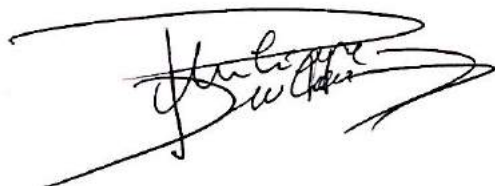


# **Simulação Multi-Escala com Elementos Finitos**

## **Primeiro Relatório Científico Anual**

- **Projeto:** 2016/05155-0
- **Período de vigência:**
  - Setembro de 2016 a agosto de 2018
- **Período coberto pelo relatório científico:**
  - Setembro de 2016 a agosto de 2017
- **Pesquisador Responsável:**
  - Prof. Philippe R B; Devloo, LabMeC-FEC, Unicamp, SP
- **Equipe de pesquisa:**
  - Pesquisadora Associada: Prof. Sônia M. Gomes, IMECC - Unicamp
  - Pesquisador Associado: Prof. Jorge L. D. Calle, USP, Pirassununga
  - Aluno de doutorado em Ciência e Engenharia de Petróleo: Omar Durán
  - Aluno de mestrado em Engenharia Civil: Pablo G. S. Carvalho
- **Assinatura do Pesquisador Responsável**

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Philippe R B', with a large, sweeping flourish extending to the right.

## 1 Resumo do projeto

O projeto apresentado pretende explorar o método Multi-Scale Hybrid Method (MHM), desenvolvido pelo grupo de pesquisa do LNCC, liderado por Dr. F. Valentin, para a simulação de problemas multi-escala multifísicos. Sendo um método híbrido, o MHM utiliza espaços de aproximação entre os macro-domínios, polinomial por partes, para multiplicadores representando fluxos [5, 4]. Diferentemente da descrição de aproximações híbridas convencionais, no método MHM supõe-se que o problema diferencial é resolvido de forma exata no interior de cada subdomínio. Nas suas implementações computacionais, utiliza-se uma discretização detalhada dentro de cada subdomínio, constituindo-se uma aproximação da solução do método MHM.

Seus criadores (C. Harder, F. Valentin e D. Paredes) mostraram a consistência e convergência deste método. Isso significa que, refinando a discretização dentro de cada subdomínio, criam-se aproximações consistentes, mesmo na ocorrência de variações acentuadas dos coeficientes materiais. A dimensão do sistema de equações globais não depende do nível de discretização interna de cada subdomínio, tornando o método muito adequado para ser implementado em máquinas paralelas. Com uma implementação em ambiente computacional mais consolidado, o objetivo é estudar e avaliar melhor o método, explorando vários aspectos da metodologia e contribuindo com novas aplicações e modificações na sua formulação. Pretende-se abordar diversos problemas em aplicações de interesse, definido em regiões de duas ou três dimensões. Especificamente, as contribuições do projeto consideram

- Utilização de aproximação com método misto no interior de cada subdomínio (MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ ).
- Comparação de aproximações MHM com a técnica  $FEM^2$  [6] .
- Aplicação do método MHM para simulação de escoamento em meios porosos com permeabilidade heterogênea, e problemas de elasticidade.
- Acoplamento do método SBFem com MHM

O cronograma inicial do projeto está indicado na figura a seguir. Conforme descrito a continuação, as tarefas previstas no primeiro ano do projeto foram amplamente cumpridas, salvo a comparação com o esquema FEM2. Em contra-partida, a tarefa sobre a aplicação do novo esquema proposto MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  ao problema Black-Oil foi adiantado.

MHM								
TAREFAS	1	2	3	4	5	6	7	8
Impl. no NeopZ p/ eq. Darcy e transp.								
Impl. no NeopZ p/ prob. de elast.								
MHM com $\mathbf{H}(\text{div})$								
Aplic. em Black-oil								
Apl. em elast. + FEM2								
Implem. SBFem p/ eq. Elípticas								
Redação de artigos								

## 2 Realizações no período

Nesta seção, os principais resultados da pesquisa obtidos no período, referenciados nas publicações geradas pelo projeto e mostradas na Seção 6, são brevemente descritos.

### 2.1 Estruturação de um código MHM- $H^1$ no ambiente NeoPZ

A criação de espaços MHM é baseada numa malha refinada, onde os elementos da discretização fina são filhos dos macro elementos. Esta abordagem permite a utilização das facilidades de transformações paramétricas disponíveis no NeoPZ:

- Para cada grupo de micro-elementos cria-se uma malha computacional do tipo  $H^1$ -conforme, não podendo haver continuidade entre elementos de grupos distintos.
- Nos lados uni-dimensionais, criam-se elementos polinomiais. Cada espaço polinomial de um lado é independente das demais interfaces
- Criam-se elementos de interface entre os micro elementos e os elementos de interface. Deve-se distinguir elementos de esquerda e direita porque os sinais das integrais é igual oposto
- Escolhe-se uma função de forma por subdomínio que não será condensada (no caso de elasticidade, 3 ou 6 funções).
- Agrupam-se todos os elementos associados a um macro elemento e seus elementos de interface em um objeto TPZSubCompMesh. A classe TPZSubCompMesh implementa sub-estruturação no NeoPZ.
- Elaboram-se dados de pós processamento, visualização gráfica etc.

Detalhes sobre a implementação no ambiente NeoPZ do MHM encontra-se no Anexo 1 dos trabalhos preparados e/ou submetidos.

### 2.2 MHM com método misto no interior de cada subdomínio

Do ponto de vista de técnica de aproximação, o método MHM caracteriza-se pela utilização de um espaço de aproximação para fluxos no contorno dos macro elementos agregada a uma solução refinada no interior dos elementos. Em sua formulação original, o MHM tem sido aplicado com aproximações  $H^1$ -conformes no interior dos sub-domínios. No entanto, pode-se idealizar o método MHM em que a solução no interior do subdomínio seja aproximada de outra forma. Uma das propostas do projeto é fazer esta solução nos macro-elementos com formulação mista. Ou seja, tem-se a formulação denotada por MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ , para diferenciar com a formulação original, a qual chamamos MHM- $H^1$ ,

O que diferencia uma aproximação tradicional  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforme global de uma aproximação MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  é que, no último caso, os fluxos entre os macro elementos são polinomiais de baixa ordem e não polinomiais por partes com a ordem da malha refinada. A vantagem da formulação proposta é que a solução numérica satisfaz a condição de incompressibilidade exatamente e, conseqüentemente, pode ser utilizada com vantagens para a aproximação de escoamentos em meios porosos heterogêneos. Além disso, a formulação mista satisfaz a propriedade de conservação local [1], que é essencial para utilização dos fluxos numéricos para problemas de transporte.

A formulação MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  é contribuição original do presente projeto. Demonstramos a adequação desta abordagem com a original através de resultados numéricos. A vantagem da formulação proposta é que a solução numérica satisfaz a condição de incompressibilidade exatamente e, conseqüentemente, pode ser utilizada com vantagens para aproximação equações em meios porosos. Detalhes sobre a implementação no ambiente NeoPZ da formulação MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  também se encontra-se no Anexo 1 dos trabalhos preparados e/ou submetidos, juntamente com resultados sobre sua verificação.

### 2.3 Espaços $\mathbf{H}(\text{div})$ enriquecidos baseados em malhas não afins

Nas aplicações do método  $\text{MHM-}\mathbf{H}(\text{div})$  para o cálculo de fluxos em meios porosos heterogêneos com descontinuidades, a malha de macro-elementos poderá incluir sub-regiões irregulares, com fronteiras curvas e a implementação de esquemas *hp*-adaptativos pode trazer benefícios na melhor representação das soluções. Na construção de espaços  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conformes em malhas não afins, as bases são definidas no elemento mestre e transferidas para o elemento computacional pela transformada de Piola [2]. Neste processo, os espaços vetoriais polinomiais do elemento mestre deixam de ser polinomiais após a transformação de Piola, comprometendo o potencial de aproximação dos espaços resultantes.

Este efeito foi analisado em [3] para malhas quadrilaterais não afins, em que um enriquecimento apropriado dos espaços de Raviart-Thomas  $RT(k)$  com algumas funções internas (componente normal nula na fronteira do elemento) de grau  $k + 2$ , recupera a taxa de convergência  $k + 1$  do divergente do fluxo, originalmente deteriorada a ordem  $k$ .

Também foi feita a construção e implementação de espaços hierárquicos de alta ordem para elementos finitos  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conformes em malhas curvilíneas tridimensionais *hp*-adaptativas [2]. O método foi verificado em formulações mistas para problemas teste definidos em regiões esféricas e com bases curvilíneas assintoticamente afins, reproduzindo as taxas de convergência esperadas. Uma aplicação em escoamento de Darcy na proximidade de um poço horizontal, com malhas curvilíneas adaptadas à geometria do poço e à região de drenagem do reservatório, em forma elíptica, ilustra o ganho em custo computacional quando usados esquemas *hp*-adaptativos, e os efeitos de paralelismo e condensação estática.

Em outro estudo, compondo a tese de doutorado em Matemática Aplicada - Unicamp, da aluna Margui A. R. Pinedo, foi analisado o efeito de discretizações mistas de elementos finitos baseadas em malhas quadrilaterais não afins para problemas elípticos não lineares. Neste caso, optou-se por uma formulação híbrida e construiu-se um algoritmo para o cálculo iterativo das soluções. Através de experimentos numéricos, compara-se o desempenho de diferentes famílias de espaços discretos compatíveis na aproximação das quantidades de interesse em malhas afins e não afins para comprovar a melhor eficácia da família de espaços conhecidos como ABF (Arnold, Boffi, Falk), que são contruídos pelo enriquecimento dos espaços de Raviart-Thomas.

### 2.4 MHM em simulações de escoamentos multifásicos em meios porosos

O comportamento do método  $\text{MHM-}H^1$  para transporte de escalar passivo para malhas heterogêneas foi estudado qualitativamente por D. Paredes na sua tese de doutorado [5]. Utilizando a nova proposta  $\text{MHM-}\mathbf{H}(\text{div})$  do presente trabalho, o escoamento interno de cada macro domínio foi simulado utilizando funções do tipo  $\mathbf{H}(\text{div})$ . Como parte da tese de doutorado em Ciência e Engenharia de Petróleo - Unicamp, defendida pelo aluno Omar Durán Triana, foram feitas simulações de escoamentos multifásicos, em duas e três dimensões, em malhas não estruturadas. No Anexo 4 dos trabalhos preparados e/ou submetidos, são ilustrados alguns resultados obtidos, demonstrando o potencial do  $\text{MHM-}\mathbf{H}(\text{div})$  para o tratamento de problemas de grande porte. Inicialmente, uma sequência de problemas lineares são resolvidos, finalizando com um sistema bifásico água-óleo tri-dimensional não linear. Uma descrição detalhada das formulações e dos algoritmos desenvolvidos encontram-se na tese mencionada, a qual também se dedicou a incorporá-los em um simulador de reservatório, acoplado com geomecânica, que está sendo denominado de iMRS (innovative Multiscale Reservoir Simulator).

### 2.5 Diferentes formulações para o acoplamento de escoamentos Stokes-Darcy

Este estudo compõe a dissertação de Mestrado em Engenharia Civil - Unicamp, do aluno Pablo P G S Carvalho, em que se propõe análises numéricas para problemas de fluidos descritos pelas equações de Stokes, de Darcy e de acoplamento Darcy-Stokes. Baseado no Método de Galerkin Descontínuo (MGD), formulações mistas são desenvolvidas para aproximações contínuas e descontínuas. Também são estudados os espaços  $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ . Como exemplo de aplicação, elabora-se um modelo computacional baseado na formulação de Stokes para um domínio poroso, capaz de descrever o comportamento do concreto auto-adensável ao ser lançado entre armações de aço. Na sequência, utilizando uma técnica de homogeneização, as armações são representadas por um domínio descrito pela lei de Darcy, o qual é acoplado por meio de uma condição de interface, a um domínio descrito por Stokes. As seguintes contribuições são obtidas a partir desse trabalho:

- Construção de novas classes no ambiente NeoPZ para a implementação de contribuições das formulações fracas, moldadas para diferentes condições de contorno, geometrias e espaços de aproximação.
- Verificação dos modelos numéricos do MEF a partir da obtenção de taxas de convergência de erros. Análise comparativa dos resultados numéricos para diferentes configurações de espaços de aproximação.
- Resolução de problemas utilizando malhas com contornos curvos.

### 3 Apoios institucionais recebidos

1. Simulador Integrado de Interface Poço-Reservatório - ANP- Petrobras. Dez/2016-nov/2019. Responsável: P. R. B. Devloo
2. Bolsas de Produtividade em Pesquisa CNPq: de P. R. B. Devloo (Processo 310369/2006-1) e S. M. Gomes (Processo 308632/2006-0), ambas vigentes até fevereiro de 2018.
3. Projeto FAPESP 2016/07766-7 - Organização de Evento. Responsável: S. M. Gomes
4. Projeto FAPESP 2016/13637-5 - Participação de Evento no Exterior. Responsável: S. M. Gomes

### 4 Plano de atividades para o próximo período

#### Simulação de meio fraturado com MHM

O Prof. Devloo visitará o Inst. of Comp. Math. & Sci./Eng. Computing, Chinese Academy of Sciences, Pequim, de agosto a outubro de 2017. Nesta estadia na China, colaborará com o Prof. Chensong Zhang e seu grupo, com o objetivo de aplicar a filosofia de aproximação MHM a simulação de meios fraturados com número expressivo de fraturas. Estas configurações são multi-escala e excessivamente custosas de se modelar, pelo grande número de graus de liberdade necessários para representar as fraturas e o meio poroso. Como resultado da aplicação desta estratégia, pretende-se obter um trabalho científico de alto impacto.

#### Extensões do MHM para problema tri-dimensionais

No Anexo 2, é verificada a implementação do MHM- $H^1$  no NeoPZ para problemas de elasticidade 2D. No Anexo 3, mostra-se a implementação do método SBFem no NeoPZ e sua verificação em problemas de Poisson singulares em 2D. Estes resultados serão estendidos no próximo período para simulações tri-dimensionais.

#### Extensão de simulações multifásicas em meios porosos

Dando continuidade ao estudo do período anterior, a metodologia MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  será estendida para o modelo black-oil.

#### Estimativas a-posteriori e adaptação da malha de macro-elementos

Nas avaliações do MHM, observamos a convergência para uma solução em função da resolução dos fluxos nas interfaces dos macro-elementos. Na sua tese de doutorado, Diego Paredes demonstra que o salto da variável primal é um estimador muito eficiente do erro na norma de energia. Iremos averiguar esta propriedade e, utilizando os recursos do NeoPZ, aplicá-la em uma estratégia de refinamento  $hp$  do espaço de fluxos dos macro-elementos, possivelmente combinado com refinamento  $hp$  no interior de cada macro-elemento.

#### Comparação com método Fem<sup>2</sup>

No projeto de pesquisa foi proposta a comparação do MHM com o método  $Fem^2$ . Implementaremos esse método e iremos comparar os resultados com os do MHM aplicados a problemas de elasticidade.

## Método SBFem e acoplamento MHM-SBFem

Implementação e verificação do procedimento de cálculo SBFem no NeoPZ (para Darcy 3D e elasticidade 2D e 3D), estudo das propriedades de convergência do método e incorporação do método nos cálculos MHM.

## Preparação de artigos para publicação dos resultados obtidos

Esforços serão feitos para colocar os relatórios da pesquisa realizada na forma de artigos a serem submetidos em revistas especializadas indexadas.

## 5 Participação em evento científico com benefícios complementares

O Prof. Philippe Devloo participou do congresso *Congress on Numerical Methods in Engineering* CMN 2017, em Valência Espanha de Julho 3-5, 2017. Foram apresentados dois trabalhos:

- *The Multiscale Hybrid Method in mixed finite element context*, cujos autores são: Philippe R. B. Devloo, Frederic Valentin, Sonia M. Gomes, Omar Y. D. Triana (ver texto completo no Anexo 1 dos trabalhos preparados e/ou submetidos)
- *Stokes Flow: Computational Modeling and Comparative Study between Approximation spaces*, cujos autores são : Pablo G. Carvalho, Philippe R. B. Devloo, Omar Y. D. Triana (o trabalho completo refere-se à dissertação de mestrado do Pablo G. Carvalho, defendida em junho de 2017, cujas primeira páginas estão anexadas).

Neste mesmo congresso foi feito um encontro do grupo de pesquisa com Abimael Loula, Cristiane Farias, Sandra Malta, Sonia Gomes e Philippe Devloo para discutir novos resultados incluídos na revisão da publicação conjunta *On continuous, discontinuous, mixed and primal hybrid finite element methods for second order elliptic problems*, submetido ao *Int. J. Numer. Meth. Eng.*

## 6 Publicações resultantes

Para a disseminação de resultados de pesquisa do projeto, descrevem-se nesta seção os artigos publicados em periódicos indexados, trabalhos em congressos, dissertações e teses defendidas no período.

### 6.1 Artigos em periódicos indexados

- P. R. B. Devloo, O. Durán, S. M. Gomes, N. Shauer, *Mixed finite element approximations based on 3D hp-adaptive curved meshes with two types of  $H(\text{div})$ -conforming spaces*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2017. Aceito.
- A. M. Farias, P. R. B. Devloo, S. M. Gomes, D. de Siqueira, D. A. Castro. *Two dimensional mixed finite element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the potential and flux divergence*. Computers & Mathematics with Applications, 2017. Aceito.

### 6.2 Trabalhos em congressos internacionais

- **Advanced numerical methods: recent developments, analysis, and applications**, Institute Henri Poincaré, Paris, França; 03-07 de outubro de 2016: <http://www.i3m.univ-montp2.fr/evenements/22-evenements/134-nmpdes#ME2>. Participante: Sônia M. Gomes  
Apresentação de trabalho: *New approximation space configuration for the mixed finite element method for elliptic problems based on curved 3D meshes*  
Apoio FAPESP, Processo 2016/13637-5
- **XXXVII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering**, Brasília, DF; 06-09 de novembro de 2016: <http://2016.cilamce.com.br/>. Participante: Philippe R. B. Devloo. Apresentação de trabalho: *High Order Finite Element Bases for  $H(\text{div})$  Spaces on 3D Adaptive Curved Meshes*

- **Congress on Numerical Methods in Engineering - CMN 2017**, Valência, Espanha; 2-5 de julho de 2017. <http://congress.cimne.com/CMN2017/frontal/default.asp>  
Participantes: Philippe R. B. Devloo e Sônia M. Gomes. Apresentações de trabalhos:
  - *The Multiscale Hybrid Method in mixed finite element context* (apresentado por P. R. B. Devloo).
  - *Stokes flow computational modeling and comparative study between approximation spaces* (apresentado por P. R. B. Devloo).

### 6.3 Trabalhos em congressos nacionais

- **XXXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional**, Gramado, RS  
<http://2016.cnmac.org.br/> Participantes: Philippe R. B. Devloo e Sônia M. Gomes
  - *On the development of high order Hdiv finite element approximation spaces including pyramid elements* (apresentado por P. R. B. Devloo,)

Trabalhos completos publicados em Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 5, n. 1 (2017) <https://proceedings.sbmec.org.br/sbmec/index>

- *Two dimensional hierarchical mixed finite element approximations with enhanced primal variable accuracy* (apresentado por co-autor A. M. Farias):
- *H (div) approximations based on hp-adaptive curved meshes using quarter point elements* (apresentado por co-autora D. de Siqueira)
- *Error analysis for a new mixed finite element method in 3D* (trabalho apresentado por co-autor D. A. Castro)
- **Workshop Métodos Numéricos para EDPs**, LNCC, Petrópolis, RJ; 18-19 de maio de 2016  
[http://www.lncc.br/eventoSeminario/eventoconsultar.php?vMenu=5&idt\\_evento=1673&vAno=2017](http://www.lncc.br/eventoSeminario/eventoconsultar.php?vMenu=5&idt_evento=1673&vAno=2017)  
Participantes: Philippe R. B. Devloo e Sônia M. Gomes  
Apresentações de trabalhos:
  - Enhanced mixed finite element approximations based on 2D or 3D curved meshes* (apresentado por S. M. Gomes)
  - Aproximações MHM utilizando espaços  $H^1$  e  $\mathbf{H}(\text{div})$  no interior dos macro-elementos* (apresentado por P. R. B. Devloo)

### 6.4 Dissertação defendida

- Pablo P G S Carvalho (Mestrado em Engenharia Civil - Unicamp, bolsa CAPES)  
Título: *Modelagem Computacional do Escoamento de Stokes e Estudo Comparativo entre Espaços de Aproximação*  
Defesa aprovada: junho 2017  
Orientador: Philippe R. B. Devloo

### 6.5 Teses defendidas

- Margui Angélica Romero Pinedo (Doutorado em Matemática Aplicada - Unicamp, bolsa CNPq)  
Título: *Métodos de Elementos Finitos Mistos Híbridos para um Problema Elíptico Não Linear em Malhas Quadrilaterais*. Defesa aprovada: dezembro de 2016  
Orientadores: Maicon Ribeiro Correa (principal) e Sônia M. Gomes (co-orientadora)
- Omar Y. D. Triana (Doutorado em Ciência e Engenharia de Petróleo - Unicamp, bolsas RHAe e ANP)  
Título: *Development of a Surrogate Multiscale Reservoir Simulator Coupled with Geomechanics*  
Defesa aprovada: julho de 2017  
Orientador: Philippe R. B. Devloo

## 7 Trabalhos preparados e/ou submetidos

Os trabalhos submetidos (mas ainda não aceitos) e/ou preparados são indicados a seguir. Os textos completos desses trabalhos são incluídos ao final do presente relatório.

- P. R. B. Devloo, C. O. Faria, A. M. Farias, S. M. Gomes, A. F. D. Loula and S. M. C. Malta. *On continuous, discontinuous, mixed and primal hybrid finite element methods for second order elliptic problems*. Int. J. Numer. Meth. Eng. 2017. Submetido e em revisão  
Comparações de diferentes formulações ( $H^1$ -conforme, mistas, híbridas e de Galerkin descontínuo, usando espaços de funções descontínuas) em termos de precisão e esforço computacional utilizando o mesmo ambiente de programação.
- P. R. B. Devloo, O. Durán, S. M. Gomes, F. Valentin. *O método MHM: simulação multi-escala com elementos finitos no NeoPZ*. Relatório de Pesquisa 2017.  
Este trabalho contém detalhes da implementação do método MHM no NeoPZ, nas suas duas versões MHM- $H^1$  e MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ , bem como a verificação das implementações na simulação de um problema de Darcy com solução suave e oscilatória. Também foi estudada a aplicação em um problema com uma distribuição de permeabilidades aleatória. Neste caso, observou-se baixa taxa de convergência do fluxo da ordem do tamanho do macro-elemento, independente da ordem de aproximação dos elementos internos. Este fato muito nos surpreendeu e nos levou ao estudo de regularidade da solução calculada a partir do mapa de permeabilidade. O baixo índice de regularidade estimado justifica a redução da taxa de convergência observada.
- P. R. B. Devloo, S. M. Gomes. *Implementação do Método MHM no NeoPZ para problemas de elasticidade*. Relatório de Pesquisa 2017.  
Como previsto na proposta original do projeto, implementou-se no NeoPZ a estrutura de classes para realização de aproximação MHM- $H^1$  de problemas bi-dimensionais elásticos. Os resultados obtidos encontram-se no Anexo 2 dos trabalhos preparados e/ou submetidos. Espera-se que a mesma implementação aplicar-se-á em simulações tri-dimensionais no futuro.
- P. R. B. Devloo, C. Song. *Implementação do SBFem no NeoPZ*. Relatório de Pesquisa 2017.  
As atividades para acoplar o cálculo SBFem no ambiente NeoPZ tem sido feita em colaboração do Prof. C. Song, da Universidade de New South Wales. A idéia é utilizar os elementos SBFem no cálculo MHM como macro elementos dedicados à aproximação de singularidades. Detalhes sobre esta implementação encontra-se no Anexo 3 dos trabalhos preparados e/ou submetidos, juntamente com verificações em problema de Laplace com singularidade e em escoamentos em meios porosos heterogêneos.
- O. Durán, P. R. B. Devloo. *MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  for multiphase fluid flow in porous media*. Relatório de Pesquisa 2017.  
Com o objetivo final de aplicar o MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  na simulação de escoamentos multifásicos (e.g. do tipo Black-oil), o Anexo 4 dos trabalhos preparados e/ou submetidos ilustrara alguns resultados preliminares numa sequência de problemas mais simples mas que, gradativamente, vão incorporando os aspectos importantes dessas aplicações. Inicialmente, uma sequência de problemas lineares são resolvidos, finalizando com um sistema bifásico água-óleo tri-dimensional não linear.

## 8 Outras atividades e realizações

Descrevem-se nesta seção outras atividades realizadas e que foram de importância para o projeto, como a preparação dos códigos computacionais de elementos finitos de interesse prático, os eventos organizados pelo grupo nas áreas do projeto e as cooperações científicas desenvolvidas. Também são indicados outros trabalhos submetidos, e dissertação defendida no período, em temas relacionados com o projeto, os quais foram desenvolvidos primordialmente em períodos anteriores. No entanto foram concluídos na vigência do presente projeto e contribuíram para o avanço e maturidade do grupo na pesquisa em questão.



## 8.1 Desenvolvimento de códigos computacionais de elementos finitos de interesse prático nas áreas do projeto.

A priori não houve necessidade de criar novos espaços de aproximação para implementar aproximações MHM- $H^1$  ou MHM-H(div). A confecção dos objetos que compõem uma aproximação MHM é bastante complexo. Por isso duas novas classes foram escritas que organizam a confecção de objetos apropriados e oferecem ao usuário opções de escolher:

- O número de refinamentos  $h$  aplicados nos macro elementos;
- A ordem polinomial interna dos elementos;
- O número de refinamentos aplicados a malha esqueleto;
- A ordem polinomial do espaço do esqueleto;
- Se os graus de liberdade externos são associados a um nó da malha original ou a pressão média;
- Se a aproximação MHM é hibridizado em segundo nível tal que os graus de liberdade globais são de pressão novamente.

Duas classes foram acrescentados no ambiente NeoPZ para configurar simular configurações MHM- $H^1$  e MHM-H(div).

- O ambiente NeoPZ já proporcionava as classes necessárias para realização de cálculos MHM e MHM-H(div). A real dificuldade em realizar simulações do tipo MHM reside na confecção dos objetos apropriados e verificação da compatibilidade entre os mesmos. Foram criados duas classes TPZMHMeshControl e TPZMHMixedMeshControl para gerenciar a criação de simulações MHM e MHM-H(div) respectivamente. A classe TPZMHMixedMeshControl é derivada de TPZMHMeshControl. A classe TPZMHMeshControl pode criar aproximações bi- e tri-dimensionais de problemas de Poisson ou Elasticidade. A classe TPZMHMixedMeshControl pode gerar malhas para simulações bi e tri-dimensionais do problema de Darcy.
- Os macro elementos são definidos por uma lista de elementos geométricos que particionam o domínio computacional. Esta malha não precisa ser regular. Ela pode ter elementos em diferentes níveis de refinamento.
- Os fluxos entre os macro elementos podem ser refinados em  $h$  ou enriquecidos em termos de ordem polinomial ( $p$ ).
- As aproximação associados ao interior de cada macro domínios podem ser  $hp$  refinados
- Implementamos a capacidade de hibridizar os fluxos entre os macro elementos. Neste caso, as equações associados a cada macro elemento (incluindo os macro fluxos) podem ser estaticamente condensados sobre um espaços de pressões. A vantagem desta abordagem é que ela gera matrizes positivo definidos. Esta opção/formulação foi pouco comentada porque gera aproximações idênticas às aproximações não hibridizadas.

## 8.2 Artigos submetidos no período em temas relacionados com o projeto

- A. M. Farias, P. R. B. Devloo, S. M. Gomes, P. C. A. Lucci, *Development of object-oriented finite element tools for multiphysics simulations and applications to hydraulic fracture propagation*. Advances in Engineering Software, 2017. Submetido e em revisão.
- D. L. Cecílio, P. R. B. Devloo, S. M. Gomes, E. R.S. dos Santos, *An adaptive finite element simulation of well stability*. Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2017. Submetido.

### 8.3 Dissertação defendida no período em tema relacionado com o projeto

- Nathalia A Batalha (Mestrado em Ciências e Engenharia de Petróleo - Unicamp (bolsa CAPES)  
Título: *Modelagem Linear Elástica para Simulação do Estado de Tensão em Poços Inclinação*  
Defesa aprovada: fevereiro de 2017. Orientador: Philippe R. B. Devloo

### 8.4 Trabalhos apresentados em congressos nacionais e internacionais em temas relacionados com o projeto

- **Recent developments in numerical methods for model reduction**, Institute Henri Poincaré, Paris, França; 07-10 de novembro de 2016. <http://www.i3m.univ-montp2.fr/evenements/22-evenements/134-nmpdes#ME3>. Participante: Sônia M. Gomes  
Apresentação de trabalho: *Advanced Finite Element Tools for Multi Physics Simulations of a Hydraulic Fracturing Problem Using a Reduced Basis Approach*
- **Workshop: Industry and mathematics**, Institute Henri Poincaré, Paris, França; 1 a 23 de novembro de 2016; <http://www.i3m.univ-montp2.fr/evenements/22-evenements/134-nmpdes#ME4>. Participante: Sônia M. Gomes. Apresentação de trabalho: *An Adaptive Finite Element Simulation for Well Stability*
- **IPAM Workshop I: Multiphysics, Multiscale, and Coupled Problems in Subsurface Physics**, UCLA, Los Angeles, USA; 3-7 de abril de 2017. Participante: Sônia M. Gomes  
Apresentação de painel: *Object oriented finite element tools for multiphysics simulations and applications to fluid-structure interaction*
- **II Workshop de Matemática e Matemática Aplicada**. UFSJ - Campus Alto Paraopeba, Ouro Branco, MG; 4 e 5 de maio de 2017. Participante: Sônia M. Gomes  
Conferência plenária: *Simulações multifísicas de problemas envolvendo interação fluido-estrutura pelo método de elementos finitos*

### 8.5 Organização de minissimpósios em congressos

- **Novos Desafios na Simulação Numérica de Equações Diferenciais Parciais II** - 31 de agosto a 16 de setembro de 2016: Unicamp e CNMAC 2016  
Financiamento: FAPESP, FAEPEX-Unicamp, CAPES  
Organização: Abimael F. D. Loula - CMA, LNCC; Cristiane O. Faria - IME, UERJ; Maicon R. Correa - IMECC, Unicamp; Sonia M. Gomes - IMECC, Unicamp.
- **Recent Results on Hybrid Discontinuous Galerkin Methods**, 3 a 5 de julho de 2017: Congress on Numerical Methods in Engineering (CMN 2017), Valência, Espanha.  
Organização: Abimael F. D. Loula - CMA, LNCC; Cristiane O. Faria - IME, UERJ; Sonia M. Gomes - IMECC, Unicamp .

### 8.6 Cooperações com outras instituições

- LNCC, RJ: Frederic Valentin. Através de publicações conjuntas, em andamento, e troca de códigos.
- LNCC e UERJ, RJ: Abimael Loula, Sandra Malta e Cristiane Faria. Os resultados desta cooperação incluem a publicação de um artigo e a organização conjunta dos dois eventos, como mencionados acima.
- Departamento de Matemática - IFNMG, Salinas, MG: Agnaldo M. Farias. Através de publicações conjuntas, em andamento, e desenvolvimentos de códigos. O Prof. Farias visitou o LabMeC em fevereiro e junho de 2017, quando foram preparados artigos submetidos para publicação.
- École Centrale Nantes, França; Laurent Stainier - através de publicações e participações em eventos conjuntos e troca de códigos. Atualmente, o Prof. Stainier (do lado francês) e o Prof. Devloo (do lado brasileiro) são coordenadores do grupo de Modelagem e Simulação, integrante do Projeto LIA

(Laboratoire International Associé Franco Brésilien de Energie et Environment), envolvendo uma rede de universidades chamada 5+6 (5 Écoles Centrales francesas (Lille, Lyon, Nantes, Paris e Marseille) e 6 universidades brasileiras (USP, Unicamp, UFRJ, PUC Rio, UFRGS e UFC). Pretende-se co-orientar um aluno de doutorado combinando as ideias de MHM com aproximação elasto-plásticas desenvolvidas pela equipe do Prof. Stainier. Foi submetido pedido de bolsa de doutorado para Fapesp que foi negada por falta de produtividade científica do orientador (Philippe Devloo). Iremos recorrer da decisão.

- University of New South Wales, Austrália: Chongmin Song através de publicações conjuntas, visitas na Unicamp e na UNSW, e troca de códigos. A extensão esta colaboração em um contexto de cooperação internacional no programa SPRINT FAPESP-UNSW está sendo avaliada.
- Institute Henri Poincaré, Paris, França. Setembro a novembro 2016 - Participação de S. M. Gomes no evento temático IHP Numerical Methods for PDEs (NMPDEs) (<http://www.ihp.fr/en/CEB/T3-2016>).
- Brown University, USA: Mark Ainsworth, o qual visitou a Unicamp em 2016, no contexto do evento *Novos Desafios na Simulação Numérica de Equações Diferenciais Parciais II*, Projeto FAPESP 2016/07766-7. A cooperação com o Prof. Ainsworth tem sido em uma nova proposta de construção de espaços do tipo  $\mathbf{H}(\text{div})$  para malhas com topologias híbridas, incluindo pirâmides.

## 9 Conclusões

O presente projeto propõe desenvolver técnicas numéricas para a aproximação de problemas multi escala, centradas no método Multi-Scale Hybrid Method (MHM). Neste primeiro ano do projeto de pesquisa foi alcançado progresso substancial na implementação e verificação do método MHM no ambiente de programação de elementos finitos NeoPZ. Estendemos a técnica MHM para MHM-H(div) onde a solução no interior de cada macro-domínio é aproximada com uma formulação mista de elementos finitos. Mostramos que a formulação nova tem erro de energia menor que formulação original. As aproximações MHM-H(div) satisfazem conservação local dos fluxos aproximados. Em tese de doutorado defendida no período a técnica MHM-H(div) foi aplicada na aproximação de escoamento bifásico com acoplamento geomecânico. Foram feitos novos progressos em formulações mistas baseadas em malhas curvilíneas e adaptativas, bem como na aplicação em problemas não lineares. Para melhor representar singularidades internas dentro dos macro elementos, a utilização de aproximações do tipo SBFem está sendo incorporada com a colaboração do Prof. Song da universidade UNSW, Sidney, Australia. Diversos problemas documentados na literatura foram simulados para a verificação das implementações.

## Referências

- [1] D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, and O. Durán. Hierarchical high order finite element bases for  $\mathbf{H}(\text{div})$  spaces based on curved meshes for two-dimensional regions or manifolds. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 301:241–258, 2016.
- [2] P. R. B. Devloo, O. Durán, S. M. Gomes, and N. Shauer. Mixed finite element approximations based on 3d *hp*-adaptive curved meshes with two types of  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming spaces. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 2017.
- [3] A. M. Farias, P. R. B. Devloo, S. M. Gomes, D. de Siqueira, and D. A. Castro. Two dimensional mixed finite element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the potential and flux divergence. *Comput. & Math. Appl.*, 2017.
- [4] C. Harder, A. L. Madureira, and F. Valentin. A hybrid-mixed method for elasticity. *ESAIM: M2AN*, 50:311–316, 2016.
- [5] C. Harder, D. Paredes, and F. Valentin. A family of multiscale hybrid-mixed finite element methods for the darcy equation with rough coefficients. *J. Comput. Phys.*, 245:107–130, 2013.
- [6] T. Hou Y. Efendiev. *Multiscale finite element methods: theory and applications*. Springer, 2009.

