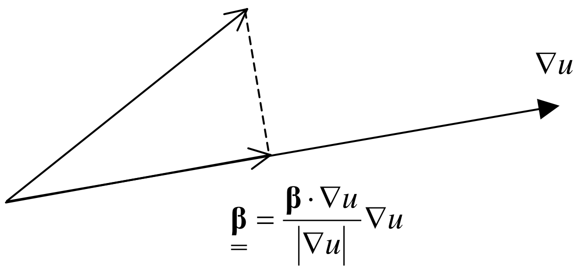

Figura 2.2 – Componente da velocidade na direção paralela ao gradiente da solução.

2.4 Formulação Matricial de Elementos Finitos

Como a intenção é resolver problemas tridimensionais, foi adotado e implementado o elemento tetraedro linear pela sua versatilidade na construção de malhas não estruturadas, em geral descrevendo muito bem geometrias complexas. A dedução de suas funções de interpolação **N**, no elemento, baseadas nas suas coordenadas de volume, e de seu operador gradiente discreto **B**, se encontram no Apêndice A e as matrizes que os representam nas equações (2.30) e (2.31).

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & N_2 & N_3 & N_4 \end{bmatrix} \tag{2.30}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \mathbf{N} = \begin{bmatrix} BI & BJ & BK & BL \\ CI & CJ & CK & CL \\ DI & DJ & DK & DL \end{bmatrix} \tag{2.31}$$

Sendo assim, a interpolação padrão da função escalar candidata u é

$$u^h = \sum_{i=1}^{NNOS} N_i u_i \tag{2.32}$$

sendo $NNOS$ o número total de nós da malha de elementos finitos.

Substituindo-se a aproximação de elementos finitos de (2.21) em (2.32), obtém-se a formulação semidiscreta, que nada mais é que um sistema não linear de equações diferenciais ordinárias.

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{C}(\mathbf{u}) = \mathbf{F} \tag{2.33}$$

ou ainda,

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}(\mathbf{u})\mathbf{u} = \mathbf{F} \tag{2.34}$$

onde $\mathbf{K}(\mathbf{u})\mathbf{u}$ é uma aproximação de primeira ordem da função vetorial não linear $\mathbf{C}(\mathbf{u})$. Ao se introduzir o algoritmo de integração no tempo, no próximo capítulo, ter-se-á um sistema global de equações algébricas, associado a essa formulação semidiscreta, a ser resolvido em cada passo de tempo. Obtendo-se finalmente a solução aproximada para o problema posto em (2.1).

As matrizes globais **M** e **K** dadas em (2.30) são construídas através do *assembling* de todos os elementos da malha de elementos finitos, representado em (2.35) e (2.37), sendo A o operador de *assembling*.

$$\mathbf{M} = \mathop{\mathsf{A}}_{e=1}^{NEL}(\mathbf{m}^{\mathbf{e}}) \tag{2.35}$$

$$\mathbf{m}^{\mathbf{e}} = \mathbf{m}_{\mathbf{g}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{m}_{\mathbf{pg}}^{\mathbf{e}} \tag{2.36}$$

$$\mathbf{K} = \mathop{\mathsf{A}}_{e=1}^{NEL}(\mathbf{k}^{\mathbf{e}}) \tag{2.37}$$

$$\mathbf{k}^{\mathbf{e}} = \mathbf{k}_{\mathbf{dg}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{k}_{\mathbf{dpg}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{k}_{\mathbf{ag}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{k}_{\mathbf{apg}}^{\mathbf{e}} + \mathbf{k}_{\mathbf{opc}}^{\mathbf{e}} \tag{2.38}$$

Os sub-índices **g** e **pg** dizem respeito às parcelas das formulações de Galerkin e Petrov-Galerkin respectivamente e os sub-índices **d**, **a** e **opc** se referem à difusão, advecção e operador de captura de choques, respectivamente. A matriz **M** é usualmente chamada de matriz de massa e a matriz **K** de matriz de rigidez, em analogia à análise de estruturas.

A seguir tem-se o desenvolvimento e obtenção das matrizes de elemento. É importante notar que algumas dessas matrizes têm a propriedade de conservação das funções de interpolação[34], onde os termos da diagonal podem ser obtidos pelo somatório dos termos fora da diagonal para cada linha, com o sinal trocado.

