

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO ESCOLA DE MINAS DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL



ANÁLISE TRANSIENTE TRIDIMENSIONAL VIA FORMULAÇÃO DIRETA DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM OPÇÃO DE SUBESTRUTURAÇÃO – APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE DIFUSÃO E ACÚSTICOS.

Por

DENIVAL ROGÉRIO ALBERTO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: CONSTRUÇÕES METÁLICAS

ORIENTADOR: PROF. DR.–ING. FRANCISCO CÉLIO DE ARAÚJO CO-ORIENTADOR: PROF. DR. FRANCISCO DE ASSIS DAS NEVES

> OURO PRETO Agosto/2002.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO ESCOLA DE MINAS DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL PROGRAMA DE PÓS–GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

ANÁLISE TRANSIENTE TRIDIMENSIONAL VIA FORMULAÇÃO DIRETA DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM OPÇÃO DE SUBESTRUTURAÇÃO – APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE DIFUSÃO E ACÚSTICOS.

Autor : Denival Rogério Alberto.

Orientador: Prof. Dr.–Ing. Francisco Célio de Araújo. Co-orientador: Prof. Dr. Francisco de Assis das Neves.

> Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Engenharia Civil da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto, como parte integrante dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, área de concentração: Construções Metálicas.

ANÁLISE TRANSIENTE TRIDIMENSIONAL VIA FORMULAÇÃO DIRETA DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO COM OPÇÃO DE SUBESTRUTURAÇÃO – APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE DIFUSÃO E ACÚSTICOS.

Autor: Denival Rogério Alberto.

Esta dissertação foi apresentada em seção pública e aprovada em 02 de Agosto de 2002, pela Banca Examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Dr.–Ing. Francisco Célio de Araújo (EM/UFOP) Orientador

Prof. Dr. Francisco de Assis das Neves (EM/UFOP) Co-orientador

Prof. Dr. José Antônio Marques Carrer (COPPE/UFRJ)

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, professor Célio, pelo imenso empenho e interesse demonstrado ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Conferiu-me ensinamentos para o presente trabalho e para a vida futura.

À Escola de Minas, professores e funcionários, pela oportunidade de realizar o mestrado bem como pelos consequentes conhecimentos adquiridos em sala de aula e no convívio dia-a-dia.

À minha família, que sempre incentivou-me e apoiou-me durante mais esta jornada.

Aos colegas de curso, com os quais compartilhei momentos de angústias e felicidades.

Por fim, mas sempre em primeiro lugar, ao nosso bom Deus.

RESUMO

Neste trabalho, aborda-se o desenvolvimento da formulação direta do Método dos Elementos de Contorno para a análise de problemas tridimensionais de difusão e problemas acústicos no domínio do tempo, definidos em domínios abertos ou fechados. Para obter a representação destes problemas através de equações integrais, emprega-se a relação de reciprocidade entre dois estados–solução distintos em $\Omega \ge t$ referente a cada classe de problema. Devido ao comportamento singular dos núcleos fundamentais, detalhes referentes à correta avaliação das integrais singulares são discutidos.

Para converter a equação integral de contorno em um sistema de equações algébricas realiza-se a discretização, no tempo e no espaço, do problema. A discretização no tempo é realizada empregando-se funções de interpolação constante ou linear, e a discretização espacial, por meio de variados tipos de elementos de contorno e células de integração. Procedimentos de integração numérica são considerados para avaliar a respectiva matriz de coeficientes.

Uma eficiente estratégia baseada no uso de coordenadas polares e que proporciona um aumento da concentração de pontos de integração em torno do ponto fonte é aplicada para avaliar as integrais singulares que surgem nas formulações citadas.

Problemas envolvendo materiais não-homogêneos ou descontinuidades de domínio são resolvidos dividindo-se o domínio em várias subregiões. Para acoplar estas subregiões emprega-se uma estratégia que se baseia no uso de *solvers* iterativos.

ABSTRACT

In this work, a direct approach of the Boundary Element Method for analyzing threedimensional transient diffusion and acoustic problems, defined in open or finite domains, is presented. To obtain the integral representation of these problems, the respective reciprocity relationship between two different states in $\Omega \ge t$ is considered. Due to the singular behavior of the fundamental kernels, details concerning the correct evaluation of the singular integrations involved are discussed.

In order to convert the boundary integral equation into a system of algebraic equations, the discretization of the problem, in space and time, is carried out. The time discretization is accomplished by using constant and linear interpolation functions, and the space discretization, by means of several boundary elements and integration cells. Numerical integration procedures are considered for evaluating the respective matrix coefficients.

Regarding the evaluation of the singular integrals, an efficient strategy based on the use of polar co-ordinates is applied, by means of which the concentration of integration points around the source point is increased.

Problems involving non-homogeneous materials or domain discontinuities are solved by subdividing the domain into a generic number of subregions. The adopted coupling strategy is based on the use of iterative solvers.

SUMÁRIO

Resumo	IV
Abstract	V
Lista de Figuras	VIII
Lista de Tabelas	X
1. Introdução	1
2. Problemas de Difusão	4
2.1. Introdução	4
2.2. Equações Básicas	5
2.3. Representação Integral Dependente do Tempo	6
2.3.1. Relação de Reciprocidade	6
2.3.2. Soluções Fundamentais Transientes	
2.3.3. Representação Integral de Contorno	
2.4. Algebrização da Equação Integral de Contorno	16
2.4.1. Processo de Marcha no Tempo	16
2.4.2. Avaliação Analítica das Integrais Temporais	21
2.4.3. A Discretização Espacial e o Sistema de Equações Algébricas	
2.4.4. Avaliação Numérica das Integrais Espaciais	
2.4.4.1. Integrais Não-singulares	
2.4.4.2. Integrais Singulares	
2.4.4.3. Procedimentos Especiais de Integração	
3. Problemas Acústicos no Domínio do Tempo	
3.1. Introdução	
3.2. Equações Básicas	
3.2.1. Descrição em Termos de Potencial de Velocidade	
3.2.2. Descrição em Termos de Excesso de Pressão	
3.3. Representação Integral no Domínio do Tempo	
3.3.1. Relação de Reciprocidade	
3.3.2. Soluções Fundamentais	
3.3.3. Representação Integral de Contorno	
3.4. Algebrização da Equação Integral de Contorno	

3.4.1. Avaliação Analítica das Integrais Temporais	
4. Acoplamento Multi-domínio	60
4.1. Introdução	
4.2. Solvers Iterativos	61
4.2.1. Algoritmo GMRES	61
4.2.2. Algoritmo de Lanczos	
4.2.3. Algoritmo do Gradiente Bi-conjugado	64
4.3. Acoplamento Multi-domínio	
5. Aplicações	70
5.1. Introdução	70
5.2. Aplicações Relativas a Problemas de Difusão	72
5.3. Aplicações Relativas a Análises Acústicas	
6. Conclusões	
6.1. Conclusões	
6.2. Aspectos Futuros	106
Referências Bibliográficas	107

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Ponto de campo x e domínios $\Omega \cup \Gamma$ e $\Omega^* \cup \Gamma^*$	9
Figura 2.2: Exclusão do ponto singular.	. 12
Figura 2.3: Exemplos de funções de interpolação no tempo	. 18
Figura 2.4: Elementos de contorno tridimensionais.	. 28
Figura 2.5: Células de integração tridimensionais	. 29
Figura 2.6: Mapeamento de elemento de contorno com subelementos de integração	35
Figura 2.7: Vizinhança de um ponto singular ξ em uma superfície Γ	. 36
Figura 2.8: Triângulo <i>D</i> mapeado num quadrado de lado unitário <i>D</i> '	. 40
Figura 2.9: Sequência de mapeamento de coordenadas – Elementos de contorno	41
Figura 2.10: Tetraedro F mapeado num cubo de aresta unitária F'	. 43
Figura 2.11: Sequência de mapeamento de coordenadas – Células internas	. 46
Figura 3.1: Intervalo de existência dos núcleos integrados no tempo.	. 59
Figura 4.1: Solução da k-ésima iteração e o erro associado ε_k	. 62
Figura 4.2: Subdomínios acoplados	67
Figura 5.1: Problema físico a ser analisado.	73
Figura 5.2: Modelo numérico proposto – discretização de um quarto da placa	73
Figura 5.3: Temperaturas no ponto central da placa – $\Delta t = 1,0$. 74
Figura 5.4: Temperaturas no ponto central da placa $-e = 0,01$	75
Figura 5.5: Modelo numérico proposto	77
Figura 5.6: Variação em relação ao tempo do potencial prescrito	. 77
Figura 5.7: Choque térmico aplicado em $t_0 = t_1 = 0$. 78
Figura 5.8: Choques térmicos aplicados em $t_0 = 0$ e $t_1 = 0,5$. 78
Figura 5.9: Choques térmicos aplicados em $t_0 = 0$ e $t_1 = 1$. 79
Figura 5.10: Malha de discretização do contorno - um quarto da placa	. 80
Figura 5.11: Malha de discretização do domínio - um quarto da placa	. 81
Figura 5.12: Perfil de temperatura no plano médio da placa no instante t=1,2	. 82
Figura 5.13: Subregiões do modelo (S1, S2, S3, S4) e suas respectivas malhas	. 84
Figura 5.14: Resposta nos pontos internos	. 85
Figura 5.15: Tempo de resolução do sistema de equações	. 85

Figura 5.16: Tempo de montagem do sistema normalizado pelo tempo de resolução.	86
Figura 5.17: Domínio da análise e função de fluxo	88
Figura 5.18: Discretização do contorno da barra e localização dos pontos A, B, C	89
Figura 5.19: Resposta no ponto A.	89
Figura 5.20: Resposta no ponto B	90
Figura 5.21: Resposta no ponto C	90
Figura 5.22: Esquema da região espacial sob análise	92
Figura 5.23: Picos de pressão sonora para as várias frequências	94
Figura 5.24: Picos de pressão sonora para a frequência de 40Hz	95
Figura 5.25: Barreira sonora infinita	97
Figura 5.26: Malhas de elementos de contorno e de enclosing elements.	98
Figura 5.27: SPL no tempo $t = 20 \Delta t = 0,04 s$ na ausência de barreira sonora	99
Figura 5.28: SPL no tempo $t = 20 \Delta t = 0.04 s$ na presença de barreira sonora	99
Figura 5.29: SPL no tempo $t = 40 \Delta t = 0,08 s$ na ausência de barreira sonora	100
Figura 5.30: SPL no tempo $t = 40 \Delta t = 0,08 s$ na presença de barreira sonora	100
Figura 5.31: SPL no tempo $t = 60 \Delta t = 0,12 s$ na ausência de barreira sonora	101
Figura 5.32: SPL no tempo $t = 60 \Delta t = 0,12 s$ na presença de barreira sonora	101
Figura 5.33: Diminuição do nível de pressão devida à presença da barreira	102
Figura 5.34: Tempo de resolução do sistema algébrico	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1: Temperaturas no ponto central da placa – $\Delta t = 1,0$. 74
Tabela 5.2: Temperaturas no ponto central da placa $-e = 0,01$. 75
Tabela 5.3: Relação entre temperaturas	. 76
Tabela 5.4: Valores de temperatura no tempo t = $1,2 - \Delta t = 0,1$. 81
Tabela 5.5: Valores de temperatura no tempo t = 1,2	. 82
Tabela 5.6: Valores de pico de pressão sonora para pontos na horizontal	. 94
Tabela 5.7: Comparação entre valores de pico de pressão - f=40hz	. 95

Capítulo 1

Introdução

A análise de sistemas via estratégias computacionais tem contribuído significativamente para os avanços no campo da análise de problemas de engenharia. No entanto, devido às limitações da capacidade de cálculo das máquinas e também das estratégias de simulação computacional em si de certos problemas, as análises experimentais são ainda necessárias para a avaliação da resposta de problemas mais complexos.

Os diversos métodos numéricos existentes para a resolução dos sistemas de engenharia podem ser classificados, de forma geral, em dois tipos: métodos de domínio e métodos de contorno. Nos métodos de domínio faz-se necessário aproximar a resposta do problema no domínio de definição do mesmo. Dentre esses, o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método das Diferenças Finitas (MDF) tiveram grande aceitação pela comunidade científica e já foram largamente aplicados a inúmeras classes de problemas de engenharia. Nos métodos de contorno, como o próprio nome diz, os problemas são descritos a partir das respectivas variáveis de contorno, ou seja, apenas o contorno precisa ser discretizado quando da avaliação da resposta da análise. Estes métodos surgiram mais recentemente e têm constituído uma interessante alternativa de análise em engenharia (Banerjee, 1994; Kane, 1992; Beer e Watson, 1992; Chen e Zhou, 1992; Brebbia e Dominguez, 1987; Brebbia *et al.*, 1984). Dentre estes, destaca-se o Método dos Elementos de Contorno (MEC).

As principais vantagens do MEC em relação aos métodos de domínio estão listadas a seguir:

- a) As soluções fundamentais empregadas na formulação do método satisfazem a condição de irradiação, ou seja, não há resposta, em um certa região de interesse, proveniente do infinito. Assim, para domínios abertos, não se faz necessário discretizar contornos que se localizem a uma distância infinita da região de análise;
- b) Na grande maioria das análises é possível modelar somente a superfície do problema, reduzindo-se substancialmente o tamanho do sistema de equações algébricas resultante, e facilitando do mesmo modo a geração de dados;
- c) Satisfazendo identicamente as equações do problema em seu domínio de definição, o método numérico apresenta alto índice de precisão;
- d) O método é também especialmente adequado para a simulação de problemas nos quais há concentração de tensões (mecânica da fratura).

Como desvantagens em relação aos métodos de domínio citam-se:

- a) Não existem soluções fundamentais para todos os tipos de problemas de engenharia, o que implica na utilização de outros recursos para o desenvolvimento baseado na formulação integral de contorno (formulação dual, por exemplo);
- b) Embora o sistema de equações algébricas resultante seja compacto, a matriz é cheia e não simétrica;
- c) Os conhecimentos matemáticos necessários à obtenção das equações integrais são menos comuns para engenheiros.

Para a aplicação do Método dos Elementos de Contorno a problemas envolvendo materiais não-homogêneos ou em problemas onde haja descontinuidades em seus domínios de definição, torna-se conveniente utilizar a técnica de subregião (Banerjee, 1994; Brebbia *et al.*, 1987). Esta técnica, que no caso deste trabalho se baseia no uso de *solvers* iterativos, consiste em subdividir o domínio da análise em diversos outros, e

considerar a equação integral de contorno para cada região, juntamente com as condições de acoplamento (equilíbrio e continuidade).

Este trabalho, que objetiva a análise tridimensional via o MEC com opção de subestruturação de problemas de difusão e acústicos no domínio do tempo, está estruturado conforme exposto a seguir:

- No capítulo 2, apresenta-se a formulação padrão do Método dos Elementos de Contorno aplicada a problemas de difusão.
- No capítulo 3, apresenta-se formulação padrão do Método dos Elementos de Contorno aplicada a problemas acústicos no domínio do tempo.
- No capítulo 4, descrevem-se, sucintamente, os esquemas iterativos de resolução de sistemas algébricos de equações lineares e a estratégia de acoplamento empregada neste trabalho.
- No capítulo 5, apresentam-se os resultados de exemplos analisados via programa computacional desenvolvido ao longo deste trabalho, no qual empregaram-se a teoria e os procedimentos numéricos discutidos nos capítulos anteriores.
- No capítulo 6, por fim, tiram-se as principais conclusões da pesquisa, e também comentam-se alternativas futuras para a continuação deste trabalho.

Capítulo 2

Problemas de Difusão

2.1. Introdução

Neste capítulo será apresentada a formulação padrão do Método dos Elementos de Contorno aplicada a problemas de difusão tridimensionais. Para este propósito, são apresentadas a equação diferencial que governa o fenômeno físico, a relação de reciprocidade entre dois diferentes estados de difusão, as soluções fundamentais transientes e a representação integral do problema. Obtida a representação integral, detalhes da equação integral de contorno, como o comportamento singular dos núcleos integrados no domínio do tempo, são estudados. A seguir, empregando-se a discretização temporal e espacial do problema, a equação integral de contorno é transformada em um sistema de equações algébricas cujos coeficientes são obtidos recorrendo-se a procedimentos de integração numérica. Por último, são mostrados procedimentos especiais de integração para avaliação das integrais singulares que surgem na formulação direta do método dos elementos de contorno.

2.2. Equações Básicas

Os problemas de difusão em meios homogêneos são descritos pela equação diferencial escalar transiente

$$\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x},t) - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) = -\gamma(\mathbf{x},t) , \qquad \mathbf{x} \in \Omega,$$
(2.1)

a qual deve ser resolvida considerando-se as condições de contorno dadas por

$$u(\mathbf{x}, t) = \overline{u}(\mathbf{x}, t) , \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_1 \quad \text{(condição de Dirichlet)}$$

$$u(\mathbf{x}, t) = \overline{u}(\mathbf{x}, t) \quad \overline{u}($$

$$p(\mathbf{x},t) = \frac{\partial \mathbf{u}(\mathbf{x},t)}{\partial n(\mathbf{x})} = \overline{p}(\mathbf{x},t) , \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_2 \quad \text{(condição de Neumann)}$$

e, visto que o problema é transiente, considerando-se também as condições iniciais no tempo $t=t_0$, dadas por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x},t_0) \quad , \qquad \mathbf{x} \in \Omega \,. \tag{2.3}$$

Nas equações acima, *c* representa a difusividade térmica, *t* indica o tempo, **x** denota um ponto com coordenadas cartesianas x_i (i = 1,2,3) e $\gamma(\mathbf{x},t)$ descreve as forças de volume a serem consideradas na análise. O termo $\dot{u}(\mathbf{x},t)$ indica derivada no tempo, isto é, $\dot{u} = \partial u / \partial t$ e ∇^2 é o operador Laplace. As funções $u(\mathbf{x},t)$ e $p(\mathbf{x},t)$ são genericamente denominadas de função potencial e função fluxo, respectivamente.

O problema de potencial representado pelas equações (2.1)–(2.3), pode também ser representado através de uma equação integral envolvendo apenas valores de contorno da função incógnita u(**x**,t), sendo esta transformação obtida via diferentes formulações.

2.3. Representação Integral Dependente do Tempo

A representação integral de problemas de difusão pode ser obtida usando-se a relação de reciprocidade entre dois estados de difusão em $\Omega \ge t$. Neste trabalho, a relação de reciprocidade será obtida empregando-se transformadas de Laplace para a remoção da dependência temporal do problema. Algumas operações algébricas simples envolvendo os dois estados serão realizadas no domínio transformado, sendo a expressão resultante inversamente transformada para o domínio do tempo. Posteriormente, o teorema da divergência será aplicado para eliminar as integrais de domínio envolvendo a função incógnita e ter-se-á, como resultado, a representação integral de problemas de difusão.

2.3.1. Relação de Reciprocidade

A transformada de Laplace de uma função $u(\mathbf{x},t)$, quando ela existe, (Widder,1946) é dada por

$$L[u(\mathbf{x},t)] = U(\mathbf{x},s) = \int_{0}^{\infty} u(\mathbf{x},t) e^{-st} dt , \qquad (2.4)$$

onde o parâmetro de transformação s é real e positivo.

Tomando-se a transformada de Laplace da derivada primeira em relação ao tempo da função $u(\mathbf{x},t)$ e integrando-se por partes, tem-se que

$$L\left[\frac{\partial u(\mathbf{x},t)}{\partial t}\right] = s U(\mathbf{x},s) - u_0(\mathbf{x},t_0).$$
(2.5)

Assim, se dois diferentes estados de difusão $S = [u, p, \gamma]$ e $S' = [u', p', \gamma']$ com condições iniciais $u_0(\mathbf{x})$ e $u'_0(\mathbf{x})$, respectivamente, são definidos no mesmo meio

contínuo Ω com contorno Γ , a aplicação da transformada de Laplace L à equação (2.1) para S e S' resulta em

$$L[u_{,ii}] + L[\gamma] = c^{-1} \{ s L[u] - u_0 \} , \qquad (2.6)$$

$$L[u'_{,ii}] + L[\gamma'] = c^{-1} \{ s L[u'] - u'_0 \}.$$
(2.7)

Multiplicando-se ambos os lados das equações (2.6) e (2.7) por L[u'] e L[u], respectivamente, e subtraindo-se os resultados, obtém-se a equação (2.8), da qual a relação de reciprocidade entre os estados S e S' será obtida

$$L[u']L[u,_{ii}] + L[u']L[\gamma] - L[u]L[u',_{ii}] - L[u]L[\gamma'] = c^{-1} \{L[u]u'_0 - L[u']u_0\}.$$
(2.8)

Com o propósito de transformar a equação (2.8) novamente para o domínio do tempo, usar-se-á a relação (2.9) dada abaixo

$$L[f(t)]L[g(t)] = L[\int_{0}^{t} f(t-\tau)g(\tau)d\tau] = L[\int_{0}^{t} f(\tau)g(t-\tau)d\tau] = L[f * g],$$
(2.9)

onde o símbolo * indica integral de convolução de Riemann.

Aplicando-se a igualdade anterior na equação (2.8), realizando-se a transformada inversa de Laplace e integrando-se a expressão resultante sobre o domínio Ω , obtém-se a expressão abaixo no domínio do tempo

$$\int_{\Omega} \mathbf{u}' * \mathbf{u}_{,ii} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{u}' * \gamma d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{u} * \mathbf{u}'_{,ii} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{u} * \gamma' d\Omega = c^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_{0}' d\Omega - c^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}_{0} d\Omega , \qquad (2.10)$$

na qual, empregando-se o teorema da divergência dado por

$$\int_{\Omega} u' * u_{,ii} d\Omega - \int_{\Omega} u * u'_{,ii} d\Omega = \int_{\Gamma} u' * p d\Gamma - \int_{\Gamma} u * p' d\Gamma, \qquad (2.11)$$

obtém-se a relação de reciprocidade para problemas de difusão, expressa por

$$\int_{\Gamma} [\mathbf{u}' * \mathbf{p}](\mathbf{x}, t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [\mathbf{u}' * \gamma](\mathbf{x}, t) d\Omega(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_{0}(\mathbf{x}) d\Omega =$$

$$\int_{\Gamma} [\mathbf{u} * \mathbf{p}'](\mathbf{x}, t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [\mathbf{u} * \gamma'](\mathbf{x}, t) d\Omega(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_{0}'(\mathbf{x}) d\Omega .$$
(2.12)

Observa-se que o teorema da divergência, dado pela equação (2.11), é válido para regiões multiplamente conexas. Consequentemente, em tais casos, a equação (2.12) é também válida.

