APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO A PROBLEMAS DE POTENCIAL TRIDIMENSIONAL EM MEIOS HETEROGÊNEOS

Thilene Falcão Luiz

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

Aprovada por:

_____
Prof. José Claudio de Faria Telles, Ph. D.

_____
Prof. José Paulo Soares de Azevedo, Ph. D.

_____
Prof. José Antonio Fontes Santiago, D. Sc.

_____
Prof[a]. Simone Louise Delarue Cezar Brasil, D.Sc.

_____
Prof. Delfim Soares Júnior, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
JUNHO DE 2006

LUIZ, THILENE FALCÃO

Aplicação do Método dos Elementos de Contorno a problemas de potencial tri-dimensional em meios heterogêneos [Rio de Janeiro] 2006

IX, 92 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc., Engenharia Civil, 2006)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Método dos Elementos de Contorno

2. Potencial em Meios Heterogêneos

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

À minha Cidinha,
eterna mãe e amiga.

AGRADECIMENTOS

À minha família, pelo apoio, motivação, carinho e dedicação em todos os momentos.

Ao meu marido, André Vinícius, por seu apoio incondicional em todos os sentidos.

Ao meu orientador, José Claudio de Faria Telles, pela dedicação, incentivo e compreensão ao longo dessa jornada, na qual fomos surpreendidos por lamentáveis acontecimentos, mas felizmente, saímos vencedores.

À minha amiga, Neyva Maria Lopes Romeiro, a quem devo minha passagem pela COPPE e sempre me apoiou.

Aos meus amigos, funcionários e professores do LAMEC, que tanto me ajudaram com seu carinho e solidariedade.

Ao Professor José Paulo Soares de Azevedo e ao Gustavo Pincirolli por terem cedido gentilmente o programa MEC3D.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

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

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO A PROBLEMAS DE POTENCIAL TRIDIMENSIONAL EM MEIOS HETEROGÊNEOS

Thilene Falcão Luiz

Junho/2006

Orientador: José Claudio de Faria Telles

Programa: Engenharia Civil

O presente trabalho apresenta a solução do problema de potencial, em meios heterogêneos, para o caso tridimensional, envolvendo condições de contorno não-lineares. Este problema é representado matematicamente pela equação de Laplace e a técnica empregada foi o Método de Elementos de Contorno (MEC), utilizando campos corretivos de velocidades que simulam a variação da permeabilidade dos meios.

Através dela chega-se a uma equação integral que pode ser discretizada em elementos de superfície, no caso das integrais de contorno e em células, para as integrais de domínio. O processo se divide em dois sistemas: principal, envolvendo o cálculo do potencial em todos os pontos e secundário, que determina o campo corretivo das derivadas do potencial em relação a normal, em todos os pontos das células.

Nos exemplos serão apresentadas comparações envolvendo outros métodos numéricos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

APPLICATION OF THE BOUNDARY ELEMENT METHOD TO THREE-DIMENSIONAL POTENTIAL PROBLEMS IN HETEROGENEOUS MEDIA

Thilene Falcão Luiz

June/2006

Advisor: José Claudio de Faria Telles

Department: Civil Engineering.

The present work presents three-dimensional potential solutions, defined within heterogeneous surroundings, involving nonlinear boundary conditions. The problem is represented mathematically by the Laplace equation and the technique adopted is the Boundary Element Method (BEM), herein using velocity correcting fields that simulate the variation of the domain permeability.

In this way, an integral equation that could be discretized using surface elements, for the boundary integrals and triangular cells, for existing domain integrals is obtained. The procedure is divided in two systems: principal, involving the calculation of potential in all these points and secondary, which determines the correcting field of the directional derivatives of potential in all cell points.

Comparisons with other numerical solutions are presented in the examples.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO.....1

CAPÍTULO II – MÉTODO DOS ELEMENTO DE CONTORNO 5

2.1 – Introdução..... 6
2.2 – Formulação Direta..... 6
2.3 – Identidades de Green..... 7
2.4 – Solução Fundamental..... 9
2.5 – Equação Integral de Contorno..... 10

CAPÍTULO III – MÉTODO DE SIMULAÇÃO DE UM CAMPO CORRETIVO DE VELOCIDADES (MSCCV)..... 12

3.1 – Introdução..... 13
3.2 – Desenvolvimento..... 13
3.3 – Derivada da Equação Integral para Meios Heterogêneos..... 17

CAPÍTULO IV – SISTEMAS DE EQUAÇÕES 21

4.1 – Introdução.....22
4.2 – Discretização do Contorno..... 22
4.2.1 – Características dos Elementos de Contorno..... 25
4.3 – Discretização do Domínio..... 30
4.3.1 – Características das Células..... 31
4.4 – Sistema de Equações de Acordo com Suas Condições de Contorno..... 33
4.4.1 – Potencial e/ou Fluxo Prescritos..... 34
4.4.2 – Análise Linear..... 37
4.4.3 – Análise Não Linear..... 38

CAPÍTULO V – INTEGRAÇÃO NUMÉRICA 42

5.1 – Introdução.....43
5.2 – Integrais Não Singulares..... 43
5.3 – Integrais Singulares 46
5.3.1 – Subdivisão dos Elementos..... 47
5.3.2 – Subdivisão das Células..... 53

CAPÍTULO VI – APLICAÇÕES 61

6.1- Introdução 62
6.2 – Exemplo 1..... 62
6.3 – Exemplo 2..... 65
6.4 - Exemplo 3 67
6.5 - Exemplo 4 69
6.6 - Exemplo 5 71
6.7 - Exemplo 6 73
6.7.1 – Potencial e/ou Fluxo Prescritos 74
6.7.2 – Análise Linear 75
6.7.3 – Análise Não Linear..... 77

CAPÍTULO VII – CONCLUSÕES 80

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 84

ANEXO A – Ingresso dos Elementos em HET3D 88

ANEXO B - Dedução da Equação que Rege o Fenômeno de Simulação de Proteção Catódica.....91

SÍMBOLOS

γ Coordenada no sistema local (coordenada intrínseca de domínio [-1,1]);

Γ Contorno da região fechada Ω;

δ Delta de Dirac;

Δ Incremento infinito;

ε Raio de uma vizinhança centrado no ponto fonte;

η Coordenada no sistema local;

ρ Coordenada radial no sistema polar local;

θ Coordenada angular no sistema polar local;

Ângulo sólido;

ξ Ponto genérico no contorno;

ϕ Função de interpolação espacial;

ψ Função de forma para os elementos;

φ Função de forma para as células;

w_k Fator de peso de *Gauss* associado à abscissa *k*;

∂ Diferencial parcial;

∇^2 Laplaciano;

$\cdot$ Produto escalar;

$\times$ Produto vetorial;

$\int$ Integral.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

Vários problemas físicos, como transferência de calor, condução elétrica em uma corrente contínua ou percolação em meios porosos são regidos pela equação de *Laplace*. Esta equação tem grande importância na física matemática, não só por descrever uma série de fenômenos estacionários, mas também por servir de base para solução de outras equações mais complicadas. O ramo da matemática destinado ao estudo das soluções da equação de *Laplace* é denominado de teoria do potencial. As maneiras de se encontrarem estas soluções são por meio de métodos analíticos ou métodos numéricos.

Métodos analíticos não são recomendados, pois mesmo em problemas mais simples, resultantes da esquematização das condições reais, apresentam-se complicados em suas soluções. No que diz respeito às esquematizações simplificadoras, estas em geral, afastam-se demasiadamente do problema de engenharia, podendo até conduzir a soluções que não se verificam na prática.

Porém, os métodos numéricos oferecem a possibilidade de solucionar problemas em condições complexas permitindo encontrar soluções para inúmeras variantes do problema em tempo satisfatório, pois contam com auxílio computacional na realização de seus cálculos.

Os métodos numéricos mais utilizados são o Método dos Elementos de Contorno (MEC), o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método das Diferenças Finitas (MDF).

O MDF aproxima os operadores diferenciais nas equações governantes do problema, usando expansões locais para as variáveis, geralmente séries de Taylor truncadas.

O MEF tem a particularidade de poder dividir o meio contínuo em uma série de elementos de forma geométrica simples, os quais podem se associar as diferentes partes físicas.

O MEC ([5] e [4]) consiste, basicamente, na transformação da equação diferencial que governa o problema em uma equação integral. Seu contorno pode ser discretizado em elementos de superfície e seu domínio por células, quando existir integral no domínio. A

partir desta discretização, suas integrais no contorno são aproximadas por integrações efetuadas em todos os elementos e, da mesma forma, para suas integrais no domínio em relação às células.

Tais integrais, geralmente obtidas numericamente, geram coeficientes de influência entre os diversos elementos e células que formam um sistema de equações onde relaciona o potencial e sua derivada normal em todos os elementos que aproximam o contorno. Se as condições de contorno do problema forem lineares, este sistema pode ser resolvido diretamente pelo método da eliminação de *Gauss*.

Quando se trata de problemas envolvendo meios heterogêneos em MEC, tradicionalmente, a técnica mais difundida e conhecida é o método de Sub-Regiões que consiste em separar o domínio em regiões distintas, utilizando interfaces. Através delas, seu domínio é dividido com a preocupação de que cada face da interface pertença a uma sub-região e sua implementação numérica é feita separadamente para cada sub-região. Seu contorno externo é discretizado independentemente e a discretização do interno, é feita por nós coincidentes aos domínios. Algumas dessas pesquisas para a aplicação na teoria do potencial podem ser vistas em Azevedo [2], Bialecki e Khun [3] e Gipson [10].

Outra alternativa foi apresentada por Kassab e Divo [12] para solução de problemas de condução de calor em regime estacionário com a condutividade térmica variando espacialmente, em princípio de maneira arbitrária, porém implementada com variação polinomial e exponencial. Esta técnica consiste na formulação da solução fundamental com o auxílio de uma função generalizada imposta com propriedades especiais de amostragem.

Para uma certa classe de problemas onde variação térmica é unidimensional, se destacam as pesquisas desenvolvidas por Clements e Larsson [8], envolvendo a função de *Green* em sua formulação e Shaw e Gipson [19], sobre uma nova função de *Green* de espaço infinito para o caso bi e tridimensional.

Apesar de já existirem vários métodos voltados para a teoria de potencial em meio não homogêneo, mesmo que em alguns deles existam certas limitações, recentemente outra técnica vem se mostrado bastante eficiente. Trata-se do Método de Simulação de um Campo Corretivo de Velocidades (MSCCV), inicialmente desenvolvido por Cavalcanti [7], à

resolução das equações de *Biot* referentes ao adesamento de meios poro-elásticos saturados e, posteriormente, por Luiz [14] no cálculo de potencial em meios heterogêneos para o caso bidimensional.

O MSCCV simula a condutividade dos meios através de um campo corretivo de velocidades dividindo coeficiente de condutividade, presente na solução fundamental, em um coeficiente constante e outro de variação nodal. Após a aplicação em todos os nós, chega-se a dois sistemas de equações denominados, respectivamente, de principal e secundário.

Portanto, motivados pelos bons resultados apresentados pelo MSCCV, o presente trabalho tem como objetivo aplicá-lo a teoria de potencial para o caso tridimensional, com condições de contorno lineares e não-lineares.

Para o caso de condições de contorno não-lineares optou-se pelas técnicas implícitas utilizando o método de *Newton-Raphson,* aplicadas anteriormente na solução de problemas viscoplásticos assimétricos (Telles [24]), problemas de torção elastoplástica de sólidos de revolução (Carrer [6]), problemas bidimensionais estáticos e dinâmicos transientes (Telles e Carrer [21]) e na análise elastoplástica tridimensional (Neitzel [16]).

O programa aqui desenvolvido (HET3D) foi iniciado a partir do programa MEC3DP, elaborado por Pincirolli [17] e que, por sua vez, foi baseado naquele desenvolvido por Silva [20], que deu origem a uma seqüência de programas com estruturas semelhantes e bem modulados em subrotinas, como os programas MEC3DE e CAV3D.

Inicialmente é apresentado um resumo sobre o Método dos Elementos de Contorno para a teoria do potencial envolvendo elementos quadrangulares, seguido pelo desenvolvimento da implementação do Método de Simulação de um Campo Corretivo de Velocidades e técnicas recomendadas para obtenção de melhores resultados.

Nas aplicações discutidas, também são apresentadas comparações com o resultado analítico e a Técnica de Sub-regiões do MEC.

Por fim, são feitas as considerações finais sobre o trabalho e sugeridos alguns desenvolvimentos futuros.

CAPÍTULO II

MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

CAPÍTULO II - MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

2.1 – Introdução

Apresenta-se neste capítulo a formulação direta do MEC para o problema de potencial tridimensional, governados pela equação de *Laplace*.

Primeiramente, a equação diferencial do problema com suas condições de contorno são transformadas em uma equação integral de contorno, a qual fornece o potencial em qualquer ponto no interior do domínio em função dos valores do potencial *(u)* e sua derivada normal ao contorno *(q)*. Este processo pode ser formulado a partir de equações de ponderação de resíduos. As funções de ponderação são usualmente denominadas de u^* e devem ser tais que permitam que a sentença final de resíduos ponderados não contenha integral de domínio envolvendo incógnitas.

Para que esta equação possa ser utilizada, faz-se necessário conhecer os valores de *u* e *q* em todo o contorno. Para isso, calcula-se o limite da expressão do potencial em ponto interno, quando este tende para o contorno. Este limite fornece uma equação integral que relaciona os valores de *u* e *q* no contorno.

Uma vez resolvido o problema no contorno, obtêm-se os valores do potencial e fluxo em pontos internos quaisquer.

2.2 – Formulação Direta

A equação que rege o problema de potencial pode ser dada pela equação de *Laplace*:

$$\nabla^2 u(x) = 0, \quad em\ \Omega \tag{2.1}$$

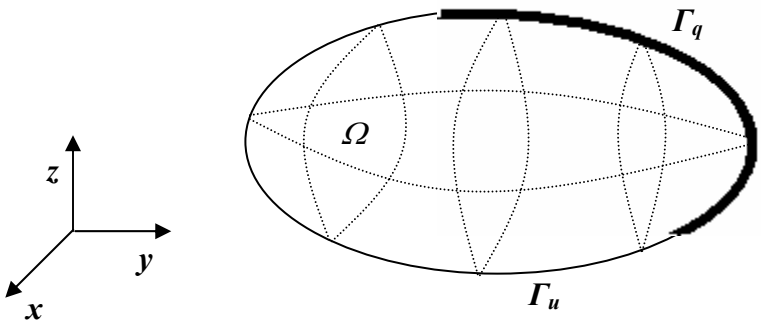


Figura 2.1 – Região tridimensional Ω onde $\Gamma = \Gamma_u \, U \, \Gamma_q$.

Para se determinar as soluções desta equação é necessário que se prescreva suas respectivas condições de contorno, as quais podem ser de dois tipos:

- Condições de contorno essenciais:

$$u(x) = \overline{u}(x),\ x \in \Gamma_u \tag{2.2}$$

- Condições de contorno naturais:

$$q(x) = K\frac{\partial u(x)}{\partial n} = \overline{q}(x),\ x \in \Gamma_q \tag{2.3}$$

onde *u(x)* representa o potencial e *q(x)*, o fluxo (coeficiente de condutividade multiplicado pela derivada do potencial na direção normal ao contorno).

2.3 – Identidades de *Green*

Recordando o teorema da divergência, de onde se tem que:

$$\int_{\Omega} f_{j,j}\, d\Omega = \int_{\Gamma} f_j n_j\, d\Gamma \ ^{1} \tag{2.4}$$

onde n_j são os co-senos diretores do vetor normal a Γ externo à Ω e f_j é a componente de um campo vetorial.

[1] $\int_{\Omega} f_{j,j} d\Omega = \int_{\Omega}\left(\frac{\partial f_x(x,y,z)}{\partial x} + \frac{\partial f_y(x,y,z)}{\partial y} + \frac{\partial f_z(x,y,z)}{\partial z}\right)$

Convenção de derivada: um índice após a vírgula indica derivada com relação à coordenada correspondente aquele índice.
Convenção de soma: um índice repetido em um termo indica soma com relação a este índice.

Observando que esta transformação (equação (2.4)) é possível desde que a função *f* seja contínua e possua suas primeiras derivadas parciais também contínuas.

Escrevendo a componente do campo vetorial f_j como $u^* u_{,j}$, a seguinte igualdade pode ser escrita:

$$\int_{\Omega} (u_{,j} u^*)_{,j} \, d\Omega = \int_{\Gamma} (u_{,j} n_j) u^* \, d\Gamma \tag{2.5}$$

Considerando-se que

$$u_{,j} n_j = \frac{\partial u}{\partial n} = q \tag{2.6}$$

$$(u_{,j} u^*)_{,j} = u^* u_{,jj} + u_{,j} u^*_{,j} \tag{2.7}$$

obtém-se a primeira identidade de *Green*, substituindo $u_{,jj}$ por $\nabla^2 u$:

$$\int_{\Omega} u^* (\nabla^2 u) \, d\Omega + \int_{\Omega} u_{,j} u^*_{,j} \, d\Omega = \int_{\Gamma} q u^* \, d\Gamma \tag{2.8}$$

A qual pode ser reescrita do seguinte modo:

$$\int_{\Omega} u (\nabla^2 u^*) \, d\Omega + \int_{\Omega} u_{,j} u^*_{,j} \, d\Omega = \int_{\Gamma} q^* u \, d\Gamma \tag{2.9}$$

considerando que $u^*_{,j} n_j = \frac{\partial u^*}{\partial n} = q^*$.

A segunda identidade de *Green* é obtida subtraindo a equação (2.8) da equação (2.9).

$$\int_{\Omega} [(\nabla^2 u) u^* - u (\nabla^2 u^*)] \, d\Omega = \int_{\Gamma} (u^* q - q^* u) \, d\Gamma \tag{2.10}$$

É importante ressaltar que se está trabalhando com as soluções de dois problemas na expressão (2.10). Uma é a solução *u* da equação de *Laplace*, que se deseja determinar para o

problema de geometria e condições de contorno adotadas. A outra é a solução fundamental *u** conhecida e correspondente a uma fonte unitária pontual aplicada no domínio infinito Ω^*.

2.4 – Solução Fundamental

A solução fundamental da equação de *Laplace* é a solução correspondente a uma fonte pontual unitária aplicada em um domínio infinito. Neste estudo, a solução representa o potencial em qualquer ponto campo *x* de um região infinita induzida pela presença de uma fonte unitária no ponto fonte ξ, a partir do qual existe um fluxo radial no interior da região.

Para eliminar a integral de domínio envolvendo a função *u*, utilizam-se funções de ponderação que sejam solução da seguinte equação diferencial.

$$\nabla^2 u^*(\xi, x) = -\delta(\xi, x) \tag{2.11}$$

onde $\delta(\xi, x)$ representa a "função" Delta de Dirac e tem como propriedades:

$$\delta(\xi, x) = 0, \text{ para } \xi \neq x;$$

$$\delta(\xi, x) \to \infty, \text{ para } \xi = x;$$

$$\int_{\Omega} u^*(x)\delta(\xi, x)\, d\Omega(x) = u^*(\xi).$$

Para o problema tridimensional, esta solução é dada por:

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{K}\frac{1}{4\pi r} \tag{2.12}$$

$$q^*(\xi, x) = K\frac{\partial u}{\partial n} \tag{2.13}$$

onde *r* representa a distância do ponto fonte ξ ao ponto campo *x*.

2.5 – Equação Integral de Contorno

A vantagem de usar uma técnica de resíduos ponderados é que, por sua generalidade, no caso dos elementos de contorno, permite uma extensão imediata do método para soluções de equações diferenciais parciais mais complexas.

Ao ser usada, também nas formulações de outros métodos numéricos clássicos, como diferenças finitas ou elementos finitos, torna-se mais fácil a combinação destes métodos com o MEC.

Sendo assim, a sentença básica de resíduos ponderados para a equação de *Laplace*, pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\int_{\Omega} (\nabla^2 u) u^* d\Omega = \int_{\Gamma_q} (q - \overline{q}) u^* d\Gamma - \int_{\Gamma_u} (u - \overline{u}) q^* d\Gamma \tag{2.14}$$

Considerando que $\nabla^2 u$, $u - \overline{u}$, $q - \overline{q}$ contêm resíduos e integrando por partes duas vezes a equação (2.14), obtemos a terceira identidade de *Green* que fornece a equação integral de contorno para pontos internos:

$$u(\xi) = \int_{\Gamma} u^*(\xi, x) q(x)\, d\Gamma(x) - \int_{\Gamma} q^*(\xi, x) u(x)\, d\Gamma(x) \tag{2.15}$$

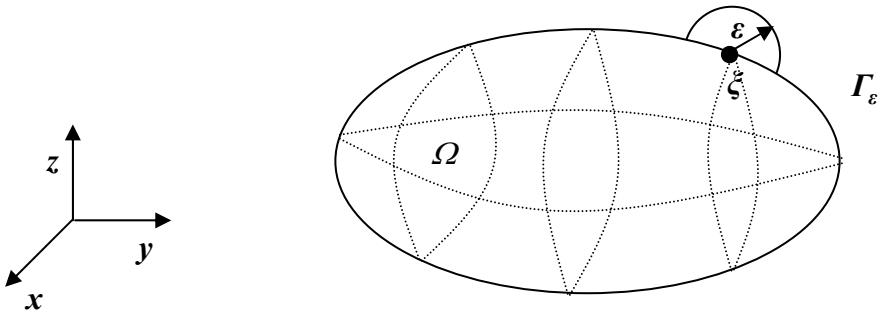


Figura 2.2 – Ponto singular ξ integrado ao domínio Ω por meio de uma esfera infinitesimal de raio ε

Porém, a expressão (2.15) só poderá ser utilizada após o cálculo de *u(x)* e *q(x)* em todo contorno. Para isso é necessário calcular previamente estas incógnitas contidas no contorno efetuando seu limite quando o ponto fonte tende ao contorno do problema.

Com o ponto fonte situado no contorno, este limite pode ser efetuado integrando-o ao domínio, através de uma esfera de raio ε e, em seguida, tender o raio ε à zero de acordo com a figura 2.2. Com isso, obtém-se a equação integral de contorno dada por:

$$C(\xi)u(\xi) = \int_{\Gamma} u^{*}(\xi,x)q(x)\,d\Gamma(x) \;-\; \oint_{\Gamma} q^{*}(\xi,x)u(x)\,d\Gamma(x) \tag{2.20}$$

onde $C(\xi)$ é dado pelo ângulo interno no ponto ξ dividido por 2π e a segunda integral é calculada no sentido de valor principal de *Cauchy*.