# **Artigos Aceitos em Revistas Indexadas**

**Projeto FAPESP 2016/05155-0**

18/08/2017

Fwd: Your Submission CAMWA-D-17-00260R1

De: "Agnaldo Monteiro Farias Agnaldo" <agnaldofarias.mg@gmail.com>  
Assunto: Fwd: Your Submission CAMWA-D-17-00260R1  
Data: Sab, Agosto 12, 2017 7:09 pm  
Para: Sônia Gomes <soniag@ime.unicamp.br>,"Philippe Devloo"  
<philippedevloo1958@gmail.com>,"Denise Siqueira" <denisesiq@gmail.com>,"Douglas Azevedo  
Castro" <dacastro@mail.uft.edu.br>

---

Boa notícia pessoal.

----- Forwarded message -----  
From: <eesserver@eesmail.elsevier.com>  
Date: 2017-08-12 13:06 GMT-03:00  
Subject: Your Submission CAMWA-D-17-00260R1  
To: [agnaldo@ime.unicamp.br](mailto:agnaldo@ime.unicamp.br), [agnaldofarias.mg@gmail.com](mailto:agnaldofarias.mg@gmail.com)

Ms. Ref. No.: CAMWA-D-17-00260R1 Title: Two dimensional mixed finite  
element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the  
potential and flux divergence Computers and Mathematics with Applications

Dear Professor Agnaldo Monteiro Farias,

I am pleased to inform you that your paper "Two dimensional mixed finite  
element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the  
potential and flux divergence" has been accepted for publication in  
Computers and Mathematics with Applications.

Thank you for submitting your work to Computers and Mathematics with  
Applications.

Yours sincerely,

Leszek Feliks Demkowicz, Ph.D. Hab.  
Editor-in-Chief  
Computers and Mathematics with Applications

\*\*\*\*\*

For further assistance, please visit our customer support site at  
<http://help.elsevier.com/app/answers/list/p/7923>. Here you can search for  
solutions on a range of topics, find answers to frequently asked questions  
and learn more about EES via interactive tutorials. You will also find our  
24/7 support contact details should you need any further assistance from  
one of our customer support representatives.

---

**Attachments:**

untitled-[2].html	
Size:	2 k
Type:	text/html

---

Manuscript Number: CAMWA-D-17-00260R1

Title: Two dimensional mixed finite element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the potential and flux divergence

Article Type: Regular Article

Keywords: Finite elements;  $H(\text{div})$  spaces; mixed formulation; approximation space configurations; convergence rates.

Corresponding Author: Professor Agnaldo Monteiro Farias, Ph.D.

Corresponding Author's Institution:

First Author: Agnaldo Monteiro Farias, Ph.D.

Order of Authors: Agnaldo Monteiro Farias, Ph.D.; Philippe Devloo, Ph.D.; Sônia M Gomes, Ph.D.; Denise Siqueira, Ph.D.; Douglas A Castro, Ph.D.

Abstract: The purpose of the present paper is to analyse two new different possibilities of choosing balanced pairs of approximation spaces for dual (flux) and primal (potential) variables, one for triangles and the other one for quadrilateral elements, to be used in discrete versions of the mixed finite element method for elliptic problems. They can be interpreted as enriched versions of  $BDFM_{k+1}$  spaces based on triangles, and of  $RT_k$  spaces for quadrilateral elements. The new flux approximations are incremented with properly chosen internal shape functions (with vanishing normal components on the edges) of degree  $k + 2$ , and matching primal functions to degree  $k + 1$  (higher than the border fluxes, which are kept of degree  $k$ ). In all these cases, the divergence of the flux space coincide with the primal approximation space on the master element, producing stable simulations. Using static condensation, the global condensed system to be solved in the enriched cases have same dimension (and structure) of the original ones, which is proportional to the space dimension of the border fluxes for each element geometry. Measuring the errors with  $L_2$ -norms, the enriched space configurations give higher convergence rate of order  $k + 2$  for the primal variable, while keeping the order  $k + 1$  for the flux. For affine meshes, the divergence errors have the same improved accuracy rate as for the error in the primal variable. For quadrilateral non-affine meshes, for instance trapezoidal elements, the divergence error has order  $k + 1$ , one unit more than the order  $k$  occurring for  $RT_k$  spaces on this kind of deformed meshes. This fact also holds for  $ABF_k$  elements, but for them the potential order of accuracy does not improve, keeping of order  $k + 1$ .

# Two dimensional mixed finite element approximations for elliptic problems with enhanced accuracy for the potential and flux divergence

Agnaldo M. Farias<sup>a,\*</sup>, Philippe R. B. Devloo<sup>b</sup>, Sônia M. Gomes<sup>c</sup>, Denise de Siqueira<sup>d</sup>, Douglas A. Castro<sup>e</sup>

<sup>a</sup>*Departamento de Matemática, IFNMG, Salinas, MG, Brazil*

<sup>b</sup>*FEC-Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brazil*

<sup>c</sup>*IMECC-Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brazil*

<sup>d</sup>*Departamento de Matemática, UTFPR, Curitiba, PR, Brazil*

<sup>e</sup>*Universidade Federal do Tocantins, Gurupi, TO, Brazil*

---

## Abstract

The purpose of the present paper is to analyse two new different possibilities of choosing balanced pairs of approximation spaces for dual (flux) and primal (potential) variables, one for triangles and the other one for quadrilateral elements, to be used in discrete versions of the mixed finite element method for elliptic problems. They can be interpreted as enriched versions of  $BDFM_{k+1}$  spaces based on triangles, and of  $RT_k$  spaces for quadrilateral elements. The new flux approximations are incremented with properly chosen internal shape functions (with vanishing normal components on the edges) of degree  $k + 2$ , and matching primal functions to degree  $k + 1$  (higher than the border fluxes, which are kept of degree  $k$ ). In all these cases, the divergence of the flux space coincide with the primal approximation space on the master element, producing stable simulations. Using static condensation, the global condensed system to be solved in the enriched cases have same dimension (and structure) of the original ones, which is proportional to the space dimension of the border fluxes for each element geometry. Measuring the errors with  $L^2$ -norms, the enriched space configurations give higher convergence rate of order  $k + 2$  for the primal variable, while keeping the order  $k + 1$  for the flux. For affine meshes, the divergence

---

\*Corresponding author - Phone +55 19 982098044

*Email addresses:* [agnaldo.farias@ifnmg.edu.br](mailto:agnaldo.farias@ifnmg.edu.br) ( Agnaldo M. Farias ),  
[phil@fec.unicamp.br](mailto:phil@fec.unicamp.br) ( Philippe R. B. Devloo ), [soniag@ime.unicamp.br](mailto:soniag@ime.unicamp.br) (Sônia M. Gomes), [denisesiqueira@utfpr.edu.br](mailto:denisesiqueira@utfpr.edu.br) (Denise de Siqueira),  
[dacastro@mail.uft.edu.br](mailto:dacastro@mail.uft.edu.br) (Douglas A. Castro)

errors have the same improved accuracy rate as for the error in the primal variable. For quadrilateral non-affine meshes, for instance trapezoidal elements, the divergence error has order  $k + 1$ , one unit more than the order  $k$  occurring for  $RT_k$  spaces on this kind of deformed meshes. This fact also holds for  $ABF_k$  elements, but for them the potential order of accuracy does not improve, keeping of order  $k + 1$ .

*Keywords:* Finite elements;  $\mathbf{H}(\text{div})$  spaces; mixed formulation; approximation space configurations; convergence rates

---

## 1. Introduction

Mixed finite element methods have the ability to provide accurate and locally conservative fluxes, an advantage over standard  $H^1$ -conforming finite element discretizations [6]. They are based on simultaneous approximations of the primal (potential) and dual (flux) variables, involving two kinds of approximation spaces. In addition to  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming approximation spaces for the flux variable, with continuous normal components over element interfaces, the primal variable is usually represented in discontinuous finite element spaces.

Since the pioneering work by Raviart and Thomas [16] in 1977, different constructions of  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming approximation spaces have been proposed, e.g. in [5, 4, 14]. Recently, several other papers have appeared in the literature due to increasing interest on this subject [2, 17, 13, 9, 8, 1]. In some contexts the vector basis functions are constructed directly on the physical element, but when it comes to solving practical problems in complex domains, shape functions are defined on the master element and then they are transformed to the elements of the partition using Piola transformations.

The main purpose of this article is to analyse two different ways of choosing balanced pairs of approximation spaces  $\mathbf{V}_h \subset \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  and  $U_h \subset L^2(\Omega)$ , for flux and primal variables, by enriching the classic  $BDFM_{k+1}$  spaces for triangular partitions  $\mathcal{T}_h = \{K\}$  of the domain  $\Omega$ , and  $RT_k$  spaces for quadrilaterals. When applied to discrete versions of the mixed finite element method for two dimensional elliptic problems, the goal is to obtain enhanced accuracy for the potential and flux divergence, while keeping fixed the flux accuracy. Using static condensation, the global condensed system to be solved in the enriched cases have same dimension (and structure) of the original ones, which is proportional to the space dimension of the border fluxes for each element geometry.



The different contexts share the following basic characteristics.

1. The functions  $\mathbf{q} \in \mathbf{V}_h$  and  $\varphi \in U_h$  are piecewise defined in each element  $K$  by locally backtracking polynomial spaces  $\hat{\mathbf{V}}$  and  $\hat{U}$  defined on the master element  $\hat{K}$ . The transformations  $\mathbb{F}^{\text{div}}$  and  $\mathbb{F}$  used in their constructions are defined in terms of invertible linear or bilinear geometric mappings  $\mathbf{x} : \hat{K} \rightarrow K$ .
2. On the master element, the flux approximation spaces  $\hat{\mathbf{V}}$  are spanned by a hierarchy of vector shape functions, which are organized into two classes: the shape functions of interior type, with vanishing normal components over all element edges, and the shape functions associated to the element edges. Thus, a direct factorization  $\hat{\mathbf{V}} = \hat{\mathbf{V}}^\partial \oplus \hat{\mathbf{V}}^\circ$ , in terms of edge and internal flux functions, naturally occurs.
3. In all the cases, the commutation de Rham property holds. Specifically,

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{V}} = \hat{U}. \quad (1)$$

4. In the flux space factorization of the enriched context, the edge component is kept fixed, but the internal component is formed by the original internal functions with degree increased by one. For consistency, the degree of the enriched scalar approximation space is also raised by one.

Different techniques have been used by numerical analysts to improve certain property of the numerical solution of a given method implemented on their codes. One popular strategy is to do post-processing, which has been considered for mixed finite element approximations of elliptic problems, as described in [3] and frequently adopted since then. The type of intrinsic enrichment strategy used in the present paper has also been previously adopted for the mixed method. For instance, on a triangular geometry, the classic  $BDM_k$  space configuration [5] uses vector polynomials of total degree  $k$  for the flux variable and polynomials of total degree  $k - 1$  for the potential variable, given uneven accuracy orders  $k + 1$  for the flux and  $k$  for the potential. The  $BDFM_{k+1}$  space has been created as an enrichment of the  $BDM_k$  space configuration by using polynomials of total degree  $k$  for the potential variable, and for the flux variable the vector polynomials of total degree  $k$  are augmented with the internal shape functions of total degree  $k + 1$  to obtain the same accuracy order  $k + 1$  for both flux and potential variables. A similar

principle has been applied on the construction of the  $RT_k$  space for quadrilateral elements [16]. The approximation space for the potential variable uses polynomials of maximum degree  $k$  in each coordinate, and for the flux approximation the vector polynomials of maximum degree  $k$  are augmented with some properly chosen internal shape functions of maximum degree  $k+1$  in order to get stability. Analogously, to improve the divergence accuracy of the  $RT_k$  solutions based on non-affine quadrilateral meshes from order  $k$  to order  $k+1$ , the idea behind the construction of the  $ABF_k$  space in [2] is also to do enrichment by adding to the  $RT_k$  flux space some properly chosen internal functions of degree  $k+1$ , and by enlarging the potential space. All these constructions are based on the de Rham principle (i.e. divergence of the flux space coinciding with the potential space on the master element).

Following the same principle, enriched space versions  $BDFM_{k+1}^+$  and  $RT_k^+$  are considered in the present paper, where their flux approximations are incremented with properly chosen internal shape functions of degree  $k+2$ , and matching primal functions to degree  $k+1$  (higher than the border fluxes, which are kept of degree  $k$ ). Measuring the errors with  $L^2$ -norms, an analysis is performed to demonstrate that for the flux variable the order of accuracy is  $k+1$ , for all space configurations. For the potential variable, the convergence rate is improved to order  $k+2$  when the enriched versions are applied on triangles and quadrilaterals, as compared with order  $k+1$  of the original ones  $BDFM_{k+1}$  and  $RT_k$ , with same condensed matrix dimension (and structure). Furthermore, the divergence errors have the same orders of convergence reached by the potential variable, excepting when non-affine quadrilateral meshes are used.

For distorted quadrilateral meshes, it is well known that the divergence error is of order  $k$  for the classic  $RT_k$  space. We prove that this result can be upgraded to get divergence errors of order  $k+1$  when the enriched version  $RT_k^+$  is applied. The error analysis follows the principles used for the construction of  $ABF_k$  spaces [2], with the advantage of getting an additional enhancement of the potential accuracy of order  $k+2$  (instead of order  $k+1$  given by the  $RT_k$  and  $ABF_k$  space configurations for quadrilateral meshes).

All the implementations of the present paper are performed in the object-oriented scientific computational environment NeoPZ [15]. This is a general finite element approximation software organized by modules for a broad classes of technologies, incorporating a variety of element geometries, general refinement patterns, variational formulations, and approximation spaces. Especially, finite element spaces for  $H^1$ -conforming approximations imple-

mented in NeoPZ are represented locally on the geometric elements by expansions in terms of a hierarchy of scalar shape functions [11], which can be based on non-uniform meshes without any constraint on polynomial degree distribution or hanging sides [7]. The construction of vector shape functions for the composition of  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming approximations in NeoPZ is based on the choice of appropriate constant vector fields, based on the geometry of each master element, which are multiplied there by scalar basis functions, and then mapped to the geometric elements by the Piola transformation. The vector shape functions are classified as being of edge or of internal type. In NeoPZ coding structure, it is possible to choose the order of approximation of the edge flux functions independently from the order of internal functions, a required capability for the implementation of the enriched flux spaces documented in this paper, which use internal functions with two orders higher than the order of the edge shape functions.

The paper is organized as follows. The mixed element formulation for an elliptic model problem is set in Section 2. The proposed approximation space configurations are described in Section 3, where the static condensation strategy is stated for them. In Section 4 an error analysis is performed for the new spaces and the rates of convergence are compared with the other cases already known. The results of the applications of these approximation spaces on discrete formulations of two model problems are discussed in Section 5. Section 6 gives the final conclusions of the article.

## 2. Mixed finite element method for a model problem

Consider a model Poisson problem expressed as:

$$\boldsymbol{\sigma} = -\nabla u \quad \text{in } \Omega, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = f \quad \text{in } \Omega, \quad (3)$$

$$u = 0 \quad \text{in } \partial\Omega, \quad (4)$$

where  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  is the computational domain with Lipchitz boundary  $\partial\Omega$ .

The classical mixed formulation for problem (2)-(4) requires the space

$$\mathbf{H}(\text{div}, \Omega) = \left\{ \mathbf{q} \in [L^2(\Omega)]^2; \nabla \cdot \mathbf{q} \in L^2(\Omega) \right\}.$$

As studied in [6], the mixed formulation for problem (3)-(4) is given as: find



**Mixed finite element approximations based on 3D hp-adaptive curved meshes with two types of  $H(\text{div})$ -conforming spaces**

Journal:	<i>International Journal for Numerical Methods in Engineering</i>
Manuscript ID	Draft
Wiley - Manuscript type:	Research Article
Date Submitted by the Author:	n/a
Complete List of Authors:	Devloo, Philippe; Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Civil Arquitetura e Urbanismo Durán, Omar; Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica Gomes, Sônia; Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica Schauer, Nathan; University of Illinois at Urbana-Champaign, Civil & Environmental Engineering,
Keywords:	Mixed finite elements, $H(\text{div})$ -conforming spaces, Curved elements, hp-adaptivity

SCHOLARONE™  
Manuscripts

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING

*Int. J. Numer. Meth. Engng* 2015; **00**:1–20

Published online in Wiley InterScience (www.interscience.wiley.com). DOI: 10.1002/nme

## Mixed finite element approximations based on 3D $hp$ -adaptive curved meshes with two types of $H(\text{div})$ -conforming spaces

P. R. B. Devloo<sup>1</sup>, O. Durán<sup>2</sup>, S. M. Gomes<sup>3\*</sup> and N. Shauer<sup>4</sup><sup>1</sup>Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brazil<sup>2</sup>Faculdade de Engenharia Mecânica - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brazil<sup>3</sup>Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brazil<sup>4</sup>Civil & Environmental Engineering, University of Illinois, Urbana-Champaign, USA

### SUMMARY

Two stable approximation space configurations are treated for the mixed finite element method for elliptic problems based on curved meshes. Their choices are guided by the property that, in the master element, the image of the flux space by the divergence operator coincides with the potential space. By using static condensation, the sizes of global condensed matrices, which are proportional to the dimension of border fluxes, are the same in both configurations. The meshes are composed of different topologies (tetrahedra, hexahedra or prisms). Simulations using asymptotically affine uniform meshes, exactly fitting a spherical like region, and constant polynomial degree distribution  $k$ , show  $L_2$ -errors of order  $k+1$  or  $k+2$  for the potential variable, while keeping order  $k+1$  for the flux in both configurations. The first case corresponds to  $RT(k)$  and  $BDFM(k+1)$  spaces for hexahedral and tetrahedral meshes, respectively, but holding for prismatic elements as well. The second case, further incrementing the order of approximation of the potential variable, holds for the three element topologies. The case of  $hp$ -adaptive meshes is considered for a problem modelling a porous media flow around a cylindrical horizontal well with elliptical drainage area. The effect of parallelism and static condensation in CPU time reduction is illustrated. Copyright © 2015 John Wiley & Sons, Ltd.

Received ...

KEY WORDS: Mixed finite elements;  $H(\text{div})$ -conforming spaces; curved elements;  $hp$ -adaptivity

### 1. INTRODUCTION

Mixed finite element formulations for elliptic problems are characterized by simultaneous calculations of the potential and of the flux field. In addition to  $H(\text{div})$ -conforming finite element spaces for flux approximations, with continuous normal components over element interfaces, the potential variable is usually represented in discontinuous finite element spaces. If these

\*Correspondence to: IMECC-Unicamp, Rua Sérgio Buarque de Holanda, 651, CEP: 13083-859, Campinas-SP, Brazil.  
E-Mail: soniag@ime.unicamp.br

approximation spaces are chosen properly, they have the ability to provide accurate and locally conservative fluxes, an advantage over standard  $H^1$ -conforming finite element discretizations.

Since the pioneering work by Raviart and Thomas [1], a variety of approximation space configurations for mixed formulation have been proposed in the literature [2]. However their implementations are much more complex than for  $H^1$ -conforming element schemes. The assemblage and implementation of  $H(\text{div})$  bases, and the evaluation of the corresponding variational formulations present a challenge in terms of code complexity. In addition, these complications increase when the interest is on higher order finite element schemes, non-uniform order approximation on unstructured meshes, and on the use of curved elements of variable topologies. This is a reason for the fact that there exist few computational environments available to the scientific community which implement mixed formulations using approximation spaces for such variety of finite element meshes.

Recently, increasing efforts have been put forward the development and/or implementation of convenient sets of basis functions for higher order  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming approximations ([3, 4, 5, 6, 8, 10]). In this direction, the present work focuses on the construction of hierarchic  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming shape functions for flux approximations based on curved 3D meshes, which can be composed of tetrahedral, hexahedral or prismatic elements, extending the developments in [10], where 3D affine elements have been treated. The following aspects shall be explored:

- (i) Two stable space configuration cases shall be considered for curved elements. As proved in [10] for affine elements, they produce different orders of accuracy for the potential variable ( $k + 1$  or  $k + 2$ ), while keeping fixed the order of accuracy ( $k + 1$ ) of the flux variable. By increasing the degree of polynomials used in the potential approximations, stabilization is obtained by enhancing flux spaces with internal shape functions, while keeping the border fluxes of degree  $k$ . In all the cases the choices of approximation spaces are guided by the property that, in the master element, the image of the flux space by the divergence operator coincides with the potential space. Furthermore, using static condensation, the global condensed matrices to be solved have reduced dimension, which is proportional to the dimension of border fluxes. The first case corresponds to RT( $k$ ) and BDFM( $k+1$ ) spaces for hexahedral and tetrahedral meshes, respectively, but holding for prismatic elements as well. The second case is a recent new type of approximation proposed in [10], further incrementing the order of approximation of the potential variable, which holds for the three element topologies.
- (ii) The vector-valued shape functions used for approximations of the flux variable are firstly defined on the master element, and then they are mapped to the geometric elements by the Piola transformation, and assembled in order to get continuous normal components. On the master element, the shape functions have the form  $\hat{\Phi} = \hat{\varphi} \hat{\mathbf{v}}$ , where  $\hat{\varphi}$  is taken from a set of  $H^1$  hierarchical scalar shape functions, and  $\hat{\mathbf{v}}$  are constant vector fields properly chosen according to the element geometry. Two types of vector-valued shape functions occur in this methodology. There are those ones of interior type, with vanishing normal components over all element faces. Otherwise, they are classified as of face type, having normal component on the face associated to them coinciding with the restriction of the corresponding scalar shape function used in their definition, and vanishing over the other faces. This property guarantees that the normal traces of the face shape functions on quadrilateral (or triangular) faces are

of the same nature independently of the element topology where they occur. This fact allows an easy combination of different element topologies on the same hybrid mesh, with varying polynomial degree distribution.

- (iii) Assembly of  $hp$ -adaptive  $H(\text{div})$ -conforming approximations is described. Implementation is performed in the NeoPZ computational platform<sup>†</sup>, which is an open-source object-oriented project providing a comprehensive set of high performance tools for finite element simulations. For instance, the required families of hierarchic high order scalar shape functions used to form  $H^1$ -conforming approximations spaces are available for all element geometries in two and three-space dimensions [11], which can be based on curved transfinite elements, and  $hp$ -adapted meshes without any constraint on hanging faces and polynomial degree distribution [12].

Section 2 is dedicated to the model problem setting, its discrete mixed finite element formulation, and to the description of the basic notation and used tools. The methodology for the definition of a hierarchy of  $\mathbf{H}(\text{div})$  shape functions is shown in Section 3. The two types of used approximation spaces, and their assembly on  $hp$ -adapted meshes are included Section 4. A test problem having known analytical solution is chosen for verification of the new developed techniques, in Section 5. It is defined on a spherical like region, which is partitioned by uniform hexahedral and tetrahedral curved meshes, and uniform polynomial degree distribution is used. The construction of these curved meshes, fitting exactly the smooth region boundary, is described. The refinement strategy is similar to the one described in [25], Chapter 8.3, for which the convergence analysis on affine elements can be extended. Simulation results show the expected convergence rates. In order to illustrate the effect of parallelism and static condensation in CPU time reduction, the flow in a porous media around a cylindrical horizontal well with elliptical drainage area is also simulated using a sequence of  $hp$ -adaptive meshes composed of hybrid prismatic and hexahedral curved elements.

## 2. MODEL PROBLEM AND DISCRETE MIXED FINITE ELEMENT FORMULATION

Consider the model Poisson problem written in the form

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= f \text{ in } \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma} &= -\mathbf{K} \nabla u \text{ in } \Omega, \\ u &= u_D \text{ on } \partial\Omega_D, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\eta} &= g \text{ on } \partial\Omega_N.\end{aligned}$$

where  $\mathbf{K}$  is a positive definite tensor.

As studied in [2, 13], discrete variational mixed formulations of this problem require finite dimensional approximation spaces  $U^\Gamma \subset L^2(\Omega)$  for the scalar variable  $u$ , and  $\mathbf{V}^\Gamma \subset \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  for the vector-valued variable  $\boldsymbol{\sigma}$ . These approximations are piecewise defined on a given partition  $\Gamma =$

<sup>†</sup><http://github.com/labmec/neoPZ>

# Trabalhos Apresentados em Conferências

Projeto FAPESP 2016/05155-0



# **New approximation space configuration for the mixed finite element method for elliptic problems based on curved 3D meshes**

**P.R.B. Devloo<sup>\*</sup>, S.M Gomes<sup>\*</sup>, O Triana<sup>\*</sup>, and N. Shauer<sup>\*\*</sup>**

**\*Universidade Estadual de Campinas, SP, Brazil**

**[phil@fec.unicamp.br](mailto:phil@fec.unicamp.br), [soniag@ime.unicamp.br](mailto:soniag@ime.unicamp.br), [omar@dep.fem.unicamp.br](mailto:omar@dep.fem.unicamp.br)**

**\*\*University of Illinois, Urbana-Champaign, USA**

**[nathan.sh@gmail.com](mailto:nathan.sh@gmail.com)**

This work focuses on new  $H(\text{div})$ -conforming finite element spaces for flux approximations based on curved 3D meshes composed of different topologies (tetrahedral, hexahedral or prismatic elements). Following the developments in [1] for affine elements, we shall consider for curved meshes an stable configuration for approximation spaces to produce enhanced accuracy of order  $k+2$  for the primal variable, while keeping the order of accuracy  $k+1$  of the flux variable. By increasing the degree of polynomials used in the primal approximations, stabilization is obtained by enhancing flux spaces with internal shape functions, while keeping the border fluxes of degree  $k$ . The choices of approximation spaces are guided by the property that, in the master element, the image of the dual space by the divergence operator coincides with the primal space. Using static condensation, the global condensed matrices to be solved have reduced dimension, which is proportional to the dimension of border fluxes. For verification, a test problem with known analytical solution is adopted, showing the expected convergence rates. In order to illustrate the effect of parallelism and static condensation in CPU time reduction, the flow in a porous media around a horizontal cylindrical well is also simulated using a sequence of hp-adaptive meshes.

## **REFERENCE**

1. D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, D. de Siqueira, O. Durán. Three dimensional hierarchical mixed finite element approximations with enhanced primal variable accuracy. Comput. Meth. Appl. Mech. and Eng. 2016. To appear.



## HIGH ORDER FINITE ELEMENT BASES FOR $H(\text{div})$ SPACES BASED ON 3D ADAPTIVE CURVED MESHES

**Philippe R. B. Devloo**

**Omar Durán**

**Sônia M. Gomes**

phil@fec.unicamp.br

omaryesiduran@gmail.com

soniag@ime.unicamp.br

Universidade Estadual de Campinas (FEC, FEM and IMECC)

Campinas, SP, Brazil

**Nathan Shauer**

nathan.sh@gmail.com

Civil & Environmental Engineering, University of Illinois Urbana-Champaign, USA

**Abstract.** Two stable approximation space configurations are treated for discrete versions of the mixed finite element method for elliptic problems. The construction of these approximation spaces are based on curved 3D meshes composed of different topologies (tetrahedral, hexahedral or prismatic elements). Furthermore, their choices are guided by the property that, in the master element, the image of the flux space by the divergence operator coincides with the primal space. Additionally, by using static condensation, the global condensed matrices sizes, which are proportional to the dimension of border fluxes, are reduced, noting that this dimension is the same in both configurations. For uniform meshes with constant polynomial degree distribution, accuracy of order  $k + 1$  or  $k + 2$  for the primal variable is reached, while keeping order  $k + 1$  for the flux in both configurations. The case of  $hp$ -adaptive meshes is treated for application to the simulation of the flow in a porous media around a cylindrical well. The effect of parallelism and static condensation in CPU time reduction is illustrated.

**Keywords:** Mixed finite elements,  $H(\text{div})$ -conforming spaces, curved elements,  $hp$ -adaptivity

---

CILAMCE 2016

Proceedings of the XXXVII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering  
Suzana Moreira Ávila (Editor), ABMEC, Brasília, DF, Brazil, November 6-9, 2016

## Stokes flow computational modeling and comparative study between approximation spaces

Pablo G S Carvalho \*, and Philippe R B Devloo \* Omar D. Triana \*

\* Universidade Estadual de Campinas  
Laboratório de Mecânica Computacional (LabMeC)  
Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo (FEC)  
Cidade Universitária - Campinas, SP, Brazil  
E-mail: phil@fec.unicamp.br, Web page: <http://www.labmec.org.br>

### ABSTRACT

The present work proposes a numerical analysis adapted to different approximation spaces for Stokes flow problem. A computational method based on a mathematical formulation will be constructed for continuous Finite Element Method (FEM) and compared to H(Div) and Discontinuous Galerkin Method (DGM) [1]. In order to obtain a numerical simulation compatible with imposed conditions, a computational code will be implemented in PZ [2], an object oriented environment for scientific programming. This approach will make possible a comparative study between approximation spaces, verifying orders, errors and rates of convergence; identifying best performance. This work will also be motivated to describe the motion of a viscous fluid relevant to civil construction applications. In this direction, a computational modelling of Stokes flow through a porous domain will be simulated to enable further analysis of self-compacting concrete (SCC) flow around reinforcing bars. Results can be compared to a homogenization technique representing reinforcing bars domain by the Darcy law and interface coupled with Stokes flow theory. The aim of this work is to understand a relevant and applicable Stokes flow problem, verifying performance of approximation spaces and mathematical optimization.

### REFERENCES

- [1] P. Devloo, T. Forti, S. Gomes, "A combined continuous-discontinuous finite element method for convection-diffusion problems.", *Latin American Journal of Solids & Structures*, **4**(3), (2007).
- [2] P. Devloo, 'PZ: An object oriented environment for scientific programming', *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **150**(1), 133-153 (1997).

## The Multiscale Hybrid Method in mixed finite element context

Philippe R B Devloo\*, Frederic Valentin<sup>†</sup> and Sonia M Gomes \* Omar D. Triana \*

\* Universidade Estadual de Campinas  
Laboratório de Mecânica Computacional (LabMeC)  
Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo (FEC)  
Cidade Universitária - Campinas, SP, Brazil  
E-mail: phil@fec.unicamp.br, Web page: <http://www.labmec.org.br>

<sup>†</sup> Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC)  
Petropolis - RJ, Brazil  
E-mail: valentin@lncc.br, Web page: <http://www.lncc.br>

### ABSTRACT

The Multiscale Hybrid Method (MHM) [1, 2, 3] is a numerical technique targeted to approximate systems of differential equations with strongly varying coefficients. In this work we develop different descriptions of the MHM technique such that it can be implemented as a substructuring method where either the singular modes of the solution in each subdomain are modelled as an additional variable or where chosen equations are delayed.

The theoretical analysis of the MHM method is based on considering a piecewise continuous flux space on the boundary of the macroscopic domains and solving the system of differential equations on the interior of the domains exactly. In all publications on MHM, the solution on the interior of the domain has been computed using continuous finite element methods. In this work we develop a numerical formulation of MHM where  $H(\text{div})$  approximations are used in the interior of each macro domain. Both formulations are compared when applied to the approximation of Darcy's flow applied to heterogeneous porous media.

Finally MHM approximations using mixed formulation inside the macro elements are applied to the numerical simulation of multiphase flow through porous media emphasizing the advantages in terms of computational cost and numerical precision.

### REFERENCES

- [1] C. Harder, D. Paredes, F. Valentin, "On a multiscale hybrid-mixed method for advective-reactive dominated problems with heterogeneous coefficients", *Multiscale Model. Simul.*, **13**(2), 491-518 (2015).
- [2] C. Harder, A. L. Madureira, F. Valentin, "A hybrid-mixed method for elasticity", *ESAIM: M2AN*, **50**, 311-316 (2016).
- [3] Christopher Harder and Diego Paredes and Frédéric Valentin, "A family of Multiscale Hybrid-Mixed finite element methods for the Darcy equation with rough coefficients", *Journal of Computational Physics*, **245**, 107-130 (2013).

# Enhanced mixed finite element approximations based on 2D or 3D curved meshes<sup>1</sup>

**S.M Gomes**

**IMECC- Universidade Estadual de Campinas, SP, Brazil**

**soniag@ime.unicamp.br**

The developments in [1], holding for affine elements, show stable configurations for approximation spaces in the mixed finite element method to produce enhanced accuracy of order  $k+2$  for the primal variable (and also for the flux divergence), while keeping the order of accuracy  $k+1$  of the flux variable. They can be interpreted as enriched versions of BDFM( $k+1$ ) spaces based on triangles or tetrahedra, of RT( $k$ ) spaces for quadrilateral or hexahedral elements, or of Nédélec spaces  $N(k)$  for prisms, but they can be implemented with equivalent computational costs (same structure and dimension of the condensed system, which is proportional to the dimension of the border fluxes). In this talk the focus is on the application of these principles to contexts where the meshes are formed by curved elements. Simulation results shall be presented for uniformly refined meshes formed by curved (but asymptotically affine) elements, exactly fitting a spherical like region, and using uniform polynomial degree distributions, confirming the expected rates of convergence predicted in [1] for affine cases. However, it is known that for more general non-affine cases the convergence rates may deteriorate. An error analysis for non-affine quadrilateral or hexahedral meshes, obtained by general multi-linear geometric transformations, shall be discussed in order to evaluate the effect of using enhanced approximation spaces instead of the corresponding original RT( $k$ ) spaces. For instance, it shows that, instead of order  $k+1$  for the primal variable and deteriorated order  $k$  for flux divergence, which is known to hold for RT( $k$ ) spaces based on such non-affine quadrilateral meshes, respective improved orders  $k+2$  and  $k+1$  occur with the proposed enhanced space approximations. For non-affine 3D geometries, the accuracy deterioration may be even worst, affecting the flux variable as well. The analysis shows that accuracy rates for flux, primal and divergence variables are respectively of order  $k$ ,  $k+1$  and  $k-1$  for RT( $k$ ) spaces based on non-affine hexahedra, but with the corresponding new enhanced context the divergence errors can be improved to order  $k$ .

## REFERENCE

[1] D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, D. de Siqueira, O. Durán. Three dimensional hierarchical mixed finite element approximations with enhanced primal variable accuracy. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 2016. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 306 (2016) 479–502.

---

<sup>1</sup> Results obtained in different works in collaboration with P.R.B. Devloo, A. M. Farias, D. de Siqueira, O. Triana, N. Shauer, and D. A. Castro

# **Teses Defendidas**

**Projeto FAPESP 2016/05155-0**



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Mecânica e Instituto de Geociências

OMAR YESID DURAN TRIANA

**DEVELOPMENT OF A SURROGATE MULTISCALE RESERVOIR  
SIMULATOR COUPLED WITH GEOMECHANICS**

***DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR SUBSTITUTO DE  
RESERVATÓRIO MULTIESCALA ACOPLADO COM GEOMECÂNICA***

Thesis presented to the Petroleum Engineering  
Department of the State University of Campinas  
in partial fulfillment of the requirements for the  
degree of Doctor in Science and Petroleum Engi-  
neering.

*Tese apresentada ao Departamento de Engen-  
haria de Petróleo da Universidade Estadual de  
Campinas como parte dos requisitos exigidos para  
a obtenção do título de Doutor em Ciências e En-  
genharia de Petróleo.*

**Orientador: Philippe Remy Bernard Devloo**

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA  
TESE DEFENDIDA PELO ALUNO OMAR YESID DURAN  
TRIANA ORIENTADO PELO PROF. DR. PHILIPPE REMY  
BERNARD DEVLOO.

**Assinatura do Orientador**

---

CAMPINAS  
2017



# UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Faculdade de Engenharia Mecânica



Comissão de Programa de Pós-Graduação Interdisciplinar em Ciências e Engenharia de Petróleo

## Ata da Sessão pública de defesa de tese para obtenção do título de Doutor em Ciências e Engenharia de Petróleo, na área de Exploração, a que se submeteu o aluno Omar Yesid Durán Triana - RA 114538, orientado pelo Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo.

Aos vinte e sete dias do mês de julho do ano de dois mil e dezessete, às 09:00 horas, no(a) Sala A - Departamento de Engenharia de Petróleo da Universidade Estadual de Campinas, reuniu-se a Comissão Examinadora da defesa em epígrafe indicada pela Comissão de Pós-Graduação do(a) Faculdade de Engenharia Mecânica, composta pelo Presidente e Orientador Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo (FEC / Unicamp) e pelos membros Prof. Dr. Eduardo Cardoso de Abreu (IMECC / Unicamp), Dr. Leonardo José do Nascimento Guimarães (UFPE), Profa. Dra. Rosângela Barros Zanoni Lopes Moreno (FEM / Unicamp) e Dr. José Luis Drummond Alves (COPPE/UFRJ), para analisar o trabalho do candidato Omar Yesid Durán Triana, apresentado sob o título "Desenvolvimento de um simulador substituto de reservatório multi-escala acoplado com geomecânica".