2.3.2. Soluções Fundamentais Transientes

As soluções fundamentais transientes são as respostas, em um instante de tempo *t*, no ponto de campo **x** de um meio infinito devidas a um impulso localizado no ponto fonte $\boldsymbol{\xi}$, em um certo instante τ , sob consideração de forças de volume nulas e condições iniciais homogêneas. Assim, a solução fundamental u^{*}(**x**, t; $\boldsymbol{\xi}, \tau$) para problemas de difusão tridimensionais é dada por (Carslaw e Jaeger, 1959; Morse e Feshbach, 1953)

$$u^{*}(\mathbf{x}, t, \xi, \tau) = \frac{1}{[4\pi c(t-\tau)]^{3/2}} \exp\left[-\frac{r^{2}}{4c(t-\tau)}\right] H(t-\tau) , \qquad (2.13)$$

onde r = $|\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}|$. A função de Heaviside H $(t - \tau)$ foi introduzida para destacar o fato da solução anular-se para $\tau > t$.

Derivando-se a equação do potencial fundamental em relação à direção definida pelo vetor normal unitário externo à superfície Γ no ponto de campo **x**, obtém-se a expressão para o fluxo fundamental p^{*}(**x**,t; ξ , τ), dada por

$$p^{*}(\mathbf{x}, t, \xi, \tau) = \frac{-r_{i}n_{i}}{16\pi^{3/2}[c(t-\tau)]^{5/2}} \exp\left[-\frac{r^{2}}{4c(t-\tau)}\right] H(t-\tau) , \qquad (2.14)$$

onde $r_i = x_i(\mathbf{x}) - x_i(\boldsymbol{\xi})$ e n_i (i = 1,2,3) são as componentes do vetor normal unitário.



Figura 2.1: Ponto de campo x e domínios $\Omega \cup \Gamma$ e $\Omega^* \cup \Gamma^*$.

As soluções fundamentais apresentadas possuem propriedades que podem ser muito úteis para a compreensão do problema de difusão e outro fenômenos físicos semelhantes. As propriedades mais importantes para este desenvolvimento teórico estão listadas abaixo.

(i) translação no tempo	\longrightarrow	$\mathbf{u}^{*}(\mathbf{x},t;\boldsymbol{\xi},\tau) = \mathbf{u}^{*}(\mathbf{x},t+\Delta t;\boldsymbol{\xi},\tau+\Delta t);$
(ii) causalidade	\longrightarrow	$u^{*}(\mathbf{x}, t; \boldsymbol{\xi}, \tau) = 0 \text{ se } \tau > t;$
(iii) reciprocidade	\longrightarrow	$u^{*}(\mathbf{x}, t, \xi, \tau) = u^{*}(\xi, -\tau; \mathbf{x}, -t)$.

É importante salientar que as propriedades (*i*), (*ii*) e (*iii*) também são válidas para o fluxo fundamental $p^*(\mathbf{x}, t; \boldsymbol{\xi}, \tau)$.

2.3.3. Representação Integral de Contorno

A representação integral de problemas de difusão é obtida a partir da equação de reciprocidade (2.12), considerando-se o estado S' como sendo um estado no qual $\gamma = \delta(t)\delta(\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi})$, em um domínio infinito com condições iniciais homogêneas. Assim, temse

$$u'(\mathbf{x},t) = u^{*}(\mathbf{x},t,\xi,0),$$
 (2.15)

$$p'(\mathbf{x},t) = p^*(\mathbf{x},t,\xi,0),$$
 (2.16)

$$\gamma'(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})\delta(t - 0), \qquad (2.17)$$

$$u_0'(\mathbf{x}) = 0.$$
 (2.18)

Aplicando-se a seguinte propriedade da função delta de Dirac

$$\int_{\Omega} u(a)\delta(b,a)d\Omega(a) = u(b)$$
(2.19)

na primeira integral de domínio que aparece no membro do lado direito da relação de reciprocidade (2.12), tem-se

$$\int_{\Omega} [u * \gamma'](\mathbf{x}, t) d\Omega(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u(\mathbf{x}, \tau) \gamma'(\mathbf{x}, t - \tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) =$$

$$\int_{\Omega} \int_{0}^{t} u(\mathbf{x}, \tau) \delta(\mathbf{x} - \xi) \delta(t - \tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) = u(\xi, t).$$
(2.20)

Substituindo-se as identidades (2.15), (2.16), (2.18) e (2.20) na equação (2.12), esta torna-se a representação integral de problemas de difusão

$$u(\xi,t) + \int_{\Gamma} [u * p^{*}](\mathbf{x},t) d\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} [u^{*} * p](\mathbf{x},t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [u^{*} * \gamma](\mathbf{x},t) d\Omega(\mathbf{x}) + c^{-1} \int_{\Omega} u^{*}(\mathbf{x},t) u_{0}(\mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{x}).$$
(2.21)

Esta representação integral pode ser escrita em uma forma mais conveniente. Assim, explicitando-se as integrais de convolução

$$u(\xi,t) + \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t-\tau;\xi,0)u(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t-\tau;\xi,0)p(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t-\tau;\xi,0)\gamma(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + c^{-1} \int_{\Omega} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0)u_{0}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x})$$

$$(2.22)$$

e aplicando-se a propriedade de translação no tempo das soluções fundamentais, tem-se a representação integral de problemas de difusão na sua forma final

$$u(\xi,t) + \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) u(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) p(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) \gamma(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + c^{-1} \int_{\Omega} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) u_{0}(\mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{x}).$$

$$(2.23)$$

Deve-se observar que nas operações realizadas para obter-se a equação (2.23), admitiuse ser a função $u(\mathbf{x},\tau)$ uma vez diferenciável em relação ao tempo e duas vezes em relação às coordenadas espaciais.

A equação integral de contorno resulta da equação (2.23) para $\xi \in \Gamma$ e deve ser resolvida inicialmente para que, com a resposta do contorno, seja possível conhecer a resposta no restante do domínio do problema. Como consequência do comportamento singular dos núcleos fundamentais integrados no tempo (ver seção 2.4.2.), para a obtenção da correspondente equação integral de contorno, o ponto singular será excluído do caminho de integração pela definição de uma casca esférica de raio ε centrada em ξ (ver figura 2.2) e aplicando-se o limite para $\varepsilon \rightarrow 0$. Partindo-se da equação (2.23), estas considerações resultam em



Figura 2.2: Exclusão do ponto singular.

$$u(\xi,t) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) u(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) p(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Omega - \Omega_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) \gamma(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + (2.24)$$

$$c^{-1} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Omega - \Omega_{\varepsilon}} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) u_{0}(\mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{x}).$$

Considerando-se o primeiro limite na equação (2.24), tem-se

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}).$$
(2.25)

Devido ao termo $\int_0^t p^*(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau$ ser fortemente singular, a primeira integral de contorno do lado direito da equação (2.25) será divergente se esta for calculada ordinariamente. Mas, como indicado nesta equação, a exclusão do ponto singular é feita por meio de uma casca esférica centrada em $\boldsymbol{\xi}$, o que corresponde exatamente ao valor

principal de Cauchy da integral imprópria quando o limite indicado é avaliado, e a existência deste limite está assegurada visto que o campo escalar $u(\mathbf{x},t)$ satisfaz a condição de continuidade de Hölder no ponto $\boldsymbol{\xi}$ (Cook *et al*, 1989; Mansur e Brebbia, 1982), isto é, existem constantes positivas A, α e *c*, tais que

$$\|\mathbf{u}(\mathbf{x},t) - \mathbf{u}(\xi,t)\| \le \operatorname{Ar}^{\alpha} \operatorname{com} \mathbf{r} = \|\mathbf{x} - \xi\|$$
 sempre que $\mathbf{r} \le \mathbf{c}$.

O outro limite da equação (2.25), representado por *L*, pode então ser avaliado observando-se a continuidade do campo escalar $u(\mathbf{x}, t)$, como mostrado a seguir

$$L = \lim_{\epsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\epsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\lim_{\epsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\epsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) [u(\mathbf{x}, \tau) - u(\xi, \tau)] d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \lim_{\epsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\epsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) \qquad (2.26)$$

$$= \lim_{\epsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\epsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}),$$

onde, substituindo-se a equação do fluxo fundamental transiente, tem-se

$$L = \lim_{\varepsilon \to 0} \iint_{\Gamma_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} \frac{-r_{i}n_{i}}{16\pi^{3/2} [c(t-\tau)]^{5/2}} \exp\left[-\frac{r^{2}}{4c(t-\tau)}\right] u(\xi,\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}).$$
(2.27)

A integral no domínio do tempo da equação anterior pode ser avaliada analiticamente introduzindo-se uma nova variável $k = \frac{r^2}{4c(t-\tau)}$. Esta troca de variáveis resulta em:

$$\begin{split} (t-\tau) &= \frac{r^2}{4ck} \quad \longrightarrow \quad \tau = t - \frac{r^2}{4ck} \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \tau}{\partial k} = \frac{r^2}{4ck^2} \\ (t-\tau)^{-5/2} &= \left(\frac{r^2}{4ck}\right)^{-5/2} = \frac{r^{-5}}{(4c)^{-5/2}} k^{5/2} , \end{split}$$

e os novos limites inferior e superior da integral serão dados por

$$\begin{aligned} \tau &= 0 \quad \Rightarrow \quad k_{i} = \frac{r^{2}}{4ct}, \\ \tau &= t \quad \Rightarrow \quad k_{f} \to \infty. \end{aligned}$$

Portanto, o limite L pode ser rescrito como

$$L = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{k_{i}}^{k_{f}} \frac{-r_{i}n_{i}}{16\pi^{3/2}c^{5/2}} \frac{r^{-5}}{(4c)^{-5/2}} k^{5/2} e^{-k} u \left(\xi, t - \frac{r^{2}}{4ck}\right) \frac{r^{2}}{4ck^{2}} dk d\Gamma(\mathbf{x}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \frac{-r_{i}n_{i}}{2\pi^{3/2}cr^{3}} \int_{k_{i}}^{\infty} k^{\frac{3}{2}-1} e^{-k} u \left(\xi, t - \frac{r^{2}}{4ck}\right) dk d\Gamma(\mathbf{x}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \frac{-r_{i}n_{i}}{2\pi^{3/2}cr^{3}} \Gamma\left(\frac{3}{2}, k_{i}\right) u \left(\xi, t - \frac{r^{2}}{4ck}\right) d\Gamma(\mathbf{x})$$
(2.28)

onde Γ é a função gama incompleta. Se $\epsilon = r \rightarrow 0$, então $k_i \rightarrow 0$ e, assim, a função gama incompleta torna-se completa, onde $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$. Portanto,

$$L = \frac{-1}{4\pi c} \left\{ \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\frac{\Gamma_{\epsilon}}{r_{\epsilon}}} \frac{r_{,i} n_{i}}{r^{2}} d\Gamma(\mathbf{x}) \right\} u(\xi, t).$$
(2.29)

Analisando-se o problema de potencial estacionário $c\nabla^2 u = 0$, verifica-se que o fluxo fundamental é dado por

$$^{\text{st}} p^{*}(\mathbf{x};\xi) = \frac{-r_{,i} n_{i}}{4\pi c r^{2}} .$$
(2.30)

Portanto, comparando-se as equações (2.29) e (2.30), conclui-se que

$$L = \lim_{\varepsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \iint_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} {}^{st} p^{*}(\mathbf{x}; \xi) d\Gamma(\mathbf{x}) \right\} u(\xi, t), \quad (2.31)$$

e a equação (2.25) pode ser rescrita como

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$V.P. \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{st} p^{*}(\mathbf{x}; \xi) d\Gamma(\mathbf{x}) \right\} u(\xi, t).$$
(2.32)

Como todos os outros limites da equação (2.24) estão relacionados a integrais fracamente singulares, integrais estas convergentes, a equação integral de contorno para problemas de difusão é dada por:

$$c(\xi)u(\xi,t) + \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)u(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\int_{\Gamma} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)p(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)\gamma(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Omega(\mathbf{x}) +$$

$$c^{-1} \int_{\Omega} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0)u_{0}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x})$$
(2.33)

onde o termo livre da equação integral de contorno $c(\boldsymbol{\xi})$ é dado por

$$\mathbf{c}(\boldsymbol{\xi}) = 1 + \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{\mathrm{st}} \mathbf{p}^{*}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right\}.$$
(2.34)

Menciona-se que a integral imprópria de contorno na equação (2.33) associada com $\int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau$ é calculada no sentido do valor principal de Cauchy.

2.4. Algebrização da Equação Integral de Contorno

Para a aplicação do método dos elementos de contorno em problemas de engenharia, faz-se necessário a discretização do contorno e do domínio destes problemas. A discretização espacial é realizada utilizando-se elementos isoparamétricos, isto é, elementos para os quais as funções de forma necessárias à interpolação das variáveis de campo e da geometria, a partir de seus valores nodais, são as mesmas. Com a discretização do problema é possível transformar a equação integral de contorno (2.33) em um sistema de equações algébricas cuja solução numérica é obtida através de um processo de marcha no tempo onde a equação integral de contorno no domínio do tempo é empregada para determinar os valores incógnitas $u(\mathbf{x},t_n) e p(\mathbf{x},t_n)$ em intervalos de tempo igualmente espaçados t_n , n = 1, 2, ..., N.

2.4.1. Processo de Marcha no Tempo

Na representação integral de contorno de problemas de difusão indicada pela equação $(2.33) u(\mathbf{x},\tau)$, $p(\mathbf{x},\tau) e \gamma(\mathbf{x},\tau)$ podem ser aproximados no *m*-ésimo passo de tempo como

$$u^{(m)}(\mathbf{x},\tau) = \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} L_{\alpha}^{(m)}(\tau) u^{\alpha(m)}(\mathbf{x})$$
(2.35)

$$p^{(m)}(\mathbf{x},\tau) = \sum_{\beta=1}^{n_{\beta}} M_{\beta}^{(m)}(\tau) p^{\beta(m)}(\mathbf{x})$$
(2.36)

$$\gamma^{(m)}(\mathbf{x},\tau) = \sum_{\zeta=1}^{n_{\zeta}} N_{\zeta}^{(m)}(\tau) \gamma^{\zeta(m)}(\mathbf{x})$$
(2.37)

onde n_{α} , $n_{\beta} e n_{\zeta}$ são os números de instantes usados para interpolar no tempo as funções $u(\mathbf{x}, \tau)$, $p(\mathbf{x}, \tau) e \gamma(\mathbf{x}, \tau)$, respectivamente. $u^{\alpha(m)}(\mathbf{x})$, $p^{\beta(m)}(\mathbf{x}) e \gamma^{\zeta(m)}(\mathbf{x})$ indicam os valores das correspondentes funções nos instantes α , $\beta e \zeta$ do *m*-ésimo passo de tempo, e $L_{\alpha}^{(m)}(\tau)$, $M_{\beta}^{(m)}(\tau) e N_{\zeta}^{(m)}(\tau)$ representam as funções de interpolação. Substituindo-se as

equações (2.35)-(2.37) na equação (2.33), a forma discretizada no tempo desta pode ser escrita como

$$c(\xi)u(\xi,t_{n}) + \int_{\Gamma} \sum_{m=1}^{\bar{n}} \int_{t_{m-1}}^{t_{m}} p^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,\tau) \sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}} L_{\alpha}^{(m)}(\tau) u^{\alpha(m)}(\mathbf{x}) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \\ \int_{\Gamma} \sum_{m=1}^{\bar{n}} \int_{t_{m-1}}^{t_{m}} u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,\tau) \sum_{\beta=1}^{n_{\beta}} M_{\beta}^{(m)}(\tau) p^{\beta(m)}(\mathbf{x}) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \\ \int_{\Omega} \sum_{m=1}^{\bar{n}} \int_{t_{m-1}}^{t_{m}} u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,\tau) \sum_{\zeta=1}^{n_{\zeta}} N_{\zeta}^{(m)}(\tau) \gamma^{\zeta(m)}(\mathbf{x}) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + \\ c^{-1} \int_{\Omega} u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,0) u_{0}(\mathbf{x}) d\Omega(\mathbf{x})$$
(2.38)

onde *n* refere-se ao tempo atual, enquanto que \overline{n} é o número de passos no qual foi discretizado o tempo t_n . Os limites da integração no tempo são obtidos por

$$t_{m} = \begin{cases} m\Delta t, & \text{se} \quad m < \overline{n}, \\ \overline{m}\Delta t, & \text{se} \quad m = \overline{n}. \end{cases}$$
(2.39)

Para a obtenção da resposta da análise no passo de tempo atual \overline{n} , caso se utilize funções de interpolação no tempo de ordem superior à linear, faz-se necessário um esquema de marcha no tempo dentro deste próprio passo de tempo de modo a possibilitar a determinação das incógnitas do problema em todos os instantes considerados. Isto é necessário porque as variáveis de campo são completamente conhecidas somente no início do passo de tempo, mas não nos outros instantes do passo de tempo nos quais os valores de contorno são parcialmente conhecidos (somente os valores de contorno prescritos). Assim, supondo-se que o problema tenha *N* incógnitas por instante de tempo, tem-se, naturalmente, em todo o passo de tempo \overline{n} , $(n_a - 1) \times N$ incógnitas que somente podem ser avaliadas gerando-se igualmente $(n_a - 1) \times N$ equações algébricas. Este esquema pode ser melhor compreendido com o auxílio do parâmetro *a*, que atua como um contador, descrito abaixo

$$a = 2,...n_a, \qquad n_a = \max(n_{\alpha}, n_{\beta})$$
 (2.40)

$$\overline{m} = \begin{cases} m, & \text{se } n_a \leq 2 \\ \left[(\overline{n} - 1) + \frac{(a - 1)}{(n_a - 1)} \right], & \text{se } n_a \geq 3 \end{cases} .$$
(2.41)

Como pode-se ver, o parâmetro *a* indica a ordem local do tempo discreto t_n ao longo do último passo de tempo \overline{n} e seu intervalo de variação é de 2 a $n_a = \max(n_{\alpha}, n_{\beta})$ de modo a tornar possível a determinação da resposta do problema em todos os pontos do passo de tempo corrente \overline{n} . Menciona-se, ainda, que as funções de interpolação $L_{\alpha}^{(m)}(\tau)$, $M_{\beta}^{(m)}(\tau)$ e $N_{\zeta}^{(m)}(\tau)$ dadas pelas expressões (2.35)-(2.37) não são necessariamente iguais entre si e obedecem à condição

$$\mathbf{L}_{a}^{(m)}(\boldsymbol{\tau}_{i}) = \boldsymbol{\delta}_{ai} \qquad \qquad \mathbf{M}_{b}^{(m)}(\boldsymbol{\tau}_{i}) = \boldsymbol{\delta}_{bi} \qquad \qquad \mathbf{N}_{c}^{(m)}(\boldsymbol{\tau}_{i}) = \boldsymbol{\delta}_{ci}$$

onde δ é o símbolo de Kronecker.



Figura 2.3: Exemplos de funções de interpolação no tempo.

Naturalmente, estas funções são independentes da ordem do passo de tempo *m* (primeiro passo, segundo passo, etc.) se os mesmos pontos (interpolação constante, interpolação linear, etc.) são considerados em cada passo de tempo da análise, como será o caso deste trabalho.

A equação (2.38), que é a versão discretizada no tempo da equação (2.33), pode ser rescrita em uma forma mais conveniente dada por

$$c(\xi)u(\xi,t_{n}) + \sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}}\int_{\Gamma}^{(\alpha)}P^{nm}(\mathbf{x};\xi)u^{\alpha(m)}(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\beta=1}^{n_{\beta}}\int_{\Gamma}^{(\beta)}U^{nm}(\mathbf{x};\xi)p^{\beta(m)}(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\zeta=1}^{n_{\zeta}}\int_{\Omega}^{(\zeta)}\overline{U}^{nm}(\mathbf{x};\xi)\gamma^{\zeta(m)}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x}) + (2.42)$$

$$c^{-1}\int_{\Omega}u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,0)u_{0}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x})$$

onde $^{(\alpha)}P^{nm}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$, $^{(\beta)}U^{nm}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$ e $^{(\zeta)}\overline{U}^{nm}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$ são os núcleos fundamentais integrados no domínio do tempo, isto é,

$$^{(\alpha)} P^{nm}(\mathbf{x};\xi) = \int_{t_{m-1}}^{t_m} p^*(\mathbf{x},t_n;\xi,\tau) L^{(m)}_{\alpha}(\tau) d\tau, \qquad (2.43)$$

$$^{(\beta)} U^{nm}(\mathbf{x};\xi) = \int_{t_{m-1}}^{t_m} u^*(\mathbf{x},t_n;\xi,\tau) M^{(m)}_{\beta}(\tau) d\tau, \qquad (2.44)$$

$$^{(\zeta)}\overline{U}^{nm}(\mathbf{x};\xi) = \int_{t_{m-1}}^{t_m} u^*(\mathbf{x},t_n;\xi,\tau) N_{\zeta}^{(m)}(\tau) d\tau.$$
(2.45)

Adotando-se passos de tempo de mesmo tamanho Δt , segue-se da aplicação da propriedade de translação no tempo para as expressões (2.43)-(2.45) que

$$^{(\alpha)}P^{nm}(\mathbf{x};\xi) = {}^{(\alpha)}P^{(n-1)(m-1)}(\mathbf{x};\xi) = \dots = {}^{(\alpha)}P^{(n-m+1)(1)}(\mathbf{x};\xi), \qquad (2.46)$$

$$^{(\beta)} U^{nm}(\mathbf{x};\xi) = {}^{(\beta)} U^{(n-1)(m-1)}(\mathbf{x};\xi) = \dots = {}^{(\beta)} U^{(n-m+1)(1)}(\mathbf{x};\xi), \qquad (2.47)$$

$$^{(\zeta)}\overline{U}^{nm}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) = {}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n-1)(m-1)}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) = \dots = {}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n-m+1)(1)}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi})$$
(2.48)

e a equação (2.42) é equivalentemente dada por

$$c(\xi)u(\xi,t_{n}) + \sum_{m=1}^{\bar{n}}\sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}}\int_{\Gamma}^{(\alpha)}P^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)u^{\alpha(m)}(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x}) = \\ \sum_{m=1}^{\bar{n}}\sum_{\beta=1}^{n_{\beta}}\int_{\Gamma}^{(\beta)}U^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)p^{\beta(m)}(\mathbf{x})d\Gamma(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^{\bar{n}}\sum_{\zeta=1}^{n_{\zeta}}\int_{\Omega}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)\gamma^{\zeta(m)}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x}) + (2.49)\\ c^{-1}\int_{\Omega}u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,0)u_{0}(\mathbf{x})d\Omega(\mathbf{x})$$

onde ${}^{(\alpha)}P^{(n-m+1)}$, ${}^{(\beta)}U^{(n-m+1)}$ e ${}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n-m+1)}$ precisam ser calculados somente para o primeiro passo de tempo, visto que para m > 1 estes núcleos já foram calculados para os tempos t < t_n. Assim, em cada passo de tempo, tem-se que realizar somente as seguintes integrações no tempo

$$^{(\alpha)} \mathbf{P}^{(n)}(\mathbf{x};\xi) = \int_{0}^{\overline{m}_{1}\Delta t} p^{*}(\mathbf{x},t_{(n)};\xi,\tau) L_{\alpha}(\tau) d\tau, \qquad (2.50)$$

$$^{(\beta)} U^{(n)}(\mathbf{x};\xi) = \int_{0}^{\overline{m}_{1}\Delta t} u^{*}(\mathbf{x},t_{(n)};\xi,\tau) M_{\beta}(\tau) d\tau, \qquad (2.51)$$

$$^{(\zeta)}\overline{\mathbf{U}}^{(n)}(\mathbf{x};\boldsymbol{\xi}) = \int_{0}^{\overline{\mathbf{m}}_{1}\Delta t} \mathbf{u}^{*}(\mathbf{x},\mathbf{t}_{(n)};\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\tau}) \mathbf{N}_{\zeta}(\boldsymbol{\tau}) d\boldsymbol{\tau} .$$
(2.52)

Nestas equações \overline{m}_1 é determinado de acordo com a equação (2.53), que é similar à equação (2.41), observando-se apenas que $\overline{n} = 1$, isto é,

$$\overline{m}_{1} = \begin{cases} 1, & \text{se } n_{a} \leq 2, \\ \frac{(a-1)}{(n_{a}-1)}, & \text{se } n_{a} \geq 3. \end{cases}$$
(2.53)

O tempo discreto $t_{b(m)}$, sendo b(m) os pontos da discretização temporal, associado com os pontos locais $\alpha(m)$, $\beta(m)$ e $\zeta(m)$ na equação (2.49) – onde as quantidades físicas serão avaliadas - é calculado por

$$t_{b(m)} = b_g \Delta t \tag{2.54}$$

onde

$$b_{g} = \begin{cases} m, & \text{se } n_{b} = 1 \\ (m-1) + \left[\frac{b(m) - 1}{n_{b} - 1} \right], & \text{se } n_{b} \ge 2 \end{cases}$$
(2.55)

com $b = \alpha, \beta, \zeta$ e $m = 1,...,\overline{n}$. Para maior clareza, menciona-se que o parâmetro b(m) indica a ordem local do instante considerado (α, β, ζ) ao longo do passo de tempo m. Assim, para o caso de interpolação linear, a ordem local do instante referente ao início do passo de tempo ($b = \alpha$) é 1 (um) e a ordem local do instante referente ao fim do passo de tempo ($b = \beta$) é 2 (dois).

