uniforme, ou seja, malhas perfeitamente estruturadas. Com isso, apesar da superioridade em termos de precisão para a formulação MECID alternativa, destaca-se que tanto a MECID clássica quanto a MECDR apresentam curvas de convergência mais suaves.

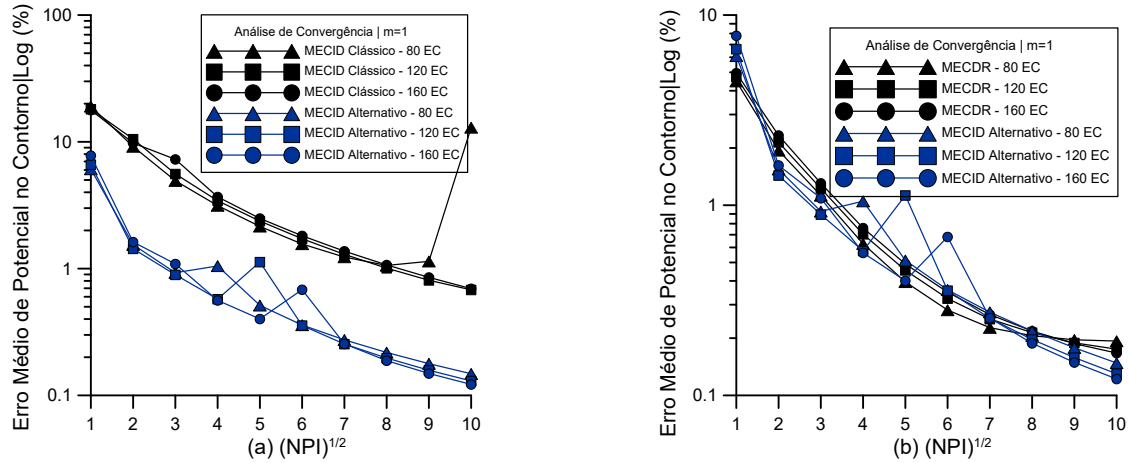


Figura 58 – C8E3 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

No Figura 58 (b), pode-se observar um comportamento muito parecido entre a MECID alternativa em relação a tradicional formulação de dupla reciprocidade em termos de precisão numérica. É interessante também destacar aqui a sensibilidade da MECDR ao quantitativo de polos internos interpolantes para problemas com campo de velocidade variável.

A seguir apresenta-se uma análise paramétrica das formulações de elementos de contorno testadas em relação ao parâmetro k , que neste terceiro caso, controla a intensidade de advecção e também dos efeitos de reação. A Figura 59 (a) compara as formulações da MECID alternativa e clássica enquanto a Figura 59 (b) contrapõe a MECID alternativa frente a MECDR.

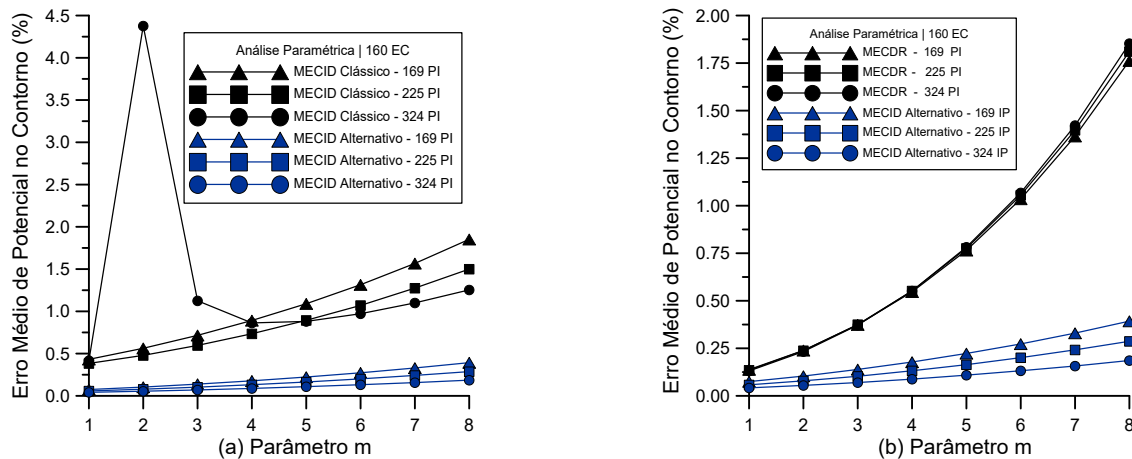


Figura 59 – C8E3 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

Uma comparação rápida entre os dois gráficos (a) e (b) da Figura 59, revela que os níveis de erros médios da MECID clássica e da MECDR são parelhos, com níveis de erro na ordem de 2% para um valor de $k = 8$. Em contraponto a isto a MECID alternativa apresenta níveis de precisão muito maiores do que as outras duas formulações com erros médios

menores que 0.5% mesmo para os cenários com advecção-reação moderadas. Na Figura 59 (a) observa-se que a formulação MECID clássica apresenta alguns arranjos de pontos interpolantes que geram saltos das curvas, como por exemplo em $k = 2$, característica já conhecida, explicada por uma maior sensibilidade à disposição da nuvem interna. Na Figura 59 (b) a MECDR mostra-se praticamente não sensível ao adensamento de polos internos enquanto a MECID alternativa demonstra melhoria de seus resultados através do aumento deste parâmetro de malha, tal como toda formulação baseada em interpolação direta.

Para finalizar os testes do caso, mostra-se uma análise de desempenho das formulações do MECID, clássica versus alternativa, com uma malha mais robusta de 320 EC e dois níveis de adensamento de polos internos. O foco aqui é extrair o melhor das formulações em termos de precisão.

