Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica

PME5425 – Métodos de Elementos Finitos de Alta Ordem com Aplicações em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
2º termo / 2017 – Professor: Bruno Souza Carmo

# Lista de Exercícios 4

**1.** Faça a seção 3.2 do tutorial de integração, disponível em `http://doc.nektar.info/tutorials/latest/fundamentals/integration/fundamentals-integration.html`.

**2.** Usando o Nektar++:

a) Integre numericamente $u(\xi_1, \xi_2) = [\xi_1]^6 \times [\xi_2]^6$ no domínio padrão quadrangular, ou seja,

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} u(\xi_1,\xi_2)\,\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 = \sum_{i=0}^{Q-1}\sum_{j=0}^{Q-1} w_i w_j u(\xi_{1i},\xi_{2j}) = \frac{4}{49},$$

usando a quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre em ambas as direções, $\xi_1$ e $\xi_2$, com $Q = 4$, 5 e 6.

b) Integre numericamente $u(\xi_1, \xi_2) = [\xi_1]^6 \times [\xi_2]^6$ no domínio padrão triangular, ou seja,

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{-\xi_2} u(\xi_1,\xi_2)\,\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} u(\eta_1,\eta_2)\frac{1-\eta_2}{2}\,\mathrm{d}\eta_1\mathrm{d}\eta_2 = \sum_{i=0}^{Q-1}\sum_{j=0}^{Q-1} w_i w_j u(\eta_{1i},\eta_{2j}) = \frac{2}{49},$$

onde $\eta_1 = 2(1+\xi_1)/(1-\xi_2) - 1$ e $\eta_2 = \xi_2$, usando a quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre na direção $\eta_1$ e e a quadratura de Gauss–Radau–Legendre (incluindo o ponto $\eta_2 = -1$) na direção $\eta_2$, com $Q = 4$, 5 e 6. Note que o fator $(1-\eta_2)/2$ poderia também ser incorporado na integração usando a quadratura de Gauss–Radau–Jacobi–(1,0).

c) Considere um elemento quadrilateral de lados retos genérico, $\Omega^e$, cujos vértices são $(x_1^A, x_2^A) = (0,0)$, $(x_1^B, x_2^B) = (1,0)$, $(x_1^C, x_2^C) = (2,1)$ e $(x_1^D, x_2^D) = (0,1)$. Integre numericamente $u(x_1, x_2) = [x_1]^6 \times [x_2]^6$, isto é,

$$\int_{\Omega^e} u(x_1,x_2)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \int_{\Omega_{\mathrm{st}}} u(\xi_1,\xi_2)|J|\,\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 = \sum_{i=0}^{Q-1}\sum_{j=0}^{Q-1} w_i w_j u(\xi_{1i},\xi_{2j})|J(\xi_{1i},\xi_{2j})|,$$

usando quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre em ambas as direções, $\xi_1$ e $\xi_2$, com $Q = 4$, 5 e 6. Será necessário determinar o mapeamento local $\chi_i(\xi_1, \xi_2)$ e calcular o seu jacobiano. Para este caso o jacobiano pode ser calculado analiticamente ou numericamente usando as técnicas de diferenciação discutidas. Note também que $u(\xi_1, \xi_2) = [\chi_1(\xi_1, \xi_2)]^6 \times [\chi_2(\xi_1, \xi_2)]^6$.

d) Considere um elemento triangular de lados retos genérico, $\Omega^e$, com vértices $(x_1^A, x_2^A) = (1,0)$, $(x_1^B, x_2^B) = (2,1)$ e $(x_1^C, x_2^C) = (1,1)$. Integre numericamente $u(x_1, x_2) = [x_1]^6 \times$