2.4.2. Avaliação Analítica das Integrais Temporais

Neste trabalho, para a avaliação dos núcleos integrados no tempo indicados nas expressões (2.50)-(2.52), considerar-se-á que as funções de interpolação $L_{\alpha}^{(m)}(\tau)$, $M_{\beta}^{(m)}(\tau)$ e $N_{\zeta}^{(m)}(\tau)$ são funções lineares. Menciona-se que a formulação apresentada é geral, podendo ser adotado qualquer outro tipo de interpolação temporal. Estas integrações podem ser realizadas analiticamente, conforme mostrado a seguir.

Substituindo-se $p^*(\mathbf{x}, t_{(n)}; \xi, \tau)$ na equação (2.50) esta é equivalentemente dada pela expressão

$$^{(\alpha)} P^{(n)}(\mathbf{x}, \xi) = k \int_{0}^{\Delta t} \frac{1}{(t_n - \tau)^{5/2}} e^{\frac{-r^2}{4c(t_n - \tau)}} L_{\alpha}(\tau) d\tau, \qquad (2.56)$$

na qual a constante k introduzida é dada por

$$k = \frac{-r_i n_i}{16\pi^{3/2} c^{5/2}}$$
(2.57)

e onde observa-se que a função de Heaviside assume apenas o valor unitário no intervalo de tempo considerado, isto é,

$$H(t_n - \tau) = 1 \text{ para } 0 \le \tau \le \Delta t.$$
(2.58)

Visto que as funções de interpolação no tempo são lineares, a função $L_{\alpha}(\tau)$ será, então, dada por

$$L_1 = \left(1 - \frac{\tau}{\Delta t}\right) \quad e \quad L_2 = \left(\frac{\tau}{\Delta t}\right),$$
 (2.59)

sendo os índices 1 e 2 referentes ao início e ao fim do passo de tempo, respectivamente.

Assim, para o início de cada passo de tempo, a expressão (2.56) é dada por

$$^{(1)} P^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = k \int_{0}^{\Delta t} \frac{1}{(t_{n} - \tau)^{5/2}} \left(1 - \frac{\tau}{\Delta t} \right) e^{\frac{-r^{2}}{4c(t_{n} - \tau)}} d\tau = k \left[\int_{0}^{\Delta t} \frac{1}{(t_{n} - \tau)^{5/2}} e^{\frac{-r^{2}}{4c(t_{n} - \tau)}} d\tau - \frac{1}{\Delta t} \int_{0}^{\Delta t} \frac{\tau}{(t_{n} - \tau)^{5/2}} e^{\frac{-r^{2}}{4c(t_{n} - \tau)}} d\tau \right]$$
(2.60)

que é equivalentemente expressa por

onde I_1 e I_2 representam as seguintes integrais

$$I_{1} = \int_{0}^{\Delta t} \frac{1}{\left(t_{n} - \tau\right)^{5/2}} e^{\frac{-r^{2}}{4c(t_{n} - \tau)}} d\tau, \qquad (2.62)$$

$$I_{2} = \int_{0}^{\Delta t} \frac{\tau}{(t_{n} - \tau)^{5/2}} e^{\frac{-r^{2}}{4c(t_{n} - \tau)}} d\tau.$$
(2.63)

Para a avaliação analítica destas integrais no domínio do tempo, faz-se necessária a introdução de uma nova variável $u = \frac{r^2}{4c(t_n - \tau)}$. Esta troca de variáveis resulta nas seguintes igualdades de interesse

$$(t_n - \tau) = \frac{r^2}{4cu} \longrightarrow \tau = t_n - \frac{r^2}{4cu} \longrightarrow \frac{\partial \tau}{\partial u} = \frac{r^2}{4cu^2}$$

$$(t_n - \tau)^{-5/2} = \left(\frac{r^2}{4cu}\right)^{-5/2} = \frac{r^{-5}}{(4c)^{-5/2}} u^{5/2} .$$

$$(2.64)$$

e os novos limites inferior e superior das integrais I_1 e I_2 , serão

$$\tau = 0 \qquad \Rightarrow \qquad u_{i} = \frac{r^{2}}{4ct_{n}},$$

$$\tau = \Delta t \qquad \Rightarrow \qquad u_{f} = \frac{r^{2}}{4ct_{n-1}},$$
(2.65)

onde $t_{n-1} = t_n - \Delta t$, e o índice *i* está associado a $\tau = 0$ e o índice *f* está associado a $\tau = \Delta t$.

Portanto, realizando-se a troca de variáveis indicada acima, a integral I_1 é dada por

$$I_{1} = \int_{u_{i}}^{u_{f}} \frac{r^{-5}}{(4c)^{-5/2}} u^{5/2} e^{-u} \frac{r^{2}}{4cu^{2}} du = \frac{r^{-3}}{(4c)^{-3/2}} \int_{u_{i}}^{u_{f}} u^{1/2} e^{-u} du$$

$$\therefore I_{1} = \frac{r^{-3}}{(4c)^{-3/2}} \int_{u_{i}}^{u_{f}} u^{3/2-1} e^{-u} du$$
(2.66)

e pode ser calculada introduzindo-se o conceito da função gama, para a qual vale:

$$\int_{u_{i}}^{u_{f}} u^{a-1} e^{-u} du = \Gamma(a, u_{i}) - \Gamma(a, u_{f}).$$
(2.67)

Assim, obtém-se a solução analítica da integral I_1 que é dada por

$$I_{1} = \frac{r^{-3}}{(4c)^{-3/2}} \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{f}\right) \right].$$
(2.68)

A solução analítica da integral I_2 , dada pela equação (2.63), pode ser obtida realizandose substituições semelhantes às empregadas na obtenção da solução da integral I_1 . Assim,

$$I_{2} = t_{n} \frac{r^{-3}}{(4c)^{-3/2}} \int_{u_{i}}^{u_{f}} u^{3/2-1} e^{-u} du - \frac{r^{-1}}{(4c)^{-1/2}} \int_{u_{i}}^{u_{f}} u^{1/2-1} e^{-u} du$$
(2.69)

e, novamente com o auxílio da função gama, tem-se que

$$I_{2} = t_{n} \frac{r^{-3}}{(4c)^{-3/2}} \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{f}\right) \right] - \frac{r^{-1}}{(4c)^{-1/2}} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{f}\right) \right].$$
(2.70)

Substituindo-se k, I_1 e I_2 na equação (2.61), o núcleo fundamental integrado no tempo ⁽¹⁾ P⁽ⁿ⁾ é dado por

$${}^{(1)} P^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{-r_{,i} n_{i}}{2\pi^{3/2} c r^{2}} \left(1 - \frac{t_{n}}{\Delta t} \right) \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{f}\right) \right] - \frac{r_{,i} n_{i}}{8\pi^{3/2} c^{2}} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{f}\right) \right]$$
(2.71)

onde $r_{i} = \frac{r_i}{r}$.

O núcleo fundamental $^{(2)}P^{(n)}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi})$, referente ao fim do passo de tempo, pode ser determinado conforme os procedimentos expostos para a avaliação do núcleo fundamental para o início do passo de tempo, $^{(1)}P^{(n)}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi})$. Assim, substituindo-se a função $L_2(\tau)$ na equação (2.56) tem-se que

$$^{(2)} P^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = k \frac{1}{\Delta t} \int_{0}^{\Delta t} \frac{\tau}{(t_n - \tau)^{5/2}} e^{\frac{-r^2}{4c(t_n - \tau)}} d\tau = k \frac{1}{\Delta t} I_2.$$
(2.72)

Fazendo-se as devidas substituições de k e I_2 na equação acima, tem-se o núcleo fundamental integrado no tempo
$${}^{(2)} P^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{-r_{,i} n_{i}}{2\pi^{3/2} c r^{2}} \frac{t_{n}}{\Delta t} \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{3}{2}, u_{f}\right) \right] + \frac{r_{,i} n_{i}}{8\pi^{3/2} c^{2}} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}, u_{f}\right) \right].$$
(2.73)

Os núcleos fundamentais ^(β) U⁽ⁿ⁾(**x**; ξ) e ^(ζ) $\overline{U}^{(n)}(\mathbf{x}; \xi)$, dados pelas equações (2.51) e (2.52), podem ser avaliados analiticamente realizando-se cálculos semelhantes aos realizados no cálculo do núcleo ^(α) P⁽ⁿ⁾(**x**; ξ). Empregando-se funções de interpolação $M_{\beta}^{(m)}(\tau)$ e $N_{\zeta}^{(m)}(\tau)$ de mesma ordem, tem-se ^(β) U⁽ⁿ⁾(**x**; ξ) = ^(ζ) $\overline{U}^{(n)}(\mathbf{x}; \xi)$. Para o caso de funções de interpolação lineares, estes núcleos são dados pelas equações a seguir

$${}^{(1)} U^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4c\pi^{3/2} r} \left(1 - \frac{t_n}{\Delta t} \int \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, u_i\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}, u_f\right) \right] + \frac{r}{16c^2 \pi^{3/2}} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(-\frac{1}{2}, u_i\right) - \Gamma\left(-\frac{1}{2}, u_f\right) \right],$$
(2.74)

$$^{(2)} \mathbf{U}^{(n)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4c\pi^{3/2} \mathbf{r}} \frac{\mathbf{t}_{n}}{\Delta t} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, \mathbf{u}_{i}\right) - \Gamma\left(\frac{1}{2}, \mathbf{u}_{f}\right) \right] - \frac{\mathbf{r}}{16c^{2}\pi^{3/2}} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(-\frac{1}{2}, \mathbf{u}_{i}\right) - \Gamma\left(-\frac{1}{2}, \mathbf{u}_{f}\right) \right].$$

$$(2.75)$$

Um ponto de fundamental importância na formulação da representação integral de contorno e na formulação dos algoritmos numéricos relacionados à difusão é o comportamento singular apresentado pelos núcleos fundamentais integrados no domínio do tempo. Como poderá ser visto a seguir, apenas os núcleos $^{(2)}U^{(1)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ e $^{(2)}P^{(1)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$, ou seja, os núcleos referentes ao fim do primeiro passo de tempo, apresentam singularidades de ordens iguais a r⁻¹ e r⁻², respectivamente.

Para a 1^ª iteração (n=1) tem-se que

$$t_n = \Delta t$$
, $u_i = \frac{r^2}{4c\Delta t}$, $u_f = \infty$.

Logo, os núcleos integrados no tempo referentes ao início deste passo de tempo, dados por

⁽¹⁾ U⁽¹⁾(**x**, **\xi**) =
$$\frac{\mathbf{r}}{16\mathbf{c}^2 \pi^{3/2}} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(-\frac{1}{2}, \mathbf{u}_i\right) \right],$$

⁽¹⁾ P⁽¹⁾(**x**, **\xi**) = $-\frac{\mathbf{r}_{i} \mathbf{n}_i}{8\pi^{3/2} \mathbf{c}^2} \frac{1}{\Delta t} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, \mathbf{u}_i\right) \right],$

não apresentam singularidades. Entretanto, os núcleos referentes ao fim do passo de tempo, dados por

$$^{(2)} \mathrm{U}^{(1)}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4\mathrm{c}\pi^{3/2}\mathrm{r}} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, \mathrm{u}_{\mathrm{i}}\right) \right] - \frac{\mathrm{r}}{16\mathrm{c}^{2}\pi^{3/2}} \frac{1}{\Delta \mathrm{t}} \left[\Gamma\left(-\frac{1}{2}, \mathrm{u}_{\mathrm{i}}\right) \right] ,$$

$$^{(2)} \mathrm{P}^{(1)}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}) = \frac{-\mathrm{r}_{\mathrm{i}}\,\mathrm{n}_{\mathrm{i}}}{2\pi^{3/2}\mathrm{c}\,\mathrm{r}^{2}} \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}, \mathrm{u}_{\mathrm{i}}\right) \right] + \frac{\mathrm{r}_{\mathrm{i}}\,\mathrm{n}_{\mathrm{i}}}{8\pi^{3/2}\mathrm{c}^{2}} \frac{1}{\Delta \mathrm{t}} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}, \mathrm{u}_{\mathrm{i}}\right) \right] ,$$

apresentam as singularidades mencionadas anteriormente.

✓ Para as demais iterações $(n \ge 2)$ tem-se que

 $\lim_{r \to 0} u_i = \lim_{r \to 0} u_r = 0.$

Portanto, conclui-se que

$$\lim_{r \to 0} {}^{(1)}U^{(n)} = \lim_{r \to 0} {}^{(1)}P^{(n)} = \lim_{r \to 0} {}^{(2)}U^{(n)} = \lim_{r \to 0} {}^{(2)}P^{(n)} = 0,$$

o que indica que os núcleos integrados no tempo referentes a estas iterações não apresentam comportamento singular.

2.4.3. A Discretização Espacial e o Sistema de Equações Algébricas

Após a discretização temporal da equação integral de contorno (2.33) ter sido realizada, pode-se desenvolver a discretização espacial de modo a produzir um sistema de equações algébricas que forneça para todos os instantes de tempo considerados uma solução aproximada do problema analisado. A geometria do contorno e do domínio do problema são discretizadas em elementos de contorno e células de integração, respectivamente. Os elementos de contorno e células de integração mais comuns em problemas tridimensionais são mostrados nas figuras 2.4 e 2.5.



Figura 2.4: Elementos de contorno tridimensionais.



Figura 2.5: Células de integração tridimensionais.

Com o emprego dos elementos de contorno e das células de integração, as quantidades físicas no tempo $t_{b(m)}$, $b = \alpha, \beta, \zeta$, $m = 1, ..., \overline{n}$ e a geometria do problema em questão são genericamente representadas por seus valores nodais como

$${}^{(e)}u^{\alpha(m)}[\mathbf{x}(r,s)] = \sum_{q=1}^{m_b} h_q^b(r,s)^{(e)}u_q^{\alpha(m)}$$
(2.76)

$$^{(e)}p^{\beta(m)}[\mathbf{x}(\mathbf{r},\mathbf{s})] = \sum_{q=1}^{m_b} h_q^b(\mathbf{r},\mathbf{s})^{(e)} p_q^{\beta(m)}$$
(2.77)

$$^{(e)}\gamma^{\zeta(m)}[\mathbf{x}(r,s,t)] = \sum_{q=1}^{n_c} h_q^c(r,s,t)^{(e)}\gamma_q^{\zeta(m)}$$
(2.78)

$$^{(e)}u_{0}[\mathbf{x}(r,s,t_{0})] = \sum_{q=1}^{m_{c}} h_{q}^{c}(r,s,t_{0})^{(e)}u_{0q}$$
(2.79)

$${}^{(e)}x_{i}(r,s) = \sum_{q=1}^{nn_{b}} h_{q}^{b}(r,s){}^{(e)}x_{iq} \quad i = 1,2,3 \text{ (nos elementos de contorno)}$$
(2.80)

$${}^{(e)}x_{i}(r,s,t) = \sum_{q=1}^{nn_{c}} h_{q}^{c}(r,s,t)^{(e)}x_{iq} \quad i = 1,2,3 \text{ (nas células de integração)}$$
(2.81)

onde nn_b e nn_c são, respectivamente, o número de nós do elemento de contorno e da célula de integração. Após a discretização do contorno em n_b elementos e do domínio em n_c células, a equação (2.49) é equivalentemente dada por

$$c(\xi)u(\xi,t_{n}) + \sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\alpha=1}^{n_{\alpha}}\sum_{e=1}^{n_{b}}\int_{\Gamma_{e}} {}^{(\alpha)}P^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)\sum_{q=1}^{m_{b}}h_{q}^{b}(r,s)d\Gamma(\mathbf{x})^{(e)}u_{q}^{\alpha(m)} = \\ \sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\beta=1}^{n_{b}}\sum_{e=1}^{n_{b}}\int_{\Gamma_{e}} {}^{(\beta)}U^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)\sum_{q=1}^{m_{b}}h_{q}^{b}(r,s)d\Gamma(\mathbf{x})^{(e)}p_{q}^{\beta(m)} + \\ \sum_{m=1}^{\overline{n}}\sum_{\zeta=1}^{n_{c}}\sum_{e=1}^{n_{c}}\int_{\Omega_{e}} {}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n-m+1)}(\mathbf{x};\xi)\sum_{q=1}^{m_{c}}h_{q}^{c}(r,s,t)d\Omega(\mathbf{x})^{(e)}\gamma_{q}^{\zeta(m)} + \\ c^{-1}\sum_{e=1}^{n_{c}}\int_{\Omega_{e}}u^{*}(\mathbf{x},t_{n};\xi,0)\sum_{q=1}^{m_{c}}h_{q}^{c}(r,s,t)d\Omega(\mathbf{x})^{(e)}u_{0q}$$

$$(2.82)$$

onde os instantes de tempo locais $\alpha(m)$, $\beta(m) \in \zeta(m)$ estão relacionados com os respectivos instantes globais através das equações (2.54) e (2.55). Associando-se a numeração local dos nós espaciais de cada elemento ou célula com a numeração global dos nós espaciais do modelo discretizado e aplicando-se a equação (2.82) a todos os nós $\boldsymbol{\xi}$ do contorno em um número apropriado de instantes de tempo do passo de tempo corrente \overline{n} , é possível gerar um sistema de equações algébricas para a avaliação dos valores nodais desconhecidos de u e p em todos os instantes de tempo de \overline{n} . A forma geral deste sistema de equações para um certo instante t_n é

$$C\mathbf{u}^{(n)} + \sum_{m=1}^{\overline{n}} \sum_{\alpha(m)=1}^{n_{\alpha}} [\alpha(m)] \mathbf{H}^{(n-m+1)} \mathbf{u}^{(\alpha_{g})} =$$

$$\sum_{m=1}^{\overline{n}} \sum_{\beta(m)=1}^{n_{\beta}} [\beta(m)] \mathbf{G}^{(n-m+1)} \mathbf{p}^{(\beta_{g})} + \sum_{m=1}^{\overline{n}} \sum_{\zeta(m)=1}^{n_{\zeta}} [\zeta(m)] \overline{\mathbf{G}}^{(n-m+1)} \mathbf{g}^{(\zeta_{g})} + \mathbf{b}^{(n)}$$
(2.83)

onde ${}^{[\alpha(m)]}\mathbf{H}^{(n-m+1)}$, ${}^{[\beta(m)]}\mathbf{G}^{(n-m+1)}$ e ${}^{[\zeta(m)]}\overline{\mathbf{G}}^{(n-m+1)}$ são as matrizes de coeficientes envolvendo ${}^{(\alpha)}\mathbf{P}^{(n-m+1)}$, ${}^{(\beta)}\mathbf{U}^{(n-m+1)}$ e ${}^{(\zeta)}\overline{\mathbf{U}}^{(n-m+1)}$, respectivamente, $\mathbf{b}^{(n)}$ é o vetor associado com a distribuição de temperatura inicial em Ω e $\mathbf{u}^{(\alpha_g)}$, $\mathbf{p}^{(\beta_g)}$ e $\mathbf{g}^{(\zeta_g)}$ são os vetores de valores nodais de $u(\mathbf{x}, t_{\alpha_g})$, $p(\mathbf{x}, t_{\beta_g})$ e $\gamma(\mathbf{x}, t_{\zeta_g})$, com os instantes de tempo t_{α_g} , t_{β_g} e t_{ζ_g} dados pelas equações (2.54) e (2.55).