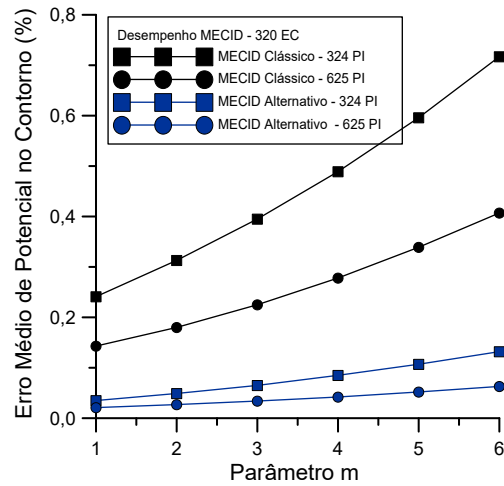


Figura 60 – C8E3 - Análise de Desempenho do MECID

Os resultados trazidos pela Figura 60 para ambas as formulações do MECID apresentam baixos níveis de erros médio, a saber menos que 0.5% para as malhas mais refinadas. Todavia, ao compará-las, percebe-se que a nova proposta da MECID alternativa apresenta maior precisão, menor sensibilidade relativa ao adensamentos de polos internos e, por fim, um crescimento mais suave de erros com a intensificação dos efeitos de advecção-reação k , o que parece indicar maior resiliência e manutenção da aderência numérica à física do problema frente a estes cenários físicos mais desafiadores.

8.2.4 Quarto Exemplo

O último caso a ser testado neste capítulo trata de um modelo difusivo-advectivo com fonte, dado pela equação 8.27. Este caso completa os testes da formulação MECID alternativa com a presença, separadamente, dos principais termos de transporte. A fonte energética imposta ao problema é exposta pela equação 8.28. A geometria, campo hidrodinâmico e condições de contorno exposta ao problema estão representados pela Figura 61, e vale ressaltar a complexidade de efeitos de quinas que são causados pela descontinuidade nos valores das derivadas direcionais do campo potencial quando tem-se condições adjacentes de Dirichlet.

$$u_{,ii} - v_i u_{,i} = f \quad (8.27)$$

$$f = m(x^2 - y^2) \quad (8.28)$$

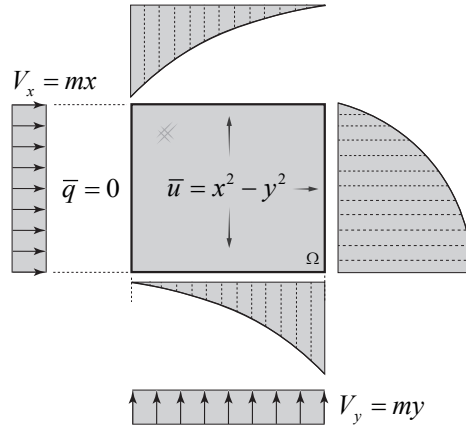


Figura 61 – C8E4 - Domínio e Condições de Contorno

A solução analítica do campo potencial e suas derivadas direcionais para o caso é dada pela Eq. (8.29), a seguir.

$$u(x, y) = x^2 - y^2 \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 2x \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -2y \quad (8.29)$$

O primeiro teste a ser exposto diz respeito à convergência, e utiliza malhas com 120, 160 e 200 EC para distintos adensamentos de polos internos. Neste exemplo numérico houve a necessidade do uso de uma malha inicial mais adensada no contorno, comparativamente a casos anteriores, devido a presença de efeitos de quina que comprometeram a precisão em testes preliminares com malhas mais pobres.

A Figura 62 (a) traz o comparativo entre as formulações de MECID clássica e alternativa. É possível perceber que o MECID clássico mostra uma certa saturação ao

quantitativo de polos interpolantes inseridos, no intervalo de pólos testado. Em contraponto, a formulação MECID alternativa traz curvas de convergência com tendência de decrescimento de erros, ainda sem indicativos da saturação anteriormente citada. Os níveis de erros alcançados pela formulação do MECID são satisfatórios, em especial, pela formulação alternativa que apresenta erros próximos de 0.5% para as melhores malhas. Também é relevante notar que não houve grande sensibilidade ao refinamento de contorno na MECID alternativa, comparativamente à MECID clássica ou mesmo a MECDR, comportamento este já apresentado pela MECID clássica dos casos anteriores, mas inédito para a formulação alternativa.

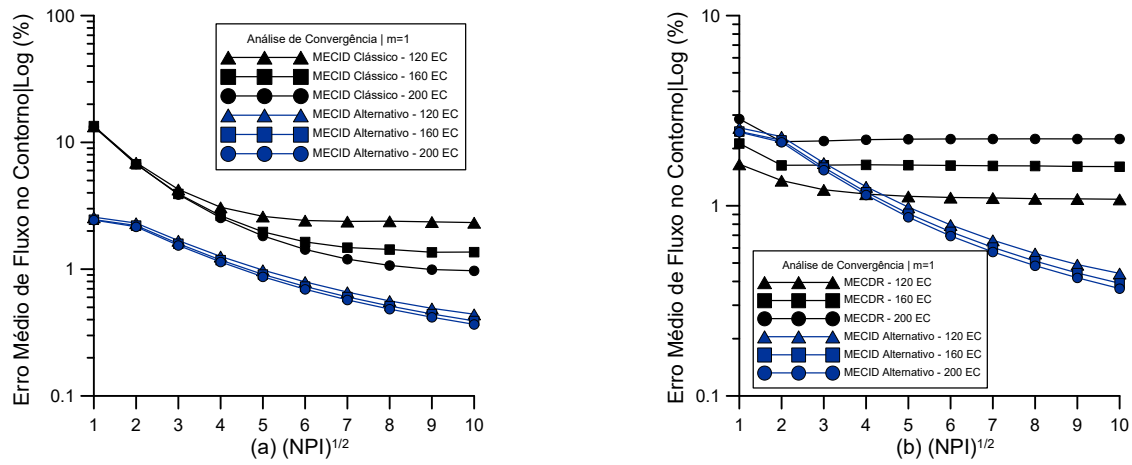


Figura 62 – C8E4 - Análise de Convergência: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

Na Figura 62 (b) traz os resultados comparados na MECID alternativa contra a MECDR. Nestes resultados a MECDR mostra maiores níveis de erros médios com pouca ou quase nenhuma sensibilidade ao adensamento de polos internos, comportamento este já conhecido da formulação em alguns problemas testados. Por outro lado, a MECID alternativa apresenta níveis de erros mais baixos com uma convergência clara na medida da melhoria da discretização do domínio, entretanto, com pouca sensibilidade ao adensamento da malha de contorno, o que poderia traduzir uma capacidade da formulação de gerar resultados satisfatórios com malhas relativamente pobres.

O segundo conjunto de resultados gerados diz respeito a uma malha de 160 EC com três distintas nuvens de polos internos interpolantes e com aumento gradativo do parâmetro m , que neste problema, controla tanto a intensidade da advecção, quanto a representatividade do termo de fonte.