Outras formas de se chegar a equação integral podem ser vistas, detalhadamente, em Azevedo [2].

CAPÍTULO III

MÉTODO DE SIMULAÇÃO DE UM CAMPO CORRETIVO DE VELOCIDADES (MSCCV)

CAPÍTULO III - MÉTODO DE SIMULAÇÃO DE UM CAMPO CORRETIVO DE VELOCIDADES (MSCCV)

3.1 – Introdução

O MSCCV tem como conceito utilizar campos corretivos de velocidades que simulam a variação da permeabilidade do meio. O coeficiente de condutividade presente na solução fundamental é dividido em um coeficiente constante e outro, efetivamente variável dentro do meio heterogêneo a ser analisado.

Com isso, chega-se em dois sistemas matriciais: principal, envolvendo o cálculo do potencial em todos os pontos do contorno e secundário, que determina o campo corretivo das derivadas do potencial, em todos os pontos do domínio (representado por células).

O tipo de resolução (*Gauss* ou *Newnton-Raphson*) desses sistemas depende das condições de contorno impostas ao problema, como será descrito no capítulo IV.

3.2 – Desenvolvimento

Considerando um problema de potencial em um sólido de material heterogêneo, a equação que rege este fenômeno pode ser representada por:

$$\left(K(x)\, u_{,i}\right)_{,i} = 0 \tag{3.1}$$

sendo *K(x),* o coeficiente de condutividade denominado como real, que estabelece a seguinte relação:

$$K(x) = \overline{K} + K^{V}(x) \tag{3.2}$$

Onde:

- $\overline{K}$ representa um coeficiente de condutividade de referência constante presente na solução fundamental, apresentada a seguir:

$$u^*(\xi, x) = \frac{1}{\overline{K}} \frac{1}{4\pi r} \tag{3.3}$$

$$q^*(\xi, x) = \overline{K} \frac{\partial u^*}{\partial n} \tag{3.4}$$

- $K^V(x)$ representa a parcela variável do coeficiente de condutividade.

Adotando a seguinte notação:

$$q = K(x) \frac{\partial u}{\partial n} = K(x) u_{,i}\, n_i \tag{3.5}$$

$$q^* = \overline{K} \frac{\partial u}{\partial n} = \overline{K}\, u_{,i}^*\, n_i \tag{3.6}$$

$$q_i^* = \overline{K}\, u_{,i}^* \tag{3.7}$$

$$q_i = K(x)\, u_{,i} \tag{3.8}$$

onde q^* representa a componente na direção normal ao contorno do fluxo, q_i^*, a componente do fluxo na direção *i* e n_i é a componente na direção *i* do vetor normal externo ao contorno.

Portanto,

$$q = q_i n_i \tag{3.9}$$

$$q^* = q_i^* n_i \tag{3.10}$$

Definindo os seguintes termos, q^E e q^A, como:

$$q^E = \overline{K}\, u_{,i}\, n_i = q_i^E n_i \tag{3.11}$$

$$q^A = \left(\overline{K} - K(x)\right) u_{,i}\, n_i = -K^V\, u_{,i}\, n_i = q_i^A n_i \tag{3.12}$$

constrói-se a seguinte relação, que será utilizada posteriormente:

$$q = q^E - q^A \tag{3.13}$$

A equação do problema pode ser reescrita da seguinte forma:

$$K(x)\,u,_{ii}+K(x),_i\,u,_i=0 \tag{3.14}$$

ou

$$\left(\overline{K}+K^V\right)u,_{ii}=-K,_i^V\,u,_i-\overline{K},_i\;\;u,_i \tag{3.15}$$

Por $\overline{K}$ ser uma constante, a última derivada é nula, restando apenas:

$$\overline{K}\,u,_{ii}=-K^V\,u,_{ii}-K,_i^V\,u,_i \tag{3.16}$$

Comparando as igualdades,

$$\overline{K}\,u,_i\,u,_i^*=q_i^E u,_i^* \quad \text{e} \quad \overline{K}\,u,_i\,u,_i^*=u,_i\,q_i^* \tag{3.17}$$

conclui-se que $q_i^E u,_i^*=u,_i\,q_i^*$.

Integrando-se ambos os lados dessa igualdade, tem-se que:

$$\int_\Omega q_i^E u,_i^*\,d\Omega=\int_\Omega u,_i\,q_i^*\,d\Omega \tag{3.18}$$

ou

$$\int_\Omega \overline{K}\,u,_i\,u,_i^*\,d\Omega=\int_\Omega u,_i\,\overline{K}\,u,_i^*\,d\Omega \tag{3.19}$$

Desta vez, integrando-se por partes, ambos os lados da equação (3.19):

$$\int_\Gamma \overline{K}\,u,_i\,u^*n_i\,d\Gamma-\int_\Omega \overline{K}\,u,_{ii}\,u^*d\Omega=\int_\Gamma \overline{K}\,u,_i^*u\,n_i\,d\Gamma-\int_\Omega \overline{K}\,u,_{ii}^*\,u\,d\Omega \tag{3.20}$$

onde $u,_{ii}^*=\nabla^2u^*=\dfrac{-\delta(\xi,x)}{\overline{K}}$, sendo $\delta(\xi,x)$ a função delta de *Dirac*.

Tendo em vista as igualdades $\overline{K}\, u,_i\, n_i = q^E$ e $\overline{K}\, u,_i^*\, n_i = q^*$ definidas anteriormente e levando em consideração a equação (3.16), a equação (3.20) pode ser reescrita como:

$$\int_\Gamma q^E u^* d\Gamma + \int_\Omega \left(K^V \nabla^2 u + K,_i^V\, u,_i\right) u^* d\Omega = \int_\Gamma q^* u \; d\Gamma + u(\xi) \tag{3.21}$$

Reordenando a equação (3.21), obtém-se:

$$\begin{aligned} u(\xi) + \int_\Gamma q^*(\xi,x) u(x)\; d\Gamma = & \int_\Gamma u^*(\xi,x) q^E(x)\; d\Gamma + \\ & \int_\Omega u^*(\xi,x)\left[K^V \nabla^2 u(x) + K,_i^V\, u,_i(x)\right] d\Omega \end{aligned} \tag{3.22}$$

A fim de simplificar no desenvolvimento, denomina-se de $B(\xi)$ esta última integral.

$$B(\xi) = B_1(\xi) + B_2(\xi) \tag{3.23}$$

onde:

$$B_1(\xi) = \int_\Omega u^* K^V \nabla^2 u \; d\Omega \quad \text{e} \quad B_2(\xi) = \int_\Omega u^* K,_i^V\, u,_i \; d\Omega. \tag{3.24}$$

Integrando por partes uma vez o termo B_1,

$$B_1(\xi) = \int_\Gamma u^* K^V u,_i\, n_i \; d\Gamma - \int_\Omega u,_i\, u,_i^*\, K^V d\Omega - \int_\Omega u,_i\, u^* K,_i^V \; d\Omega \tag{3.25}$$

pode se observar que a última integral cancela o termo $B_2(\xi)$.

Com isso, a equação (3.22) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} u(\xi) + \int_\Gamma q^*(\xi,x) u(x)\; d\Gamma = & \int_\Gamma u^*(\xi,x) q^E(x)\; d\Gamma + \\ & \int_\Gamma u^*(\xi,x) K^V u,_i(x) n_i \; d\Gamma - \int_\Omega K^V u,_i(x) u,_i^*(\xi,x)\; d\Omega \end{aligned} \tag{3.26}$$

onde, conforme a equação (3.12), na terceira integral é identificado o termo $-q^A$, que somado à q^E, obtém o termo *q*.

Deste modo:

$$u(\xi)+\int_{\Gamma} q^*(\xi,x)u(x)\ d\Gamma=\int_{\Gamma} u^*(\xi,x)q(x)\ d\Gamma-\int_{\Omega} K^V u_{,i}(x)u^*_{,i}(\xi,x)\ d\Omega \tag{3.27}$$

Desta vez, o termo $-q_i^A$ surge na última integral. Substituindo-o, finalmente, obtém-se a equação integral para meios heterogêneos:

$$u(\xi)+\int_{\Gamma} q^*(\xi,x)u(x)\ d\Gamma=\int_{\Gamma} u^*(\xi,x)q(x)\ d\Gamma+\int_{\Omega} u^*_{,i}(\xi,x)q_i^A(x)\ d\Omega \tag{3.28}$$

3.3 - Derivada da Equação Integral para Meios Heterogêneos

A derivada em relação ao ponto fonte da equação (3.28) é determinada, para as integrais de contorno, aplicando a derivação diretamente na solução fundamental. Porém, para a integral de domínio, faz-se necessária uma melhor análise, como se segue.

Pra facilitar a apresentação, seu desenvolvimento será mostrado para o caso bidimensional. Contudo a expansão para 3-D é obtida de maneira direta.

Esta integral em questão pode ser representada como:

$$V=\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{\Omega_\varepsilon} u^*_{,i}(\xi,x)q_i^A(x)\,d\Omega \tag{3.29}$$

onde Ω_ε é o que resta de Ω quando se retira uma esfera de raio ε centrado no ponto fonte ξ.

A expressão que representa a derivada de V para o caso bidimensional é dada por:

$$\frac{\partial V}{\partial x_m}=\lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\frac{\partial}{\partial x_m}\int_{\Omega_\varepsilon} u^*_{,i}(\xi,x)q_i^A(x)\ d\Omega\right\} \tag{3.30}$$

$$\frac{\partial V}{\partial x_m}=\frac{1}{2\overline{K}\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\frac{\partial}{\partial x_m}\int_{\Omega_\varepsilon}\frac{r_{,i}}{r}q_i^A(x)\ d\Omega\right\} \tag{3.31}$$

Considere que ε representa o raio de um círculo onde pode ser definido um sistema de coordenadas cilíndricas $(\bar{r},\bar{\theta})$ com origem no ponto fonte ξ, de acordo com a figura (3.1).

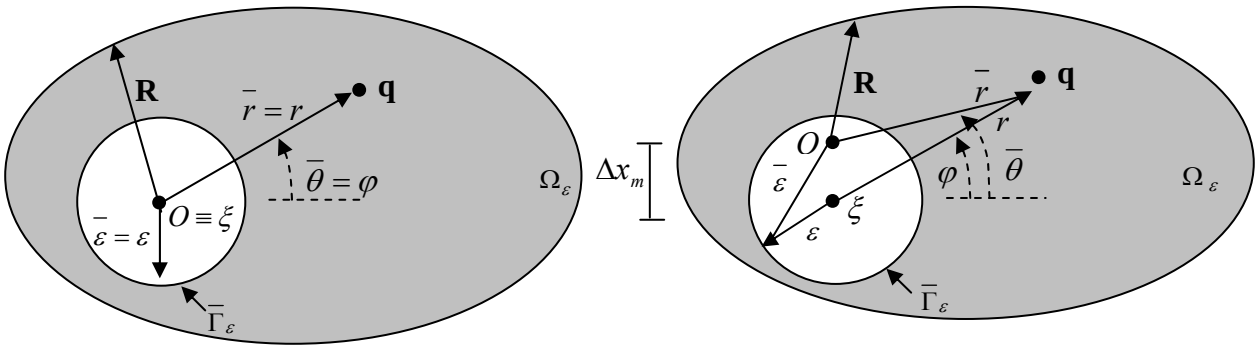


Figura 3.1 – Mudança de coordenadas

Neste sistema de coordenadas, $u,_i^*$ pode ser reescrito da seguinte maneira:

$$u,_i^* = \frac{1}{r(\bar{r},\bar{\theta})} \cdot \psi_i(\varphi) \tag{3.32}$$

onde, para o caso ilustrado, $r(\bar{r},\bar{\theta}) = \bar{r}$ e $\varphi(\bar{r},\bar{\theta}) = \bar{\theta}$, mas se um pequeno incremento na coordenada retangular x_m do ponto singular é dado, não é só r e φ que se tornam diferentes de $\bar{r}$ e $\bar{\theta}$ mas também $\bar{\Gamma}_\varepsilon$ é deslocado, indicando sua dependência com as coordenadas do ponto fonte.

Com isso, a equação (3.31) se transforma em:

$$\frac{\partial V}{\partial x_m} = \frac{1}{2\bar{K}\pi} \int_0^{2\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_m} \int_{\bar{\varepsilon}}^{R(\bar{\theta})} \frac{\psi_i}{r} \, q_i^A \, \bar{r} \, d\bar{r} \right\} d\bar{\theta} \tag{3.33}$$

sendo $\bar{r}$ o Jacobiano da transformada.

Aplicando a fórmula de *Leibnitz*[2] no termo $\frac{\partial}{\partial x_m}\int_{\bar{\varepsilon}}^{R(\bar{\theta})}\frac{\psi_i}{r}\,q_i^A\,\bar{r}\,d\bar{r}$, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_m}\int_{\bar{\varepsilon}}^{R(\bar{\theta})}\frac{\psi_i}{r}\,q_i^A\,\bar{r}\,d\bar{r}=\int_{\bar{\varepsilon}}^{R}\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\psi_i}{r}\right)q_i^A\,\bar{r}\,d\bar{r}-\frac{\psi_i}{r(\bar{\varepsilon},\bar{\theta})}\,q_i^A\,\bar{\varepsilon}\,\frac{\partial\bar{\varepsilon}}{\partial x_m} \tag{3.34}$$

Levando em consideração que $0\equiv\xi$ e $r(\bar{\varepsilon},\bar{\theta})=\varepsilon$ e substituindo a equação (3.34) na equação (3.33), tem-se que:

$$\frac{\partial V}{\partial x_m}=\frac{1}{2\bar{K}\pi}\int_0^{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{\bar{\varepsilon}}^{R(\bar{\varphi})}\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\psi_i}{r}\right)q_i^A\,r\,dr\,d\varphi-q_i^A(\xi)\int_0^{2\pi}\psi_i\cos(r,x_m)\,d\varphi \tag{3.35}$$

Voltando ao sistema de coordenadas retangulares, a equação (3.35) se torna:

$$\frac{\partial V}{\partial x_m}=\int_\Omega\frac{\partial u,_i^*(\xi,x)}{\partial x_m}\,q_i^A\,d\Omega-q_i^A(\xi)\int_{\Gamma_1}u,_i^*(\xi,x)\,r,_m\;d\Gamma \tag{3.36}$$

onde Γ_1 é definido como um círculo de raio unitário centrado no ponto fonte e $r,_m$ representa a derivada de *r* em relação ao ponto campo$\left(r,_m=-\frac{\partial r}{\partial x_m}\right)$. A integral Γ_1 pode ser calculada de forma fechada. Para o caso bidimensional, Γ_1 define um circulo de raio unitário e para 3-D, representa uma esfera de raio unitário, responsável pelo termo independente g_i a seguir.

$$\begin{aligned} g_i &= q_i^A\int_{\Gamma_1}\frac{1}{2\bar{K}\pi r}\cdot r,_i\cdot r,_m\;d\Gamma_1, \qquad \text{para 2-D;}\\ g_i &= q_i^A\int_{\Gamma_1}\frac{1}{4\bar{K}\pi r}\cdot r,_i\cdot r,_m\;d\Gamma_1, \qquad \text{para 3-D.}\end{aligned} \tag{3.37}$$

[2] $\frac{d}{d\alpha}\int_{\phi_1(\alpha)}^{\phi_2(\alpha)}F(x,\alpha)dx=\int_{\phi_1(\alpha)}^{\phi_2(\alpha)}\frac{\partial F}{\partial\alpha}dx-F(\phi_1,\alpha)\frac{d\phi_1}{d\alpha}+F(\phi_2,\alpha)\frac{d\phi_2}{d\alpha}=0$

Finalmente, a derivada da equação (3.28) é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x_m} = \int_{\Gamma} \frac{\partial u^*}{\partial x_m} q \; d\Gamma - \int_{\Gamma} \frac{\partial q^*}{\partial x_m} u \; d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial u,_i^* (\xi, x)}{\partial x_m} q_i^A \; d\Omega + g_i \tag{3.38}$$

onde a última integral é obtida no sentido de valor principal de *Cauchy*.

CAPÍTULO IV

SISTEMA DE EQUAÇÕES

CAPÍTULO IV - SISTEMA DE EQUAÇÕES

4.1 – Introdução

A seguir são apresentados os tipos de elementos usados na discretização do contorno e as células, para o domínio. Após tal dicretização, chega-se a um sistema de equações que pode ser resolvido por meio de eliminação de *Gauss,* quando as condições de contorno forem lineares ou por meio de método iterativo, utilizando *Newton-Raphson,* quando não lineares.

Os recursos utilizados para o cálculo das integrais singulares, quasi-singulares e não-singulares serão discutidos no capítulo seguinte.

4.2 – Discretização do Contorno

Como se trata de um corpo tridimensional, os elementos utilizados foram os quadrangulares, com interpolação que podem ser constante, linear ou quadrática. Tais elementos fazem parte da biblioteca do Programa MEC3D, desenvolvido por Pincirolli [15].

Os elementos empregados foram contínuos, descontínuos ou de transição. A adoção do elemento quadrangular está relacionada ao tipo de célula desenvolvida na discretização do domínio.

As coordenadas cartesianas *x, y* e *z* dos pontos do contorno, pertencentes a um elemento Γ_j, são expressas em termos de coordenadas de seus nós geométricos (x_m, y_m e z_m) e das suas funções de forma ($\psi_m(x)$), satisfazendo a seguinte relação:

$$
\begin{aligned}
x(x) &= \sum_{m=1}^{NN} \psi_m(x) x_m \qquad (x \in \Gamma_j) \\
y(x) &= \sum_{m=1}^{NN} \psi_m(x) y_m \qquad (y \in \Gamma_j) \\
z(x) &= \sum_{m=1}^{NN} \psi_m(x) z_m \qquad (z \in \Gamma_j)
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

onde *NN* corresponde ao número de nós geométricos do elemento Γ_j e $\psi_m(x)$ representa a função de forma associada ao nó *m* pertencente a Γ_j e computada no ponto campo *x*.

As funções $\psi_m(x)$, em cada elemento devem satisfazer:

$$\begin{aligned} x_m &= \sum_{k=1}^{NN} \psi_k(x_m) x_k \qquad (x \in \Gamma_j) \\ y_m &= \sum_{k=1}^{NN} \psi_k(y_m) y_k \qquad (y \in \Gamma_j) \\ z_m &= \sum_{k=1}^{NN} \psi_k(z_m) z_k \qquad (z \in \Gamma_j) \end{aligned} \tag{4.2}$$

onde $\psi_k(x) = 1$ quando *x* corresponde à coordenada do nó geométrico *k* e $\psi_k(x) = 0$ quando corresponde a outro nó geométrico qualquer, resultando:

$$\sum_{k=1}^{NN} \psi_k(x) = 1 \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.3}$$

Matricialmente, os termos da equação (4.1) são dados por:

$$\boldsymbol{\psi}^j = [\psi_1 \quad \psi_2 \quad \cdots \quad \psi_{NN}] \tag{4.4a}$$

$$\boldsymbol{x}^j = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{NN} \end{bmatrix} \tag{4.4b}$$

$$\boldsymbol{y}^j = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{NN} \end{bmatrix} \tag{4.4c}$$

$$z^j = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{NN} \end{bmatrix} \tag{4.4d}$$

As funções *u(x)* e *q(x)* são expressas para qualquer ponto genérico *x* do contorno Γ_j, em termos de seus valores nos nós funcionais u_n e q_n, respectivamente, e das funções de interpolação $\phi_n(x)$, satisfazendo às seguintes relações:

$$u(x) = \sum_{n=1}^{NF} \phi_n(x)\, u_n \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.5}$$

$$q(x) = \sum_{n=1}^{NF} \phi_n(x)\, q_n \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.6}$$

sendo que u_n e q_n representam, respectivamente, os valores dos potenciais e das derivadas normais no nó funcional *n* do elemento Γ_j, *NF* corresponde ao número de pontos nodais funcionais em Γ_j e $\phi_n(x)$ é a função de interpolação associada ao ponto nodal *n* e computada no ponto *x* de Γ_j.

As funções de interpolação são determinadas de tal modo que representem exatamente:

$$u_n = \sum_{k=1}^{NF} \phi_k(x)\, u_k \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.7}$$

$$q_n = \sum_{k=1}^{NF} \phi_k(x)\, q_k \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.8}$$

Quando *x* corresponde à coordenada do nó funcional *n*, $\phi_k(x) = 1$ e quando corresponde a outro nó funcional, $\phi_k(x) = 0$, resultando:

$$\sum_{n=1}^{NF} \phi_k(x) = 1 \qquad (x \in \Gamma_j) \tag{4.9}$$

As equações (4.7) e (4.8) garantem que as condições de contorno (2.2) e (2.3) sejam atendidas.

Matricialmente, os termos das equações (4.5) e (4.6) são dados por:

$$\Phi^{j} = \begin{bmatrix} \phi_1 & \phi_2 & \cdots & \phi_{NN} \end{bmatrix}$$

$$U^{j} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{NN} \end{bmatrix} \qquad (4.10)$$

$$Q^{j} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_{NN} \end{bmatrix}$$

4.2.1 – Características dos Elementos de Contorno

A seguir são apresentadas as funções de forma e de interpolação dos elementos quadrangulares. Elas são escritas em coordenadas retangulares η_1 e η_2 pertencentes ao intervalo [-1,1], como mostra a figura (4.1).

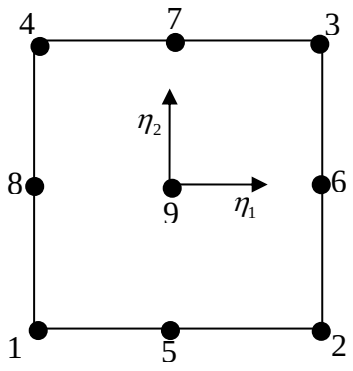


Figura 4.1 – Sistema de coordenada local (η_1 , η_2).

Nó	η_1	η_2
1	-1	-1
2	1	-1
3	1	1
4	-1	1
5	0	-1
6	1	0
7	0	1
8	-1	0
9	0	0

Tabela 4.1 – Coordenada dos nós geométricos.

O ingresso dos elementos quanto à geometria e descontinuidade no programa HET3D é apresentado no Anexo [A].