$[x_2]^6$, isto é,

$$\int_{\Omega^e} u(x_1,x_2)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \int_{\Omega_{\mathrm{st}}} u(\eta_1,\eta_2)\frac{1-\eta_2}{2}|J|\,\mathrm{d}\eta_1\mathrm{d}\eta_2 =$$
$$\sum_{i=0}^{Q-1}\sum_{j=0}^{Q-1} w_i w_j u(\xi_{1i},\xi_{2j})\frac{1-\eta_2}{2}|J(\xi_{1i},\xi_{2j})|,$$

usando a quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre na direção $\eta_1$ e e a quadratura de Gauss–Radau–Legendre (incluindo o ponto $\eta_2=-1$) na direção $\eta_2$, com $Q=4$, 5 e 6. Como no item anterior, será necessário determinar o mapeamento local $\chi_i(\xi_1,\xi_2)$ e calcular o seu jacobiano.

e) Usando os domínios elementares definidos nos itens c) e d), calcule $\mathcal{I}=\int_{\Omega^e}\operatorname{sen} x_1 \operatorname{sen} x_2\,\mathrm{d}\mathbf{x}$ para $2\le Q\le 8$ e plote o erro, $\varepsilon$, entre a solução exata e a aproximada numérica em função de $Q$ num gráfico monolog. Espera-se que o erro seja proporcional a $C^Q$, onde $C$ é uma constante, e portanto que o gráfico traçado se aproxime de uma reta.

**3.** Construa a matriz de massa elementar, $\mathbf{M}^e$, para uma expansão modal $C^0$ definida num quadrilátero, $\phi_{pq}(\xi_1,\xi_2)=\psi_p^a(\xi_1)\psi_q^a(\xi_2)$ de ordem $P_1=P_2=P$. Comece gerando um vetor contendo cada um dos componentes das bases tensoriais unidimensionais, $\psi_p^a(\xi_1)$ e $\psi_q^a(\xi_2)$, avaliados num conjunto de pontos discretos, $\xi_{1i}$ e $\xi_{2j}$. Tipicamente, só é necessário calcular o valor da aproximação nos pontos de quadratura. Como a ordem do polinômio é a mesma em ambas ass direções, podemos também fixar a ordem da quadratura em ambas as direções e fazê-la iguala a $Q_1=Q_2=Q$ Dependendo do tipo de regra de quadratura de Gauss adotada, podemos definir $Q$ de modo que a integral calculada seja exata.Por exemplo, se utilizarmos integração de Gauss–Lobatto–Legendre, ao escolhermos $Q=P+2$ faremos com que cada um dos elementos da matriz elementar de massa seja integrada de forma exata. Definimos então dois vetores bidimensionais base1$[p][i]$ e base2$[q][j]$ para $0\le p,q\le P, 0\le i,j<Q$ tal que,

$$\mathrm{base1}[p][i] = \psi_p^a(\xi_{1i}),$$
$$\mathrm{base2}[q][j] = \psi_q^a(\xi_{2j}).$$

Se usarmos a mesma regra de quadratura em ambas as direções, então os dois vetores base1$[p][i]$ e base2$[q][j]$ serão idênticos e somente um deles precisa ser definido. A matriz de massa pode ser então gerada da seguinte forma:

$$\mathbf{M}^e[n(p,q)][m(r,s)] = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\phi_{pq}(\xi_1,\xi_2)\phi_{rs}(\xi_1,\xi_2)\,\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 =$$
$$\int_{-1}^{1}\psi_p(\xi_1)\psi_q(\xi_1)\,\mathrm{d}\xi_1 \times \int_{-1}^{1}\psi_q(\xi_2)\psi_s(\xi_2)\,\mathrm{d}\xi_2 =$$
$$\left[\sum_{i=0}^{Q-1} w_i \mathrm{base1}[p][i]\mathrm{base1}[r][i]\right] \times \left[\sum_{j=0}^{Q-1} w_j \mathrm{base2}[q][j]\mathrm{base2}[s][j]\right],$$

onde $w[i]=w_i^{0,0}$ e $w[j]=w_j^{0,0}$ são os pesos de quadratura. Na operação acima, $n(p,q)$ e $m(r,s)$ denotam um mapeamento de um par de índices unidimensionais $(p,q)$ e $(r,s)$ para uma numeração simples e única que representa a localização de cada modo bidimensional na matriz $\mathbf{M}^e$. Há muitas maneiras de numerar os modos e um esquema bastante direto pode ser construído com as expressões:

$$n(p,q) = p \times (P+1) + q, \qquad m(r,s) = r \times (P+1) + s.$$

Um esquema alternativo, também bastante comum, consiste em numerar os modos de fronteira antes dos modos de interior.