A Figura 63 (a) mostra que tanto a formulação MECID clássica quanto a MECID alternativa apresentam clara sensibilidade e melhoria de nível de precisão em relação a um maior quantitativo de polos internos. Todavia, pode-se constatar que os níveis de erros médios nos fluxos alcançados pela formulação alternativa são substancialmente menores, o que aponta para a qualidade da nova proposta.

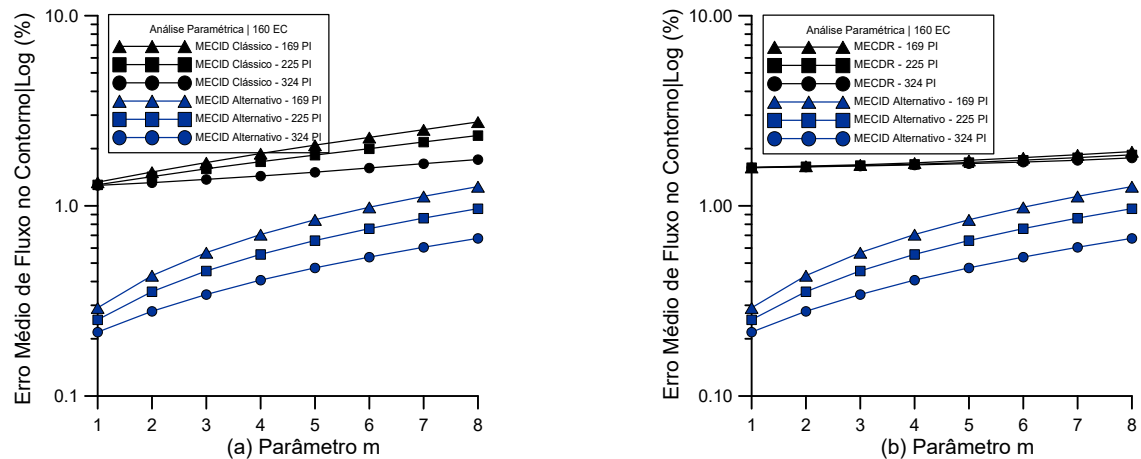


Figura 63 – C8E4 - Análise Paramétrica: (a) MECID Clássico vs Alternativo (b) MECID Alternativo vs MECDR

Na Figura 63 (b) mostra a pouca sensibilidade da formulação MECDR à inserção de polos internos, tal como já visto nos resultados de convergência, na Figura 62 (b). Quando a MECID alternativa, esta apresenta níveis de precisão maiores quando comparada com a MECDR, se apresentando como uma opção viável para este tipo de problema.

Por fim, compara-se na Figura 64, a seguir, as duas formulações do MECID, clássica e alternativa, com uma malha robusta de 320 EC e duas nuvens densas de polos internos.

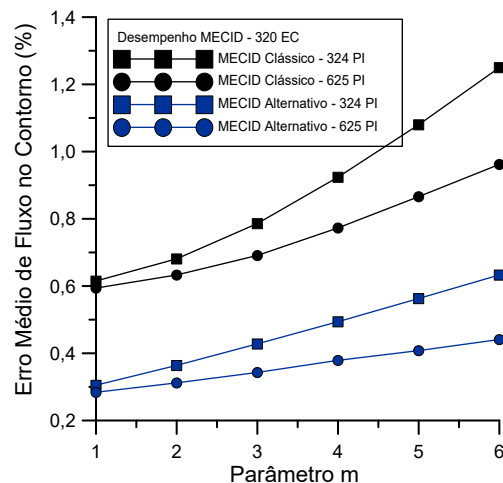


Figura 64 – C8E4 - Análise de Desempenho do MECID

A formulação MECID alternativa mostra-se mais precisa do que a versão clássica da MECID, tal como nos três exemplos anteriormente testados. Tal consistência é um ótimo indicativo para a nova proposta, que não só parece ser mais precisa, como também mais resiliente aos efeitos de advecção moderada.

8.3 Conclusões do Capítulo

A priori é relevante salientar que a formulação da MECID alternativa proposta neste capítulo, tal como seus pares, MECID clássica e MECDR, tem seus comportamentos fortemente influenciados pelo modelo de governo solucionado e, em especial, pela natureza constante ou variável do divergente de velocidade.

De forma geral, em termos de precisão, pode-se afirmar que a MECID alternativa aqui proposta foi mais consistente frente a efeitos advectivos moderados e apresentou-se mais precisa que seus pares, em comparação cruzada, em todos os casos testados, o que atesta sua consistência e robustez.

A estrutura matemática da formulação proposta apresenta um híbrido entre uma aproximação de integrais de domínio com a filosofia da interpolação direta (MECID) e uma aproximação do campo primal análogo ao feito na dupla reciprocidade (MECDR), com vistas em aproximar as derivadas do termo advectivo. Tal estrutura híbrida reflete de forma clara nos resultados, quando a formulação até certa magnitude de efeitos advectivos se comporta análoga ao MECDR, e com a continuidade da intensificação de tais efeitos passa a ressaltar características da MECID.

A formulação alternativa proposta neste capítulo foi testada em dois casos difusivo-advectivos, um caso com adição de termo reativo e um último com presença de termo fonte. Tais modelos testados mostram que o MECID alternativo é capaz de gerar desempenho satisfatório em virtualmente qualquer equação de transporte estacionária. Como contraponto, também é importante colocar que o termo reativo no terceiro exemplo estava acoplado ao campo de velocidades, tal como o termo fonte do quarto exemplo. Este acoplamento, em certo grau, alerta-nos a um maior cuidado no levantamento de conclusões mais gerais.

Por fim, a maior resiliência da nova formulação aqui proposta aos efeitos de advecção moderada é motivador e caracteriza um avanço em relação aos métodos já existentes de dupla reciprocidade, e também em relação a própria formulação do MECID clássica. Tal resiliência e precisão devem-se, provavelmente, a manter o divergente de velocidade implícito na formulação matemática, uma vez que, explicita-lo e trata-lo em separado, tal como feito na MECID clássica e testado no capítulo anterior não se mostrou a estratégia mais precisa, em especial para cenários físicos com divergente variável do campo hidrodinâmico.