As funções de forma são dadas por:

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{4}(1-\eta_1)(1-\eta_2) \\
\psi_2 &= \frac{1}{4}(1+\eta_1)(1-\eta_2) \\
\psi_3 &= \frac{1}{4}(1+\eta_1)(1+\eta_2) \\
\psi_4 &= \frac{1}{4}(1-\eta_1)(1+\eta_2)
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Mas, como os elementos podem ser descontínuos, suas funções de interpolação são apresentadas a seguir, segundo a figura (4.2).

$$a_i = 1 - b_i, \qquad i = 1, 4.$$
$$a_5 = a_2 + a_4$$
$$a_6 = a_1 + a_3$$

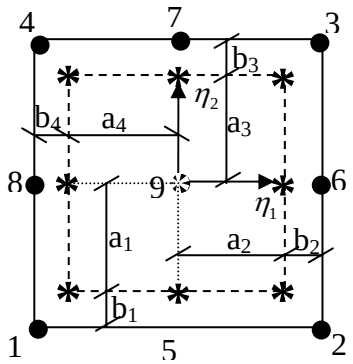


Figura 4.2 – Posição dos nós funcionais no elemento.

Nó	η_1	η_2
1	- a_4	- a_1
2	a_2	- a_1
3	a_2	a_3
4	- a_4	a_3
5	0	- a_1
6	a_2	0
7	0	a_3
8	- a_4	0
9	0	0

Tabela 4.2 – Coordenada dos nós funcionais.

Interpolantes unidimensionais lineares:

$$\phi_1^1 = \frac{1}{a_5}(a_2 - \eta_1) \qquad \phi_2^1 = \frac{1}{a_5}(a_4 + \eta_1)$$
$$\phi_1^2 = \frac{1}{a_6}(a_3 - \eta_2) \qquad \phi_2^2 = \frac{1}{a_6}(a_1 + \eta_2) \tag{4.12}$$

Interpolantes unidimensionais quadráticos:

$$\phi_1^1 = \frac{\eta_1}{a_4 \cdot a_5}(\eta_1 - a_2) \qquad \phi_2^2 = \frac{\eta_2}{a_5 \cdot a_6}(\eta_2 + a_1)$$

$$\phi_1^2 = \frac{\eta_2}{a_1 \cdot a_6}(\eta_2 - a_3) \qquad \phi_3^1 = \frac{1}{a_2 \cdot a_4}\left[(a_2 - \eta_1)(a_4 + \eta_1)\right] \tag{4.13}$$

$$\phi_2^1 = \frac{\eta_1}{a_2 \cdot a_5}(\eta_1 + a_4) \qquad \phi_3^2 = \frac{1}{a_1 \cdot a_3}\left[(a_3 - \eta_2)(a_1 + \eta_2)\right]$$

Portanto, as funções para os elementos lineares ($N^e = 4$) e quadrático ($N^e = 9$), são:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi_1^1 \cdot \phi_1^2 \\ \phi_2 &= \phi_2^1 \cdot \phi_1^2 \\ \phi_3 &= \phi_2^1 \cdot \phi_2^2 \\ \phi_4 &= \phi_1^1 \cdot \phi_2^2 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} \phi_5 &= \phi_3^1 \cdot \phi_1^2 \\ \phi_6 &= \phi_2^1 \cdot \phi_3^2 \\ \phi_7 &= \phi_3^1 \cdot \phi_3^2 \\ \phi_8 &= \phi_1^1 \cdot \phi_3^2 \\ \phi_9 &= \phi_3^1 \cdot \phi_3^2 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Com o contorno discretizado em *NEL* elementos, a equação (3.28) torna-se:

$$u(\xi) = \sum_{j=1}^{NEL}\left[\left(\int_{\Gamma_j}(u^*\Phi^j\, d\Gamma)\right)Q^j - \left(\int_{\Gamma_j}(q^*\Phi^j\, d\Gamma)\right)U^j\right] + \int_{\Omega} u,_i^*(\xi, x) q_i^A(x)\, d\Omega \tag{4.15}$$

onde as incógnitas são os potenciais U^j e suas derivadas em relação à normal Q^j nos *NF* nós funcionais do contorno.

Lembrando que a integral de domínio será tratada adiante.

Como as funções de interpolação são expressas em função da coordenada adimensional η, deve-se transformar a área elementar $d\Gamma$ do sistema global para o sistema de coordenadas intrínsecas:

$$d\Gamma = \left[\frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta_1} \times \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta_2} \right] d\eta_1 \, d\eta_2 = |G| \, d\eta_1 \, d\eta_2 \tag{4.16}$$

onde $|G|$ é o módulo do vetor normal ao contorno, expresso por:

$$|G| = \sqrt{g_1^2 + g_2^2 + g_3^2} \tag{4.17}$$

Sendo que:

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{\partial y}{\partial \eta_1}\frac{\partial z}{\partial \eta_2} - \frac{\partial z}{\partial \eta_1}\frac{\partial y}{\partial \eta_2} \\ g_2 &= \frac{\partial z}{\partial \eta_1}\frac{\partial x}{\partial \eta_2} - \frac{\partial x}{\partial \eta_1}\frac{\partial z}{\partial \eta_2} \\ g_3 &= \frac{\partial x}{\partial \eta_1}\frac{\partial y}{\partial \eta_2} - \frac{\partial y}{\partial \eta_1}\frac{\partial x}{\partial \eta_2} \end{aligned} \tag{4.18}$$

Efetuado a mudança de coordenadas do sistema global para o local, reescrevemos a equação (4.15) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} u(\xi) + \sum_{j=1}^{NEL} \left(\int_{\Gamma_j} (q^*(\xi, x) \Phi^e(\eta_1, \eta_2) \; |G| \, d\eta_1 \, d\eta_2) \right) U^j(x) = \\ \sum_{j=1}^{NEL} \left(\int_{\Gamma_j} (u^*(\xi, x) \Phi^e(\eta_1, \eta_2) |G| \, d\eta_1 \, d\eta_2) \right) Q^j(x) + \int_{\Omega} u,_i^*(\xi, x) q_i^A(x) \, d\Omega \end{aligned} \tag{4.19}$$

Nos casos onde o ponte fonte ξ não pertence ao elemento Γ_j, as integrais são regulares e podem ser obtidas numericamente através da quadratura de *Gauss* (assunto discutido no próximo capítulo).

Sub-matrizes g^j e h^j são montadas, para cada elemento *j,* e reordenadas adequadamente para contribuir na construção das matrizes ***H*** e ***G***, que possuem os coeficientes de influência globais *u* e *q*.

$$h^j = \int_{\Gamma_j} q^*(\xi, x)\, \Phi(\eta_1, \eta_2)\, |G|\, d\eta_1 d\eta_2 \tag{4.20}$$

$$g^j = \int_{\Gamma_j} u^*(\xi, x)\, \Phi(\eta_1, \eta_2)\, |G|\, d\eta_1 d\eta_2 \tag{4.21}$$

Com isso, é obtido o seguinte sistema de equações:

$$\boldsymbol{H}\, u = \boldsymbol{G}\, q + \int_{\Omega} u_i^*\, q_i^A\, d\Omega \tag{4.22}$$

4.3 – Discretização do Domínio

Para discretizar as integrais de domínio presentes nas equações (3.28) e (3.38), foram utilizadas células hexaédricas com geometria linear e oito nós geométricos, como mostra a figura (4.3). A interpolação funcional foi constante, gerando apenas um único nó funcional no centróide de cada célula.

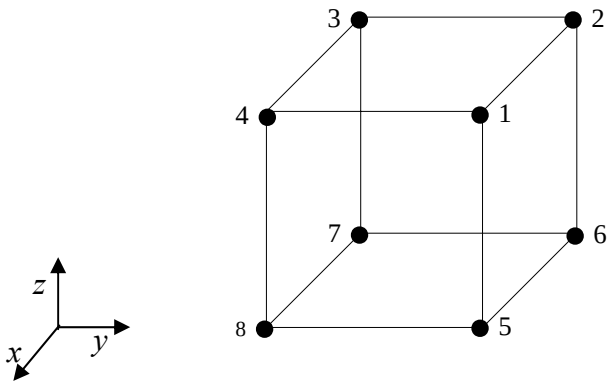


Figura 4.3 – Célula Hexaédrica

Com isso, as coordenadas cartesianas de um ponto *x* qualquer sobre o domínio Ω_c da célula, serão obtidas a partir dos nós geométricos da mesma e de funções de forma lineares φ.

Considerando os oito nós geométricos da célula de coordenadas x_m, y_m e z_m, as seguintes relações devem ser atendidas:

$$x(x) = \sum_{m=1}^{8} \varphi_m(x) x_m$$

$$y(x) = \sum_{m=1}^{8} \varphi_m(x) y_m \tag{4.23}$$

$$z(x) = \sum_{m=1}^{8} \varphi_m(x) z_m$$

$$\sum_{m=1}^{8} \varphi_m(x) = 1, \; x \in \Omega_c \tag{4.24}$$

onde $\varphi_m(x)$ representa a função forma associada ao nó *m* pertencente a Ω_c e computada no ponto campo *x*.

As funções de forma são expressas por um sistema de coordenadas locais adimensionais (η_1, η_2, η_3). Para tal transformação, deve considerar que:

$$d\Omega = \left| \frac{\partial r}{\partial \eta_1} \cdot \frac{\partial r}{\partial \eta_2} \times \frac{\partial r}{\partial \eta_3} \right| d\eta_1 \; d\eta_2 \; d\eta_3 \tag{4.25}$$

onde

$$\left| \frac{\partial r}{\partial \eta_1} \cdot \frac{\partial r}{\partial \eta_2} \times \frac{\partial r}{\partial \eta_3} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \eta_1} & \frac{\partial x}{\partial \eta_2} & \frac{\partial x}{\partial \eta_3} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta_1} & \frac{\partial y}{\partial \eta_2} & \frac{\partial y}{\partial \eta_3} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta_1} & \frac{\partial z}{\partial \eta_2} & \frac{\partial z}{\partial \eta_3} \end{vmatrix} = |J| \tag{4.26}$$

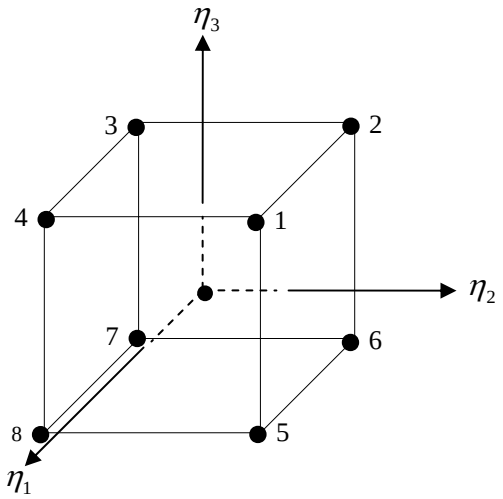
A expressão $|J|$ representa o jacobiano dessa transformação de coordenadas.

4.3.1 – Características das Células

Para descrever a geometria das células, são utilizadas funções de forma lineares, escritas em relação ao sistema de coordenadas locais. Com isso, o mapeamento da célula é realizado em um hexaédro regular, com origem no nó funcional da mesma.

O sistema de coordenadas locais (η_1, η_2, η_3) realiza o mapeamento da célula apresentada na figura (4.3) para a figura (4.4), onde as coordenadas dos nós são:

Nó 1: (1, 1, 1);
Nó 2: (-1, 1, 1);
Nó 3: (-1, -1, 1);
Nó 4: (1, -1, 1);
Nó 5: (1, 1, -1);
Nó 6: (-1, 1, -1);
Nó 7: (-1, -1, -1);
Nó 8: (1, -1, -1);



Figuras 4.4 – Coordenadas locais da célula.

A seguir são apresentadas as funções lineares correspondentes às posições dos nós:

$$\varphi_1 = \frac{1}{8}(1+\eta_1)(1+\eta_2)(1+\eta_3) \qquad \varphi_5 = \frac{1}{8}(1+\eta_1)(1+\eta_2)(1-\eta_3)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{8}(1-\eta_1)(1+\eta_2)(1+\eta_3) \qquad \varphi_6 = \frac{1}{8}(1-\eta_1)(1+\eta_2)(1-\eta_3)$$

$$\varphi_3 = \frac{1}{8}(1-\eta_1)(1-\eta_2)(1+\eta_3) \qquad \varphi_7 = \frac{1}{8}(1-\eta_1)(1-\eta_2)(1-\eta_3) \qquad (4.27)$$

$$\varphi_4 = \frac{1}{8}(1+\eta_1)(1-\eta_2)(1+\eta_3) \qquad \varphi_8 = \frac{1}{8}(1+\eta_1)(1-\eta_2)(1-\eta_3)$$

As seguintes integrais de domínio, apresentadas abaixo, podem ser efetuadas numericamente.

$$\int_{\Omega_c} u,_i^* (\xi, x)\, d\Omega_c \tag{4.28}$$

$$\int_{\Omega_c} \frac{\partial u,_i^* (\xi, x)}{\partial x_m}\, d\Omega_c \tag{4.29}$$

Considerando o sistema de coordenadas locais (η_1, η_2, η_3), deve ser estabelecida a seguinte transformação de coordenadas sobre as equações acima:

$$d_i^c = \int_{\Omega_c} u,_i^* (\xi, x)\, |J|\, d\eta_1\, d\eta_2\, d\eta_3 \tag{4.30}$$

$$\overline{d}_i^c = \int_{\Omega_c} \frac{\partial u,_i^* (\xi, x)}{\partial x_m}\, |J|\, d\eta_1\, d\eta_2\, d\eta_3 \tag{4.31}$$

De forma similar, sub-matrizes d^c e $\overline{d}^c$ são montadas, para cada célula *c,* e irão contribuir na construção das matrizes D e $\overline{D}$, que possuem os coeficientes de influência globais q_i^A. A integração das células é detalhada no capítulo V.

Com isso, a equação (4.22) pode ser reescrita sob a seguinte forma:

$$\boldsymbol{H}\, u = \boldsymbol{G}\, q + \boldsymbol{D}\, q_i^A \tag{4.32}$$

4.4 – Sistema de Equações de Acordo com Suas Condições de Contorno

Na seqüência são apresentados três tipos de sistemas, segundo suas respectivas condições de contorno. Todos os desenvolvimentos consistem na resolução de dois sistemas matriciais, denominados:

A) Sistema Principal: envolvendo o cálculo do potencial e do fluxo em todos os pontos funcionais do contorno;

B) Sistema Secundário: determina o valor do campo corretivo de velocidades nos nós funcionais das células.

4.4.1 – Potencial e/ou Fluxo Prescritos

A) Sistema Principal

Como visto anteriormente, a equação (3.28) pode ser representada matricialmente da seguinte forma:

$$\boldsymbol{H}\, u = \boldsymbol{G}\, q + \boldsymbol{D}\, q_i^A \tag{4.33}$$

onde:

$\boldsymbol{H}$: matriz *ntnf x ntnf*, que possui os coeficientes do potencial no contorno[3];

$\boldsymbol{G}$: matriz *ntnf x ntnf*, que contém os coeficientes da componente do fluxo perpendicular ao contorno;

$\boldsymbol{D}$: matriz *ntnf x 3nc*, referente aos coeficientes das componentes da parcela de heterogeneidade[4];

u : Vetor *ntnf*, que contém os valores do potencial;

q : Vetor *ntnf* das componentes do fluxo;

q_i^A : Vetor *3nc* referente às componentes do campo corretivo da derivada do potencial.

Desenvolvendo o sistema matricial e reordenando as matrizes e vetores para separar os valores prescritos e incógnitas, chega-se à:

$$\boldsymbol{A}\, x = f + \boldsymbol{D}\, q_i^A \tag{4.34}$$

[3] *ntnf* = número total de nós funcionais no contorno.
[4] *3nc* = o triplo do número de nós funcionais nas células.

Sendo que:

A: matriz *ntnf x ntnf*, que contém os coeficientes de influência que multiplicam as incógnitas;

x: vetor *ntnf* das incógnitas;

f: vetor *ntnf* que inclui em sua formação os valores prescritos no contorno;

E, finalmente:

$$x = \boldsymbol{R}\, q_i^A + m$$

ou (4.35)

$$x = \boldsymbol{R}\left\{-\boldsymbol{K}^V\right\} q_i + m$$

onde:

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}^{-1}\, \boldsymbol{D} \tag{4.36}$$

$$m = \boldsymbol{A}^{-1}\, f \tag{4.37}$$

B) Sistema Secundário

Este sistema representa a equação (3.38), que pode ser escrita matricialmente sob a seguinte forma:

$$q_i = \boldsymbol{G'}\, q - \boldsymbol{H'}\, u + \overline{\boldsymbol{D}}\, q_i^A \tag{4.38}$$

H': matriz *3nc x ntnf,* que contem os coeficientes de potencial;

G': matriz *3nc x ntnf,* com os coeficientes da componente de fluxo;

$\overline{\boldsymbol{D}}$: matriz *3nc x 3nc,* referente aos coeficientes das componentes do campo corretivo do fluxo nos pontos internos somados ao termo independente;

Reordenando as matrizes e vetores para separar os valores prescritos das incógnitas, chega-se:

$$q_i = -\boldsymbol{A'}\, x + f' + \overline{\boldsymbol{D}}\, q_i^A \tag{4.39}$$

onde o vetor *f'* é obtido de maneira análoga ao vetor *f*, bem como ***A'*** em relação à matriz ***A*.**

Substituindo equação (4.35) em (4.39):

$$q_i = \boldsymbol{V}\ q_i^A + n \tag{4.40}$$

onde:

$$\boldsymbol{V} = \overline{\boldsymbol{D}} - \boldsymbol{A}'\,\boldsymbol{R}$$

$$n = f' - \boldsymbol{A}'\,m$$

O valor da derivada do potencial, q_i, pode ser obtido de duas maneiras, como segue adiante.

- **Método de Eliminação *Gauss***

Este é o método mais usual. Por ele chega-se a um simples sistema que pode ser resolvido através de eliminação de *GAUSS*.

Desenvolvimento:

$$q_i = \boldsymbol{V}\ q_i^A + n \tag{4.41}$$

$$q_i - \boldsymbol{V}\ q_i^A = n$$

$$q_i - \boldsymbol{V}\left\{-\boldsymbol{K}^V\right\} q_i = n$$

Definindo uma matriz $\boldsymbol{VK}$ sob a forma de $\boldsymbol{VK} = \boldsymbol{V}\left\{-\boldsymbol{K}^V\right\}$, tem-se que:

$$\left[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{VK}\right] q_i = n \tag{4.42}$$

Onde

$\boldsymbol{I}$: matriz identidade *3nc x 3nc;*

$\boldsymbol{K}^V$: matriz diagonal *3nc x 3nc.*

- **Processo Iterativo**

Neste processo o cálculo do termo q_i é calculado por um simples processo iterativo. O seu valor inicial é dado como zero até que se converge para o seu devido valor num número determinado de iterações de acordo com um critério de parada a ser estabelecido.

Sua fórmula é apresentada a seguir.

$$q_i^{k+1} = \boldsymbol{VK}\, q_i^k + n\,, \text{ com } K \in N. \tag{4.43}$$

Com isso, o termo q_i é calculado e para achar o vetor de incógnitas *x*, basta substituí-lo na equação (4.35).

4.4.2 - Análise Linear

A) Sistema Principal

Para apresentar este procedimento, leva-se em consideração que a seguinte relação linear: $k \cdot q = a \cdot u + b$ é prescrita em todos os nós do contorno[5].

Podemos reescrever a equação (4.33) da seguinte maneira.

$$\boldsymbol{H}\, u = \boldsymbol{G}\left(\frac{a \cdot u + b}{k}\right) + \boldsymbol{D}\, q_i^A \tag{4.44}$$

$$\left(\boldsymbol{H} - \boldsymbol{G} \cdot {}^{a}\!/_{k}\right) \cdot u = \boldsymbol{G} \cdot \left({}^{b}\!/_{k}\right) + \boldsymbol{D}\, q_i^A \tag{4.45}$$

Comparando com a equação (4.34), implica que:

$$\begin{gathered} A = \left(\boldsymbol{H} - \boldsymbol{G}\ {}^{a}\!/_{k}\right) \\ x = u \\ f = \boldsymbol{G}\left({}^{b}\!/_{k}\right) \end{gathered} \tag{4.46}$$

[5] *a* representa o coeficiente angular e *b*, o coeficiente linear da reta.

B) Sistema Secundário

De forma análoga, obtém as seguintes igualdades para a equação (4.39);

$$A' = \left(\boldsymbol{H'} - \boldsymbol{G'} \; a/k \right)$$
$$f' = \boldsymbol{G'} \left(b/k \right) \tag{4.47}$$

4.4.3 - Análise Não Linear

Por questão de praticidade, pois neste caso, a aplicabilidade maior se refere ao problema de proteção catódica, também regida por *Laplace* (ver Anexo [B]), usaremos a notação adequada. O potencial eletroquímico será representado por ϕ e a sua densidade de corrente na posição adjacente ao ponto representada por *i.*

Quando as condições de contorno são curvas de polarização, o sistema de equações não-lineares resultante é resolvido pelo método de *Newton-Raphson*.

O programa desenvolvido considera que estas curvas sejam fornecidas por pontos, ou seja, pares de valores *i* e ϕ (de ordem crescente em relação à ϕ) e que assume uma variação linear entre si, conforme ilustra a figura (4.5).