a) Construa a matriz de massa bidimensional $\mathbf{M}^e$ de $N_m = (P+1)^2$ elementos para $P = 7$, $Q = 9$ utilizando a base modal $C^0$ e plote a estrutura da matriz.

b) Construa a matriz de massa $\mathbf{M}^e$ para a base ortogonal utilizando polinômios de Legendre, com $P = 7$, $Q = 9$. Lembre-se que este exercício deve resultar uma matriz diagonal.

c) Construa a matriz de massa para a base nodal (que utiliza polinômios de Lagrange) $\phi_{pq}(\xi_1, \xi_2) = h_p(\xi_1)h_q(\xi_2)$. Neste caso a matriz será 'discretamente' ortogonal quando $Q = P + 1$. Para observar esta característica, gere a matriz para $P = 7$, $Q = 9$ e $P = 7$, $Q = 8$.

**4.** Construa a matriz de massa elementar, $\mathbf{M}^e$, para uma expansão modal $C^0$ definida num triângulo, $\phi_{pq}(\xi_1, \xi_2) = \psi_p^a(\eta_1)\psi_{pq}^b(\eta_2)$. Usando o sistema de coordenadas colapsado, esta matriz pode ser calculada da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^e[n(p,q)][m(r,s)] = &\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{-\xi_2} \phi_{pq}(\xi_1,\xi_2)\phi_{rs}(\xi_1,\xi_2)\,\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 = \\ &\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \psi_p^a(\eta_1)\psi_{pq}^b(\eta_2)\psi_r^a(\eta_1)\psi_{rs}^b(\eta_2)\left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)\mathrm{d}\eta_1\mathrm{d}\eta_2 = \\ &\int_{-1}^{1} \psi_p^a(\eta_1)\psi_r(\eta_1)\,\mathrm{d}\eta_1 \times \int_{-1}^{1} \psi_{pq}^b(\eta_2)\psi_{rs}^b(\eta_2)\left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)\mathrm{d}\eta_2,\end{aligned}$$

onde

$$\eta_1 = \frac{2(1+\xi_1)}{1-\xi_2} - 1, \qquad \eta_2 = \xi_2.$$

Utilizando o tipo de quadratura de Gauss–Jacobi apropriado para absorver o fator $(1-\eta_2)/2$ nos pesos da quadratura, obtemos os zeros, $\xi_i^{1,0}$ e pesos $w_i^{1,0}$. Assim como no exercícios anterior, calculamos dois vetores, base1$[p][q]$ e base2$[p][q][j]$, para $0 \le p, q \le P$, $0 \le i, j < Q$, tal que

$$\begin{aligned}\text{base1}[p][i] &= \psi_p^a(\xi_{1i}^{0,0}), \\ \text{base2}[p][q][j] &= \psi_{pq}^b(\xi_{2j}^{1,0}).\end{aligned}$$

Lembre-se que o vetor base2$[p][q][j]$ não precisa ter todos os elementos porque somente alguns dos seus componentes são necessários para calcular bases completetas $\phi_{pq}(\xi_1, \xi_2) = \psi_p^a(\eta_1)\psi_{pq}^b(\eta_2)$. Tendo construídos os vetores base1$[p][i]$ e base2$[p][q][j]$, podemos construir a matriz de massa,