O Presidente declarou abertos os trabalhos, a seguir o candidato dissertou sobre o seu trabalho e foi arguido pela Comissão Examinadora. Terminada a exposição e a arguição, a Comissão reuniu-se e deliberou pelo seguinte resultado:

### ☒ APROVADO

☐ APROVADO CONDICIONALMENTE (ao atendimento das alterações sugeridas pela Comissão Examinadora especificadas no parecer anexo)

☐ REPROVADO (anexar parecer circunstanciado elaborado pela Comissão Examinadora).

Para fazer jus ao título de Doutor, a versão final da tese, considerada Aprovada ou Aprovada Condicionalmente, deverá ser entregue à CPG dentro do prazo de 60 dias, a partir da data da defesa. De acordo com o previsto na Deliberação CONSU-A-10/2015, Artigo 42, parágrafo 1º, inciso II e parágrafo 2º, o aluno Aprovado Condicionalmente que não atender a este prazo será considerado Reprovado. Após a entrega do exemplar definitivo e a sua conferência pela CPG, o resultado será homologado pela Comissão Central de Pós-Graduação da UNICAMP, conferindo título de validade nacional aos aprovados.

Nada mais havendo a tratar, o Senhor Presidente declara a sessão encerrada, sendo a ata lavrada por mim, que segue assinada pelos Senhores Membros da Comissão Examinadora, pelo Coordenador da Comissão de Pós-graduação, com ciência do aluno.

  
Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo  
Presidente da Comissão Examinadora

  
Prof. Dr. Eduardo Cardoso de Abreu

  
Dr. Leonardo José do Nascimento Guimarães

  
Profa. Dra. Rosângela Barros Zanoni Lopes Moreno

  
Dr. José Luis Drummond Alves

  
Omar Yesid Durán Triana  
Aluno(a)

  
Brunna F. Moreno  
Secretaria de Pós Graduação

  
Prof. Dr. Marco Lúcio Bittencourt  
Coordenador(a) da CPG

### CÓDIGO DE AUTENTICIDADE

Verifique a autenticidade deste documento na página <http://www.daconline.unicamp.br/ActionConsultaDiploma.asp>  
Código: 5f6f818c09b939b201d2198821aa9d3f10005341

UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas  
Comissão Central de Pós-Graduação  
Rua 6 de Agosto, 251 - Cidade Universitária - Barão Geraldo - Campinas/SP -13083-970



## Abstract

Reservoir simulation softwares are used as a tool to understand the behavior of petroleum reservoirs and, eventually, to diagnose operating anomalies. The increased computational power allows reservoir engineers to develop more realistic geological models, that are very refined and have a large amount of input data. As an example, multi-physics models couple geomechanical, thermal, geochemical effects and include multiple scales inherent to full field models. These models are generally costly, because the direct calculation of a refined geocellular model, generates a huge linear systems of equations. When coupling the geomechanical deformation with fluid flow through porous media, a very large system of equations associated with elasticity, is coupled to an equally large system of equations, which is associated with fluid flow and mass transport. Therefore, most simulations are performed without considering the geomechanical coupling. These simulations ignore physical phenomena that can have serious environmental impacts such as fault activation, land subsidence and others. In this work an innovative multiscale method is developed, allowing the direct simulation of a fine geocellular model in a cost-effective way. A surrogate model has also been developed for simulating the geomechanical deformation coupled to the fluid model. The goal is obtain approximations for the nonlinear multiphysic problem described by the multiphase poroelastic equations. In order to attain this goal, different finite element technologies are integrated within a reservoir simulator, solving problems that include a geocellular model with different scales, coupled with a surrogate model of geomechanical deformation. The mathematical model is written in a form suitable for the NeoPZ finite element framework. At each timestep, the approximation is obtained as a sequence of elastic, Darcy's and transport problems. Each component in this sequence is treated by a different numerical scheme and/or approximation space; first, a surrogate model, inspired on the theory of poroelastic inclusions, is used for the calculation of the geomechanical deformation of rocks; second, a multiscale method based on mixed approximation of multiphase equations is used; third, for the convection of the phases, a mixed multiscale approximation of the Darcy's velocity field is used together with a first-order upwind scheme. The potential of the numerical approach is demonstrated through several bi-dimensional and three-dimensional examples, in which reservoirs are simulated using unstructured meshes. All simulations have been executed using low cost computational structures.

**Keywords:** Finite elements; Reservoir Simulator; Poroelasticity; Reduced Base Modeling; Multiscale Modeling.



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE  
CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e  
Computação Científica

MARGUI ANGÉLICA ROMERO PINEDO

**Métodos de Elementos Finitos Mistos-Híbridos  
para um Problema Elíptico Não Linear em  
Malhas Quadrilaterais**

Campinas

2016

Margui Angélica Romero Pinedo

## **Métodos de Elementos Finitos Mistos-Híbridos para um Problema Elíptico Não Linear em Malhas Quadrilaterais**

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutora em Matemática Aplicada.

Orientador: Maicon Ribeiro Correa

Coorientadora: Sônia Maria Gomes

Este exemplar corresponde à versão final da Tese defendida pela aluna Margui Angélica Romero Pinedo e orientada pelo Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa.

Campinas

2016

**Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s):** CNPq, 140366/2015-6; CAPES

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica  
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

R664m Romero Pinedo, Margui Angélica, 1985-  
Métodos de elementos finitos mistos-híbridos para um problema elíptico não linear em malhas quadrilaterais / Margui Angélica Romero Pinedo. – Campinas, SP : [s.n.], 2016.

Orientador: Maicon Ribeiro Correa.

Coorientador: Sônia Maria Gomes.

Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Método dos elementos finitos. 2. Equações diferenciais não-lineares - Soluções numéricas. I. Correa, Maicon Ribeiro, 1979-. II. Gomes, Sônia Maria, 1952-. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Mixed-hybrid finite element methods for a non-linear elliptic problem on quadrilateral meshes

**Palavras-chave em inglês:**

Finite element methods

Differential equations, Nonlinear - Numerical solutions

**Área de concentração:** Matemática Aplicada

**Titulação:** Doutora em Matemática Aplicada

**Banca examinadora:**

Maicon Ribeiro Correa [Orientador]

Philippe Remy Bernard Devloo

Giuseppe Romanazzi

Márcio Rentes Borges

Cristiane Oliveira de Faria

**Data de defesa:** 02-12-2016

**Programa de Pós-Graduação:** Matemática Aplicada



UNICAMP- Universidade Estadual de Campinas  
IMECC - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica  
Secretaria de Pós-Graduação  
Fone (19) 3521-5933 - 3521-5929  
e-mail: [posgrad@ime.unicamp.br](mailto:posgrad@ime.unicamp.br)  
Rua Sérgio Buarque de Holanda, 651 - 13083-859 - Campinas- SP- Brasil  
<http://www.ime.unicamp.br/posgrad>

**Ata da Sessão pública de defesa de tese para obtenção do título de Doutor(a) em Matemática Aplicada a que se submeteu o(a) aluno(a) Margui Angélica Romero Pinedo – RA 142302 orientado(a) pelo(a) Prof(a). Dr(a). Maicon Ribeiro Correa e coorientado(a) pelo(a) Prof(a). Dr(a) Sonia Maria Gomes.**


Aos 02 dias do mês de dezembro do ano de dois mil e dezesseis, às 10 horas, no Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas, reuniu-se a Comissão Examinadora da defesa em epígrafe indicada pela Comissão de Pós-Graduação do IMECC, composta pelos Professores Doutores: **Maicon Ribeiro Correa** - IMECC-UNICAMP (Presidente e Orientador(a)), **Philippe Remy Bernard Devloo** (FEC-UNICAMP), **Giuseppe Romanazzi** (IMECC-UNICAMP), **Márcio Rentes Borges** (LNCC) e **Cristiane Oliveira de Faria** (UERJ), para analisar o trabalho do(a) candidato(a) **Margui Angélica Romero Pinedo** apresentado sob o título "**Métodos de Elementos Finitos Mistos-Híbridos para um Problema Elíptico Não Linear em Malhas Quadrilaterais**". O(A) Presidente declarou abertos os trabalhos, a seguir o(a) candidato(a) dissertou sobre o seu trabalho e foi arguido(a) pela Comissão Examinadora. Terminada a exposição e a arguição, a Comissão reuniu-se e deliberou pelo seguinte resultado:

☒ **APROVADO**

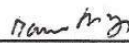
☐ **APROVADO CONDICIONALMENTE** ao atendimento das alterações sugeridas pela Comissão Julgadora especificadas no parecer em anexo.

☐ **REPROVADO**

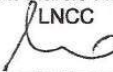
Para fazer jus ao título de Doutor(a) a versão final da Tese, considerada Aprovada ou Aprovada Condicionalmente, deverá ser entregue à CPG dentro do prazo de 60 dias, a partir da data da defesa. De acordo com o previsto na Deliberação CONSU-A10/2015, Artigo 42, parágrafo 1º, inciso II e parágrafo 2º, o(a) aluno(a) Aprovado(a) Condicionalmente que não atender a esse prazo será considerado(a) Reprovado(a). Após a entrega do exemplar definitivo e a sua conferência pela CPG, o resultado será homologado pela Comissão Central de Pós-Graduação da UNICAMP, conferindo título de validade nacional aos aprovados. Nada mais havendo a tratar, o(a) Senhor(a) Presidente declarou a sessão encerrada, sendo a ata lavrada por mim, que segue assinada pelos(as) Senhores(as) Membros da Comissão Examinadora, pelo Coordenador da Comissão de Pós-graduação, com ciência do(a) aluno(a).

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo  
FEC-UNICAMP

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Giuseppe Romanazzi  
IMECC-UNICAMP

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Márcio Rentes Borges  
LNCC

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Cristiane Oliveira de Faria  
UERJ

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Plamen Emilov Kochloukov  
Coordenador da CPG

  
\_\_\_\_\_  
Ronaldo Sanchez Gonçalves  
CPG do IMECC

Ciência do(a) aluno(a):



# Resumo

Nesta tese são estudadas aproximações numéricas da solução de um problema de valor de contorno elíptico, não linear, com domínio em duas dimensões, com particular interesse na modelagem do escoamento de fluidos em meios porosos. Especificamente, o modelo estudado descreve o escoamento de um fluido ligeiramente compressível num meio poroso rígido, em regime permanente. A abordagem empregada para a aproximação numérica se baseia no uso de métodos de elementos finitos mistos e mistos-híbridos em malhas quadrilaterais. Na primeira parte é estudada a teoria de métodos de elementos finitos mistos para o problema em sua forma linear. Também são estudadas diferentes famílias de espaços compatíveis para esse tipo de métodos em malhas quadrilaterais, já conhecidas, e suas propriedades de aproximação em malhas de elementos afins e não afins. Após as considerações sobre a construção de espaços conformes para as formulações mistas, é apresentada a formulação mista-híbrida associada para esse tipo de problema e é discutida a sua relação com a formulação mista discreta. Em seguida é feito um estudo do problema em sua forma não linear e são apresentadas hipóteses que permitam garantir existência e unicidade das soluções do problema forte, como também do problema misto discreto e são apresentados resultados de convergência, obtidos em diferentes trabalhos. Nessa parte é proposto um algoritmo iterativo do tipo Picard para a solução do problema, que utiliza uma formulação mista-híbrida e os diferentes espaços em malhas quadrilaterais estudados. Através de experimentos numéricos compara-se o desempenho de diferentes famílias de espaços discretos compatíveis na aproximação das quantidades de interesse em malhas afins e não afins.

**Palavras-chave:** Métodos de Elementos Finitos, Métodos de Elementos Finitos Mistos-Híbridos, Problemas Elípticos não Lineares, Malhas Quadrilaterais.

**PABLO GIOVANNI SILVA CARVALHO**

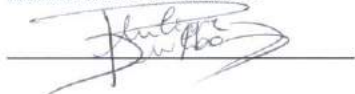
**MODELAGEM COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO  
DE STOKES E ESTUDO COMPARATIVO ENTRE  
ESPAÇOS DE APROXIMAÇÃO**

Dissertação de Mestrado apresentada à  
Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e  
Urbanismo da Unicamp, para obtenção do  
título de Mestre em Engenharia Civil, na  
área de Estruturas e Geotécnica.

**Orientador: Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo**

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA  
DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO PABLO GIOVANNI  
SILVA CARVALHO, ORIENTADO PELO PROF. DR. PHILIPPE  
REMY BERNARD DEVLOO.

ASSINATURA DO ORIENTADOR



**CAMPINAS**

**2017**

**Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s):** CAPES, 01P-4376/2015

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura  
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

C253m Carvalho, Pablo Giovanni Silva, 1989-  
Modelagem computacional do escoamento de Stokes e estudo comparativo entre espaços de aproximação / Pablo Giovanni Silva Carvalho. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

Orientador: Philippe Remy Bernard Devloo.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo.

1. Método dos elementos finitos. 2. Galerkin, Métodos de. 3. Mecânica dos fluidos - Modelos matemáticos. 4. Programação orientada a objetos (Computação). I. Devloo, Philippe Remy Bernard, 1958-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Stokes flow computational modeling and comparative study between approximation spaces

**Palavras-chave em inglês:**

Finite element method

Galerkin, Methods of

Fluid mechanics - Mathematical models

Object-oriented programming (Computing)

**Área de concentração:** Estruturas e Geotécnica

**Titulação:** Mestre em Engenharia Civil

**Banca examinadora:**

Philippe Remy Bernard Devloo [Orientador]

Maicon Ribeiro Correa

Sônia Maria Gomes

**Data de defesa:** 22-06-2017

**Programa de Pós-Graduação:** Engenharia Civil



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA CIVIL, ARQUITETURA E  
URBANISMO**

**MODELAGEM COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO DE  
STOKES E ESTUDO COMPARATIVO ENTRE ESPAÇOS DE  
APROXIMAÇÃO**

**Pablo Giovanni Silva Carvalho**

**Dissertação de Mestrado aprovada pela Banca Examinadora, constituída por:**

Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo  
**Presidente e Orientador / FEC - UNICAMP**

Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa  
**IMECC - UNICAMP**

Profa. Dra. Sônia Maria Gomes  
**IMECC - UNICAMP**

A Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se  
no processo de vida acadêmica do aluno.

Campinas, 22 de Junho de 2017.



**Ata da Sessão Pública de Defesa de Dissertação para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, na área de Estruturas e Geotécnica, a que se submeteu o aluno Pablo Giovanni Silva Carvalho (RA 73569), orientado pelo Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo.**

Aos vinte e dois dias do mês de junho do ano de dois mil e dezessete, às 10:00 horas, no(a) Sala de defesa 02 - Prédio da FEC da Universidade Estadual de Campinas, reuniu-se a Comissão Examinadora da defesa em epígrafe indicada pela Comissão de Pós-Graduação do(a) Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo, composta pelo Presidente e Orientador Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo (FEC / Unicamp) e pelos membros Dra. Sonia Maria Gomes (Universidade Estadual de Campinas/Campinas) e Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa (IMECC / Unicamp), para analisar o trabalho do candidato Pablo Giovanni Silva Carvalho, apresentado sob o título "Modelagem computacional do escoamento de Stokes e estudo comparativo entre espaços de aproximação".

O Presidente declarou abertos os trabalhos, a seguir o candidato dissertou sobre o seu trabalho e foi arguido pela Comissão Examinadora. Terminada a exposição e a arguição, a Comissão reuniu-se e deliberou pelo seguinte resultado:

☒ **APROVADO**

☐ **APROVADO CONDICIONALMENTE** (ao atendimento das alterações sugeridas pela Comissão Examinadora especificadas no parecer anexo)

☐ **REPROVADO** (anexar parecer circunstanciado elaborado pela Comissão Examinadora).

Para fazer jus ao título de Mestre, a versão final da dissertação, considerada Aprovada ou Aprovada Condicionalmente, deverá ser entregue à CPG dentro do prazo de 60 dias, a partir da data da defesa. De acordo com o previsto na Deliberação CONSU-A-10/2015, Artigo 42, parágrafo 1º, inciso II e parágrafo 2º, o aluno Aprovado Condicionalmente que não atender a este prazo será considerado Reprovado. Após a entrega do exemplar definitivo e a sua conferência pela CPG, o resultado será homologado pela Comissão Central de Pós-Graduação da UNICAMP, conferindo título de validade nacional aos aprovados.

Nada mais havendo a tratar, o Senhor Presidente declara a sessão encerrada, sendo a ata lavrada por mim, que segue assinada pelos Senhores Membros da Comissão Examinadora, pelo Coordenador da Comissão de Pós-graduação, com ciência do aluno.

  
Prof. Dr. Philippe Remy Bernard Devloo  
Presidente da Comissão Examinadora

  
Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa

  
Secretaria de Pós Graduação

ROSANA KELLY PEDRO SILVA  
Matrícula: 293689  
CPG / FEC - UNICAMP

  
Dra. Sonia Maria Gomes

  
Pablo Giovanni Silva Carvalho  
Aluno(a)

  
Prof. Dr. Armando Lopes Moreno Junior  
Coordenador(a) da CPG

# Resumo

O presente trabalho propõe análises numéricas para problemas de fluidos descritos pelas equações de Stokes, de Darcy e de acoplamento Darcy-Stokes. São consideradas diferentes formulações do Método dos Elementos Finitos (MEF), como o Método de Galerkin Descontínuo (MGD), baseado em aproximações descontínuas, e o método  $H^1$ -conforme, com aproximações contínuas. Também são consideradas formulações que utilizam espaços  $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ . Com o intuito de se obter uma simulação numérica compatível com as condições impostas, faz-se necessária a implementação de um código computacional, o qual é inserido no ambiente de programação científica orientado a objetos denominado PZ. Essa abordagem possibilita o estudo comparativo entre espaços de aproximação, a verificação do comportamento para diferentes ordens, e a obtenção de erros e taxas de convergência; pode-se identificar, assim, a melhor performance. Esse trabalho também é motivado pela descrição do movimento de fluidos viscosos relevantes para a construção civil. Nesse sentido, elabora-se um modelo computacional baseado na formulação de Stokes para um domínio poroso, capaz de descrever o comportamento do concreto auto-adensável (CAA) ao ser lançado entre as armações de aço. Na sequência, utilizando uma técnica de homogeneização, as armações são representadas por um domínio descrito pela lei de Darcy, o qual será acoplado por meio de uma condição de interface, a um domínio descrito por Stokes. Em suma, o objetivo deste trabalho reside na compreensão de um modelo de fluido regido por Stokes e de seu acoplamento com Darcy, verificando performances e otimização matemática dos espaços de aproximação considerados, para o desenvolvimento de aplicações numéricas relevantes.

**Palavras-chaves:** Método dos Elementos Finitos. Galerkin Descontínuo. Problema de Stokes. Problema de Darcy. Programação orientada a objetos.

## Artigos Preparados e/ou Submetidos

Projeto FAPESP 2016/05155-0

# Anexo 1

## O Método MHM: Simulação Multi-Escala com Elementos Finitos no NeoPZ

Philippe R. B. Devloo, Omar Durán, Sonia M. Gomes, Frederic Valentin

### 1 Introdução

Este relatório refere-se ao método denominado Multi Scale Hybrid Method (MHM), desenvolvido pelo grupo de pesquisa do LNCC, liderado pelo Prof. F. Valentin, para a simulação de problemas multi-escala [10, 9] e faz parte do projeto FAPESP 2016/05155, intitulado *Simulação Multi-Escala com Elementos Finitos*. O foco será dado sobre escoamentos em meios porosos, modelados pelo problema de Darcy. Com uma implementação no ambiente computacional mais consolidado NeoPZ, vários aspectos da metodologia poderão ser melhor estudados e avaliados, contribuir com novas aplicações e modificações na formulação do método.

### 2 O Método MHM

Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2, 3$ , uma dada região aberta limitada, com fronteira poligonal  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$ , em que  $\partial\Omega_D$  e  $\partial\Omega_N$  indicam onde são impostas condições de Dirichlet e Neumann. Considere o problema modelo

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (-\mathcal{K}\nabla u) &= f, \quad \text{em } \Omega, \\ -\mathcal{K}\nabla u \cdot \boldsymbol{\eta} &= 0 \quad \text{em } \partial\Omega_N, \\ u &= g_D, \quad \text{em } \Omega_D,\end{aligned}$$

em que  $g_D$  e  $f$  são funções dadas,  $\boldsymbol{\eta}$  é o vetor normal exterior a  $\partial\Omega$ .

#### 2.1 Formulação híbrida primal

Considere uma partição regular  $\mathcal{T} = \{\Omega_e\}$  do domínio  $\Omega$ . Para cada sub-domínio  $\Omega_e$  (macro-elementos), a fronteira  $\partial\Omega_e$  é formada por faces  $F$ , sendo  $\mathcal{E}$  o *esqueleto* da partição, ou seja o conjunto de todas as faces de elementos da partição,  $\mathcal{E}^\partial$  o conjunto das faces de fronteira  $F \subset \partial\Omega$  e  $\mathcal{E}^0 = \mathcal{E} \setminus \mathcal{E}^\partial$  formado por faces interiores. Sobre o esqueleto  $\mathcal{E}$ , define-se um campo  $\mathbf{n}$  de forma que  $\mathbf{n}|_F$  é um vetor normal à face  $F \in \mathcal{E}$ , e denota-se por  $\boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}$  a normal unitária exterior em  $\partial\Omega_e$ .

No método clássico de elementos finitos ( $H^1$ -conforme), a continuidade da solução entre elementos da partição do domínio costuma ser imposta fortemente no espaço de aproximação, em que as soluções são procuradas. No entanto, ocorrem situações em que este tipo de aproximação não é apropriada, como por exemplo, para o cálculo de fluxos em meios porosos heterogêneos com descontinuidades. Em formulações híbridas, a continuidade das aproximações é imposta de forma fraca, através de termos integrais, sobre o contorno dos elementos.

#### Notação

Para formalizar a formulação híbrida primal do problema modelo, definem-se os seguintes espaços funcionais:

$$\begin{aligned}
H^1(\mathcal{T}) &= \{v \in L^2(\Omega) : v|_{\Omega_e} \in H^1(\Omega_e), \Omega_e \in \mathcal{T}\}, \\
\Lambda(\mathcal{E}) &= \left\{ \mu \in \prod_{\Omega_e \in \mathcal{T}} H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_e) : \exists \boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega), \text{ such that } \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e} = \mu \text{ on } \partial\Omega_e, \Omega_e \in \mathcal{T} \right\}, \\
\Lambda_0(\mathcal{E}) &= \{\mu \in \Lambda(\mathcal{E}) : \mu|_{\partial\Omega_N} = 0\}.
\end{aligned}$$

A formulação híbrida primal do problema modelo é dada por : encontrar  $(u, \lambda) \in H^1(\mathcal{T}) \times \Lambda_0(\mathcal{T})$  tal que, para  $\forall (v, \mu) \in H^1(\mathcal{T}) \times \Lambda_0(\mathcal{T})$ ,

$$\begin{aligned}
\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathcal{K} \nabla u, \nabla v)_{\Omega_e} - (\lambda \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, v)_{\partial\Omega_e} &= \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (f, v)_{\Omega_e} \\
\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mu \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, u) &= (\mu, g_D)_{\partial\Omega_D}
\end{aligned}$$

Um procedimento similar pode ser aplicado para aproximar problemas elásticos 2D ou 3D [9].

## 2.2 Formulação MHM com aproximação $H^1$ -conforme no interior dos sub-domínios

O método *MHM* é uma discretização da formulação híbrida, em que o espaço de fluxos entre os macro-elementos é polinomial por partes [10, 11, 9]. Diferentemente da descrição de aproximações híbridas convencionais, o método MHM supõe que o problema diferencial é resolvido inicialmente de forma exata no interior de cada elemento. Neste sentido, o método MHM assemelha-se ao método de elementos de contorno.

Nas suas implementações computacionais, utiliza-se uma discretização detalhada dentro de cada subdomínio, constituindo-se uma aproximação da solução do método MHM. Seus criadores (C. Harder, F. Valentin e D. Paredes) mostraram a consistência e convergência deste método. Isso significa que, refinando a discretização dentro de cada subdomínio, aproximações consistentes são criadas, mesmo na ocorrência de variações acentuadas dos coeficientes materiais. A dimensão do sistema de equações globais não depende do nível de discretização interna de cada subdomínio, tornando o método muito adequado para ser implementado em máquinas paralelas.

1. Define-se um espaço de aproximação  $V \subset H^1(\mathcal{T})$  de dimensão finita, gerado funções de forma  $\varphi_i \in V$ .
2. Define-se um espaço de aproximação  $\Lambda \subset \Lambda_0(\mathcal{E})$  de dimensão finita, gerado por funções de forma  $\mu_j \in \Lambda$ , em que  $j$  indica o índice da função. Supõe-se que a discretização no interior de cada sub-domínio seja bem mais refinada do que a discretização associada aos contornos dos macro-elementos.
3. A aproximação MHM- $H^1$  é descrita como: encontrar  $(u, \lambda) \in V \times \Lambda$  tal que,  $\forall \varphi_i, \mu_j$

$$\begin{aligned}
\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathcal{K} \nabla u, \nabla \varphi_i)_{\Omega_e} + (\lambda \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, \varphi_i)_{\partial\Omega_e} &= \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (f, \varphi_i)_{\Omega_e} \\
\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mu_j \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, u)_{\partial\Omega_e} &= (\mu_j, g_D)_{\partial\Omega_D}
\end{aligned}$$

4. É possível *condensar* os graus de liberdade internos de cada subdomínio, fora uma função constante, de tal forma que o tamanho do sistema global de equações corresponde ao número de funções  $\psi_j$  mais uma incógnita (e equação) por subdomínio. Isto significa representar a solução  $u$  na forma

$$u = u_0 + \tilde{u},$$

em que  $u_0 \in V_0 \subset V$  é uma aproximação grosseira, constante sobre cada subdomínio  $\Omega_e$ , e  $\tilde{u} = u - u_0 \in W$  contém os detalhes de  $u$ , em que  $W$  é o complemento ortogonal de  $V_0$  em  $V$ .

5. Uma vez calculados o multiplicador  $\lambda$  e a componente grosseira  $u_0$ , a componente  $\tilde{u}$ , contendo os detalhes das escalas mais finas de  $u$ , é obtida pela resolução de problemas de Neumann locais nos sub-domínios, usando  $\lambda$  como condição de contorno.

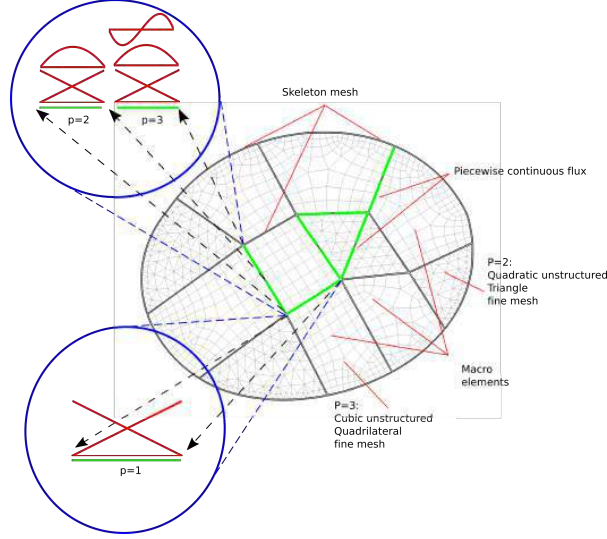


Figura 1: Diagrama ilustrativo da discretização utilizada no MHM.

A Figura 1 é uma ilustração da discretização do MHM. Observa-se que os fluxos entre os macro-elementos são aproximados em termos de polinômios de ordem mais baixa e com esqueleto menos refinado do que quando induzido pela malha refinada do interior da sub-região.

### 2.3 Formulação MHM com aproximação mista $H(\text{div})$ -conforme no interior dos sub-domínios

Propomos uma formulação discreta em do método MHM em que a solução no interior do sub-domínio seja aproximada com elementos mistos, com aproximação do fluxo  $H(\text{div})$ -conforme no interior dos macro-elementos. Para isso, introduzimos uma nova variável  $\sigma$  a ser encontrada no espaço

$$\mathbf{H}(\text{div}, \mathcal{T}) = \{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^d : \mathbf{v}|_{\Omega_e} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega_e), \Omega_e \in \mathcal{T} \}.$$

A formulação discreta do método MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  é feita nas seguintes etapas:

1. Define-se um subespaço  $\mathbf{V} \subset \mathbf{H}(\text{div}, \mathcal{T})$ , de dimensão finita, associado a uma sub-partição de cada sub-domínio, composto de funções  $\sigma$  cuja componente normal é contínua nas interfaces dos micro-elementos dentro de cada sub-partição, mas geralmente descontínua nas interfaces dos macro-elementos. Supõe-se que  $\mathbf{V}$  é gerado funções de forma  $\Phi_i \in \mathbf{V}$ .
2. Define-se um subespaço  $U \subset L^2(\Omega)$ , de dimensão finita, composto de funções cuja propriedade essencial é que seja equivalente ao espaço formado pelo divergente das funções fluxo  $\mathbf{V}$  em cada sub-domínio. Ou seja, de forma que as restrições  $U^{\Omega_e} = U|_{\Omega_e}$  e  $\mathbf{V}^{\Omega_e} = \mathbf{V}|_{\Omega_e}$  verifiquem a condição de compatibilidade  $\nabla \cdot \mathbf{V}^{\Omega_e} = U^{\Omega_e}$ . Supõe-se que  $U$  é gerado por funções de forma  $\phi_k \in U$ .
3. Define-se um espaço de aproximação  $\Lambda \subset \Lambda(\mathcal{E})$  de dimensão finita, gerado por funções de forma  $\mu_j \in \Lambda$ .

4. A aproximação MHM- $H(\text{div})$  é descrita como: achar  $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{V}$ ,  $u \in U$ , e  $\lambda \in \Lambda$  tal que  $\forall \Phi_i, \phi_k$  e  $\mu_j$

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} ((\mathcal{K}^{-1} \boldsymbol{\sigma}, \Phi_i)_{\Omega_e} - (u, \nabla \cdot \Phi_i)_{\Omega_e} + (u, \Phi_i \cdot \mathbf{n}^{\Omega_e})_{\partial \Omega_e \setminus \partial \Omega_D}) = -(g_D, \Phi_i \cdot \boldsymbol{\eta})_{\partial \Omega_D} \quad (1)$$

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \phi_k)_{\Omega_e} = \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (f, \phi_k)_{\Omega_e} \quad (2)$$

$$\sum_{F \in \mathcal{E}} (\lambda, \mu_j)_F = \sum_{F \in \mathcal{E}} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \mu_j)_F \quad (3)$$

5. Pela equação 3, conclui-se que o fluxo  $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{V} \subset \mathbf{H}(\text{div}, \mathcal{T})$  está de fato em  $\mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$ .

6. O que diferencia uma aproximação tradicional  $H(\text{div})$ -conforme global de uma aproximação MHM- $H(\text{div})$  é que, no último caso, os fluxos entre os macro-elementos são aproximados em termos de polinômios de ordem mais baixa e com esqueleto menos refinado do que quando induzido pela malha refinada do interior da subregião, que ocorre no caso  $H(\text{div})$ -conforme global. como ilustrado na Figura 1.

Esta formulação é contribuição original dos autores deste projeto. Demonstraremos a equivalência desta abordagem com a original através de resultados numéricos. As soluções das duas abordagens convergem para a mesma solução quando se refina a malha interna. A vantagem da formulação proposta é que a solução numérica satisfaz a condição de incompressibilidade exatamente e, consequentemente, pode ser utilizada com vantagens para aproximação equações em meios porosos. Além disso, a formulação mista satisfaz a propriedade de conservação local, que é essencial para utilização dos fluxos numéricos para problemas de transporte.

### Condensação estática

Assim como na formulação MHM- $H^1$  original, é possível condensar os graus de liberdade internos de cada sub-domínio, fora uma função constante, de tal forma que o tamanho do sistema global de equações corresponde ao número de funções de forma  $\psi_j$  que gera o espaço do multiplicador  $\Lambda$ , mais uma incógnita (e equação) por sub-domínio. Isto significa representar a solução  $u$  na forma

$$u = u_0 + \tilde{u},$$

em que  $u_0 \in U_0 \subset U$  é constante sobre cada sub-domínio  $\Omega_e$  e  $\tilde{u} = u - u_0 \in Q$ , em que  $Q$  é o complemento ortogonal de  $U_0$  em  $U$ . Desta forma, o problema (1-3) pode ser representado em forma matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{ff} & \mathbf{A}_{fc} \\ \mathbf{A}_{cf} & \mathbf{A}_{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_f \\ \alpha_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_f \\ \mathbf{F}_c \end{pmatrix}$$

em que  $\alpha_f = \{\boldsymbol{\sigma}, \tilde{u}\}$  representa os graus de liberdade associados a  $\boldsymbol{\sigma}$  e  $\tilde{u}$ , e  $\alpha_c = \{u_0, \lambda\}$  contém os graus de liberdade de  $u_0$  e  $\lambda$ . Este sistema pode ser condensado em termos apenas de  $\alpha_c$ , na forma

$$\bar{\mathbf{A}} \alpha_c = \bar{\mathbf{F}}$$

(em que

$$\bar{\mathbf{K}} = \mathbf{A}_{cc} - \mathbf{A}_{cf} \mathbf{A}_{ff}^{-1} \mathbf{A}_{fc}, \quad \bar{\mathbf{F}} = \mathbf{F}_c - \mathbf{A}_{cf} \mathbf{A}_{ff}^{-1} \mathbf{F}_f.$$

Uma vez resolvido o sistema condensado para a variável  $\lambda$  e a componente  $p_0$  (upscaling), a variável  $\boldsymbol{\sigma}$  e a componente  $\tilde{p}$  são obtidas pela resolução de problemas locais em cada sub-domínio  $\Omega_e$  (downscaling): achar  $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbf{V}^{\Omega_e}$ , com  $\boldsymbol{\sigma}|_{\partial \Omega_e} = \lambda|_{\partial \Omega_e}$ , e  $\tilde{u} \in U^{\Omega_e}$  tal que



$$\begin{aligned}
(\mathcal{K}^{-1}\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\Phi}_i)_{\Omega_e} - (\tilde{u}, \nabla \cdot \boldsymbol{\Phi}_i)_{\Omega_e} &= -(\boldsymbol{\Phi}_i \cdot \boldsymbol{\eta}, g_D)_{\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_e} \\
(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \phi_k)_{\Omega_e} &= (f, \phi_k)_{\Omega_e} \\
(\tilde{u}, 1)_{\Omega_e} &= 0
\end{aligned}$$

para todas as bases  $\boldsymbol{\Phi}_i$  internas a  $\Omega_e$  (componente normal nula em  $\partial\Omega_e$ ) e bases de face associadas a  $\partial\Omega_e \cap \partial\Omega_D$ , e para todas as bases  $\phi_k$  restritas a  $\Omega_e$ .

### 3 O Ambiente Computacional NeoPZ

O **NeoPZ** é uma plataforma de código aberto, formado por um conjunto de classes, que foi idealizada e vem sendo desenvolvida pelo Prof. Devloo e seu colaboradores, para permitir o desenvolvimento de códigos de elementos finitos com ampla flexibilidade<sup>1</sup>. Sua concepção é baseada na aplicação de conhecimentos de computação orientada a objeto, através de uma estrutura modular de classes. Estão incorporados no NeoPZ uma variedade de geometrias de elementos, em uma, duas e tres dimensões, formulações variacionais e espaços de aproximação de alta ordem com bases hierárquicas (de funções contínuas ( $H^1$ ) [1], descontínuas [8], ou vetoriais em  $\mathbf{H}(\text{div})$  e  $\mathbf{H}(\text{curl})$  [12, 2, 3]. Novas formulações e implementações para permitir a combinação de diferentes espaços de aproximação foram desenvolvidos recentemente [5, 7]. Um dos pontos fortes do código **NeoPZ** é que ele é adaptativo, no sentido de que consegue refinar malhas e adaptar o grau dos polinômios para captar as variações dos fenômenos de uma forma mais precisa [6, 4, 1]. É também possível combinar os espaços de aproximação em que uma das variáveis usa uma malha mais refinada do que outra, como por exemplo, em simulações de fraturamento hidráulico, em que o fluido que está na fratura induz uma concentração de tensão muito grande em torno da borda da fratura. Então é preciso colocar uma espaço de aproximação mais refinado nessa borda. Esta concentração de tensões não afeta o fluido que está na fratura. O fluido não precisa ser aproximado com uma malha tão fina como a malha elástica [7].

