

Método dos Elementos Finitos

Formulação Variacional, Método de Galerkin, Condições de Contorno e Implementação Computacional

Iury Igreja

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional
Departamento de Ciência da Computação
Universidade Federal de Juiz de Fora
iuryigreja@ice.ufjf.br

Conteúdo

- ▶ Problema Modelo
- ▶ Definições
- ▶ Formulação Fraca
- ▶ Existência e Unicidade
- ▶ Problema Modelo Unidimensional
 - ▶ Formulação Fraca
 - ▶ Problema Aproximado
- ▶ Método de Elementos Finitos
 - ▶ Problema Local
 - ▶ Montagem da Matriz de Rigidez
 - ▶ Condições de Contorno
- ▶ Implementação Computacional
- ▶ Caso Geral com Coeficientes Variáveis
- ▶ Problema de Difusão Reação

Problema Modelo - Difusão

Seja o domínio espacial $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ com contorno $\partial\Omega$, dada a função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, encontrar $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$-\Delta u = f \quad \text{em } \Omega$$

suplementado por condições de contorno do tipo Dirichlet

$$u = \bar{u} \quad \text{sobre } \partial\Omega_D$$

ou Neumann

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = g \quad \text{sobre } \partial\Omega_N$$

onde \mathbf{n} é o vetor unitário normal com orientação exterior a $\partial\Omega_N$.

Definições

► Espaços (de Hilbert)

$$H^0(\Omega) = L^2(\Omega) = \{v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; \int_{\Omega} |v|^2 dx < \infty\}$$

$$H^1(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega); \nabla v \in [L^2(\Omega)]^2\}$$

$$H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega); v|_{\partial\Omega} = 0\}$$

$$H^2(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega); \nabla v \in [L^2(\Omega)]^2; \Delta v \in L^2(\Omega)\}$$

► Produto Interno

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} u v \, dx$$

$$\begin{aligned}(u, v)_{H^1(\Omega)} &= (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + (u, v)_{L^2(\Omega)} \\ &= \int_{\Omega} [\nabla u \cdot \nabla v + u v] \, dx\end{aligned}$$

Definições

► Norma

$$\|v\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|v\|_0^2 = (v, v)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} |v|^2 dx$$

$$\begin{aligned}\|v\|_{H^1(\Omega)}^2 &= \|v\|_1^2 = (\nabla v, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + (v, v)_{L^2(\Omega)} \\ &= \|\nabla v\|_0^2 + \|v\|_0^2 = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 + |v|^2 dx\end{aligned}$$

► seminorma

$$|v|_{H^1(\Omega)}^2 = |v|_1^2 = (\nabla v, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx$$

$$|v|_{H^2(\Omega)}^2 = |v|_2^2 = (\Delta v, \Delta v)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} |\Delta v|^2 dx$$

Formulação Fraca

Integrando no domínio Ω e multiplicando o problema modelo por uma função v , obtemos:

$$-\int_{\Omega} (\Delta u + f)v \, dx = 0. \quad (1)$$

Usando a identidade

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\nabla u v) \, dx = \int_{\Omega} \Delta u v \, dx + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx,$$

e aplicando o teorema da divergência, geramos a seguinte relação

$$-\int_{\Omega} \Delta u v \, dx = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds.$$

Logo, a equação (1) pode ser escrita como:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx$$

Formulação Fraca

A partir da formulação fraca, podemos definir o seguinte problema:

Dado $f \in L^2(\Omega)$, encontrar $u \in \mathcal{U}$, tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in \mathcal{V}.$$

Os espaços \mathcal{U} e \mathcal{V} podem ser definidos como:

$$\mathcal{U} = \{u \in L^2(\Omega), \nabla u \in L^2(\Omega); u|_{\partial\Omega_D} = \bar{u}\}$$

$$\mathcal{V} = \{v \in L^2(\Omega), \nabla v \in L^2(\Omega); v|_{\partial\Omega_D} = 0\}$$

- ▶ As condições de **Dirichlet**, conhecidas como **condições essenciais**, são impostas no espaço;
- ▶ As condições de **Neumann**, conhecidas como **condições naturais**, são inseridas diretamente na formulação variacional.
- ▶ As condições de **Robin** são uma mistura das condições de Dirichlet e Neumann.

Formulação Fraca – Condições de Contorno

Como $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$, podemos reescrever o problema variacional como:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega_D} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds - \int_{\partial\Omega_N} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in \mathcal{V}.$$

Como, por definição:

- ▶ $\forall v \in \mathcal{V}$ se anula no contorno de Dirichlet $\partial\Omega_D$; e
- ▶ $\nabla u \cdot \mathbf{n} = g$ sobre $\partial\Omega_N$

então:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \underbrace{\int_{\partial\Omega_D} \nabla u \cdot \mathbf{n} v \, ds}_0 - \int_{\partial\Omega_N} \underbrace{\nabla u \cdot \mathbf{n}}_g v \, ds = \int_{\Omega} f v \, dx.$$

Formulação Fraca

Dessa forma, o problema variacional pode ser apresentado como
Achar $u \in \mathcal{U}$, satisfazendo

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \mathcal{V}.$$

A forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ é dada por

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$$

e o funcional linear $f(\cdot)$ por

$$f(v) = \int_{\Omega} f v \, dx - \int_{\partial\Omega_N} g v \, ds$$

Existência e Unicidade

Dado o problema variacional

Achar $u \in \mathcal{U}$, satisfazendo

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \mathcal{U}. \quad (2)$$

Devemos provar:

- ▶ Continuidade da forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$;
- ▶ Continuidade da forma linear $f(\cdot)$;
- ▶ Estabilidade da forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$.

Essas três hipóteses nos fornecem a condição suficiente para a existência e unicidade de solução do problema (2) e formam o **Lema de Lax-Milgram**.

Problema Modelo Unidimensional

Seja o domínio espacial $\Omega = [a, b]$, dada a função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, encontrar $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = f \quad \text{em } \Omega$$

suplementado por condições de contorno do tipo Dirichlet

$$u(a) = \bar{u}$$

ou Neumann

$$\frac{du}{dx}(b) = g$$

Formulação Fraca

Integrando no domínio Ω e multiplicando o problema modelo por uma função v , obtemos:

$$- \int_{\Omega} \left(\frac{d^2 u}{dx^2} + f \right) v \, dx = 0.$$

Integrando por partes o problema acima, obtemos

$$\int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} \, dx - \frac{du}{dx} v \Big|_a^b = \int_{\Omega} f v \, dx$$

Supondo que u está no espaço

$$\mathcal{U} = \{u \in H^1(\Omega); u(a) = \bar{u}\}$$

e v pertence ao espaço

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega); v(a) = 0\}$$

Formulação Fraca

Dessa forma, considerando os espaços definidos e a condição de Neumann imposta sobre o ponto b , temos

$$\int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx - \cancel{\frac{du}{dx}(b)v(b)} \overset{g}{\nearrow} + \frac{du}{dx}(a)v(a) \overset{0}{\nearrow} = \int_{\Omega} f v dx.$$

Assim podemos enunciar o seguinte problema variacional:

Encontrar $u \in \mathcal{U}$, tal que

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

com

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx \quad \text{e} \quad f(v) = \int_{\Omega} f v dx + g v(b)$$

Problema Aproximado

Aplicando uma aproximação conforme para o problema, $\mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ e $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, reescrevemos o problema variacional como segue
Achar $u_h \in \mathcal{U}_h$, tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h$$

com

$$a(u_h, v_h) = \int_{\Omega} \frac{du_h}{dx} \frac{dv_h}{dx} dx \quad \text{e} \quad f(v_h) = \int_{\Omega} f v_h dx + g v_h(b)$$

onde

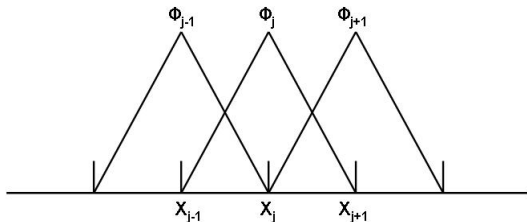
$$\mathcal{U}_h = \mathcal{S}_h^k \cap \mathcal{U}, \quad \mathcal{V}_h = \mathcal{S}_h^k \cap \mathcal{V} \quad \text{e} \quad \mathcal{S}_h^k = \{v_h \in C^0(\Omega); v_h \in \mathbb{P}_k\}$$

Onde \mathbb{P}_k denota o polinômio de interpolação e k a ordem do polinômio.