2.4.1 Desenvolvimento das Matrizes do Elemento Tetraedro

- **Matriz de Massa Consistente de Galerkin (simétrica)**

$$\mathbf{m_g^e} = \phi \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \mathbf{N} \, d\Omega^e \tag{2.39}$$

$$\mathbf{m_g^e} = \phi \frac{6\mathrm{V}}{120} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \tag{2.40}$$

- **Matriz de Massa Discreta de Galerkin (simétrica)**

A matriz de massa discreta ou *lumped* é diagonal. Seus termos podem ser obtidos pelo somatório de cada linha da matriz de massa consistente, conforme (2.41).

$$[ml_{g\,ii}^e] = \sum_{j=1}^{4} m_{g\,ij}^e \quad \text{para } i\text{=1,4} \tag{2.41}$$

$$\mathbf{ml_g^e} = \phi \frac{6\mathrm{V}}{24} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.42}$$

- **Matriz de Massa de Petrov-Galerkin, correção SUPG (não simétrica)**

$$\mathbf{m}_{\mathbf{pg}}^{\mathbf{e}} = \tau\phi \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^{\mathbf{T}} \boldsymbol{\beta} \mathbf{N} \, d\Omega^e \tag{2.43}$$

Pode-se verificar que:

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{N} \, d\Omega^e = \frac{6\mathrm{V}}{24} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.44}$$

Substituindo (2.44) em (2.43), tem-se:

$$\mathbf{m}_{\mathbf{pg}}^{\mathbf{e}} = \phi \frac{\tau}{24} \begin{bmatrix} m_{pg}^1 & m_{pg}^1 & m_{pg}^1 & m_{pg}^1 \\ m_{pg}^2 & m_{pg}^2 & m_{pg}^2 & m_{pg}^2 \\ m_{pg}^3 & m_{pg}^3 & m_{pg}^3 & m_{pg}^3 \\ m_{pg}^4 & m_{pg}^4 & m_{pg}^4 & m_{pg}^4 \end{bmatrix} \tag{2.45}$$

onde

$$m_{pg}^1 = BI\beta_x + CI\beta_y + DI\beta_z \tag{2.46}$$

$$m_{pg}^2 = BJ\beta_x + CJ\beta_y + DJ\beta_z \tag{2.47}$$

$$m_{pg}^3 = BK\beta_x + CK\beta_y + DK\beta_z \tag{2.48}$$

$$m_{pg}^4 = BL\beta_x + CL\beta_y + DL\beta_z \tag{2.49}$$

- **Matriz de Difusão de Galerkin (simétrica)**

$$\mathbf{k}_{\mathbf{dg}}^{\mathbf{e}} = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, d\Omega^e \tag{2.50}$$

$$\mathbf{k}_{\mathbf{dg}}^{\mathbf{e}} = \frac{1}{36V}\begin{bmatrix} k_{dg}^{1} & k_{dg}^{5} & k_{dg}^{9} & k_{dg}^{13} \\ & k_{dg}^{6} & k_{dg}^{10} & k_{dg}^{14} \\ & & k_{dg}^{11} & k_{dg}^{15} \\ sim. & & & k_{dg}^{16} \end{bmatrix} \tag{2.51}$$