9 Conclusões Gerais

Neste capítulo final são expostas, de forma consolidada, as principais conclusões e inferências gerais acerca dos resultados gerados nesta tese. Cabe salientar que as conclusões parciais acerca de cada formulação da MECID proposta, num total de duas, foram previamente expostas ao final dos Capítulos 6 e 7, no tocante à MECID clássica e no 8, no referente à MECID alternativa.

Na sequência são postas as conclusões gerais geradas por esta tese:

- A formulação MECID padrão, denominada clássica, que abordou modelos difusivo-advectivos com campo uniforme de velocidade, mostrada no Capítulo 6, apresenta-se como ferramenta robusta e viável em termos de precisão e resiliência a efeitos moderados de advecção, quando comparada à técnica da dupla reciprocidade (MECDR). Não obstante a superioridade apresentada pela formulação MECID sobre o MECDR nestes casos, confirma-se, de forma recorrente, a necessidade de um maior quantitativo de pólos internos por parte da MECID, tal como em outros problemas de campo escalar previamente testados. A contribuição científica dos testes deste Capítulo 6, para a tese, se deram no sentido de consolidar a formulação MECID clássica testada como uma opção viável para solucionar modelos advectivo-difusivos em cenários de advecção moderada, em contraste a MECDR que, ao que indicam os resultados, tem precisão restrita a cenários com fraca advecção.
- Na formulação MECID clássica aplicada a problemas com campo de velocidade variável, proposta no Capítulo 7, destaca-se a grande influência exercida pelo formato do divergente de velocidade no desempenho da formulação. Os testes numéricos indicam para um comportamento mais preciso da proposta nos casos em que o divergente da velocidade é constante, seja nulo ou não, quando comparada à MECDR. Por outro lado, para o caso em que o divergente de velocidade é variável, o MECID clássico tem menor precisão e demanda um nível substancialmente maior de refinamento para obter precisão pareada com a da MECDR. Tal dificuldade em lidar com valores variáveis do divergente se deve a forma explícita com que este termo aparece na formulação integral proposta da MECID, diferentemente da formulação do MECDR, que trata o termo de forma implícita. A principal contribuição associada a este Capítulo 7 foi a de testar a formulação MECID clássica em cenários de campo de velocidade variável, uma vez que, até então os resultados já documentados em literatura se restringiam a cenários com campo de velocidade uniforme (PINHEIRO; LOEFFLER; MANSUR, 2022).

- Há inferências interessantes acerca da sensibilidade à quantidade e ao posicionamento dos pontos internos interpolantes, tanto em relação à formulação MECID clássica quanto à MECDR nas aplicações ao campo de velocidade variável, proposta no Capítulo 7. No que tange a MECID, pode-se constatar uma dependência não só em relação ao quantitativo, mas também ao posicionamento da distribuição interna dos polos no domínio computacional. O MECDR que tradicionalmente apresenta pouca sensibilidade a inserção de polos internos, mostra nesta aplicação claro ganho de precisão com a introdução destes, provavelmente devido a necessidade de boa representação das derivadas espaciais.
- No tocante ao esquema de integração numérica, os testes comparativos entre a quadratura Gaussiana clássica e o esquema adaptativo de Telles são efetuados, para todos os casos, no Capítulo 7. Os resultados gerados indicam que a MECDR é sensível ao uso da quadratura de Telles, uma vez que, seu sistema matricial final apresenta as matrizes $[H]$ e $[G]$ tanto no lado difusivo quanto no advectivo. Como os coeficientes destas matrizes englobam integrações singulares e quase-singulares a melhoria é robusta e consistente, com a utilização de menos pontos de Gauss, inclusive. Em contrapartida, a formulação MECID clássica mostrou-se praticamente insensível à implementação da quadratura adaptativa.
- A formulação MECID alternativa proposta para melhor modelagem dos campos de velocidade variável, proposta no Capítulo 8, mostrou-se mais precisa e resiliente a efeitos advectivos e de compressibilidade em todos os casos testados, inclusive com presença de termo reativo e fonte. O bom desempenho da formulação provavelmente pode ser atribuído à aproximação mais consistente de todo o núcleo da integral de domínio, característico do MECID, com uma aproximação análoga à feita pela MECDR no campo primal para determinação das derivadas do campo, o que torna a abordagem do divergente do campo de velocidade implícita, tal como a da MECDR. Este Capítulo 8 tem como principal contribuição para esta tese a proposta e validação de uma formulação alternativa do MECID que mostra-se mais robusta e precisa que a MECDR e que a própria formulação MECID clássica em cenários físicos de advecção moderada.
- A estrutura matemática da formulação MECID alternativa apresenta um modelo híbrido entre uma aproximação completa do núcleo das integrais de domínio com uma aproximação do campo das derivadas do termo advectivo, de modo análogo ao feito na MECDR. Tal estrutura híbrida tem reflexo direto nos resultados gerados pela proposta, uma vez que, a formulação, até certa magnitude de efeitos advectivos, se comporta análoga ao MECDR, a saber, sem muita sensibilidade ao adensamento de polos internos, e, a partir daí, muda de comportamento, adquirindo ganho de precisão em resposta ao adensamento de pólos internos.

- Em síntese, em problemas de difusão-advecção, utilizando-se a MECID foi possível transformar com maior precisão a integral de domínio composta pelo termo de transporte, seja nos casos com divergente nulo ou não. Nestes últimos, típicos de problemas compressíveis, uma vez que o núcleo da integral de transporte se compõe de duas parcelas, o emprego da MECID na forma clássica não foi tão bem sucedido. Assim, unindo os dois termos numa única parcela e aproximando-a através da sequência típica de funções radiais seguindo a filosofia da MECID, e operando posteriormente os termos relacionados às derivadas espaciais, segundo a metodologia usada na MECIDR, resultados de melhor precisão puderam ser alcançados.
- O conteúdo aqui apresentado reforça, então, conclusões anteriormente inferidas de outros trabalhos que resolveram problemas de campo escalar, relativamente ao melhor desempenho da MECID em face de outras técnicas do MEC que transformam integrais de domínio em integrais de contorno. Além dos problemas de Poisson e Helmholtz, os desafiantes problemas de difusão-advecção puderam ser resolvidos satisfatoriamente para cenários cuja magnitude dos efeitos de transporte advectivo e dos efeitos de compressibilidade se mantenha moderada.