Considerando-se interpolação linear no tempo para as funções $u(\mathbf{x},\tau)$, $p(\mathbf{x},\tau)$ e $\gamma(\mathbf{x},\tau)$, o sistema de equações (2.83) pode ser escrito num modo mais conciso como

$$Hu^{(n)} = Gp^{(n)} + r^{(n)}$$
(2.84)

onde os superescritos de ${}^{(2)}\mathbf{H}^{(1)}$ e ${}^{(2)}\mathbf{G}^{(1)}$ foram omitidos visto que estas matrizes permanecem inalteradas ao longo de todo o processo de marcha no tempo e $\mathbf{r}^{(n)}$, que contém somente valores conhecidos dos passos de tempo atual e anteriores, é dado por

$$\mathbf{r}^{(n)} = {}^{(1)}\mathbf{G}^{(n)}\mathbf{p}^{(0)} + \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ {}^{(1)}\mathbf{G}^{(n-m)} + {}^{(2)}\mathbf{G}^{(n-m+1)} \right\} \mathbf{p}^{(m)}$$

- ${}^{(1)}\mathbf{H}^{(n)}\mathbf{u}^{(0)} + \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ {}^{(1)}\mathbf{H}^{(n-m)} + {}^{(2)}\mathbf{H}^{(n-m+1)} \right\} \mathbf{u}^{(m)}$
+ ${}^{(2)}\mathbf{G}^{(1)}\mathbf{g}^{(n)} + {}^{(1)}\mathbf{G}^{(n)}\mathbf{g}^{(0)} + \sum_{m=1}^{n-1} \left\{ {}^{(1)}\mathbf{G}^{(n-m)} + {}^{(2)}\mathbf{G}^{(n-m+1)} \right\} \mathbf{g}^{(m)} + \mathbf{b}^{(n)}$ (2.85)

Estabelecendo-se o sistema de equações (2.83) para $t_{a(m)}$, $a = 2,..,n_a$, $m = 1,..,\overline{n}$, e introduzindo-se os valores de contorno prescritos nos correspondentes instantes de tempo – através de convenientes trocas de colunas - é, portanto, possível obter-se todos os valores de contorno desconhecidos do problema para todos os instantes de tempo considerados na discretização do domínio do tempo.

Com todos os valores de contorno determinados, é possível avaliar-se as soluções aproximadas nos pontos internos ao domínio do problema Ω por meio da versão discretizada no tempo e no espaço da equação integral (2.23) que é dada por

$$\hat{\mathbf{u}}^{(n)} = \sum_{m=1}^{\bar{n}} \sum_{\beta(m)=1}^{n_{\beta}} [\beta(m)] \mathbf{G}^{(n-m+1)} \mathbf{p}^{(\beta_{g})} - \sum_{m=1}^{\bar{n}} \sum_{\alpha(m)=1}^{n_{\alpha}} [\alpha(m)] \mathbf{H}^{(n-m+1)} \mathbf{u}^{(\alpha_{g})} + \sum_{m=1}^{\bar{n}} \sum_{\zeta(m)=1}^{n_{\zeta}} [\zeta(m)] \overline{\mathbf{G}}^{(n-m+1)} \mathbf{g}^{(\zeta_{g})} + \mathbf{b}^{(n)}$$
(2.86)

onde $\hat{\mathbf{u}}^{(n)}$ é o vetor que contém os potenciais no instante t_n de todos pontos internos escolhidos $\boldsymbol{\xi}$.

2.4.4. Avaliação Numérica das Integrais Espaciais

Como visto na discussão apresentada na seção 2.4.3., os coeficientes do sistema de equações algébricas (2.83) são obtidos através de integrações de contorno e domínio sobre elementos de contorno e células de integração, respectivamente, ou seja, são obtidos avaliando-se as seguintes integrais

$$^{(\alpha)}h_{q}^{(n)}(\xi) = \int_{\Gamma_{e}}{}^{(\alpha)}P^{(n)}(\mathbf{x};\xi)h_{q}^{b}(r,s)d\Gamma(\mathbf{x}) \qquad q = 1, nn_{b}, \qquad (2.87)$$

$${}^{(\beta)}g_{q}^{(n)}(\xi) = \int_{\Gamma_{e}}{}^{(\beta)}U^{(n)}(\mathbf{x},\xi)h_{q}^{b}(\mathbf{r},s)d\Gamma(\mathbf{x}) \qquad q = 1, nn_{b}, \qquad (2.88)$$

$$^{(\zeta)}\overline{g}_{q}^{(n)}(\xi) = \int_{\Omega_{c}} {}^{(\zeta)}\overline{U}^{(n)}(\mathbf{x};\xi)h_{q}^{c}(\mathbf{r},s,t)d\Omega(\mathbf{x}) \qquad q = 1, nn_{c}.$$
(2.89)

$$b_{q}^{(n)}(\xi) = \int_{\Omega_{c}} u^{*}(\mathbf{x}, t_{n}; \xi, 0) h_{q}^{c}(r, s, t) d\Omega(\mathbf{x}) \qquad q = 1, nn_{c} \qquad (2.90)$$

Como é impossível realizar-se analiticamente tais integrações, deve-se recorrer aos procedimentos de integração numérica. Entre estes procedimentos, a quadratura de Gauss, que será usada neste trabalho, é o processo mais comumente adotado.

Na formulação padrão do método dos elementos de contorno, obtém-se 3 tipos de integrais, a saber: integrais não-singulares, fracamente singulares e fortemente singulares.

2.4.4.1. Integrais Não-singulares

Na formulação no domínio do tempo apresentada, integrais não-singulares ocorrem se para o primeiro passo de tempo o ponto fonte ξ não pertencer ao elemento (elemento de contorno ou célula) sobre o qual se integra e em todas as outras integrações espaciais a partir do segundo passo de tempo. Observa-se que a última integral de volume da equação integral de contorno é sempre não-singular. Nestes casos, a quadratura de Gauss pode ser diretamente aplicada sem nenhuma consideração particular e a convergência é obtida aumentando-se o número de pontos de integração.

De modo a melhorar a eficiência da integração numérica, é conveniente subdividir os elementos de superfície ou volume, após terem sidos mapeados no sistema de coordenadas locais r,s ou r,s,t, em subelementos de integração. Assim, tem-se as seguintes expressões gerais para a avaliação numérica das integrais não-singulares envolvidas na formulação

$$\begin{split} {}^{(\zeta)} \overline{g}_{q}^{(n)}(\xi) &= \int_{\Omega_{e}} {}^{(\zeta)} \overline{U}^{(n)}(\mathbf{x};\xi) h_{q}^{c}(\mathbf{r},\mathbf{s},t) d\Omega = \\ &\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \overline{U}^{(n)}(\mathbf{r},\mathbf{s},t) h_{q}^{c}(\mathbf{r},\mathbf{s},t) \Big| J_{\Omega}^{(e)}(\mathbf{r},\mathbf{s},t) \Big| d\mathbf{r} d\mathbf{s} dt = \\ &\sum_{i=1}^{nsc} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \overline{U}^{(n)}(\mathbf{r}',\mathbf{s}',t') h_{q}^{c}(\mathbf{r}',\mathbf{s}',t') \times \\ & \left| J_{\Omega}^{(e)}(\mathbf{r}',\mathbf{s}',t') \right\| \widetilde{J}_{\Omega}^{(i)}(\mathbf{r}',\mathbf{s}',t') \Big| d\mathbf{r}' d\mathbf{s}' dt' = \\ &\sum_{i=1}^{nsc} \sum_{i=1}^{nsc} \sum_{j=1}^{nsc} \sum_{k=1}^{nsc} \int_{-1}^{nsc} \left| \overline{U}^{(n)}(\mathbf{r}_{i}',\mathbf{s}_{j}',\mathbf{t}_{k}') h_{q}^{c}(\mathbf{r}_{i}',\mathbf{s}_{j}',\mathbf{t}_{k}') \times \\ & \left| J_{\Omega}^{(e)}(\mathbf{r}_{i}',\mathbf{s}_{j}',\mathbf{t}_{k}') \right\| \widetilde{J}_{\Omega}^{(i)}(\mathbf{r}',\mathbf{s}',t') \Big| w_{i}w_{j}w_{k} , \end{split}$$

$$\begin{split} b_{q}^{(n)}(\xi) &= \int_{\Omega_{e}} u^{*}(\mathbf{x}, t_{n}; \xi, 0) h_{q}^{c}(r, s, t) d\Omega = \\ &\int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} u^{*(n)}(r, s, t) h_{q}^{c}(r, s, t) \Big| J_{\Omega}^{(e)}(r, s, t) \Big| dr ds dt = \\ &\sum_{i=1}^{nsc} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} u^{*(n)}(r', s', t') h_{q}^{c}(r', s', t') \times \\ & \left| J_{\Omega}^{(e)}(r', s', t') \right\| \widetilde{J}_{\Omega}^{(i)}(r', s', t') \Big| dr' ds' dt' = \\ &\sum_{i=1}^{nsc} \sum_{i=1}^{ngr} \sum_{j=1}^{ngs} \sum_{k=1}^{ngt} u^{*(n)}(r_{i}', s_{j}', t_{k}') h_{q}^{c}(r_{i}', s_{j}', t_{k}') \times \\ & \left| J_{\Omega}^{(e)}(r_{i}', s_{j}', t_{k}') \right\| \widetilde{J}_{\Omega}^{(i)}(r', s', t') \Big| w_{i} w_{j} w_{k} . \end{split}$$

$$\end{split}$$

Nas expressões (2.91)-(2.94) *nse* e *nsc* indicam o número de subelementos considerados por elemento de contorno e célula, respectivamente, enquanto que *ngr*, *ngs*, *ngt* são o número de pontos de Gauss usados nas direções $r, s, t \in w_i$, w_j , w_k são os correspondentes pesos. $|\mathbf{J}_{\Gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{s})| \in |\mathbf{J}_{\Omega}(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)|$ representam os determinantes das Jacobianas das transformações de coordenadas para superfícies e volumes, respectivamente, dados por

$$\left|\mathbf{J}_{\Gamma}(\mathbf{r},\mathbf{s})\right| = \left\|\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{r}} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{s}}\right\| = \left[\left(\frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{r}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{r}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{r}}\right)^{2}\right],$$
(2.95)

$$\begin{aligned} \left| \mathbf{J}_{\Omega}(\mathbf{r},\mathbf{s},\mathbf{t}) \right| &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{s}} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{t}} \right) = \frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{t}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{t}} \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{s}} \right) + \\ \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{t}} \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{t}} \frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{s}} \right) + \frac{\partial \mathbf{x}_{3}}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{t}} - \frac{\partial \mathbf{x}_{2}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_{1}}{\partial \mathbf{t}} \right), \end{aligned}$$
(2.96)

onde as funções $x_i(r,s)$ e $x_i(r,s,t)$, i = 1,2,3, definindo, respectivamente, as geometrias do contorno e do domínio são estabelecidas nas relações (2.80) e (2.81). Mais especificamente, $\mathbf{J}_{\Gamma}^{(e)}$ está relacionado ao *e-ésimo* elemento de contorno, $\mathbf{J}_{\Omega}^{(e)}$ à *e-ésima* célula e $\mathbf{J}_{\Gamma}^{(e)}$ e $\mathbf{J}_{\Omega}^{(e)}$ aos respectivos subelementos de integração.



Figura 2.6: Mapeamento de elemento de contorno com subelementos de integração.

Embora a figura 2.6 ilustre somente o mapeamento referente ao elemento de contorno de 8 nós, não há dificuldades adicionais para extendê-lo a outros elementos de contorno e para as células de integração, conforme será visto na seção 2.4.4.3, onde apresentam-se os mapeamentos necessários à avaliação das integrais singulares.

2.4.4.2. Integrais Singulares

Na formulação direta do método dos elementos de contorno podem ocorrer tanto núcleos fracamente singulares quanto fortemente singulares. Da análise dos núcleos fundamentais integrados no domínio do tempo, vê-se que as integrais singulares aparecem somente no primeiro passo de tempo. Para avaliar estas integrais impróprias pode-se proceder conforme exposto a seguir para elementos de contorno. O procedimento relativo às células de integração é similar.

O ponto singular $\boldsymbol{\xi}$ é excluído das integrais de contorno excluindo-se *n* superfícies infinitesimais na sua vizinhança por meio da interseção de superfícies de elemento de contorno com esferas de raios ε_i centradas em $\boldsymbol{\xi}$, *i* sendo o número do elemento (*i* = 1,2,...*n*), e *n* o número de elementos na vizinhança de $\boldsymbol{\xi}$ (ver figura 2.7).



Figura 2.7: Vizinhança de um ponto singular ξ em uma superfície Γ .

Seja $f(\mathbf{x})$, definida no domínio D, uma função singular em $\mathbf{x} = \boldsymbol{\xi}, \, \boldsymbol{\xi} \in D$. As integrais impróprias podem ser avaliadas conforme mostrado abaixo

$$\int_{D} f(\mathbf{x}) dD = \sum_{i=1}^{n} \lim_{\epsilon_{i} \to 0} \int_{D_{i} - D_{\epsilon_{i}}} f(\mathbf{x}) dD$$
(2.97)

onde D_i é o *i-ésimo* elemento do domínio na vizinhança de ξ .

Quando a integral indicada pela equação (2.97) é fracamente singular (Tanaka *et al.*, 1994), cada limite indicado nesta existe, e diz-se que a integral imprópria existe no sentido ordinário. Por outro lado, quando a solução desta integral pode ser obtida somente se $\varepsilon^1 = \varepsilon^2 = \dots = \varepsilon^n$, diz-se que tal integral existe somente no sentido do valor principal de Cauchy; este é o caso das integrais fortemente singulares. Se o integrando é fracamente singular, o cálculo do valor principal de Cauchy da integral será idêntico ao cálculo desta integral no sentido de Riemann (sentido ordinário).

Em análises tridimensionais, os núcleos fracamente singulares são de ordem $O(r^{-s})$, sendo *s* menor que 2 para integrais de contorno e menor que 3 para integrais de domínio (Hackbusch, 1989). Na formulação estudada aqui, as integrais espaciais dos núcleos integrados no tempo ${}^{(\beta)}U^{(n)}$ em Γ e ${}^{(\varsigma)}\overline{U}^{(n)}$ em Ω mostradas na equação (2.49) são fracamente singulares. Portanto, estas são convergentes no sentido ordinário e a quadratura padrão de Gauss pode ser aplicada diretamente para avaliá-las. Entretanto, como os integrandos são singulares, a eficiência pode ser bastante melhorada se procedimentos especiais de integração são usados (Telles, 1987; Mang *et al.*, 1985).

Para problemas estacionários de potencial, um meio de se evitar a avaliação direta das integrais de contorno relacionadas ao núcleo fortemente singular e do termo livre da integral é aplicando-se o critério de potencial constante, que baseia-se no fato físico que, na ausência de forças de volume, para uma distribuição constante de potencial em $\Omega \cup \Gamma$, os fluxos correspondentes em Γ são identicamente nulos. Assim segue-se que

$${}^{st} \mathbf{c}(\xi) + {}^{st} \mathbf{h}_{\xi\xi} = \begin{cases} -\sum_{\substack{k=1\\k\neq\xi}}^{N} {}^{st} \mathbf{h}_{\xi k} & \text{para regiões finitas} \\ 1 - \sum_{\substack{k=1\\k\neq\xi}}^{N} {}^{st} \mathbf{h}_{\xi k} & \text{para regiões infinitas} \end{cases}$$
(2.98)

sendo todos os coeficientes ${}^{st}h_{\xi k}$ no lado direito da equação (2.98) obtidos de integrais não-singulares. Assim a soma do termo livre ${}^{st}c(\xi)$ e o termo ${}^{st}h_{\xi\xi}$ pode ser facilmente determinada.

No entanto, o critério de potencial constante não pode ser aplicado diretamente na formulação transiente do método dos elementos de contorno desenvolvida aqui para difusão. De modo a tornar possível a avaliação implícita da soma ^{dif} $c(\xi) + h_{\xi\xi}$, onde ^{dif} $c(\xi)$ representa o termo livre da equação integral de contorno para problemas de difusão, devem-se observar as seguintes considerações: primeira, ^{dif} $c(\xi) = {}^{st} c(\xi) = c(\xi)$ [ver equação (2.34)]; segunda, pode-se demonstrar, sem dificuldades, que o núcleo ${}^{(n_{\alpha})}P^{(1)}(\mathbf{x};\xi)$ tende para ${}^{st}p^{*}(\mathbf{x};\xi)$, quando $\mathbf{x} \rightarrow \boldsymbol{\xi}$. Baseado nestas considerações, os elementos da diagonal principal de ${}^{(n_{\alpha})}\mathbf{H}^{(1)}$, para difusão tridimensional, juntamente com o respectivo termo livre da integral $c(\boldsymbol{\xi})$, podem ser regularizados conforme mostrado a seguir

$$c(\xi) + {}^{(n_{\alpha})} h_{\xi\xi}^{(1)} = c(\xi) + {}^{st} h_{\xi\xi} + \sum_{e=1}^{nse(\xi)} \int_{\Gamma_e} \left[{}^{(n_{\alpha})} P^{(1)}(\mathbf{x};\xi) - {}^{st} p^*(\mathbf{x};\xi) \right] h_q^b(r,s) d\Gamma(\mathbf{x})$$
(2.99)

sendo $nse(\boldsymbol{\xi})$ igual ao número de elementos singulares ao redor de $\boldsymbol{\xi}$. Como pode-se ver da equação (2.99), os coeficientes de ${}^{(n_{\alpha})}\mathbf{H}^{(1)}$ são obtidos através da soma de coeficientes determinados de modo implícito para problemas estacionários e da avaliação de integrais não-singulares.

2.4.4.3. Procedimentos Especiais de Integração

Nesta seção descrever-se-á um eficiente método para a avaliação de integrais singulares, tanto de contorno quanto de domínio, que surgem na formulação direta do método dos elementos de contorno. Este procedimento baseia-se no uso de coordenadas polares triangulares e tetraédricas para a avaliação de integrais de contorno e de domínio, respectivamente, e o seu emprego resulta no aumento da concentração de pontos de integração em torno do ponto singular.

O método, originalmente desenvolvido para a avaliação de integrais singulares de contorno, foi subsequentemente expandido à avaliação de integrais singulares sobre células tridimensionais. Para este propósito foram introduzidas as coordenadas polares tetraédricas que representam a extensão lógica das coordenadas polares triangulares à terceira dimensão.

2.4.4.3.1. Coordenadas Polares Triangulares

As coordenadas polares triangulares podem ser descritas apresentando-se o mapeamento de um triângulo plano *D* contornado por linhas retas em um quadrado *D'* de lado unitário (figura 2.8). O triângulo representa um elemento de contorno referenciado ao espaço cartesiano global. Os pontos $P_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)})$, $P_2(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)})$ e $P_3(x_1^{(3)}, x_2^{(3)}, x_3^{(3)})$ são os vértices de *D*. P_1 é admitido ser o ponto singular. O quadrado de lado unitário está associado a um espaço bidimensional local. Os pontos $P_1'(\rho_1 = 0, \rho_2 = 0)$, $P_2'(\rho_1 = 1, \rho_2 = 0)$, $P_3'(\rho_1 = 1, \rho_2 = 1)$ e $P_4'(\rho_1 = 0, \rho_2 = 1)$ são os vértices de *D'*.

O mapeamento mostrado na figura 2.8 é dado por

$$\mathbf{x}_{i} = (1 - \rho_{1})\mathbf{x}_{i}^{(1)} + \rho_{1}(1 - \rho_{2})\mathbf{x}_{i}^{(2)} + \rho_{1}\rho_{2}\mathbf{x}_{i}^{(3)} , \quad i = 1, 2, 3$$
(2.100)

onde x_i , i = 1,2,3 são as coordenadas cartesianas ortogonais e $\rho_1 e \rho_2$ são as coordenadas polares triangulares. As relações entre $\rho_1 e \rho_2$ e as coordenadas triangulares $L_1, L_2, L_3, 0 \le L_1, L_2, L_3 \le 1, L_1 + L_2 + L_3 = 1$ são

$$L_1 = (1 - \rho_1), \quad L_2 = \rho_1 (1 - \rho_2), \quad L_3 = \rho_1 \rho_2$$
 (2.101)

Da igualdade (2.100) segue-se que o vértice P₁ de *D* corresponde ao lado $\overline{P'_4P'_1}$ de *D'* e que os lados $\overline{P_1P_2}$, $\overline{P_2P_3}$ e $\overline{P_3P_1}$ de *D* correspondem as lados $\overline{P'_1P'_2}$, $\overline{P'_2P'_3}$ e $\overline{P'_3P'_4}$, respectivamente, de *D'*.



Figura 2.8: Triângulo D mapeado num quadrado de lado unitário D'

Apresentar-se-á, a seguir, o procedimento para a avaliação de integrais singulares empregando-se apenas elementos de contorno isoparamétricos quadrilaterais quadráticos, visto que foram estes os elementos usados na grande maioria de análises durante a realização deste trabalho. A figura 2.9 ilustra este procedimento que é caracterizado por uma sequência de mapeamentos de coordenadas com o objetivo de reduzir a ordem de singularidade das integrais e a realização da integração numérica padrão sobre um quadrado de lado 2, tal que alguns dos pontos de integração representem o mapeamento de um conjunto compacto de pontos na vizinhança do ponto singular no domínio original.



(2.9.a) Mapeamento de Γ^e em $\Gamma^{e'}$.



(2.9.b) Subdivisão de $\Gamma^{e'}$ dependendo da localização do ponto singular.



(2.9.c) Mapeamento de $\Gamma^{e'}$ em $\Gamma^{e''}$ e de $\Gamma^{e''}$ em $\Gamma^{e'''}$.

Figura 2.9: Sequência de mapeamento de coordenadas - Elementos de contorno.

Primeiro, o elemento curvo *e* representando a parte Γ^e da superfície Γ do corpo considerado, é mapeado em um quadrado $\Gamma^{e'}$ de lado 2 como mostrado na figura 2.9.a. Enquanto Γ^e está associado ao espaço cartesiano tridimensional global, $\Gamma^{e'}$ está associado a uma espaço cartesiano bidimensional local, caracterizado pelas coordenadas $\xi_1 \in \xi_2$. As funções de forma do mapeamento mencionado podem ser escritas como:

$$h_{q} = \frac{1}{4} \left(1 + \xi_{1}^{(q)} \xi_{1} \right) \left(1 + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} \right) \left(\xi_{1}^{(q)} \xi_{1} + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} - 1 \right) \quad q = 1, 3, 5, 7$$

$$h_{q} = \frac{1}{2} \left(1 + \xi_{1}^{(q)} \xi_{1} + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} \right) \left[1 - \left(\xi_{1}^{(q)} \right)^{2} \xi_{2}^{2} - \left(\xi_{2}^{(q)} \right)^{2} \xi_{1}^{2} \right] \quad q = 2, 4, 6, 8$$
(2.102)

sendo h_q as funções de forma com $\xi_1^{(q)}$ e $\xi_2^{(q)}$ representando as coordenadas do ponto nodal P'_q .

O segundo passo do procedimento consiste em uma subdivisão de $\Gamma^{e'}$ em dois ou três subelementos triangulares $\Gamma_g^{e'}$, dependendo se o ponto singular, designado localmente como ponto 1, é nó de canto ou nó de meio (figura 2.9.b). O terceiro passo é caracterizado pelo mapeamento de cada um dos subelementos em um quadrado de lado unitário, empregando-se as coordenadas polares triangulares, previamente introduzidas. A figura 2.9.c ilustra o mapeamento do subelemento $\Gamma_1^{e'}$ da parte esquerda da figura 2.9.b em $\Gamma_1^{e''}$ e, subsequentemente, o mapeamento de $\Gamma_1^{e''}$ em $\Gamma_1^{e''}$. O último mapeamento representa uma transformação linear com o objetivo de realizar a integração numérica em um modo padrão. Analogamente, todos os outros subdomínios $\Gamma_g^{e'}$ devem ser mapeados em quadrados de lado unitário $\Gamma_g^{e''}$ que, por sua vez, devem ser mapeados em quadrados $\Gamma_g^{e'''}$.