Método de Elementos Finitos

Seja $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ uma discretização uniforme para o domínio Ω , onde cada elemento $x_j - x_{j-1}$, com $j = 1, 2, \dots, N$, é um intervalo de comprimento $h = (b - a)/N$. Neste contexto, definimos uma base linear $\mathcal{S}_h = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ onde as funções de base são dadas por

$$\phi_j = \begin{cases} \frac{1}{h}(x - x_{j-1}), & \forall x \in [x_{j-1}, x_j] \\ \frac{1}{h}(x_{j+1} - x), & \forall x \in [x_j, x_{j+1}] \\ 0, & \forall x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \end{cases}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$



Método de Elementos Finitos

Assim, a solução aproximada u_h pode ser representada como:

$$u_h = \sum_{i=1}^N u_i \phi_i, \quad \phi_i \in \mathcal{S}_h,$$

e

$$v_h = \phi_j \quad \phi_j \in \mathcal{S}_h.$$

Dessa forma, podemos reescrever o problema aproximado como:

Achar $u_i \in \mathbb{R}$, tal que:

$$\sum_{i=1}^N a(u_i \phi_i, \phi_j) = f(\phi_j), \quad j = 1, 2, \dots, N.$$

que é equivalente a forma matricial:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F}$$

onde $\mathbf{u} = \{u_i\}$ vetor de incógnitas e

$$K_{ij} = a(\phi_i, \phi_j), \quad i, j = 1, 2, \dots, N,$$

$$F_j = f(\phi_j), \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

Método de Elementos Finitos

No contexto do problema modelo que está sendo abordado, a matriz de rigidez \mathbf{K} e o vetor fonte \mathbf{F} são dados por:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx, \quad i, j = 1, 2, \dots, N,$$
$$F_j = \int_{\Omega} f \phi_j dx + \phi(b)g, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

A montagem de \mathbf{K} e \mathbf{F} é feita adicionando-se adequadamente as contribuições locais, definidas no nível do elemento por

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx, \quad i, j = 1, \dots, n,$$
$$F_j^e = \int_{\Omega^e} f \phi_j^e dx + \phi^e(b)g, \quad j = 1, \dots, n,$$

onde $\Omega = \bigcup \Omega^e$, $\mathbf{K} = \sum \mathbf{K}^e$, $\mathbf{F} = \sum \mathbf{F}^e$ e n o número de nós do elemento Ω^e .

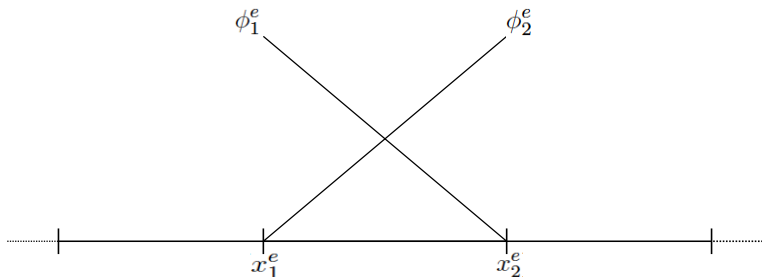
Problema Local

As funções de base locais ϕ_i^e são definidas em cada elemento $\Omega^e = [x_1^e, x_2^e]$, porém são análogas as funções globais e podem ser representadas na forma linear, para cada elemento Ω^e , como:

$$\phi_1^e = \frac{1}{h}(x_2^e - x), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_2^e = \frac{1}{h}(x - x_1^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_i^e = 0, \quad i = 1, 2 \quad \forall x \notin [x_1^e, x_2^e]$$



Problema Local

Assim, a matriz local K_{ij}^e para o caso linear é dada por:

$$K_{ij}^e = \begin{bmatrix} K_{11}^e & K_{12}^e \\ K_{21}^e & K_{22}^e \end{bmatrix}$$

onde

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx, \quad i, j = 1, 2.$$

e

$$\frac{d\phi_1^e}{dx} = \frac{1}{h}; \quad \frac{d\phi_2^e}{dx} = -\frac{1}{h}.$$

O vetor local F_j^e é dado por

$$F_j^e = \begin{bmatrix} F_1^e \\ F_2^e \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad F_j^e = \int_{\Omega^e} f \phi_j^e dx + \phi^e(b)g, \quad j = 1, 2.$$

Montagem da Matriz de Rigidez

A montagem da matriz de rigidez \mathbf{K} e do vetor fonte global \mathbf{F} é feita através da soma em blocos das matrizes e vetores locais, respectivamente. Ou seja:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11}^1 & K_{12}^1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 + K_{11}^2 & K_{12}^2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & K_{21}^2 & K_{22}^2 + K_{11}^3 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & K_{22}^{N-1} + K_{11}^N & K_{12}^N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{21}^N & K_{22}^N \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_1^1 \\ F_2^1 + F_1^2 \\ F_2^2 + F_1^3 \\ \vdots \\ F_2^{N-1} + F_1^N \\ F_2^N + \textcolor{blue}{g} \end{bmatrix}$$

Condições de Contorno

A imposição das condições de contorno do problema estudado geram as seguintes modificações na matriz e no vetor de carga¹.

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & K_{22}^1 + K_{11}^2 & K_{12}^2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & K_{21}^2 & K_{22}^2 + K_{11}^3 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & K_{22}^{N-1} + K_{11}^N & K_{12}^N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{21}^N & K_{22}^N \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ F_2^1 + F_1^2 - \bar{\mathbf{u}}\mathbf{K}_{21}^1 \\ F_2^2 + F_1^3 \\ \vdots \\ F_2^{N-1} + F_1^N \\ F_2^N + g \end{bmatrix}$$

¹ detalhes a partir da pág. 52 do livro <http://www.dcc.ufrj.br/~rincon/MEF2016.pdf>

Exemplo

Seja o problema

Encontrar $u \in [0, 1]$, tal que

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = 1 \quad \text{em} \quad [0, 1]$$

$$u(0) = 0$$

$$u(1) = 0.5$$

Resolva o problema acima pelo método de elementos finitos utilizando uma aproximação linear em uma malha de 4 elementos.

Para tanto, necessitamos seguir os seguintes passos:

- ▶ definir os espaços das variáveis
- ▶ gerar uma formulação fraca
- ▶ aproximar a formulação fraca em espaços conformes
- ▶ definir as bases polinomiais
- ▶ gerar as matrizes e vetores locais
- ▶ montar o problema global
- ▶ impor condição de Dirichlet (se houver)
- ▶ resolver o sistema linear

Exemplo

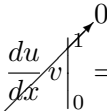
Definindo os espaços

$$\mathcal{U} = \{u \in H^1(\Omega); u(0) = 0 \text{ e } u(1) = 0.5\}$$

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega); v(0) = v(1) = 0\}$$

podemos apresentar a seguinte formulação fraca

Achar $u \in \mathcal{U}$, tal que


$$\int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx - \left. \frac{du}{dx} v \right|_0^1 = \int_{\Omega} 1 v dx, \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

Uma aproximação conforme para o problema fraco acima pode ser obtida nos espaços $\mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ e $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ e pode ser apresentada como

Achar $u_h \in \mathcal{U}_h$, tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h$$

onde

$$a(u_h, v_h) = \int_{\Omega} \frac{du_h}{dx} \frac{dv_h}{dx} dx \quad \text{e} \quad f(v_h) = \int_{\Omega} v_h dx$$