9.1 Continuidade de Linha de Pesquisa

A continuidade desta linha de pesquisa no tocante a modelos difusivo-advectivos pode ser feita de inúmeras maneiras, dentre as quais destacam-se as seguintes proposições:

- Avançar os testes numéricos em direção a problemas com domínios tridimensionais, meios não-homogêneos, problemas não-lineares e problemas com marcha no tempo, no intuito de determinar as limitações e potencialidades das formulações MECID, clássica e alternativa, propostas nesta tese.
- Estender os testes com a formulação MECID alternativa para cenários com advecção intensa. Esta potencial linha de investigação se fundamenta na magnitude de erro médio apresentada por esta formulação em cenários de moderada advecção. Espera-se que a precisão da MECID alternativa seja satisfatória até intensidade moderada para intensa dos efeitos advectivos, e que, a partir deste ponto, a técnica perca precisão e coerência com a física do problema-teste, tal como todas as outras formulações que empregam aproximação via bases radiais, e que, normalmente, não envolvem a solução fundamental correlata ao modelo de advecção-difusão.
- Adaptar a decomposição do campo de velocidade em uma média, $\bar{u}(X)$, adicionada de uma flutuação, $\tilde{u}(X)$, tal como proposto no trabalho de Wrobel ([WROBEL; FIGUEIREDO, 1991](#)), à formulação MECID alternativa do Capítulo 8, no intuito de gerar uma proposta potencialmente capaz de lidar com efeitos advectivos intensos.

Espera-se que esta proposta tenha êxito, pois já foi testada em literatura para a MECDR, com capacidade de representar cenários com intensa advecção. Ao considerar os resultados apresentados nesta tese, a aproximação das integrais de domínio pela MECID mostra-se robusta e superior àquela proposta pela MECDR, no que diz respeito a modelos de advecção-difusão.

Referências

- ABRAMOWITZ, M. S.; STEGUN, I. Ia.(1964), handbook of mathematical functions. *Washington: National Bureau of Standards*, p. 923, 1999. Citado 3 vezes nas páginas [54](#), [55](#) e [61](#).
- AL-BAYATI, S. A. *Boundary element analysis for convection-diffusion-reaction problems combining dual reciprocity and radial integration methods*. Tese (Doutorado) — Brunel University London, 2018. Citado na página [17](#).
- AL-BAYATI, S. A.; WROBEL, L. C. The dual reciprocity boundary element formulation for convection-diffusion-reaction problems with variable velocity field using different radial basis functions. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 145, p. 367–377, 2018. ISSN 0020-7403. Citado 8 vezes nas páginas [21](#), [22](#), [23](#), [24](#), [102](#), [111](#), [113](#) e [129](#).
- AL-BAYATI, S. A.; WROBEL, L. C. A novel dual reciprocity boundary element formulation for two-dimensional transient convection–diffusion–reaction problems with variable velocity. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 94, p. 60–68, 2018. ISSN 0955-7997. Citado na página [22](#).
- AL-BAYATI, S. A.; WROBEL, L. C. Radial integration boundary element method for two-dimensional non-homogeneous convection–diffusion–reaction problems with variable source term. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 101, p. 89–101, 2019. ISSN 0955-7997. Citado na página [21](#).
- BALISTA, T. G. et al. Comparisons between direct interpolation and reciprocity techniques of the boundary element method for solving two-dimensional helmholtz problems. *Engineering Computations*, Emerald Publishing Limited, 2023. Citado na página [45](#).
- BARBOSA, J.; LOEFFLER, C.; LARA, L. The direct interpolation boundary element technique applied to three-dimensional scalar free vibration problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 108, p. 295 – 300, 2019. ISSN 0955-7997. Citado 3 vezes nas páginas [24](#), [77](#) e [111](#).
- BARBOSA, J. P.; LOEFFLER, C. F. Application of boundary element method superposition technique for solving natural frequencies in piecewise homogeneous domains. *Computers & Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 79, n. 4, p. 1131–1144, 2020. Citado na página [24](#).
- BATHE, K.-J. *Finite element procedures*. [S.l.]: Prentice-Hall, 1996. Citado 4 vezes nas páginas [16](#), [29](#), [36](#) e [40](#).
- BECKER, E. B.; CAREY, G. F.; ODEN, J. T. *Finite Elements, An Introduction: Volume I*. [S.l.]: Prentice-Hall, 1981. Citado 4 vezes nas páginas [16](#), [28](#), [36](#) e [40](#).
- BOKOTA, A.; ISKIERKA, S. An analysis of the diffusion-convection problem by the boundary element method. *Engineering analysis with boundary elements*, Elsevier, v. 15, n. 3, p. 267–275, 1995. Citado 2 vezes nas páginas [18](#) e [29](#).

- BREBBIA, C. *The Boundary Element Method for Engineers*. [S.l.]: Pentech press, 1978. Citado na página 16.
- BREBBIA, C. *Boundary element methods in engineering*. [S.l.]: Springer New York, NY, USA:, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 60 e 65.
- BREBBIA, C. A.; DOMINGUEZ, J. *Boundary elements: an introductory course*. [S.l.]: WIT press, 1994. Citado 8 vezes nas páginas 16, 32, 35, 54, 60, 82, 92 e 118.
- BREBBIA, C. A.; TELLES, J. C. F.; WROBEL, L. C. *Boundary element techniques: theory and applications in engineering*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado 11 vezes nas páginas 16, 21, 29, 30, 35, 42, 54, 76, 79, 118 e 122.
- BREBBIA, C. A.; WALKER, S. *Boundary Element Techniques in Engineering*. [S.l.]: Newnes-Butterworths, 1980. Citado 7 vezes nas páginas 17, 34, 35, 47, 49, 63 e 99.
- BREBBIA, C. A.; WROBEL, L. A. The solution of parabolic problems using the dual reciprocity boundary element. In: CRUSE, T. A. (Ed.). *Advanced Boundary Element Methods*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1988a. p. 55–71. Citado na página 22.
- BUHMANN, M. D. *Radial basis functions: theory and implementations*. [S.l.]: Cambridge university press, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 49, 70 e 77.
- BULCÃO, A. *Formulação do Método dos Elementos de Contorno com Dupla Reciprocidade Usando Elementos de Ordem Superior Aplicação a Problemas de Campo Escalar Generalizado*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Espírito Santo, 1999. Citado 4 vezes nas páginas 26, 45, 56 e 69.
- BURMEISTER, L. C. *Convective heat transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 76.
- BUTKOV, E. *Física matemática*. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 1988. Citado 3 vezes nas páginas 32, 34 e 47.
- CARRER, J. et al. Solution of two-dimensional diffusion–advection problems for non-isotropic media with spatially variable velocity field by the boundary element method. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 43, n. 1, p. 1–15, 2021. Citado na página 21.
- CAVALCANTI, M.; TELLES, J. Biot’s consolidation theory—application of bem with time independent fundamental solutions for poro-elastic saturated media. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 27, n. 2, p. 145 – 157, 2003. ISSN 0955-7997. Recent Innovations in BEM -Part ii. Citado na página 23.
- CLOUGH, R. W. The finite element method in plane stress analysis. In: *Proceedings of 2nd ASCE Conference on Electronic Computation, Pittsburgh PA., Sept.* [S.l.: s.n.], 1960. p. 345–378. Citado na página 16.
- CUNHA, C. et al. A study concerning the solution of advection–diffusion problems by the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 65, p. 79 – 94, 2016. ISSN 0955-7997. Citado na página 21.