#### 3.1 Intervenções necessárias no NeoPZ para viabilizar o método MHM

A estrutura de um código para implementar o método MHM deve possuir as seguintes características particulares:

1. Permitir a combinação de discretização de dimensão  $n$  com discretizações de dimensão  $n - 1$  dentro de um único problema.
2. Considerando que a discretização dentro de cada macro-elemento é mais refinada do que nas interfaces, o código deve ser capaz de transferir informações entre malhas *finas* e malha *esqueleto*.

O ambiente NeoPZ é adequado para efetuar estas tarefas pela sua capacidade de refinamento de malhas. Outro incentivo de implementar MHM no ambiente NeoPZ é que o mesmo permite refinar cada sub-domínio de forma independente. Por isso, é possível resolver singularidades existentes dentro de um macro-elemento com refinamento adaptativo sem aumentar o tamanho do sistema global de equações.

NeoPZ já incorpora os elementos necessários para calcular as integrais necessários para a implementação da técnica MHM- $H^1$  e MHM-H(div) em termos de integrais, cálculos de integrais entre elementos interfaces e/ou integrais sobre contornos. A real dificuldade em realizar simulações com MHM reside na configuração do problema. Para documentar este trabalho iremos primeiro descrever a aproximação MHM graficamente e depois sua tradução em classes e métodos.

#### Descrição da aproximação do MHM

A concepção de espaço de aproximação no ambiente NeoPZ é feita em dois passos: cria-se uma malha geométrica e depois o espaços de aproximação.

<sup>1</sup>[www.labmec.org.br/wiki/neoPZ/start](http://www.labmec.org.br/wiki/neoPZ/start)

**A malha geométrica.** Primeiro cria-se uma malha *macroscópica* que particiona o domínio computacional. As interfaces entre os elementos macroscópicos são identificados. Em seguida, os elementos macroscópicos são refinados até o nível desejado. Esses elementos formarão a base da malha fina.

**A malha computacional.** Para cada elemento macroscópico (dividido em elementos finos) cria-se um espaço de aproximação  $H^1$ . Cada espaço  $H^1$  é independente dos demais, por isso eles são descontínuos entre si. Depois os elementos de fluxo entre os macro-elementos são criados. O tipo de elementos entre macro-elementos são do tipo *TPZElcHDivBound*: o tipo de elementos de contorno para aproximações  $\mathbf{H}(\text{div})$ . O valor das funções de forma é inversamente proporcional ao determinante do jacobiano. Finalmente, os elementos de interface são criados entre os elementos da malha fina e os elementos entre os macro-elementos.

Depois da malha criada, não se consegue aproveitar as vantagens do teor paralelo do método MHM.

**Organização dos cálculos.** Os elementos de cada sub-domínio e as interfaces são agrupados em objetos tipo *TPZSubCompMesh*. Esta classe permite agrupar os graus de liberdade condensáveis e calcular a matriz condensada associada a cada macro-elemento.

## Implementação com aproximações internas do tipo $H^1$

Na tese de D. Paredes e subsequentes publicações [10, 9], sugere-se calcular uma função interna associada a cada função fluxo definida no contorno dos macro domínios impondo que a média da função seja nula. A matriz de rigidez associada ao método MHM é calculada como o produto interno dessas funções fluxo. Na nossa interpretação do método, as variáveis internas do domínio podem ser condensadas estaticamente, com excessão dos movimentos de corpo rígido associados à equação sendo simulada. Existem duas maneiras para calcular a matriz do método MHM.

### Isolar a pressão em um ponto

Escolhe-se uma função cuja média não seja nula e associa-se a ela um grau de liberdade que não seja condensado. A matriz associada aos demais graus de liberdade agora pode ser invertida e condensada nos graus de liberdade de fluxo mais uma equação. Esta proposta gera funções de fluxo diferentes dos fluxos propostos por D. Paredes, mas conjecturamos que ambas proposta geram a mesma solução. As vantagens da nova abordagem proposta são:

1. Ela é numericamente mais eficiente e muito fácil de ser implementada.
2. A extensão desta abordagem para problemas elásticos 2D ou 3D podem seguir a mesma lógica. Nestes casos, teremos mais que uma equação a ser resolvida posteriormente para cada macro-elemento.

### Adicionar dois graus de liberdade internos

Esta abordagem gera matrizes condensadas idênticas às matrizes de fluxos da tese de D. Paredes, sem a necessidade de calcular e integrar as extensões dos fluxos explicitamente.

Acrescenta-se à matriz de rigidez dos graus de liberdade internos duas linhas e duas colunas. A primeira linha e coluna é igual à integral das funções de forma. A segunda linha e coluna são nulas, exceto no penúltimo elemento que é igual 1. A estrutura da matriz é ilustrada na equação 4. As  $n+1$  equações podem ser invertidas porque a última equação impõe que a média da solução seja igual a um valor estabelecido. O significado da variável adicional é o fluxo distribuído que precisa ser acrescido de tal forma que a integral do fluxo distribuído mais os fluxos de contorno seja nulo.

$$\begin{bmatrix} & & & \vdots & \vdots \\ & A_{IJ} & & \int_{\Omega_E} \phi_i & 0 \\ & & & \vdots & 0 \\ \cdots & \int_{\Omega_E} \phi_j & \cdots & 0 & 1 \\ \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

A demonstração de que esta solução é equivalente à solução proposta por Valentin e Paredes não é trivial. A sua implementação na biblioteca NeoPZ requer a criação de três espaços de aproximação associados a

cada macro-elemento: um espaço com as funções de forma em  $H^1$  e as funções de fluxo no contorno, um espaço consistente em uma única função associada a um fluxo distribuído e um espaço com uma única função associado ao valor médio da solução.

A extensão desta abordagem para problemas elásticos 2D ou 3D podem seguir a mesma lógica. Nestes casos, teremos mais que um multiplicador de Lagrange para cada macro-elemento.

#### class TPZMHMeshControl

Esta classe implementa uma interface para estruturar/simplificar a geração da estrutura de dados que permite realizar uma simulação MHM com aproveitamento do teor de paralelismo do mesmo.

**Constructor** :TPZMHMeshControl(TPZAutoPointer<TPZGeoMesh> gmesh, std::set<long> &coarseindices); O argumento gmesh é a malha geométrica que será utilizada para criar a aproximação MHM. coarseindices são os índices dos elementos geométricos que representam os macro-elementos da aproximação MHM.

O construtor inicializa a estrutura de dados da classe com dados vazios. A estrutura do objeto é construído por chamado a métodos específicos.

**void SetLagrangeAveragePressure(bool)** : indica se a malha criada utilizará a pressão média e fluxo distribuído para cada macro-elemento com variável de estado adicional. Caso afirmativo a malha criada sera composta de três malhas : uma para representar a solução, outra para representar a pressão média de cada sub-domínio e a terceira para representar o fluxo distribuído.

**void SetInternalPOrder(int porder)** : estabelece a ordem polynomial dos elementos.

**void SetSkeletonOrder(int porder)** : estabelece a ordem polynomial dos elementos de fluxo entre os elementos macroscópicos

**void CreateSkeletonElements(int skeleton)** : cria os elementos geométricos associados aos fluxos entre macro-elementos e atribua o índice de material *skeleton* aos mesmos. Este método também alimenta a estrutura de dados *fInterfaces*. *fInterfaces* associa com cada elementos de interface os índices dos elementos *coarse* na esquerda e direito.

**void DivideSkeletonElements(int numdiv)** : divide os elementos de interface *numdiv* vezes. Este método atualiza a estrutura de dados *fInterfaces*. Os elementos de interface não podem ser mais refinados que os elementos que compoem a malha fina dentro de cada elementos macroscópico

**void Hybridize(int secondskeleton, int matpressure)** : este método estabelece que a malha computacional criada sera uma malha correspondente ao método MHM hybridizado. Nestas malhas são criados dois espaços fluxo entre macro-elementos e um espaço de pressão que estabelece que os dois fluxos devem ser iguais.

**void BuildComputacionalMesh(bool substructure)** : este método cria a malha computacional de acordo com a configuração estabelecida nas chamadas anteriores. O *flag* substructure indica se os elementos de cada sub-domínio serão transferidos para um objeto *TPZSubCompMesh* ou não. Caso *false* as equações da aproximação MHM não serão condensadas estáticamente.

#### Implementação do método MHM utilizando aproximação mista no interior dos elementos

A teoria associada ao método MHM supõe que a solução no interior dos macro-elementos seja exata para os fluxos numéricos calculados. Este ponto de vista abre a possibilidade de utilizar outras formulações e espaços de aproximação no interior de cada sub-domínio, como por exemplo Galerkin Descontínuo ou formulação mista. A vantagem de utilizar a formulação mista é que a aproximação da equação diferencial satisfaz a propriedade de conservação a nível local. Esta propriedade é essencial para utilização dos fluxos numéricos para problema de transporte.

A utilização de formulação mista leva a uma técnica de aproximação bem diferente da aproximação com variáveis primais do tipo  $H^1$ . No caso de *MHM H(div)*, os fluxos dos micro elementos são *restritos* pelo espaço de fluxo entre macro-elementos. Similarmente ao método MHM- $H^1$ , na formulação MHM-*H(div)* as equações internas do macro-elementos conseguem ser condensadas nas equações de fluxo se uma função de pressão for excluída da condensação.

A utilização de formulação mista no interior dos macro-elementos no NeoPZ restringe-se a aproximações da equação de Darcy. Não temos ainda espaços de aproximação mista para problemas de elasticidade, mas estamos trabalhando neste sentido.

#### **class TPZMHMixedMeshControl**

Esta classe é derivada da classe *TPZMHMeshControl* e difere apenas no espaço de aproximação associado aos macro-elementos. O único método que foi reimplementado é

**void BuildComputacionalMesh(bool substructure)** : Neste caso a malha geométrica é aproveitada para criar um espaço de aproximação mista de elementos finitos no interior dos macro-elementos. Ao invés de criar elementos de interface entre os (micro) elementos associados aos sub-domínios e os fluxos entre os elementos macroscópicos, as funções fluxo dos elementos  $H(\text{div})$  são restritos pelo espaço de fluxo (macroscópico) entre os macro-elementos.

## **4 Resultados numéricos para aproximações $\text{MHM-}H^1$ e $\text{MHM-H}(\text{div})$**

Estudamos o comportamento numérico das aproximações  $\text{MHM-}H^1$  de  $\text{MHM-H}(\text{div})$  quando aplicados a problemas de Darcy com solução oscilatória. Consideramos dois tipos de problemas : um problema acadêmico, em que a solução oscilatória é obtida através de vetor de carga calculado a partir do laplaciano da solução, e outro problema em que os métodos são aplicados a um problema com permeabilidade descontínua.

### **4.1 Aproximação de problema com solução suave e oscilatória**

Aproxima-se o problema de Darcy

$$\begin{aligned} -\Delta p &= f(x, y) \quad (x, y) \in \Omega = ]0, 1[ \times ]0, 1[ \\ u(s) &= u_D(s) \quad s \in \partial\Omega \end{aligned}$$

em que  $f(x, y) = -\Delta u_{ex}$  é a solução exata dada por  $u_{ex} = \arctan((r - 0.5) * 100)(1 + 0.3 * \sin(10\pi x))(1 + 0.5\cos(10\pi r))$ , em que  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  e  $u_D(s) = u_{ex}(x(s), y(s))$ ,  $s \in \partial\Omega$ .

Uma representação gráfica da solução é ilustrada na Figura 2. Aproximamos este problema com  $\text{MHM-}H^1$  e  $\text{MHM-H}(\text{div})$  com configurações diferentes de macro-elementos quadrilaterais, ordens diferentes polinomiais associadas à aproximação interna, ordens polinomiais diferentes associadas aos elementos de fluxos, número de refinamentos diferentes associados à aproximação dos macro-elementos e número de refinamentos do esqueleto associados aos fluxos entre macro-elementos. Ao todo foram comparados mais de 140 configurações diferentes. Para cada simulação  $\text{MHM-}H^1$  foi realizada uma simulação  $\text{MHM-H}(\text{div})$  com o mesmo tamanho de elemento e ordem polinomial da pressão/fluxo.

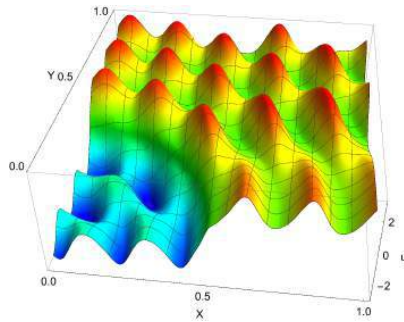


Figura 2: Solução analítica  $u_{ex}$  para o problema teste de Darcy

Os resultados confirmam um aspecto teórico do método MHM: para uma dada configuração de macro-elementos e funções de fluxo de borda, a solução converge quando se refina a malha interna.

Surpreende a qualidade visual da solução mesmo para um número pequeno de sub-domínios e funções de fluxo de baixa ordem. Figura 3 ilustra as aproximações MHM com a solução interna totalmente convergida. Os erros de  $\text{MHM-}H^1$  e  $\text{MHM-H}(\text{div})$  coincidem nestes casos.

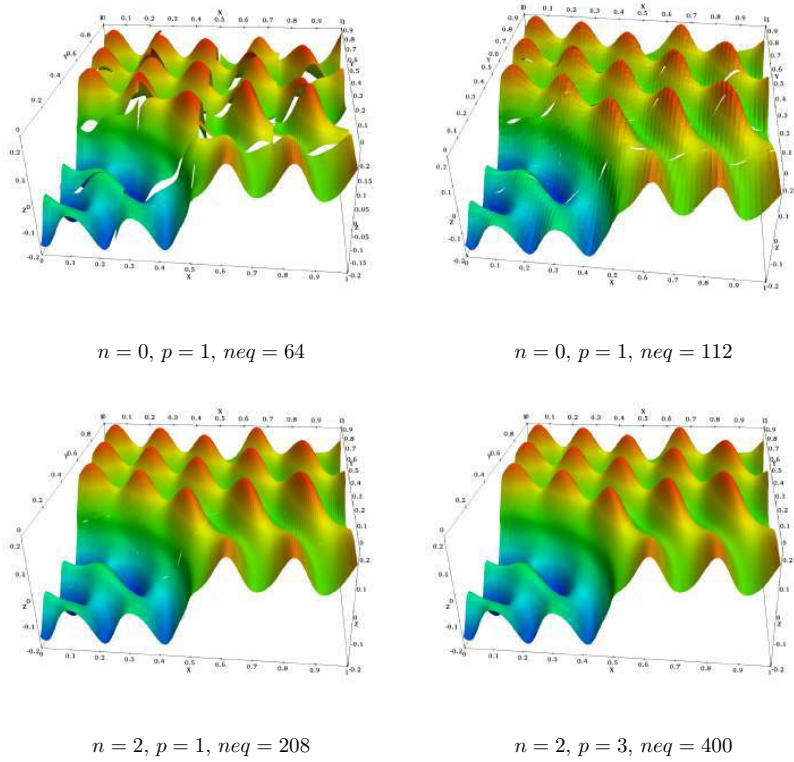


Figura 3: Aproximações de  $p$  com  $\text{MHM-H}(\text{div})$ , com  $4 \times 4$  macro-elementos:  $n$  = número de divisões de cada face do esqueleto,  $p$  = ordem polinomial do esqueleto,  $neq$  = número de equações do sistema condensado.

Para comparar a qualidade das aproximações  $\text{MHM-}H^1$  e  $\text{MHM-H}(\text{div})$ , confeccionou-se um gráfico em que na abcissa coloca-se o erro do fluxo obtido com  $\text{MHM-}H^1$  e na ordenada com  $\text{MHM-H}(\text{div})$ , ambos em escala logarítmica. A Figura 4 mostra que para todas as configurações, o erro de  $\text{MHM-H}(\text{div})$  para o fluxo é menor que o erro de  $\text{MHM-}H^1$ . Em alguns casos (menos refinados) a razão dos erros é maior que 10. Observa-se deste gráfico que as duas abordagens convergem para a mesma solução em todos os casos. As soluções para a pressão não se diferenciam significativamente.

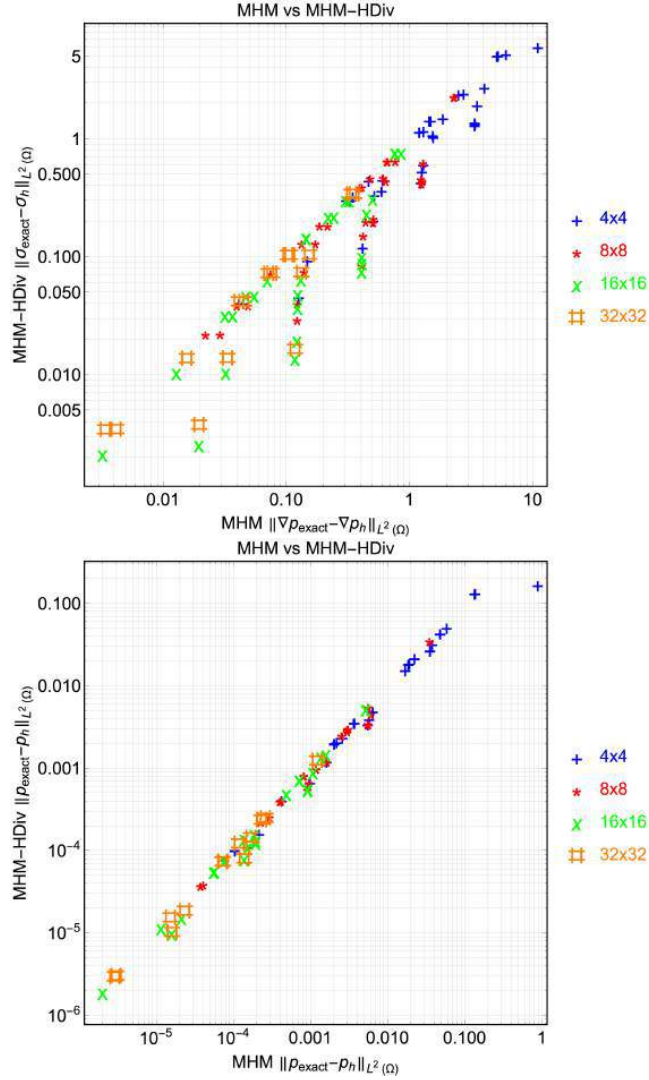


Figura 4: Erros comparativos entre  $\text{MHM-}H^1$  e  $\text{MHM-H}(\text{div})$  para o fluxo (acima) e a pressão (abaixo), usando para macro-domínios 4x4, 8x8, 16x16 e 32x32, e diferentes configurações das discretizações do esqueleto e dos espaços internos: .

Finalmente, calcula-se a taxa de convergência do erro na norma de energia em função do refinamento do esqueleto ou em função do nível de refinamento do macro-elemento. Espera-se obter a taxa  $p + 1$  para a norma de energia. Figura 5 mostra gráficos de convergência em função do tamanho  $H$  do macro-elemento. Para o gráfico do lado esquerdo, cada linha corresponde a um número de divisões  $n$  do esqueleto. No gráfico à direita, cada linha corresponde a uma ordem polinomial do elemento esqueleto. Para o gráfico à esquerda, a taxa de convergência está em torno de 1.65, um pouco abaixo da taxa teórica de 2. No gráfico à direita,

observa-se que as taxas para  $p = 2$  e  $p = 3$  acompanham a taxa para  $p = 1$ . Somente nas configurações mais refinadas é que os gráficos começam a se distanciar. Acredita-se que este fato ocorre devido à forte oscilação da solução exata, e por estarmos ainda no regime pre-assintótico.

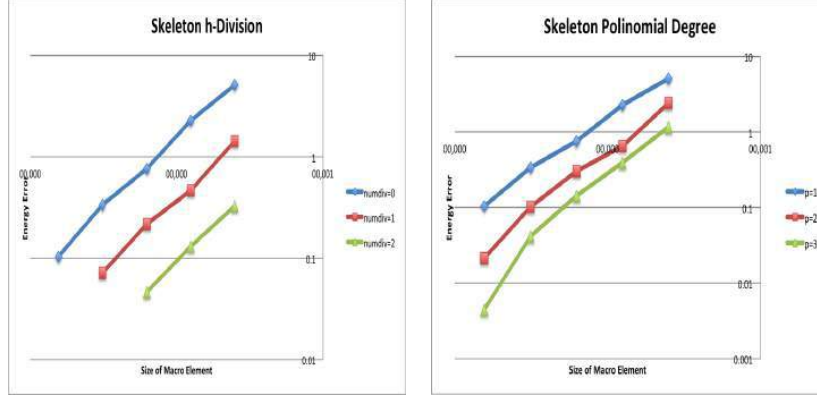


Figura 5: Convergência MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  variando o número de sub-divisões (à esquerda) e do grau polinomial usados na discretização do multiplicador definido no esqueleto da malha de macro-elementos..

#### 4.2 Aproximação de problema com permeabilidade descontínua

Neste exemplo, aproxima-se o problema de Darcy mas com uma distribuição de permeabilidades aleatória. Este exemplo tem como objetivo aplicar o método MHM a problemas em que a variação da permeabilidade não pode ser modelada com malhas finas. Figura 6 mostra a disposição dos macro-elementos ( $16 \times 4$ ). A cor associada à malha fina reflete a variação da permeabilidade. Novamente, comparam-se as aproximações com MHM- $H^1$  e MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ . Aplica-se uma condição de contorno à esquerda e à direita do domínio de tal forma que o gradiente da pressão é aproximadamente unitário. Aplica-se condição Neumann zero no contorno de cima e de baixo e considera-se  $f = 0$ .

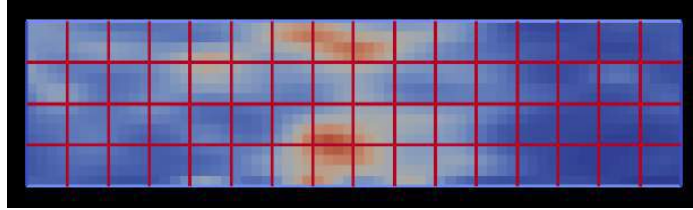


Figura 6: Distribuição da permeabilidade

Figura 7 compara os vetores de fluxo entre as aproximações MHM (em cima) e MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  (em baixo). O mapa de cores corresponde ao valor da pressão. Notam-se as características diferentes de MHM- $H^1$  e MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ . Na aproximação MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  a condição de não penetração nos contornos superiores e inferiores é satisfeita de forma forte. Na aproximação MHM- $H^1$  observa-se claramente vetores de fluxo penetrando o contorno.

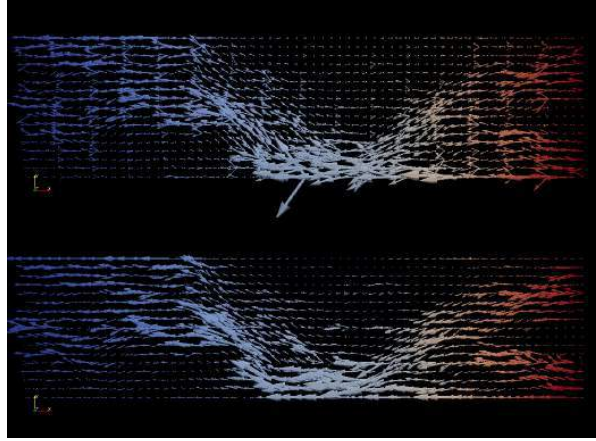


Figura 7: Comparação da solução fluxo para  $MHM-H^1$  (acima) e  $MHM-H(\text{div})$  (em baixo).

Na ausência de solução analítica, calculou-se a norma de erro entre as aproximações  $MHM-H^1$  e  $MHM-H(\text{div})$  em função do número de divisões internas dos macro-elementos. A taxa de convergência deste erro é condição necessária para a convergência de ambas as aproximações, pois

$$\|\sigma_{MHM-H^1} - \sigma_{MHM-H(\text{div})}\| \leq \|\sigma_{MHM-H^1} - \sigma_{ex}\| + \|\sigma_{MHM-H(\text{div})} - \sigma_{ex}\|.$$

Observou-se taxa de convergência

$$\|\sigma_{MHM-H^1} - \sigma_{MHM-H(\text{div})}\| \approx CH,$$

independente da ordem de aproximação dos elementos internos. Este fato muito nos surpreendeu e nos levou ao estudo de regularidade da solução.

#### Regularidade de solução de problemas heterogêneas

É sabido que, onde há uma mudança de propriedade de material, a solução do problema elíptico perde regularidade. Verificamos a seguir a força da singularidade que ocorre quando diferentes permeabilidades encontram-se. Este estudo é baseado na publicação de Wolf e Song [13], em que se analisa a regularidade de uma configuração com duas propriedades de material.

Considera-se uma configuração de domínio circular onde 4 diferentes permeabilidades encontram-se em um ponto. O domínio e a configuração de permeabilidade são ilustrados na Figura 8. A regularidade da solução deste problema pode ser obtida pela análise de problema Steklov associado à equação de Laplace:

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= \lambda u \end{aligned}$$



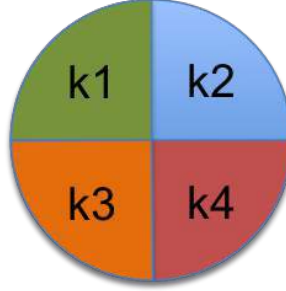


Figura 8: Domínio com 4 permeabilidades

A solução geral deste problema é da forma: para sub-domínio  $i$ :

$$u_i(r, \theta) = C_{1i} r^\lambda \sin(\lambda \theta) + C_{2i} r^\lambda \cos(\lambda \theta)$$

Para calcular os valores das constantes  $C_{1i}$  e  $C_{2i}$ , estabelecem-se duas condições de compatibilidade na interface entre sub-domínios:

$$\begin{aligned} u_i(r, \theta_{int}) &= u_{i+1}(r, \theta_{int}) \\ K_i \frac{\partial u_i(r, \theta)}{\partial \theta} &= K_{i+1} \frac{\partial u_{i+1}(r, \theta_{int})}{\partial \theta} \end{aligned}$$

Estas oito equações tem solução trivial  $C_{1i} = 0$  e  $C_{2i} = 0$ . Existem valores para  $\lambda$  para os quais o sistema para determinar as constantes é singular. Esses valores de  $\lambda$  são os autovalores de Steklov. Os menores valores de  $\lambda$  determinam a singularidade da solução e, por consequência, irão determinar a taxa de convergência que se pode esperar de uma aproximação de elementos finitos.

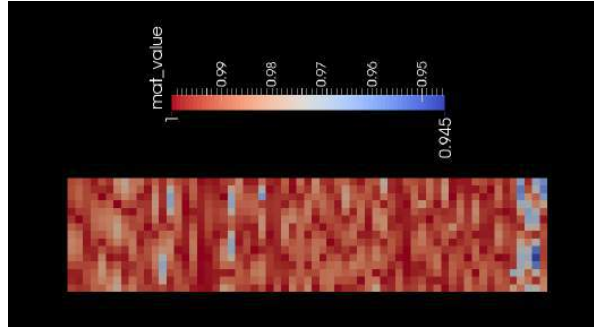


Figura 9: Mapa de regularidade de solução

Figura 9 mostra a regularidade da solução calculada a partir do mapa de permeabilidade ilustrado na Figura 6. Observa-se que a singularidade é fraca. O expoente menor é da ordem de 0,94. Mesmo assim, esta falta de regularidade justifica a redução da taxa de convergência observada.

## 5 Conclusão

O presente estudo propõe desenvolver técnicas numéricas para a aproximação de problemas multiescala, centradas no método Multi Scale Hybrid Method (MHM). O método MHM foi incorporado como uma

opção de espaço de aproximação no ambiente de programação de elementos finitos NeoPZ. A formulação originalmente proposta foi estendida para utilizar aproximações mistas dentro de cada macro-elemento.

Para melhor representar singularidades internas dentro dos macro-elementos, foram utilizadas aproximações SBFem, uma técnica de aproximação que está sendo incorporada com a colaboração do Prof. Song da universidade UNSW, Sidney, Australia.

Dando continuidade ao estudo, pretende-se utilizar os recursos adaptativos do NeoPZ para melhorar a qualidade das aproximações MHM tanto ao nível dos macro-elementos como também ao nível de espaço de fluxos macroscópicos, a ser feito na próxima etapa.

## Referências

- [1] J.L.D. Calle, P.R.B. Devloo, and S.M. Gomes. Implementation of continuous hp-adaptive finite element spaces without limitations on hanging sides and distribution of approximation orders. *Comput. & Math. Appl.*, 70(5):1051–1069, 2015.
- [2] D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, D. de Siqueira, and O. Durán. Three dimensional hierarchical mixed finite element approximations with enhanced primal variable accuracy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 306:479–502, February 2016.
- [3] D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, and O. Durán. Hierarchical high order finite element bases for  $h(\text{div})$  spaces based on curved meshes for two-dimensional regions or manifolds. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 301:241–258, 2016.
- [4] P.R.B. Devloo, O. Duran, S.M. Gomes, and N. Shauer. Mixed finite element approximations based on 3d hp-adaptive curved meshes with two types of  $h(\text{div})$ -conforming spaces. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 2017.
- [5] P.R.B. Devloo, A. M. Farias, and S.M. Gomes. Application of a combined continuous-discontinuous galerkin finite element method for the solution of the girkmann problem. *Comput. & Math. Appl.*, 65(11):1786–1794, 2013.
- [6] P.R.B. Devloo, A.M. Farias, S.M. Gomes, and D. de Siqueira. Two-dimensional hp adaptive finite element spaces for mixed formulations. *Math. Comput. Simul.*, 126(104-122):279–297, 2016.
- [7] A.M. Farias, P.R.B. Devloo, S.M. Gomes, and P.C.A. Lucci. Development of object-oriented finite element tools for multiphysics simulations and applications to hydraulic fracture propagation. *Adv. Eng. Soft.*, 2017.
- [8] J. L. Gonçalves, S.M. Gomes, and P.R.B. Devloo. A goal-oriented hp-adaptive discontinuous galerkin approach for biharmonic problems. international journal for numerical methods in engineering. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 97(4):279–297, 2014.
- [9] C. Harder, A. L. Madureira, and F. Valentin. A hybrid-mixed method for elasticity. *ESAIM: M2AN*, 50:311–316, 2016.
- [10] C. Harder, D. Paredes, and F. Valentin. A family of multiscale hybrid-mixed finite element methods for the darcy equation with rough coefficients. *J. Comput. Phys.*, 245:107–130, 2013.
- [11] C. Harder, D. Paredes, and F. Valentin. On a multiscale hybrid-mixed method for advective-reactive dominated problems with heterogeneous coefficients. *Multiscale Model. Simul.*, 13(2):491–518, 2015.
- [12] D. Siqueira, P. R. B. Devloo, and S. M. Gomes. A new procedure for the construction of  $h\text{div}$  and  $h\text{curl}$  finite element spaces. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 240:204–214, 2013.
- [13] Chongmin Song and John P. Wolf. The scaled boundary finite element method—alias consistent infinitesimal finite element cell method—for diffusion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(10):1403–1431, 1999.

## Anexo 2

# O método MHM no NeoPZ aplicado a problemas de elasticidade

Philippe R. B. Devloo, Sonia M. Gomes

### 1 Introdução

Problemas multi-escala em elasticidade são abundantes. O concreto é provavelmente o material mais utilizado pela humanidade e é um material altamente heterogêneo. O material presente em baterias deteriora-se devido à inclusão de moléculas dentro de uma matriz elástica porosa. Os reservatórios de petróleo brasileiros na camada pré-sal são altamente heterogêneos, etc.

Uma das técnicas mais populares para simular o comportamento multi-escala de problemas elásticos sem recorrer a malhas excessivamente finas é chamada *FEM<sup>2</sup>* [4, 2, 3]. Nesta técnica, uma realização de um pedaço heterogêneo do corpo é simulado em cada ponto de integração para extrair o comportamento macroscópico do corpo. Na técnica MHM para problemas elásticos [1], a heterogeneidade pode ser simulada a nível de cada macro-elemento e a interação entre os mesmos pode ser calculada utilizando as tensões polinomiais entre os blocos. O presente estudo faz parte do projeto FAPESP 2016/05155, intitulado *Simulação Multi-Escala com Elementos Finitos*.

### 2 MHM para problemas de elasticidade

Seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2, 3$ , uma dada região aberta limitada, com fronteira poligonal  $\partial\Omega$  e considere a seguinte formulação forte das equações de elasticidade: achar o deslocamento  $\mathbf{u}$  tal que

$$-\nabla \cdot \mathbb{C}E(\nabla \mathbf{u}) = \mathbf{f} \text{ em } \Omega, \quad (1)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{g} \text{ em } \partial\Omega, \quad (2)$$

em que  $\mathbf{g} \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ ,  $\mathbf{f} \in [L^2(\Omega)]^d$ ,  $E(\nabla \mathbf{u}) = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}}{2}$ ,  $\mathbb{C}$  é um tensor uniformemente definido positivo atuando no espaços de matrizes simétricas  $d \times d$ .

#### 2.1 Formulação híbrida primal

No método clássico de elementos finitos ( $H^1$ -conforme), a continuidade da solução entre elementos da partição do domínio costuma ser imposta fortemente no espaço de aproximação, onde as soluções são procuradas. No entanto, ocorrem situações em que este tipo de aproximação não é apropriado, como por exemplo, para o caso de materiais heterogêneos. Em formulações híbridas, a continuidade das aproximações é imposta de forma fraca, através de termos integrais, sobre o contorno dos elementos.

Considere uma partição regular  $\mathcal{T} = \{\Omega_e\}$  do domínio  $\Omega$ . Para cada sub-domínio  $\Omega_e$  (macro-elementos), a fronteira  $\partial\Omega_e$  é formada por faces  $F$ , sendo  $\mathcal{E}$ , o *esqueleto* da partição, o conjunto de todas as faces de elementos da partição. Sobre o esqueleto  $\mathcal{E}$ , define-se um campo  $\mathbf{n}$  de forma que  $\mathbf{n}|_F$  é um vetor normal à face  $F \in \mathcal{E}$ , e denota-se por  $\boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}$  a normal unitária exterior em  $\partial\Omega_e$ .