Exemplo

O domínio $[0, 1]$ é discretizado uniformemente em 4 elementos onde $h = 0.25$. Em cada elemento definimos as seguintes funções de base lineares

$$\phi_1^e = \frac{1}{h}(x - x_1^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_2^e = \frac{1}{h}(x_2^e - x), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_i^e = 0, \quad i = 1, 2 \quad \forall x \notin [x_1^e, x_2^e]$$

que dão origem a seguinte matriz e vetor em cada elemento e

$$K_{ij}^e = \begin{bmatrix} K_{11}^e & K_{12}^e \\ K_{21}^e & K_{22}^e \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx, \quad i, j = 1, 2.$$

$$F_j^e = \begin{bmatrix} F_1^e \\ F_2^e \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad F_j^e = \int_{\Omega^e} \phi_j^e dx, \quad j = 1, 2.$$

Elemento $e = 1$ (Matriz K_{ij}^1)

o elemento $e = 1$ está definido no intervalo $\Omega^1 = [0, 0.25]$, e os valores dos elementos da matriz K_{ij}^1 são calculados como segue

$$K_{11}^1 = \int_0^{0.25} \frac{d\phi_1^1}{dx} \frac{d\phi_1^1}{dx} dx = \int_0^{0.25} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = \left. \frac{x}{h^2} \right|_0^{0.25} = \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{12}^1 = \int_0^{0.25} \frac{d\phi_1^1}{dx} \frac{d\phi_2^1}{dx} dx = - \int_0^{0.25} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = - \left. \frac{x}{h^2} \right|_0^{0.25} = - \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{21}^1 = \int_0^{0.25} \frac{d\phi_2^1}{dx} \frac{d\phi_1^1}{dx} dx = - \int_0^{0.25} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = - \left. \frac{x}{h^2} \right|_0^{0.25} = - \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{22}^1 = \int_0^{0.25} \frac{d\phi_2^1}{dx} \frac{d\phi_2^1}{dx} dx = \int_0^{0.25} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = \left. \frac{x}{h^2} \right|_0^{0.25} = \frac{0.25}{h^2}$$

Como $h = 0.25$, então

$$K_{ij}^1 = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Elemento $e = 1$ (Vetor F_j^1)

Os valores do vetor força F_j^1 são calculados como segue

$$\begin{aligned} F_1^1 &= \int_0^{0.25} \phi_1^1 dx = \int_0^{0.25} \frac{1}{h} (0.25 - x) dx \\ &= \left(\frac{0.25x}{h} - \frac{x^2}{2h} \right) \Big|_0^{0.25} = \frac{(0.25)^2}{2h} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_2^1 &= \int_0^{0.25} \phi_2^1 dx = \int_0^{0.25} \frac{1}{h} (x - 0) dx \\ &= \frac{x^2}{2h} \Big|_0^{0.25} = \frac{(0.25)^2}{2h} \end{aligned}$$

Como $h = 0.25$, então

$$F_j^1 = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Elemento $e = 2$ (Matriz K_{ij}^2)

o elemento $e = 2$ está definido no intervalo $\Omega^2 = [0.25, 0.5]$, e os valores dos elementos da matriz K_{ij}^2 são calculados como segue

$$K_{11}^2 = \int_{0.25}^{0.5} \frac{d\phi_1^2}{dx} \frac{d\phi_1^2}{dx} dx = \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = \left. \frac{x}{h^2} \right|_{0.25}^{0.5} = \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{12}^2 = \int_{0.25}^{0.5} \frac{d\phi_1^2}{dx} \frac{d\phi_2^2}{dx} dx = - \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = - \left. \frac{x}{h^2} \right|_{0.25}^{0.5} = - \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{21}^2 = \int_{0.25}^{0.5} \frac{d\phi_2^2}{dx} \frac{d\phi_1^2}{dx} dx = - \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = - \left. \frac{x}{h^2} \right|_{0.25}^{0.5} = - \frac{0.25}{h^2}$$

$$K_{22}^2 = \int_{0.25}^{0.5} \frac{d\phi_2^2}{dx} \frac{d\phi_2^2}{dx} dx = \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = \left. \frac{x}{h^2} \right|_{0.25}^{0.5} = \frac{0.25}{h^2}$$

Como $h = 0.25$, então

$$K_{ij}^2 = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Elemento $e = 2$ (Vetor F_j^2)

Os valores do vetor força F_j^2 são calculados como segue

$$\begin{aligned} F_1^2 &= \int_{0.25}^{0.5} \phi_1^2 dx = \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} (0.5 - x) dx \\ &= \left(\frac{0.5x}{h} - \frac{x^2}{2h} \right) \bigg|_{0.25}^{0.5} = \frac{(0.25)^2}{2h} \\ F_2^2 &= \int_{0.25}^{0.5} \phi_2^2 dx = \int_{0.25}^{0.5} \frac{1}{h} (x - 0.25) dx \\ &= \left(\frac{x^2}{2h} - \frac{0.25x}{h} \right) \bigg|_{0.25}^{0.5} = \frac{(0.25)^2}{2h} \end{aligned}$$

Como $h = 0.25$, então

$$F_j^2 = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Elementos $e = 3$ e $e = 4$

Para os intervalos $\Omega^3 = [0.5, 0.75]$ e $\Omega^4 = [0.75, 1]$, geramos as seguintes matrizes

$$K_{ij}^3 = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad K_{ij}^4 = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

e vetores locais

$$F_j^3 = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad F_j^4 = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

A partir da derivação das matrizes e vetores locais podemos montar a matriz de rigidez \mathbf{K} e o vetor de carga \mathbf{F} contendo a informação de todos os elementos da malha.

Montagem do Problema Global

Somando em blocos as matrizes locais e o vetores locais, obtemos a matriz de rigidez e o vetor de carga, respectivamente

$$\mathbf{K} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

A dimensão do problema é da ordem de $k*N + 1$, onde k é o grau do polinômio e N o número de elementos da malha. Neste caso, $k = 1$ e $N = 4$, temos que $k*N + 1 = 5$.

Condições de contorno

A imposição das condições de Dirichlet

$$u(0) = 0 \quad \text{e} \quad u(1) = 0.5$$

é feita diretamente na matriz e no vetor global, como segue

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{0} & 2/h & -1/h & 0 & 0 \\ 0 & -1/h & 2/h & -1/h & 0 \\ 0 & 0 & -1/h & 2/h & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ h+\mathbf{0/h} \\ h \\ h+\mathbf{0.5/h} \\ \mathbf{0.5} \end{bmatrix}$$

Dessa forma devemos resolver o sistema linear

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F}$$

para encontrar os u_i que satisfazem a combinação linear

$$\sum_{i=1}^N u_i \phi_i$$

Solução do problema

Solucionando o sistema linear, obtemos o seguinte vetor solução:

$$\mathbf{u}_{aproximada} = [0, 0.2188, 0.3750, 0.4688, 0.50]^T$$

A solução exata para o problema em questão é dada por

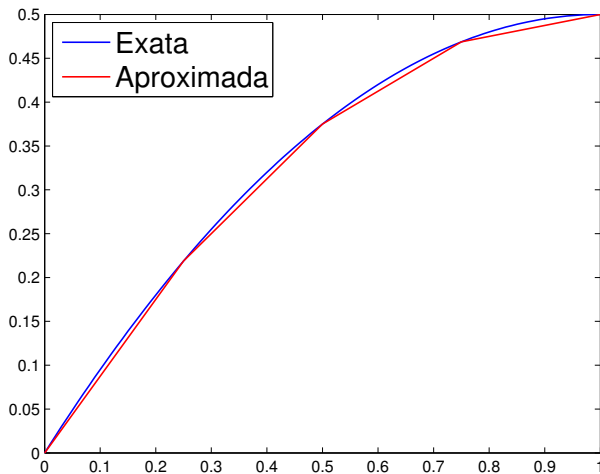
$$u(x) = -\frac{x^2}{2} + x$$

a solução exata avaliada nos nós da malha resulta nos seguintes valores

$$\mathbf{u}_{exata} = [0, 0.2188, 0.3750, 0.4688, 0.50]^T$$

O que mostra que o problema em questão resolvido pelo método de elementos finitos apresenta solução aproximada nodalmente exata.