$$k_{dg}^{5} = BIkxBJ + CIkyCJ + DIkzDJ \tag{2.52}$$

$$k_{dg}^{9} = BIkxBK + CIkyCK + DIkzDK \tag{2.53}$$

$$k_{dg}^{13} = BIkxBL + CIkyCL + DIkzDL \tag{2.54}$$

$$k_{dg}^{1} = -(k_{dg}^{5} + k_{dg}^{9} + k_{dg}^{13}) \tag{2.55}$$

$$k_{dg}^{10} = BJkxBK + CJkyCK + DJkzDK \tag{2.56}$$

$$k_{dg}^{14} = BJkxBL + CJkyCL + DJkzDL \tag{2.57}$$

$$k_{dg}^{6} = -(k_{dg}^{5} + k_{dg}^{10} + k_{dg}^{14}) \tag{2.58}$$

$$k_{dg}^{15} = BKkxBL + CKkyCL + DKkzDL \tag{2.59}$$

$$k_{dg}^{11} = -(k_{dg}^{9} + k_{dg}^{10} + k_{dg}^{15}) \tag{2.60}$$

$$k_{dg}^{16} = -(k_{dg}^{13} + k_{dg}^{14} + k_{dg}^{15}) \tag{2.61}$$

- **Matriz de Difusão de Petrov-Galerkin, correção SUPG**

$$\mathbf{k}_{\mathbf{dpg}}^{\mathbf{e}} = \tau \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\beta} \nabla^2 (\mathbf{DB})\, d\Omega^e \tag{2.62}$$

É interessante notar que a matriz de difusão de Petrov-Galerkin envolve a derivada segunda do operador gradiente discreto **B**, que é constante, pois o elemento tetraedro adotado é linear, então essa matriz é nula.

$$\mathbf{k}_{\mathbf{dpg}}^{\mathbf{e}} = \mathbf{0} \tag{2.63}$$

- **Matriz de Advecção de Galerkin (não simétrica)**

$$\mathbf{k}_{\mathbf{ag}}^{\mathbf{e}} = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^{\mathbf{T}} \boldsymbol{\beta}^{\mathbf{T}} \mathbf{B} \, d\Omega^e \tag{2.64}$$

$$\mathbf{k}_{\mathbf{ag}}^{\mathbf{e}} = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} k_{ag}^{1} & k_{ag}^{5} & k_{ag}^{9} & k_{ag}^{13} \\ k_{ag}^{1} & k_{ag}^{5} & k_{ag}^{9} & k_{ag}^{13} \\ k_{ag}^{1} & k_{ag}^{5} & k_{ag}^{9} & k_{ag}^{13} \\ k_{ag}^{1} & k_{ag}^{5} & k_{ag}^{9} & k_{ag}^{13} \end{bmatrix} \tag{2.65}$$

$$k_{ag}^{1} = BI\beta_x + CI\beta_y + DI\beta_z \tag{2.66}$$

$$k_{ag}^{5} = BJ\beta_x + CJ\beta_y + DJ\beta_z \tag{2.67}$$

$$k_{ag}^{9} = BK\beta_x + CK\beta_y + DK\beta_z \tag{2.68}$$

$$k_{ag}^{13} = BL\beta_x + CL\beta_y + DL\beta_z \tag{2.69}$$

Percebe-se que a matriz de advecção de Galerkin é igual à transposta da matriz de massa de Petrov-Galerkin, a menos da constante τ. Esse detalhe é levado em consideração na implementação computacional.

$$\mathbf{k}_{\mathbf{ag}}^{\mathbf{e}} = \frac{1}{\tau} \mathbf{m}_{\mathbf{pg}}^{\mathbf{e}\ \mathbf{T}} \tag{2.70}$$

- **Matriz de Advecção de Petrov-Galerkin, correção SUPG (simétrica)**

$$\mathbf{k}_{\mathbf{apg}}^{\mathbf{e}} = \tau \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^{T} \boldsymbol{\beta} \, \mathbf{B} \, d\Omega^e \tag{2.71}$$

$$\mathbf{k}_{\mathbf{apg}}^{\mathbf{e}} = \frac{\tau}{36\mathrm{V}} \begin{bmatrix} k_{apg}^{1} & k_{apg}^{5} & k_{apg}^{9} & k_{apg}^{12} \\ & k_{apg}^{6} & k_{apg}^{10} & k_{apg}^{13} \\ & & k_{apg}^{11} & k_{apg}^{14} \\ sim. & & & k_{apg}^{15} \end{bmatrix} \tag{2.72}$$

$$k_{apg}^{5} = (BI\beta_x + CI\beta_y + DI\beta_z)(BJ\beta_x + CJ\beta_y + DJ\beta_z) \qquad (2.73)$$

$$k_{apg}^{9} = (BI\beta_x + CI\beta_y + DI\beta_z)(BK\beta_x + CK\beta_y + DK\beta_z) \qquad (2.74)$$