### Notação

Para formalizar a formulação híbrida primal do problema modelo de elasticidade, definem-se os seguintes espaços funcionais:

$$\mathbf{H}^1(\mathcal{T}) = \{\mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^d : \mathbf{v}|_{\Omega_e} \in [H^1(\Omega_e)]^d, \Omega_e \in \mathcal{T}\}$$

$$\mathbf{\Lambda}(\mathcal{E}) = \left\{ \boldsymbol{\mu} \in \prod_{\Omega_e \in \mathcal{T}} \mathbf{H}^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_e) : \exists \mathbf{q} \in \mathbf{H}(\text{div}, \Omega, \mathbb{S}), \text{ such that } \mathbf{q}\boldsymbol{\eta}^{\Omega_e} = \boldsymbol{\mu} \text{ on } \partial\Omega_e, \Omega_e \in \mathcal{T} \right\},$$

em que  $\mathbb{S}$  representa o espaço das matrizes  $d \times d$  simétricas. Para funções  $\mathbf{v} \in \mathbf{H}^1(\mathcal{T})$  e  $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{\Lambda}(\mathcal{E})$ , considera-se o produto dual

$$(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{v})_{\partial\Omega_e} := \int_{\Omega_e} \nabla \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} + \int_{\Omega_e} \mathbf{q} \nabla \mathbf{v} d\mathbf{x}.$$

A formulação híbrida primal do problema modelo é dada por: encontrar  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in v \in \mathbf{H}^1(\mathcal{T}) \times \mathbf{\Lambda}$  tal que, para  $\forall (\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}) \in \mathbf{H}^1(\mathcal{T}) \times \mathbf{\Lambda}$ ,

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathbb{C}E(\nabla \mathbf{u}), E(\nabla \mathbf{v}))_{\Omega_e} + (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{v})_{\partial\Omega_e} = \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathbf{f}, \mathbf{v})_{\Omega_e}, \quad (3)$$

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u})_{\partial\Omega_e} = (\boldsymbol{\mu}, \mathbf{g})_{\partial\Omega}. \quad (4)$$

Verifica-se que  $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \in v \in \mathbf{H}^1(\mathcal{T}) \times \mathbf{\Lambda}$  é solução de (3-4) se e somente se  $\mathbf{u} \in \mathbf{H}^1(\Omega)$  é solução de (1-2). Além disso,  $\boldsymbol{\lambda}|_{\partial\Omega_e} = -\boldsymbol{\sigma} = -\mathbb{C}E(\mathbf{u})\boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}$ .

Conforme descrito em [1], a formulação MHM do problema de elasticidade é feita nas seguintes etapas:

1. Define-se  $\mathbf{V} \subset \mathbf{H}^1(\mathcal{T})$  um sub-espaço de dimensão finita, e considera-se a sua decomposição  $\mathbf{V} = \mathbf{V}_{\text{rm}} \oplus \tilde{\mathbf{V}}$ , em que  $\mathbf{V}_{\text{rm}} = \{\mathbf{v} : E(\mathbf{v})|_{\Omega_e} = 0\}$  (*rigid motions*) e  $\tilde{\mathbf{V}}$  é o complemento ortogonal de  $\mathbf{V}_{\text{rm}}$  em  $\mathbf{V}$ .
2. Define-se um espaço de aproximação  $\mathbf{\Lambda} \subset \mathbf{\Lambda}(\mathcal{E})$  de dimensão finita. Supõe-se que a discretização no interior de cada sub-domínio seja bem mais refinada do que a discretização associada aos contornos dos macro-elementos.
3. A aproximação MHM é descrita como: encontrar  $(\mathbf{u}_{\text{rm}} + \tilde{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\lambda}) \in (\mathbf{V}_{\text{rm}} \oplus \tilde{\mathbf{V}}) \times \mathbf{\Lambda}$  tal que,

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathbb{C}E(\nabla \tilde{\mathbf{u}}), E(\nabla \tilde{\mathbf{v}}))_{\Omega_e} + (\boldsymbol{\lambda} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, \tilde{\mathbf{v}})_{\partial\Omega_e} = \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathbf{f}, \tilde{\mathbf{v}})_{\Omega_e}$$

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\boldsymbol{\mu}, \mathbf{u}_{\text{rm}} + \tilde{\mathbf{u}})_{\partial\Omega_e} = (\boldsymbol{\mu}, \mathbf{g})_{\partial\Omega}$$

$$\sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\boldsymbol{\lambda} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\eta}^{\Omega_e}, \mathbf{v}_{\text{rm}})_{\partial\Omega_e} = \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}} (\mathbf{f}, \mathbf{v}_{\text{rm}})_{\partial\Omega_e}$$

para todo  $\mathbf{v}_{\text{rm}} \in \mathbf{V}_{\text{rm}}$ ,  $\tilde{\mathbf{v}} \in \tilde{\mathbf{V}}$  e  $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{\Lambda}$ .

## 2.2 A formulação MHM

A estrutura de classes que foi desenvolvida no NeoPZ para realização de simulações escalares foi adaptada para implementação de aproximação MHM de problemas bi-dimensionais elásticos. Espera-se que a mesma irá se aplicar a simulações tri-dimensionais no futuro.

Para a condensação das equações internas de elasticidade é preciso separar ao menos três equações correspondentes ao movimento de corpo rígido. Para simplificar a implementação separamos dois nós, correspondentes a quatro equações, para serem resolvidos depois das equações de tensões normais entre os macro-elementos.

No caso escalar, tanto a versão  $\text{MHM-}\mathbf{H}^1$  quanto a  $\text{MHM-}\mathbf{H}(\text{div})$  foram implementadas. Mas a versão  $\text{MHM-}\mathbf{H}(\text{div})$  no caso vetorial do problema elástico ainda não está disponível no NeopZ.

### 3 Problema exemplo

Para verificar a implementação do método  $\text{MHM-}\mathbf{H}^1$ , aproximamos um problema elástico em que tanto o coeficiente elástico de Young quanto a solução são oscilatórios:

$$\begin{aligned} E &= 100(1 + 0.3 \sin(10\pi(x - 0.5)) \cos(10\pi y)), \\ u(x, y) &= \begin{cases} \frac{1}{3}(\frac{x}{3})^2 y^2 \cos(6\pi x) \sin(7\pi y) \\ \frac{1}{5} e^y \sin(4\pi x) \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

As expressões dos dados de entrada do problema são mostrados graficamente na Figura 1. As tensões resultantes desta configuração são ilustradas na Figura 2.

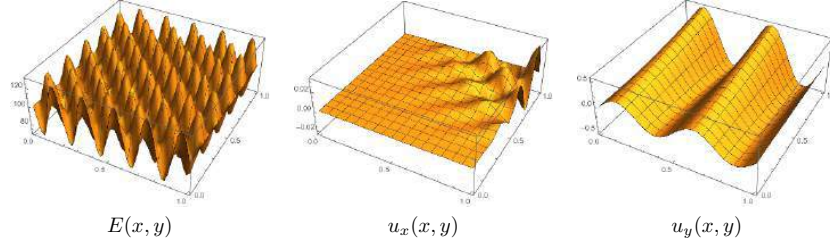


Figura 1: Dados de entrada para o problema elástico.

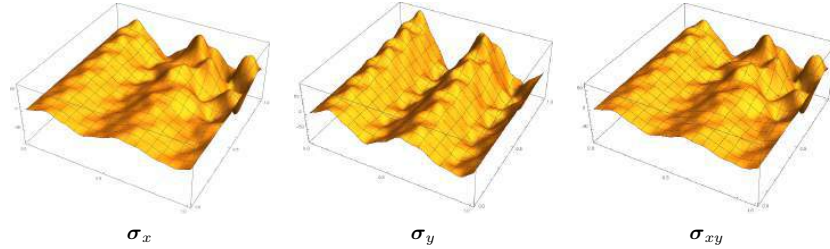


Figura 2: Estado de tensão analítico.

Aproximamos as equações acima utilizando MHM com base em macro-elementos  $8 \times 8$  e  $32 \times 32$ . As configurações com  $4 \times 4$  subdomínios tiveram 4 refinamentos internos (256 elementos) com interpolação quadrática. A configuração com  $32 \times 32$  macro-elementos foi rodada com 2 refinamentos internos (16 elementos). Os resultados para  $\sigma_x$  são mostrados em relevo na Figura 3. A configuração com  $8 \times 8$  macro-elementos claramente foi insuficiente para capturar os elementos essenciais da solução. A segunda e terceira configuração são equivalentes em termos de tamanho de *micro* elemento. A configuração  $32 \times 32$  resultou em menores erros para todas as normas.

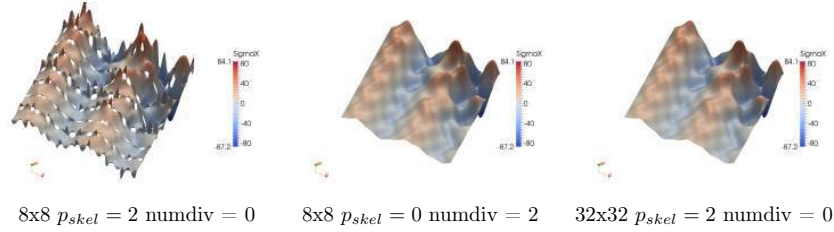


Figura 3:  $\sigma_x$  para diferentes configurações

Figura 4 mostra o erro em função do tamanho do macro-elemento. Nota-se que a convergência já entre em regime asymptótico desde a maior discretização. As taxas de convergência para a norma de energia são 2 e 3 respectivamente.

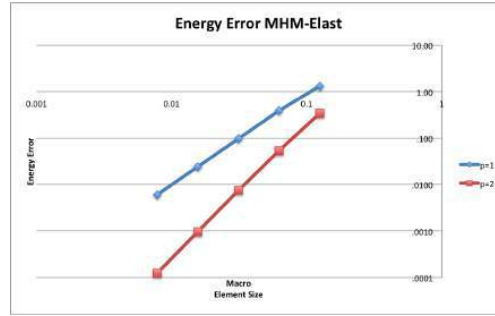


Figura 4: Convergência de solução obtida pelo MHM para o problema elástico

### Próximas etapas

- Implementação e validação das equações elásticas tri-dimensionais no quadro MHM.
- Definição de configuração multi-escala a ser simulada.
- Implementação do método  $FEM^2$  utilizando as propriedades extraídas da configuração definida.
- Comparação da taxa de convergência de MHM e  $FEM^2$ .

### Referências

- [1] C. Harder, A. L. Madureira, and F. Valentin. A hybrid-mixed method for elasticity. *ESAIM: M2AN*, 50:311–316, 2016.
- [2] Michael Ortiz and Laurent Stainier. The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 171(3):419–444, 1999.
- [3] K. Terada and N. Kikuchi. A class of general algorithm for multi-scale analyses of heterogeneous media. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:5427–5464, 2001.
- [4] T. Hou Y. Efendiev. *Multiscale finite element methods: theory and applications*. Springer, 2009.

## Anexo 3

# Implementação do SBFem no NeoPZ

Philippe R. B. Devloo e Chongmin Song

### 1 Introdução

Uma técnica desenvolvida recentemente para aproximação de problemas de elasticidade e problemas de Poisson de forma semi-analítica é denominada SBM (*Scaled Boundary Method*) [2, 1, 3]. Neste método, a equação diferencial no interior de um polígono é resolvida de forma semi-analítica em função do valor da função na borda do domínio. A técnica é parecida, embora diferente, da técnica de elementos de contorno. Posteriormente, as idéias da técnica SBM foram estendidas para calcular uma aproximação nos moldes de elementos finitos, combinando uma discretização polinomial do domínio computacional. Esta extensão é chamada de SBFem.

Na técnica SBFem o domínio é particionado por elementos polinomiais. A cada elemento polinomial, associa-se um espaço de aproximação polinomial na borda e calcula-se uma matriz de rigidez associada à discretização das funções de borda. A montagem do sistema global é realizada de forma idêntica ao método de elementos finitos.

As aproximações SBFem mostram excelente qualidade quando aplicadas a problemas com singularidades, tais como transição de tipo de condição de contorno, no caso de problemas de Poisson, ou fraturas, no caso de problemas de elasticidade.

A proposta do presente estudo é acoplar o cálculo SBFem no ambiente NeoPZ. Os elementos SBFem poderão fazer parte do cálculo MHM, como macro-elementos dedicados à aproximação de singularidades, cujo estudo faz parte do projeto FAPESP 2016/05155, intitulado *Simulação Multi-Escala com Elementos Finitos*.

#### 1.1 Incorporação de aproximações SBFem dentro de uma estrutura tradicional de elementos finitos

Para uma descrição elucidadora, nos referimos às publicações [3, 2]. Um aspecto fundamental do método é a divisão do domínio poliedral em elementos piramidais, como ilustrados na Figura 1. Em cada pirâmide (triângulo no caso de domínios bi-dimensionais), o mapeamento do domínio paramétrico  $(\xi, \eta)$  para a sua coordenada  $(x, y)$  deve seguir a lógica do *scaled map* da base da pirâmida até a ponta. Tal mapeamento pode ser obtido por um quadrilátero onde os dois nós superiores coincidem.

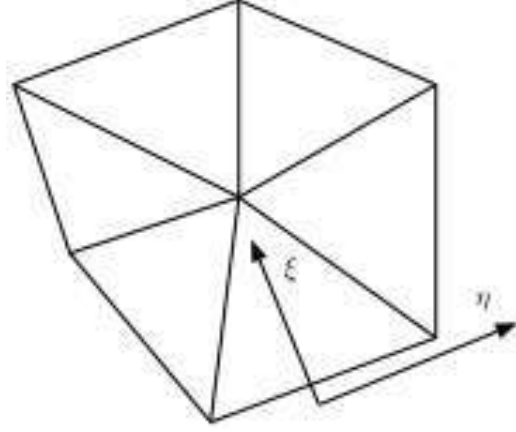


Figura 1: Subdivisão de elemento SBFem poliedral.

Para um elemento quadrilátero com vértices nos pontos  $(x_i, y_i)$ , as coordenadas  $(x, y)$  correspondente a um ponto paramétrico  $(\xi, \eta)$  são calculadas como:

$$(x, y) = \sum_i \varphi_i(\xi, \eta) (x_i, y_i)$$

,em que

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta), \\ \varphi_2 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta), \\ \varphi_3 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta), \\ \varphi_4 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta). \end{aligned}$$

Substituindo as relações  $x_2 = x_3$ ,  $y_2 = y_3$  e utilizando a propriedade  $\sum_i \varphi_i = 1$ , o mapeamento entre  $(\xi, \eta)$  e  $(x, y)$  pode se re-escrito como

$$(x, y) = ((x_1, y_1) - (x_2, y_2)) \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) + ((x_4, y_4) - (x_2, y_2)) \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) + (x_2, y_2),$$

o que corresponde ao mapeamento documentado nas publicações sobre SBFem, desde que substitua-se o parametro  $\xi$  pela parametrização alternativa  $\hat{\xi} = (1 - \xi)/2$ .

Partindo do fato que dispomos de código de elementos finitos que calcula funções de forma unidimensionais  $N(\eta)$ , em que  $-1 \leq \eta \leq 1$ , os cálculos SBFem baseiam-se numa extensão de  $N(\eta)$  tal que  $u(\xi, \eta) = N(\eta)u(\xi)$ . Os cálculos das matrizes intermediárias  $K_{11}, K_{12}, K_{22}$  são baseados na propriedade de que

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \xi} &= N(\eta)u'(\xi), \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} &= N'(\eta)u(\xi), \end{aligned}$$

separando os termos que multiplicam  $u(\xi)$  e  $u'(\xi)$ .

As matrizes  $K_{ij}$  do método SBFem são calculadas utilizando a extensão das funções unidimensionais  $N(\eta)$  para duas funções bidimensionais tal que

$$\begin{aligned} N_1(\xi, \eta)|_{\xi=1} &= N(\eta)1_x, \\ N_2(\xi, \eta)|_{\xi=1} &= N(\eta)1_y, \end{aligned}$$



e

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_1}{\partial \xi}|_{\xi=1} &= 0, \\ \frac{\partial N_1}{\partial \eta}|_{\xi=1} &= N'(\eta), \\ \frac{\partial N_2}{\partial \xi}|_{\xi=1} &= -1/2N(\eta), \\ \frac{\partial N_2}{\partial \eta}|_{\xi=1} &= N'(\eta)\end{aligned}$$

As matrizes  $K_{ij}$  utilizando a extensão das funções unidimensionais para bidimensionais e efetuando integrais unidimensionais utilizando o método *Contribute* do material bidimensionais. Isso significa que podemos utilizar a formulação variacional do material bidimensional para calcular as matrizes fundamentais  $K_{ij}$  de SBFem.

## 1.2 Incorporação do SBFem dentro do NeoPZ

Para incluir simulações SBFem dentro da biblioteca NeoPZ, classes específicas foram criadas para implementar os procedimentos necessários para realizar simulações SBFem.

## 1.3 Modelo geométrico

A descrição geométrica necessária para realizar cálculos com SBFem consiste de uma malha de dimensão  $n-1$ , que chamaremos de malha esqueleto. Cada elemento SBFem é composto de uma lista de pares <elemento esqueleto, elemento piramidal>. A união dos elementos piramidais formam o domínio associada ao elemento.

## 1.4 Espaço de aproximação

Associado a cada elemento geométrico piramidal, cria-se um elemento computacional **SBFemVolume** cuja principal função é calcular as matrizes  $K_{ij}$ . Dependendo da formulação variacional associada com o elemento (objeto *TPZMaterial*), matrizes  $K_{ij}$  associadas a problema de Poisson ou elasticidade são calculadas. A área coberta pelo elemento SBFem corresponde a um conjunto de objetos **SBFemVolume**. Desenvolvemos a classe **TPZSBFemElementGroup** para agrupar os objetos **TPZSBFemVolume**, assemblar suas contribuições e resolver o problema de autovalores inerente ao método SBFem.

O pós processamento e visualização dos resultados é também implementado pelos objetos **TPZSBFemVolume**.

# 2 Validação da implementação SBFem

## 2.1 Aproximação de problema com solução regular

Aplica-se o método SBFem para aproximar um problema da equação de Laplace com condições Dirichlet no contorno com solução exata

$$u(x, y) = e^{\pi x} \sin(\pi y), \quad (x, y) \in \Omega$$

$$\Omega = [0, 1] \times [-2, 2]$$

A solução exata é ilustrada na Figura 2

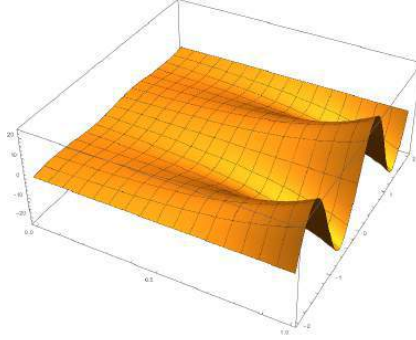


Figura 2: Solução harmônica regular.

O problema foi aproximada com diferentes configurações de malha. Variamos o numero de elementos SBFem, variamos o número de elementos esqueleto associado a cada lado e a ordem polinomial das funções associadas às bordas de SBFem. O gráfico de convergência 3 mostra o erro da norma  $L^2$  e semi norma  $H^1$  em função do tamanho do elemento de esqueleto. O grafico combina erros para configurações com 1, 2 e 4 elementos esqueleto associado a cada lado. O gráfico de erro que começa do lado mais direito corresponde a elementos com um elemento esqueleto, depois dois elementos esqueleto e finalmento 4 elementos esqueleto. Observamos que uma malha com  $2n \times 2n$  elementos com 1 esqueleto gera o mesmo erro que uma malha com  $n \times n$  elementos e 2 esqueleto por lado.

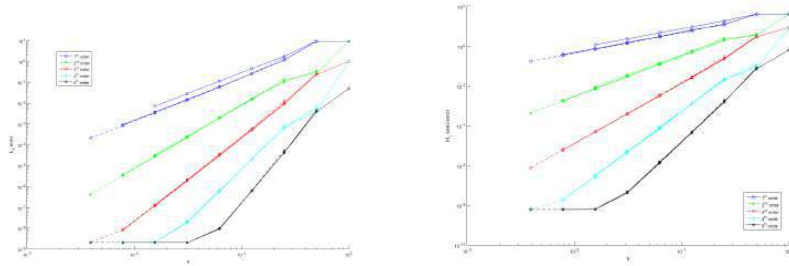


Figura 3: Erros de aproximação do problema regular pelo método SBFem medidos pela norma de  $L^2(\Omega)$  (à direita) e pela semi-norma de  $H^1(\Omega)$  (à esquerda) .

As taxas de convergência associadas a cada gráfico são documentado na Tabela 1. Observa-se que a taxa é aproximadamente  $p + 1$  para o erro em  $L^2$  e ordem  $p$  para o erro na seminorma  $H^1$ , em que  $p$  é a ordem polinomial do esqueleto.

$p$	norma $L^2$	semi-norma $H^1$
1	1.8484	0.9175
2	2.8653	1.9308
3	3.9623	3.0018
4	4.8646	3.9147
5	5.5365	4.8563

Tabela 1: Taxas de convergência do SBFem aplicado ao problemas regular.

## 2.2 Aproximação de um problema com singularidade

Neste problema, o método SBFem é aplicado na simulação de um problema associado a uma cunha circular com ângulo de  $3\pi/2$  e raio unitário. O problema de valor de contorno associado ao domínio impõe condições Neumann no contorno externo e condições de Dirichlet homogêneo nos lados radiais. O domínio e a solução aproximada é ilustrado na Figura 4. A solução analítica que determina as condições de Neumann é

$$u(r, \theta) = \sum_{n=1}^{n=6} \frac{(11-n)}{45} r^{\frac{2n}{3}} \cos\left(\frac{2n}{3}\theta\right)$$

O valor da solução no contorno é ilustrado na Figura 5. Nota-se que a solução deste problema tem derivada infinita para  $r = 0$ .

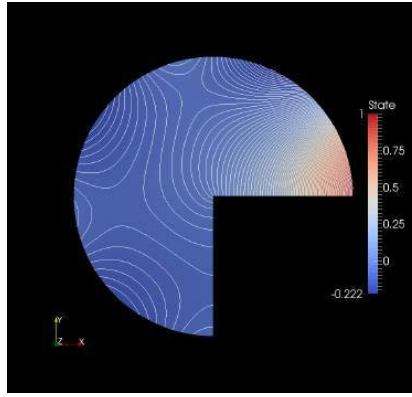


Figura 4: Solução em um círculo truncado.

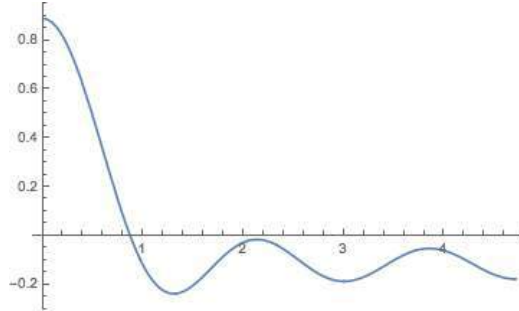


Figura 5: Solução ao longo da fronteira

O problema foi aproximado utilizando SBFem com apenas um elemento (a biblioteca NeoPZ permite implementar geometrias não lineares). Como o método SBFem baseia-se em aproximação de autovalores/autovetores do problema de Steklov e o fato da solução analítica ser composta por combinação linear se autovetores de Steklov, avaliamos o erro de aproximação pelo erro dos auto-valores calculados internamente. Esta avaliação foi feita também na publicação [4]. O tamanho do sistema linear associado à aproximação numérica do problema é  $p + 1$ , em que  $p$  é a ordem polinomial associada ao elemento esqueleto. A representação das auto-funções de Steklov é realizada pelos polinomios uni-dimensionais. Quando a ordem polinomial é aumentada, sua capacidade de representar o autovetor  $\cos(n\frac{2\pi}{3})$  também é melhorada. Na Tabela 2 comparam-se o auto-valores calculados no problema SBFem com os auto-valores analíticos.

Tabela 2: Eigenvalue approximation

p	Auto-valores				
$\infty$	0.66666....	1.33333..	2	2.66666...	3.33333...
5	0.66666675	1.3381618	2.02682796	not found	not found
6	0.66666675	1.333355	2.026827	2.7498338	not found
7	0.66666666677	1.333355	2.00042052	2.749833	3.5239695
8	0.666666666677	1.333333364	2.00042052	2.669548	3.5239695
9	0.6666666666668	1.333333364	2.00000215	2.669548	3.344838
10	0.6666666666667	1.33333333351	2.00000215	2.666703	3.344838
11	0.66666666666686	1.33333333335	2.0000000046	2.6667031	3.333621
12	0.6666666666667	1.33333333332	2.0000000046	2.66666686	3.333621
13	0.666666666658	1.33333333332	2.0000000000083	2.66666686	3.333364
14	0.666666666669	1.333333333306	2.0000000000014	2.6666666672	3.333364

Na Figura 6 relata-se a convergência do método SBFem em função do tamanho do elemento quando aplicado ao problema singular, documentado utilizando elementos quadráticos e medidos nas normas de  $L^2(\Omega)$  e  $H^1(\Omega)$ , respectivamente. Nota que taxas ótimas (três e dois respectivamente) são obtidas. Este fato é surpreendente porque estamos aproximando um problema singular com aproximações polinomiais.

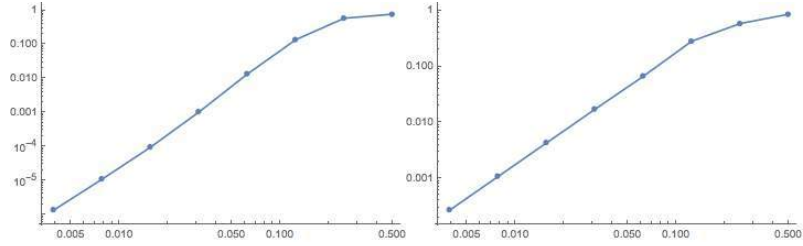


Figura 6: Taxas de convergência para problema singular utilizado o método SBFem com erro medidos na norma de  $L^2(\Omega)$  (à direita) e de  $H^1(\Omega)$  (à esquerda).

### 2.3 Simulação de problemas de meios porosos heterogêneos

Neste problema simulamos o problema documentado em [4], em o problema de Steklov aplicado a um domínio circular com contraste de permeabilidade de 10 é aproximado. A geometria do problema é ilustrada na Figura 7. A região com cor vermelha tem permeabilidade 1 e a região azul tem permeabilidade 10. Na Tabela 3, comparam-se os valores calculados com nosso programa com os valores documentados na publicação. Os valores correspondem a 4 elementos com ordem polinomial 6, com os quais o SBFem aproxima os autovalores analíticos com 12 dígitos de precisão.

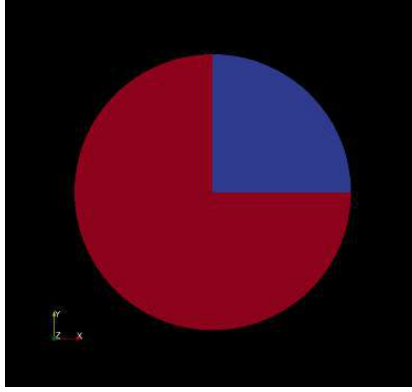


Figura 7: Geometria de um meio heterogêneo.

$p$	$\lambda_1$	$\lambda_2$
$\infty$	-0.73169177869975244829	-1.268308221300247551
2	-0.731746	-1.2691331106
3	-0.7316919	-1.2683141
4	-0.7316917788695	-1.268308244
5	-0.7316917786999	-1.2683082213596
6	-0.7316917786997	-1.268308221300

Tabela 3: Aproximação do autovalores para o problema de Steklov com contraste 10 na permeabilidade.

### Simulando um caso mais extremo ainda

Estendemos a formulação acima para uma configuração com possivelmente quatro permeabilidades diferentes. No caso , os quadrantes nordeste e sudoeste possuem permeabilidade 100 vezes maior que nos outros quadrantes. Impomos uma pressão constante nos contornos dos quadrantes nordeste ( $u = 1$ ) e sudoeste ( $u=0$ ). Nos outros quadrantes a pressão varia linearmente em função do ângulo. A Figura 8 mostra a pressão simulada por SBFem em cores junto com isolinhas.

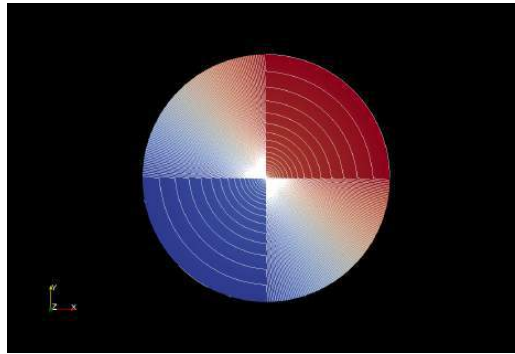


Figura 8: Isolinhas e isocores da pressão simulada por SBFem.

Quando calcula-se o primeiro autovalor do problema de Steklov com Mathematica utilizando o procedi-

mento detalhado no relatório de pesquisa do Anexo 1, calcula-se o autovalor  $\lambda = -0.1269020697222142780599$ . Este mesmo autovalor calculado por SBFem é -0.1269020697212138 (12 dígitos de precisão). A solução para a pressão ao longo da diagonal da aproximação SBFem é ilustrada na Figura 9. Sua evolução é tão singular que não pode ser corretamente visualizada com Paraview.

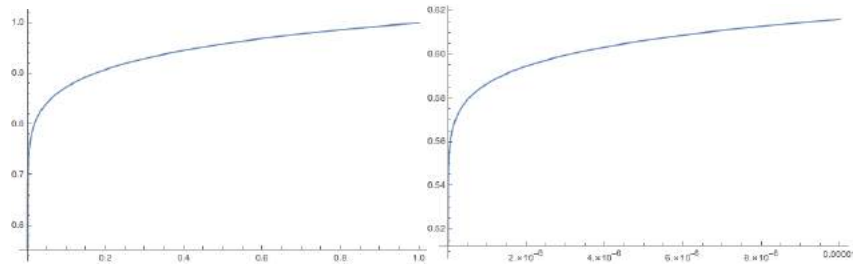


Figura 9: Pressão calculada com SBFem mostrada ao longo da diagonal (à esquerda) e *zoom in* próximo de 0 (à direita).

## Próximas etapas

- Implementação do método SBFem para problemas de elasticidade 2D
- Implementação do método SBFem para problemas de Darcy 3D
- Implementação do método SBFem para problemas de elasticidade 3D
- Combinação do método SBFem com método MHM (elasticidade e Darcy)
- Cálculo de estimativa de erro para SBFem baseado na hibridização da mesma

## Referências

- [1] A.J. Deeks and J.P. Wolf. A virtual work derivation of the scaled boundary finite element method. *CM*, 28:489–504, 2002.
- [2] E. T. Ooi, S. Natarajan, C. Song, and F. Tin-Loi. Crack propagation modelling in functionally graded materials using scaled boundary polygons. *Int J Fract*, 192:87–105, 2015.
- [3] E.T. Ooi, M. Shi, C. Song, F. Tin-Loi, and Z. J. Yang. Dynamic crack propagation simulation with scaled boundary polygon elements and automatic remeshing technique. *Engineering Fracture Mechanics*, 106:1–21, 2012.
- [4] Chongmin Song and John P. Wolf. The scaled boundary finite element method—alias consistent infinitesimal finite element cell method—for diffusion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(10):1403–1431, 1999.

# Anexo 4

## MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ for multiphase fluid flow simulations in porous media

Omar Durán and Philippe R. B. Devloo

### Abstract

As an anthology, several finite element technologies have been incorporated into a home-made reservoir simulator coupled with geomechanics, called iMRS (innovative Multiscale Reservoir Simulator). For reasons of simplicity, a detailed description of the algorithms and procedures involved in the development of the simulator is avoided. The main scope of document, is to show the MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  potential to treat problems with hundred of thousands degrees of freedom in a very efficient way. At first a sequence of linear simulations are presented and then it is presented a set of three-dimensional simulations in the linear and non-linear case (water-oil reservoir system).

## 1 Introduction

In reservoir engineering, the accuracy of a reservoir simulation is dominated by the simulation of the multiscale characteristics of the geological models [1]. To understand the role of the multiscale characteristics of rocks, the reservoir models, must be able to master and model the multiscale characteristics of the equations of a blackoil model, or even the characteristics of the elliptic kernel, that is embedded in the equations for flow inside porous media, for instance the stationary case. For reservoir engineers, the accuracy of a multiphase simulation in porous media is fundamental for the correct prediction of the performance and the evaluation of the best strategy for the exploitation of an oil field. The heterogeneities of the rocks make the development of high precision models difficult, for two main reasons; first, the heterogeneity of the rocks are understood as properties randomly distributed and second, because the flow has characteristics of multiple scales.

In order to overcome these difficulties, a variant of the multiscale approach of [3] was adopted in this work. In this variant, a mixed method is applied with precision, being controlled through the resolution of the mesh and solving the elliptic problem with variable coefficients, that comes from any porous medium.

The method is based on the construction of basis functions, that incorporate the local properties of the PDE coefficients. Like several fine-coarse approaches, this method incorporates the effects of fine scales to calculate velocities and pressures in a coarse resolution, to later calculate detailed velocity fields, which are suitable for the approximation of convection dominated problems. The method is locally conservative at any scale, and takes into account radial flows. It does not need complicated source/sink well models near the wellbore region, and global / local upscaling procedures.

As was stated before the MHM- $H^1$  approximations are determined by the extension of polynomial fluxes, defined at the interfaces between the macro elements. In addition, the extension of the fluxes is computed using  $H^1$ . However, the vector field of this numerical approximation, has the disadvantage, that the vector field is inappropriate for convection dominated problems, because the vector is not conservative. In this research, a different approximation is introduced for the same boundary value problem, or in other words the MHM- $H(\text{div})$  method corresponding to the Darcy problem. Instead of using a  $H^1$  approximation for the extension of the internal fluxes, a mixed finite element approximation of  $H(\text{div})$  is used. In relation to the Darcy problem, the main differences between MHM- $H^1$  and MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  are:

- A polynomial flow by parts is defined at the interfaces between the coarse elements. In this case, the interface fluxes do not have the Lagrange multiplier function; instead it use degree of freedom restrains to couple a collection of elliptical problems, on each coarse element by condensing all the fine data on interface fluxes.

- The extension of the coarse fluxes into the micro elements is carried out by the solving the elliptic problem embedded in the macro elements.

In this contribution an approximation of the global mixed problem is calculated differently to [3]. In the sense that an  $H(\text{div})$  is used for the extension of the fluxes of a composite mesh of internal interfaces over the micro elements, and projecting the macro fluxes on the micro fluxes to force the necessary continuity. The use of  $H(\text{div})$  is primarily motivated to obtain locally conservative vectors at the finest scales, which are required without the need for a extra computational cycle dedicated to the reconstruction of the desired fluxes.  $\text{MHM-H}(\text{div})$  is composed mainly of two operations:

- Upscaling operator: This operation is based mainly on fine scale data for the construction of fluxes in the coarse scale problem. Its main function is the restriction of the fine scale fluxes to the coarse scale fluxes.
- Downscaling operator: Given the fluxes in the coarse problem, this operator extends the solution over the fine scales.

## 2 MHM-H(div) implementation

Several characteristics of Neopz were crucial to make the timely development of the  $\text{MHM-H}(\text{div})$  possible:

- Elements that form a macro element were grouped into an object of type `TPZSubCompMesh`. This object was developed to implement the sub-structuring of the finest elements and to group them into macro elements. It also provides facilities for static condensation that characterize the upscaling operator.
- Restrictions between fine scale fluxes over those defined over the skeleton mesh, are implemented through methods already developed for hp refinements.
- Once the constraints are calculated, the object substructures `TPZSubCompMesh` naturally implements the static condensation, that make  $\text{MHM-H}(\text{div})$  a computationally efficient.

### 2.0.1 Application of the MHM-H(div)

Several simulations 2D and 3D were performed; the purpose of the two dimensional simulations is show the nature of the  $\text{MHM-H}(\text{div})$  approach dealing with unstructured meshes in the linear case (linear tracer); the three dimensional simulations shows the capability of the implementation dealing with 3D tetrahedral partitions in the linear and non-linear case (water-oil reservoir system with gravity effects). All the problems related to the transport are approximated with lowest order DG using upstream differencing fluxes including gravity effects similar to [2].

#### Linear Tracer 2D

The geometry is represented by: the rectangular reservoir; a producing well and two injectors with radius  $r_w$ ; and impervious boundaries, the physical parameter are presented in table 1. In order to compare with a reference, the same case is configured in the IMEX reservoir simulator, obtaining the pressure profiles of the figure 2. In the IMEX configuration a cartesian mesh of resolution  $n_x = 1001$ ,  $n_y = 101$  was used. The difference between the profiles is due to the type of numerical scheme used by the simulators. The mixed approximation of iMRS has better convergence properties (the curves show a great similarity). The Dirichlet data of the prescribed pressure in the wells are reproduced, and the logarithmic variation is properly captured. The simulation of iRMS represented by the blue curve is verified quantitatively and will be used as the reference for the following multiscale approximations.