Comparação Exata-Aproximada



Aproximação de Segunda Ordem

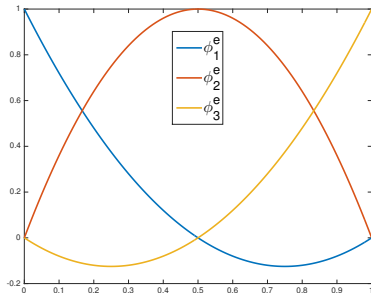
As funções de base locais ϕ_i^e são definidas em cada elemento $\Omega^e = [x_1^e, x_3^e]$ com $x_2^e \in \Omega^e$, onde

$$\phi_1^e = \frac{2}{h^2}(x - x_2^e)(x - x_3^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_3^e]$$

$$\phi_2^e = -\frac{4}{h^2}(x - x_1^e)(x - x_3^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_3^e]$$

$$\phi_3^e = \frac{2}{h^2}(x - x_1^e)(x - x_2^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_3^e]$$

$$\phi_i^e = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad \forall x \notin [x_1^e, x_3^e]$$



Aproximação de Ordem Geral

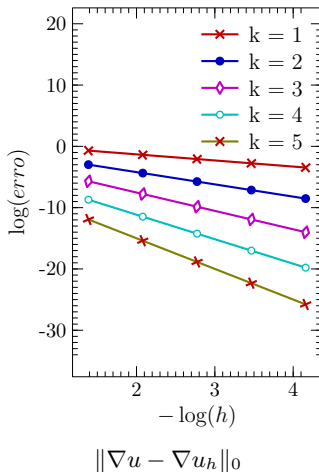
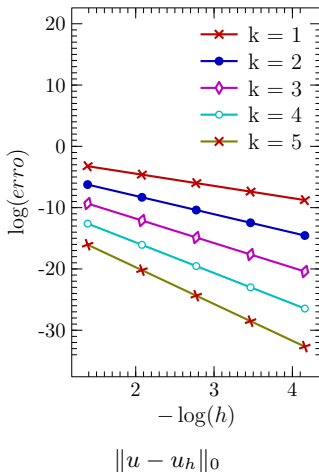
Para se obter uma forma geral das funções de base locais recordamos a função geral das funções de base de Lagrange que pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\phi_i^e(x) &= \frac{(x - x_1^e) \dots (x - x_{i-1}^e)(x - x_{i+1}^e) \dots (x - x_n^e)}{(x_i^e - x_1^e) \dots (x_i^e - x_{i-1}^e)(x_i^e - x_{i+1}^e) \dots (x_i^e - x_n^e)} \\ &= \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{(x - x_j^e)}{(x_i^e - x_j^e)}\end{aligned}$$

onde n é o número de nós do elemento.

Taxa de convergência

No domínio $\Omega = [0, 1]$, supondo a fonte $f = \pi^2 \sin(\pi x)$ cuja solução exata é $u(x) = \sin(\pi x)$, são apresentadas as taxas de convergência para diferentes ordens polinomiais em malhas de 4, 8, 16, 32, 64 elementos.



Implementação Computacional

A implementação do método de elementos finitos deve seguir os seguintes passos

- ▶ Definir um elemento de referência (comumente definido no intervalo de $[-1,1]$ para aplicar o método de integração numérica de Gauss)
- ▶ Definir as funções de forma (*shape functions*) no elemento de referência
- ▶ Calcular a integração numérica das funções de forma no elemento de referência
- ▶ Aplicar uma transformação isoparamétrica (transferência das informações do elemento de referência para o elemento da malha)
- ▶ Construir as matrizes locais
- ▶ Montar o problema global (matriz de Rigidez e vetor de Força)
- ▶ Resolver o sistema linear formado pela matriz e o vetor global

Quadratura de Gauss (Recordando...)

O método da Quadratura de Gauss tem por objetivo determinar numericamente o valor da integral definida de uma determinada função $f(x)$ através da fórmula de integração

$$I = \int_a^b f(x) \, dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \dots + w_n f(x_n)$$

Para exemplificar, a idéia do método é apresentada para o caso com 2 pontos

$$I = \int_a^b f(x) \, dx = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

Vamos considerar o intervalo $[-1, 1]$ para as regras de quadratura de Gauss, sem perda de generalidade, já que sempre podemos fazer uma mudança de variável para mudar do intervalo $[a, b]$ para $[-1, 1]$ para realizar a integração.

Antes de continuar, vejamos como podemos fazer essa mudança de intervalo.

Quadratura de Gauss (Recordando...)

Mudança de intervalo

Seja $x \in [a, b]$. Podemos fazer a seguinte mudança de variável

$$x(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}, \quad t \in [-1, 1]$$

Qualquer que seja $x \in [a, b]$, existe $t \in [-1, 1]$ tal que $x = x(t)$.
Sendo assim

$$\frac{dx}{dt} = x'(t) = \frac{b-a}{2} \Rightarrow dx = \frac{b-a}{2} dt$$

logo usando $x = x(t)$ e $dx = x'(t) dt$ temos

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f(x(t)) x'(t) dt = \int_{-1}^1 F(t) dt$$

onde $F(t) = f(x(t)) x'(t) = f\left(t \frac{(b-a)}{2} + \frac{b+a}{2}\right) \frac{b-a}{2}$

Quadratura de Gauss (Recordando...)

Logo, o objetivo é determinar

$$I = \int_{-1}^1 F(t) dt \approx w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1)$$

onde t_0, t_1, w_0 e w_1 são apresentados na Tabela

pesos		pontos	
w_0	1.0	t_0	$-\frac{\sqrt{3}}{3}$
w_1	1.0	t_1	$\frac{\sqrt{3}}{3}$

É importante ressaltar que a fórmula geral de quadratura de Gauss com os pontos t_0, t_1, \dots, t_n , tem grau de precisão polinomial dado por:

$$2n + 1$$

Por exemplo, se tivermos 2 pontos, isto é, t_0 e t_1 , a quadratura de Gauss tem precisão $2n + 1 = 2(1) + 1 = 3$. Isto indica que o método da quadratura de Gauss é capaz de integrar exatamente polinômios de grau ≤ 3 .

Elemento de Referência

Transformação isoparamétrica

Como estamos interessados em utilizar o método de integração numérica de Gauss, devemos definir o elemento de referência no intervalo fechado $[-1, 1]$.

Dessa forma, supondo um elemento de intervalo $[x_1^e, x_2^e]$ a mudança de variável para o intervalo $[-1, 1]$ do elemento de referência obedece a seguinte relação

$$x(t) = \frac{h}{2}t + \frac{x_2^e + x_1^e}{2}, \quad t \in [-1, 1]$$

onde $h = x_2^e - x_1^e$. Isolando t na equação acima, obtemos

$$t(x) = \frac{2x - x_1^e - x_2^e}{h}$$

a relação acima é conhecida como transformação isoparamétrica.