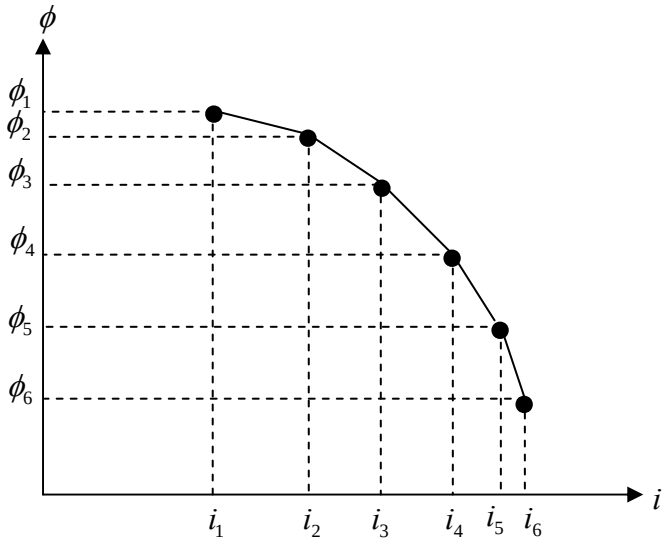


Figura 4.5 – Modelo de curva de polarização

O método de *Newton-Raphson* pode ser formulado desprezando, no desenvolvimento da série de Taylor, os termos que envolvem derivadas de segunda e de ordem superior. Com isso, obtém-se que:

$$i^m = i^{m-1} + \left(\frac{\partial i}{\partial \phi}\right)^{m-1} \left(\phi^m - \phi^{m-1}\right) \tag{4.48}$$

Reorganizando,

$$i^m - i^{m-1} = \Delta i^m = \left(\frac{\partial i}{\partial \phi}\right)^{m-1} \Delta \phi^m \Rightarrow i^m = i^{m-1} + \Delta i^m \tag{4.49}$$

podem ser introduzidas as seguintes formas incrementais:

$$\phi^m = \phi^{m-1} + \Delta \phi^m \tag{4.50}$$

$$\Delta i^m = \boldsymbol{T}^{m-1} \cdot \Delta \phi^m$$

onde $T^{m-1} = \partial i / \partial \phi$ representa a matriz tangente ou jacobiana.

Logo, partindo da equação (4.33) e admitindo que todos os pontos nodais do contorno obedecem a esta condição de contorno não linear, obtém-se que:

$$\boldsymbol{H}\, \phi^m = \boldsymbol{G}\, i^m + \boldsymbol{D}\, i_i^{A(m)} \tag{4.51}$$

É importante salientar que o termo i_i^A não sofre nenhuma transformação porque será calculado de forma iterativa, como será descrito detalhadamente na seqüência.

Substituindo as equações (4.49) e (4.50) em (4.51), tem-se que:

$$\boldsymbol{H}\left(\phi^{m-1}+\Delta\phi^{m}\right)=\boldsymbol{G}\left(i^{m-1}+\Delta i^{m}\right)+\boldsymbol{D}\,i_i^{A} \tag{4.52}$$

$$\left(\boldsymbol{H}-\boldsymbol{G}\,\boldsymbol{T}^{\boldsymbol{m\text{-}1}}\right)\Delta\phi^{m}=\boldsymbol{G}\,i^{m-1}-\boldsymbol{H}\phi^{m-1}+\boldsymbol{D}\,i_i^{A}$$

Para facilitar, denomina-se:

$$\boldsymbol{HGT}^{\boldsymbol{m\text{-}1}}=\boldsymbol{H}-\boldsymbol{G}\,\boldsymbol{T}^{\boldsymbol{m\text{-}1}} \quad \text{e} \quad \psi^{m-1}=\boldsymbol{G}\,i^{m-1}-\boldsymbol{H}\phi^{m-1}+\boldsymbol{D}\,i_i^{A} \tag{4.53}$$

Deste modo:

$$\boldsymbol{HGT}^{\boldsymbol{m\text{-}1}}\,\Delta\phi^{m}=\psi^{m-1}\ \text{(Sistema Principal)} \tag{4.54}$$

Pode-se observar que o termo ψ^{m-1} corresponde a uma função de resíduos que deve ser tomada tão pequena quanto possível. Quando $\psi^{m-1}\to 0$, temos que $\Delta\phi^{m}\to 0$, o que significa que a solução ϕ^{m} é convergente.

Quanto à matriz tangente ***T***, sabendo que a relação de *i* e ϕ é linear (por trechos) dada por $i=a\cdot\phi+b$, seus coeficientes são da seguinte forma:

$$\boldsymbol{T}_{ij}=\begin{cases}0 & \text{quando } i\neq j\\ a & \text{quando } i=j\end{cases}$$

onde *a* é o coeficiente angular de cada trecho reto da curva de polarização.

- **Cálculo iterativo de i_i^A**

O cálculo do termo i_i^A é realizado por meio de iterações e seu algoritmo é descrito da seguinte forma.

1) Loop de iterações de i_i^A, onde seu valor inicial é dado como zero;

1.1) Resolução iterativa (*Newton-Raphson*) do Sistema Principal $\boldsymbol{HGT^{m-1}}\ \Delta\phi^m = \psi^{m-1}$ para encontrar $\Delta\phi^m$;

1.2) Após sua convergência, efetua-se $\phi^m = \phi^{m-1} + \Delta\phi^m$ e, na seqüência $i^m = a\phi^m + b$;

1.3) Essas variáveis, i^m e ϕ^m, são separadas e substituídas na equação $i_i = \boldsymbol{G'}\, i - \boldsymbol{H'}\, \phi^m + \overline{\boldsymbol{D}}\, i_i^{A(m)}$. (Sistema Secundário)

1.4) O valor de $i_i^{A(m)}$ é encontrado e sua norma é calculada obedecendo a relação: $norma \leq 10^{-5}$.

1.5) Se convergir, o programa pára com as iterações e i e ϕ são calculados. Senão, volta ao item 1.1, onde $i_i^{A(m)}$ assume o valor $i_i^{A(m-1)}$.

CAPÍTULO V

INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

CAPÍTULO V - INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

5.1 – Introdução

Quando ponto fonte ξ se encontra fora do domínio de integração, as integrais vistas anteriormente não são singulares e podem ser obtidas por meio de integração numérica de *Gauss*. Entretanto, quando o ponto fonte está muito próximo ou contido no domínio de integração, essas integrais se tornam quase-singulares ou singulares, respectivamente e alguns cuidados especiais são necessários para garantir a melhoria dos resultados.

5.2 - Integrais Não Singulares

Considerando que as integrais das equações (3.28) e (3.38) não sejam singulares, seus termos podem ser expressos, após seu mapeamento respectivo em elementos (contorno) ou células (domínio), da seguinte maneira:

$$h^j = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} q^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1,\eta_2)\,|G|\,d\eta_1 d\eta_2 \tag{5.1}$$

$$g^j = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} u^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1,\eta_2)\,|G|\,d\eta_1 d\eta_2 \tag{5.2}$$

$$d_i^c = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} u,_i^*(\xi,x)\,|J|\,d\eta_1\,d\eta_2\,d\eta_3 \tag{5.3}$$

$$\overline{d}_i^c = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \frac{\partial u,_i^*(\xi,x)}{\partial x_m}|J|\,d\eta_1\,d\eta_2\,d\eta_3 \tag{5.4}$$

Como o cálculo das expressões acima pode ser realizado através da integração numérica de *Gauss*, elas se tornam:

$$h^j = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\left(q^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1,\eta_2)\,|G|\,w_L\,w_N\right) \tag{5.5}$$

$$g^j = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\left(u^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1,\eta_2)\,|G|\,w_L\,w_N\right) \tag{5.6}$$

$$d_i^c = \sum_{L=1}^{NG_L} \sum_{N=1}^{NG_N} \sum_{K=1}^{NG_K} \left(u,_i^* (\xi, x) \left| J \right| w_L \, w_N \, w_K \right) \tag{5.7}$$

$$\bar{d}_i^c = \sum_{L=1}^{NG_L} \sum_{N=1}^{NG_N} \sum_{K=1}^{NG_K} \left(\frac{\partial u,_i^* (\xi, x)}{\partial x_m} \left| J \right| w_L \, w_N \, w_K \right) \tag{5.8}$$

A fim de obter melhores resultados, foram utilizados dois procedimentos. No primeiro, foi implementado um processo seletivo para a escolha do número de pontos de *Gauss* que determina a menor distância relativa, calculada como quociente entre a distância mínima entre o ponto fonte e o ponto campo e a distância máxima entre o nós geométricos. Quanto menor a distância relativa, maior o número de pontos de *Gauss* necessários.

O segundo procedimento, proposto por Telles [22], se trata da transformação cúbica de coordenadas, que consiste em aplicar uma transformação não linear nas coordenadas locais.

Supondo que γ_i é uma coordenada do ponto de integração na direção *i.* A transformação dessa coordenada tem a seguinte formulação:

$$\eta_i^T = a_i \, \gamma_i^3 + b_i \, \gamma_i^2 + c_i \, \gamma_i + d_i \tag{5.9}$$

O Jacobiano da transformação é dado por:

$$J_i^T = 3 a_i \, \gamma_i^2 + 2 b_i \, \gamma_i + c_i \tag{5.10}$$

As constantes a_i, b_i, c_i, d_i dependem da posição relativa entre o ponto fonte e o campo e são determinadas pelas seguintes condições:

$$J_i^T(\gamma) = \left. \frac{\partial \eta}{\partial \gamma} \right|_{\eta = \bar{\eta}} = \bar{r}_i$$

$$\eta_i(1) = 1$$

$$\eta_i(-1) = -1$$

$$\left. \frac{\partial^2 \eta_i}{\partial^2 \gamma_i} \right|_{\eta_i = \bar{\eta}_i} = 0$$

onde $\bar{r}_i$ é um parâmetro livre dependente da distância normalizada D_i (apresentada adiante).

Com estas condições o γ_i se mantêm no mesmo intervalo de integração *(-1, 1)* da coordenada natural η_i, o que faz com que J_i^T possua um mínimo em $\gamma_i = \bar{\gamma}_i$. Este é mapeado em $\eta_i(\bar{\gamma}) = \bar{\eta}_i$ correspondente ao ponto de elemento campo mais próximo ao do fonte.

A distância mínima normalizada D_i é expressa por:

$$D_i = \frac{2R^{\min}}{L_i} \tag{5.11}$$

onde $R^{\min}$ significa a distância mínima entre o ponto fonte e o campo e L_i indica o comprimento do elemento ou célula na direção *i*.

Para encontrar o valor do parâmetro $\bar{r}$,apresenta-se a seguinte relação:

$$\bar{r} = 0{,}85 + 0{,}24\ ln(D) \qquad para\ 0{,}05 \le D \le 1{,}3$$

$$\bar{r} = 0{,}893 + 0{,}0832\ ln(D) \qquad para\ 1{,}3 \le D \le 3{,}618$$

$$\bar{r} = 1 \qquad para\ D \ge 3{,}618$$

A coordenada $\bar{\gamma}$ é representada por:

$$\bar{\gamma}_i = \sqrt[3]{[-q_i + \sqrt{(q_i^{\,2} + p_i^{\,3})}]} + \sqrt[3]{[-q_i - \sqrt{(q_i^{\,2} + p_i^{\,3})}]} + \frac{\bar{\eta}_i}{1 + 2\bar{r}_i} \tag{5.12}$$

onde,

$$q_i = \frac{1}{2(1+2\bar{r}_i)}\left[\left(\bar{\eta}_i\ (3 - 2\bar{r}_i) - \frac{2\bar{\eta}_i^{\,3}}{1+2\bar{r}_i}\right)\frac{1}{1+2\bar{r}_i} - \bar{\eta}_i\ \right] \tag{5.13}$$

$$p_i = \frac{1}{3(1+2\bar{r}_i)^2}\left[4\bar{r}_i(1-\bar{r}_i) + 3(1-\bar{\eta}_i^{\,2})\right] \tag{5.14}$$

E, finalmente, os coeficientes *a*, *b*, *c* e *d* dos polinômios (5.9) e (5.10) são:

$$Q_i = 1 + 3\bar{\gamma}_i^2 \tag{5.15a}$$

$$a_i = \frac{1-\bar{r}_i}{Q_i} \tag{5.15b}$$

$$b_i = -\frac{3(1-\bar{r}_i)\cdot\bar{\gamma}_i}{Q_i} \tag{5.15c}$$

$$c_i = \frac{\left(\bar{r}_i + 3\bar{\gamma}_i^2\right)}{Q_i} \tag{5.15d}$$

$$d_i = -b_i \tag{5.15e}$$

Com isso, é realizado o cálculo de η_i^T em função de γ.

Após a aplicação da transformação cúbica, as expressões (5.5), (5.6), (5.7) e (5.8) passam a ser:

$$h^j = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\left(q^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1^T,\eta_2^T)\,|G|\,w_L\,w_N\,J_L^T J_N^T\right) \tag{5.16}$$

$$g^j = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\left(u^*(\xi,x)\,\Phi(\eta_1^T,\eta_2^T)\,|G|\,w_L\,w_N\,J_L^T\,J_N^T\right) \tag{5.17}$$

$$d_i^c = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\sum_{K=1}^{NG_K}\left(u,_i^*(\xi,x)\,|J|\,w_L\,w_N\,w_K\,J_L^T J_N^T J_K^T\right) \tag{5.18}$$

$$\bar{d}_i = \sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\sum_{K=1}^{NG_K}\left(\frac{\partial u,_i^*(\xi,x)}{\partial x_m}\,|J|\,w_L\,w_N\,w_K\,J_L^T\,J_L^T\,J_L^T\right) \tag{5.19}$$

5.3 - Integrais Singulares

Nas expressões (5.1), (5.2), (5.3) e (5.4) o jacobiano e as funções de interpolação são regulares, enquanto que os termos *u**, *q**, u_i^* e $\frac{\partial u_i^*}{\partial x_m}$ são singulares devido à dependência com a distância *r* entre o ponto fonte e campo.

Por isso, adotaremos recurso proposto por Telles [23], no cálculo desses coeficientes de influência. Tal procedimento consiste em transladar o sistema de coordenadas retangulares para o ponto fonte. Em seguida utiliza um sistema de coordenadas polares centrado em ξ e subdivide o domínio de integração.

Para o caso das células, seu domínio será subdivido em 6 pirâmides (Neitzel [16]), enquanto que para os elementos quadrangulares, o domínio se subdividirá em 4 triângulos, como descrito a seguir.

5.3.1 - Subdivisão dos Elementos

Assumindo que o ponto ξ tem coordenada η_i^{PF} no sistema retangular local (η_1, η_2), as coordenadas no sistema transladado $(\eta_1^{'}, \eta_2^{'})$ de qualquer ponto campo *i*, será dado por:

$$\begin{aligned} \eta_1^{'} &= \eta_1 - \eta_1^{PF} \\ \eta_2^{'} &= \eta_2 - \eta_2^{PF} \end{aligned} \tag{5.20}$$

Considerando que o centro seja ξ, a transformação para coordenadas polares será:

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{(\eta_1^{'})^2 + (\eta_2^{'})^2} \\ \theta &= arctan\left(\eta_1^{'} \Big/ \eta_2^{'}\right) \end{aligned} \tag{5.21}$$

A transformação inversa é dada por:

$$\begin{aligned} \eta_1^{'} &= \rho\, cos(\theta) \\ \eta_2^{'} &= \rho\, sen(\theta) \end{aligned} \tag{5.22}$$

O Jacobiano desta transformação é:

$$J_p = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial \eta_1'}{\partial \rho} & \dfrac{\partial \eta_1'}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial \eta_2'}{\partial \rho} & \dfrac{\partial \eta_2'}{\partial \theta} \end{vmatrix} = \rho \tag{5.23}$$

Seu diferencial de área é definido por:

$$d\eta_1\, d\eta_2 = d\eta_1'\, d\eta_2' = \rho\, d\rho\, d\theta \tag{5.24}$$

Subdividindo o domínio quadrado em quatro triângulos, com vértices comum em ξ, os coeficientes de influência podem ser efetuados por:

$$h^j = \sum_{NT=1}^{4} \left[\int_{\theta_i}^{\theta_f} \int_{\rho_i}^{\rho_f} q^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, d\rho \, d\theta \right] \tag{5.25}$$

$$g^j = \sum_{NT=1}^{4} \left[\int_{\theta_i}^{\theta_f} \int_{\rho_i}^{\rho_f} u^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, d\rho \, d\theta \right] \tag{5.26}$$

Com a presença de ρ no integrando, a singularidade em g^j é eliminada enquanto que em h^j se reduz de uma ordem, uma vez que $\rho = r$.

Mesmo sendo h^j de ordem $O\left(1/r\right)$, sua integral imprópria será convergente, pois seu valor principal coincide com o resultado obtido ao ser calculado no sentido usual. Isto é válido, pois se garante um limite finito *L*.

$$L = \lim_{r \to 0} \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial n} \tag{5.27}$$

Para $\forall \theta, \theta_i \leq \theta \leq \theta_f$, como demonstrado em Mansur [15] para o domínio 2-D.

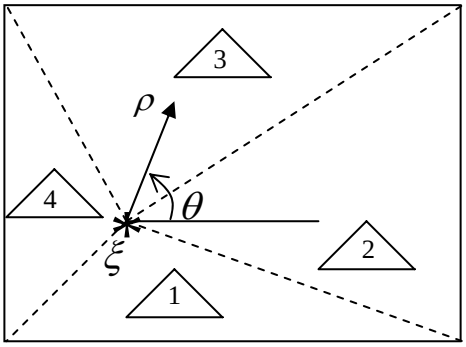


Figura 5.1 – Subdivisão do domínio de integração em triângulos.

Admitindo a subdivisão do elemento quadrangular, conforme a figura (5.1), com os triângulos numerados no mesmo sentido que os nós geométricos e sendo o triangulo 1 o que possui, na numeração local, os vértices 1 e 2 do elemento, podemos definir os seguintes limites de integração:

$$\begin{aligned} \theta_i &= \theta_2 = \arctan\left(\frac{\eta_2^{'(2)}}{\eta_1^{'(2)}}\right) \\ \theta_f &= \theta_3 = \arctan\left(\frac{\eta_2^{'(3)}}{\eta_1^{'(3)}}\right) \\ \rho_i &= \lim_{\rho\to 0}\rho = 0 \\ \rho_f &= f(\theta) = \eta_1^{'(2)}\sec(\theta) = \eta_1^{'(3)}\ \sec(\theta) \end{aligned} \tag{5.28}$$

onde $\eta_1^{'(i)}$ representa a coordenada no nó *i* na direção 1, no sistema de retangular local transladado $(\eta_1^{'}, \eta_2^{'})$.

Na figura (5.2) são ilustradas as coordenadas dos vértices 2 e 3 do triângulo 2.

Podemos observar que os limites de integração variam de um triângulo para outro, portanto são usadas matrizes de rotação para agilizar o processo. As coordenadas dos triângulos 1, 3 e 4 são rotacionados de modo que fiquem na posição do triângulo 2, com o lado do vértice ξ sempre paralelo ao eixo $\eta_2^{'}$ e na direção positiva de $\eta_1^{'}$.

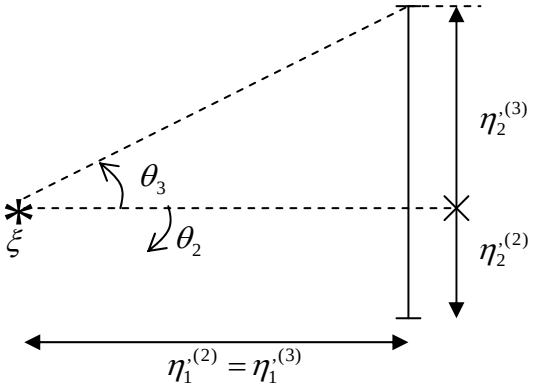


Figura 5.2 – Coordenadas dos vértices do triângulo 2.

Com isso os limites de integração são os mesmos dados pela expressão (5.28) com suas coordenadas rotacionadas.

Simultaneamente, é feita a rotação e translação das coordenadas dos vértices dos triângulos da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \eta_1^{'} \\ \eta_2^{'} \end{bmatrix} = \boldsymbol{R} \begin{bmatrix} \eta_1 - \eta_1^{pf} \\ \eta_2 - \eta_2^{pf} \end{bmatrix} \tag{5.29}$$

onde $\boldsymbol{R}$ são matrizes de rotação para cada um dos triângulos indicados pela figura (5.2) e cujos valores são os seguintes:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R_1} &= \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \eta_1^{'} = -\left(\eta_2 - \eta_2^{pf}\right) \\ \eta_2^{'} = \eta_1 - \eta_1^{pf} \end{cases} \\
\boldsymbol{R_2} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \eta_1^{'} = \eta_1 - \eta_1^{pf} \\ \eta_2^{'} = \eta_2 - \eta_2^{pf} \end{cases} \\
\boldsymbol{R_3} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \eta_1^{'} = \eta_2 - \eta_2^{pf} \\ \eta_2^{'} = -\left(\eta_1 - \eta_1^{pf}\right) \end{cases} \\
\boldsymbol{R_4} &= \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \eta_1^{'} = -\left(\eta_1 - \eta_1^{pf}\right) \\ \eta_2^{'} = -\left(\eta_2 - \eta_2^{pf}\right) \end{cases}
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Como, para a integração numérica de *Gauss* os limites de integração devem pertencer ao intervalo [-1,1], faz-se necessário uma outra transformação de coordenadas para ρ e θ.

A transformação dos limites de integração $\left[\theta_i, \theta_f\right]$, correspondente a θ, para a coordenada θ', de domínio [-1,1], geram um Jacobiano $J_{\theta'}$, definido por:

$$\int_{\theta_i}^{\theta_f} d\theta \rightarrow \int_{-1}^{1} J_{\theta'}\, d\theta'$$

$\theta' = -1$ em $\theta = \theta_2$

$\theta' = 1$ em $\theta = \theta_3$

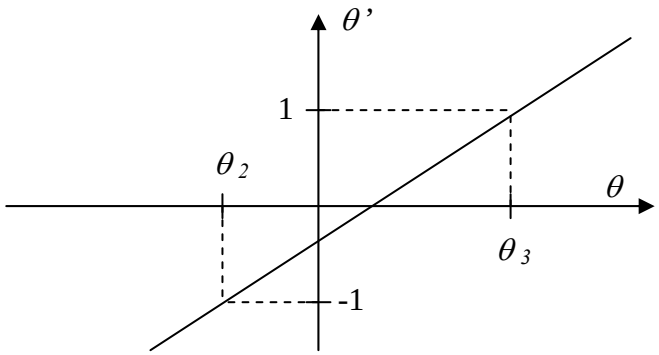


Figura 5.3 – Relação entre θ e θ'.