Property	Value
Reservoir dimensions	$L_x = 1000 [m], L_y = 100 [m]$
Well radius	$r_w = 0.2 [m]$
Production pressure	$p_p = 10 [MPa]$
Injection pressure	$p_i = 20 [MPa]$
Fluid viscosity	$\eta_f = 0.001 [Pa \cdot s]$
Fluid density	$\rho_f = 1000 [kg/m^3]$
Permeability	$\mathbf{K} = 1.0 \times 10^{-13} \mathbf{I} [m^2]$
Porosity	$\phi = 0.25$
Relative permeabilities	$k_{rw} = s_w$ and $k_{r \text{ tracer}} = 1 - s_w$

Table 1: Input data for the linear trace problem.

From the skeleton mesh shown in the figure 1, the full order problem is approximated with MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  meshes at levels  $l = \{0, 1, 2, 3\}$ , where  $l = 3$  represents the reference operator used for the approximation of the figure 2a. The table 2 shows, the size of the linear equation system associated with each iMRS configuration. The figure 2b shows the different approximations of the full order operator showing a correct concordance. In terms of the linear condensed system, the multiscale approach uses very few degree of freedom, and consequently has much lower memory usage. It should be emphasized that the logarithmic variation of the pressure near the wells is captured even by the coarser level  $l = 0$  of the multiscale process.

Setting	$\mathbf{H}(\text{div})$	MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ with $l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
DoF	225152	1348	4740	8740	18532

Table 2: DoF of global mixed and condensed linear system of equations after MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ .

### Linear tracer with Heterogeneous field

In this verification a field of heterogeneous permeabilities and porosities is introduced, described and shown in the figure 3. This field must be properly captured, leaving the size of the micro elements as small as necessary to capture the variation of the property map. This process is shown in the figure 4, where a sequence of refinements on the micro elements are carried out, until they are small enough to completely capture the variation of properties. For this case level three  $l = 3$  is enough to capture the scale of the map, and the conventional upscaling process is avoided since, upscaling and downscaling operators are naturally incorporated by the multiscale process being described in this document.

Two important remarks can be stated:

- The figure 4 emphasizes that the multiscale method can be configured to capture the fine level of the properties of interest. Through the mesh adaptation in the wellbore regions, more degrees of freedom are concentrated and dedicated to capture the smaller scales, including those that come from the realization of a geological properties model.
- The skeleton meshes used in this example are non-structured meshes, demonstrating the capability to very complex geometries.

The figures 5a and 5b show that the coarser approximation with  $l = \{0, 1\}$  manages to capture the effects of the finer scales without compromising the solution of the transport problem.

### Linear Tracer 3D

The approximation of the passive tracer in a 3D setting is revisited with the objective to demonstrate the capabilities of the approximations in the 3D case.

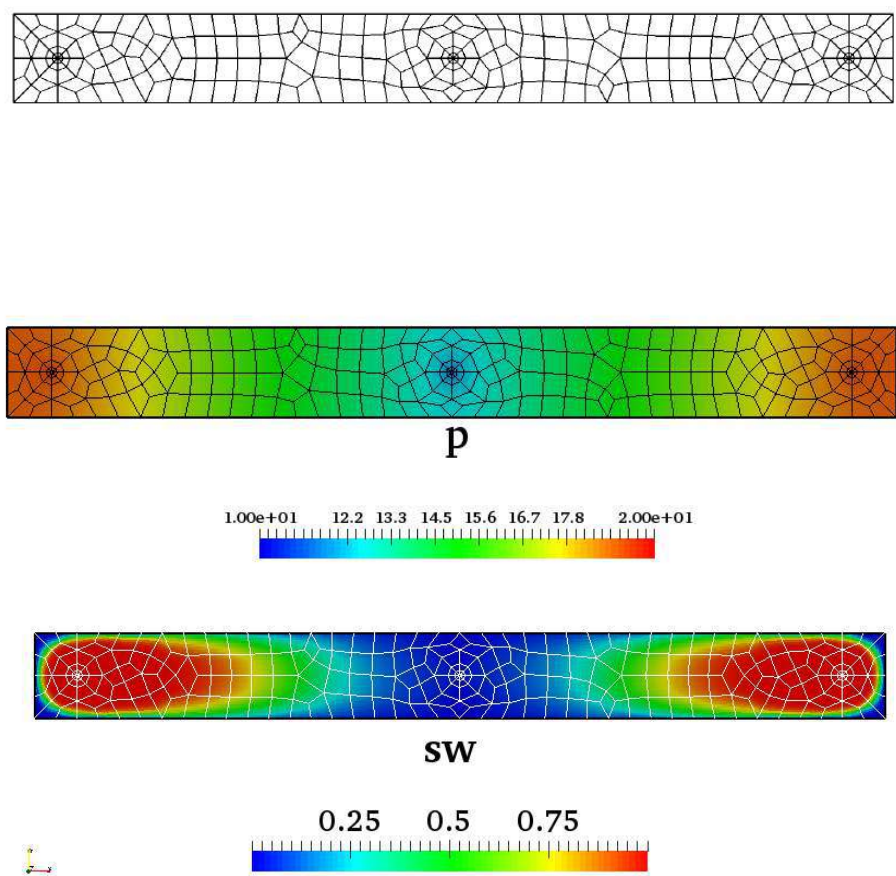


Figure 1: MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  partition mesh with  $l = 0$ . Color maps of pressure and saturations at  $t = 500[d]$ .

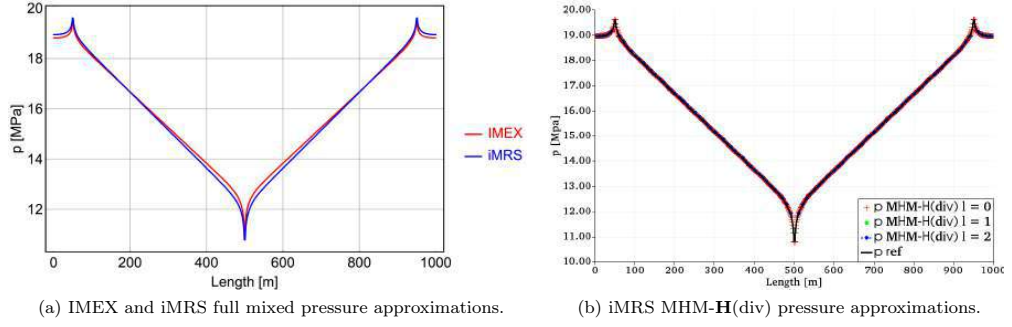


Figure 2: Approximation of reservoir pressure by iMRS and IMEX. The pressure profiles are rendered over the line  $\{-500, 0\}, \{500, 0\}$ .

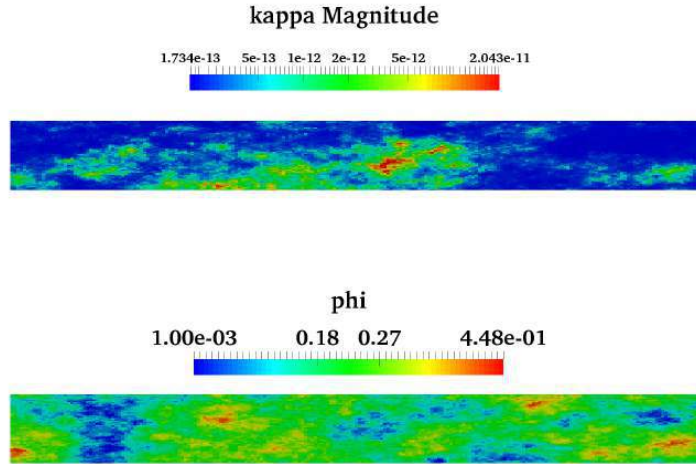


Figure 3: Natural logarithm of a field of permeability and 2D porosity, this field was extracted from the top layer of the 3D model of the SPE 10. The variance of log-permeability is  $\sigma_{ln}^2 = 5.49$ , which corresponds to a coefficient of variation  $CV = 2.97$ .

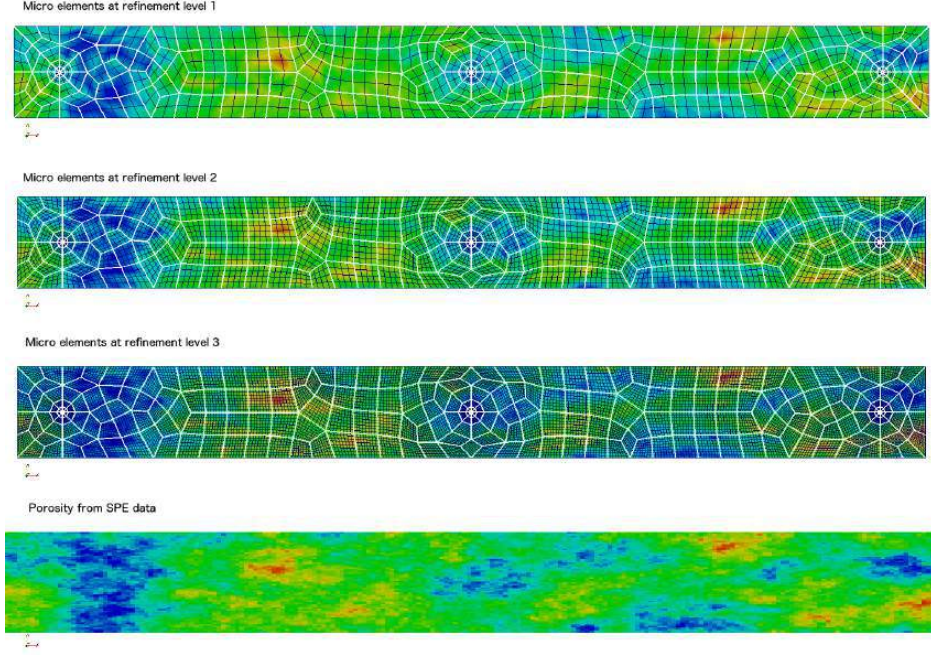


Figure 4: Examples of porosity tranfered to MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  meshes at three different levels. The white wire frame represents the skeleton mesh.

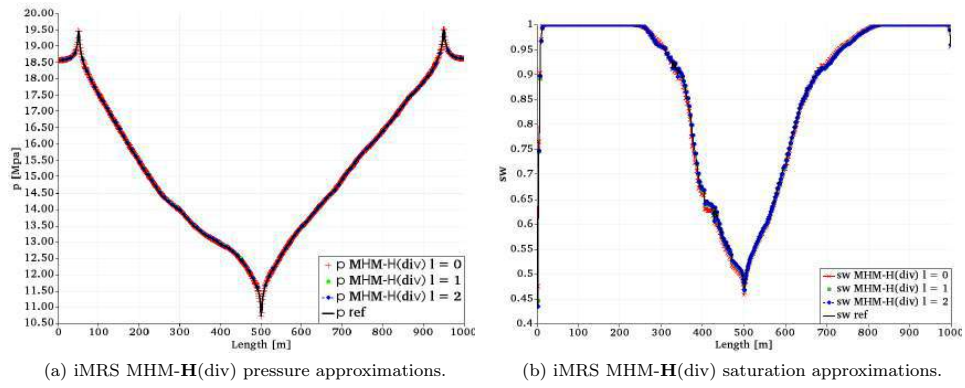


Figure 5: Approximation of reservoir pressure and saturations with SPE10 properties. The profiles are rendered over the line  $\{-500, 0\}, \{500, 0\}$ .

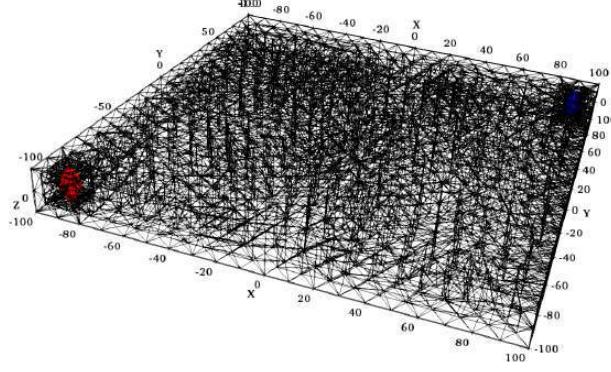


Figure 6: Partition of a rectangular 3D reservoir, ellipsoidal wellbore region and cylindrical wells. The blue wellbore region is the producer.

Property	Value
Reservoir dimensions	$L_x = 100 [m], L_y = 100 [m], L_z = 10 [m]$
Well radius	$r_w = 0.1 [m]$
Production pressure	$p_p = 10 [MPa]$
Injection pressure	$p_i = 30 [MPa]$
Fluid viscosity	$\eta_f = 0.001 [Pa \cdot s]$
Fluid density	$\rho_f = 1000 [kg/m^3]$
Permeability	$\mathbf{K} = 1.0 \times 10^{-13} \mathbf{I} [m^2]$
Porosity	$\phi = 0.25$
Relative permeabilities	$k_{rw} = s_w$ and $k_{r \text{ tracer}} = 1 - s_w$
Time step	$\Delta t = 10 [d]$
MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ level	$l = 0$

Table 3: Input data for the linear trace problem.

Figure 6 shows the finite element partition, generated by the Gmsh script. The blue and red regions represented the producer and injector wellbore regions respectively, they represent a cylindrical wellbore with spherical lids, with  $r_w = 0.1 [m]$ . This avoid the use of complicated well treatments such as regularized sources terms.

Figures 8, show the velocity approximation for the full order problem. Stream lines as rendered from flux approximation, it defines the trajectory of tracer particles from the injector to the producer. For incompressible flow the magnitude of vorticity of field associated with flux field is zero. The approximate field vector is mostly irrotational as should be expected from a conservative vector field (see figure 9). Isopotential contours are shown on the left of the figure 8. They have an inclination with respect to the  $z$  axis, due to the effect of gravity.

Figure 7 shows approximations for pressure profiles over the line  $\{(-100, -100, 0), (100, 100, 0)\}$ . The coarsest level  $l = 0$  already captures the pressure variation along the reservoir center.

Figure 10 shows the tracer saturation for the full order and the multiscale settings. The color maps of the saturations are very similar. The black wire frame representation of the bottom figure shows the macro element mesh being used.

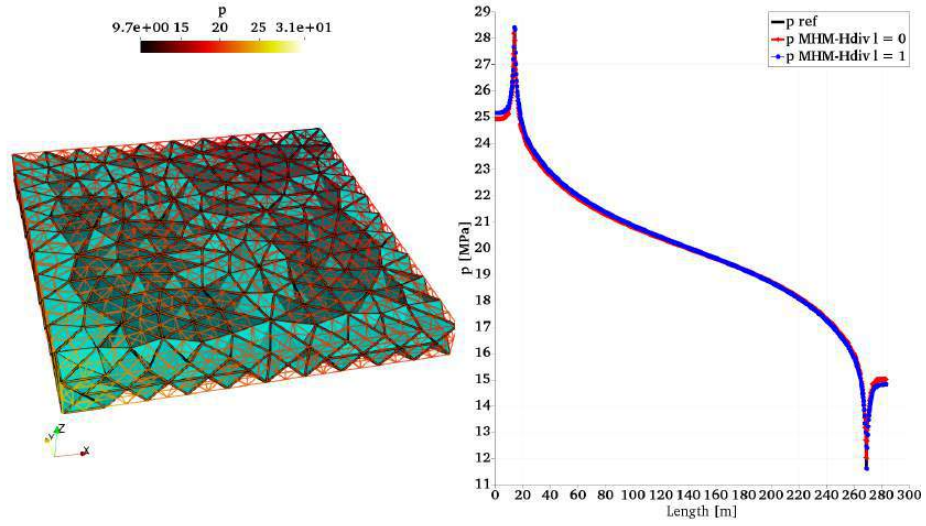


Figure 7: MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  skeleton mesh and comparison of pressure approximation of with the pressure coming from the standar mixed formulation, plot over line  $l = \{-100, -100, 0\}, \{100, 100, 0\}$ .

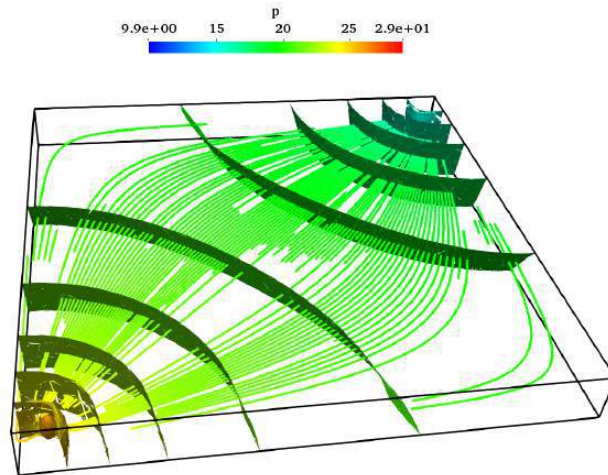


Figure 8: Stream lines from the velocity colored with pressure.



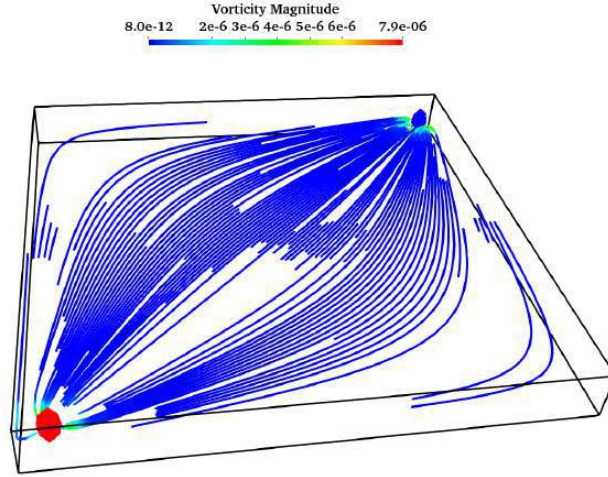


Figure 9: Stream lines from the velocity colored with vorticity magnitude (right). The blue wellbore region is the producer well.

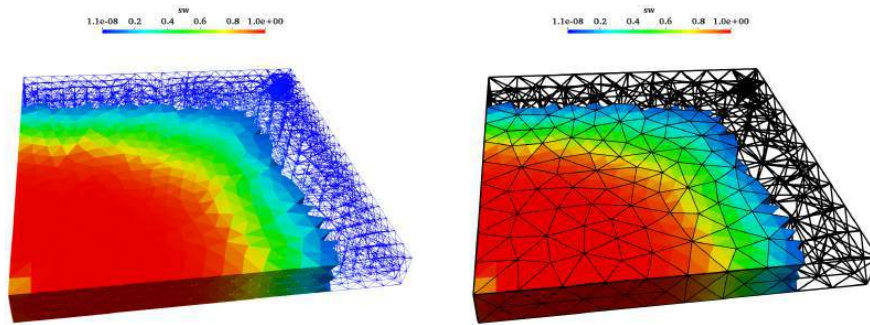


Figure 10: Tracer saturation at  $t = 100 [d]$ , transported with standar mixed formulation (left) and computed with multiscale approach (right).

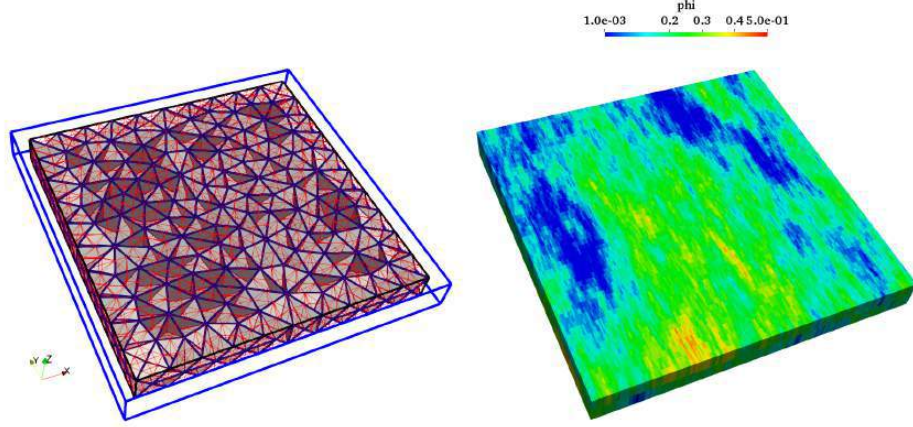


Figure 11: Multiscale mesh surrounded by the external cartesian mesh of properties, the cartesian mesh represented by blue outline (left). External mesh with used with rasterized porosity (right).

#### Linear tracer with Heterogeneous field

In this subsection a heterogeneous field of permeabilities is shown in the figure 11, with the same setting of the homogeneous case. The blue outline corresponds to the cartesian mesh, which contains the rasterized properties value with two layers in the vertical  $z$  direction; the red wire frame representation shows the micro element partition; the gray faces with blue edges, represent the multiscale skeleton partition.

The spatial variation of properties, naturally results in a perturbation on velocity, and consequently modifies the pressure and saturation being transported. The velocity and pressure profile are shown in Figure 12. Figure 13 reports the saturations after  $t = 100 [d]$  of tracer injection, at two different reservoir vertical levels; these levels result from the bisection of the geometry, using a plane which is perpendicular to the vertical  $z$  axis. The bottom and top saturation maps are on the left and right, respectively. They show that the effect of the spatial variation of permeability and porosity of the two layers being transferred to the finite element mesh, where the velocity magnitude favors the flow in the  $z$  direction.

#### Water injection in an oil water system in 3D

This subsection shows the injection of water into an oil water system using the data documented in the table 4. Emphasizing that the MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  technique is capable of treating non-linear problems, such as a lightly compressible flow subject to the effect of gravitational segregation of the water-oil phases in the sense of [2]. Figure 14 shows the effect of gravity at  $t = 200 [d]$  where it can be seen that the saturation  $s_w$  is higher at the bottom of the reservoir. In relation to the pressure the figure 14, shows the change of pressure from  $t = 200 [d]$ , to  $t = 1000 [d]$  where after 700  $[d]$  the volume is completely saturated with water, recovering the monophasic solution of the previous problem.



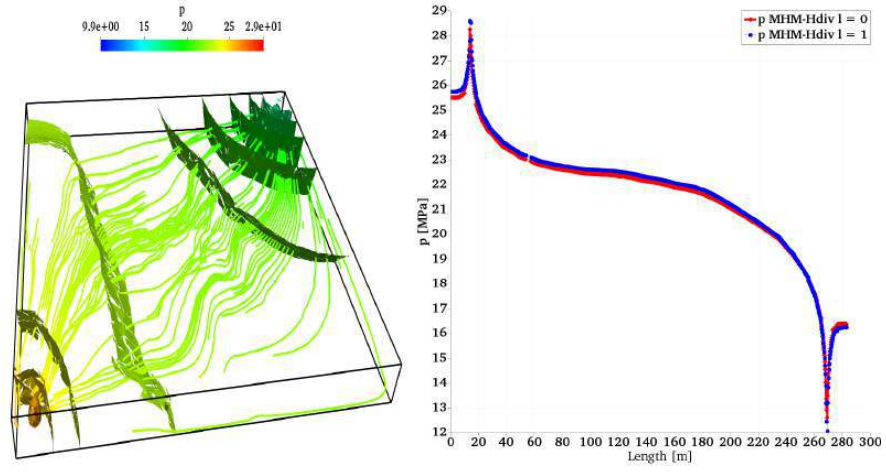


Figure 12: Stream lines from the velocity colored with pressure (left) and multiscale pressure approximation, plot over line  $l = \{-100, -100, 0\}, \{100, 100, 0\}$ .

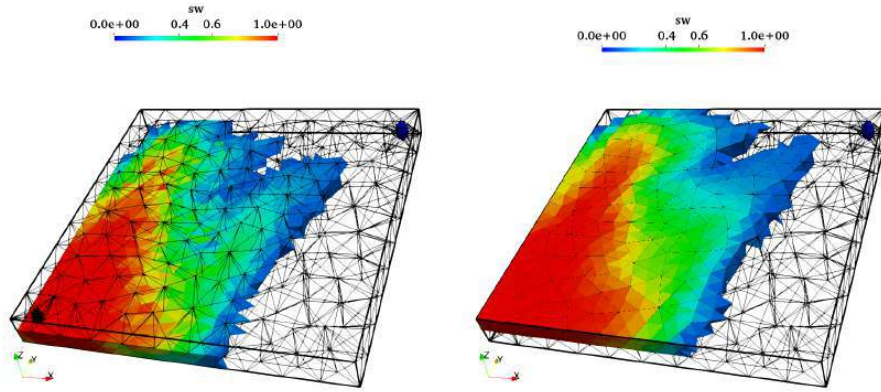


Figure 13: Water saturations at  $t = 100$  [d], computed with multiscale approximation of the velocity vector .

Property	Value
Reservoir dimensions	$L_x = 100 [m], L_y = 100 [m], L_z = 10 [m]$
Well radius	$r_w = 0.1 [m]$
Production pressure	$p_p = 10 [MPa]$
Injection pressure	$p_i = 30 [MPa]$
Water viscosity	$\eta_w = 0.001 [Pa \cdot s]$
Oil viscosity	$\eta_o = 0.005 [Pa \cdot s]$
Water density incompressible	$\rho_w = 1000 [kg/m^3]$
Oil density	$\rho_{o\_std} = 800 [kg/m^3]$
Oil compressibility	$c_0 = 1.45037 \times 10^{-9} [1/Pa]$
Permeability	$\mathbf{K} = 1.0 \times 10^{-13} \mathbf{I} [m^2]$
Porosity	$\phi = 0.25$
Relative permeabilities	$k_{rw} = s_w$ and $k_{ro} = 1 - s_w$
Time step	$\Delta t = 10 [d]$
MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$ level	$l = 0$
Initial saturation	$s_w^0 = 0.0$
Initial pressure	$p^0 = 30 [MPa]$

Table 4: Input data for the linear trace problem.

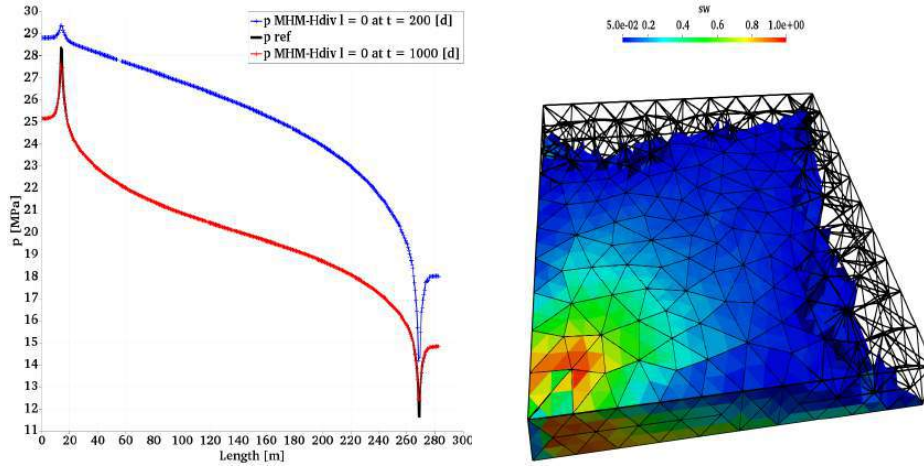


Figure 14: MHM- $\mathbf{H}(\text{div})$  with  $l = 0$ . Left pressure evolution at  $t = 200 [d]$  and  $t = 1000 [d]$ , plot over line  $l = \{ \{-100, -100, 0\}, \{100, 100, 0\} \}$ . Right gravity effect on saturations at  $t = 200 [d]$ .

## References

- [1] Jorg E. Aarnes. On the use of a mixed multiscale finite element method for GreaterFlexibility and increased speed or improved accuracy in reservoir simulation. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2(3):421–439, jan 2004.
- [2] Yann Brenier and Jérôme Jaffré. Upstream differencing for multiphase flow in reservoir simulation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 28(3):685–696, jun 1991.
- [3] C. Harder, D. Paredes, and F. Valentin. A family of multiscale hybrid-mixed finite element methods for the darcy equation with rough coefficients. *J. Comput. Phys.*, 245:107–130, 2013.



**On continuous, discontinuous, mixed and primal hybrid  
finite element methods for second order elliptic problems**

Journal:	<i>International Journal for Numerical Methods in Engineering</i>
Manuscript ID	NME-Jul-16-0519.R1
Wiley - Manuscript type:	Research Article
Date Submitted by the Author:	n/a
Complete List of Authors:	Devloo, Philippe; UNICAMP, Faculdade de Engenharia Civil Departamento de Estruturas Faria, Cristiane; Rio de Janeiro State University, Department of Mathematical Analysis Farias, Agnaldo; IFNMG - Instituto Federal do Norte de Minas Gerais Gomes, Sônia; Unicamp, IMECC Loula, Abimael Fernando Dourado; Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Mecânica Computacional Malta, Sandra; LNCC, CMA
Keywords:	Partial differential equations, Elliptic, Finite element methods, Discontinuous Galerkin, Computational efficiency, Adaptivity

SCHOLARONE™  
Manuscripts

## On continuous, discontinuous, mixed and primal hybrid finite element methods for second order elliptic problems

P. R. B. Devloo<sup>1</sup>, C. O. Faria<sup>2\*</sup>, A. M. Farias<sup>3</sup>, S. M. Gomes<sup>4</sup>, A. F. D. Loula<sup>5</sup> and S. M. C. Malta<sup>5</sup>

<sup>1</sup> *FEC, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brazil.*

<sup>2</sup> *IME, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro-RJ, Brazil.*

<sup>3</sup> *Departamento de Matemática - IFNMG, Salinas, MG, Brazil.*

<sup>4</sup> *IMECC, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-RJ, Brazil.*

<sup>5</sup> *COMOD, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis-RJ, Brazil.*

<sup>5</sup> *COMAC, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis-RJ, Brazil.*

### SUMMARY

Finite element formulations for second order elliptic problems, including the classical  $H^1$ -conforming Galerkin method, dual mixed methods, a discontinuous Galerkin method, and two primal hybrid methods, are implemented and numerically compared on accuracy and computational performance. Excepting the Discontinuous Galerkin formulation, all the other formulations allow static condensation at the element level, reducing the size of the global system of equations. For a 3-dimensional test problem with smooth solution, the simulations are performed with  $h$  refinement, for hexahedral and tetrahedral meshes, and uniform polynomial degree distribution up to four. For a singular 2-dimensional problem, the results are for approximation spaces based on given sets of  $hp$ -refined quadrilateral and triangular meshes adapted to an internal layer. The different formulations are compared in terms of  $L^2$ -norm of the approximation errors for the solution and its gradient, number of degrees-of-freedom, with and without static condensation, and computational effort required for the simulations. Copyright © 2016 John Wiley & Sons, Ltd.

Received ...

KEY WORDS: Elliptic partial differential equations, Finite element methods, Discontinuous Galerkin, Computational Efficiency, Adaptivity

### 1. INTRODUCTION

- 1 This work intends to be a partial survey on some finite element methods for second order elliptic
- 2 problems which are compared in terms of accuracy and computational efficiency. The studied
- 3 formulations may use approximation spaces conforming to their original variational form, as in the
- 4 classical  $H^1$ -conforming Galerkin or  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming mixed formulations. Other formulations

\*Correspondence to: Cristiane O. Faria, ANMAT-IME-UERJ, CEP: 20550-013, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.  
E-mail: cofaria@ime.uerj.br

5 characterized by the use of discontinuous approximations are also considered, as for a Discontinuous  
6 Galerkin method (the Symmetric Interior Penalty method) or two primal hybrid formulations.

7 The development of these methods has a long history, since the early beginning of finite element  
8 methods in the sixties. The classical  $H^1$ -conforming Galerkin method and the mixed formulations  
9 are very well analysed in the literature. Undoubtedly, the most commonly implemented formulation  
10 in finite element codes is the  $H^1$  formulation used by the mathematician and engineering  
11 communities. However, in recent years, mixed formulations have received renovated interest due  
12 to their accuracy and local conservation property [1, 2, 3, 4, 5, 6].

13 As alternatives for problems that cannot be easily treated by the classical conforming formu-  
14 lations, as occurring in boundary layer regions or in highly heterogeneous media, Discontinuous  
15 Galerkin (DG) and hybrid approaches, using discontinuous piecewise approximations, have also  
16 gained popularity. They are attractive because of their computational implementation flexibility. For  
17 elliptic problems, the natural connection between DG formulations and hybrid methods has been  
18 successfully exploited to derive new finite element methods with improved stability and reduced  
19 complexity and computational cost, but still keeping the robustness and flexibility of DG methods  
20 [7, 8, 9, 10, 11].

21 Excepting the mixed methods, all other formulations search the primal variable (potential), which  
22 is here denoted by  $u$ . If the flux  $\sigma$  is required, as in many engineering applications, it can be  
23 computed in terms of the gradient of the numerical solution, but paying the price of accuracy  
24 deterioration. Usually, the users of these methods apply some post-processing procedures, which  
25 is not required by using mixed methods formulated in terms of  $u$  and  $\sigma$  simultaneously [12]. These  
26 formulations not only improve flux accuracy, but also guarantee local conservation, a very desirable  
27 physical property to be preserved.

28 The current work is a step forward of an earlier numerical study started in [13] for quadrilateral  
29 meshes. The purpose here is to enlarge the set of methods to be compared by including new  
30 mixed and hybrid formulations, and to evaluate their different aspects when applied to two Poisson  
31 problems. The first problem has smooth solution in a 3-dimensional region which is partitioned in  
32 uniform hexahedral or tetrahedral elements. The second problem presents strong gradient close to  
33 an internal layer in a 2-dimensional region and is used to exemplify the efficiency of the methods  
34 when using approximation spaces based on  $hp$  adapted triangular or quadrilateral meshes.

35 One of the new methods to be considered is the Locally Discontinuous but Globally Continuous  
36 (*LDGC*) hybrid finite element formulation [11], where the authors propose the combination of the  
37 advantages of DG methods with the element based data structure and reduced computational cost of  
38 usual conforming finite element methods, as the  $H^1$ -conforming Galerkin method and the classical  
39 mixed finite element method. Differently from the classical primal hybrid formulation of Raviart  
40 and Thomas [14], where the multiplier is identified with the flux, the *LDGC* multiplier is the trace  
41 of the primal variable being obtained by continuous approximations. In this direction, there is also  
42 the hybrid mortar method proposed and analyzed in [15], denoted here by the Stabilized Hybrid  
43 Discontinuous Galerkin (*SHDG*) method, when discontinuous approximations are employed for  
44 the multiplier.

45 The other new method to be analyzed is a mixed formulation based on a novel kind of space  
46 configurations producing enhanced accuracy in the potential variable [6], which suits for a variety  
47 of element geometries. Their constructions are guided by the property that the image of the flux

space by the divergence operator coincides with the space associated with the potential. Taking polynomial approximation of degree  $k + 1$  to approximate the potential  $u$ , the flux space is enhanced with internal vector shape functions of degree up to  $k + 2$  having zero normal components on the element boundaries and keeping the border fluxes of degree  $k$ . Using static condensation all degrees of freedom associated to the internal flux shape functions and to the potential, up to the constant shape function, are eliminated at the element level.

The analyzed formulations are implemented in the object-oriented scientific computational environment NeoPZ<sup>†</sup>. NeoPZ is a general finite element approximation library, which incorporates a variety of element geometries, variational formulations, and approximation spaces. It contains modules for a broad class of finite element procedures such as system resolution, finite element geometric approximation, finite element approximation spaces (e.g. continuous, discontinuous,  $H(\text{div})$ , and others). It incorporates local mesh refinements and allows the user to choose the order of approximation. NeoPZ is integrated with pthreads and thread building blocks for efficient execution on multi core computers. Multiphysics simulations can be implemented by combining different approximation spaces into a coupled system of equations. The development of the present numerical study was possible thanks to the wide range of resources provided by this library.

The article is organized as follows. Section 2 describes the formulations that are implemented. In Section 3, the numerical implementation for the methods are described, and the two test problems are analyzed in terms of accuracy, and computational efficiency when applied with higher order approximations and different element topologies. Section 4 concludes the article.