2.4.4.3.2. Coordenadas Polares Tetraédricas

As coordenadas polares tetraédricas podem ser descritas apresentando-se o mapeamento de um tetraedro *F*, contornado por superfícies planas, em um cubo *F*['] de aresta unitária (figura 2.10). O tetraedro representa uma célula referenciada ao espaço cartesiano global. Os pontos $P_1(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)})$, ..., $P_4(x_1^{(4)}, x_2^{(4)}, x_3^{(4)})$ são os vértices de *F*. P_1 é admitido ser o ponto singular. O cubo de aresta unitária está associado a um espaço tridimensional local. Os pontos $P_1'(\rho_1 = 0, \rho_2 = 0, \rho_3 = 0)$, ..., $P_8'(\rho_1 = 0, \rho_2 = 1, \rho_3 = 1)$ são os vértices de *F*'.



Figura 2.10: Tetraedro F mapeado num cubo de aresta unitária F'.

O mapeamento mostrado na figura 2.10 é dado por

$$\mathbf{x}_{i} = (1 - \rho_{1})\mathbf{x}_{i}^{(1)} + \rho_{1}(1 - \rho_{2})\mathbf{x}_{i}^{(2)} + \rho_{1}\rho_{2}(1 - \rho_{3})\mathbf{x}_{i}^{(3)} + \rho_{1}\rho_{2}\rho_{3}\mathbf{x}_{i}^{(4)} , \quad i = 1, 2, 3$$
(2.103)

onde x_i , i = 1,2,3 são as coordenadas cartesianas ortogonais e ρ_1 , ρ_2 e ρ_3 são as coordenadas polares tetraédricas. As relações entre ρ_1 , ρ_2 e ρ_3 e as coordenadas tetraédricas L_1, L_2, L_3, L_4 , $0 \le L_1, L_2, L_3, L_4 \le 1$, $L_1 + L_2 + L_3 + L_4 = 1$ são

$$L_{1} = (1 - \rho_{1}), \quad L_{2} = \rho_{1}(1 - \rho_{2}), \quad L_{3} = \rho_{1}\rho_{2}(1 - \rho_{3}), \quad L_{4} = \rho_{1}\rho_{2}\rho_{3}$$
(2.104)

Da igualdade (2.103) segue-se que o vértice P_1 e o lado $\overline{P_1P_2}$ de *F* correspondem às superfícies $\overline{P'_1P'_4P'_8P'_5}$ e $\overline{P'_1P'_5P'_6P'_2}$, respectivamente, de *F'* e que as superfícies $\overline{P_1P_2P_3}$, $\overline{P_4P_1P_2}$, $\overline{P_3P_4P_1}$ e $\overline{P_2P_3P_4}$ de *F* correspondem às superfícies $\overline{P'_1P'_2P'_3P'_4}$, $\overline{P'_5P'_6P'_7P'_8}$, $\overline{P'_3P'_4P'_8P'_7}$ e $\overline{P'_2P'_3P'_7P'_6}$, respectivamente, de *F'*.

Apresentar-se-á, a seguir, o procedimento para a avaliação de integrais singulares empregando-se apenas células hexaédricas quadráticas, visto que são estas as células usadas na grande maioria de análises deste trabalho. A figura 2.11 ilustra este procedimento que é caracterizado por uma sequência de mapeamentos de coordenadas com o objetivo de reduzir a ordem de singularidade das integrais e a realização da integração numérica padrão sobre um cubo de aresta 2, tal que alguns dos pontos de integração representem o mapeamento de um conjunto compacto de pontos na vizinhança do ponto singular no domínio original.

Primeiro, a célula *f*, representando a parte Ω^{f} do interior Ω do corpo considerado, é mapeada em um cubo $\Omega^{f'}$ de aresta 2 como mostrado na figura 2.11.a. Enquanto Ω^{f} está associado ao espaço cartesiano tridimensional global, $\Omega^{f'}$ está associado a um espaço cartesiano tridimensional local, caracterizado pelas coordenadas ξ_1 , ξ_2 e ξ_3 . As funções de forma do mapeamento mencionado podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} h_{q} &= 1/8 \left(1 + \xi_{1}^{(q)} \xi_{1} \right) \left(1 + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} \right) \left(1 + \xi_{3}^{(q)} \xi_{3} \right) \left(\xi_{1}^{(q)} \xi_{1} + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} + \xi_{3}^{(q)} \xi_{3} - 2 \right) \\ & \text{para } q = \text{nós de canto.} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_{q} &= 1/4 \left(1 + \xi_{1}^{(q)} \xi_{1} \right) \left(1 + \xi_{2}^{(q)} \xi_{2} \right) \left(1 + \xi_{3}^{(q)} \xi_{3} \right) \left(1 + \xi_{3}^{(q)} \xi_{3} \right) \left(1 + \left(\xi_{1}^{(q)} \right)^{2} - 1 \right) \xi_{1}^{2} \\ &+ \left[\left(\xi_{2}^{(q)} \right)^{2} - 1 \right] \xi_{2}^{2} + \left[\left(\xi_{3}^{(q)} \right)^{2} - 1 \right] \xi_{3}^{2} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{para } q = \text{nós de meio.} \end{aligned}$$

$$(2.106)$$

O segundo passo deste procedimento consiste em duas partes. A primeira parte é caracterizada pela subdivisão de $\Omega^{f'}$ em dois ou três prismas triangulares $\Omega_c^{f'}$, dependendo se o ponto singular, designado localmente como ponto 1, é coincidente com

um nó de canto ou nó de meio (figura 2.11.b₁). A segunda parte deste passo consiste na subdivisão de cada um dos prismas triangulares em três subcélulas tetraédricas. A figura 2.11.b₂ ilustra a subdivisão do prisma triangular $\Omega_1^{f'}$ da parte esquerda da figura 2.11.b₁ nas subcélulas tetraédricas $\Omega_{1g}^{f'}$, g=1,2,3. O terceiro passo é caracterizado pelo mapeamento de cada uma das subcélulas em um cubo de aresta unitária, empregando-se as coordenadas polares tetraédricas. A figura 2.11.c ilustra o mapeamento da subcélula $\Omega_{11}^{f'}$ da figura 2.11.b₂ em $\Omega_{11}^{f'}$ e, subsequentemente, o mapeamento de $\Omega_{11}^{f''}$ em $\Omega_{11}^{f''}$. O último mapeamento representa uma transformação linear com o objetivo de realizar a integração numérica em um modo padrão. Analogamente, todos os outros subdomínios $\Omega_{cg}^{f'}$ devem ser mapeados em cubos de aresta unitária $\Omega_{cg}^{f''}$ que, por sua vez, devem ser mapeados em cubos $\Omega_{cg}^{f'''}$.



(2.11.a) Mapeamento de Ω^{f} em $\Omega^{f'}$.



 $(2.11.b_1)$ Subdivisão de $\Omega^{f'}$ dependendo da localização do ponto singular.



(2.11.b₂) Subdivisão do prisma triangular $\Omega_1^{f^\prime}$ em três tetraedros.



(2.11.c) Mapeamento de $\Omega_{11}^{f'}$ em $\Omega_{11}^{f'}$ e de $\Omega_{11}^{f'}$ em $\Omega_{11}^{f''}$.

Figura 2.11: Sequência de mapeamento de coordenadas – Células internas.

Capítulo 3

Problemas Acústicos no Domínio do Tempo

3.1. Introdução

O som resulta-se da propagação de perturbações de pressão num meio fluido compressível quando as partículas deste fluido, por meio de considerável aumento (ou diminuição) de densidade em certas regiões, começam a mover-se repentinamente. As colisões entre as moléculas devidas aos fluxos de fluido de regiões de alta pressão para regiões de baixa pressão geram as ondas sonoras que, dependendo da pressão e dos correspondentes níveis de intensidade atingidos, podem produzir desde um simples desconforto a até mesmo sensação de dor para o ouvido humano. Embora a sensação de som seja o fenômeno acústico mais familiar, ele não é o único. O som consiste em perturbações detectadas pelo sistema auditivo dos seres humanos e outros animais, que, por exemplo, para uma pessoa jovem corresponde a perturbações cujas frequências variam entre 20 e 20.000 Hz. No entanto, ondas de vibração envolvendo frequências infrasônicas e ultrasônicas ao ouvido humano, ou seja, abaixo de 20Hz e acima de 20.000Hz, respectivamente, estão também relacionadas à acústica.

Como pode-se ver, acústica é um tópico de mecânica dos fluidos e, para salientar algumas situações nas quais a investigação das ondas acústicas é importante, podem ser citados o estudo de barreiras ao longo de estradas em áreas urbanas e em aeroportos, o controle da poluição sonora em instalações industriais e o *design* de veículos, entre outros igualmente interessantes.

Neste capítulo será apresentada a formulação padrão do Método dos Elementos de Contorno aplicada a problemas de acústica no domínio do tempo.

3.2. Equações Básicas

A propagação de ondas acústicas de pequena amplitude através de um meio homogêneo é descrita pela equação de onda escalar

$$\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x},t) - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) = -\gamma(\mathbf{x},t) , \qquad \mathbf{x} \in \Omega , \qquad (3.1)$$

submetida a condições de contorno e iniciais. Na equação (3.1), *c* representa a velocidade de propagação, *t* indica o tempo, *x* denota um ponto com coordenadas cartesianas x_i (i = 1,2,3) e $\gamma(\mathbf{x},t)$ descreve a densidade da fonte considerada na análise. O termo $\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t)$ indica derivada segunda no tempo, isto é, $\ddot{\mathbf{u}} = \partial^2 \mathbf{u}/\partial t^2$ e ∇^2 é o operador Laplace.

O problema acústico pode ser descrito em termos de potencial de velocidade $\varphi(\mathbf{x}, t)$ ou excesso de pressão acústica $p(\mathbf{x}, t)$. Em ambas as descrições interessa-se encontrar uma solução particular que satisfaça a equação de onda escalar em $\Omega \times t$, onde t representa o intervalo de tempo, ou seja, $t \in [0,\infty)$.

3.2.1. Descrição em Termos de Potencial de Velocidade

A equação de equilíbrio é escrita como

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c^2} \ddot{\varphi}(\mathbf{x}, t) = -\gamma(\mathbf{x}, t) , \qquad (3.2)$$

sendo possível os seguintes tipos de condições de contorno

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \overline{\varphi}(\mathbf{x}, t) \text{ em } \Gamma_1$$
 (condição de Dirichlet), (3.3a)

$$q(\mathbf{x},t) = \frac{\partial \phi(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{n}} = \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \overline{v}_n(\mathbf{x},t) \text{ em } \Gamma_2 \qquad \text{(condição de Neumann),} \qquad (3.3b)$$

$$\alpha \varphi(\mathbf{x}, t) + \beta q(\mathbf{x}, t) = \gamma(\mathbf{x}, t) \text{ em } \Gamma_3$$
 (condição de Robin). (3.3c)

Condições de contorno do tipo (3.3a) e (3.3b) ocorrem se pressões e componentes normais de velocidades, respectivamente, são conhecidas em algumas partes de Γ , enquanto que condições do tipo (3.3c), onde $\alpha(\mathbf{x})$, $\beta(\mathbf{x}) \in \gamma(\mathbf{x})$ são funções conhecidas, representam condições mistas. As condições iniciais para tais problemas são dadas por

$$\varphi(\mathbf{x},0) = \overline{\varphi}_0(\mathbf{x}) \text{ em } \Omega , \qquad (3.4a)$$

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x},0)}{\partial t} = \overline{\dot{\varphi}}_0(\mathbf{x}) \text{ em } \Omega .$$
(3.4b)

e a função $\gamma(\mathbf{x},t)$ pode ser calculada como mostrado abaixo

$$\gamma(\mathbf{x},t) = -\frac{\mathbf{h}(\mathbf{x},t)}{\rho_0} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \psi_k(\mathbf{x},t)}{\partial t}, \qquad (3.5)$$

onde ρ_0 é a densidade da região não perturbada (antes da chegada da onda), ψ é uma função potencial tal que $b_i = \psi_{,i}$ (b_i representa as forças de volume) e h(\mathbf{x} ,t) é a taxa por unidade de massa de volume injetado na região que define o domínio do problema.

3.2.2. Descrição em Termos de Excesso de Pressão

Neste caso, a equação de equilíbrio é dada por

$$\nabla^2 \mathbf{p}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = -\gamma(\mathbf{x}, t), \qquad (3.6)$$

sendo possível as seguintes condições de contorno

$$p(\mathbf{x},t) = \overline{p}(\mathbf{x},t) \text{ em } \Gamma_1$$
 (condição de Dirichlet), (3.7a)

$$q(\mathbf{x},t) = \frac{\partial p(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{n}} = \nabla p \cdot \mathbf{n} = p_i n_i \text{ em } \Gamma_2 \qquad (\text{condição de Neumann}), \qquad (3.7b)$$

$$q(\mathbf{x},t) = -g(\mathbf{x})\frac{\partial p(\mathbf{x},t)}{\partial t} \text{ em } \Gamma_3 \qquad (\text{condição de Robin}), \qquad (3.7c)$$

onde g(x) é a função admitância, que é estabelecida em termos do correspondente fator de reflexão. As condições iniciais a serem consideradas são

$$p(\mathbf{x},0) = \overline{p}_0(\mathbf{x}) \text{ em } \Omega , \qquad (3.8a)$$

$$\frac{\partial p(\mathbf{x},0)}{\partial t} = \overline{\dot{p}}_0(\mathbf{x}) \text{ em } \Omega.$$
(3.8b)

Na presente formulação, a função que descreve a densidade da fonte $\gamma(\mathbf{x},t)$ é dada por

$$\gamma(\mathbf{x},t) = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} - \rho_0 \mathbf{b}_{i,i} \,. \tag{3.9}$$

3.3. Representação Integral no Domínio do Tempo

O problema de potencial representado pela equação diferencial (3.1) pode também ser representado através de uma equação integral de contorno, a qual é obtida empregandose a relação de reciprocidade entre dois estados acústicos em $\Omega \ge t$.

3.3.1. Relação de Reciprocidade

O procedimento que será seguido para a obtenção da representação integral referente à acústica linear no domínio do tempo é válido para ambos os casos de descrição do problema, ou seja, descrição em termos de potencial de velocidade e em termos de excesso de pressão. A notação indicada na equação (3.1) será seguida, isto é, tanto excesso de pressão quanto potencial de velocidade serão substituídos pela função potencial u(**x**,t) e sua derivada com relação à normal $\partial u(\mathbf{x},t)/\partial \mathbf{n}$ será representada por p(**x**,t).

A relação de reciprocidade, relativa à equação de onda escalar, entre dois diferentes estados acústicos $S = [u, p, \gamma]$ e $S' = [u', p', \gamma']$, com condições iniciais $u_0(\mathbf{x})$, $v_0(\mathbf{x})$ e $u'_0(\mathbf{x})$, $v'_0(\mathbf{x})$, respectivamente, pode ser obtida empregando-se o mesmo procedimento adotado na seção 2.3.1. Portanto, a relação desejada é dada por

$$\begin{split} &\int_{\Gamma} [\mathbf{u}' * \mathbf{p}](\mathbf{x}, t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [\mathbf{u}' * \gamma](\mathbf{x}, t) d\Omega(\mathbf{x}) + \\ &\mathbf{c}^{-2} \int_{\Omega} [\dot{\mathbf{u}}'(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_{0}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_{0}(\mathbf{x})] d\Omega(\mathbf{x}) = \\ &\int_{\Gamma} [\mathbf{u} * \mathbf{p}'](\mathbf{x}, t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [\mathbf{u} * \gamma'](\mathbf{x}, t) d\Omega(\mathbf{x}) + \\ &\mathbf{c}^{-2} \int_{\Omega} [\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}_{0}'(\mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_{0}'(\mathbf{x})] d\Omega(\mathbf{x}). \end{split}$$
(3.10)

3.3.2. Soluções Fundamentais

A solução geral da equação diferencial não-homogênea (3.1) em um meio infinito pode ser encontrada através de diferentes procedimentos (Courant e Hilbert, 1968). Sob consideração de condições iniciais homogêneas, isto é, $u(\mathbf{x},0)=\partial u(\mathbf{x},0)/\partial t=0$, tal solução geral é dada por

$$u(\mathbf{y},t) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{1}{R} \gamma \left(\mathbf{x}, t - \frac{R}{c} \right) d\Omega(\mathbf{x}), \qquad (3.11)$$

onde R = $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|$. A equação (3.11) mostra que o valor de u(\mathbf{y} ,t) no tempo atual é dado através de uma integral de domínio da função $\gamma(\mathbf{x}$,t_r) no tempo retardado t_r = t - R / c.

Com o auxílio da equação (3.11) pode-se determinar a solução fundamental para problemas acústicos $u^*(\mathbf{y}, t; \xi, \tau)$ que corresponde à solução da equação (3.1) em um meio infinito para uma função $\gamma(\mathbf{x}, t)$ dada por

$$\gamma(\mathbf{x},t) = \delta(t-\tau)\delta(\mathbf{x}-\xi). \tag{3.12}$$

Levando-se a equação (3.12) em (3.11), tem-se que

$$\mathbf{u}^{*}(\mathbf{y},\mathbf{t};\boldsymbol{\xi},\tau) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \delta\left(\mathbf{t} - \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{c} - \tau\right) \delta(\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi}) d\Omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi r} \delta\left(\mathbf{t} - \frac{\mathbf{r}}{c} - \tau\right), \quad (3.13)$$

onde $r = |y - \xi|$.

Derivando-se a equação do potencial fundamental em relação à direção definida pelo vetor normal unitário externo à superfície Γ no ponto de campo y, obtém-se a expressão para o fluxo fundamental p^{*}(y,t; ξ , τ), dada por

$$p^{*}(\mathbf{y}, \mathbf{t}; \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\tau}) = \frac{\partial u^{*}(\mathbf{y}, \mathbf{t}; \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\tau})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial u^{*}}{\partial y_{i}} n_{i} = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial y_{i}} \left[\frac{1}{r} \delta \left(\mathbf{t} - \frac{\mathbf{r}}{c} - \boldsymbol{\tau} \right) \right] n_{i} = -\frac{1}{4\pi r^{2}} \left[\delta \left(\mathbf{t} - \frac{\mathbf{r}}{c} - \boldsymbol{\tau} \right) + \frac{\mathbf{r}}{c} \dot{\delta} \left(\mathbf{t} - \frac{\mathbf{r}}{c} - \boldsymbol{\tau} \right) \right] \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{n}}.$$

$$(3.14)$$

A solução fundamental dada pela equação (3.13) que representa a resposta em um instante de tempo *t* num certo ponto de campo *y* de um meio infinito devida a um impulso localizado no ponto fonte ξ , em um certo instante τ , apresenta as seguintes propriedades

(*i*) translação no tempo
(*i*) translação no tempo
(*ii*) causalidade
(*ii*) reciprocidade

$$u^{*}(\mathbf{y}, t; \xi, \tau) = 0 \text{ se } c(t - \tau) < |\mathbf{y} - \xi|,$$

 $u^{*}(\mathbf{y}, t; \xi, \tau) = 0 \text{ se } c(t - \tau) < |\mathbf{y} - \xi|,$
 $u^{*}(\mathbf{y}, t; \xi, \tau) = u^{*}(\xi, -\tau; \mathbf{y}, -t).$

Deve-se observar que as propriedades (*i*), (*ii*) e (*iii*) também são válidas para o fluxo fundamental $p^*(y,t;\xi,\tau)$. Outro ponto importante na formulação da representação integral de contorno e na formulação dos algoritmos numéricos relacionados à acústica é o comportamento singular apresentado pelas soluções fundamentais, no ponto ξ , sendo a ordem das singularidades de u^{*} e p^{*} iguais a r⁻¹ e r⁻², respectivamente. Assim, integrais singulares serão originadas na obtenção da representação integral de contorno.

3.3.3. Representação Integral de Contorno

Obtém-se a representação integral de problemas acústicos a partir da equação de reciprocidade (3.10), considerando-se o estado S' como sendo um estado no qual $\gamma = \delta(t)\delta(\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi})$, em um domínio infinito com condições iniciais homogêneas. Assim, tem-se

$$u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) = \frac{1}{4\pi r} \delta\left(t - \frac{r}{c}\right),$$
 (3.15)

$$p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, 0) = -\frac{1}{4\pi r^{2}} \left\{ \delta \left(t - \frac{r}{c} \right) + \frac{r}{c} \dot{\delta} \left(t - \frac{r}{c} \right) \right\} \frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}}.$$
(3.16)

Observando-se a propriedade da função delta de Dirac dada pela equação (2.19), tem-se que a primeira integral de domínio que aparece no membro do lado direito da relação de reciprocidade (3.10) é dada pela equação (2.20).

Levando-se em consideração as equações (3.15), (3.16) e (2.20), a relação de reciprocidade apresentada torna-se a representação integral de problemas acústicos, ou seja,

$$u(\xi,t) + \int_{\Gamma} [u * p^{*}](\mathbf{x},t) d\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} [u^{*} * p](\mathbf{x},t) d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} [u^{*} * \gamma](\mathbf{x},t) d\Omega(\mathbf{x}) + c^{-2} \int_{\Omega} [\dot{u}^{*}(\mathbf{x},t)u_{0}(\mathbf{x}) + u^{*}(\mathbf{x},t)v_{0}(\mathbf{x})] d\Omega(\mathbf{x})$$
(3.17)

que pode ser escrita numa forma mais conveniente explicitando-se as integrais de convolução de Riemann e aplicando-se a propriedade de translação no tempo das soluções fundamentais. Assim, tem-se que

$$u(\xi,t) + \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) u(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$\int_{\Gamma} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) p(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) \gamma(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) +$$

$$c^{-2} \int_{\Omega} \{ v_{0}(\mathbf{x}) u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) + u_{0}(\mathbf{x}) \dot{u}^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) \} d\Omega(\mathbf{x}).$$
(3.18)

Nas operações realizadas para obter-se a equação (3.18), a função $u(\mathbf{x},\tau)$ foi admitida ser duas vezes diferenciável com relação ao tempo e às coordenadas espaciais.