Considerando a reta da figura (5.3), pode-se concluir que seu coeficiente angular é dado por:

$$\frac{2}{\theta_3 - \theta_2}$$

Portanto a equação da reta pode ser escrita como:

$$\theta' - 1 = \frac{2}{\theta_3 - \theta_2}\left(\theta - \theta_3\right) \Rightarrow \theta' = \frac{2\theta - \left(\theta_2 - \theta_3\right)}{\theta_3 - \theta_2}$$

A inversa é dada por:

$$\theta = \frac{1}{2}\left[\left(\theta_2 - \theta_3\right)\theta' + \theta_2 + \theta_3\right]$$

e seu jacobiano representado por:

$$J_{\theta'} = \frac{d\theta}{d\theta'} = \frac{1}{2}\left(\theta_2 - \theta_3\right)$$

Deste modo, os coeficientes de influência do triângulo 2 se tornam:

$$h^2 = \int_{-1}^{1}\int_{0}^{f(\theta)} q^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, J_{\theta'} \, d\rho \, d\theta' \tag{5.31}$$

$$g^2 = \int_{-1}^{1}\int_{0}^{f(\theta)} u^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, J_{\theta'} \, d\rho \, d\theta' \tag{5.32}$$

De maneira similar encontramos os limites de integração da coordenada ρ.

$$\int_{0}^{\rho_f} d\theta \rightarrow \int_{-1}^{1} J_{\rho'} \, d\rho'$$

$\rho' = -1$ em $\rho = \rho_i = 0$

$\rho' = 1$ em $\rho = \rho_f = f(\theta)$

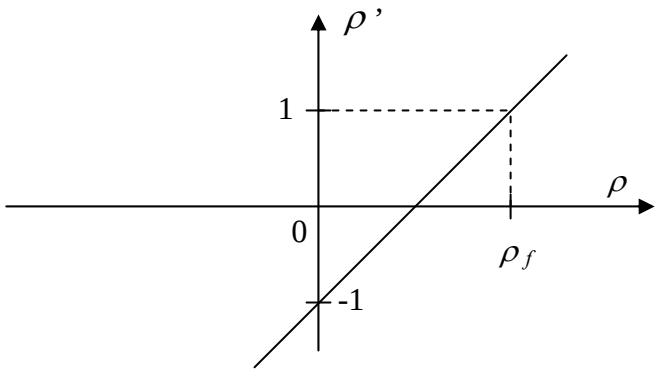


Figura 5.4 - Relação entre as coordenadas ρ e ρ'.

Coeficiente angular: $\dfrac{2}{\rho_f}$

Equação da reta: $\rho' = \dfrac{2\rho - \rho_f}{\rho_f}$

Inversa: $\rho = \dfrac{\rho_f}{2}(\rho' + 1)$

Jacobiano: $J_{\rho'} = \dfrac{\rho_f}{2} = \dfrac{f(\theta)}{2}$

Com isso, as expressões (5.31) e (5.32), podem ser reescritas como:

$$h^2 = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} q^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, J_{\theta'} J_{\rho'} \, d\rho \, d\theta' \tag{5.33}$$

$$g^2 = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} u^* \, \Phi \, |G| \, \rho \, J_{\theta'} J_{\rho'} \, d\rho \, d\theta' \tag{5.34}$$

Lembrando que as integrais em h^j devem ser efetuadas no sentido do valor principal de *Cauchy*. Entretanto, para o caso de potencial 3-D estas integrais coincidem com integrais no sentido usual (*Riemann*), já que são impróprias convergentes.

Finalmente, após a aplicação dessa técnica aos elementos de contorno, e dividi-los em 4 triângulos, podemos reescrever as expressões (5.5) e (5.6) da seguinte maneira:

$$h^j = \sum_{NT=1}^{4} \left\{ \sum_{L=1}^{NG_L} \left[\sum_{N=1}^{NG_N} \left(q^*(\xi, x) \, \Phi \, |G| \, \rho \, \frac{f(\theta)}{2} \, w_\rho \right) \right] \frac{\theta_3 - \theta_2}{2} \, w_\theta \right\} \tag{5.35}$$

$$g^j = \sum_{NT=1}^{4} \left\{ \sum_{L=1}^{NG_L} \left[\sum_{N=1}^{NG_N} \left(u^*(\xi, x) \, \Phi \, |G| \, \rho \, \frac{f(\theta)}{2} \, w_\rho \right) \right] \frac{\theta_3 - \theta_2}{2} \, w_\theta \right\} \tag{5.36}$$

5.3.2 - Subdivisão das Células

Considerando o sistema de coordenadas locais (η_1, η_2, η_3) transladado para o ponto fonte e as coordenadas esféricas indicadas na figura (5.5) a seguir, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \eta_1' &= \rho \, \text{sen}\phi \cos\theta \\ \eta_2' &= \rho \, \text{sen}\phi \, \text{sen}\theta \\ \eta_3' &= \rho \, cos\phi \end{aligned} \tag{5.37}$$

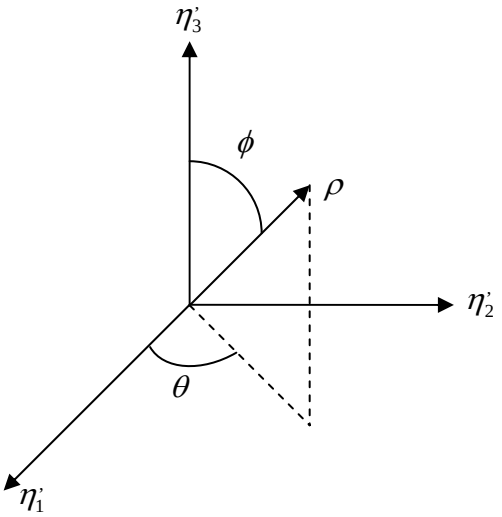


Figura 5.5 - Coordenadas esféricas

Na translação do sistema de coordenadas locais para o ponto fonte, indicada na figura (5.5), as coordenadas $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$ são obtidas com:

$$\begin{aligned} \eta_1' &= \eta_1 - \eta_1^{PF} \\ \eta_2' &= \eta_2 - \eta_2^{PF} \\ \eta_3' &= \eta_3 - \eta_3^{PF} \end{aligned} \tag{5.38}$$

onde η_i^{PF} representa as coordenadas do ponto fonte no sistema local (η_1, η_2, η_3).

O jacobiano desta transformação de coordenadas esféricas é dado por:

$$|J_E| = \rho^2 \operatorname{sen}\phi \tag{5.39}$$

Após esta transformação, as expressões (5.3) e (5.4) tornam-se:

$$\int_{\theta} \int_{\phi(\theta)} \int_{\rho(\theta,\phi)} u_{,i}^{*}(\xi, x) |J| |J_E| \, d\rho \, d\phi \, d\theta \tag{5.40}$$

$$\int_{\theta} \int_{\phi(\theta)} \int_{\rho(\theta,\phi)} \frac{\partial u_{,i}^{*}(\xi, x)}{\partial x_m} |J| |J_E| \, d\rho \, d\phi \, d\theta \tag{5.41}$$

onde as variáveis ξ e x são funções de (θ, ϕ, ρ).

As integrais singulares são efetuadas considerando a divisão da célula em seis pirâmides, tendo como bases as faces do hexaédro e, como vértices o ponto fonte. Sempre se considera uma pirâmide base, onde todos os cálculos são efetuados e, para as demais, os resultados são obtidos por meio da rotação.

Uma célula que possua o ponto fonte no interior de seu domínio tem a pirâmide, utilizada como base, representada de acordo com a figura (5.6).

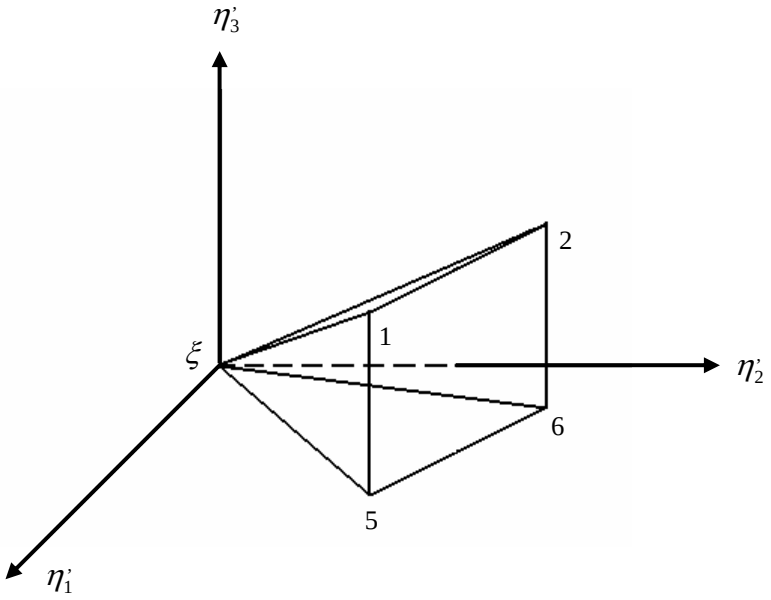


Figura 5.6 – Pirâmide Base

- **Integral de domínio d_i**

Após a aplicação da transformação de coordenadas esféricas, a singularidade contida na expressão (5.3), de ordem $O\left(1/r^2\right)$, pode ser removida pela presença da variável ρ^2 no integrando $\left(\rho = O(r)\right)$. Com isso, a integral de domínio, presente na equação (3.28), não é singular. Sua integração, efetuada sobre o domínio de seis pirâmides, pode ser executada numericamente, aplicando a quadratura de *Gauss*.

Os limites de integração definidos a partir da pirâmide base mostrada na figura (5.6), consideram a mesma altura *H* definida pela coordenada η_2' de qualquer um dos nós indicados.

Para o ângulo θ, o limite inicial e final são, respectivamente, dados por:

$$\theta_i = \arctan\left(\frac{H}{\eta_1^{'(1,5)}}\right)$$
$$\theta_f = \arctan\left(\frac{H}{\eta_1^{'(2,6)}}\right) \tag{5.42}$$

Quanto aos limites de integração, em relação à ϕ, segue-se que:

$$\phi_i = \arctan\left(\frac{H}{\eta_3^{'(1,2)} \cdot \operatorname{sen}\theta}\right)$$
$$\phi_f = \arctan\left(\frac{H}{\eta_3^{'(5,6)} \cdot \operatorname{sen}\theta}\right) \tag{5.43}$$

Os números entre parênteses contidos nas variáveis η' das expressões acima, indicam os nós das pirâmides base em relação aos quais o valor das coordenadas destas variáveis pode ser tomado. Exemplificando, o termo $\eta_3^{'(1,2)}$ significa que o valor desta coordenada pode ser o pertencente ao nó 1 ou ao nó 2 da pirâmide base.

A variável $\rho(\theta,\phi)$ tem limite inicial igual a zero e o limite final é dado por:

$$\rho_f(\theta,\phi) = \left|\frac{H}{(\operatorname{sen}\phi \cdot \operatorname{sen}\theta)}\right| \tag{5.44}$$

Considerando estes limites de integração definidos pelas equações (5.42), (5.43) e (5.44), a expressão (5.40) terá variáveis θ, ϕ, ρ. Para a integração de Gauss, estas variáveis são expressas sob a seguinte forma:

$$\theta = J_\theta \cdot \theta_G + \frac{(\theta_i + \theta_f)}{2}$$
$$\phi = J_\phi \cdot \phi_G + \frac{(\theta_i + \theta_f)}{2} \tag{5.45}$$
$$\rho = J_\rho \cdot \rho_G + \rho_f(\theta,\phi)$$

onde θ_G, ϕ_G, ρ_G representam as abscissas de Gauss e $J_\theta, J_\phi, J\rho$ são os jacobianos da transformação das variáveis, dados por:

$$J_\theta = \frac{(\theta_f - \theta_i)}{2}$$
$$J_\phi = \frac{(\phi_f - \phi_i)}{2} \qquad (5.46)$$
$$J_\rho = \frac{\rho(\theta,\phi)}{2}$$

Os limites de integração indicados pelas equações (5.42), (5.43) e (5.44) foram escritos em relação à pirâmide base e variam de acordo com a posição das demais. Por isso, é realizada uma rotação destas posições para a pirâmide base, a fim de que estes limites possam ser usados em todas as pirâmides. Assim, depois de efetuadas as operações, os resultados obtidos são novamente rotacionados para as suas posições originais.

Finalmente, a expressão para a integração numérica da equação (5.40), para as seis pirâmides que representam o domínio Ω_c é:

$$\sum_{NP=1}^{6}\left[\sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\sum_{K=1}^{NG_K}\left[u,_i^*(\xi,x)\,|J||J_E|\right]_{L,N,K} J_K^\rho J_N^\phi J_L^\theta w_\rho\, w_\phi\, w_\theta\right] \qquad (5.47)$$

- **Integral de domínio $\bar{d}_i$**

A singularidade da integral de domínio presente na equação (3.38) é de ordem $O\left(1/r^3\right)$. Mas, após a transformação para coordenadas esféricas, esta singularidade será reduzida à $O\left(1/r\right)$ e sua remoção foi realizada através da retirada de um domínio esférico de raio R_c, em torno do ponto singular. Neste domínio, a integral da função $\frac{\partial u,_i^*(\xi,x)}{\partial x_m}$ vale zero devido à existência do valor principal de *Cauchy*. Com a remoção do domínio esférico, esta integral se torna não-singular e pode ser calculada numericamente.

1. Obtenção do raio da esfera

O raio da esfera R_c é obtido pela distância entre o nó funcional da célula e as superfícies representadas por suas faces. Após determinar tais distâncias, a menor delas é escolhida para ser utilizada como raio.

2. Integração numérica

Determinado R_c, a integração numérica é efetuada no domínio da célula dividido em seis pirâmides. A integração é feita sobre a célula mapeada no espaço $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$ e são geradas pirâmides iguais.

Considerando a pirâmide base, representada pela figura (5.6), os limites de integração para o ângulo θ são:

$$\theta_i = \frac{\pi}{4}$$
$$\theta_f = \frac{3\pi}{4} \tag{5.48}$$

Para o ângulo ϕ, os limites de integração são os mesmos representados pela equação (5.43). Quanto à variável $\rho(\theta,\phi)$, seu limite final é idêntico ao da equação (5.44), mas seu limite inicial merece uma melhor análise, descrita na seqüência.

Deve-se levar em consideração a remoção da esfera de raio R_c, no espaço real. Esta esfera tem sua forma modificada no espaço $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$, fazendo com que ρ_i modifique-se para cada ponto de integração.

Conhecidos os valores de θ_G e ϕ_G para um determinado ponto de integração numérica *G*, na pirâmide base, pode ser construído um vetor Np_b que passe por *G.* Tal vetor será rotacionado para sua posição real sobre a pirâmide que estiver sendo integrada através de:

$$Np_i = R_i \; Np_b$$

sendo que Np_i representa o vetor posicionado sobre a pirâmide *i* que está sendo integrada, R_i é a matriz de rotação correspondente e o Np_b, o vetor na pirâmide base.

Uma vez determinado Np_i, o problema passa a ser obter o comprimento correspondente a R_c, do espaço real, no espaço $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$, conhecendo a direção deste comprimento, dada pelo vetor Np_i, ou seja:

$$\rho_G : \left\| Np_i(\theta_G, \phi_G, \rho_G) \right\|_{[x,y,z]} = R_c$$

A solução adotada foi converter a situação acima em um problema escalar do tipo:

$$\text{determinar}\,\alpha : \left\| Np_i(\theta_G, \phi_G, \alpha) \right\|^2_{[x,y,z]} - R_c^2 = 0 \tag{5.49}$$

uma vez que, das três componentes que determinam o vetor Np_i no espaço $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$, duas ($\theta_G$ e ϕ_G) são conhecidas. Logo, a equação (5.49) torna-se:

$$\alpha : \sum_{j=1}^{3} \left[\sum_{m=1}^{8} \varphi_m(\theta_G, \phi_G, \alpha) x_j^m \right] - R_c^2 = 0 \tag{5.50}$$

Considerando que exista solução para o problema, ou seja, existe um comprimento no espaço $(\eta_1', \eta_2', \eta_3')$ correspondente à R_c no espaço real, foi escolhida, entre várias formas de solução existentes para o caso, a subrotina ZBREN, pertencente à biblioteca IMSL [11]. Por exigência do tipo de solução adotada pela subrotina, devem ser fornecidos dois valores da variável α que definam o intervalo que contenha a solução do problema. Como condição de programação deve-se ter:

$$F(\alpha_0) \cdot F(\alpha_1) < 0$$

indicando que, no intervalo (α_0, α_1), a função *F* representada pela equação (5.49) passa por um zero.

No caso do problema representado pela equação (5.49), o intervalo foi definido por $\alpha_0 = 0$, que é o centro da esfera no espaço $(\eta_1^i, \eta_2^i, \eta_3^i)$ e $\alpha_1 = 2$, valor que garante um comprimento para o vetor Np_i maior do que a célula mapeada e, conseqüentemente, maior que o raio R_c da esfera no espaço real. A facilidade de escolha destes limites também motivou pela escolha deste tipo de solução.

A solução do problema é o valor de α que satisfaça a equação (5.49) e forneça o valor de ρ_i, que representa o limite inferior de integração de $\rho(\theta,\phi)$ no espaço $(\eta_1^i, \eta_2^i, \eta_3^i)$ para o ponto de integração *G*.

A subrotina ZBREN exige que a função fornecida como argumento seja como escalar, descrita na forma de uma estrutura em linguagem FORTRAN do tipo FUNCTION, com um único argumento sendo este um escalar.

O procedimento de obtenção das variáveis de integração de Gauss, após a determinação de ρ_i detalhada acima, é idêntico aos já descritos, resultando:

$$\rho = J_\rho \cdot \rho_G + \frac{\rho_f - \rho_i}{2} \tag{5.51}$$

onde o Jacobiano J_ρ tem a forma:

$$J_\rho = \frac{\rho_f - \rho_i}{2} \tag{5.52}$$

A expressão final para a integração numérica da equação (5.41), considerando as seis pirâmides que representam o domínio total da célula é:

$$\sum_{NP=1}^{6}\left[\sum_{L=1}^{NG_L}\sum_{N=1}^{NG_N}\sum_{K=1}^{NG_K}\left[\frac{\partial u_i^*(\xi,x)}{\partial x_m}|J||J_E|\right]_{L,N,K} J_K^\rho J_N^\phi J_L^\theta w_\rho\, w_\phi\, w_\theta\right] \tag{5.53}$$

CAPÍTULO VI

APLICAÇÕES

CAPÍTULO VI – APLICAÇÕES

6.1 – Introdução

As seguintes aplicações têm como objetivo demonstrar o desempenho do Método de Simulação de um Campo Corretivo de Velocidades (MSCCV) para problemas de potencial tridimensional em meios heterogêneos.

Os resultados são comparados com as soluções analíticas e com o uso do Método de Sub-Regiões. Estas últimas obtidas por meio do programa PROCAT [18], cedido gentilmente, pelos professores José Claudio de Faria Telles e José Antônio Fontes Santiago.

6.2 – Exemplo 1

Este problema foi apresentado por Araújo e Silva [1] e trata da condução de calor em um hexaédro. O modelo apresenta duas regiões distintas com seus respectivos coeficientes k_1 e k_2. Considerando que $k_2 = k$, as seguintes simulações foram realizadas: $k_1 = k_2$, $k_1 = 10^3 k_2$, $k_1 = 10^6 k_2$, $k_1 = 10^9 k_2$, $k_1 = 10^{10} k_2$, $k_1 = 10^{11} k_2$, $k_1 = 10^{12} k_2$. A discretização, para o MSCCV, foi de 64 elementos lineares e 32 células.

Porém quando se trata de Sub-Regiões, devido às interfaces da região 1, o modelo é dividido em 8 regiões. Levando em consideração que k_i corresponde ao coeficiente de condutividade térmica da sub-região Ω_i, as mesmas simulações foram realizadas, como se segue: $k_1 = k$, $k_1 = 10^3 k$, $k_1 = 10^6 k$, $k_1 = 10^9 k$, $k_1 = 10^{10} k$, $k_1 = 10^{11} k$, $k_1 = 10^{12} k$ e $k_2 = k_3 = k_4 = k_5 = k_6 = k_7 = k_8 = k$. Nesse caso, a discretização foi de 54 elementos quadrangulares em cada região.

A figura (6.1) ilustra o problema, juntamente com suas condições de contorno, para o caso de Sub-Regiões. As mesmas considerações são aplicadas ao MSCCV, onde Ω_2, Ω_3, Ω_4, Ω_5, Ω_6, Ω_7 e Ω_8 representam um mesmo domínio.

Para a comparação de resultados, como demonstra a figura (6.2), foi analisada a temperatura do ponto central da região 5 (Sub-Regiões) e o erro relativo[6] à Sub-Regiões é mostrado pela fig. (6.3).

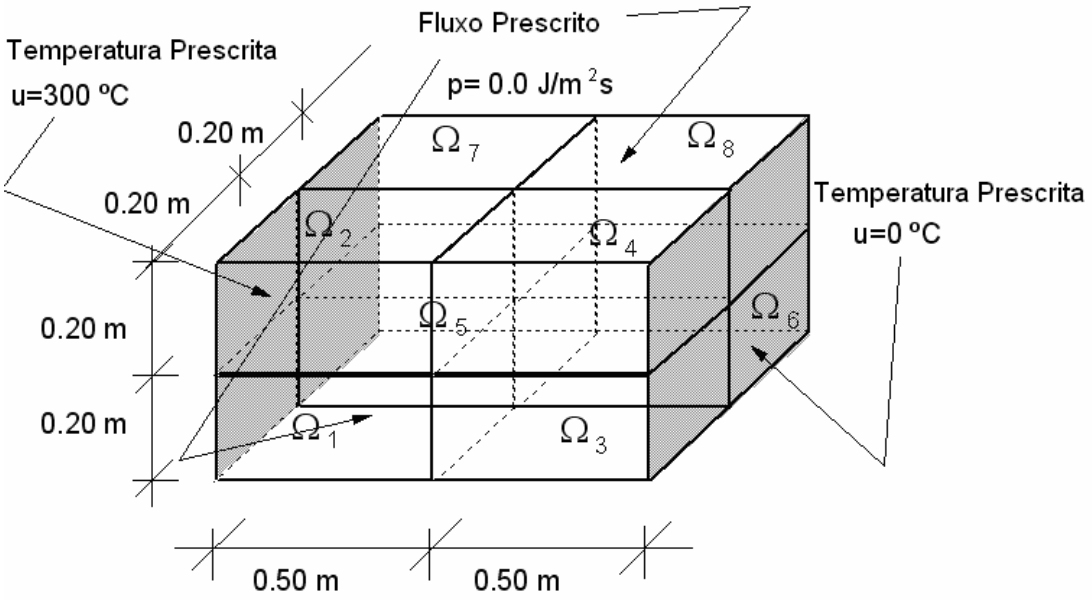


Figura 6.1 – Modelo dividido em oito sub-regiões com suas respectivas dimensões e condições de contorno.