## 2. FINITE ELEMENT FORMULATIONS

This section describes the considered finite element formulations for the Poisson problem in its usual single field form

$$-\Delta u = f \text{ in } \Omega, \quad (1)$$

$$u = u_D \text{ on } \partial\Omega, \quad (2)$$

and in the mixed form

$$\nabla \cdot \sigma = f \text{ in } \Omega, \quad (3)$$

$$\sigma = -\nabla u \text{ in } \Omega, \quad (4)$$

$$u = u_D \text{ on } \partial\Omega. \quad (5)$$

where  $u$  is a scalar real function,  $\Omega$  is a bounded domain  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d = 2, 3$ , with boundary  $\partial\Omega$ ,  $f \in L^2(\Omega)$ , and  $u_D \in H^{1/2}(\partial\Omega)$  is the Dirichlet boundary condition.

The considered finite element formulations are defined in terms of polynomial spaces based on partitions  $\mathcal{T} = \{K\}$  of the domain  $\Omega$  by elements  $K$ . The scalar field is approximated using polynomial spaces  $P_k$  of maximum or total degree  $k$ , depending on the adopted element geometry,

<sup>†</sup><http://github.com/labmec/neoPZ>

73 quadrilateral and hexahedral or triangular and tetrahedral, respectively. The numerical experiments  
 74 are performed for uniform meshes  $\mathcal{T} = \mathcal{T}_h$ , the parameter  $h$  identifying the element size, or for  
 75  $hp$ -adaptive meshes, with non-uniform distribution of polynomial degree and of element size.

## 76 2.1. $H^1$ -conforming Galerkin Method

77 Let  $V_h^k \subset H^1(\Omega)$  be the usual  $C^0$  Lagrangian space of local polynomial of degree  $k$ . In this space  
 78 the continuous Galerkin method is given by [16]:

79 Find  $u_h \in V_h^k$  with  $u_h = u_D$  on  $\partial\Omega$  such that

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega, \quad (6)$$

80 for all  $v \in V_{h,0}^k = \{v \in V_h^k; v = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$ .

81 In the present numerical experiments, the continuous  $H^1$ -conforming spaces  $V_h^k$  are locally  
 82 spanned by hierarchical shape functions, as described in [17]. In each element  $K$  of the partition,  
 83 they are associated to one of the basic elements of  $K$ , which are classified as vertex, edge, face  
 84 or internal functions. For a description of the construction of  $H^1$ -conforming spaces based on  $hp$ -  
 85 adaptive meshes, we refer to [18].

## 86 2.2. Dual Mixed Formulation

87 Using stable pairs of conforming approximation spaces  $\mathbf{V}_h \subset \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  for  $\boldsymbol{\sigma}$ , and  $U_h \subset L^2(\Omega)$   
 88 for the variable  $u$ , the variational mixed formulation for the problem (3)-(5) is [12]:

89 Find  $u_h \in U_h$  and  $\boldsymbol{\sigma}_h \in \mathbf{V}_h$ , such that for all  $\mathbf{q} \in \mathbf{V}_h$ , and  $v \in U_h$

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_h \cdot \mathbf{q} d\Omega - \int_{\Omega} u_h \nabla \cdot \mathbf{q} d\Omega = - \int_{\partial\Omega} u_D \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\eta} ds, \quad (7)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_h v d\Omega = \int_{\Omega} f v d\Omega, \quad (8)$$

90 where  $\boldsymbol{\eta}$  denotes the outward normal vector on the boundary.

91 The approximation spaces  $\mathbf{V}_h$  and  $U_h$ , considered in the numerical experiments presented in this  
 92 paper, are described in [19], for affine triangular and rectangular meshes, and in [6], for affine 3D  
 93 meshes formed by tetrahedral, hexahedral or prismatic elements. The constructions of these spaces  
 94 share the following basic characteristics:

95 1. The approximation spaces  $\mathbf{V}_h$  for  $\boldsymbol{\sigma}$  are spanned by a hierarchy of vectorial shape functions  
 96 which are organized into two classes:

- 97 • interior shape functions, with vanishing normal components on the element boundary,  
 98 whose degrees of freedom can be eliminated at the element level by static condensation,
- 99 • edge/face shape functions, with non vanishing normal components on the element  
 100 boundary, whose degrees of freedom are associated with the element edges or faces.

101 The principle in their construction is to choose appropriate constant vector fields, based on  
 102 the geometry of each element, which are multiplied by scalar basic functions in  $H^1(\Omega)$ ,  
 103 constructed in [17]. The resulting vectorial spaces are said to be of  $\mathbf{P}_k$  type when the scalar

- 104 basic functions used in their definitions come from polynomial spaces of degree  $k$  in the  
 105 master element.
- 106 2. The variable  $u$  is approximated in subspaces  $U_h$  of  $L^2(\Omega)$  formed by piecewise polynomial  
 107 functions,  $u|_K = u_K$ , without any continuity constraint, as in typical discretized mixed  
 108 formulations.
- 109 3. In all the cases, the commutation De Rham property holds. Specifically,

$$\nabla \cdot \mathbf{V}_h \equiv U_h, \quad (9)$$

110 implying stable simulations with optimal  $L^2$ -error convergence orders, which are dictated by  
 111 the degree of the complete set of polynomials used in the approximations.

112 Two cases for the choice of approximation space configuration  $(\mathbf{V}_h, U_h)$  shall be considered.

113 **Approximation spaces of type  $\mathbf{P}_k^* P_k$ .** The approximations for  $\sigma$  in  $\mathbf{V}_h \subset \mathbf{H}(\text{div}, \Omega)$  are said to  
 114 be of  $\mathbf{P}_k^*$  type if they are locally spanned by the face functions of  $\mathbf{P}_k$  type, and by the internal shape  
 115 functions of  $\mathbf{P}_{k+1}$  defined by vectorial polynomials of degree  $k+1$  whose divergences are included  
 116 in the scalar approximation space  $U_h$  of type  $P_k$ . Since the incomplete dual approximation space  
 117 of type  $\mathbf{P}_k^*$  only involves the complete vector valued polynomials of degree  $k$ , in simulations using  
 118  $\mathbf{P}_k^* P_k$  configurations the expected  $L^2$ -error convergence rates are of order  $k+1$  for both  $\sigma$  and  $u$   
 119 variables. This is the type of  $RT_k$  space configuration for rectangular and hexahedral geometries  
 120 [14, 20], and of  $BDFM_{k+1}$  elements for triangular and tetrahedral elements [21].

121 **Approximation spaces of type  $\mathbf{P}_k^{**} P_{k+1}$ .** This is a new space configuration introduced in [6],  
 122 where the construction of approximation spaces for  $\sigma$  of type  $\mathbf{P}_k^{**}$  consists in adding to the  
 123 complete vector valued spaces of type  $\mathbf{P}_k$  those interior shape functions of  $\mathbf{P}_{k+1}^*$  defined by vectorial  
 124 polynomials of degree  $k+2$  whose divergence are included in the scalar approximation space of  
 125 type  $P_{k+1}$ . Therefore, in  $\mathbf{P}_k^{**}$  the face shape functions are still obtained by polynomials of degree  
 126  $\leq k$ , but some of the internal shape functions may be obtained from polynomials of degree up to  
 127  $k+2$ . As in the previous case, here the verification of property (9) is the basic principle guiding  
 128 the definition of the pair of approximation spaces. Since the spaces of type  $\mathbf{P}_k^{**}$  contains only the  
 129 complete vector valued approximations of type  $\mathbf{P}_k$ , the  $L^2$ -error convergence rate of order  $k+1$  is  
 130 expected for the  $\sigma$ . However, for the variable  $u$  a higher order  $k+2$  of convergence may be reached.

131 In the numerical test problems, the mixed method for these two approximation spaces will be  
 132 refereed by the acronyms  $MF^*$  and  $MF^{**}$ . For the experiments based on non-conformal meshes,  
 133 with varying degree distributions, the assembly of  $\mathbf{H}(\text{div})$ -conforming spaces to obtain continuous  
 134 normal components on the elements interfaces is obtained as a direct consequence of the properties  
 135 of the properly chosen vector fields and of the continuity of the scalar basic functions used in their  
 136 construction, as described in [22] for 2D meshes.



## 137 2.3. Symmetric Interior Penalty Formulation

138 In discontinuous Galerkin methods, variational formulations are designed for discontinuous  
 139 approximations of type

$$U_h^k = \{v \in L^2(\Omega) : v|_K \in P_k(K), \forall K \in \mathcal{T}_h\}. \quad (10)$$

140 A well established primal discontinuous Galerkin method for our model problem is the Symmetric  
 141 Interior Penalty Discontinuous Galerkin (SIP-DG) [23]: Find  $u_h \in U_h^k$  such that,

$$a_h(u_h, v) = l_h(v) \quad \forall v \in U_h^k \quad (11)$$

with

$$\begin{aligned} a_h(u_h, v) = & \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \nabla u_h \cdot \nabla v \, dK - \sum_{F \in \partial \mathcal{T}_h} \int_F (\llbracket u_h \rrbracket \cdot \llbracket \nabla v \rrbracket + \llbracket v \rrbracket \cdot \llbracket \nabla u_h \rrbracket) \, ds \\ & + \sum_{F \subset \partial \mathcal{T}_h \setminus \partial \Omega} \int_F \beta \llbracket u_h \rrbracket \cdot \llbracket v \rrbracket \, ds + \sum_{F \subset \partial \Omega} \int_F \beta u_h v \, ds \end{aligned} \quad (12)$$

and

$$l_h(v) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K f v \, dK - \sum_{F \subset \partial \Omega} \int_F (\nabla v \cdot \mathbf{n}) u_D \, ds + \sum_{F \subset \partial \Omega} \int_F \beta u_D v \, ds.$$

142 Here  $\partial \mathcal{T}_h$  denotes the set of faces  $F$  of the elements in  $\mathcal{T}_h$ ,  $\llbracket \cdot \rrbracket$  and  $\llbracket \cdot \rrbracket$  representing the average and  
 143 jump operators at element interfaces, and  $\beta$  is a stabilization parameter to be provided by the user.

144 The numerical analysis of this class of discontinuous Galerkin methods fits into the framework  
 145 provided in [24] (see also [23, 25, 26]), and it presents optimal  $L^2$ -error convergence rate of order  
 146  $k + 1$  for the variable  $u$ . The acronym *DG* will be employed to identify this formulation in the  
 147 numerical experiments.

## 148 2.4. Primal Stabilized Hybrid Methods

149 Hybrid formulations are also based on nonconforming spaces of discontinuous functions  $U_h^k$  (see  
 150 [12, 15, 11]), but additional multiplier spaces of discontinuous functions [15]

$$\Lambda_h^{k,d} = \{\mu \in L^2(\partial \mathcal{T}_h); \mu|_F = P_k(F), \forall F \subset \partial \mathcal{T}_h \setminus \partial \Omega, \mu|_{\partial \Omega} = u_D\}, \quad (13)$$

151 or of continuous functions [11]

$$\Lambda_h^{k,c} = \{\mu \in C^0(\partial \mathcal{T}_h); \mu|_F = P_k(F), \forall F \subset \partial \mathcal{T}_h \setminus \partial \Omega, \mu|_{\partial \Omega} = u_D\}, \quad (14)$$

are considered, where  $P_k(F)$  denotes a polynomial space with degree  $k$  on each face  $F$ . Thus,  
 by either taking  $\Lambda_h^k = \Lambda_h^{k,d}$  or  $\Lambda_h^k = \Lambda_h^{k,c}$ , the primal stabilized hybrid methods [15, 11, 27] are

formulated as: find  $(u_h, \lambda_h) \in (U_h^k \times \Lambda_h^k)$  such that

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left\{ \int_K \nabla u_h \cdot \nabla v \, dK - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \boldsymbol{\eta}_K (v - \mu) \, ds - \int_{\partial K} \nabla v \cdot \boldsymbol{\eta}_K (u_h - \lambda_h) \, ds + \beta \int_{\partial K} (u_h - \lambda_h)(v - \mu) \, ds \right\} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K f v \, dK, \quad (15)$$

for any  $v \in U_h^k$  and  $\mu \in \Lambda_{h,0}^k = \{\mu \in \Lambda_h^k, \mu|_{\partial\Omega} = 0\}$ . Note that the multiplier  $\lambda_h$  corresponds to the tracer of the variable  $u_h$  on  $\partial K$ , which can be globally continuous if (14) is used, as in [11], or discontinuous if (13) is applied, as in [15]. Figure 1 gives an illustration of the two types of multipliers for a rectangular grid considering linear interpolation where the multipliers are marked by crosses.

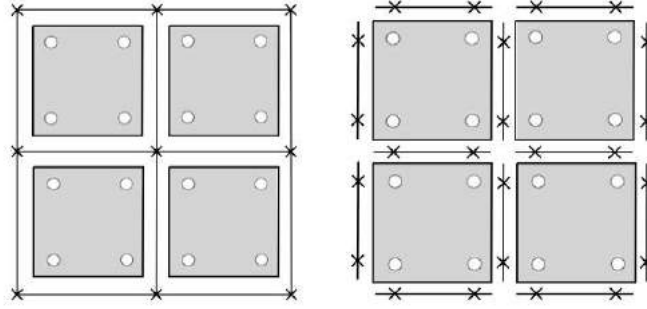


Figure 1. Illustration of the continuous (left side) and discontinuous (right side) multipliers.

Following the notations introduced in [27] and [11], the method with discontinuous multiplier is indicated by acronym *SHDG* (Stabilized Hybrid Discontinuous Galerkin), and with continuous multiplier by *LDGC* (Locally Discontinuous but Globally Continuous).

Considering that  $v$ , belonging to the broken function space  $U_h^k$ , is defined independently on each element  $K \in \mathcal{T}_h$ , we observe that equation (15) can be split into a set of local problems defined on each element  $K$  coupled to the global problem defined on  $\partial\mathcal{T}_h$ , as follow:

*Local problems:* Find  $u_h|_K \in U_h^k|_K$ , such that, for all  $v \in U_h^k|_K$ ,

$$\int_K \nabla u_h \cdot \nabla v \, dK - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \boldsymbol{\eta}_K v \, ds - \int_{\partial K} \nabla v \cdot \boldsymbol{\eta}_K (u_h - \lambda_h) \, ds + \int_{\partial K} \beta (u_h - \lambda_h) v \, ds = \int_K f v \, dK, \quad (16)$$

*Global Problem:* Find  $\lambda_h \in \Lambda_h^k$ , such that, for all  $\mu \in \Lambda_h^k$ ,

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \boldsymbol{\eta}_K \mu \, ds - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \beta (u_h - \lambda_h) \mu \, ds = 0 \quad (17)$$

164 where  $\Lambda_h^k = \Lambda_h^{k,d}$  for *SHDG* or  $\Lambda_h^k = \Lambda_h^{k,c}$  for *LDGC* methods.

165 The penalization parameter  $\beta$  should be sufficiently large, for stability and accuracy purposes,  
 166 but small enough to avoid possible severe lack of local conservation. For the *DG* method is taken  
 167 in the form  $\beta = \frac{\beta_0 k^2}{h}$ , where  $k$  is the polynomial approximation degree,  $h$  is the element size, as  
 168 suggested in [28]. This same kind of stabilization parameter is used for the hybrid *LDGC* and  
 169 *SHDG* methods. The positive constant  $\beta_0$  is provided by the user, and for the results presented in  
 170 this paper  $\beta_0 = 100$  for *DG* simulations, and  $\beta_0 = 6$  for the two hybrid methods. These choices are  
 171 justified in the next section.

### 3. NUMERICAL EXPERIMENTS

172 In this section, numerical experiments are performed for the evaluation of convergence and  
 173 computational efficiency of the different methods. All methods are applied to two test problems: one  
 174 defined in the cube  $\Omega = (0, 1)^3$  with smooth solution, and a second one is defined in  $\Omega = (0, 1)^2$ ,  
 175 whose solution presents strong gradients in the vicinity of an internal layer. The MKL/Pardiso linear  
 176 solver is used with parameters appropriate for inverting indefinite system of equations.

177 The timing results have been obtained by running the code on a Mac Pro desktop computer having  
 178 the following configuration: 2×6-Core Intel Xeon Processor with clock speed of 2.93 GHz, 256 KB  
 179 of L0 cache and 12 MB of L3 cache and 56 GB of 1333 MHz DDR3 ECC of memory.

#### 180 Static condensation

181 Excepting the *DG* method, all other discrete formulations are implemented using static  
 182 condensation techniques, according to the following organization of the degrees-of-freedom (*DoF*).

- 183 •  **$H^1$ -conforming method:** For the  $H^1$ -conforming formulation, static condensation can be  
 184 applied by the organization of the degrees-of-freedom of  $u$  in terms of internal contributions  
 185  $u_i$ , and the remaining ones denoted by  $u_e$  (associated to vertex, edge and face contributions).  
 186 Therefore, the condensed discrete version may be represented only in terms of the  
 187 contributions  $u_e$ . The internal shape functions occur for  $k > 3$  on tetrahedral elements,  $k > 2$   
 188 for triangular elements, and for  $k > 1$  for hexahedral and quadrilateral elements.
- 189 • **Mixed formulation:** The degrees-of-freedom of the  $\sigma$  may be organized in the same form,  
 190 that is,  $\sigma_i, \sigma_e$ , where  $\sigma_i$  and  $\sigma_e$  refer to internal and face components of  $\sigma$ , respectively.  
 191 For the variable  $u$ , let  $u_0$  be a constant value and  $u_i$  denote the remaining degrees-of-freedom  
 192 except  $u_0$ . Thus, the matrix representation of the mixed formulation can be expressed in the  
 193 form

$$\left( \begin{array}{cc|cc} A_{ii} & B_{ii}^T & B_{ie}^T & A_{ie} \\ B_{ii} & 0 & 0 & B_{ie} \\ \hline B_{ie} & 0 & 0 & B_{ee} \\ A_{ei} & B_{ie}^T & B_{ee}^T & A_{ee} \end{array} \right) \begin{pmatrix} \sigma_i \\ u_i \\ u_0 \\ \sigma_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_D \\ -f_i \\ -f_0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

194 Then, static condensation may be applied by eliminating the internal degrees-of-freedom  $\sigma_i$   
 195 and  $u_i$ , to get a condensed system in terms of  $\sigma_e$  and  $u_0$ . It should be observed that:

- It is not possible to condense all degrees-of-freedom associated to the variable  $u$ . In fact, the block matrix  $B_{ii}$  is formed by entries of type  $\int_K \varphi \nabla \cdot \Phi dK$ , where  $\Phi$  denotes one of the vectorial internal shape functions, and  $\varphi$  is a scalar shape function. Therefore, recalling that vectorial internal shape functions have zero normal components on the boundary of the elements, for constant  $\varphi$  these entries vanish, since

$$\varphi \int_K \nabla \cdot \Phi dK = \varphi \int_{\partial K} \Phi \cdot \eta ds = 0.$$

That is why the constant **potential** shape functions are not condensed in our implementation.

- Since the space configurations  $\mathbf{P}_k^* P_k$  and  $\mathbf{P}_k^{**} P_{k+1}$  share the same face shape functions, their condensed systems have the same dimension.

- **Hybrid formulations:** For hybrid formulations, the global degrees-of-freedom are those associated to the Lagrange multiplier, while the ones corresponding to  $u_h$  can be condensed. Considering  $\mathbf{A}_K$ ,  $\mathbf{B}_K$  and  $\mathbf{C}_K$  matrices generated by local operators, and  $\mathbf{F}_K$  a given vector, we can rewrite (16)-(17) in the following matrix form:

$$\mathbf{A}_K \mathbf{U} + \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{F}_K, \forall K \in \mathcal{T}_h \quad (18)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{U} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{C}_K \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{0}, \quad (19)$$

Therefore, given that  $\mathbf{A}_K$  is a positive definite, we solve the system (18) to obtain

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}_K^{-1} (\mathbf{F}_K - \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda}). \quad (20)$$

Replacing (20) in (19), we arrive at the global system in the multiplier only  $\boldsymbol{\Lambda} = \{\lambda_h\}$ :

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\mathbf{C}_K - \mathbf{B}_K^T \mathbf{A}_K^{-1} \mathbf{B}_K) \boldsymbol{\Lambda} = - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{A}_K^{-1} \mathbf{F}_K. \quad (21)$$

After solving the global system (21), the vector  $\mathbf{U}$  is evaluated from (20) with  $\boldsymbol{\Lambda}$  given by (21).

Methods	$\ u - u_h\ $	$\ \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_h\ $
Continuous Galerkin	$k + 1$	$k$
Discontinuous Galerkin	$k + 1$	$k$
Primal Hybrid <i>LDGC</i>	$k + 1$	$k$
Primal Hybrid <i>SHDG</i>	$k + 1$	$k$
Dual Mixed <i>MF*</i>	$k + 1$	$k + 1$
Dual Mixed <i>MF**</i>	$k + 2$	$k + 1$

Table I. Summary of the expected convergence rates in  $L^2(\Omega)$  norm.

A summary of the main convergence properties of these schemes is presented in Table I with respect to the  $L^2$ -norm (for  $u$  and  $\boldsymbol{\sigma} = -\nabla u$ ) when applied to smooth solutions with uniform meshes. For all primal formulations  $\boldsymbol{\sigma}_h$  is given by  $\boldsymbol{\sigma}_h = -\nabla u_h$ .

## 211 3.1. Problem 1: smooth solution in 3D

212 In this example, the domain is  $\Omega = (0, 1)^3$ , and the analytic solution, represented in Figure 2, is  
 213 given by the formula  $u = \frac{\pi}{2} - \arctan \left[ 5 \left( \sqrt{(x - 1.25)^2 + (y + 0.25)^2 + (z + 0.25)^2} - \frac{\pi}{3} \right) \right]$ .

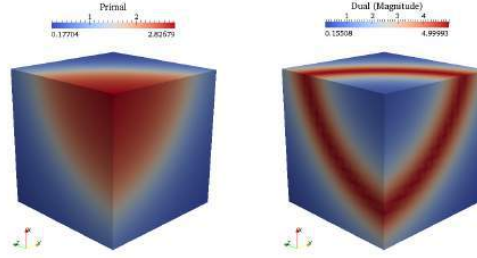


Figure 2. 3D test problem: exact primal solution (left side) and its gradient magnitude (right side).

214 For this problem, regular meshes  $\mathcal{T}_h$  formed by tetrahedral and hexahedral elements are used.  
 215 The hexahedral meshes are uniform with spacing  $h = 2^{-i}$ ,  $i = 0, 1, \dots, 4$ . The tetrahedral meshes  
 216 are obtained from the hexahedral ones by the subdivision of each cubic element into six tetrahedra.  
 217 The approximation spaces are based on polynomials of tensorial type for hexahedral meshes, and of  
 218 total degree for tetrahedral meshes, and degrees  $k = 1, 2, \dots, 4$  shall be tested.

219 *On the choice of stabilization parameters for DG and hybrid methods.* To identify good choices of  
 220 the penalization parameter concerning stability and accuracy, a numerical study has been performed  
 221 by Arruda et al. [11] for the LDGC method. We perform a similar analysis for the current test  
 222 problem to evaluate the behaviour of DG and hybrid LDGC and SHDG methods based on  
 223 fixed hexahedra and tetrahedral meshes with spacing  $h = 1/4$ . The plots in Figure 3 show that  
 224 the accuracy of  $u$  stabilizes for increasing values of  $\beta_0$ . The DG method is more sensitive to the  
 225 choice of this parameter, requiring much larger values of  $\beta_0$  to reach a steady accuracy, a behaviour  
 226 that is more significant as  $k$  increases. The hybrid LDGC and SHDG methods are less sensitive to  
 227 the variation of the stabilization parameters. Based on this numerical analysis,  $\beta_0 = 6$  is chosen for  
 228 the hybrid methods (which is optimal for the SHDG method with  $k = 1$ ), and  $\beta_0 = 100$  is set for  
 229 the DG method.

230 *Confirmation of the predicted rates of convergence.* Figure 4 presents  $L^2$ -error curves for  $u$  and  
 231 for  $\sigma = -\nabla u$  obtained with the six methods under consideration, for approximation spaces based  
 232 on hexahedral meshes and polynomials of degree  $k = 1$  and  $k = 2$ . Similar results for tetrahedral  
 233 meshes are presented in Figure 5. Table II and Table III summarize the results for  $k = 3$  and 4,  
 234 respectively, for both element geometries.

235 The expected convergence rates indicated in Table I are verified. For instance, the orders  $k + 1$   
 236 in  $u$ , and  $k$  in  $\sigma$  are achieved for the  $H^1$ -conforming formulation, the hybrid LDGC and SHDG  
 237 methods, and the DG method. As expected, both  $H(\text{div})$ -conforming mixed formulations  $MF^*$   
 238 and  $MF^{**}$  present significant improvement in the accuracy in  $\sigma$ , with higher rate of convergence

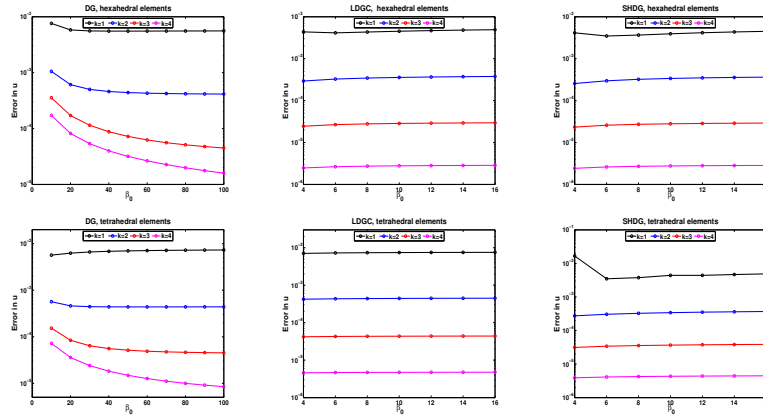


Figure 3. Problem 1: Influence of the stabilization parameter  $\beta_0$  on the accuracy of  $u$  using  $DG$ ,  $LDGC$  and  $SHDG$  methods based on meshes with spacing  $h = 1/4$ .

of order  $k + 1$ . For the  $MF^*$  configuration in hexahedral and tetrahedral meshes, corresponding to the classic  $RT_k$  and  $BDMF_{k+1}$  spaces,  $u$  is approximated with accuracy of order  $k + 1$ , but in the new case  $MF^{**}$ , enhanced order  $k + 2$  is verified for the variable  $u$  in both geometries.

It is interesting to observe that even though different approximation methods may have the same theoretical and numerical convergence rates, their absolute accuracy can be very different. For instance, for low order approximations with  $k = 1$  in tetrahedra meshes, all tested methods, excepting the enhanced mixed formulation  $MF^{**}$ , show optimal convergence rate 2 in the potential  $u$ , but their absolute accuracy varies in one order of magnitude, from about 0.003 for the  $H^1$  formulation to 0.0008 for the mixed  $MF^*$  formulation. However, for higher order methods, the absolute accuracy of these methods tends to coincide, especially for the hexahedral meshes and higher order approximations.

*The effect of static condensation.* Hybrid and mixed methods introduce new variables in the formulation, namely, the multiplier  $\lambda_h$  or the flux  $\sigma_h$ , respectively, increasing significantly the total number of degrees of freedom ( $DoF$ ) of the problem. Therefore, in order to optimize the computational efficiency, specially for three dimensional problems, they require the application of static condensation techniques, as described before. From the results presented in Table II and Table III, and in the illustrations shown in Figure 6, it can be observed that there is a significant impact in using static condensation for the reduction of the number of equations to be solved in the mixed formulations and in hybrid methods.

The purpose of Figure 7 is to evaluate the six methods in terms  $L^2$ -errors for  $u$  and  $\sigma$  versus  $DoF$ , taking approximations with  $k = 4$ . From these plots it is clear that, under this point of view, the performances of  $H^1$ -conforming and hybrid  $LDGC$  methods are quite similar (the graphs overlap). In fact, these two methods are more efficient for the approximation of the variable  $u$ , as compared with  $DG$ ,  $SHDG$  and  $MF^*$  methods, specially for tetrahedral meshes. The enhanced

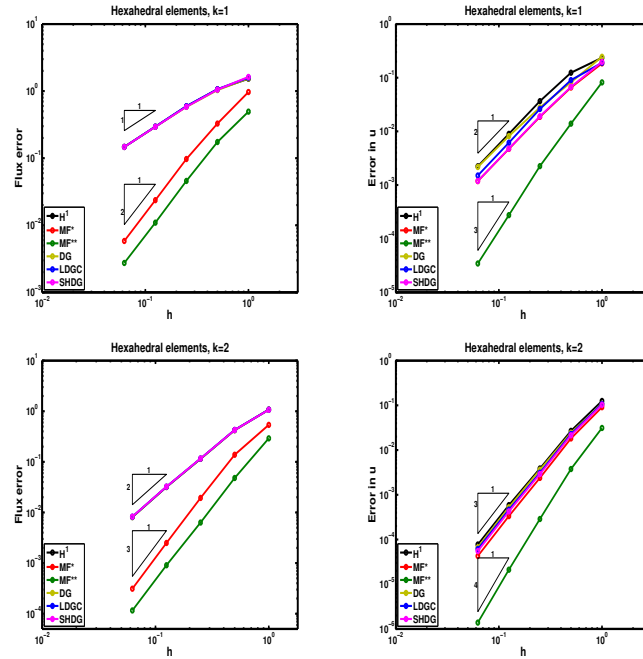


Figure 4. Problem 1:  $L^2$ -error curves in terms of  $h$  for  $\nabla u$  (left side) and for  $u$  (right side), using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method, based on hexahedral uniform meshes, for  $k = 1$  (top side) and  $k = 2$  (bottom side).

263 mixed  $MF^{**}$  method gives the best error results in terms of system dimension, for both flux and  
 264 potential variables, specially for hexahedral meshes. Because the  $DG$  method can not profit from  
 265 static condensation, global systems of high dimensions have to be solved, a drawback asking for  
 266 further smart  $DG$  implementations.

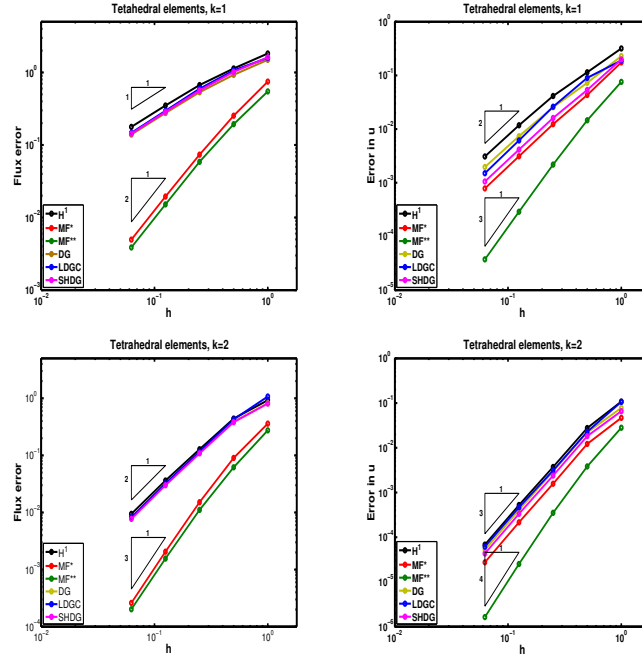


Figure 5. Problem 1:  $L^2$ -error curves in terms of  $h$  for  $\nabla u$  (left side) and for  $u$  (right side), using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method, based on tetrahedral uniform meshes, for  $k = 1$  (top side) and  $k = 2$  (bottom side).

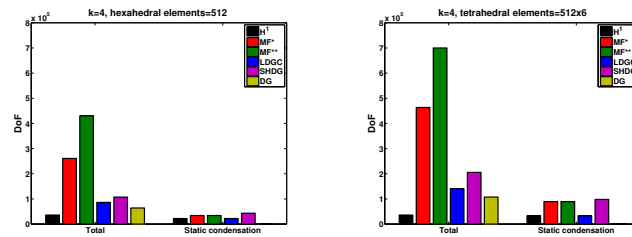


Figure 6. Problem 1: number of equations to be solved ( $DoF$ ) without or with static condensation using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method, for polynomial degree  $k = 4$ , and based on uniform meshes with spacing  $h = 1/8$ , formed by 512 hexahedra (left side) and  $512 \times 6$  tetrahedra (right side).



Hexahedral meshes, $k = 3$												
$h$	$H^1$ -formulation						$DG$ Formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	5.46e-3		6.36e-1		64	56	5.22e-2		6.35e-1		64	-
$\frac{1}{2}$	7.06e-3	2.95	1.53e-1	2.06	343	279	6.44e-3	3.02	1.54e-1	2.04	512	-
$\frac{1}{4}$	7.06e-4	3.32	2.84e-2	2.43	2197	1685	6.56e-4	3.29	2.85e-2	2.44	4096	-
$\frac{1}{8}$	5.04e-5	3.81	3.92e-3	2.86	15625	11529	4.81e-5	3.77	3.92e-3	2.86	32768	-
$\frac{1}{16}$	3.22e-6	4.00	4.94e-4	3.00	117649	84881	3.17e-6	3.92	4.95e-4	2.99	262144	-
$h$	$MF^*$ -formulation						$MF^{**}$ Formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	4.35e-2		3.57e-1		304	1	1.48e-2		1.62e-1		521	1
$\frac{1}{2}$	4.94e-3	2.95	5.07e-2	2.82	2240	200	9.88e-4	3.90	1.55e-2	3.39	3976	200
$\frac{1}{4}$	4.46e-4	3.32	4.33e-3	3.55	17152	2368	5.61e-5	4.14	1.39e-3	3.48	31040	2368
$\frac{1}{8}$	3.08e-5	3.81	2.91e-4	3.90	134144	22016	2.00e-6	4.81	8.28e-5	4.07	245248	22016
$\frac{1}{16}$	1.94e-6	3.97	1.80e-5	4.02	1060864	188416	6.27e-8	5.00	5.23e-6	3.98	1949696	188416
$h$	$LDGC$						$SHDG$					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	5.08e-2		6.38e-1		120	56	4.99e-2		6.35e-1		160	96
$\frac{1}{2}$	6.25e-3	3.02	1.54e-1	2.05	791	279	6.12e-3	3.03	1.55e-1	2.04	1088	576
$\frac{1}{4}$	6.11e-4	3.36	2.87e-2	2.43	5781	1685	5.91e-4	3.37	2.89e-2	2.42	7936	3840
$\frac{1}{8}$	4.31e-5	3.82	3.97e-3	2.86	44297	11529	4.18e-5	3.82	3.98e-3	2.86	60416	27648
$\frac{1}{16}$	2.74e-6	3.98	5.01e-4	2.99	347025	84881	2.66e-6	3.97	5.03e-4	2.99	471040	208896

Tetrahedral meshes, $k = 3$												
$h$	$H^1$ -formulation						$DG$ Formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	5.14e-2		5.58e-1		64	64	4.51e-2		5.29e-1		120	-
$\frac{1}{2}$	5.95e-3	3.11	1.38e-2	2.02	343	343	5.29e-3	3.09	1.28e-1	2.05	960	-
$\frac{1}{4}$	6.55e-4	3.18	2.90e-2	2.25	2197	2197	5.71e-4	3.21	2.65e-2	2.27	7680	-
$\frac{1}{8}$	4.54e-5	3.85	4.19e-3	2.79	15625	15625	4.00e-5	3.84	3.85e-3	2.79	61440	-
$\frac{1}{16}$	2.82e-6	4.01	5.39e-4	2.96	117649	117649	2.52e-6	3.99	4.96e-4	2.95	491520	-
$h$	$MF^*$ -formulation						$MF^{**}$					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	2.89e-2		2.17e-1		370	66	4.99e-2		6.35e-1		160	96
$\frac{1}{2}$	3.13e-3	3.21	3.92e-2	2.47	4320	768	1.21e-3	3.90	2.47e-2	2.74	6912	768
$\frac{1}{4}$	3.01e-4	3.38	3.49e-3	3.49	33600	7104	7.27e-5	4.05	2.59e-3	3.26	54336	7104
$\frac{1}{8}$	2.10e-5	3.84	2.41e-4	3.86	26496	60672	2.82e-6	4.69	1.92e-4	3.75	430848	60672
$\frac{1}{16}$	1.35e-6	3.96	1.57e-5	3.94	2104320	500736	9.29e-8	4.92	1.26e-5	3.93	3431424	500736
$h$	$LDGC$						$SHDG$					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	4.93e-2		5.50e-1		184	64	4.19e-2		5.19e-1		300	180
$\frac{1}{2}$	5.64e-3	3.13	1.35e-1	2.02	1303	343	4.75e-3	3.14	1.25e-2	2.05	2160	1200
$\frac{1}{4}$	6.22e-4	3.18	2.85e-2	2.25	9877	2197	5.02e-4	3.24	2.57e-2	2.28	16320	8640
$\frac{1}{8}$	4.31e-5	3.85	4.14e-3	2.79	77065	15625	3.51e-5	3.84	3.73e-3	2.78	126720	65280
$\frac{1}{16}$	2.67e-6	4.02	5.31e-4	2.96	609169	117649	2.21e-6	3.99	4.82e-4	2.95	998400	506880

Table II. Problem 1: Errors in  $L^2$ -norm  $\|u - u_h\|$  and  $\|\sigma - \sigma_h\|$ , rates of convergence, and number of equations (DoF) without (Total) and with static condensation (SC), using approximation spaces with  $k = 3$  for the  $H^1$ -conforming, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method for uniform meshes formed by hexahedral (top side) and tetrahedral (bottom side) elements.