Elemento de Referência

Mudança de variável

Logo, o problema

$$K_{ij}^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx$$

pode ser reescrito no intervalo $[-1, 1]$ em termos da variável t aplicando a relação

$$\frac{d\phi_i^e}{dx} = \frac{d\phi_i}{dt} \frac{dt}{dx} = \frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h},$$

onde t é a transformação isoparamétrica, e

$$dx = \frac{h}{2} dt$$

para obter

$$K_{ij}^e = \int_{-1}^1 \left(\frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h} \right) \left(\frac{d\phi_j}{dt} \frac{2}{h} \right) \frac{h}{2} dt = \int_{-1}^1 F(t) dt$$

Elemento de Referência

Mudança de variável

Como

$$F(t) = \left(\frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h} \right) \left(\frac{d\phi_j}{dt} \frac{2}{h} \right) \frac{h}{2}$$

a aplicação do método de Gauss com 2 pontos para obtenção do valor da integral de $F(t)$ é dada por:

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = w_0 F(t_0) + w_1 F(t_1) = F\left(\frac{-\sqrt{3}}{3}\right) + F\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

Analogamente para o termo fonte local F_j^e , temos que

$$F_j^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} f(x) \phi_j^e dx = \int_{-1}^1 f(x(t)) \phi_j \frac{h}{2} dt = \int_{-1}^1 G(t) dt$$

Logo,

$$\int_{-1}^1 G(t) dt = G\left(\frac{-\sqrt{3}}{3}\right) + G\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right), \quad \text{com } G(t) = f(x(t)) \phi_j \frac{h}{2}$$

Elemento de Referência

Bases lagrangianas

No domínio de referência $[-1, 1]$, podemos definir os seguintes polinômios lineares

$$\phi_1(t) = \frac{1}{2}(1 - t), \quad \forall x \in [-1, 1]$$

$$\phi_2(t) = \frac{1}{2}(1 + t), \quad \forall x \in [-1, 1]$$

$$\phi_i(t) = 0, \quad i = 1, 2 \quad \forall x \notin [-1, 1]$$

ou quadráticos (interpolado nos pontos $-1, 0$ e 1)

$$\phi_1(t) = \frac{1}{2}t(t - 1), \quad \forall x \in [-1, 1]$$

$$\phi_2(t) = -(t - 1)(t + 1), \quad \forall x \in [-1, 1]$$

$$\phi_3(t) = \frac{1}{2}t(t + 1), \quad \forall x \in [-1, 1]$$

$$\phi_i(t) = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad \forall x \notin [-1, 1]$$

Exemplo

Resolver o problema

Encontrar $u \in [0, 1]$, tal que

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} = 1 \quad \text{em} \quad [0, 1]$$

$$u(0) = 0$$

$$u(1) = 0.5$$

pelo método de elementos finitos utilizando uma aproximação polinomial linear e integração numérica de Gauss com 2 pontos em uma malha de 4 elementos.

Para o problema acima uma aproximação conforme pode ser apresentada como

Achar $u_h \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$, tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$$

onde

$$a(u_h, v_h) = \int_{\Omega} \frac{du_h}{dx} \frac{dv_h}{dx} dx \quad \text{e} \quad f(v_h) = \int_{\Omega} v_h dx$$

Exemplo

Matrizes e Vetores locais

$$K_{ij}^e = \begin{bmatrix} K_{11}^e & K_{12}^e \\ K_{21}^e & K_{22}^e \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx, \quad i, j = 1, 2.$$

$$F_j^e = \begin{bmatrix} F_1^e \\ F_2^e \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad F_j^e = \int_{\Omega^e} \phi_j^e dx, \quad j = 1, 2.$$

A matriz K_{ij}^e é montada utilizando as contribuições do elemento de referência, como segue

$$\begin{aligned} K_{ij}^e &= \int_{\Omega^e} \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx = \int_{-1}^1 \left(\frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h} \right) \left(\frac{d\phi_j}{dt} \frac{2}{h} \right) \frac{h}{2} dt \\ &= \int_{-1}^1 \frac{d\phi_i}{dt} \frac{d\phi_j}{dt} \frac{2}{h} dt \end{aligned}$$

e as contribuições do vetor F_j^e vindas do elemento de referência, são

$$F_j^e = \int_{\Omega^e} \phi_j^e dx = \int_{-1}^1 \phi_j \frac{h}{2} dt$$

Exemplo

Motagem da matriz local

Os valores da matriz local K_{ij}^e são calculados como segue

$$K_{11}^e = \int_{-1}^1 \frac{d\phi_1}{dt} \frac{d\phi_1}{dt} \frac{2}{h} dt = \int_{-1}^1 \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{2}{h} dt = \frac{1}{2h} + \frac{1}{2h} = \frac{1}{h}$$

$$K_{12}^e = \int_{-1}^1 \frac{d\phi_1}{dt} \frac{d\phi_2}{dt} \frac{2}{h} dt = \int_{-1}^1 \left(-\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right) \frac{2}{h} dt = -\frac{1}{2h} - \frac{1}{2h} = -\frac{1}{h}$$

$$K_{21}^e = \int_{-1}^1 \frac{d\phi_2}{dt} \frac{d\phi_1}{dt} \frac{2}{h} dt = \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{2}{h} dt = -\frac{1}{2h} - \frac{1}{2h} = -\frac{1}{h}$$

$$K_{22}^e = \int_{-1}^1 \frac{d\phi_2}{dt} \frac{d\phi_2}{dt} \frac{2}{h} dt = \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right) \frac{2}{h} dt = \frac{1}{2h} + \frac{1}{2h} = \frac{1}{h}$$

Logo, a matriz local K_{ij}^e é dada por

$$K_{ij}^e = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Exemplo

Motagem do vetor local

Os valores do vetor local F_j^e são calculados como segue

$$\begin{aligned} F_1^e &= \int_{-1}^1 \phi_1 \frac{h}{2} dt = \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1-t) \frac{h}{2} dt \\ &= \frac{h}{4} \left[1 - \left(-\frac{\sqrt{3}}{3} \right) + 1 - \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \right) \right] = \frac{h}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_2^e &= \int_{-1}^1 \phi_2 \frac{h}{2} dt = \int_{-1}^1 \frac{1}{2}(1+t) \frac{h}{2} dt \\ &= \frac{h}{4} \left[1 + \left(-\frac{\sqrt{3}}{3} \right) + 1 + \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \right) \right] = \frac{h}{2} \end{aligned}$$

Assim, o vetor local é dado por

$$F_j^e = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Exemplo

Montagem do problema global

A partir das contribuições locais montamos a matriz de rigidez e o vetor força

$$\mathbf{K} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Incluindo as condições de contorno, geramos o sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2/h & -1/h & 0 & 0 \\ 0 & -1/h & 2/h & -1/h & 0 \\ 0 & 0 & -1/h & 2/h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ h+0/h \\ h \\ h+0.5/h \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

cujas solução é dada por

$$\mathbf{u} = [0, 0.2188, 0.3750, 0.4688, 0.50]^T$$

Algoritmo – Montagem do problema global

```
para  $n = 1 : nel$  faça
|    $Ke = 0; Fe = 0;$ 
|   para  $l = 1 : nint$  faça
|   |    $xx = 0;$ 
|   |   para  $i = 1 : nen$  faça
|   |   |    $xx = xx + shg(1, i, l) * xl(i);$ 
|   |   fim-para
|   |   para  $j = 1 : nen$  faça
|   |   |    $Fe(j) = Fe(j) + f(xx) * shg(1, j, l) * w(l) * \frac{h}{2};$ 
|   |   |   para  $i = 1 : nen$  faça
|   |   |   |    $Ke(i, j) =$ 
|   |   |   |    $Ke(i, j) + shg(2, i, l) * \frac{2}{h} * shg(2, j, l) * \frac{2}{h} * w(l) * \frac{h}{2};$ 
|   |   |   fim-para
|   |   fim-para
|   fim-para
|    $K = K + Ke; F = F + Fe;$ 
fim-para
```

Algoritmo

A variável $shg(i, j, k)$ guarda as informações da função de base do elemento de referência calculada nos pontos de Gauss, onde

- ▶ o primeiro parâmetro denota a função ($i = 1$) ou a derivada da função ($i = 2$) de base do elemento de referência.
- ▶ j são as funções de base, ou seja, varia de acordo com o número de nós do elemento (nen).
- ▶ k representa o número de pontos de integração de Gauss ($nint$).

Além disso,

- ▶ $w(l)$ guardam os pesos da integração de Gauss.
- ▶ $xl(i)$ denota os valores das coordenadas locais referente aos nós dos elementos (nen).
- ▶ Ke e Fe denotam as matrizes e vetores locais de dimensão nen .
- ▶ K e F a matriz e o vetor global de dimensão $k*nel + 1$.