6 $Erro = \left| 1 - \frac{Resultado\ MSCCV}{Resultado\ Sub-Região} \right|$

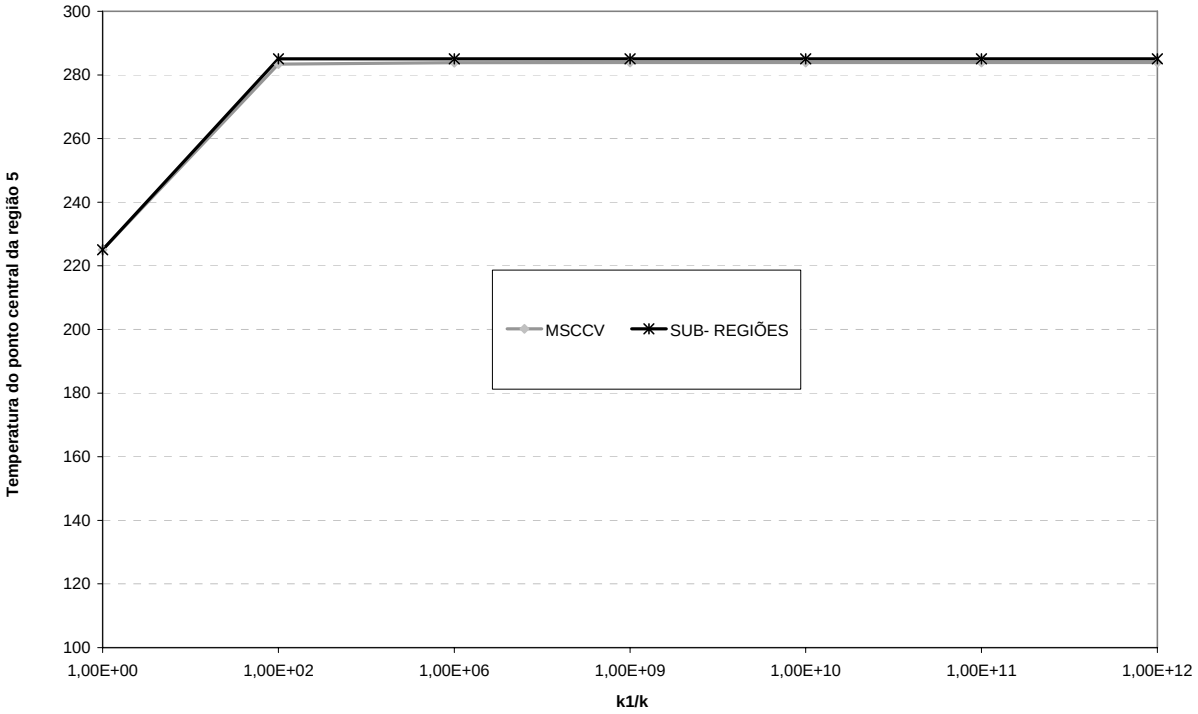


Figura 6.2 - Comparação de resultados: Sub-Regiões x MSCCV

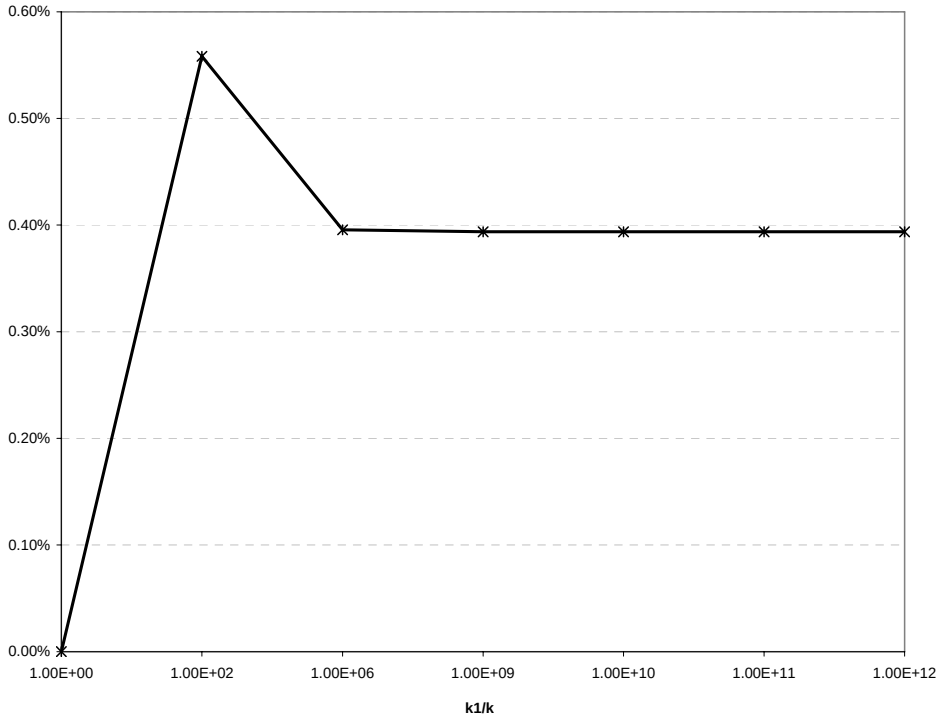


Figura 6.3 – Erro relativo dos resultados: erro máximo de 0.55%.

6.3 – Exemplo 2

Este exemplo, apresentado por Kassab & Divo [12], foi adaptado para 3-D, incluindo uma espessura em *z*. Considere a região ilustrada pela figura (6.4), com dimensões 100 x 100 x 50 u.c. (unidades de comprimento.), onde o fundo e o topo contêm isoladores térmicos. À lateral esquerda é imposta uma temperatura de 200^{o}C e à direita, uma temperatura de 100^{o}C.

O contorno foi discretizado em 48 elementos lineares e em 16 células de mesmo tamanho (sem refinamento).

A variação espacial da condutividade térmica é descrita por uma relação cúbica na direção *x* dada pela equação (6.1).

$$k(x,y,z) = \left(1 + \frac{x}{100}\right)^3 \tag{6.1}$$

Como o problema é unidimensional, a solução exata pode ser calculada por meio da equação (6.2).

$$T(x,y,z) = \frac{800}{6}\left[\frac{1}{\left(1 + \frac{x}{100}\right)^2} + \frac{1}{2}\right] \tag{6.2}$$

A comparação dos resultados para os pontos localizados ao longo de *x* e o gráfico do erro percentual[7] são apresentados, respectivamente, pelas figuras (6.5) (6.6).

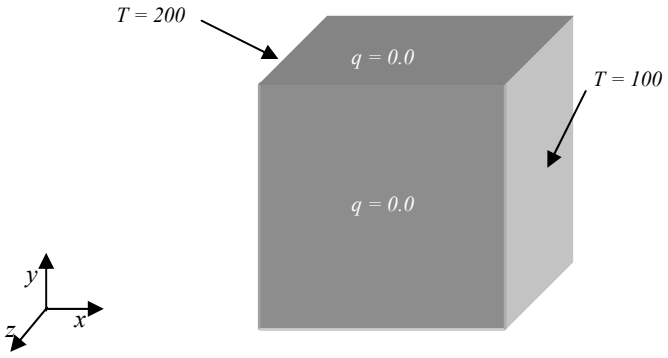


Figura 6.4 – Geometria e condições de contorno do exemplo 2.

7 $Erro = \left|1 - \frac{Resultado\ Numérico}{Resultado\ Analítico}\right|$

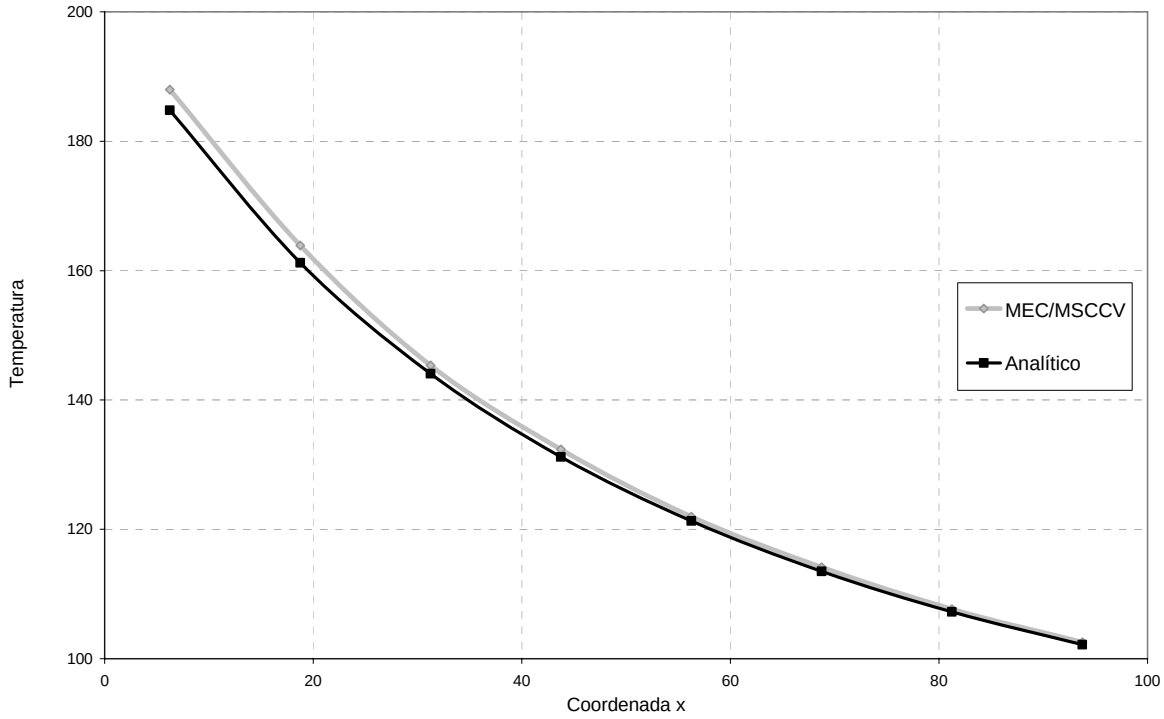


Figura 6.5 – Comparação dos resultados ao longo de *x*.

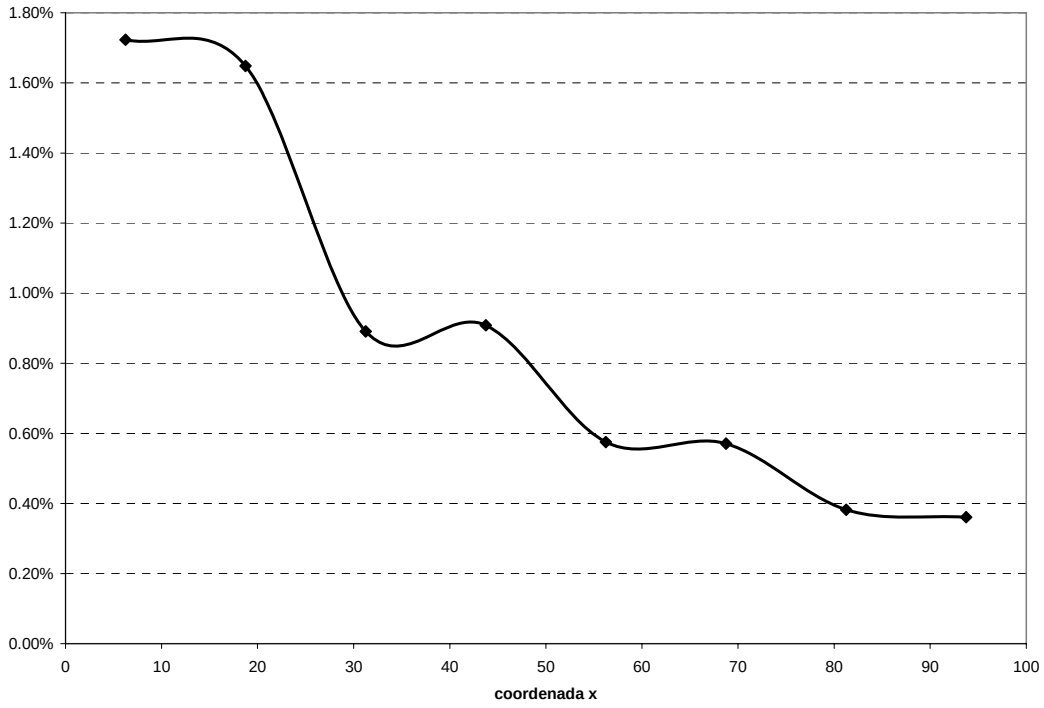


Figura 6.6 – Gráfico do erro percentual: máximo de 1.72%.

6.4 – Exemplo 3

Com a finalidade de apresentar uma comparação com a solução analítica, a mesma geometria do exemplo anterior é utilizada, porém com condições de contorno alteradas (figura 6.7).

Neste exemplo houve uma simulação para o caso de análise não linear. Para isso, foi atribuída ao lado esquerdo uma curva de temperatura, figura (6.8), constituída por cinco segmentos de reta, onde o ponto (2,7 ; 200), pertence ao terceiro segmento deste conjunto. Similarmente, o mesmo foi feito para o lado direito, ou seja, o ponto (-2.7 ; 100) pertence ao segundo segmento de reta que com mais outros seis formam a curva de temperatura representada pela figura (6.9).

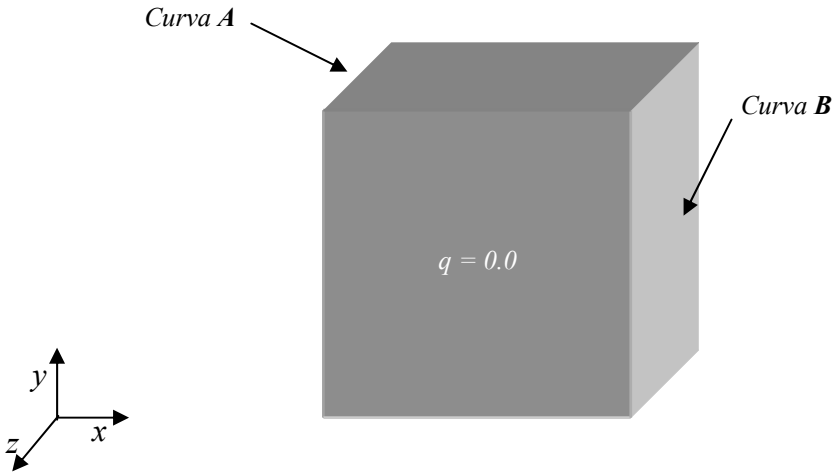


Figura 6.7 – Geometria e condições de contorno do exemplo 3.

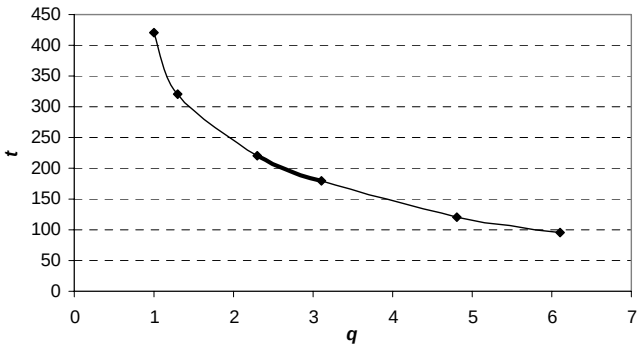


Figura 6.8 - Curva **A** referente a T = 200 °C.

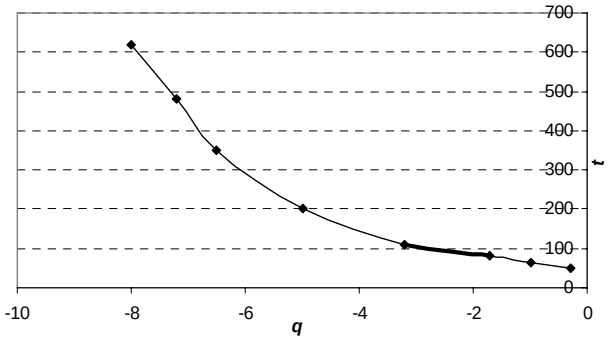


Figura 6.9 - Curva **B** referente a T = 100 °C.

A comparação dos resultados para os pontos localizados ao longo de *x* e o gráfico de erro percentual são ilustrados pelas figuras (6.10) e (6.11), respectivamente. E sua tabela de iterações para o cálculo do campo corretivo de velocidades (CCV) até sua convergência é dada pela tabela 6.1.

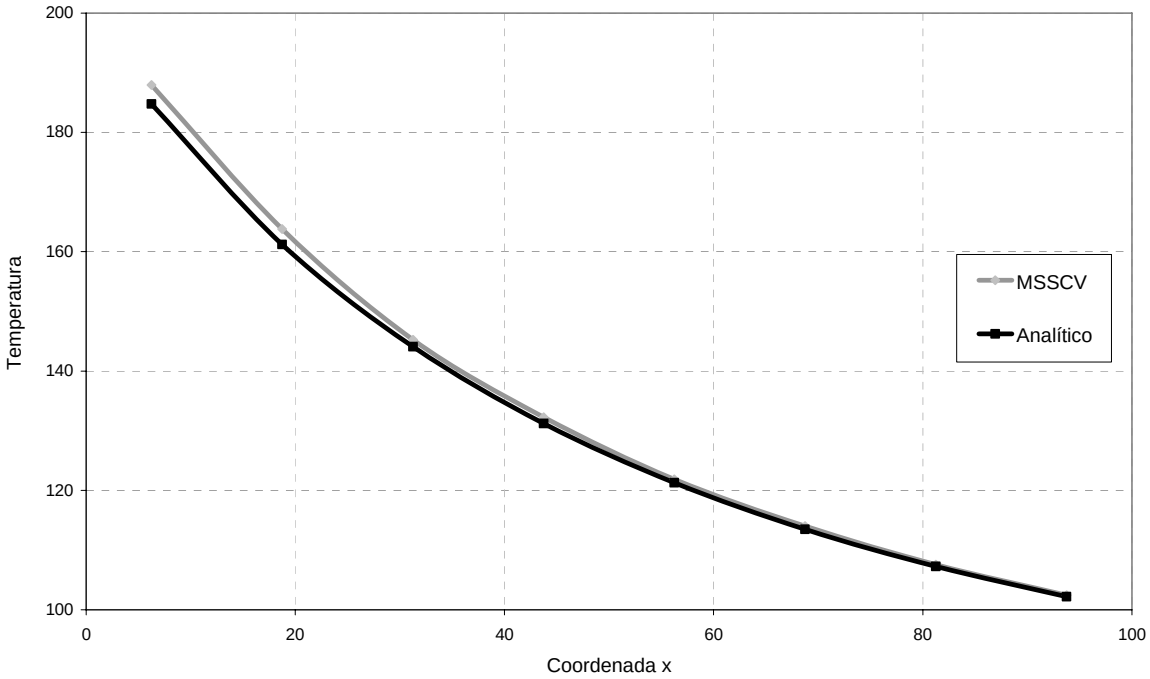


Figura 6.10 – Comparação dos resultados ao longo de *x*.

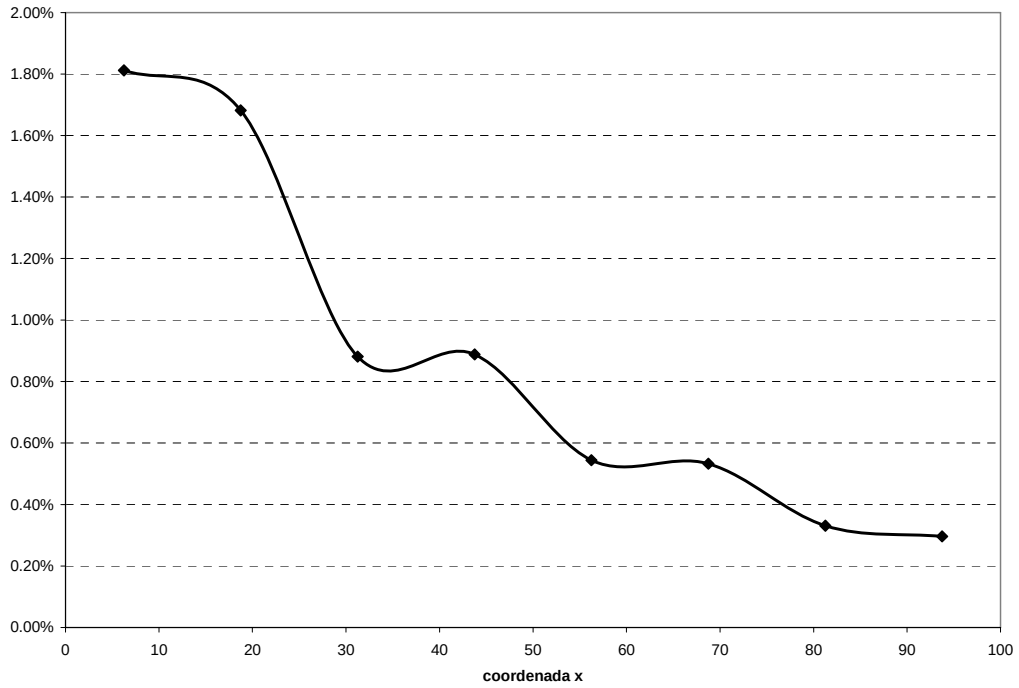


Figura 6.11 – Gráfico do erro percentual: máximo de 1.81%.

Iterações	
Cálculo do CCV	***Newnton-Raphson***
1	5
2	5
3	5
4	5
5	5
6	5
7	5
8	5
9	5
10	5
11	5
12	5

Tabela 6.1 – Tabela de Convergência do Exemplo 3.

6.5 – Exemplo 4

Apresentado por Feijóo [9], neste exemplo analisa-se a distribuição de temperatura de um cilindro oco, composto por duas camadas distintas e de comprimento infinito, de acordo com a figura (6.12). As condutividades dos materiais têm a seguinte relação: $K_2 = 10K_1$. A geometria e condições de contorno são apresentadas na figura (6.13) e sua discretização, na figura (6.14). É interessante ressaltar que neste exemplo se fez uso da simetria com respeito aos planos *X-Z e Y-Z*, necessitando discretizar apenas $1/4$ do cilindro em 84 elementos e 36 células.

A comparação dos resultados obtidos com a solução analítica (também apresentada por Feijóo) é incluída na figura (6.15).