Hexahedral meshes, $k = 4$												
$h$	$H^1$ formulation						$DG$ formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	2.34e-2		3.57e-1		125	98	2.24e-2		3.63e-1		125	-
$\frac{1}{2}$	2.71e-3	3.11	7.22e-2	2.31	729	513	2.59e-3	3.11	7.27e-2	2.32	1000	-
$\frac{1}{4}$	1.21e-4	4.49	6.30e-3	3.52	4913	3185	1.17e-4	4.46	6.32e-3	3.52	8000	-
$\frac{1}{8}$	4.49e-6	4.75	4.56e-4	3.79	35937	22113	4.40e-6	4.74	4.56e-4	3.79	64000	-
$\frac{1}{16}$	1.57e-7	4.84	3.14e-5	3.86	274625	164033	1.50e-7	4.87	3.15e-5	3.86	512000	-
$h$	$MF^*$ formulation						$MF^{**}$ formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	1.91e-2		2.10e-1		75	1	8.30e-3		1.03e-1		906	1
$\frac{1}{2}$	1.95e-3	3.29	2.33e-2	3.17	4300	308	4.08e-4	4.34	6.50e-3	3.97	6948	308
$\frac{1}{4}$	7.98e-5	4.61	1.01e-3	4.53	33200	3664	1.06e-5	5.26	2.50e-4	4.70	54384	3664
$\frac{1}{8}$	2.86e-6	4.80	3.42e-5	4.88	260800	34112	1.83e-7	5.86	8.45e-6	4.89	430272	34112
$\frac{1}{16}$	9.85e-8	4.86	1.09e-6	4.97	2067200	292096	3.19e-9	5.84	2.68e-7	4.98	3422976	292096
$h$	$LDGC$						$SHDG$					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	2.19e-2		3.60e-1		223	98	2.19e-2		3.60e-1		275	150
$\frac{1}{2}$	2.50e-3	3.14	7.28e-2	2.31	1513	513	2.46e-3	3.15	7.30e-2	2.30	1900	900
$\frac{1}{4}$	1.09e-4	4.52	6.38e-3	3.51	11185	3185	1.07e-4	4.52	6.38e-3	3.52	14000	6000
$\frac{1}{8}$	3.99e-6	4.77	4.62e-4	3.79	6113	22113	3.95e-6	4.76	4.63e-4	3.79	107200	43200
$\frac{1}{16}$	1.39e-7	4.84	3.18e-5	3.86	676033	164033	1.38e-7	4.84	3.18e-5	3.86	838400	326400

Tetrahedral meshes, $k = 4$												
$h$	$H^1$ formulation						$DG$ formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	1.88e-2		2.82e-1		125	119	1.79e-2		2.69e-1		210	-
$\frac{1}{2}$	2.31e-3	3.02	6.85e-2	2.04	729	681	2.10e-3	3.14	6.43e-2	2.07	1680	-
$\frac{1}{4}$	1.16e-4	4.32	6.91e-3	3.31	4913	4529	1.08e-4	4.52	6.55e-3	3.29	13440	-
$\frac{1}{8}$	4.55e-6	4.67	5.27e-4	3.71	35937	32865	4.21e-6	4.77	5.00e-4	3.71	107520	-
$\frac{1}{16}$	1.58e-7	4.85	3.58e-5	3.88	274625	250049	1.46e-7	4.89	3.39e-5	3.88	860160	-
$h$	$MF^*$ formulation						$MF^{**}$ formulation					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	1.31e-2		1.41e-1		984	96	8.40e-3		1.05e-1		1446	96
$\frac{1}{2}$	1.24e-3	3.40	1.46e-2	3.27	7512	1128	6.08e-4	3.79	1.06e-2	3.31	11208	1128
$\frac{1}{4}$	6.12e-5	4.34	8.10e-4	4.17	58656	10464	3.57e-7	5.01	6.61e-4	4.00	88224	10464
$\frac{1}{8}$	2.30e-6	4.74	3.23e-5	4.67	463488	89472	2.30e-6	5.72	2.57e-5	4.68	700032	89472
$\frac{1}{16}$	7.68e-8	4.90	1.05e-6	4.95	3684864	738816	6.00e-9	5.89	8.74e-7	4.88	5577216	738816
$h$	$LDGC$						$SHDG$					
	$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF		$\ u - u_h\ $		$\ \sigma - \sigma_h\ $		DoF	
	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC	Error	Rate	Error	Rate	Total	SC
1	1.82e-2		2.79e-1		329	119	1.69e-2		2.68e-1		480	270
$\frac{1}{2}$	2.21e-3	3.04	6.75e-2	2.05	2361	681	1.93e-3	3.13	6.30e-2	2.09	3480	1800
$\frac{1}{4}$	1.11e-4	4.31	6.82e-3	3.31	17969	4529	9.85e-5	4.29	6.43e-3	3.29	26400	12960
$\frac{1}{8}$	4.37e-6	4.67	5.21e-4	3.71	140385	32865	3.87e-6	4.67	4.89e-4	3.72	205440	97920
$\frac{1}{16}$	1.52e-7	4.85	3.55e-5	3.88	1110209	250049	1.33e-7	4.86	3.30e-5	3.89	1620480	760320

Table III. Problem 1: Errors in  $L^2$ -norm  $\|u - u_h\|$  and  $\|\sigma - \sigma_h\|$ , rates of convergence, and number of equations (DoF) without (Total) and with static condensation (SC), using approximation spaces with  $k = 4$  for the  $H^1$ -conforming, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method for uniform meshes formed by hexahedral (top side) and tetrahedral (bottom side) elements.

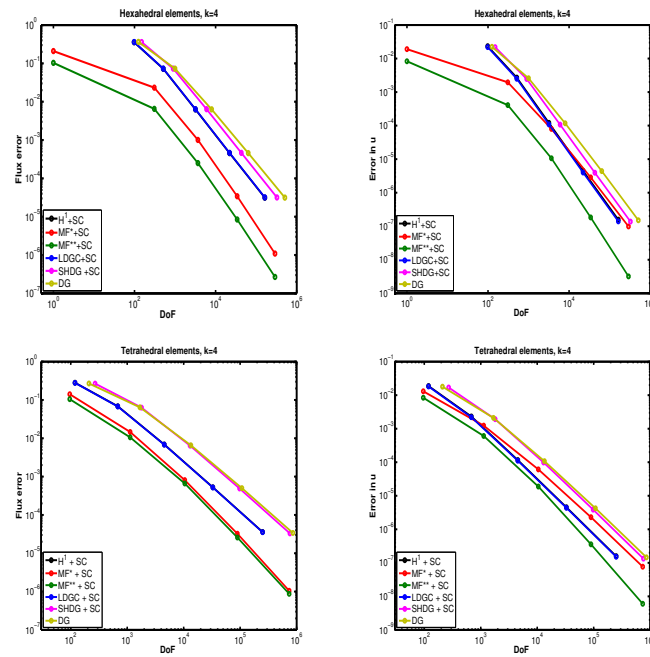


Figure 7. Problem 1:  $L^2$ -error curves for  $\sigma$  (left side) and for  $u$  (right side) in terms of the number of equations to be solved ( $DoF$ ) for simulations based on hexahedral (top side) and tetrahedral (bottom side) uniform meshes, and  $k = 4$ . Static condensation is applied to the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, but not for the  $DG$  method.

267 *Computational effort.* Several effects can affect the computational efficiency of a given numerical  
 268 scheme. Usually, the execution time of a simulation is determined by the linear solver efficiency,  
 269 which is bound by the number of equations to be solved. But a solver efficiency can also be affected  
 270 by other aspects, as matrix sparsity, bandwidth and condition number. The computational overhead  
 271 related to the assembly of the condensed matrices can also impact the overall cost. In this section,  
 272 some of these aspects are addressed for the six methods under study.

273 Figure 8 displays the execution times ( $s$ ) required by matrix assembly (A), and by system  
 274 resolution (S) using the MKL/Pardiso solver. In almost all cases, excepting the DG method, the  
 275 matrix assembly dominates the resolution time. For hybrid and mixed methods this overhead is  
 276 much more significant, but for the later ones this task severely dominates the execution time. As  
 277 the meshes are refined, the relative cost of matrix assembly tends to diminish. Furthermore, these  
 278 computations scale well with the number of threads and could become less important in higher  
 279 performance computers.

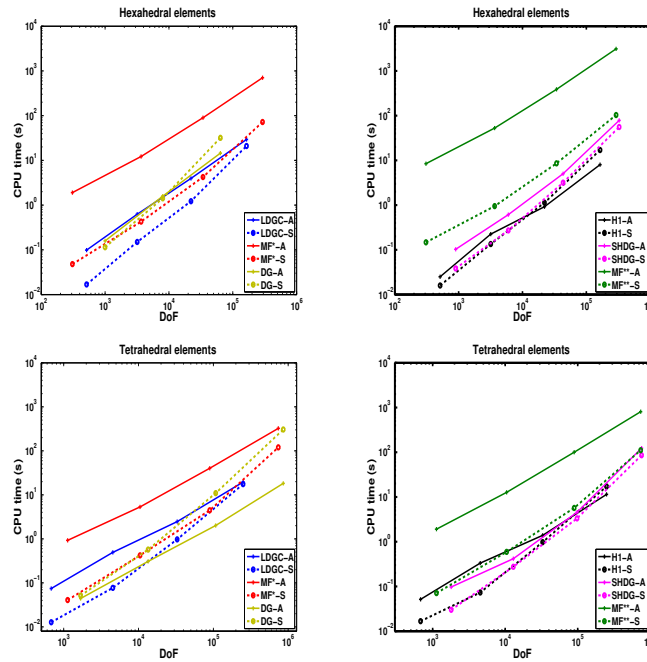


Figure 8. Problem 1: Execution times ( $s$ ) required for matrix assembly (A), and to solve the systems (S) with the iterative solver, when using for the hybrid  $LDGC$ , mixed  $MF^*$ , and  $DG$  formulations (left side), and for  $H^1$ -conforming, hybrid  $SHDG$ , and mixed  $MF^{**}$  formulations (right side), for approximations using  $k = 4$ , and uniform tetrahedral meshes with spacing  $h = 1/N$ ,  $N = 4, 8$  and  $16$ .

280 In order to evaluate the methods in terms of the approximation error versus the computational  
 281 effort, Figure 7 displays the error curves for  $u$  and  $\sigma$  for approximations with  $k = 4$ . These  
 282 plots reveal that, using the current implementation, the performance of  $H^1$ -conforming and hybrid

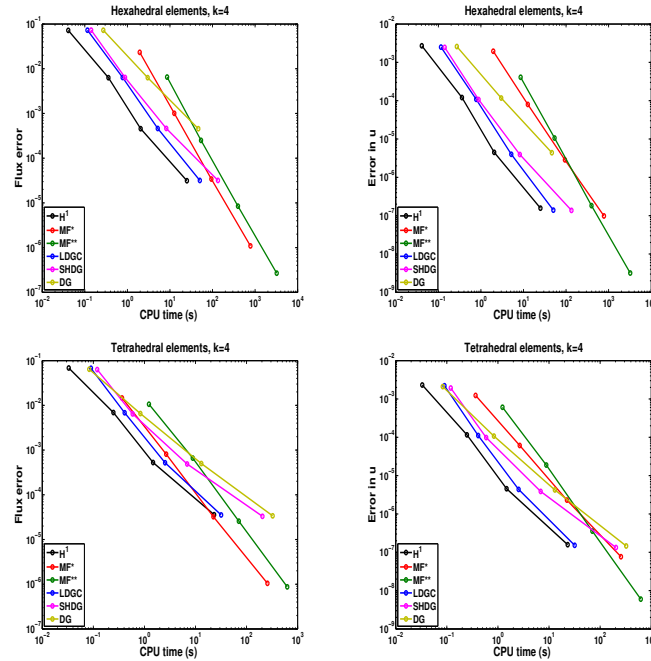


Figure 9. Problem 1:  $L^2$ -error curves in terms of total execution times (s) using iterative linear solver, with  $k = 4$ , hexahedral (top side) and tetrahedral (bottom side) uniform meshes: errors for  $\sigma$  (left side) and  $u$  (right side) variables, using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method.

283  $LDGC$  methods are quite similar. In fact, these two methods are more efficient than the other ones  
 284 for the approximations of both variables  $u$  and  $\sigma$  at lower accuracy levels. The price to be paid for  
 285 better accuracy of mixed methods, especially for the enhanced version  $MF^{**}$ , is their computational  
 286 cost overhead for matrix assembly.

287 Figure 10 illustrates the sparsity pattern of the matrices associated to the systems to be solved for  
 288 meshes with  $h = 1/8$ , which are strongly depended of the method. In all cases, the bandwidth was  
 289 optimized using Sloan's algorithm [29]. Enhanced mixed method  $MF^{**}$  is not included, since it  
 290 has the same dimension and structure of the corresponding original method  $MF^*$ . It is interesting  
 291 to note that, with same mesh size, the aspect ratio of the matrices associated to tetrahedral meshes  
 292 seems to be better than for hexahedra.

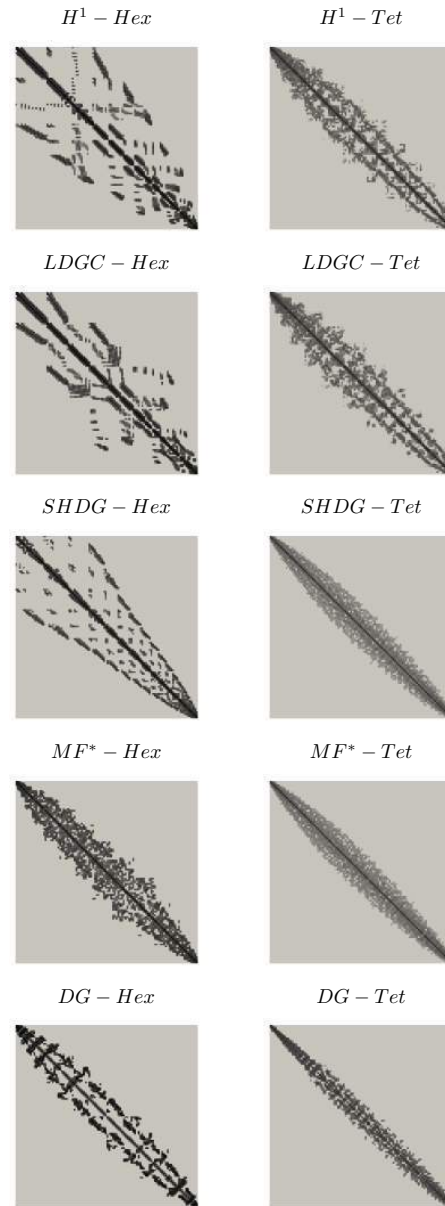


Figure 10. Problem 1: Matrix structure for uniform hexahedral (left side) and tetrahedral (right side) meshes with spacing  $h = 1/8$ , and using  $k = 4$ : condensed matrices for  $H^1$ ,  $LDGC$ ,  $SHDG$ ,  $MF^*$  (the same for  $MF^{**}$ ) formulations, and the full matrix for the  $DG$  method.

## 293 3.2. Problem 2: internal layer in 2D

294 Adaptive numerical treatment of problems governed by elliptic partial differential equations by high  
 295 order finite element schemes, incorporating local mesh refinement ( $h$ -adaptivity) and/or different  
 296 orders of approximating polynomials on separate elements in the same mesh ( $p$ -adaptivity), has  
 297 proved to be very effective [30, 31, 32, 33]. However, the implementation of  $hp$ -adaptive strategies is  
 298 more complex than for standard finite element schemes [34, 35, 36]. The differences in polynomial  
 299 orders and the presence of hanging sides introduce additional difficulties in the enforcement of  
 300 continuity constraints. One of the advantages of discontinuous and hybrid methods is that the  
 301 implementation of  $hp$ -strategies is less complex [28, 26].

302 In this section, we take advantage of NeoPZ facilities for  $hp$ -adaptivity to compare the  
 303 efficiency of all the methods when applied to a particular sequence of meshes adapted  
 304 to the singularity of a given problem. It is defined over the domain  $\Omega = (0, 1)^2$  and the  
 305 load function  $f$  is chosen such that the model problem has exact solution given by  $u =$   
 306  $\frac{\pi}{2} - \arctan \left[ \alpha \left( \sqrt{(x - 1.25)^2 + (y + 0.25)^2} - \frac{\pi}{3} \right) \right]$ , having strong gradients with magnitude  
 307 determined by the parameter  $\alpha = 200$  in the proximity to the circumference centred at the point  
 308  $(1.25, -0.25)$ , with radius  $\pi/3$ . Plots of the exact solution  $u(x, y)$  and the magnitude of its gradient  
 309 magnitude are presented in Figure 11.

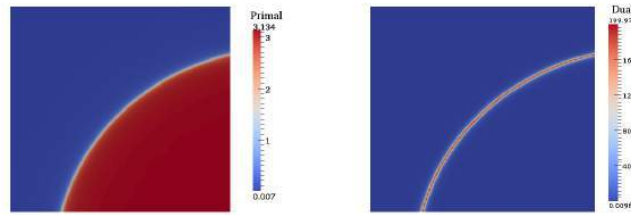


Figure 11. Exact solution of Problem 2:  $u(x, y)$  (left side) and the magnitude of its gradient (right side).

310 For the construction of the  $hp$ -adaptive meshes, with either quadrilateral or triangular cells, the  
 311 domain is split into two regions: the region near the singularity and the smooth part, elsewhere. In  
 312 the region where the solution is smooth,  $p$  refinement is adopted in order to produce exponential  
 313 convergence rates there. In the central region,  $hp$  refinement is employed in order to generate  
 314 approximation spaces which better capture the singular behaviour. The initial mesh is composed  
 315 of uniform elements with mesh size  $2^{-3}$ , and  $p = 2$  in the smooth part, and mesh size  $2^{-4}$  and  $p = 3$   
 316 in the region of the singularity. Then, the refinement process follows a sequence of steps  $\ell = 2, 3,$   
 317 and 4 by first increasing by 1 the approximation order of all elements of the previous step, and then  
 318 by subdividing the elements intersecting a layer of diameter  $2^{-\ell}$  around the singularity curve, and  
 319 by further increasing their approximation order by 1. Figure 12 illustrates the  $hp$  refinement process  
 320 at the initial step, and at the final refinement level.

321 For the construction of the multiplier approximation spaces for  $hp$ -adaptive hybrid methods,  
 322 the polynomial degree taken in each face corresponds to the minimum value occurring in the  
 323 two neighbouring elements, and the penalization parameter  $\beta$  is defined using face width and the

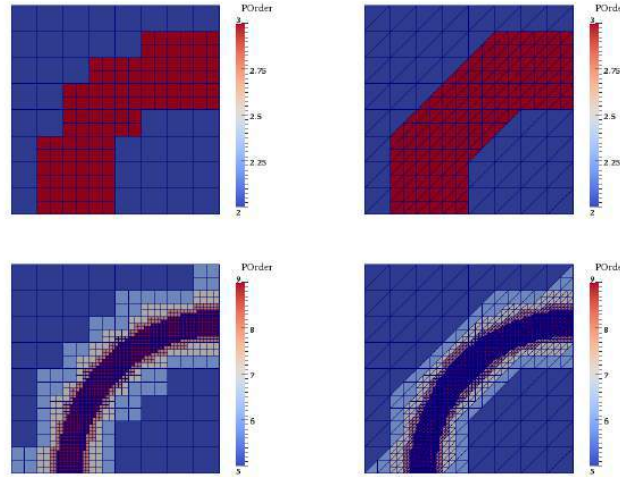


Figure 12. Illustration of the  $hp$  refinement process: initial mesh (top-side), and mesh at the final refinement step (bottom-side) for quadrilateral (left-side) and triangular (right-side) geometries.

polynomial degree assigned to it. For the DG method, the penalization parameter uses the [average of the neighbour polynomial degrees and element widths, as suggested in \[28\]](#).

Figure 13 shows the calculated  $L^2$ -norms of errors in  $\sigma$  and  $u$  using these sequences of  $hp$ -adaptive meshes versus the number of equations solved after static condensation. The results demonstrate exponential rates of convergence when using  $hp$ -adaptive meshes. Excepting the DG case, which is not condensed, the tendency of the error curves are similar for the other methods. However the accuracy in the flux variable improves when using mixed formulations, and for primal variable it is also better when  $\mathbf{P}_k^* P_k$  configurations are applied.

In Figure 14 and Figure 15 the effect of static condensation is also verified in terms of the size reduction of the global system to be solved. For all the methods, it is more significant with increasing order of approximation and for rectangular meshes. It can also be observed that static condensation is more favourable when using mixed methods. At the finest levels of mesh refinement, the number of condensed equations in the mixed formulation amounts to more than 90%, meaning that the size of the condensed system to be solved is less than 10% of the total number of equations required for these methods.



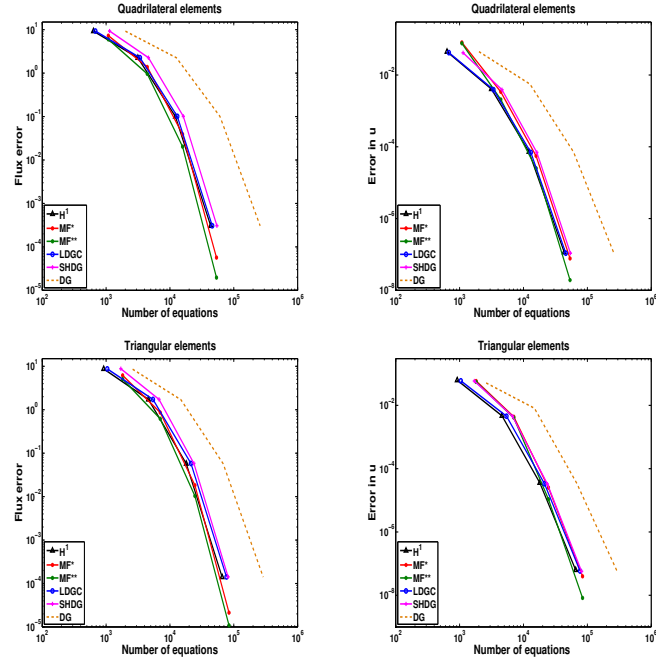


Figure 13. Problem 2:  $L^2$ -error curves for  $\sigma$  (left side) and the primal variable (right side), in terms of the number of equations to be solved, using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, and the  $DG$  method based on quadrilateral (top side) and triangular (bottom side)  $hp$ -meshes of Figure 12.

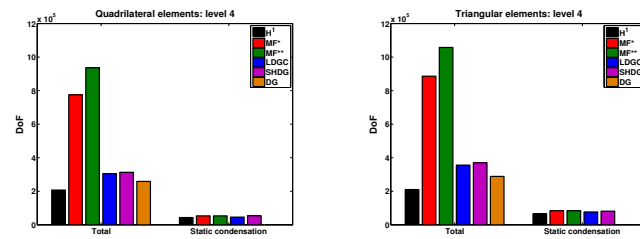


Figure 14. Problem 2: number of solved equations using quadrilateral (left side) and triangular (right side)  $hp$  meshes at the refinement level 4, using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, without and with static condensation, and the  $DG$  method.

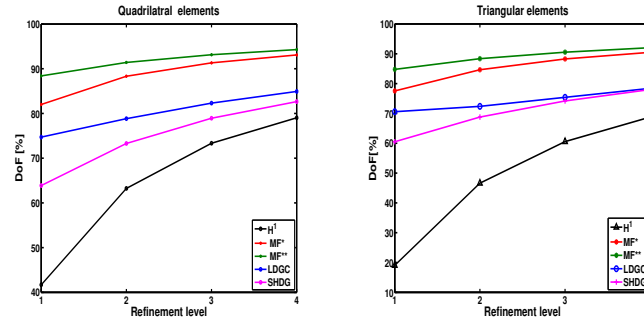


Figure 15. Problem 2: percentage of condensed degrees-of-freedom at different refinement levels, using the  $H^1$ -conforming formulation, the mixed formulations  $MF^*$  and  $MF^{**}$ , the hybrid  $LDGC$  and  $SHDG$  methods, applied to quadrilateral (left side) and triangular (right side)  $hp$ -meshes

#### 4. CONCLUSIONS

Continuous, discontinuous, primal hybrid and mixed finite element methods have been applied to solve the Poisson problem in two and three space dimensions. All methods have been implemented in a unique programming environment NeopZ which allows the comparison of their performances when applied to different mesh topologies. The current work is a step forward of an earlier numerical study started in [13] for quadrilateral meshes. The analysis here considers a three dimensional formulations based on hexahedral and tetrahedral meshes, and includes new mixed and hybrid approaches in the set of compared methods.

It is interesting to observe that even though different approximation methods may have the same convergence rates, their absolute accuracy can be very different. Tremendous impact of static condensation in reducing matrix dimensions for mixed and hybrid methods has been observed. This effect appears to be more significant for increasing polynomial degree, and refinement level. The enhanced mixed method  $MF^{**}$  is the most accurate, for both flux and primal variables, in all comparison tests in terms of rate of convergence, and error versus number of equations to be solved.

Some aspects concerning computational effort have also being addressed, both in terms of matrix assembly and system resolution. For all methods, the same general linear solver MKL/Pardiso has being applied to solve the three dimensional test problem. The performances of  $H^1$ -conforming formulation and hybrid  $LDGC$  method are quite similar, revealing, at lower accuracy levels, the best compromise of computational cost versus precision, for both flux and potential approximations. For higher accuracy, the best flux and potential errors are provided by the mixed methods, especially by the enhanced versions  $MF^{**}$ . However, its computational cost for matrix assembly is very high. As the meshes are refined, the relative cost of matrix assembly tends to diminish. For hybrid and mixed methods this overhead results to be more significant, especially for the later ones.

The authors do not claim that the current implementations are the most efficient for the methods under consideration, but they expect that, under this unified comparison perspective, the presented

results may provide a good reference for those wanting to choose the appropriate method for a problem they wish to solve.

# ACKNOWLEDGEMENTS

P. R. B. Devloo, S. M. Gomes, A. F. D. Loula and S. M. C. Malta thankfully acknowledge financial support from CNPq, the Brazilian Research Council (grants 310369/2006-1, 308632/2006-0, 352991/92-5 and 475259/2013-0, respectively). P. R. B. Devloo and S. M. Gomes are grateful for financial supports received from FAPESP - Research Foundation of the State of São Paulo, Brazil (2016/05144-0, 2016/05155, 2016/13637-5). The authors would like to thank the reviewers for making constructive and pertinent comments for the manuscript improvement, and to Omar Durán for the help in some NeoPZ implementations.

# REFERENCES

1. Arnold DN, Falk RS, Winther R. Geometric decompositions and local bases for spaces of finite element differential forms. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2009; **198**(1):1660–1672, doi:10.1016/j.cma.2008.12.017.
2. Ainsworth M, Andriamaro G, Davydov O. Bernstein-Bézier finite elements of arbitrary order and optimal assembly procedures. *SIAM J. Sci. Comput.* 2011; **33**(6):3087–3109, doi:10.1137/11082539X.
3. Ainsworth M, Ma X. Non-uniform order mixed FEM approximation: Implementation, post-processing, computable error bound and adaptivity. *J. Comput. Physics* 2012; **231**(2):436–453, doi:10.1016/j.jcp.2011.09.011.
4. Beuchler S, Pillwein V, Zaglmayr S. Sparsity optimized high order finite element functions for h(div) on simplices. *Numerische Mathematik* 2012; **122**(2):197–225, doi:10.1007/s00211-012-0461-0.
5. Fuentes F, Keith B, Demkowicz L, Nagaraj S. Orientation embedded high order shape functions for the exact sequence elements of all shapes. *Comput. Math. Appl.* 2015; **70**(4):353–458, doi:10.1016/j.camwa.2015.04.027.
6. Castro DA, Devloo PR, Farias AM, Gomes SM, de Siqueira D, Durán O. Three dimensional hierarchical mixed finite element approximations with enhanced primal variable accuracy. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2016; **306**:479–502, doi:10.1016/j.cma.2016.03.050.
7. Cockburn B, Shu CW. The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems. *SIAM J. Numerical Analysis* 1998; **35**(6):2440–2463, doi:10.1137/S0036142997316712.
8. Ewing RE, Wang J, Yang Y. A stabilized discontinuous finite element method for elliptic problems. *Numerical Lin. Alg. with Applic.* 2003; **10**(1-2):83–104, doi:10.1002/nla.313.
9. Cockburn B, Gopalakrishnan J, Lazarov RD. Unified hybridization of discontinuous Galerkin, mixed, and continuous Galerkin methods for second order elliptic problems. *SIAM J. Numerical Analysis* 2009; **47**(2):1319–1365, doi:10.1137/070706616.
10. Cockburn B, Gopalakrishnan J, Nguyen NC, Peraire J, Sayas FJ. Analysis of HDG methods for Stokes flow. *Math. Comput.* 2011; **80**(274):723–760, doi:10.1090/S0025-5718-2010-02410-X.
11. Arruda NC, Loula AF, Almeida RC. Locally discontinuous but globally continuous Galerkin methods for elliptic problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2013; **255**(1):104–120, doi:10.1016/j.cma.2012.11.013.
12. Brezzi F, Fortin M. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods, Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag New York, Inc.: New York, NY, USA, 1991.
13. Forti TL, Farias AM, Devloo PR, Gomes SM. A comparative numerical study of different finite element formulations for 2D model elliptic problems: Continuous and discontinuous Galerkin, mixed and hybrid methods. *Finite Elements in Analysis and Design* 2016; **115**:9–20, doi:10.1016/j.finel.2016.02.009.
14. Raviart PA, Thomas JM. *A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems*. Springer Berlin Heidelberg, 1977; 292–315, doi:10.1007/BFb0064470.
15. Egger H. A class of hybrid mortar finite element methods for interface problems with non-matching meshes. *Preprint: AICES-2009-2* 2009; .
16. Oden JT, Carey GF, Becker EB. *Finite Elements – An Introduction*, vol. 1. Prentice Hall Inc.: New Jersey, USA, 1981.

- 409 17. Devloo PRB, Bravo CMAA, Rylo EC. Systematic and generic construction of shape functions for p-adaptive  
410 meshes of multidimensional finite elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 2009; **198**(21–26):1716–1725,  
411 doi:10.1016/j.cma.2008.12.022.
- 412 18. Díaz Calle JL, Devloo PR, Gomes SM. Implementation of continuous H P -adaptive finite element spaces without  
413 limitations on hanging sides and distribution of approximation orders. *Comput. Math. Appl.* 2015; **70**(5):1051–  
414 1069, doi:10.1016/j.camwa.2015.06.033.
- 415 19. Siqueira DD, Devloo PR, Gomes SM. A new procedure for the construction of hierarchical high order Hdiv  
416 and Hcurl finite element spaces. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 2013; **240**:204–214, doi:  
417 10.1016/j.cam.2012.09.026.
- 418 20. Nédélec JC. Mixed finite elements in  $\mathbb{R}^3$ . *Numerische Mathematik* 1980; **35**(3):315–341, doi:10.1007/BF01396415.
- 419 21. Brezzi F, Douglas Jr J, Fortin M, Marini LD. Efficient rectangular mixed finite elements in two and three space  
420 variables. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.* 1987; **21**(4):581–604.
- 421 22. Devloo PR, Farias AM, Gomes SM, de Siqueira D. Two-dimensional hp adaptive finite element spaces for mixed  
422 formulations. *Math. Comput. Simul.* 2016; **126**(C):104–122, doi:10.1016/j.matcom.2016.03.009.
- 423 23. Arnold DN. An interior penalty finite element method with discontinuous elements. *SIAM Journal on Numerical*  
424 *Analysis* 1982; **19**(4):742–760, doi:10.1137/0719052.
- 425 24. Arnold DN, Brezzi F, Cockburn B, Marini LD. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic  
426 problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 2001; **39**(5):1749–1779, doi:10.1137/S0036142901384162.
- 427 25. Brezzi F, Cockburn B, Marini L, Süli E. Stabilization mechanisms in discontinuous Galerkin finite element  
428 methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 2006; **195**(25–28):3293–3310, doi:  
429 10.1016/j.cma.2005.06.015.
- 430 26. Rivière B. *Discontinuous Galerkin Methods For Solving Elliptic And Parabolic Equations: Theory and*  
431 *Implementation*. Society for Industrial and Applied Mathematics: Philadelphia, PA, USA, 2008.
- 432 27. Faria CO, Loula AF, dos Santos AJ. Primal stabilized hybrid and DG finite element methods for the linear elasticity  
433 problem. *Computers & Mathematics with Applications* 2014; **68**(4):486–507, doi:10.1016/j.camwa.2014.06.014.
- 434 28. Harriman K, Houston P, Senior B, Süli E. hp-version discontinuous Galerkin methods with interior penalty for  
435 partial differential equations with nonnegative characteristic form. *Recent Advances in Scientific computing and*  
436 *partial differential equations*, vol. 330. (Hong Kong, 2002), Contemp. Math., Amer.Math. Soc., Providence, RI,  
437 2003; 89–119.
- 438 29. Sloan SW. An algorithm for profile and wavefront reduction of sparse matrices. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 1986;  
439 **23**(2):239–251, doi:10.1002/nme.1620230208.
- 440 30. Schwab C. p- and hp-finite element methods. *Numerical Mathematics and Scientific Computation*, vol. 606,  
441 Galligani I, Magenes E (eds.), chap. Theory and applications in solid and fluid mechanics, The Clarendon Press,  
442 Oxford University Press, New York, 1998.
- 443 31. Guo B, Babuška I. The h-p version of the finite element method. part 1: The basic approximation results. *Comput.*  
444 *Mech.* 1986; **1**(1):21–41, doi:10.1007/BF00298636.
- 445 32. Guo B, Babuška I. The h-p version of the finite element method. part 2: General results and applications. *Comput.*  
446 *Mech.* 1986; **1**(3):203–220, doi:10.1007/BF00272624.
- 447 33. Ainsworth M, Oden JT. *A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons, Inc.: New  
448 York, 2000.
- 449 34. Demkowicz L, Kurtz J, Pardo D, Paszynski M, Rachowicz W, Zdunek A. *Computing with Hp-Adaptive Finite*  
450 *Elements, Vol. 2: Frontiers Three Dimensional Elliptic and Maxwell Problems with Applications*. 1st edn., Chapman  
451 & Hall/CRC, 2007.
- 452 35. Šolín P, Segeth K, Doležal I. *Higher-Order Finite Element Methods. Series: Studies in Advanced Mathematics*.  
453 Chapman & Hall/CRC: Boca Raton, 2003.
- 454 36. Šolín P, Červený, Doležal I. Arbitrary-level hanging nodes and automatic adaptivity in the hp-FEM. *Math. Comp.*  
455 *Simulat* 2008; **77**(1):117–132, doi:10.1016/j.matcom.2007.02.011.