Algoritmo – Montagem das funções de base *shg*

Caso particular com polinômio linear e 2 pontos de integração

se $nint==2$ **então**

$pt(1) = -0.577350269189625764509148780502;$

$pt(2) = 0.577350269189625764509148780502;$

$w(1) = 1.00000000000000000000000000000000;$

$w(2) = 1.00000000000000000000000000000000;$

fim-se

para $l = 1 : nint$ **faça**

$t = pt(l);$

se $nen==2$ **então**

$shg(1, 1, l) = (1.0 - t)/2.0;$

$shg(1, 2, l) = (1.0 + t)/2.0;$

$shg(2, 1, l) = -1.0/2.0;$

$shg(2, 2, l) = 1.0/2.0;$

fim-se

fim-para

Erro na norma L2

erro da função

```
erul2 = 0;
para n = 1 : nel faça
|
|   eru = 0;
|   para l = 1 : nint faça
|   |
|   |   uh = 0;
|   |   xx = 0;
|   |   para i = 1 : nen faça
|   |   |
|   |   |   uh = uh + shg(1,i,l) * u(i);
|   |   |   xx = xx + shg(1,i,l) * xl(i);
|   |   fim-para
|   |   eru = eru + ((exata(xx) - uh) ** 2) * w(l) *  $\frac{h}{2}$ ;
|   fim-para
|   erul2 = erul2 + eru;
fim-para
erul2 = sqrt(erul2);
```

Erro na norma L2

erro da derivada da função

erdul2 = 0;

para *n* = 1 : *nel* **faça**

erdu = 0;

para *l* = 1 : *nint* **faça**

duh = 0;

xx = 0;

para *i* = 1 : *nen* **faça**

duh = *duh* + *shg*(2, *i*, *l*) * $\frac{2}{h}$ * *u*(*i*);

xx = *xx* + *shg*(1, *i*, *l*) * *xl*(*i*);

fim-para

erdu = *erdu* + ((*dexata*(*xx*) - *duh*) * *2) * *w*(*l*) * $\frac{h}{2}$;

fim-para

erdul2 = *erdul2* + *erdu*;

fim-para

erdul2 = *sqrt*(*erdul2*);

Caso Geral com Coeficientes Variáveis

Seja o domínio espacial $\Omega = [a, b]$, dadas as funções $K(x) > 0$ e $f(x)$, encontrar $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$-\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{du}{dx} \right) = f(x) \quad \text{em } \Omega$$

suplementado por condições de contorno de Dirichlet:

$$u(a) = g_a,$$

$$u(b) = g_b,$$

e/ou de Neumann

$$K(a) \frac{du}{dx}(a) = q_a,$$

$$-K(b) \frac{du}{dx}(b) = q_b,$$

onde g_a, g_b, q_a, q_b são parâmetros dados.

Condição de Contorno de Robin

A combinação das condições de Dirichlet e Neumann dão origem as condições de Robin

$$\begin{aligned}K(a) \frac{du}{dx}(a) &= u(a) + q_a, \\ -K(b) \frac{du}{dx}(b) &= u(b) + q_b.\end{aligned}$$

Uma forma alternativa para a imposição das condições essenciais (Dirichlet) pode ser feita através de termos de penalização $\kappa_a \geq 0$ e $\kappa_b \geq 0$, como segue

$$\begin{aligned}K(a) \frac{du}{dx}(a) &= \kappa_a(u(a) - g_a) + q_a, \\ -K(b) \frac{du}{dx}(b) &= \kappa_b(u(b) - g_b) + q_b.\end{aligned}$$

Os parâmetros κ_a e κ_b tem por objetivo forçar a imposição da condição de Dirichlet.

Problema Modelo: Aplicações

O modelo

$$-\frac{d}{dx}(q) = f(x) \quad \text{em } \Omega,$$

encontra aplicações em diversas áreas, como:

- Fluxo de Calor. Neste caso u denota a temperatura,

$$q = -K(x) \frac{du}{dx}$$

a lei de Fourier, q o fluxo de calor e $K(x)$ a condutividade térmica.

- Barra Carregada Axialmente. Neste caso u denota o deslocamento,

$$q = -K(x) \frac{du}{dx}$$

a lei de Hooke, q a tensão e $K(x)$ o módulo de elasticidade.

Problema Modelo: Aplicações

O modelo

$$-\frac{d}{dx}(q) = f(x) \quad \text{em } \Omega,$$

encontra aplicações em diversas áreas, como:

- ▶ Escoamento em Meios Porosos. Neste caso u denota a pressão hidrostática,

$$q = -K(x) \frac{du}{dx}$$

a lei de Darcy, q a velocidade e $K(x)$ a condutividade hidráulica.

- ▶ Difusão Molecular. Neste caso u denota a concentração da espécie,

$$q = -K(x) \frac{du}{dx}$$

a lei de Fick, q o fluxo mássico da espécie e $K(x)$ o coeficiente de difusão molecular.

Formulação Fraca

Integrando no domínio Ω e multiplicando o problema modelo por uma função v , obtemos:

$$-\int_{\Omega} \left(\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{du}{dx} \right) + f \right) v \, dx = 0.$$

Integrando por partes o problema acima, obtemos

$$\int_{\Omega} K(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} \, dx - K(x) \frac{du}{dx} v \Big|_a^b = \int_{\Omega} f v \, dx$$

Supondo que u está no espaço

$$\mathcal{U} = \{u \in H^1(\Omega)\}$$

e v pertence ao espaço

$$\mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega)\}$$

Problema Fraco

Dessa forma, considerando os espaços definidos e a condição de Robin imposta sobre os pontos a e b , temos

$$\int_{\Omega} K(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx - \cancel{K(b) \frac{du}{dx}(b) v(b)} + \cancel{K(a) \frac{du}{dx}(a) v(a)} = \int_{\Omega} f v dx.$$

$\nearrow \kappa_b(u(b) - g_b) + q_b$ $\nearrow \kappa_a(u(a) - g_a) + q_a$

Assim podemos enunciar o seguinte problema variacional:

Encontrar $u \in \mathcal{U}$, tal que

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \mathcal{V}$$

com

$$a(u, v) = \int_{\Omega} K(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx + \kappa_a u(a) v(a) + \kappa_b u(b) v(b)$$

$$f(v) = \int_{\Omega} f v dx + (\kappa_a g_a - q_a) v(a) + (\kappa_b g_b - q_b) v(b)$$

Problema Aproximado

Aplicando uma aproximação conforme para o problema, $\mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$ e $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$, reescrevemos o problema variacional como segue

Achar $u_h \in \mathcal{U}_h$, tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h), \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h$$

com

$$a(u_h, v_h) = \int_{\Omega} \frac{du_h}{dx} \frac{dv_h}{dx} dx + \kappa_a u_h(a) v_h(a) + \kappa_b u_h(b) v_h(b)$$

$$f(v_h) = \int_{\Omega} f v_h dx + (\kappa_a g_a - q_a) v_h(a) + (\kappa_b g_b - q_b) v_h(b)$$

onde

$$\mathcal{U}_h = \mathcal{S}_h^k \cap \mathcal{U}, \quad \mathcal{V}_h = \mathcal{S}_h^k \cap \mathcal{V} \quad \text{e} \quad \mathcal{S}_h^k = \{v_h \in C^0(\Omega); v_h \in \mathbb{P}_k\}$$

Onde \mathbb{P}_k denota o polinômio de interpolação e k a ordem do polinômio.