Devido ao comportamento singular das soluções fundamentais, para a obtenção da equação integral de contorno de problemas acústicos, que corresponde à equação (3.18) aplicada a pontos $\xi \in \Gamma$, faz-se necessário excluir o ponto singular do caminho de integração pela definição de uma casca esférica de raio ε centrada em ξ (ver figura 2.2) e aplicar o limite para $\varepsilon \rightarrow 0$. Procedendo-se assim, tem-se

$$\begin{aligned} u(\xi,t) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) u(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \\ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma_{\varepsilon}}} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) p(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Omega - \Omega_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau) \gamma(\mathbf{x},\tau) d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + (3.19) \\ c^{-2} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Omega - \Omega_{\varepsilon}} \{v_{0}(\mathbf{x})u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) + u_{0}(\mathbf{x})\dot{u}^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0)\} d\Omega(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Considerando-se a forte singularidade do núcleo fundamental $p^*(\mathbf{x}, t; \xi, \tau)$, o conceito de valor principal de Cauchy e a continuidade do campo escalar $u(\mathbf{x}, t)$ no ponto $\boldsymbol{\xi}$ (ver seção 2.3.3), o primeiro limite da equação (3.19) é dado por

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$V.P. \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}).$$
(3.20)

Fazendo-se a substituição da equação do fluxo fundamental no limite do membro do lado direito da equação (3.20) e observando-se que $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{n}} = 1$ e que ε é uma constante independente de Γ e τ , tem-se que

$$L = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon^{2}} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} \left[\delta \left(t - \frac{\varepsilon}{c} - \tau \right) + \frac{\varepsilon}{c} \dot{\delta} \left(t - \frac{\varepsilon}{c} - \tau \right) \right] u(\xi, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}).$$
(3.21)

Há dois tipos de integração temporal em (3.21), a saber

(i) Primeiro tipo de integração

$$I_{1} = \int_{0}^{t} \delta \left(t - \frac{\varepsilon}{c} - \tau \right) \mu(\xi, \tau) d\tau = u \left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c} \right).$$
(3.22)

(ii) Segundo tipo de integração

$$I_{2} = \int_{0}^{t} \dot{\delta} \left(t - \frac{\varepsilon}{c} - \tau \right) u(\xi, \tau) d\tau = -\int_{0}^{t} \frac{\partial}{\partial \tau} \delta \left(t - \frac{\varepsilon}{c} - \tau \right) u(\xi, \tau) d\tau = \dot{u} \left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c} \right)$$
(3.23)

Levando-se as equações (3.22) e (3.23) em (3.21) e usando-se coordenadas esféricas, obtém-se

$$L = -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon^{2}} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{\varepsilon} \left\{ u\left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c}\right) + \frac{\varepsilon}{c} \dot{u}\left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c}\right) \right\} \varepsilon^{2} \sin\varphi d\varphi d\theta = -\frac{1}{4\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\theta} \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ u\left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c}\right) + \frac{\varepsilon}{c} \dot{u}\left(\xi, t - \frac{\varepsilon}{c}\right) \right\} \sin\varphi d\varphi d\theta = -\frac{1}{4\pi} \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\theta} \sin\varphi d\varphi d\theta \right\} u(\xi, t).$$

$$(3.24)$$

Observa-se ainda que para problemas de potencial tridimensionais estacionários, o fluxo fundamental é dado por

$$^{st}p^{*} = -\left(\frac{1}{4\pi r^{2}}\right)\frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}},$$
(3.25)

de onde resulta que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{st} p^{*}(\mathbf{x};\xi) d\Gamma(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{s} \frac{d\Gamma(\mathbf{x})}{\varepsilon^{2}} = -\frac{1}{4\pi} \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\theta} \sin\varphi d\varphi d\theta \right\}.$$
(3.26)

Assim, das equações (3.24) e (3.26), tem-se que

$$L = \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma_{\varepsilon}}^{st} p^{*}(\mathbf{x};\xi) d\Gamma(\mathbf{x}) \right\} u(\xi,t).$$
(3.27)

Portanto, conclui-se que a equação (3.20) pode ser rescrita como

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon} + \overline{\Gamma}_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) =$$

$$V.P. \int_{\Gamma - \Gamma_{\varepsilon}} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x}, t; \xi, \tau) u(\mathbf{x}, \tau) d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \left\{ \lim_{\varepsilon \to 0} \int_{\overline{\Gamma}_{\varepsilon}}^{st} p^{*}(\mathbf{x}; \xi) d\Gamma(\mathbf{x}) \right\} u(\xi, t)$$
(idem 2.32)

Como todos os outros limites da equação (3.19) estão relacionados a integrais fracamente singulares, integrais estas convergentes, a equação integral de contorno para problemas acústicos é completamente dada por

$$c(\xi)u(\xi,t) + \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} p^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)u(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)p(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} \int_{0}^{t} u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,\tau)\gamma(\mathbf{x},\tau)d\tau d\Omega(\mathbf{x}) + c^{-2} \int_{\Omega} \{v_{0}(\mathbf{x})u^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0) + u_{0}(\mathbf{x})\dot{u}^{*}(\mathbf{x},t;\xi,0)\}d\Omega(\mathbf{x}),$$
(3.28)

sendo o termo livre da equação integral tempo-dependente $c(\boldsymbol{\xi})$ dado pela equação (2.34).

3.4. Algebrização da Equação Integral de Contorno

A equação integral de contorno (3.28) pode ser transformada em um sistema de equações algébricas discretizando-se tanto o domínio temporal quanto o domínio espacial do problema analisado. Menciona-se que todos os procedimentos relativos à discretização espacial - incluindo-se a avaliação numérica das integrais espaciais e os procedimentos especiais de integração numérica relativos às integrais singulares - e o processo de marcha no tempo estão descritos em detalhes no capítulo 2. No entanto, observa-se que para os núcleos integrados no tempo há um intervalo de existência, fora do qual estes são identicamente nulos, conforme mostrado a seguir.

3.4.1. Avaliação Analítica das Integrais Temporais

As integrações indicadas nas expressões (2.50)-(2.52) são muito simples, para o problema acústico, e podem ser realizadas analiticamente como mostrado a seguir

$$^{(\alpha)} P^{(n)}(\mathbf{x};\xi) = -\frac{1}{4\pi r^2} \int_0^{\overline{m}_l \Delta t} \left[\delta(t_n - \frac{r}{c} - \tau) + \frac{r}{c} \dot{\delta}(t_n - \frac{r}{c} - \tau) \right] L_{\alpha}(\tau) d\tau \frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}} = -\frac{1}{4\pi r^2} \int_0^{\overline{m}_l \Delta t} \left[\delta(t_n - \frac{r}{c} - \tau) - \frac{r}{c} \frac{\partial}{\partial \tau} \delta(t_n - \frac{r}{c} - \tau) \right] L_{\alpha}(\tau) d\tau \frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}} = -\frac{1}{4\pi r^2} \left[L_{\alpha} \left(t_n - \frac{r}{c} \right) + \frac{r}{c} L_{\alpha}' \left(t_n - \frac{r}{c} \right) \right] \frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}}$$
(3.29)

se $c(t_n - \overline{m}_1 \Delta t) < r < ct_n$, senão $P^{(n)} = 0$.

$$^{(\beta)} U^{(n)}(\mathbf{x};\xi) = \frac{1}{4\pi r} \int_{0}^{\overline{m}_{1}\Delta t} \delta(t_{n} - \frac{r}{c} - \tau) M_{\beta}(\tau) d\tau = \frac{1}{4\pi r} M_{\beta}\left(t_{n} - \frac{r}{c}\right)$$
(3.30)

se $c(t_n - \overline{m}_1 \Delta t) < r < ct_n$, senão $U^{(n)} = 0$.

$$^{(\zeta)}\overline{U}^{(n)}(\mathbf{x};\xi) = \frac{1}{4\pi r} \int_{0}^{\overline{m}_{1}\Delta t} \delta(t_{n} - \frac{r}{c} - \tau) N_{\zeta}(\tau) d\tau = \frac{1}{4\pi r} N_{\zeta}(t_{n} - \frac{r}{c})$$
(3.31)

se
$$c(t_n - \overline{m}_1 \Delta t) < r < ct_n$$
, senão $\overline{U}^{(n)} = 0$.

Os núcleos integrados no tempo (3.29)-(3.31) são definidos na região do espaço compreendida entre duas cascas esféricas centradas em $\boldsymbol{\xi}$ com raios $r_{inf} = c(t_n - \overline{m}_1 \Delta t)$ e $r_{sup} = ct_n$, ou seja, a região do espaço para a qual $c(t_n - \overline{m}_1 \Delta t) < r < ct_n$.



Figura 3.1: Intervalo de existência dos núcleos integrados no tempo.

Capítulo 4

Acoplamento Multi-domínio

4.1. Introdução

Para a aplicação do Método dos Elementos de Contorno a problemas envolvendo materiais não-homogêneos ou a problemas em que haja descontinuidade em seus domínios de definição – como por exemplo em problemas de mecânica da fratura – faz-se necessário utilizar a técnica de subregião. Esta técnica consiste em subdividir o domínio em regiões isoladas, e considerar a equação integral de contorno para cada região separadamente, aplicando-se, em seguida, as condições de acoplamento. A estratégia de acoplamento entre as diversas regiões do domínio empregada fundamenta-se no uso de *solvers* iterativos que são uma poderosa ferramenta para a resolução de tais problemas, pois permitem anular, completamente, o armazenamento e a manipulação dos blocos nulos que aparecem no sistema acoplado. Nesta estratégia, o sistema matricial global, que nunca é explicitamente montado, é tratado via consideração dos subsistemas algébricos correspondentes às subestruturas de análise.

Neste capítulo, tanto a estratégia de acoplamento quanto a formulação dos algoritmos dos *solvers* iterativos são apresentadas de forma sucinta. Maiores detalhes a respeito destas técnicas podem ser obtidos em (Cleberson, 2002; Araújo e Martins, 2001; Araújo *et al*, 2001; Martins, 2000; Araújo, 1989).

4.2. Solvers Iterativos

4.2.1. Algoritmo GMRES

O *solver* GMRES (Generalized Minimal RESidual) baseia-se na minimização do vetor erro obtido da diferença entre a k-ésima solução do sistema e a sua solução exata, e é derivado a partir da definição de subespaço de Krylov (Araújo, 1989; Mansur *et al*, 1992; Hackbusch, 1991; Hageman e Young, 1981) impondo-se que

$$\mathbf{x}_{k} - \mathbf{x}_{0} \in \mathbf{K}_{k}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{A}), \tag{4.1}$$

onde \mathbf{x}_k representa a solução da k-ésima iteração, \mathbf{x}_0 é a solução inicial do sistema $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$, \mathbf{r}_0 representa o resíduo inicial dado por $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ e \mathbf{K}_k é o subespaço de dimensão k associado a \mathbf{r}_0 e \mathbf{A} .

A condição imposta em (4.1) significa que

$$\mathbf{x}_{k} - \mathbf{x}_{0} = \sum_{i=1}^{k} y_{i} \overline{\mathbf{v}}_{i} = \overline{\mathbf{V}}_{k} \mathbf{y}_{k} = \mathbf{h}_{k}$$
(4.2)

onde $\overline{\mathbf{V}}_{k} = [\overline{\mathbf{v}}_{1} \ \overline{\mathbf{v}}_{2} \cdots \overline{\mathbf{v}}_{k}] e \mathbf{y}_{k} = (\mathbf{y}_{1} \ \mathbf{y}_{2} \cdots \mathbf{y}_{k})^{\mathrm{T}}$. Os vetores $\{\overline{\mathbf{v}}_{1} \ \overline{\mathbf{v}}_{2} \cdots \overline{\mathbf{v}}_{k}\}$ representam vetores ortonormalizados com $\overline{\mathbf{v}}_{1} = \frac{\mathbf{r}_{0}}{\|\mathbf{r}_{0}\|}$. O vetor \mathbf{y}_{k} é determinado impondo-se a condição de que \mathbf{x}_{k} seja uma aproximação ótima da solução exata $(\overline{\mathbf{x}})$ do sistema algébrico. Logo, o problema consiste em encontrar o vetor \mathbf{y}_{k} tal que

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}_{k}\| = \|\boldsymbol{x}_{k} - \overline{\boldsymbol{x}}\| = \|\boldsymbol{\varepsilon}_{0} + \overline{\boldsymbol{V}}_{k}\boldsymbol{y}_{k}\| = \min \|\boldsymbol{\varepsilon}_{0} + \overline{\boldsymbol{V}}_{k}\boldsymbol{y}_{k}\|, \qquad \boldsymbol{y}_{k} \in \mathbb{R}^{k}.$$

$$(4.3)$$

Assim, resolvendo-se o problema de otimização, tem-se que
$$\mathbf{y}_{k} = \mathbf{H}_{k}^{-1} \| \mathbf{r}_{0} \| \mathbf{e}_{1}, \qquad \mathbf{e}_{1} = (1, 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}$$
(4.4)

onde a matriz de Hessenberg \mathbf{H}_k , que resulta da obtenção da base ortonormal do subespaço de Krylov através do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, é dada por

$$\mathbf{H}_{k} = \begin{bmatrix} \mathbf{h}_{11} & \mathbf{h}_{12} & \cdots & \mathbf{h}_{1k} \\ \|\mathbf{v}_{2}\| & \mathbf{h}_{22} & \cdots & \mathbf{h}_{2k} \\ & \|\mathbf{v}_{3}\| & \cdots & \mathbf{h}_{3k} \\ & & & \vdots \\ & & & & \mathbf{h}_{kk} \end{bmatrix}, \text{ com } \mathbf{h}_{ij} = (\mathbf{A}\overline{\mathbf{v}}_{j}, \overline{\mathbf{v}}_{i}).$$
(4.5)



Figura 4.1: Solução da k-ésima iteração e o erro associado $\boldsymbol{\epsilon}_k$.

Como vantagem, este solver apresenta uma eficiência elevada na maioria dos casos, com altas taxas de convergência. Suas principais desvantagens situam-se no fato de trabalhar armazenando-se todo o conjunto de vetores \overline{v}_k gerados durante o processo iterativo, o que implica em alocação adicional de memória; além disso, o esquema iterativo apresenta, em certos casos, problemas de estagnação, ou seja, em um dado

ponto do processo iterativo a resposta do sistema não mais se altera e, em conseqüência, o erro mantém-se constante, não sendo obtida a convergência.

Existem estratégias para contornar os problemas mencionados e, dentre elas, destaca-se o processo de *restart*. A idéia deste algoritmo é reinicializar o processo iterativo do solver GMRES, a cada *k* iterações (k < ordem do sistema), utilizando-se a resposta obtida \mathbf{x}_k , como resposta inicial para o próximo ciclo. Este procedimento torna possível a diminuição do conjunto de vetores a serem armazenados, além de melhorar a questão da estagnação, salvo algumas exceções.

4.2.2. Algoritmo de Lanczos

Conhecido como algoritmo de tridiagonalização de Lanczos (Wilkinson, 1965), este processo iterativo fundamenta-se na geração de duas sequências de vetores de Krylov a partir das matrizes $\mathbf{A} \in \mathbf{A}^{T}$, mutuamente ortogonais entre si.

Para estabelecer o algoritmo de resolução de sistemas de equações lineares, considera-se uma fórmula iterativa básica do tipo

$$\mathbf{u}^{n+1} = \rho_{n+1} \gamma_{n+1} \mathbf{r}^n + \rho_{n+1} \mathbf{u}^n + (1 - \rho_{n+1}) \mathbf{u}^{n-1} , \qquad (4.6)$$

que resulta em um vetor resíduo (erro) do tipo

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}^{n+1} = -\rho_{n+1}\gamma_{n+1}\mathbf{A}\mathbf{r}^{n} + \rho_{n+1}\mathbf{r}^{n} + \mathbf{r}^{n-1} - \rho_{n+1}\mathbf{r}^{n-1}.$$
(4.7)

Manipulando-se a equação (4.7), pode-se mostrar que esta tem o aspecto dos vetores de Lanczos derivados de A (Araújo, 1989), ou seja,

$$\left(-\frac{1}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{A}\mathbf{r}^{n} - \left(\frac{1}{\gamma_{n+1}}\right)\mathbf{r}^{n} - \left(\frac{1-\rho_{n+1}}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\mathbf{r}^{n-1}.$$
(4.8)

De maneira análoga, para a matriz \mathbf{A}^{T} , tem-se

$$\left(-\frac{1}{\overline{\rho}_{n+1}\overline{\gamma}_{n+1}}\right)\overline{\mathbf{r}}^{n+1} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\overline{\mathbf{r}}^{n} - \left(\frac{1}{\overline{\gamma}_{n+1}}\right)\overline{\mathbf{r}}^{n} - \left(\frac{1-\overline{\rho}_{n+1}}{\overline{\rho}_{n+1}\overline{\gamma}_{n+1}}\right)\overline{\mathbf{r}}^{n-1}.$$
(4.9)

Sob a imposição de que os vetores \mathbf{r}^{n+1} e $\mathbf{\bar{r}}^{n+1}$ sejam vetores de Lanczos ($\mathbf{r}^{i,T}$. $\mathbf{\bar{r}}^{j} = 0$ para $i \neq j$) e realizando-se as transformações necessárias, chega-se a

$$\gamma_{n+1} = \overline{\gamma}_{n+1} = \frac{\overline{\mathbf{r}}^{n,T} \mathbf{r}^{n}}{\overline{\mathbf{r}}^{n,T} \mathbf{A} \mathbf{r}^{n}}$$
(4.10)

$$\rho_{n+1} = \overline{\rho}_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \left(\frac{\overline{\mathbf{r}}^{n,T} \mathbf{r}^n}{\overline{\mathbf{r}}^{n-1,T} \mathbf{r}^{n-1}} \right) \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1} \qquad \text{com } \rho_1 = \overline{\rho}_1 = 1.$$
(4.11)

Portanto, o algoritmo de Lanczos para resolução iterativa de sistemas de equações lineares é estabelecido pela equação (4.6), onde os parâmetros γ_{n+1} e ρ_{n+1} são calculados por (4.10) e (4.11), respectivamente, e \mathbf{r}^n é determinado por (4.8). Para cálculo dos parâmetros ρ_{n+1} e γ_{n+1} faz-se necessária, ainda, a determinação do vetor resíduo auxiliar, que é obtido de (4.9). Este algoritmo é geral, e pode ser aplicado a qualquer sistema não-singular. A convergência é garantida em, no máximo, *N* iterações. Entretanto, isto nem sempre ocorre em consequência de erros de truncamento na execução das operações.

4.2.3. Algoritmo do Gradiente Bi-conjugado

Também pode-se expressar o processo iterativo de Lanczos na seguinte forma (Araújo, 1989)

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \lambda_n \cdot \mathbf{p}^n \tag{4.11}$$

onde os vetores \mathbf{p}^{n} , que definem as direções de busca, são dados por

$$\mathbf{p}^{n} = \begin{cases} \mathbf{r}^{0} & , n = 0\\ \mathbf{r}^{n} + \alpha_{n} \cdot \mathbf{p}^{n-1} & , n \ge 1. \end{cases}$$
(4.12)

Sendo a fórmula iterativa dada por (4.11), segue-se que o resíduo para a n-ésima iteração é dado por

$$\mathbf{r}^{n} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}^{n} = \mathbf{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}^{n-1}.$$
(4.13)

Para as fórmulas iterativas auxiliares, obtém-se:

$$\overline{\mathbf{r}}^{n} = \overline{\mathbf{r}}^{n-1} - \lambda_{n-1} \cdot \mathbf{A}^{T} \cdot \overline{\mathbf{p}}^{n-1}$$
(4.14)

$$\overline{\mathbf{p}}^{n} = \begin{cases} \overline{\mathbf{r}}^{0} = \mathbf{r}^{0} & , n = 0\\ \overline{\mathbf{r}}^{n} + \alpha_{n} \cdot \overline{\mathbf{p}}^{n-1} & , n \ge 1. \end{cases}$$
(4.15)

Impondo-se a condição de que os vetores-resíduos \mathbf{r}^n sejam vetores de Lanczos, ou seja,

$$\mathbf{r}^{i,\mathrm{T}}.\overline{\mathbf{r}}^{j} = 0 \quad \text{para } i \neq j,$$

$$(4.16)$$

prova-se que as direções de busca p^j são ortogonais às direções de busca auxiliares \overline{p}^j em relação à matriz A, ou seja,

$$\overline{\mathbf{p}}^{i,\mathrm{T}}.\mathbf{A}.\mathbf{p}^{j} = 0 \quad \text{para } i \neq j. \tag{4.17}$$

Com as relações (4.16) e (4.17) demonstra-se facilmente que os parâmetros λ_{n-1} e α_n do processo iterativo são dados por

$$\lambda_{n-1} = \frac{\overline{\mathbf{r}}^{(n-1),\mathrm{T}} \cdot \mathbf{r}^{n-1}}{\overline{\mathbf{p}}^{(n-1),\mathrm{T}} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}^{n-1}}, \qquad \alpha_n = \frac{\overline{\mathbf{r}}^{n,\mathrm{T}} \cdot \mathbf{r}^n}{\overline{\mathbf{r}}^{(n-1),\mathrm{T}} \cdot \mathbf{r}^{n-1}}$$
(4.18)

O processo iterativo estabelecido por (4.11), (4.12), (4.13), (4.14), (4.15) e (4.18) é conhecido como algoritmo de gradiente biconjugado.

Para sistemas algébricos reais, pode-se obter um critério de parada adequado para o *solver* iterativo através da comparação entre a norma do vetor resíduo \mathbf{r}^n (que corresponde ao vetor erro no caso do solver GMRES) e uma determinada tolerância (**tol**), conforme expressão abaixo

$$\left\|\underline{\mathbf{r}}^{n}\right\| \leq \mathbf{tol} \,. \tag{4.19}$$

4.3. Acoplamento Multi-domínio

Para o desenvolvimento do algoritmo de subestruturação aplicado a problemas transientes, escreve-se o sistema de equações (2.84) para cada subregião do domínio. Assim, para uma certa região k tem-se

$$\mathbf{H}^{k}\mathbf{u}^{(n),k} = \mathbf{G}^{k}\mathbf{p}^{(n),k} + \mathbf{r}^{(n),k}, \quad \text{com } k=1,...,nsr$$
 (4.20)

onde nsr é o número de subregiões e n representa o passo de tempo atual.