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^e[n(p,q)][m(r,s)] = &\int_{-1}^{1} \psi_p^a(\eta_1)\psi_r(\eta_1)\,\mathrm{d}\eta_1 \times \int_{-1}^{1} \psi_{pq}^b(\eta_2)\psi_{rs}^b(\eta_2)\left(\frac{1-\eta_2}{2}\right)\mathrm{d}\eta_2 = \\ &\left[\sum_{i=0}^{Q-1} w_1[i]\text{base1}[p][i]\text{base1}[r][i]\right] \times \left[\sum_{j=0}^{Q-1} w_2[j]\text{base2}[p][q][j]\text{base2}[r][s][j]\right],\end{aligned}$$

onde $w_1[i] = w_i^{0,0}$ e $w_2[j] = w_j^{1,0}/2$. Diferentemente do caso da expansão em quadrilátero, não existe uma forma fechada de obter uma relação entre os índices $n(p,q)$ e $m(r,s)$. É também necessário ter atenção na forma especial de considerar a contribuição do vértice colapsado.

a) Construa a matriz de massa bidimensional $\mathbf{M}^e$ de $N_m = (P+1)(P+2)/2$ elementos para $P = 14$, $Q = 16$ e plote a estrutura da matriz. É preciso construir o código de forma que os índices $q$ e $s$ corram em laços mais internos do que os índices $p$ e $r$ para que a matriz tenha uma estrutura semi-ortogonal.

b) Construa a matriz de massa $\mathbf{M}^e$ para a base ortogonal utilizando polinômios de Legendre, $\phi_{pq}(\xi_1,\xi_2) = \tilde{\psi}^a_p(\eta_1)\tilde{\psi}^b_{pq}(\eta_2)$ com $P = 14$, $Q = 16$. Lembre-se que este exercício deve resultar uma matriz diagonal.

**5.** Faça a seção 3.2 do tutorial de diferenciação, disponível em `http://doc.nektar.info/tutorials/latest/fundamentals/differentiation/fundamentals-differentiation.html`.

**6.** Com o Nektar++, construa a matriz de diferenciação unidimensional para os zeros da regra de quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre, $D[i][j]$. Utilizando esta matriz,

a) Calcule a derivada da função $u(\xi_1,\xi_2) = [\xi_1]^7 \times [\xi_2]^6$ na região padrão quadrilateral usando os pontos da quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre $\xi_{1i}$, $\xi_{2j}$, isto é,

$$\frac{\partial u}{\partial \xi_1}(\xi_{1i},\xi_{2j}) = [\xi_{2j}]^6 \sum_{k=0}^{Q_1-1} D[i][k](\xi_{1k})^7 = 7[\xi_{1i}]^6 \times [\xi_{2j}]^6,$$

$$\frac{\partial u}{\partial \xi_2}(\xi_{1i},\xi_{2j}) = [\xi_{1i}]^7 \sum_{k=0}^{Q_2-1} D[i][k](\xi_{2k})^6 = [\xi_{1i}]^7 \times 6[\xi_{2j}]^5.$$

Use $Q_1 = Q_2 =$6, 7, 8 e 9 e verifique quantos pontos de quadratura são necessários para que se tenha uma resposta exata dentro da precisão numérica do computador.

b) Calcule a derivada da função $u(\xi_1,\xi_2) = [\xi_1]^7 \times [\xi_2]^6$ na região padrão triangular usando os pontos da quadratura de Gauss–Lobatto–Legendre na direção $\xi_1$ e os pontos da quadratura de Gauss–Radau–Legendre na direção $\xi_2$. Este item é similar ao anterior, mas aqui é preciso diferenciar com relação ao sistema de coordenadas local colapsado $(\eta_1,\eta_2)$ ao invés do sistema de coordenadas cartesiano, e aplicar a regra da cadeia, isto é,

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial \xi_1} \\ \dfrac{\partial}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{2}{1-\eta_2}\dfrac{\partial}{\partial \eta_1} \\ 2\dfrac{1+\eta_1}{1-\eta_2}\dfrac{\partial}{\partial \eta_1} + \dfrac{\partial}{\partial \eta_2} \end{pmatrix}.$$