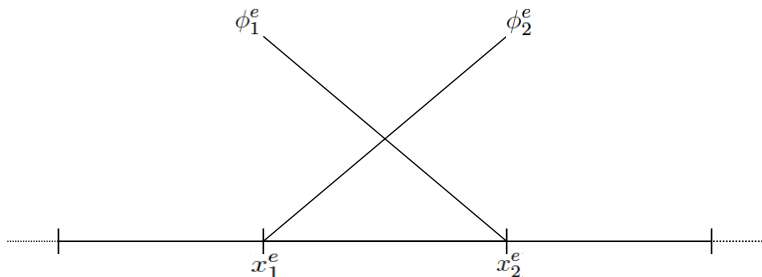
Problema Local

As funções de base locais ϕ_i^e são definidas em cada elemento $\Omega^e = [x_1^e, x_2^e]$, porém são análogas as funções globais e podem ser representadas na forma linear, para cada elemento Ω^e , como:

$$\phi_1^e = \frac{1}{h}(x_2^e - x), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_2^e = \frac{1}{h}(x - x_1^e), \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_i^e = 0, \quad i = 1, 2 \quad \forall x \notin [x_1^e, x_2^e]$$



Problema Local

Assim, a matriz local K_{ij}^e para o caso linear é dada por:

$$K_{ij}^e = \begin{bmatrix} K_{11}^e & K_{12}^e \\ K_{21}^e & K_{22}^e \end{bmatrix}$$

onde

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega^e} K(x) \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx + \kappa_a \phi_i^1(a) \phi_j^1(a) + \kappa_b \phi_i^N(b) \phi_j^N(b) \quad i, j = 1, 2,$$

e o vetor local $F_j^e = \begin{bmatrix} F_1^e \\ F_2^e \end{bmatrix}$ é dado por

$$F_j^e = \int_{\Omega^e} f \phi_j^e dx + (\kappa_a g_a - q_a) \phi_j^1(a) + (\kappa_b g_b - q_b) \phi_j^N(b) \quad j = 1, 2.$$

Montagem da Matriz de Rigidez

A montagem da matriz de rigidez \mathbf{K} e do vetor fonte global \mathbf{F} é feita através da soma em blocos das matrizes e vetores locais, respectivamente. Ou seja:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{11}^1 + \kappa_a & K_{12}^1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 + K_{11}^2 & K_{12}^2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & K_{21}^2 & K_{22}^2 + K_{11}^3 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & K_{22}^{N-1} + K_{11}^N & K_{12}^N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{21}^N & K_{22}^N + \kappa_b \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_1^1 + (\kappa_a g_a - q_a) \\ F_2^1 + F_1^2 \\ F_2^2 + F_1^3 \\ \vdots \\ F_2^{N-1} + F_1^N \\ F_2^N + (\kappa_b g_b - q_b) \end{bmatrix}$$

Condições de Contorno

Uma vez que a condição de Robin é uma combinação das condições de Dirichlet e Neumann, é possível impor nesta formulação, além da condição de Robin, as condições de Dirichlet e/ou Neumann como segue:

- ▶ Condição de Dirichlet:
 - ▶ zerar os termos relacionados a condição de Neumann q_a e/ou q_b ;
 - ▶ forçar a imposição de g_a e/ou g_b através dos parâmetros κ_a e/ou κ_b escolhendo valores suficientemente grandes (da ordem de 10^6 ou maior) a fim de se obter $u(a) \approx g_a$ e/ou $u(b) \approx g_b$.
- ▶ Condição de Neumann:
 - ▶ zerar os parâmetros κ_a e/ou κ_b relacionados a condição de Dirichlet;
 - ▶ zerando κ_a e/ou κ_b , apenas a condição de Neumann q_a e/ou q_b é adicionada a \mathbf{F} .

Estratégia de Resolução - Elemento de Referência

definindo o elemento de referência no intervalo $[-1, 1]$ e supondo um elemento de intervalo $\Omega^e = [x_1^e, x_2^e]$, temos:

$$K_{ij}^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} K(x) \frac{d\phi_i^e}{dx} \frac{d\phi_j^e}{dx} dx + \kappa_a \phi_i^1(a) \phi_j^1(a) + \kappa_b \phi_i^N(b) \phi_j^N(b) \quad i, j = 1, 2,$$

pode ser reescrito no intervalo $[-1, 1]$ em termos da variável t aplicando a relação

$$\frac{d\phi_i^e}{dx} = \frac{d\phi_i}{dt} \frac{dt}{dx} = \frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h}, \quad \text{e} \quad dx = \frac{h}{2} dt$$

para obter

$$\begin{aligned} K_{ij}^e &= \int_{-1}^1 K(x(t)) \left(\frac{d\phi_i}{dt} \frac{2}{h} \right) \left(\frac{d\phi_j}{dt} \frac{2}{h} \right) \frac{h}{2} dt \\ &\quad + \kappa_a \phi_i^1(a) \phi_j^1(a) + \kappa_b \phi_i^N(b) \phi_j^N(b) \\ &= \int_{-1}^1 F(t) dt + \kappa_a \phi_i^1(a) \phi_j^1(a) + \kappa_b \phi_i^N(b) \phi_j^N(b) \end{aligned}$$

Estratégia de Resolução - Elemento de Referência

Analogamente para o termo fonte local F_j^e , temos que

$$\begin{aligned} F_j^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} f(x) \phi_j^e dx + (\kappa_a g_a - q_a) \phi_j^1(a) + (\kappa_b g_b - q_b) \phi_j^N(b) \\ &= \int_{-1}^1 f(x(t)) \phi_j \frac{h}{2} dt + (\kappa_a g_a - q_a) \phi_j^1(a) + (\kappa_b g_b - q_b) \phi_j^N(b) \\ &= \int_{-1}^1 G(t) dt + (\kappa_a g_a - q_a) \phi_j^1(a) + (\kappa_b g_b - q_b) \phi_j^N(b) \end{aligned}$$

As funções $F(t)$ e $G(t)$ são integradas numericamente para gerar as contribuições da matriz e vetor fonte local, respectivamente.

Algoritmo – Montagem do problema global

```
para  $n = 1 : nel$  faça  
     $Ke = 0; Fe = 0;$   
    para  $l = 1 : nint$  faça  
         $xx = 0;$   
        para  $i = 1 : nen$  faça  
             $xx = xx + shg(1, i, l) * xl(i);$   
        fim-para  
        para  $j = 1 : nen$  faça  
             $Fe(j) = Fe(j) + f(xx) * shg(1, j, l) * w(l) * det(l);$   
            para  $i = 1 : nen$  faça  
                 $Ke(i, j) =$   
                     $Ke(i, j) + k(xx) * shg(2, i, l) * \frac{2}{h} * shg(2, j, l) * \frac{2}{h} * w(l) * \frac{h}{2};$   
            fim-para  
        fim-para  
    fim-para  
     $K = K + Ke; F = F + Fe;$   
fim-para
```

Exemplo

Seja o problema:

Dado $K(x) = (1 - x)^2$, encontrar $u \in [2, 8]$, tal que

$$-\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{du}{dx} \right) = x^2, \quad \text{em } [2, 8]$$

sujeito às seguintes condições de contorno

$$K(2) \frac{du}{dx}(2) = \kappa_a(u(2) + 1),$$

$$K(8) \frac{du}{dx}(8) = 0,$$

ou seja, condição de Dirichlet $u(2) = -1$ e condição de Neumann homogênea $K(8) \frac{du}{dx}(8) = 0$. Neste caso, a solução exata é dada por:

$$u(x) = 514/3 - \log(x - 1) - 511/(3x - 3) - x^2/6 - (2x)/3.$$

Exemplo: Comparação exata \times aproximada

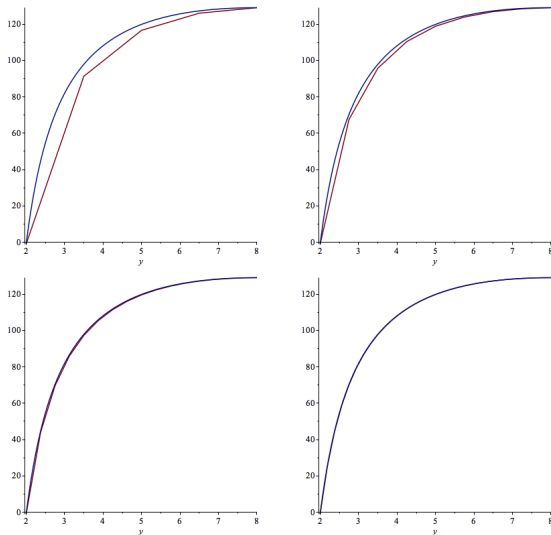


Figura: Comparação exata \times aproximada para malhas de $N = 4, 8, 16, 32$ elementos.