$$k_{apg}^{13} = (BI\beta_x + CI\beta_y + DI\beta_z)(BL\beta_x + CL\beta_y + DL\beta_z) \qquad (2.75)$$

$$k_{apg}^{1} = -(k_{apg}^{5} + k_{apg}^{9} + k_{apg}^{13}) \qquad (2.76)$$

$$k_{apg}^{10} = (BJ\beta_x + CJ\beta_y + DJ\beta_z)(BK\beta_x + CK\beta_y + DK\beta_z) \qquad (2.77)$$

$$k_{apg}^{14} = (BJ\beta_x + CJ\beta_y + DJ\beta_z)(BL\beta_x + CL\beta_y + DL\beta_z) \qquad (2.78)$$

$$k_{apg}^{6} = -(k_{apg}^{5} + k_{apg}^{10} + k_{apg}^{14}) \qquad (2.79)$$

$$k_{apg}^{15} = (BK\beta_x + CK\beta_y + DK\beta_z)(BL\beta_x + CL\beta_y + DL\beta_z) \qquad (2.80)$$

$$k_{apg}^{11} = -(k_{dg}^{9} + k_{dg}^{10} + k_{dg}^{15}) \qquad (2.81)$$

$$k_{apg}^{16} = -(k_{apg}^{13} + k_{apg}^{14} + k_{apg}^{15}) \qquad (2.82)$$

- **Matriz de Correção do Operador de Captura de Choques/Descontinuidades (simétrica)**

$$\mathbf{k_{opc}^{e}} = \delta \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{B} \, d\Omega^e \qquad (2.83)$$

$$\mathbf{k_{opc}^{e}} = \frac{\delta}{36\mathrm{V}} \begin{bmatrix} k_{opc}^{1} & k_{opc}^{5} & k_{opc}^{9} & k_{opc}^{12} \\ & k_{opc}^{6} & k_{opc}^{10} & k_{opc}^{13} \\ & & k_{opc}^{11} & k_{opc}^{14} \\ sim. & & & k_{opc}^{15} \end{bmatrix} \qquad (2.84)$$

$$k_{opc}^{5} = BIBJ + CICJ + DIDJ \qquad (2.85)$$

$$k_{opc}^{9} = BIBK + CICK + DIDK \qquad (2.86)$$

$$k_{opc}^{13} = BIBL + CICL + DIDL \qquad (2.87)$$

$$k_{opc}^{1} = -(k_{opc}^{5} + k_{opc}^{9} + k_{opc}^{13}) \qquad (2.88)$$

$$k_{opc}^{10} = BJBK + CJCK + DJDK \qquad (2.89)$$

$$k_{opc}^{14} = BJBL + CJCL + DJDL \tag{2.90}$$

$$k_{opc}^{6} = -(k_{opc}^{5} + k_{opc}^{10} + k_{opc}^{14}) \tag{2.91}$$

$$k_{opc}^{15} = BKBL + CKCL + DKDL \tag{2.92}$$

$$k_{opc}^{11} = -(k_{opc}^{9} + k_{opc}^{10} + k_{opc}^{15}) \tag{2.93}$$

$$k_{opc}^{16} = -(k_{opc}^{13} + k_{opc}^{14} + k_{opc}^{15}) \tag{2.94}$$

2.4.2 Avaliação do Parâmetro SUPG a partir das Matrizes de Elemento

O parâmetro τ também pode ser avaliado segundo Tezduyar[50] a partir de estimativas baseadas nas normas das matrizes de elemento, $\|\mathbf{k}_{\mathbf{adg}}\|, \|\mathbf{k}_{\mathbf{adpg}}\|$ e $\|\mathbf{m}_{\mathbf{pg}}\|$. Estas estimativas são dadas por

$$\tau_{s1} = \frac{\|\mathbf{k}_{\mathbf{adg}}\|}{\|\mathbf{k}_{\mathbf{adpg}}\|} \tag{2.95}$$

$$\tau_{s2} = \frac{\Delta t}{2}\frac{\|\mathbf{k}_{\mathbf{adg}}\|}{\|\mathbf{m}_{\mathbf{pg}}\|} \tag{2.96}$$

$$\tau_{s3} = \tau_{s1} Re \tag{2.97}$$

onde Δt é o passo de tempo e

$$Re = \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|\|\mathbf{k}_{\mathbf{adg}}\|}{\|\mathbf{D}\|\|\mathbf{k}_{\mathbf{adpg}}\|} \tag{2.98}$$