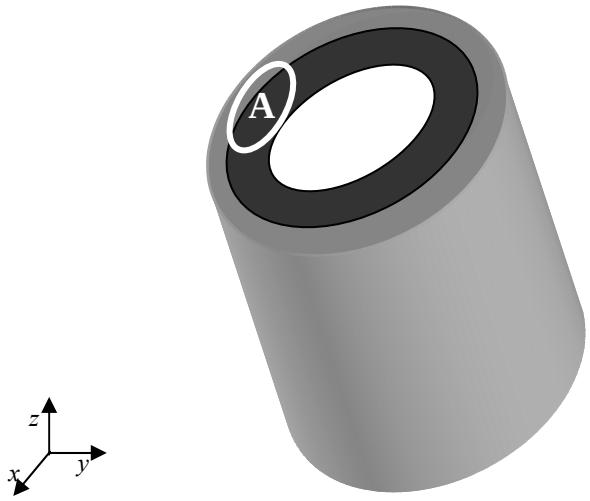


Figura 6.12 – Cilindro oco de comprimento infinito.

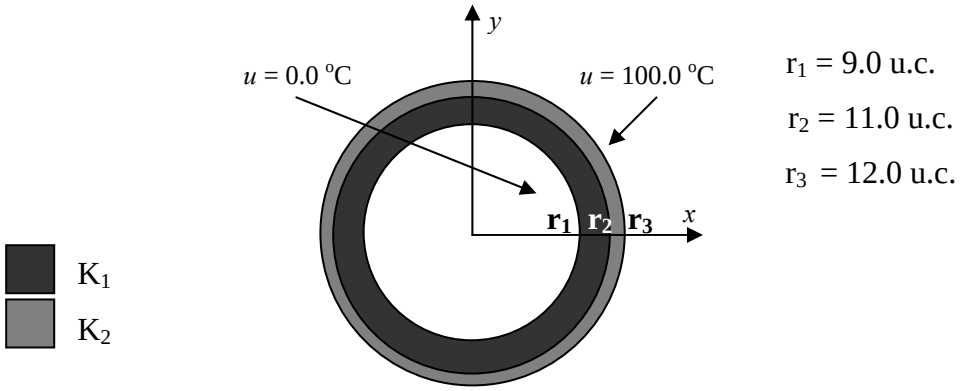


Figura 6.13 – Detalhe de A e condições de contorno do problema.

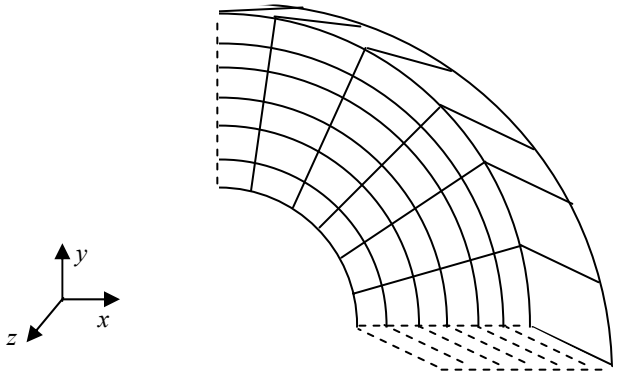


Figura 6.14 – Discretização do cilindro usando a simetria *XZ* e *YZ.*

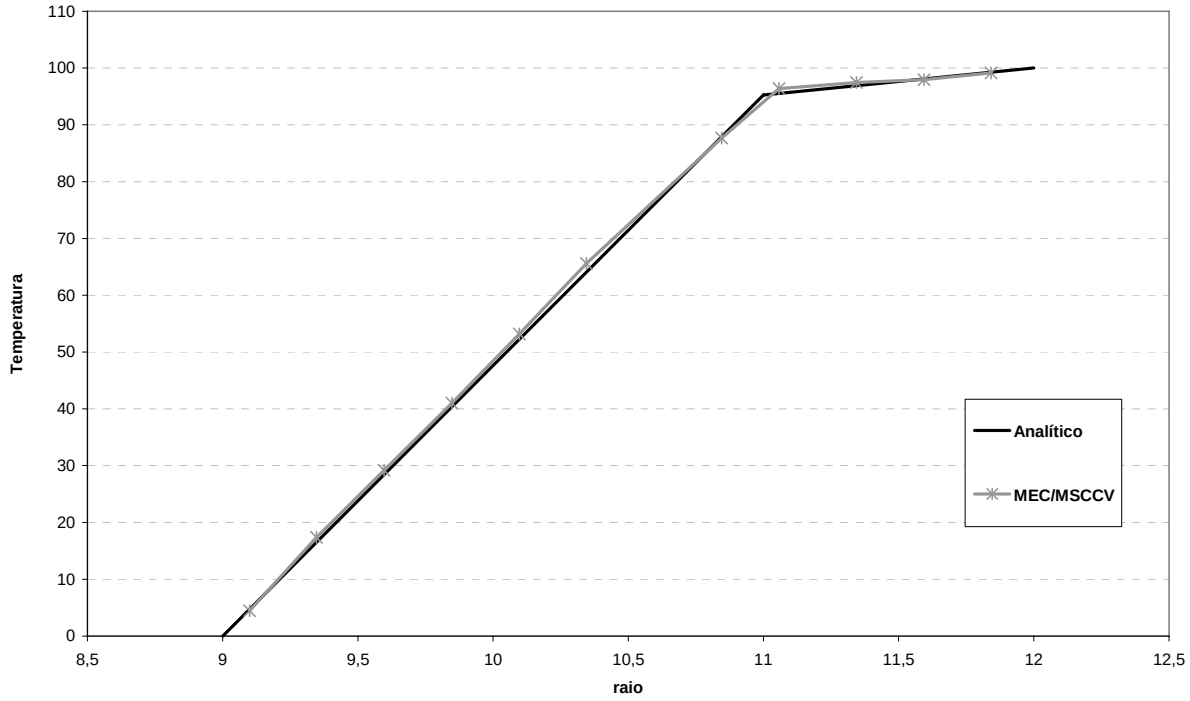


Figura 6.15 – Comparação dos resultados ao longo do raio.

6.6 – Exemplo 5

Este exemplo foi apresentado por Lambe & Whitman [13] e adaptado para o problema tri-dimensional. Trata-se do fluxo de água em meios heterogêneos, como mostra a figura (6.16). Seus planos verticais são impermeáveis conforme a figura (6.17).

Para o MSCCV, o modelo foi discretizado em 152 elementos quadrangulares de interpolação linear e 60 células (figura 6.18). Para Sub-Regiões foram necessários 192 elementos triangulares de interpolação constante.

A comparação é realizada com o Método de Sub-Regiões (PROCAT) e o resultado analítico (também apresentado por Lambe), conforme a figura (6.19). Os erros relativos em relação à solução analítica para o MSCCV e para Sub-Regiões constam, respectivamente, nas tabelas 6.2 e 6.3.

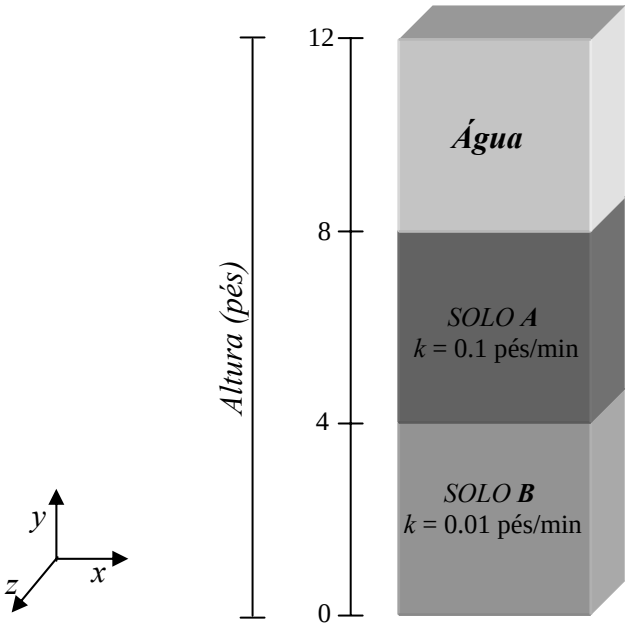


Figura 6.16 - Geometria com as seguintes dimensões: 4.0 x 8.0 x 1.0 pés.

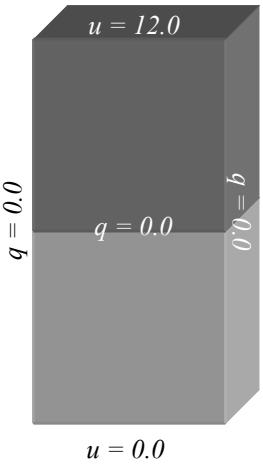


Figura 6.17 – Condições de Contorno do exemplo 5.

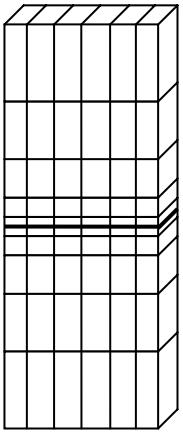


Figura 6.18 – Discretização do exemplo 5 para MSCCV.

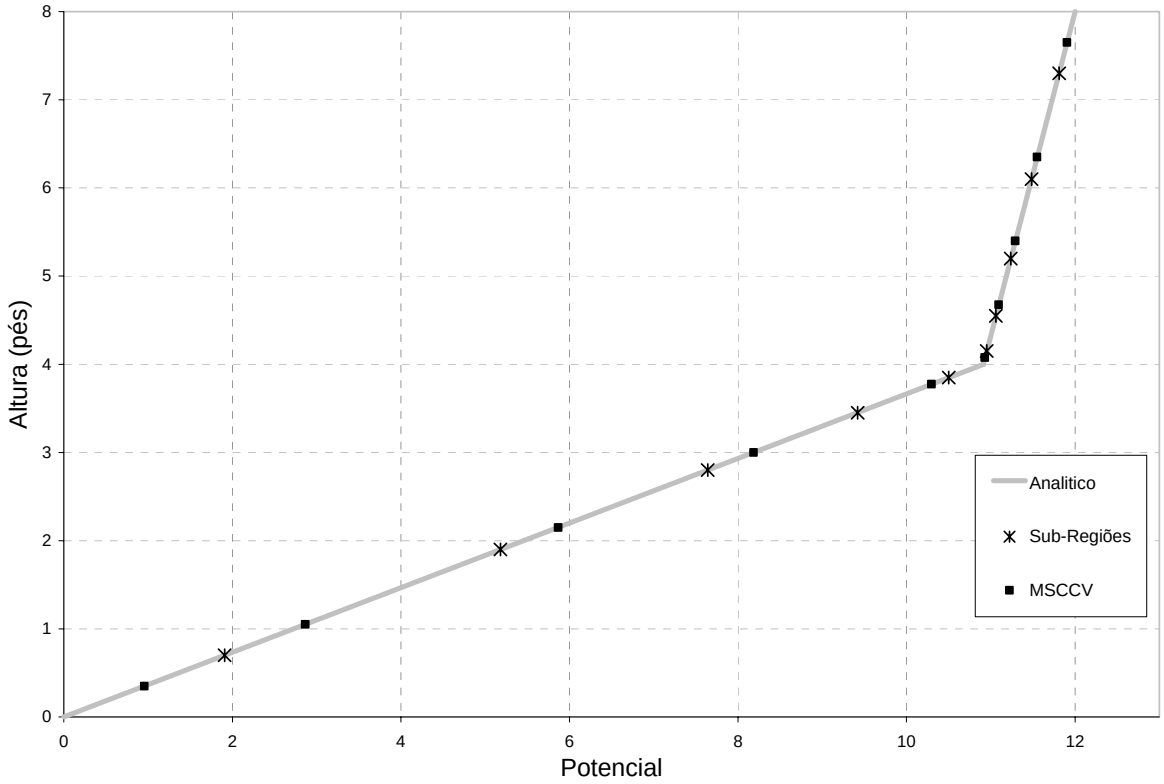


Figura 6.19 – Comparação dos resultados ao longo de *y*.

MSCCV	
Coord. y	**Erro**
0.350	0.03%
1.050	0.02%
2.150	0.04%
3.000	0.03%
3.775	0.00%
4.075	0.01%
4.675	0.01%
5.400	0.01%
6.350	0.01%
7.650	0.00%

Tabela 6.2 – Tabela do erro relativo

Sub-Regiões	
Coord. y	**Erro**
0.70	0.14%
1.90	0.03%
2.80	0.03%
3.45	0.10%
3.85	0.00%
4.15	0.01%
4.55	0.01%
5.20	0.01%
6.10	0.00%
7.30	0.00%

Tabela 6.3 – Tabela do erro relativo

6.7 – Exemplo 6

As seguintes aplicações utilizam o mesmo modelo apresentado pelo exemplo 5, porém com condições de contorno alteradas com o objetivo de ilustrar a aplicabilidade do método em situações mais adversas. Serão apresentadas várias simulações realizadas com o MSCCV

e comparadas com o Método de Sub-Regiões (PROCAT). Tais comparações são do valor do potencial em 10 pontos internos ao longo de *y*, com as seguintes coordenadas *x, y, z*, respectivamente:

1	2.34	0.70	0.50	6	2.34	4.15	0.50
2	2.34	1.90	0.50	7	2.34	4.55	0.50
3	2.34	2.80	0.50	8	2.34	5.20	0.50
4	2.34	3.45	0.50	9	2.34	6.10	0.50
5	2.34	3.85	0.50	10	2.34	7.30	0.50

6.7.1 – Potencial e/ou Fluxo Prescritos

Neste exemplo as condições de contorno são potencial e fluxo prescritos, descrito abaixo e ilustrado pela figura (6.20).

Potencial Prescrito:

Topo $\Rightarrow$ u = 20.0;

Fundo $\Rightarrow$ u = 5.0;

Lateral direita $\Rightarrow$ u = 10.0.

Fluxo Prescrito:

Lateral esquerda $\Rightarrow$ q = 0.5;

Demais planos verticais $\Rightarrow$ q = 0.0.

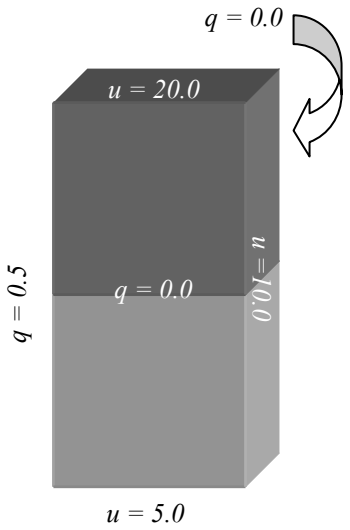


Figura 6.20 – Condições de contorno do exemplo 6.7.1.

A comparação com o método de Sub-Regiões é apresentada pela figura (6.21) e o erro relativo ao MSCCV é dado pela tabela 6.4.

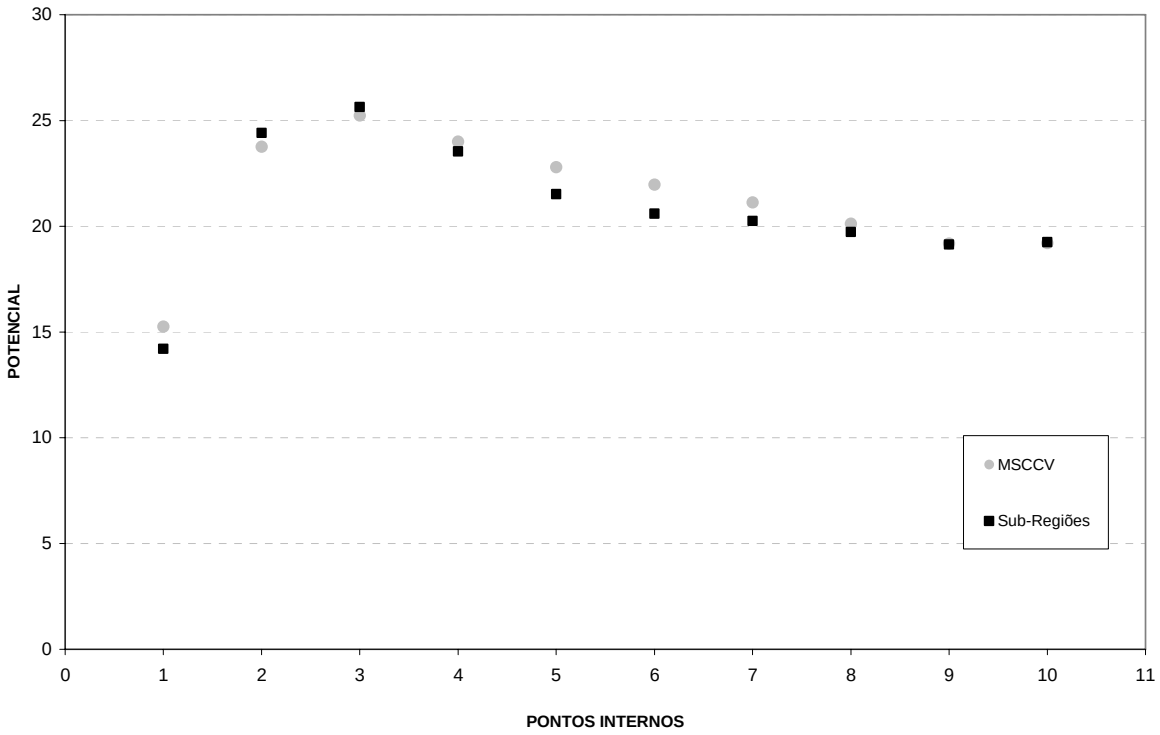


Figura 6.21 – Comparação dos resultados ao longo de *y* do exemplo 6.7.1.

Pontos	Erro	Pontos	Erro
1	6.93%	6	6.30%
2	2.78%	7	4.17%
3	1.58%	8	1.92%
4	1.92%	9	0.26%
5	5.57%	10	0.20%

Tabela 6.4 – Tabela do erro relativo.

6.7.2 – Análise Linear

Nesta seção se realiza uma análise linear no modelo, conforme a figura (6.22).

Topo $\Longrightarrow$ $k.q$ = -0.03 u + 0.63;

Fundo $\Longrightarrow$ u = -12.0; Demais planos verticais $\Longrightarrow$ q = 0.0

Lateral esquerda $\Longrightarrow$ u = 5.0.

Seu gráfico comparativo é mostrado na figura (6.23) e seu erro relativo pela tabela 6.5.

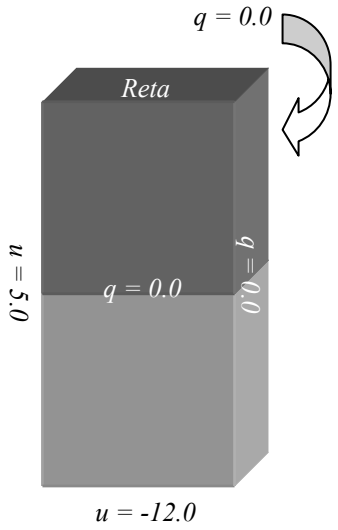


Figura 6.22 – Condições de contorno do exemplo 6.7.2.

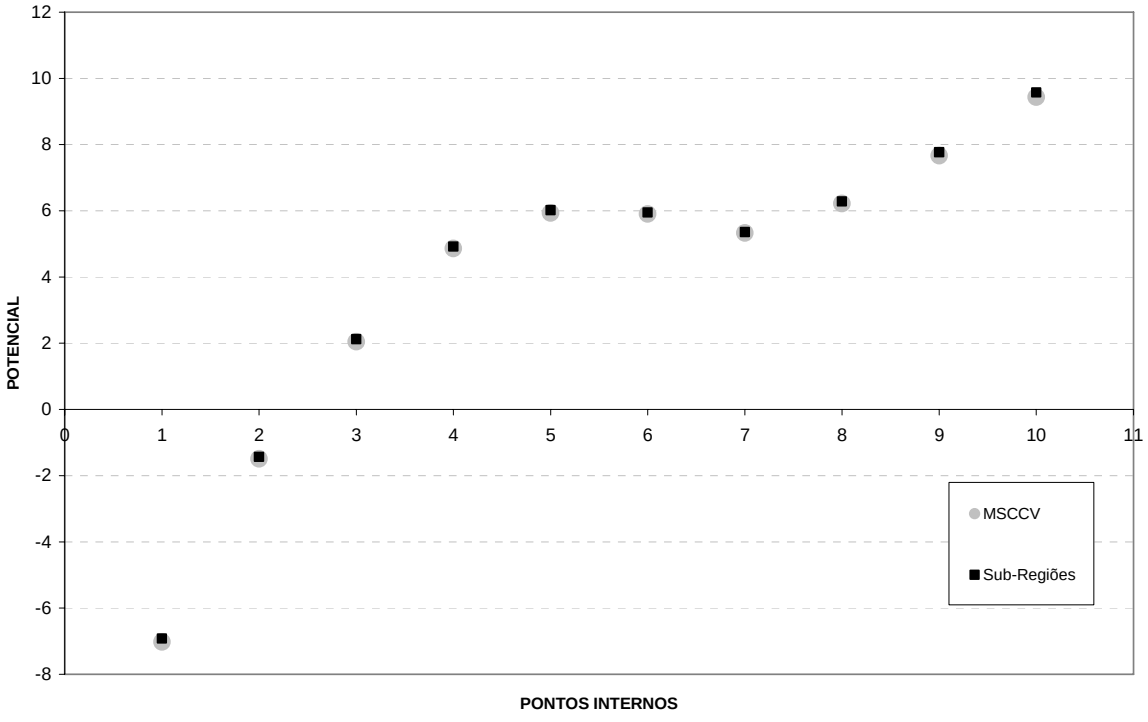


Figura 6.23 – Comparação dos resultados ao longo de *y* do exemplo 6.7.2.

Pontos	Erro	Pontos	Erro
1	1.47%	6	0.78%
2	3.81%	7	0.42%
3	3.76%	8	0.98%
4	1.07%	9	1.38%
5	1.43%	10	1.50%

Tabela 6.5 – Tabela do erro relativo.

6.7.3 – Análise Não-Linear

Neste exemplo é simulado um problema de proteção catódica com condição de contorno não linear, segundo a curva da figura (6.24). As demais condições estão demonstradas na figura (6.25) .

Topo $\Longrightarrow$ ϕ = 20.0;

Fundo $\Longrightarrow$ curva de polarização; Demais planos verticais $\Longrightarrow$ i = 0.0

Lateral direita $\Longrightarrow$ ϕ = 10.0.