Organizando-se o sistema de equações (4.20) de modo a obter-se no membro do lado esquerdo os valores de contorno desconhecidos e os potenciais de interface, também incógnitas do problema, e no membro do lado direito os valores de contorno prescritos e os fluxos normais de interface (incógnitas), tem-se o sistema a seguir

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{b}^{k} & \mathbf{H}_{i}^{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{b}^{(n),k} \\ \mathbf{u}_{i}^{(n),k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{\overline{b}}^{k} & \mathbf{G}_{i}^{k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{\overline{b}}^{(n),k} \\ \mathbf{p}_{i}^{(n),k} \end{bmatrix} + \mathbf{r}^{(n),k}$$
(4.21)

onde as matrizes $\mathbf{A}_{b}^{k} \in \mathbf{B}_{\overline{b}}^{k}$ e os vetores $\mathbf{x}_{b}^{(n),k} \in \mathbf{y}_{\overline{b}}^{(n),k}$, resultantes da introdução das condições de contorno, são formados por

$$\mathbf{A}_{b}^{k} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{b(u)}^{k} & -\mathbf{G}_{b(p)}^{k} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}_{b}^{(n),k} = \begin{cases} \mathbf{u}_{b}^{(n),k} \\ \mathbf{p}_{b}^{(n),k} \end{cases}$$
(4.22)

$$\mathbf{B}_{\overline{b}}^{k} = \begin{bmatrix} -\mathbf{H}_{b(\overline{u})}^{k} & \mathbf{G}_{b(\overline{p})}^{k} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{y}_{\overline{b}}^{(n),k} = \begin{cases} \overline{\mathbf{u}}_{b}^{(n),k} \\ \overline{\mathbf{p}}_{b}^{(n),k} \end{cases}$$
(4.23)

sendo ainda que o subescrito b(u) define a parte do contorno da *k*-ésima região com potenciais desconhecidos, b(p) define a parte do contorno da *k*-ésima região com fluxos desconhecidos e o subescrito *i* corresponde às superfícies de interface.

Visto que para os nós de interface de uma dada subregião k tanto os potenciais quanto os fluxos são desconhecidos – pois apenas valores de contorno são prescritos - torna-se necessário aplicar condições de equilíbrio e continuidade entre as interfaces das diversas subregiões, visando igualar o número de equações ao número de incógnitas, de modo a tornar possível o cálculo de todos os valores desconhecidos desta subregião.



Figura 4.2: Subdomínios acoplados

Para nós acoplados que não tenham a mesma posição geométrica de nós acoplados de outras subregiões, isto é, para nós de interface não-comum (ver figura 4.2), o número de equações associadas a eles, duas por nó, é sempre suficiente para o cálculo dos potenciais e fluxos nodais, não sendo, então, necessária nenhuma consideração adicional nas variáveis de interface além das condições de equilíbrio. No caso de nós de interface comum, ou seja, se o nó acoplado é comum a duas ou mais interfaces, algumas considerações adicionais nas variáveis de interface devem ser introduzidas a fim de reduzir-se o número das correspondentes incógnitas de modo que o número de equações seja suficiente para a determinação destas. Neste caso, além das condições de equilíbrio dadas por

$$u^{i}(\mathbf{x},t) = u^{j}(\mathbf{x},t)$$
 e $p^{i}(\mathbf{x},t) = -p^{j}(\mathbf{x},t)$, (4.24)

para $\mathbf{x} \in \Gamma_{ij}$, torna-se necessário que ao menos uma das subregiões tenha superfície com curvatura suave no ponto comum para que seja possível estabelecer-se as condições de continuidade de potencial e fluxo, dadas por

$$u^{i}(\mathbf{x},t) = u^{j}(\mathbf{x},t)$$
 e $p^{i}(\mathbf{x},t) = p^{j}(\mathbf{x},t)$, (4.25)

sempre que $\mathbf{n}^{i}(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^{j}(\mathbf{x})$. Ressalta-se que a necessidade das mesmas deve-se ao uso de nós múltiplos para representação de descontinuidades das variáveis de campo.

Para o nó de interface comum mostrado na figura 4.2, por exemplo, com a consideração das condições de acoplamento e continuidade, tem-se somente três incógnitas a serem determinadas, a saber

$$u^{i} = u^{j} = u^{k} = u^{l} = u^{m} = u^{n}$$
 (4.26)

$$p^{i} = -p^{j} = -p^{m} = p^{n}$$
 (4.27)

$$\mathbf{p}^{\mathbf{k}} = -\mathbf{p}^{\mathbf{l}} \tag{4.28}$$

O sistema de equações, em forma explícita e não condensada, estabelecido considerando-se as condições de continuidade e acoplamento para uma região composta de *n* subdomínios pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{b}^{1} \mid \mathbf{0} \mid \cdots \mid \mathbf{0} \mid \mathbf{C}_{12}^{1} \mid \mathbf{C}_{13}^{1} \mid \cdots \mid \mathbf{C}_{1n}^{1} \\ \mathbf{0} \mid \mathbf{A}_{b}^{2} \mid \cdots \mid \mathbf{0} \mid \mathbf{C}_{12}^{2} \mid \mathbf{C}_{13}^{2} \mid \cdots \mid \mathbf{C}_{2n}^{2} \\ \vdots \mid \vdots \mid \ddots \mid \vdots \mid \vdots \mid \vdots \mid \vdots \mid \cdots \mid \mathbf{C}_{1n}^{n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{b}^{(n),2} \\ \mathbf{x}_{b}^{(n),m} \\ \mathbf{x}_{b}^{(n),m} \\ \mathbf{x}_{12}^{(n)} \\ \mathbf{x}_{13}^{(n)} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{13}^{(n)} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{13}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{b}^{1} \\ \mathbf{B}_{b}^{2} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{b}^{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{b}^{(n),1} \\ \mathbf{y}_{b}^{(n),2} \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{b}^{(n),m} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{b}^{(n),1} \\ \mathbf{r}_{b}^{(n),2} \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{b}^{(n),m} \end{bmatrix}$$

$$(4.29)$$

onde \mathbf{C}_{ij}^{k} representa a submatriz do acoplamento associada com Γ_{ij} da *k*-ésima subregião (contendo termos de \mathbf{H}_{ij}^{k} e \mathbf{G}_{ij}^{k}) e $\mathbf{x}_{ij}^{(n)}$ contém os valores incógnitas da interface referentes ao *n*-ésimo instante de tempo.

A montagem da matriz global para o sistema acoplado (4.29) introduz blocos de coeficientes nulos que ocupam espaço de memória desnecessariamente. Empregando-se *solvers* iterativos, pode-se resolver o sistema acoplado sem a montagem explícita desta matriz global, optando-se por gerar somente as submatrizes das subregiões e promovendo-se a transferência dos valores de acoplamento (interface) convenientes entre as subregiões. Assim, ao longo de cada passo (iteração) do processo iterativo, procede-se como se os diversos sistemas fossem desacoplados. Além de reduzir o espaço total alocado, esta opção permite reduzir consideravelmente o tempo de processamento, visto que não se realiza operações com blocos nulos. As submatrizes de cada região são armazenadas na forma binária em disco rígido sendo os arquivos identificados com o número da subregião concatenado ao nome da matriz.

Capítulo 5

Aplicações

5.1. Introdução

Neste capítulo serão apresentados os resultados de alguns exemplos analisados via programa computacional desenvolvido ao longo deste trabalho, no qual empregaram-se a teoria e os procedimentos numéricos discutidos nos capítulos anteriores. Visto que soluções analíticas de problemas transientes tridimensionais não são facilmente encontradas na literatura técnica, de modo a testar os algoritmos implementados, resolveram-se, ao invés de aplicações tecnicamente mais importantes, problemas acadêmicos simples cujas soluções analíticas são conhecidas.

Em todas as análises realizadas empregaram-se elementos quadrilaterais quadráticos na discretização do contorno e, quando necessário, como no caso de problemas com condições iniciais não-homogêneas, empregaram-se células hexaédricas quadráticas na discretização do domínio dos problemas. Foi adotada interpolação linear para a função $u(\mathbf{x},t)$ e tanto interpolação linear quanto interpolação constante para a função $q(\mathbf{x},t)$ ao longo de cada passo de tempo.

Neste trabalho faz-se necessário o uso de células de integração na obtenção das respostas de problemas submetidos a condições iniciais não-homogêneas e/ou forças de volume, uma vez que fez-se a opção de não transformar a integral de domínio que surge nestes casos em uma integral de contorno equivalente. Este procedimento é geral e aplica-se à avaliação de quaisquer grandezas definidas no domínio do problema.

Tanto *solvers* iterativos quanto direto foram empregados na resolução dos sistemas de equações, sendo o esquema iterativo parado sempre que $\|\mathbf{r}^{n+1}\| \le \text{tol}$, com $\text{tol} = 10^{-10}$ e \mathbf{r}^{n+1} sendo o vetor resíduo da iteração atual. O computador usado nas análises possui um processador INTEL com 1.0GHz e 768Mbytes de memória RAM.

5.2. Aplicações Relativas a Problemas de Difusão

Exemplo 1:

Este primeiro exemplo visa verificar o algoritmo de difusão implementado. Com este propósito, analisou-se a placa mostrada na figura 5.1, para a qual considerou-se a difusividade térmica como sendo unitária (c=1,0) e as seguintes condições de contorno:

potencial prescrito	\rightarrow	u(x,t) = 1,0	nas superfícies $x_1 = \pm 5,0$ e $x_2 = \pm 4,0$;
fluxo prescrito	\rightarrow	p(x,t) = 0,0	nas superfícies $x_3 = 0,0$ e $x_3 = e$ (espessura).

Devido à simetria verificada neste problema, o mesmo foi resolvido discretizando-se apenas um quarto da placa apresentada, ou seja, a região dada por $x_1 = 0$ a 5,0 e $x_2 = 0$ a 4,0, sendo empregados nesta discretização 58 elementos de contorno e 176 pontos nodais.

Com o intuito de verificar a influência da espessura da placa nos resultados, o problema foi analisado considerando-se algumas espessuras. Observou-se que a resposta apresenta uma variação desprezível ao longo da espessura. Os resultados obtidos foram comparados com a solução analítica disponível. Esta solução corresponde à solução de um problema plano.

As temperaturas resultantes no ponto central da placa, ou seja, $x_1=x_2=0$ e $x_3 = e/2$ - considerando-se $\Delta t = 1,0$ - são apresentados na tabela 5.1, juntamente com uma solução numérica via formulação de contorno (num1) e a solução analítica do correspondente problema plano dadas por Wrobel (1981).

Como o valor do passo de tempo foi escolhido arbitrariamente, analisou-se o problema para alguns valores de Δt , de modo a verificar a influência deste parâmetro nos resultados. A mesma discretização espacial foi adotada em todas as situações e os resultados destas análises para o mesmo ponto anterior são apresentados na tabela 5.2.



Figura 5.1: Problema físico a ser analisado.



Figura 5.2: Modelo numérico proposto – discretização de um quarto da placa.

Tempo	e = 1,0	e = 0,5	e = 0,1	e = 0,05	e = 0,01	e = 0,005	num1	analítico
2	0,065	0,071	0,080	0,083	0,084	0,084	0,092	0,114
4	0,349	0,350	0,353	0,357	0,359	0,359	0,389	0,420
6	0,595	0,594	0,593	0,596	0,598	0,598	0,621	0,646
8	0,753	0,752	0,750	0,752	0,755	0,755	0,769	0,786
10	0,850	0,849	0,847	0,849	0,851	0,851	0,860	0,871
12	0,909	0,908	0,907	0,908	0,910	0,910	0,915	0,922
14	0,945	0,944	0,944	0,944	0,946	0,946	0,948	0,953
16	0,967	0,966	0,966	0,966	0,967	0,967	0,968	0,972
18	0,980	0,980	0,979	0,980	0,980	0,980	0,981	0,983
20	0,988	0,988	0,987	0,988	0,988	0,988	0,988	0,990

Tabela 5.1: Temperaturas no ponto central da placa – $\Delta t = 1,0$.



Figura 5.3: Temperaturas no ponto central da placa – $\Delta t = 1,0$.

Tempo	Δt=2,0	Δt=1,0	$\Delta t=2/3$	analítico
2	0,076	0,084	0,091	0,114
4	0,305	0,359	0,386	0,420
6	0,541	0,598	0,626	0,646
8	0,711	0,755	0,780	0,786
10	0,820	0,851	0,874	0,871
12	0,889	0,910	0,930	0,922
14	0,932	0,946	0,965	0,953
16	0,958	0,967	0,985	0,972
18	0,975	0,980	0,998	0,983
20	0,985	0,988	1,005	0,990

Tabela 5.2: Temperaturas no ponto central da placa -e = 0,01.



Figura 5.4: Temperaturas no ponto central da placa -e = 0,01.

Como citado anteriormente, a variação da resposta ao longo da espessura é desprezível. A título de ilustração o mesmo ponto (x,y) foi tomado. Agora porém, este varia ao longo da espessura. A tabela a seguir contém a relação entre as temperaturas obtidas para o ponto (x,y) situado em z=e/2 e em z=0 (ou z=e), adotando-se diferentes espessuras e $\Delta t=1,0$.

tempo	e=1,0	e=0,5	e=0,1	e=0,05	e=0,01
1	1,233	1,065	1,004	1,002	1,000
2	1,058	1,022	1,002	1,001	1,000
3	1,009	1,004	1,001	1,000	1,000
4	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
5	0,999	0,999	1,000	1,000	1,000
6	0,999	0,999	1,000	1,000	1,000
7	0,999	0,999	1,000	1,000	1,000
8	0,999	1,000	1,000	1,000	1,000
9	0,999	1,000	1,000	1,000	1,000
10	0,999	1,000	1,000	1,000	1,000
11	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

Tabela 5.3: Relação entre temperaturas.

Neste primeiro exemplo, analisou-se uma placa submetida a condições de contorno constantes no tempo. O problema, que devido à geometria e às condições de contorno representa uma análise plana, foi tridimensionalmente analisado para diferentes espessuras, de onde constata-se que a resposta apresenta uma pequena variação ao longo da espessura (tabela 5.3), sendo porém mais precisa à medida que a espessura diminui. Observa-se, ainda, que a mesma fica inalterada para espessuras inferiores a 0,01. Visando analisar a estabilidade do algoritmo de marcha no tempo, consideraram-se diferentes passos de tempo. Situações de instabilidade numérica não foram verificadas em nenhum caso. Tampouco foram consideráveis as diferenças entre os valores de temperatura, nos pontos de observação da resposta, a partir do tempo em que a convergência da mesma (no sentido físico) era atingida.

Exemplo 2:

Com o objetivo de verificar a formulação desenvolvida para problemas com condições de contorno dependentes do tempo, analisou-se um disco de raio unitário, com espessura e = 0,1 e difusividade térmica c = 1. A área lateral do disco está submetida a uma variação de temperatura - choque térmico - conforme mostrado na figura 5.6, permanecendo as demais áreas perfeitamente isoladas durante todo o tempo da análise. Como no exemplo anterior, devido à simetria do problema, discretizou-se apenas um quarto do disco. O modelo numérico proposto, constituído por 72 elementos e 218 nós, é ilustrado pela figura 5.5. Os resultados obtidos para os choques térmicos aplicados em diferentes instantes de tempo estão plotados nos gráficos das figuras 5.7-5.9 e foram comparados com as soluções analíticas apresentadas graficamente por Wrobel (1981). As duas primeiras respostas (figuras 5.7 e 5.8) foram obtidas adotando-se $\Delta t=0,05$ e a última resposta (figura 5.9), adotando-se $\Delta t=0,1$.



Figura 5.5: Modelo numérico proposto



Figura 5.6: Variação em relação ao tempo do potencial prescrito.



Figura 5.7: Choque térmico aplicado em $t_0 = t_1 = 0$.



Figura 5.8: Choques térmicos aplicados em $t_0 = 0$ e $t_1 = 0,5$.



Figura 5.9: Choques térmicos aplicados em $t_0 = 0$ e $t_1 = 1$.

Aqui, o problema proposto relaciona-se com a consideração de condições de contorno variáveis com o tempo. As respostas obtidas aplicando-se os choques térmicos em diferentes instantes de tempo estão apresentadas nos gráficos das figuras 5.7-5.9. As respostas obtidas nesta análise foram comparadas qualitativamente com as respostas fornecidas por Wrobel (1981), as quais não foram mostradas nos gráficos por terem sido fornecidas apenas graficamente, sem os respectivos valores numéricos. Destas comparações, vê-se que as respostas obtidas com o algoritmo proposto neste trabalho encontram-se em boa concordância com as analíticas.

Exemplo 3:

O objetivo deste exemplo é verificar o algoritmo implementado para a resolução de problemas sujeitos a condições iniciais não-homogêneas e/ou forças de volume, ou seja, problemas nos quais o uso de células de integração se faz necessário devido à integral de domínio presente na sua formulação.

Neste exemplo faz-se a investigação de uma placa quadrada de dimensões 3x3x1. A distribuição inicial de temperatura na placa é dada por $u_0 = 30$, a temperatura das superfícies laterais é nula para $t > t_0$ e as demais superfícies estão perfeitamente isoladas. A difusividade térmica adotada para a análise é c=1,25 e o modelo numérico proposto compõe-se de 92 elementos de contorno e 35 células internas ao domínio do problema.

O resultado numérico obtido desta análise para o passo de tempo $\Delta t = 0,1$ (MEC 2) é comparado com resultados numéricos obtidos via formulação 2D de contorno (MEC 1), via formulação 2D de domínio (MEF) e também com o resultado analítico fornecidos em Wrobel (1981). Estes resultados estão apresentados na tabela 5.4. Apresenta-se, também, na figura 5.12, o perfil de temperatura no plano médio da placa em um dado instante. Em seguida, apresentam-se os resultados para alguns outros valores de Δt (tabela 5.5) onde verifica-se a influência deste parâmetro na resposta da análise. A mesma discretização espacial foi adotada em todas as análises.



Figura 5.10: Malha de discretização do contorno - um quarto da placa.



Figura 5.11: Malha de discretização do domínio - um quarto da placa.

x ₁	X2	MEF	MEC 1	MEC 2	analítico
0,0	0,0	2,108	2,009	1,982	1,812
0,3	0,0	2,005	1,913	1,890	1,723
0,6	0,0	1,706	1,632	1,607	1,466
0,9	0,0	1,239	1,194	1,168	1,065
1,2	0,0	0,652	0,639	0,615	0,560
0,3	0,3	1,907	1,821	1,800	1,639
0,6	0,6	1,380	1,325	1,302	1,186
0,9	0,9	0,728	0,710	0,687	0,626
1,2	1,2	0,201	0,201	0,190	0,173

Tabela 5.4: Valores de temperatura no tempo t = $1,2 - \Delta t = 0,1$.



Figura 5.12: Perfil de temperatura no plano médio da placa no instante t=1,2.

x ₁	X2	Δt=0,15	Δt=0,12	Δt=0,08	Δt=0,067	analítico
0,0	0,0	2,094	2,025	1,957	2,042	1,812
0,3	0,0	2,003	1,934	1,851	1,879	1,723
0,6	0,0	1,703	1,644	1,574	1,587	1,466
0,9	0,0	1,238	1,195	1,144	1,151	1,065
1,2	0,0	0,651	0,629	0,602	0,606	0,560
0,3	0,3	1,912	1,843	1,761	1,783	1,639
0,6	0,6	1,383	1,333	1,274	1,285	1,186
0,9	0,9	0,729	0,703	0,673	0,677	0,626
1,2	1,2	0,200	0,194	0,186	0,187	0,173

Tabela 5.5: Valores de temperatura no tempo t = 1,2.

Como discutido anteriormente, o problema aqui é o da verificação das estratégias voltadas para a avaliação das integrais de volume que ocorrem em formulações do MEC, sendo, neste problema específico, tratada a simulação de uma distribuição inicial de temperatura. Na análise adotou-se tanto o processo especial de integração em células singulares (baseado em coordenadas polares tetraédricas) como o processo padrão de Gauss para o cálculo de integrações de volume. Nenhuma diferença significativa foi

observada entre as respostas obtidas como um e outro processo, o que se explica em função da fraca singularidade que há nos núcleos envolvidos. Chama-se a atenção para o fato de que, para uma simulação mais adequada da distribuição inicial de temperatura, sem que a sua atuação seja estendida por algum intervalo de tempo subseqüente ao tempo inicial, t₀, faz-se necessário a consideração da estreita faixa de células ao longo do contorno (figura 5.11), onde a temperatura, no caso, deve ser nula ao longo de toda a análise. Os resultados assim obtidos encontram-se em boa concordância com os analíticos do correspondente problema plano. Nota-se que os resultados obtidos são mais precisos que os obtidos por Wrobel (1981), via MEC e MEF, com uma formulação 2D. Nas análises com o algoritmo proposto nesta dissertação, vários passos de tempo foram adotados (tabela 5.5).

Exemplo 4:

Para verificação do desempenho do algoritmo de acoplamento genérico EC/EC, aplicado a problemas de difusão, resolveu-se o problema da barra mostrada na figura 5.13. O modelo numérico proposto para a análise compõe-se de quatro subregiões indicadas por S1, S2, S3, e S4, sendo que cada subregião contém 240 nós e 54 elementos. A distribuição inicial de temperatura na barra é nula, as superfícies laterais desta estão perfeitamente isoladas e a mesma está submetida às seguintes condições de contorno: na extremidade esquerda a temperatura é mantida a 0°C durante todo o tempo de análise e na extremidade direita a temperatura é igual a 400°C para t>t₀. A difusividade térmica e o passo de tempo adotados para a análise são c=0,14 [cm²/s] e $\Delta t=2,00$ [s], respectivamente.



Figura 5.13: Subregiões do modelo (S1, S2, S3, S4) e suas respectivas malhas.

A resposta em termos de temperatura deste problema foi calculada em alguns pontos internos, de forma que com ajuda de seus correspondentes valores foram obtidas as curvas representadas no gráfico da figura 5.14. Outros resultados importantes para se avaliar a eficiência do algoritmo, tais como os tempos de montagem e resolução do sistema de equações, são mostrados nos gráficos da figuras 5.15 e 5.16.



Figura 5.14: Resposta nos pontos internos



Figura 5.15: Tempo de resolução do sistema de equações (Valores normalizados pelo tempo de resolução empregando-se o solver direto – LU.)



Figura 5.16: Tempo de montagem do sistema normalizado pelo tempo de resolução.

Observando-se o gráfico da figura 5.14 vê-se que a resposta desta análise converge para a resposta do problema estacionário a partir do instante t=30,0. A informação relacionada à eficiência computacional do algoritmo está apresentada no gráfico da figura 5.15, que mostra a relação entre os tempos de resolução do sistema de equações versus o número de passos de tempo. Como esperado, para os primeiros passos de tempo, a estratégia de acoplamento baseada no uso de solvers iterativos é muito mais eficiente, visto que os esquemas iterativos são muito mais rápidos do que o solver direto empregado. Entretanto, como o problema tratado é linear, o algoritmo de acoplamento baseado no uso do solver direto torna-se mais eficiente do que aquele baseado em solvers iterativos quando o número de passos de tempo aumenta, tal que após o trigésimo passo de tempo, aproximadamente, o tempo acumulado gasto por este para resolver o sistema de equações acoplado é menor do que o tempo acumulado gasto pela estratégia baseada em solvers iterativos. Apesar deste fato (não surpreendente), esperase, até mesmo para análises lineares no domínio do tempo, que o esquema baseado em solvers iterativos apresentado, que exclui completamente operações com blocos nulos, seja mais adequado quando da análise de sistemas de equações muito grandes, visto que nestes casos a fatoração LU se torna uma tarefa bastante difícil. No gráfico da figura 5.16 mostra-se a relação entre o tempo de montagem das matrizes e o tempo de

resolução do sistema. Observa-se que para as análises transientes estudadas, o tempo de montagem de matrizes corresponde a praticamente o tempo total da análise. Mencionase, ainda, que a letra J presente no nome dos *solvers* iterativos indica que estes são précondicionados pela matriz de Jacobi.