De modo que τ pode ser finalmente avaliado como

$$\tau = \left(\frac{1}{\tau_{s1}^{ir}} + \frac{1}{\tau_{s2}^{ir}} + \frac{1}{\tau_{s3}^{ir}}\right)^{\left(-\frac{1}{ir}\right)} \tag{2.99}$$

baseado no inverso de τ, definido como a norma *ir* do vetor com componentes $\frac{1}{\tau_{s1}}$, $\frac{1}{\tau_{s2}}$ e $\frac{1}{\tau_{s3}}$.

A norma de matrizes adotada corresponde ao máximo valor do somatório dos valores absolutos de cada linha, para uma matriz **M** com *n* colunas tem-se

$$\|\mathbf{M}\| = \max_i \sum_{j=1}^{n} |m_{ij}| \tag{2.100}$$

Cabe ressaltar também que o parâmetro τ deve ser avaliado somente no início de cada passo de tempo e não deve ser atualizado em iterações não lineares dentro de um intervalo de tempo.

2.4.3 Desenvolvimento das Matrizes do Tetraedro por Arestas

A formulação baseada em arestas (*Edge-Based Finite Elements*) foi introduzida em aplicações da mecânica dos fluidos, para malhas não estruturadas de triângulos e tetraedros, utilizando o método dos volumes finitos[2], [19] e [45] e foi largamente pesquisada por Löhner[34], [35] e [37]. Apesar da implementação original ter motivações diferentes desse trabalho, o rearranjo da estrutura de dados por aresta é visto como uma técnica de aceleração das operações matriz-vetor a serem realizadas diversas vezes pelo *solver* iterativo ou no cálculo do resíduo e de economia de memória para armazenar as matrizes resultantes. Como estudado por Martins em [42] e [43], apesar do número de arestas ser maior que o número de elementos, na ordem 1.5 vezes para malhas de tetraedros, e ainda ter que se montar essa estrutura internamente, como pré-

Apêncice A

Funções de Interpolação e Operador Gradiente Discreto para o Tetraedro Linear

Relações Geométricas no Tetraedro e Funções de Interpolação

As funções de interpolação para o tetraedro são definidas em coordenadas de volume, deste modo tem-se que:

$$\xi_i = \frac{\mathrm{V_i}}{\mathrm{V}}, \qquad i = 1, 4 \tag{A.1}$$

$$\sum_{i=1}^{4} \xi_i = 1 \tag{A.2}$$

$$\sum_{i=1}^{4} \mathrm{V_i} = \mathrm{V} \tag{A.3}$$

$$N_i = \xi_i, \qquad i = 1, 4 \tag{A.4}$$

onde V é volume do tetraedro e N_i são funções de interpolação.

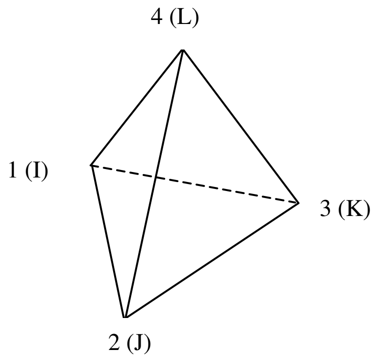

Figura A.1 – Tetraedro Linear.