Exemplo: estudo de convergência

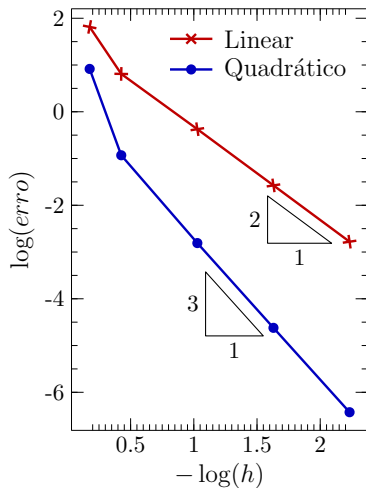


Figura: Erro na norma do máximo adotando $N = 4^i$ com $i = 1, 2, 3, 4, 5$ elementos.

Problema de Difusão Reação

Seja o domínio espacial $\Omega = [a, b]$, dado $K(x) > 0$, $\gamma(x)$ e $f(x)$, encontrar $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$-\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{du}{dx} \right) + \gamma(x)u = f(x) \quad \text{em } \Omega \quad (3)$$

+ condições de contorno.

- ▶ Para $\gamma(x) > 0$, o problema (3) é conhecido como problema de difusão reação;
- ▶ Para $\gamma(x) < 0$ e $K(x) = 1$, obtemos o problema de Helmholtz (equação da onda no domínio da frequência);
- ▶ Para $\gamma(x) = 0$, recuperamos o problema de difusão apresentado anteriormente.

Problema Particular

Tomando $K(x)$ igual a uma constante difusiva ε , $\gamma(x) = 1$ e $f = 1$, derivamos o seguinte problema:

Seja o domínio espacial $\Omega = [a, b]$, dado $\varepsilon > 0$, encontrar $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$-\varepsilon \frac{d^2 u}{dx^2} + u = 1 \quad \text{em } \Omega, \quad (4)$$

supondo condições de Dirichlet homogêneas ($u(a) = u(b) = 0$), obtemos a seguinte solução analítica para este problema:

$$u(x) = c_1 e^{-\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}} + c_2 e^{\frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}} + 1$$

$$\text{onde } c_1 = -1 - c_2 \text{ e } c_2 = \frac{e^{-\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}} - 1}{e^{\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}} - e^{-\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}}}.$$

Matrizes Elementares

Após aproximar o problema (4) pelo método de Galerkin, derivamos as seguintes matrizes, definidas em cada elemento e , associadas a difusão e a reação, respectivamente:

$$K^e = \frac{\varepsilon}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad M^e = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

e o vetor de carga

$$F^e = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Problema global $(\mathbf{K} + \mathbf{M})\mathbf{u} = \mathbf{F}$

$$\mathbf{K} = \frac{\varepsilon}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{M} = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Dividindo por h , o problema Global pode ser reescrito através do seguinte stencil

$$-\frac{\varepsilon}{h^2}(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) + \frac{1}{6}(u_{i-1} + 4u_i + u_{i+1}) = 1$$

Instabilidade Numérica

Quando os efeitos reativos sobrepõem os efeitos difusivos, o método se torna instável. Dessa forma, a estabilidade é garantida quando os efeitos difusivos são dominantes, ou seja

$$\frac{\varepsilon}{h^2} > \frac{1}{6},$$

ou ainda

$$h^2 < 6\varepsilon,$$

dando origem a seguinte relação de estabilidade

$$h < \sqrt{6\varepsilon}$$

Estudo da Instabilidade Numérica

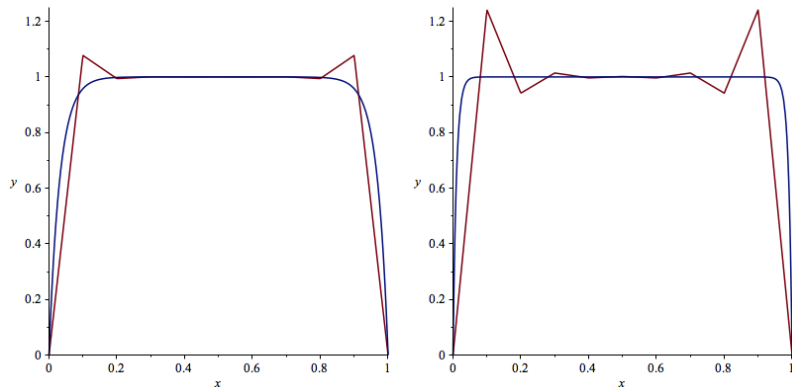


Figura: Comparação exata \times aproximada para $\varepsilon = 10^{-3}$ (esquerda) e $\varepsilon = 10^{-4}$ (direita) adotando uma malha de 10 elementos ($h = 1/10$).

Método Estável (Petrov-Galerkin²)

Outra alternativa para superar as instabilidades é a definição de funções peso específicas para o problema que estamos tratando. Neste contexto, definimos as seguintes funções de base:

$$\phi_1^{PG} = -\frac{e^{(x-x_2^e)/\sqrt{\varepsilon}} - e^{(x_2^e-x)/\sqrt{\varepsilon}}}{e^{(x_2^e-x_1^e)/\sqrt{\varepsilon}} - e^{(x_1^e-x_2^e)/\sqrt{\varepsilon}}}, \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_2^{PG} = \frac{e^{(x-x_1^e)/\sqrt{\varepsilon}} - e^{(x_1^e-x)/\sqrt{\varepsilon}}}{e^{(x_2^e-x_1^e)/\sqrt{\varepsilon}} - e^{(x_1^e-x_2^e)/\sqrt{\varepsilon}}}, \quad \forall x \in [x_1^e, x_2^e]$$

$$\phi_i^{PG} = 0, \quad i = 1, 2 \quad \forall x \notin [x_1^e, x_2^e]$$

- funções contínuas, quadrado integráveis (L^2) e de suporte compacto;

²Se diferencia do método de Galerkin devido a função de base relacionada as funções teste serem diferentes das funções de base relacionadas a função peso.

Funções de Base ϕ_i^{PG} (dependência com ε)

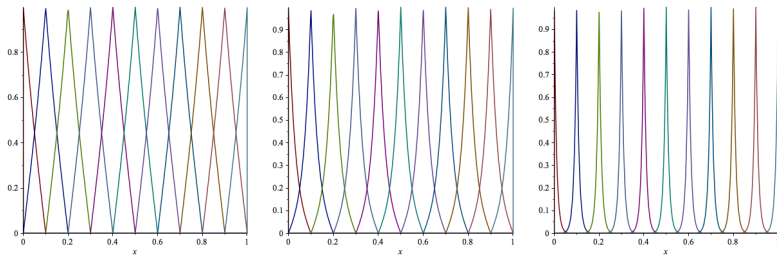


Figura: Funções de base com $\varepsilon = 10^{-2}$ (esquerda), $\varepsilon = 10^{-3}$ (centro) e $\varepsilon = 10^{-4}$ (direita).

Resultados Estáveis com funções peso ϕ_i^{PG}

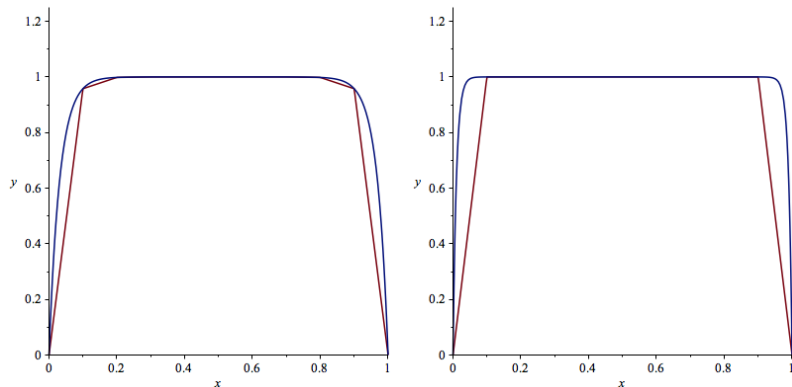


Figura: Comparação exata \times aproximada para $\varepsilon = 10^{-3}$ (esquerda) e $\varepsilon = 10^{-4}$ (direita) adotando uma malha de 10 elementos ($h = 1/10$).