5.3. Aplicações Relativas a Análises Acústicas

Exemplo 5:

Nesta análise, verifica-se o algoritmo transiente aplicado a problemas acústicos. Para isso, resolveu-se o problema da barra prismática mostrada na figura 5.17 sob condições iniciais homogêneas e condições de contorno dadas por: potencial nulo prescrito na extremidade da esquerda, fluxo unitário prescrito na extremidade da direita e fluxo nulo prescrito nas demais superfícies do corpo. Adotou-se interpolação linear no tempo para a função potencial e interpolação constante no tempo para a função fluxo. O contorno do problema foi discretizado em 34 elementos e a velocidade do som foi tomada igual à unidade.



Figura 5.17: Domínio da análise e função de fluxo.

Com o objetivo de mostrar o efeito do passo de tempo sobre a resposta do problema, três análises serão apresentadas. Em cada análise, a escolha do passo de tempo adotado foi feita observando-se o coeficiente β , definido pela relação

$$\beta = \frac{c\Delta t}{d},$$

onde d é a diagonal mínima de todos os elementos da malha de contorno, de modo que o valor deste parâmetro não estivesse muito afastado do valor unitário. Estes valores de passo de tempo correspondem a $\beta \approx 0.4$ ($\Delta t=0.11$), $\beta \approx 0.6$ ($\Delta t=0.17$) e $\beta \approx 0.8$ ($\Delta t=0.22$).



Figura 5.18: Discretização do contorno da barra e localização dos pontos A, B, C.

O gráfico da figura 5.19 mostra o histórico da função fluxo no ponto A do contorno, e os gráficos da figuras 5.20 e 5.21 mostram os históricos dos potenciais nos pontos B e C, respectivamente.



Figura 5.19: Resposta no ponto A.



Figura 5.20: Resposta no ponto B.



Figura 5.21: Resposta no ponto C.

Nesta análise, observou-se a influência do tamanho do passo de tempo no comportamento da resposta, seja em termos de precisão, seja em termos de estabilidade numérica, sendo o passo de tempo foi escolhido com base no valor do parâmetro β . As respostas obtidas para cada passo adotado são mostradas nos gráficos das figuras 5.19-5.21. Como esperado, quanto menor o passo de tempo, mais precisa a resposta, uma vez que neste caso o comportamento da variação temporal das grandezas é melhor aproximado. No entanto, para valores muito pequenos de Δt a avaliação das matrizes, em função do comportamento dos núcleos fundamentais, torna-se imprecisa, de modo a haver, usualmente, instabilidade numérica na reconstituição da resposta. Para o caso da guia de onda deste exemplo, verificam-se ocorrências de instabilidade para $\beta < 0.35$. Para valores maiores de Δt as respostas apresentam-se normalmente amortecidas e defasadas, e assim tornam-se imprecisas. Em função dessa imprecisão, também ocorre instabilidade numérica.

Exemplo 6:

Neste exemplo estuda-se um problema de domínio semi-infinito. Para que o domínio possa ser considerado semi-infinito, as dimensões do contorno devem ser muito maiores do que o comprimento da onda irradiada pela fonte sonora. Para a realização das análises, considerou-se uma região do espaço na qual há uma fonte sonora concentrada - fonte cujas dimensões são muito menores que o comprimento de onda sonora irradiada - próxima a um contorno plano rígido tal que a distância separando a fonte e o contorno seja muito menor que um comprimento de onda.



Figura 5.22: Esquema da região espacial sob análise.

As ondas acústicas são irradiadas por uma superfície pulsante harmonicamente localizada a uma altura $h_f = 0,5m$ do contorno. A componente normal da velocidade da partícula é dada por $v_n(t) = v_0 \cos(\omega t)$, com $v_0 \approx 0,53 \text{ m/s}$, $v_0 \approx 0,66 \text{ m/s}$, $v_0 \approx 0,82 \text{ m/s}$ e $v_0 \approx 1,31 \text{ m/s}$ para frequências de excitação f = 62,5Hz, f = 50Hz, f = 40Hz e f = 25Hz, respectivamente. As constantes físicas são: velocidade do som c = 340,0 m/s e densidade de equilíbrio (a 20°C) $\rho_0 = 1,21 \text{ Kg/m}^3$. O mesmo passo de tempo, $\Delta t=0,002s$, foi adotado em todas as situações. Para a simulação do domínio semi-infinito faz-se necessário considerar uma malha de elementos de fechamento (enclosing elements). As malhas de elementos de contorno e de *enclosing elements* são semelhantes àquelas mostradas na figura 5.26, observando-se que, para esta aplicação, não há os elementos de interface (tampouco barreira) visto que o problema foi resolvido com apenas um subdomínio. Os resultados obtidos para o campo de pressão no semiespaço ocupado pela fonte, e que corresponde a duas vezes o campo gerado pela mesma fonte no espaço livre, são comparados com a solução analítica dada por Kinsler *et al.* (1982). A tabela 5.6 apresenta as respostas das análises em termos de pressão, dada em Pascal (Pa), para pontos situados sobre uma linha horizontal passando pela fonte e a tabela 5.7, a comparação entre as respostas para pontos na horizontal e na vertical, correspondentes a uma frequência de 40Hz.

raio (m)	picos de pressão sonora (Pa)					
	f=62,5Hz	f=50Hz	f=40Hz	f=25Hz	analítico	
2,0	0,967	1,020	1,080	1,100	1,194	
4,0	0,544	0,562	0,579	0,582	0,597	
6,0	0,377	0,384	0,389	0,392	0,398	
8,0	0,282	0,289	0,292	0,295	0,298	
10,0	0,228	0,233	0,234	0,237	0,239	
12,0	0,191	0,194	0,194	0,198	0,199	
14,0	0,164	0,166	0,167	0,170	0,171	
16,0	0,142	0,144	0,145	0,149	0,149	
18,0	0,127	0,128	0,130	0,132	0,133	
20,0	0,114	0,115	0,117	0,119	0,119	
22,0	0,102	0,106	0,108	0,109	0,109	

Tabela 5.6: Valores de pico de pressão sonora para pontos na horizontal.



Figura 5.23: Picos de pressão sonora para as várias frequências.

raio (m)	pice	os de pressão sonora ((Pa)
	horizontal	vertical	analítico
2,0	1,080	0,847	1,194
4,0	0,579	0,471	0,597
6,0	0,389	0,337	0,398
8,0	0,292	0,267	0,298
10,0	0,234	0,220	0,239
12,0	0,194	0,194	0,199
14,0	0,167	0,166	0,171
16,0	0,145	0,148	0,149
18,0	0,130	0,130	0,133
20,0	0,117	0,119	0,119
22,0	0,108	0,106	0,109

Tabela 5.7: Comparação entre valores de pico de pressão - f=40hz.



Figura 5.24: Picos de pressão sonora para a frequência de 40Hz.

De modo a obter uma eficiente malha de discretização do espaço semi-infinito foram realizados diversos testes de truncamento. Entende-se por malha eficiente aquela que apresenta resposta próxima à resposta analítica e ao mesmo tempo menor espaço de discretização. Diferentes frequências de excitação para a fonte foram adotadas e pode-se observar que para frequências menores a resposta comporta-se de modo mais aproximado à solução analítica (tabela 5.6). Isto se justifica pelo fato do período de onda gerada ser inversamente proporcional à frequência da fonte. Assim, quanto menor a frequência da fonte menor a defasagem entre a onda gerada e a onda refletida pelo anteparo. Chama-se a atenção para a estratégia adotada nesta análise para a simulação da fonte concentrada, a qual, em virtude da formulação 3D, pode ser facilmente simulada através de cavidades no meio de formas geométricas quaisquer. Nota-se que em função das dimensões exíguas, precisa-se de apenas poucos elementos para a modelagem desses tipos de fonte. No problema em questão, adotou-se uma cavidade cúbica. Como vê-se, de posse da tabela 5.6 e gráfico 5.23, as respostas calculadas com o módulo de acústica desenvolvido e com a correspondente expressão analítica coincidem satisfatoriamente bem. A pequena diferença observada para os receptores localizados nas proximidades da fonte justifica-se pela influência da geometria da fonte, que no caso não é perfeitamente pontual (situação idealizada).

Exemplo 7:

Com o objetivo de verificar o algoritmo de acoplamento EC/EC aplicado a problemas acústicos, a distribuição de pressão sonora causada por uma fonte de energia acústica, na ausência, e também na presença, de uma barreira infinita sem espessura de altura $h_b = 5,0m$, é analisada. As ondas acústicas são irradiadas por uma superfície pulsante harmonicamente localizada a uma altura $h_f = 1,5m$, a uma distância d = 3,0m da barreira, cuja componente normal da velocidade da partícula é dada por $v_n(t) = v_0 \sin(\omega t)$, com $v_0 = 0,31 \text{ m/s}$ e frequência de excitação f = 63Hz. As constantes físicas, considerando-se o ar como o meio de propagação das ondas, são: velocidade do som c = 340,0 m/s e densidade de equilíbrio $\rho_0 = 1,21 \text{Kg/m}^3$ (a 20 °C).



Figura 5.25: Barreira sonora infinita.

As correspondentes ondas acústicas têm comprimento $\lambda = 5,397 \text{ m}$ e a malha de contorno foi estabelecida tal que tenha aproximadamente 4 elementos (quadráticos de 8 nós) por comprimento de onda. Para a inclusão da barreira no modelo foram consideradas 2 subregiões, sendo necessárias malhas de elementos de fechamento (*enclosing elements*) para a simulação do meio infinito dos respectivos subdomínios. As duas malhas de elementos de contorno têm um total de 1944 nós e as malhas de *enclosing elements* têm um total de 842 nós.


Figura 5.26: Malhas de elementos de contorno e de enclosing elements.

O passo de tempo adotado para a realização da análise no domínio do tempo foi determinado observando-se o período T da onda e o coeficiente β . A idéia relacionada à escolha do passo de tempo Δt é tal que este não deva ser tão longo comparado ao período da onda e o correspondente coeficiente β não deva ser muito diferente da unidade. Para a análise deste problema, um passo de tempo dado por $\Delta t = 2,0 \times 10^{-3}$ s, que corresponde aproximadamente a um oitavo do período de onda e a um $\beta = 0,36$, foi escolhido. Os resultados, em termos do nível de pressão sonora (*sound pressure level* - SPL), obtidos no plano vertical que passa pela fonte e pelos receptores para alguns instantes de tempo estão mostrados nos gráficos das figuras 5.27-5.32.

Figura 5.27: SPL no tempo $t = 20 \Delta t = 0.04 s$ na ausência de barreira sonora.

Figura 5.28: SPL no tempo $t = 20 \Delta t = 0.04 s$ na presença de barreira sonora.

Figura 5.29: SPL no tempo $t = 40 \Delta t = 0,08 s$ na ausência de barreira sonora.

Figura 5.30: SPL no tempo $t = 40 \Delta t = 0.08 s$ na presença de barreira sonora.

Figura 5.31: SPL no tempo $t = 60 \Delta t = 0,12 s$ na ausência de barreira sonora.

Figura 5.32: SPL no tempo $t = 60 \Delta t = 0,12 s$ na presença de barreira sonora.

Mostra-se, a seguir, na figura 5.33, os resultados em termos da perda por inserção (insertion loss - IL) medida nos pontos receptores localizados a uma altura $h_r = 1,5m$ acima do chão, atrás da barreira.



Figura 5.33: Diminuição do nível de pressão devida à presença da barreira.

O problema mostrado neste exemplo foi resolvido empregando-se *solver* direto – baseado na decomposição não-simétrica LU - e também *solver* iterativo – gradiente biconjugado pré-condicionado. A comparação entre os tempos atingidos na resolução do sistema de equações do problema empregando-se cada um dos *solvers* está mostrada na figura 5.34.



Figura 5.34: Tempo de resolução do sistema algébrico.

Observando-se os gráficos das figuras 5.27-5.32, que mostram a distribuição espacial do nível de pressão sonora em certos instantes de tempo, na ausência e também na presença de uma barreira infinita, pode-se visualizar a eficiência da barreira na redução do ruído na área oposta à fonte acústica em relação à barreira. Salienta-se que não foi possível comparar os resultados obtidos nesta análise com resultados obtidos por outros pesquisadores devido à dificuldade de encontrá-los na literatura técnica disponível. Para assegurar a qualidade dos resultados, os módulos computacionais associados foram testados analisando-se um problema similar ao exemplo 6, porém com 2 subdomínios. Neste caso, a resposta analítica do problema é dada por Kinsler *et al.*(1982) e apresentada na figura 5.23. Este problema foi simulado usando-se a malha mostrada na figura 5.26, sem barreira. Os resultados obtidos (e não mostrados aqui) estavam em concordância com a referida solução analítica. Após estas primeiras análises, a barreira foi então introduzida e os resultados obtidos são os mostrados nas figuras 5.27–5.32. Deve ser observado que a fonte sonora foi simulada por um cubo.

Para melhor informar sobre a eficiência da barreira, a curva de perda por inserção da barreira (IL) é mostrada na figura 5.33. Como se pode ver, a barreira é bastante eficiente, principalmente para os pontos mais próximos a ela, onde os maiores valores de redução de ruído foram observados.

O gráfico da figura 5.34 relaciona-se à eficiência computacional do algoritmo e, quanto ao comportamento do gráfico, vale a mesma explicação dada para o exemplo 4.

Capítulo 6

Conclusões

6.1. Conclusões

Uma série de problemas envolvendo condução de calor e irradiação de ondas acústicas foi analisada visando verificar os módulos computacionais implementados sob o aspecto de observação tanto da qualidade de resposta (se precisas ou não) como também sob o aspecto de desempenho dos algoritmos propostos. Comparando-se os resultados obtidos via algoritmos desenvolvidos no âmbito do trabalho com resultados analíticos e/ou numéricos fornecidos por outros pesquisadores, pode-se concluir que há uma boa concordância entre ambas respostas.

O algoritmo de marcha no tempo, necessário para a análise de problemas de difusão e problemas acústicos transientes, apresenta aspecto comum em ambas as classes de problemas, ou seja, os algoritmos para a consideração da variação temporal das variáveis destes problemas são idênticos. Menciona-se que o passo de tempo adotado no esquema de marcha no tempo deve ser escolhido conforme critérios que, geralmente, estabelecem uma relação entre a discretização espacial e temporal do problema. Para análises acústicas, o critério apresentado neste trabalho, também já adotado por outros autores, proporcionou bons resultados. Para problemas de difusão pode-se ter uma maior liberdade na escolha de Δt , pois as respectivas respostas no tempo apresentam-se normalmente bem comportadas quanto a questões de instabilidade numérica. Ressaltase, porém, que muito embora o valor adotado para Δt não comprometa a estabilidade numérica do processo nesta classe de problemas, este parâmetro pode comprometer a precisão das respostas.

Em problemas de difusão, quando da avaliação analítica das integrais temporais, há o surgimento de funções Gamma incompletas. O algoritmo desenvolvido para a avaliação destas funções forneceu resultados muito precisos se comparados aos resultados fornecidos pelas rotinas IMSL, usualmente disponíveis em compiladores FORTRAN.

Na formulação direta do método dos elementos de contorno há o surgimento de integrais singulares. Devido ao fato das integrais fortemente singulares serem divergentes no sentido riemanniano, hão de ser avaliadas de forma indireta. Para isso recorreu-se ao critério de potencial constante, que pôde ser satisfatoriamente aplicado tanto para problemas acústicos quanto para problemas de difusão. Em função das integrais fracamente singulares deve-se considerar procedimentos especiais de integração de modo a melhorar a eficiência da quadratura padrão de Gauss empregada nas avaliações. O procedimento especial associado às integrais de volume não proporcionou significativo aumento de precisão para o tipo de problema analisado, uma vez que neste caso a singularidade é muito fraca.

Neste trabalho, fez-se uma primeira aplicação do algoritmo de acoplamento multidomínio a problemas transientes. Como os problemas analisados eram lineares, o algoritmo de acoplamento que baseava-se no esquema de decomposição LU apresentou melhor desempenho. Infere-se, todavia, que para problemas de grande ordem (modelos bem maiores que os considerados aqui) o esquema de acoplamento proposto neste trabalho (baseado nos *solvers* iterativos) possa ter melhor desempenho, uma vez que nestes casos a decomposição passa a consumir muito tempo de processamento, além de exigir bem mais espaço de memória que o primeiro esquema. Melhoramentos do esquema iterativo deverão ainda ser incluído em pesquisas futuras, de modo que esperase que, mesmo para modelos pequenos, como os analisados neste trabalho, este apresente melhor desempenho. O algoritmo proposto também adequa-se perfeitamente para o desenvolvimento de programas computacionais que operem ambientes de processamento paralelo.

6.2. Aspectos Futuros

Abaixo enumeram-se alguns tópicos importantes para a continuação desta pesquisa:

- Idealização de estratégias para a aproximação da inversa, o que deverá aumentar mais ainda a eficiência do esquema de subestruturação baseada nos *solvers* iterativos para análises transientes;
- Implementação de elemento descontínuo na formulação de acoplamento, para facilitar a consideração de condições de acoplamento em nós comuns a mais de duas interfaces;
- Aplicação da estratégia de acoplamento a problemas termo ou poroelásticos transientes (quasi-estáticos e fisicamente acoplados);
- Consideração das opções de análise para a simulação de problemas tridimensionais de contato unilateral;
- 5. Simulações de molas acústicas;
- Utilização de recursos de paralelização nos módulos desenvolvidos para análises no domínio do tempo;
- 7. Introduzir critério de convergência da resposta para problemas de difusão;
- Introduzir critério de truncamento para cálculo das matrizes de elementos de contorno em problemas de difusão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Araújo, F. C. (1989). *Técnicas iterativas para resolução de sistemas de equações lineares originados do método dos elementos de contorno*. Dissertação de Mestrado, COPPE – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

Araújo, F. C. and Martins, C. J. (2001). A Study of efficiency of multizone BE/BE coupling algorithms based on iterative solvers - applications to 3D time-harmonic problems. In M. Denda, M. H. Aliabadi & A. Charafi (eds.), Proc. Joint Meeting of Boundary Element Techniques and International Association for Boundary Elements, New Brunswick–NJ–USA, 16–18 July 2001. Advances in Boundary Element Techniques II. Geneva: Hoggar, v.1. p.21-29.

Araújo, F. C., Mansur, W. J. and Carrer, J. A. M. (2000) Time-domain three dimensional analysis. In: Boundary Element Acoustics – Fundamentals and Computer Codes, ed. T.W. Wu, Computacional Mechanics Inc., London, p.159–216.

Araújo, F. C., Martins, C. J. and Mansur, W. J. (2001). An efficient BE iterative-solverbased substructuring algorithm for 3D time-harmonic problems in elastodynamics. Engineering Analysis with Boundary Elements.

Banerjee, P. K. (1994). *The Boundary Element Methods in Engineering*. McGraw-Hill, London.

Beer, G. and Watson, J. O. (1992). *Introduction to Finite and Boundary Element Methods for Engineers*. John Wiley and Sons, New York.

Brebbia, C. A. and Dominguez, J. (1987). Boundary Elements – An Introduction Course. McGraw-Hill.

Brebbia, C. A., Telles, J. C. F. and Wrobel, L. C. (1984). *Boundary Element Techniques*. Springer Verlag, Berlin.

Carslaw, H. S., and Jaeger, J. C. (1959). *Conduction of Heat in Solids*, 2nd ed. Claredon Press, Oxford.

Chen, G. and Zhou, J. (1992). Boundary Element Methods. Academic Press Limited

Cook, R. D., Malkus, D. S. and Plesha, M. E. (1989). *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*, John Wiley and Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore.

Courant, R. and Hilbert, D. (1968). *Methoden der Mathematischen Physik II*, Springer-Verlag, Berlin.

Dors, C. (2002). Paralelização de algoritmos MEC via subestruturação baseada em solvers iterativos – Aplicação a problemas 3D escalares e vetoriais. Dissertação de Mestrado, Dept^o Engenharia Civil, Universidade Federal de Ouro Preto.

Hackbusch, W. (1989). Integralgleichungen: Theorie und Numerik, B. G. Teubner Stuttgart.

Hackbusch, W. (1991). *Iterative Lösung Grosser Schwachbesetzter Gleichungssysteme*. B. G. Teubner Stuttgart.

Hageman, L. A. and Young, D. M. (1981). *Applied Iterative Methods*. Academic Press, Inc..

Kane, J. H. (1992). Boundary Element Analysis in Engineering Continuum Mechanics. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

Kinsler, L. E., Frey, A. R., Coppens, A. B. and Sanders, J. V. (1982). *Fundamentals of Acoustics*, 3rd ed. John Wiley and Sons, Singapore.

Mang, H., Li, H. and Han, G. (1985). A new method for evaluating singular integrals in stress analysis of solids by the direct BEM, Int. J. Num. Methods in Eng., 21, pp. 2071-2098.

Mansur, W. J. and Brebbia, C. A. (1982). *Numerical implementation of the boundary element method for two-dimensional transient scalar wave propagation problems*, Appl. Math. Modelling, 6, pp. 299-306.

Mansur, W. J., Araújo, F. C. and Malaghini, J. E. B. (1992). *Solution of BEM systems of equations via iterative techniques*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 33, 1823-1841.

Martins, C. J. (2000). Análise de problemas 3D no domínio da freqüência via processo de acoplamento multidomínio BE/BE. Dissertação de Mestrado, Dept^o Engenharia Civil, Universidade Federal de Ouro Preto.

Morse, P. M., and Feshbach, H. (1953). *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York.

Tanaka, T., Sladek, V. and Sladek, J. (1994). *Regularization procedures applied to boundary element methods*, Appl. Mech. Rev., 47, pp. 457 -499.

Telles, J. C. F. (1987). A self-adaptive coordinate transformation for efficient numerical evaluation of general boundary element integrals, Int. J. Num. Methods in Eng., 24, pp. 959-937.

Widder, V. D. (1946). The Laplace Transform. Princeton University Press, Princeton.

Wilkinson, J. H. (1965). The Algebraic Eingenvalue Problem. Claredon Press, Oxford.

Wrobel, L. C. (1981). *Potential and Viscous Flow Problems Using The Boundary Element Method*. Ph.D. thesis, University of Southampton.