Como o elemento é isoparamétrico, ou seja, a geometria no interior do elemento pode ser obtida pelas funções de interpolação, então pode-se escrever as seguintes equações

$$\xi_1 + \xi_2 + \xi_3 + \xi_4 = 1 \tag{A.5}$$

$$\xi_1 x_1 + \xi_2 x_2 + \xi_3 x_3 + \xi_4 x_4 = x \tag{A.6}$$

$$\xi_1 y_1 + \xi_2 y_2 + \xi_3 y_3 + \xi_4 y_4 = y \tag{A.7}$$

$$\xi_1 z_1 + \xi_2 z_2 + \xi_3 z_3 + \xi_4 z_4 = z \tag{A.8}$$

As equações (A.5) a (A.8) podem ser escritas em forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \\ \xi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{G}\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\chi} \tag{A.9}$$

Resolvendo o sistema linear de equações (A.9), tem-se

$$\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\\ \xi_3\\ \xi_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4\\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4\\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}1\\ x\\ y\\ z\end{bmatrix}\rightarrow \boldsymbol{\xi}=\mathbf{G}^{-1}\boldsymbol{\chi} \qquad \text{(A.10)}$$

Operador Gradiente Discreto

Definindo a matriz **N** das funções de interpolação como

$$\mathbf{N}=\begin{bmatrix}N_1 & N_2 & N_3 & N_4\end{bmatrix} \qquad \text{(A.11)}$$

e as derivadas das funções de interpolação como

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x}=\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1}{\partial \xi_1}\frac{\partial \xi_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial \xi_2}\frac{\partial \xi_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial \xi_3}\frac{\partial \xi_3}{\partial x} & \frac{\partial N_4}{\partial \xi_4}\frac{\partial \xi_4}{\partial x}\end{bmatrix} \qquad \text{(A.12)}$$

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial y}=\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1}{\partial \xi_1}\frac{\partial \xi_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial \xi_2}\frac{\partial \xi_2}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial \xi_3}\frac{\partial \xi_3}{\partial y} & \frac{\partial N_4}{\partial \xi_4}\frac{\partial \xi_4}{\partial y}\end{bmatrix} \qquad \text{(A.13)}$$

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial z}=\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1}{\partial \xi_1}\frac{\partial \xi_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial \xi_2}\frac{\partial \xi_2}{\partial z} & \frac{\partial N_3}{\partial \xi_3}\frac{\partial \xi_3}{\partial z} & \frac{\partial N_4}{\partial \xi_4}\frac{\partial \xi_4}{\partial z}\end{bmatrix} \qquad \text{(A.14)}$$

Como $\frac{\partial N_i}{\partial \xi_i}=1$, para i =1, 4, então para se obter derivadas das funções de interpolação basta, simplesmente, determinar $\frac{\partial \xi_i}{\partial \mathbf{x}}$. Para tal, resolve-se a equação (A.10) para ξ_i e em seguida deriva-se o resultado em função de $\mathbf{x}$, onde $\mathbf{x}^{\mathbf{T}}=(\,x \;\; y \;\; z\,)$. Os resultados das operações descritas acima estão apresentados abaixo

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial x} = -y_3 z_4 + y_4 z_3 + y_2 z_4 - y_2 z_3 - z_2 y_4 + z_2 y_3 \tag{A.15}$$

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial y} = x_3 z_4 - x_4 z_3 - x_2 z_4 + x_2 z_3 + z_2 x_4 - z_2 x_3 \tag{A.16}$$

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial z} = -x_3 y_4 + x_4 y_3 + x_2 y_4 - x_2 y_3 - y_2 x_4 + y_2 x_3 \tag{A.17}$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial x} = y_3 z_4 - y_4 z_3 - y_1 z_4 + y_1 z_3 + z_1 y_4 - z_1 y_3 \tag{A.18}$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial y} = -x_3 z_4 + x_4 z_3 + x_1 z_4 - x_1 z_3 - z_1 x_4 + z_1 x_3 \tag{A.19}$$

$$\frac{\partial \xi_2}{\partial z} = x_3 y_4 - x_4 y_3 - x_1 y_4 + x_1 y_3 + y_1 x_4 - y_1 x_3 \tag{A.20}$$

$$\frac{\partial \xi_3}{\partial x} = -y_2 z_4 + y_4 z_2 + y_1 z_4 - y_1 z_2 - z_1 y_4 + z_1 y_2 \tag{A.21}$$

$$\frac{\partial \xi_3}{\partial y} = x_2 z_4 - z_2 x_4 - x_1 z_4 + x_1 z_2 + z_1 x_4 - z_1 x_2 \tag{A.22}$$