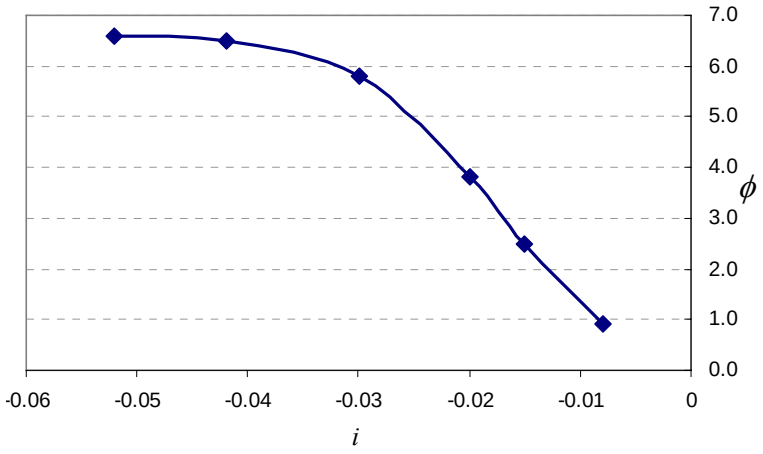


Figura 6.24 – Curva de polarização do exemplo 6.7.3.

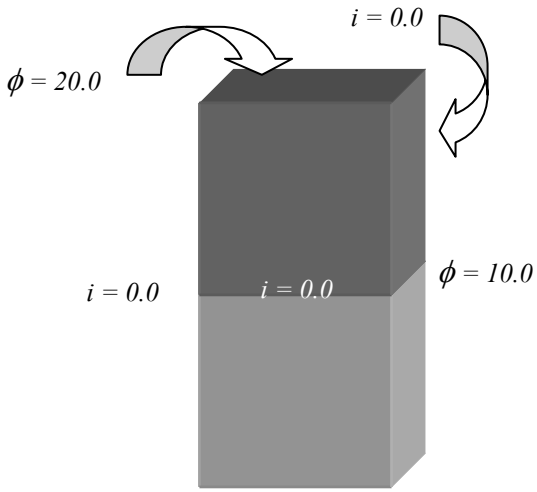


Figura 6.25 – Condições de contorno do exemplo 6.7.3.

A comparação dos resultados é mostrada na figura (6.26). Seu erro relativo é dado pela tabela 6.6 e as iterações para o cálculo do campo corretivo de velocidades até sua convergência, pela tabela 6.7.

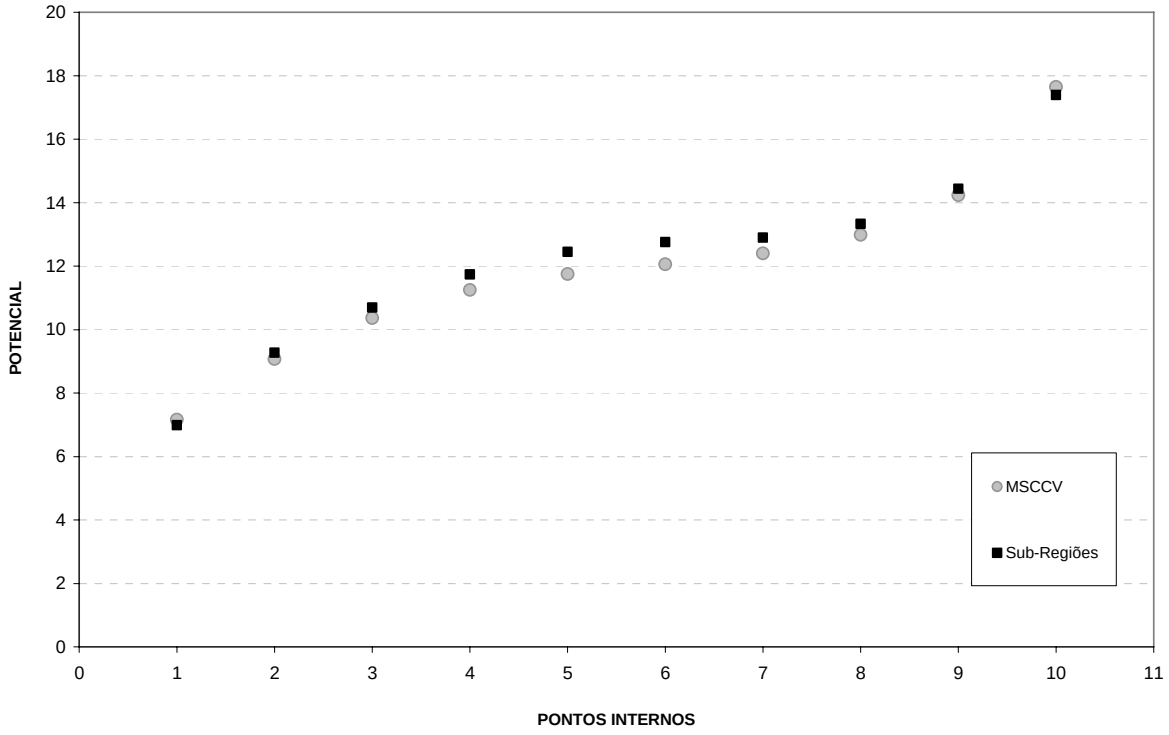


Figura 6.26 – Comparação dos resultados ao longo de *y* do exemplo 6.7.3.

Pontos	Erro
1	2.36%
2	2.21%
3	3.16%
4	4.32%
5	5.93%
6	5.79%
7	3.98%
8	2.64%
9	1.44%
10	1.43%

Tabela 6.6 – Tabela do erro relativo.

Iterações		**Iterações**	
Cálculo do CCV	***Newnton-Raphson***	**Cálculo do CCV**	***Newnton-Raphson***
1	3	11	6
2	4	12	6
3	5	13	6
4	5	14	6
5	5	15	6
6	5	16	6
7	5	17	6
8	5	18	6
9	6	19	6
10	6	---	---

Tabela 6.7 – Tabela de Convergência do Exemplo 6.7.3.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES

CAPÍTULO VII – CONCLUSÕES

Motivados pelo bom desempenho apresentado pelo Método de Simulação de Velocidades à problemas de potencial em meio heterogêneo, em regime permanente para o caso 2-D, este trabalho teve como o objetivo estender esta pesquisa para o caso tridimensional abrangendo diferentes condições de contorno e, por conseqüência, apresentar uma nova alternativa, na formulação do Método dos Elementos de Contorno, para o problema em questão.

O MSCCV, descrito no capítulo III, utiliza campos corretivos de velocidades que simulam a variação da permeabilidade dos meios dividindo do coeficiente de condutividade, $K(x)$, em um $\overline{K}$ constante, presente na solução fundamental e em um outro $K^V(x)$, denominado de variável, que efetivamente varia de ponto para ponto.

O domínio do modelo analisado deve ser discretizado por células de interpolação constante gerando apenas um único nó funcional em cada uma delas e seu contorno, por elementos quadrangulares. Tais elementos podem ser contínuos, descontínuos ou de transição de interpolação constante, linear ou quadrática. Vale a pena destacar que mesmo tendo essas opções, nos exemplos executados a interpolação linear foi capaz de alcançar os resultados almejados.

Após esta discretização, de acordo com o capítulo IV, chega-se a dois sistemas de equações denominados de principal e secundário. Estes sistemas podem ser resolvidos por eliminação de *Gauss* quando as condições de contorno impostas ao problema forem lineares ou pelo Método de *Newton-Raphson*, quando não-lineares.

Com o intuito de melhorar os resultados, utilizou-se um processo seletivo para a escolha do número de pontos de Gauss necessários na integração e a transformação cúbica de coordenadas para o problema de quase-singularidade. O recurso proposto por Telles [18], que consiste em transladar o sistema de coordenadas retangulares para o ponto fonte e , na seqüência, utilizar um sistema de coordenadas polares centrado em ξ subdividindo o domínio de integração, foi realizado para o caso de integrais singulares.

A fim de mostrar a aplicabilidade desse método, alguns exemplos foram estudados no capítulo anterior e tendo em vista os resultados obtidos, o MSCCV se mostrou bastante eficiente, produzindo resultados numéricos de grande precisão. Para tal eficácia é importante ressaltar que os melhores resultados foram aqueles obtidos com o coeficiente de condutividade constante correspondendo à média aritmética dos meios envolvidos e que se faz necessário um refinamento da malha próximo à interface do modelo analisado.

Pelo MSCCV, a formulação para a obtenção da integral de domínio não necessitou de grande esforço computacional e o uso de células não comprometeu sua estabilidade.

Quanto à utilização do Método de *Newton-Raphson*, o tempo de convergência se apresentou bastante satisfatório, como nos mostram as tabelas dos exemplos com condições de contorno não-lineares e sua estabilidade não foi comprometida em nenhum exemplo ou teste realizado. Da mesma forma, o método iterativo escolhido para o cálculo do campo corretivo de velocidades (i_i^A) não apresentou problemas de convergência, muito embora, necessite de um número maior de iterações.

É interessante lembrar, como foi mostrado no exemplo 3, que o programa HET3D pode analisar problemas envolvendo várias curvas de polarização, facilitando o processo para análise de proteção catódica.

Levando em consideração que os exemplos (6.7.1), (6.7.2) e (6.7.3) foram rodados na mesma máquina (*Pentium-1.4 MHz com 512 de memória RAM*) e que em todos eles a discretização foi de 152 elementos quadrangulares e 60 células, para o MSCCV e em 24 superelementos triangulares, subdivididos em 8 elementos cada (total de 192) para Sub-Região, pôde-se observar que:

- Nos exemplos envolvendo condições de contorno lineares, o programa HET3D obteve um ganho em relação ao tempo de processamento, cerca de 60%, em relação ao CAV3D;
- No caso de condição de contorno não linear, o CAV3D é que superou em 22.5% o programa HET3D em tempo de processamento.

A grande vantagem deste método é que sua variação é nodal. Cada nó funcional de uma célula representa um coeficiente de condutividade. Com isso, o cálculo do potencial em um modelo que possua vários coeficientes, se torna muito mais ágil. Resta só agregar tais características diretamente às células. Se somente uma parte do problema é heterogênea, não há necessidade de discretização total do modelo e sim, apenas, daquela região não homogênea.

Por conseqüência, sua desvantagem está na montagem da malha em seu domínio (células) cuja discretização pode ser trabalhosa. Para resolver este inconveniente seria necessário um gerador automático de malha, que deverá ser implementado num futuro próximo.

Futuramente também se pretende efetuar comparações com modelos testados experimentalmente, envolvendo a análise de proteção catódica, objeto de pesquisas atuais na área de corrosão do programa de engenharia metalúrgica e de materiais.

Considerando tudo isso, a sugestão deste trabalho é de estender a pesquisa para análise em regime transiente (equação da difusão) e realizar as seguintes implementações a fim de diminuir esforços computacionais e melhorar ainda mais o desempenho do programa (FORTRAN):

- Otimização do programa;
- Implementação de outros tipos de interpolação nas células;
- Pré e pós-processador gráfico para uma melhor visualização de um problema;
- Utilização de nó duplo.

REFERÊNCIAS

BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] ARAÚJO, F. C. e SILVA, K. I., "The Use of Discontinuous Boundary Elements in the Generic BE/BE Coupling Algorithm - Applications to 3D Potential Problems." *International Conference on Boundary Element Techniques V*, Lisbon, F. Aliabadi, and V. Leitão, eds., EC Ltd.: London, 2004, Vol. I, pp. 237-242.

[2] AZEVEDO, J. P. S., *Análise de Problemas Não-lineares de Transferência De Calor Pelo Método Dos Elementos De Contorno*, Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1985.

[3] BIALECKI, R. and KHUN, G., "Boundary Element Solution of Heat Conduction Problems in Multizone Bodies of Nonlinear Materials". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 36, pp 799-809, 1993.

[4] BREBBIA, C. A., *Boundary Element Method for Engineering*, Plymouth, Pentech, 1978.

[5] BREBBIA, C. A., TELLES, J. C. F. and WROBEL, L.C., *Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering*, Berlin, Springer – Verlag, 1984.

[6] CARRER, J. A. M., *Análise da Torção Elastoplástica de Sólidos de Revolução pelo Método dos Elementos de Contorno,* Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1987.

[7] CAVALCANTI, M. C. R., *Resolução das equações de Biot referentes ao adesamento de meios poro-elásticos saturados*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 2002.

[8] CLEMENTS, D. L. and LARSSON A., "A Boundary Element Method for the Solution of a Class of Time Dependent Problems for Inhomogeneous Media". *Communications in Numerical Methods in Engineering*, Vol. 9, pp 111-119, 1993.

[9] FEIJÓO, R. A., *Método das Funções de Interpolação Seqüenciais.* Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1975.

[10] GIPSON, G. S., “Boundary Element Fundamentals – Basic Concepts and Recent Developments in Poisson Equation”. *Computational Mechanics*, Boston, MA, 1987.

[11] IMSL, *Math/Library – User’s Manual*, IMSL, Inc., 1991.

[12] KASSAB, A. J. & DIVO, E., “A Generalized Boundary Integral Equation for Isotropic Heat Conduction with Spatially Varying Thermal Conductivity”. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 18, pp 273-286, 1996.

[13] LAMBE, T. W. and WHITMAN, R. V., Soil Mechanics, SI Version, New York, John Wiley and Sons, 1979.

[14] LUIZ, T. F. e TELLES, J. C. F., *Aplicação do Método dos Elementos de Contorno a Problemas de Potencial em Regime Permanente, em meios Heterogêneos*, XXV CILAMCE, 2004.

[15] MANSUR, W. J., TELLES, J. C. F., PRODANOFF, J. H. A. and FRAUCHES, E., “On BEM Singular Integrals for Two-dimensional Potential Applications”, *Technical note in Engineering Analysis with Boundary Elements ,* Vol. 1, pp 185-187, 1992.

[16] NEITZEL, B. M. T., *Análise Elastoplástica Tridimensional Através do Método dos Elementos de Contorno Utilizando Técnicas Implícitas*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1997.

[17] PINCIROLI, G. A., *Desenvolvimento do Sistema MEC3DP para Análise de Problemas Potenciais Tridimensionais pelo Método dos Elementos de Contorno*, Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1995.

[18] PROCAT, *Manual de teoria do programa PROCAT*, 1985.

[19] SHAW, R. P. and GIPSON, G. S., “A BIE Formulation of Linearly Layered Potential Problems”. *Engineering Analysis,* Vol. 16, pp 1-3, 1996.

[20] SILVA, J. J. R., *MEC3DE – Um Programa para a Análise Elástica Tridimensional com o Método dos Elementos de Contorno,* Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1989.

[21] TELLES, J. C. F. and CARRER, J. A. M., "Static and Transient Dynamic Nonlinear Stress Analysis by the Boundary Elements Method with Implicit Techniques", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 24, pp. 65-74, 1994.

[22] TELLES, J. C. F. and OLIVEIRA, R. F., "Third Degree Polynomial Transformation Element Integrals: Further Improvements", *Engineering Analysis with boundary elements*, n. 13, pp. 135-141, 1994.

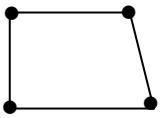
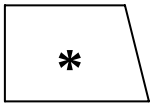
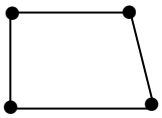
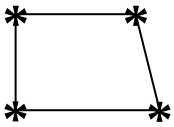
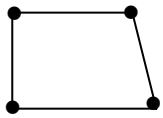
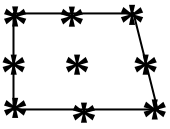
[23] TELLES, J. C. F., "A Self-Adaptative Co-coordinate Transformation for Efficient Numerical Evaluation of General Boundary Element Integrals", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 24, pp 957-973, 1987.

[24] TELLES, J. C. F., "On Inelelastic Analysis Algorithms for Boundary Elements", *Advanced Topics in Boundary Elements Analysis*, Ed. Cruse, T.A., Pifko, A. B. and Armen, H., ASME, AMD – vol. 72, pp 35-44,1985.

ANEXOS

ANEXO A – INGRESSO DOS ELEMENTOS EM HET3D

As tabelas seguintes ilustram os códigos utilizados no programa HET3D quanto à interpolação e descontinuidade.

Código do elemento	Número de nós geométricos	Número de nós funcionais	Interpolação da geometria	Interpolação das funções
3	4	1		
4	4	4		
12	4	9		

Levando em consideração a seguinte figura:

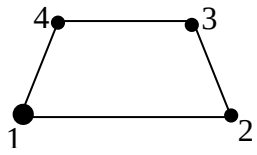
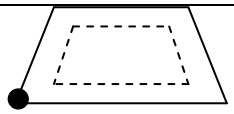
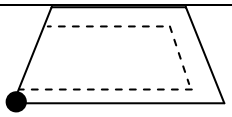
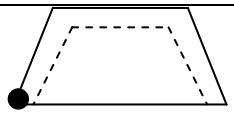
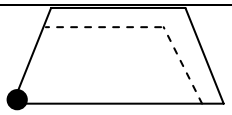
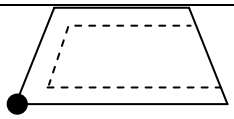
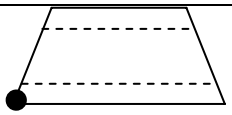
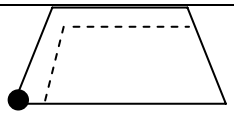
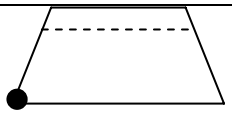
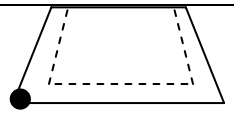
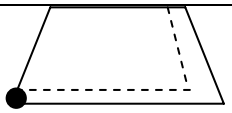
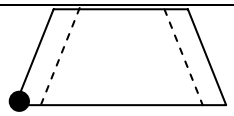
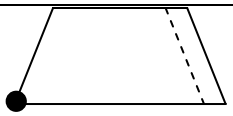
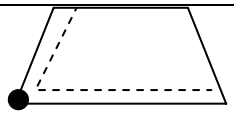
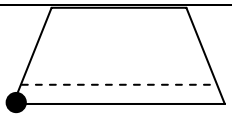
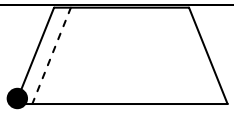
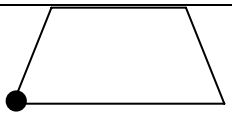


Figura A.1 – Ordem dos nós no elemento quadrangular

Código	Tipo de descontinuidade	Código	Tipo de descontinuidade
1		9	
2		10	
3		11	
4		12	
5		13	
6		14	
7		15	
8		16	

ANEXO B – DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO QUE REGE O FENÔMENO DE SIMULAÇÃO DE PROTEÇÃO CATÓDICA

Para facilitar a dedução, inicialmente a direção x_1 será considerada. Para as demais direções o processo é análogo e serão incluídas na seqüência.

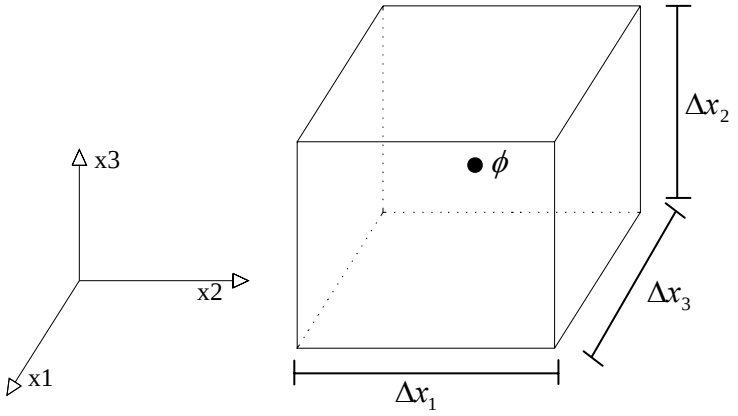


Figura B.1 – Elemento infinitesimal do eletrólito $\Delta x_1\ \Delta x_2\ \Delta x_3$ com potencial ϕ no centro.

Considerando a figura (B.1), os potencias à esquerda e à direita, respectivamente, são dados por:

$$\phi_e = \phi - \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x}\Delta x_1 \qquad (1)$$

$$\phi_d = \phi + \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x}\Delta x_1 \qquad (2)$$

Da aplicação da lei de *Ohm* na direção x_1, tem –se que:

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = -K\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \qquad (3)$$

onde K representa a condutividade do material (uniforme e isotrópica) e q é a densidade superficial de carga.

Após a aplicação da equação (3) ao lado esquerdo do elemento e a multiplicação pela área da face A, a expressão que fornece a carga na face esquerda do elemento é apresentada a seguir:

$$\Delta P_e = -A \cdot K \cdot \Delta t \cdot \frac{\partial \phi_e}{\partial x_1} \qquad (4)$$

ou

$$\Delta P_e = -K \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\phi - \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x_1}\Delta x_1\right) \cdot \Delta t \tag{5}$$

Analogamente, para o lado direito, tem-se que:

$$\Delta P_d = -K \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x_1}\Delta x_1\right) \cdot \Delta t \tag{6}$$

e o ganho total de carga é dado por:

$$\Delta P_{x_1} = \Delta P_e - \Delta P_d = -K \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\phi - \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x_1}\Delta x_1\right) - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial \phi}{\partial x_1}\Delta x_1\right)\right] \cdot \Delta t \tag{7}$$

ou seja,

$$\Delta P_{x_1} = K \cdot \Delta x_1 \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \cdot \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} \cdot \Delta t \tag{8}$$

Aplicando o mesmo processo as outras direções e superpondo, obtém-se:

$$\Delta P = K \cdot \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2}\right] \cdot \Delta t \cdot \Delta x_1 \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \tag{9}$$

Para que a carga total ΔP seja armazenada no elemento, a seguinte relação deve ser válida:

$$\Delta P = \rho \cdot \Delta x_1 \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3 \cdot \Delta \phi \tag{10}$$

onde o produto $\rho \cdot \Delta x_1 \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3$ representa a capacitância do elemento.

$$K \nabla^2 \phi \cdot \Delta t = \rho \cdot \Delta \phi \tag{11}$$

ou

$$K \nabla^2 \phi = \frac{\rho \cdot \Delta \phi}{\Delta t} \tag{12}$$

Portanto, para $t \to 0$:

$$K \nabla^2 \phi = \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \tag{13}$$

Esta equação governa a distribuição do potencial em um meio condutor. Levando em consideração que problemas eletroquímicos ocorrem no regime estacionário, chega-se à equação de Laplace:

$$K \nabla^2 \phi = 0 \tag{14}$$