- DAN, M. L.; LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. A transformation of variables technique applicable to the boundary element method to simulate a special class of diffusive-advective potential problems. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, SciELO Brasil, v. 34, p. 9–17, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 107 e 126.
- FORTUNA, A. de O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Flúidos Vol. 30*. [S.l.]: Edusp, 2000. Citado na página 15.
- FUNG, Y. C. *A first course in continuum mechanics*. [S.l.]: Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, Inc, 1977. Citado na página 75.
- GAO, X.-W. The radial integration method for evaluation of domain integrals with boundary-only discretization. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Elsevier, v. 26, n. 10, p. 905–916, 2002. Citado na página 47.
- GREEN, G. *An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theories of Electricity and Magnetism: Originally Published at Nottingham in 1828*. [S.l.]: George Green Memorial Committee, 1828. Citado na página 16.
- HADAMARD, J. *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations*. [S.l.]: Courier Corporation, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 77.
- HAYAMI, K.; BREBBIA, C. A new coordinate transformation method for singular and nearly singular integrals over general curved boundary elements. In: *Mathematical and Computational Aspects*. [S.l.]: Springer, 1987. p. 375–399. Citado na página 54.
- HONMA, T.; TANAKA, Y.; KAJI, I. Regular boundary element solutions to steady-state convective diffusion equations. *Engineering Analysis*, v. 2, n. 2, p. 95 – 99, 1985. ISSN 0264-682X. Citado na página 21.
- HUGHES, T. J.; SCOVAZZI, G.; TEZDUYAR, T. E. Stabilized methods for compressible flows. *Journal of Scientific Computing*, Springer, v. 43, n. 3, p. 343–368, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 23.
- IKEUCHI, M.; ONISHI, K. Boundary element solutions to steady convective diffusion equations. *Applied Mathematical Modelling*, v. 7, n. 2, p. 115 – 118, 1983. ISSN 0307-904X. Citado na página 23.
- IKEUCHI, M.; SAKAKIHARA, M. Boundary elements in steady convective diffusion problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 12-13, p. 381 – 389, 1985. ISSN 0377-0427. Citado na página 23.
- INCROPERA, F. P. et al. *Fundamentos de Transferência de Calor e Massa. 6ª edição*. [S.l.]: Rio de Janeiro: LTC, 2008. Citado na página 73.
- JOHNSTON, P. R.; ELLIOTT, D. A generalisation of telles' method for evaluating weakly singular boundary element integrals. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 131, n. 1, p. 223 – 241, 2001. ISSN 0377-0427. Citado na página 54.
- KAPLAN, W. *Advanced calculus*. [S.l.]: Cambridge, Mass., Addison-Wesley Press, 1952. Citado na página 61.

- KATSIKADELIS, J. T. *The boundary element method for engineers and scientists: theory and applications*. [S.l.]: Academic Press, 2016. Citado 5 vezes nas páginas 16, 60, 76, 79 e 81.
- KONTONI, D.; BESKOS, D. Transient dynamic elastoplastic analysis by the dual reciprocity bem. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 12, n. 1, p. 1 – 16, 1993. ISSN 0955-7997. Citado na página 22.
- KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics: 2d Ed.* [S.l.]: J. Wiley, 1967. Citado 4 vezes nas páginas 29, 33, 55 e 61.
- KREYSZIG, E. *Matemática Superior para Engenharia-Volumes 1, 2 e 3*. [S.l.]: LTC, Rio da Janeiro,, 2001. Citado na página 99.
- KREYSZIG, E. *Differential geometry*. [S.l.]: Courier Corporation, 2013. Citado na página 38.
- KYTHER, P. K. *An introduction to boundary element methods*. [S.l.]: CRC press, 1995. Citado na página 82.
- LOEFFLER, C. Modelos mecânicos derivados da equação de campo escalar generalizada. *Revista Militar de Ciência e Tecnologia*, v. 9, p. 24–38, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 26, 29 e 30.
- LOEFFLER, C.; COSTALONGA, F. Hyper-singular dual reciprocity boundary element formulation applied to diffusive-advective problems. *Advances in Boundary Element and Meshless Techniques XIII*, ECIted, p. 200–205, 2012. Citado na página 89.
- LOEFFLER, C.; MANSUR, W. Dual reciprocity boundary element formulation for potential problems in infinite domains. *Boundary Elements X*, p. 155–163, 1988. Citado na página 62.
- LOEFFLER, C.; MANSUR, W. Dual reciprocity boundary element formulation for transient elastic wave propagation analysis in infinite domains. *Advances in Boundary Elements*, Comp. Mech. Pub., Springer-Verlag, v. 2, p. 231–240, 1989. Citado na página 62.
- LOEFFLER, C. et al. Performance of compact radial basis functions in the direct interpolation boundary element method for solving potential problems. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, Tech Science Press, v. 113, n. 3, p. 367–387, 2017. Citado 4 vezes nas páginas 70, 77, 79 e 92.
- LOEFFLER, C. F. *Uma Formulação Alternativa do Método dos Elementos de Contorno aplicada a Problemas de Campo Escalar*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 34.
- LOEFFLER, C. F.; CRUZ, A. L.; BULCÃO, A. Direct use of radial basis interpolation functions for modelling source terms with the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 50, p. 97 – 108, 2015. ISSN 0955-7997. Citado 5 vezes nas páginas 24, 49, 77, 85 e 92.
- LOEFFLER, C. F.; DAN, M. L. Modeling of a forced convection problem with compressive flow through the diffusive-advective equation (in portuguese). *Engineering, Science and Technological Journal*, Centro Tecnológico, v. 7, p. 21–25, 2004. Citado na página 126.

- LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. Analysis of time integration schemes for boundary element applications to transient wave propagation problems. In: *Computational Mechanics Publications, Southampton*. [S.l.]: BETECH, 1987. p. 105–124. Citado na página [22](#).
- LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. Dual reciprocity boundary element formulation for potential problems in infinite domains. In: *Boundary Elements X*. Berlin and New York: [s.n.], 1988. v. 2, p. 155–163. Citado na página [22](#).
- LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. Boundary element formulation for transient elastic wave propagation in infinite domains. In: *Boundary Elements XI*. Berlin and New York: [s.n.], 1989. v. 2, p. 231–240. Citado na página [22](#).
- LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. Quasi-dual reciprocity boundary-element method for incompressible flow: Application to the diffusive–advective equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 58, n. 8, p. 1167–1186, 2003. Citado na página [22](#).
- LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. A regularization scheme applied to the direct interpolation boundary element technique with radial basis functions for solving eigenvalue problem. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 74, p. 14 – 18, 2017. ISSN 0955-7997. Citado 7 vezes nas páginas [24](#), [49](#), [77](#), [82](#), [119](#), [120](#) e [121](#).
- LOEFFLER, C. F. et al. Solving helmholtz problems with the boundary element method using direct radial basis function interpolation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 61, p. 218 – 225, 2015. ISSN 0955-7997. Citado 5 vezes nas páginas [17](#), [24](#), [83](#), [85](#) e [92](#).
- LUIZ, T. F.; TELLES, J. C. F. Application of the boundary element method to three-dimensional potential problems in heterogeneous media. *Computational Mechanics*, Springer, v. 42, n. 3, p. 431–440, 2008. Citado na página [23](#).
- MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2007. Citado 2 vezes nas páginas [28](#) e [29](#).
- MASSARO, C. *O Método dos Elementos de Contorno Aplicado na Solução de Problemas de Transferência de Calor Difusivos-Advectivos*. Dissertação (Mestrado) — Dissertação de mestrado, UFES, 2001. Citado 2 vezes nas páginas [61](#) e [107](#).
- MAZUMDER, S. *Numerical methods for partial differential equations: finite difference and finite volume methods*. [S.l.]: Academic Press, 2015. Citado na página [16](#).
- MONEGATO, G.; SLOAN, I. H. Numerical solution of the generalized airfoil equation for an airfoil with a flap. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 34, n. 6, p. 2288–2305, 1997. Citado na página [54](#).
- MOON, P.; SPENCER, D. E. *Field theory handbook: including coordinate systems, differential equations and their solutions*. [S.l.]: Springer, 2012. Citado na página [26](#).
- NARDINI, D.; BREBBIA, C. A new approach to free vibration analysis using boundary elements. *Applied Mathematical Modelling*, v. 7, n. 3, p. 157 – 162, 1983. ISSN 0307-904X. Citado 4 vezes nas páginas [22](#), [45](#), [62](#) e [70](#).

- NOWAK, A. The multiple reciprocity method of solving transient heat conduction problems. *Boundary Elements XI*, Computational Mechanics Publications and Springer-Verlag Southampton and Berlin, v. 2, 1989. Citado na página 43.
- NOWAK, A.; BREBBIA, C. Numerical verification of the multiple reciprocity method for linear potential problems with body forces. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 10, n. 3, p. 259 – 266, 1992. ISSN 0955-7997. Citado na página 22.
- NOWAK, A. J.; BREBBIA, C. A. The multiple-reciprocity method. a new approach for transforming bem domain integrals to the boundary. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Elsevier, v. 6, n. 3, p. 164–167, 1989. Citado na página 43.
- ÖZİŞİK, M. N. et al. *Finite difference methods in heat transfer*. [S.l.]: CRC press, 2017. Citado 5 vezes nas páginas 15, 17, 28, 30 e 31.
- PARTRIDGE, P.; BREBBIA, C. On derivatives of the problem unknowns in bem analysis. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 7, n. 1, p. 50–52, 1990. ISSN 0955-7997. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 89.
- PARTRIDGE, P.; BREBBIA, C.; WROBEL, L. *The Dual Reciprocity Boundary Element Method*, (1992). [S.l.: s.n.], 1992. Citado 5 vezes nas páginas 43, 62, 63, 70 e 119.
- PARTRIDGE, P. W.; BREBBIA, C. A. Computer implementation of the bem dual reciprocity method for the solution of general field equations. *Communications in Applied Numerical Methods*, v. 6, n. 2, p. 83–92, 1990. Citado 3 vezes nas páginas 24, 62 e 87.
- PASQUETTI, R.; CARUSO, A. Boundary element approach for transient and nonlinear thermal diffusion. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor Francis, v. 17, n. 1, p. 83–99, 1990. Citado na página 23.
- PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. [S.l.]: Taylor & Francis, 1980. Citado na página 16.
- PETTRES, R.; CIRILO, E. R. A first advective velocity study in porous media using temperature measures and boundary element formulation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 121, p. 217–232, 2020. ISSN 0955-7997. Citado na página 21.
- PETTRES, R.; LACERDA, L. A. de. Numerical analysis of an advective diffusion domain coupled with a diffusive heat source. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 84, p. 129–140, 2017. ISSN 0955-7997. Citado na página 21.
- PINHEIRO, V. et al. Técnica de interpolação direta de elementos de contorno aplicada a um modelo advectivo-difusivo com campo de velocidade variável incompressível. In: *XL Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*. Campo Grande, UFMS: [s.n.], 2021a. Citado na página 104.
- PINHEIRO, V. et al. A brief performance analysis of direct integration technique applied on bidimensional advective-diffusive problems with variable velocity fields. In: *Proceedings of the XLI Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Foz do Iguaçu: [s.n.], 2020. Citado 2 vezes nas páginas 105 e 118.
- PINHEIRO, V. et al. Application of the direct interpolation boundary element technique with self-adaptative integration to bidimensional diffusive-advective problems. In:

Proceedings of the XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering and III Pan-American Congress on Computational Mechanics. Rio de Janeiro: [s.n.], 2021b. Citado na página 106.