$$\frac{\partial \xi_3}{\partial z} = -x_2 y_4 + y_2 x_4 + x_1 y_4 - x_1 y_2 - y_1 x_4 + y_1 x_2 \tag{A.23}$$

$$\frac{\partial \xi_4}{\partial x} = y_2 z_3 - z_2 y_3 - y_1 z_3 + y_1 z_2 + z_1 y_3 - z_1 y_2 \tag{A.24}$$

$$\frac{\partial \xi_4}{\partial y} = -x_2 z_3 + z_2 x_3 + x_1 z_3 - x_1 z_2 - z_1 x_3 + z_1 x_2 \tag{A.25}$$

$$\frac{\partial \xi_4}{\partial z} = x_2 y_3 - y_2 x_3 - x_1 y_3 + x_1 y_2 + y_1 x_3 - y_1 x_2 \qquad \text{(A.26)}$$

As equações (A.15) a (A.26) possuem um denominador comum, que foi omitido. Esse denominador é igual a seis vezes o volume do tetraedro que pode ser calculado por

$$\begin{aligned} 6\mathrm{V} = \det(\mathbf{G}) &= x_2 y_3 z_4 - x_2 y_4 z_3 - y_2 x_3 z_4 + y_2 x_4 z_3 + z_2 x_3 y_4 \\ &- z_2 x_4 y_3 - x_1 y_3 z_4 + x_1 y_4 z_3 + x_1 y_2 z_4 - x_1 y_2 z_3 - x_1 z_2 y_4 + x_1 z_2 y_3 \\ &+ y_1 x_3 z_4 - y_1 x_4 z_3 - y_1 x_2 z_4 + y_1 x_2 z_3 + y_1 z_2 x_4 - y_1 z_2 x_3 - z_1 x_3 y_4 \\ &+ z_1 x_4 y_3 + z_1 x_2 y_4 - z_1 x_2 y_3 - z_1 y_2 x_4 + z_1 y_2 x_3 \end{aligned} \qquad \text{(A.27)}$$

Pode-se definir o Operador Gradiente Discreto para o tetraedro linear como

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} \\ \dfrac{\partial \mathbf{N}}{\partial y} \\ \dfrac{\partial \mathbf{N}}{\partial z} \end{bmatrix}_{3\times 4} \qquad \text{(A.28)}$$

Substituindo as equações (A.15) a (A.26) na equação (A.28) e fazendo algumas simplificações, tem-se a equação que descreve o Operador Gradiente Discreto para o tetraedro linear

$$\mathbf{B} = \frac{1}{6\mathrm{V}} \begin{bmatrix} BI & BJ & BK & BL \\ CI & CJ & CK & CL \\ DI & DJ & DK & DL \end{bmatrix}_{3\times 4} \qquad \text{(A.29)}$$

Portanto, os termos da matriz **B** ficam definidos como

$$BI = (z_{43} y_{23} - z_{23} y_{43}) \qquad \text{(A.30)}$$

$$BJ = (y_{31} z_{41} - y_{41} z_{31}) \qquad \text{(A.31)}$$

$$BK = (y_{41}z_{21} - y_{21}z_{41}) \tag{A.32}$$

$$BL = (y_{21}z_{31} - y_{31}z_{21}) \tag{A.33}$$

$$CI = (z_{42}x_{32} - z_{32}x_{42}) \tag{A.34}$$

$$CJ = (x_{41}z_{31} - x_{31}z_{41}) \tag{A.35}$$

$$CK = (x_{21}z_{41} - x_{41}z_{21}) \tag{A.36}$$

$$CL = (x_{31}z_{21} - x_{21}z_{31}) \tag{A.37}$$

$$DI = (y_{43}x_{23} - x_{43}y_{23}) \tag{A.38}$$

$$DJ = (y_{41}x_{31} - y_{31}x_{41}) \tag{A.39}$$

$$DK = (y_{42}x_{12} - x_{42}y_{12}) \tag{A.40}$$

$$DL = (x_{21}y_{31} - y_{21}x_{31}) \tag{A.41}$$

onde $x_{ij} = x_i - x_j$; $y_{ij} = y_i - y_j$; $z_{ij} = z_i - z_j$; para $i, j = 1, 4$.