Use $Q_1 = Q_2 =$6, 7, 8 e 9 e verifique quantos pontos de quadratura são necessários para que se tenha uma resposta exata dentro da precisão numérica do computador.

c) Considere um elemento quadrilateral de lados retos $\Omega^e$ cujos vértices são $(x_1^A, x_2^A) = (0,0)$, $(x_1^B, x_2^B) = (1,0)$, $(x_1^C, x_2^C) = (2,1)$ e $(x_1^D, x_2^D) = (0,1)$. Definindo um mapeamento linear $x_i = \chi_i(\boldsymbol{\xi})$ e usando a regra da cadeia, calcule $\partial u/\partial x_1$ e $\partial u/\partial x_2$ nos pontos de quadratura de $\Omega^e$ sendo $u(x_1,x_2) = [x_1]^7 \times [x_2]^6$. Avalie o erro no cálculo numérico das derivadas parciais para $Q_1 = Q_2 =$6, 7, 8 e 9.

d) Repita o item anterior para um elemento triangular de lados retos, $\Omega^e$, cujos vértices são $(x_1^A, x_2^A) = (1, 0)$, $(x_1^B, x_2^B) = (2, 1)$ e $(x_1^C, x_2^C) = (1, 1)$.

e) Para o elemento quadrilateral do item c) e para o elemento triangular do item d) calcule

$$\mathcal{I} = -\int_{\Omega^e} \left[ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1} \cos(x_1 + x_2) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_2} \cos(x_1 + x_2) \right] \mathrm{d}\mathbf{x}$$

para $2 \leq Q \leq 8$ e trace um gráfico monolog do erro desta integral em função de $Q$.

**7.** A matriz laplaciana elementar $\mathbf{L}^e$ é definida da seguinte forma:

$$\mathbf{L}^e[m(pq)][n(rs)] = \int_{\Omega^e} \nabla \phi_{pq} \cdot \nabla \phi_{rs} \, \mathrm{d}\mathbf{x},$$

$$\mathbf{L}^e = (\mathbf{D}^e_{x1} \mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{D}^e_{x1} \mathbf{B}^e + (\mathbf{D}^e_{x2} \mathbf{B}^e)^\top \mathbf{W}^e \mathbf{D}^e_{x2} \mathbf{B}^e,$$

onde

$$\mathbf{D}^e_{x1} = \mathbf{\Lambda}^e \left( \frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \right) \mathbf{D}^e_{\xi_1} + \mathbf{\Lambda}^e \left( \frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \right) \mathbf{D}^e_{\xi_2},$$

$$\mathbf{D}^e_{x2} = \mathbf{\Lambda}^e \left( \frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \right) \mathbf{D}^e_{\xi_1} + \mathbf{\Lambda}^e \left( \frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \right) \mathbf{D}^e_{\xi_2}.$$

Utilizando o Nektar++:

a) Gere a matriz laplaciana elementar $\mathbf{L}^e$ para o elemento padrão quadrangular $\Omega_{\mathrm{st}}$ usando a expansão modal modificada $C^0$, $\phi_{pq} = \psi_p^a \psi_q^a$ com $P_1 = P_2 = 14$ e pontos de quadratura suficientes para integração exata. Monte a matriz de forma que os graus de liberdade do contorno estejam listados primeiro, seguidos pelos graus de liberdade do interior. Plote a estrutura da matriz.

b) Gere a matriz laplaciana elementar $\mathbf{L}^e$ para o elemento padrão triangular $\Omega_{\mathrm{st}}$ usando a expansão modal modificada $C^0$, $\phi_{pq} = \psi_p^a \psi_{pq}^b$ com $P_1 = P_2 = 14$ e pontos de quadratura suficientes para integração exata. Monte a matriz de forma que os graus de liberdade do contorno estejam listados primeiro, seguidos pelos graus de liberdade do interior. Plote a estrutura da matriz.