PINHEIRO, V. et al. Efficacy of an adaptive integration scheme on the numerical performance of dibem applied to the solution of compressible diffusive-advective problems. In: *Proceedings of the XLIII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*. Foz do Iguaçu: [s.n.], 2022. Citado na página 106.

PINHEIRO, V. P. *Aplicação do Método de Elementos de Contorno com Integração Direta Regularizada a Problemas Advectivo-Difusivos Bidimensionais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Espírito Santo, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 76, 78, 81 e 93.

PINHEIRO, V. P.; LOEFFLER, C. F.; MANSUR, W. J. Boundary element method solution of stationary advective–diffusive problems: A comparison between the direct interpolation and dual reciprocity technique. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Elsevier, v. 142, p. 39–51, 2022. Citado 3 vezes nas páginas 24, 118 e 136.

PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. [S.l.]: CRC press, 2012. Citado 4 vezes nas páginas 15, 17, 29 e 73.

POPOV, V.; POWER, H. The drm-md integral equation method: an efficient approach for the numerical solution of domain dominant problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 44, n. 3, p. 327–353, 1999. Citado na página 22.

QIU, Z. H.; WROBEL, L. C.; POWER, H. Numerical solution of convection–diffusion problems at high péclét number using boundary elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 41, n. 5, p. 899–914, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 23.

RAMACHANDRAN, P. *Boundary element methods in transport phenomena*. [S.l.]: London, UK: Computacional Mechanics Publication and Elsevier Applied Science, 1994. Citado 5 vezes nas páginas 21, 22, 59, 61 e 63.

REDDY, J. *An introduction to the finite element method, 2nd ed.* [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 16, 28 e 98.

REDDY, J. N. *Principles of continuum mechanics: A study of conservation principles with applications*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 118.

ROACHE, P. J. *Fundamentals of computational fluid dynamics*. [S.l.]: Albuquerque, NM: Hermosa Publishers, 1998. Citado na página 23.

SANTOS, A. de Jesus dos. *Estudo do desempenho do Método dos Elementos de Contorno utilizando esquema de integração autoadaptativo em problemas de campo escalar bidimensionais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Espírito Santo, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 69 e 106.

SCHLICHTING, H.; GERSTEN, K. *Boundary-layer theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 60, 75 e 76.

SINGH, K.; TANAKA, M. On accurate evaluation of boundary element integrals for

- advection–diffusion and helmholtz equations. In: SN. *Proceedings of the 15th JASCOME Symposium on BEM, JASCOME, Tokyo, Japan*. [S.l.], 1998. p. 1–6. Citado na página 61.
- SPITZER, K.-H. et al. Mathematical model for thermal tracking and on-line control in continuous casting. *ISIJ International*, v. 32, n. 7, p. 848–856, 1992. Citado na página 23.
- TAIGBENU, A. Three green element models for the diffusion–advection equation and their stability characteristics. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 23, n. 7, p. 577 – 589, 1999. ISSN 0955-7997. Citado na página 22.
- TANAKA, M. et al. A boundary element investigation of natural convection problems. *Advances in Water Resources*, v. 11, n. 3, p. 139 – 143, 1988. ISSN 0309-1708. Citado na página 21.
- TELLES, J.; OLIVEIRA, R. Third degree polynomial transformation for boundary element integrals: Further improvements. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 13, n. 2, p. 135 – 141, 1994. ISSN 0955-7997. Citado na página 54.
- TELLES, J.; OLIVEIRA, R. Third degree polynomial transformation for boundary element integrals: further improvements. *Engineering analysis with boundary elements*, Elsevier, v. 13, n. 2, p. 135–141, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 57 e 106.
- TELLES, J. C. F. A self-adaptive co-ordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element integrals. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 24, n. 5, p. 959–973, 1987. Citado 4 vezes nas páginas 54, 55, 56 e 57.
- TELLES, J. C. F. A self-adaptive co-ordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element integrals. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 24, n. 5, p. 959–973, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 86 e 106.
- TIKHONOV, A. N.; SAMARSKII, A. A. *Equations of mathematical physics*. [S.l.]: Courier Corporation, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. [S.l.]: Pearson education, 2007. Citado na página 16.
- WROBEL, L.; BREBBIA, C. The dual reciprocity boundary element formulation for nonlinear diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 65, n. 2, p. 147 – 164, 1987. ISSN 0045-7825. Citado na página 22.
- WROBEL, L.; DEFIGUEIREDO, D. A dual reciprocity boundary element formulation for convection-diffusion problems with variable velocity fields. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 8, n. 6, p. 312 – 319, 1991. ISSN 0955-7997. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 24.
- WROBEL, L.; FIGUEIREDO, D. D. Numerical analysis of convection-diffusion problems using the boundary element method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, MCB UP Ltd, v. 1, n. 1, p. 3–18, 1991. Citado 3 vezes nas páginas 17, 21 e 138.
- WROBEL, L. C. *The boundary element method, applications in thermo-fluids and acoustics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 65.

- WROBEL, L. C.; ALIABADI, M. The boundary element method: Applications in solids and structures. John Wiley & Sons Inc, 2002. Citado na página 49.
- WROBEL, L. C.; BREBBIA, C. A. Boundary elements for non-linear heat conduction problems. *Communications in Applied Numerical Methods*, v. 4, n. 5, p. 617–622, 1988b. Citado na página 22.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. *The finite element method: its basis and fundamentals*. [S.l.]: Elsevier, 2005. Citado na página 16.
- ZILL, C. A.; TELLES, J. C. F.; WROBEL, L. C. *Boundary element techniques: theory and applications in engineering*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 65.
- ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. *Matemática Avançada para Engenharia*. [S.l.]: Bookman Editora, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 61.
- ŠKERGET, L.; HRIBERŠEK, M.; KUHN, G. Computational fluid dynamics by boundary–domain integral method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 46, n. 8, p. 1291–1311, 1999. Citado na página 22.