Roteiro completo e entendível de Métodos de Elementos Finitos

Jhuan Cedro

7 de março de 2021

Sumário

Capítulo 1

Introdução

.

Capítulo 2

Essencial do cálculo?

Só relembrar umas coisas bem básicas e deixar muitas referências

- O que é divergente, gradiente, jacobiana, hessiana;
- Problemas de otimização de funções diferenciáveis;
- Integração por partes, teorema de Green e Gauss;
- (**álgebra linear**) Espaço vetorial, base, distância e norma.

Capítulo 3

Método dos Mínimos Quadrados

Os métodos de elementos finitos tem o objetivo de aproximar a solução de um problema diferencial por funções mais simples. Nessa linha, eles acabam recaindo em um método que tem o mesmo princípio, mas sem a parte diferencial. Apresentamos aqui a ideia do método de mínimos quadrados, pois ela será bem útil adiante.

Suponha que você possui um conjunto de dados ... Achar exemplo e figura (com N pontos)

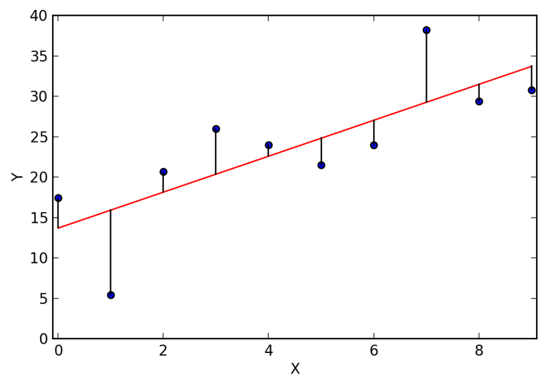

Figura 3.1: ...

Imagine que você queira encontrar uma função que descreve os seus dados. Porém, as observações nem sempre são precisas e podem conter erros. Além disso, pode ser que a função que você escolha pra representar seus dados não seja perfeita. Você pode escolher uma reta, uma equação do segundo grau, uma curva exponencial, e por aí vai. O método de mínimos quadrados se propõe a encontrar a função $f(x)$ que **melhor se aproxime** dos seus dados $y(x)$, **dentro de um conjunto de funções** de sua escolha.

Por exemplo, se você quiser encontrar a melhor reta que aproxima $y(x)$, você quer escolher $f(x)$ dentro do conjunto de polinômios de primeiro grau. Qualquer polinômio de primeiro grau pode ser escrito como:

$$p_1(x) = ax + b\,, \quad \forall\, a, b \in \mathbb{R}.$$

Portanto, podemos definir o conjunto de todos os polinômios de primeiro grau como:

$$\mathbb{P}_1 = \Big\{ p : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \;\Big|\; p(x) = ax + b\,, \forall a, b \in \mathbb{R} \Big\} \tag{3.1}$$

Então, nossa missão é encontrar a e b, de forma que $f(x) = p_1(x)$ seja a melhor aproximação possível de $y(x)$. Porém, precisamos definir que é ser melhor. Fazemos isso definindo o quanto uma função f erra ao tentar aproximar y. Por exemplo, em um ponto x_i o valor da sua função deveria ser y_i, mas na verdade é $f(x_i)$. Essa diferença entre o real e o aproximado é o que chamamos de erro:

$$\text{erro de } f \text{ no ponto } i = y_i - f(x_i)\,. \tag{3.2}$$

Essa forma de definir erro tem a desvantagem de existirem erros positivos e negativos. Como para nós é tudo erro, o sinal não interessa. Nesse método, consideraremos o erro quadrático, definido por:

$$\text{erro quadrático de } f \text{ no ponto } i = (y_i - f(x_i))^2\,. \tag{3.3}$$

Definimos a melhor função f como aquela que tem a menor soma dos erros quadráticos em todos os N pontos. Assim, temos um problema de **minimização funcional**, onde:

$$f = \text{polinômio } p_1 \text{ que minimize } \sum_{i=1}^{N} \big(y_i - p_1(x_i)\big)^2 \tag{3.4}$$

Mais formalmente:

$$f = \underset{p_1 \in \mathbb{P}_1}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} (y_i - p_1(x_i))^2 \tag{3.5}$$

Como sabemos que $p_1(x) = ax + b$, e também conhecemos todos os pontos x_i e y_i, podemos afirmar que o erro total depende apenas de a e b, ou seja:

$$\text{Erro}(a,b) = E(a,b) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - p_1(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - (ax_i + b))^2 \tag{3.6}$$

Por sorte, sabemos cálculo! Então sabemos que o ponto mínimo da função $\text{Erro}(a,b)$ ocorre, necessariamente, quando:

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial E}{\partial b} = 0\,.$$

Como o erro é um somatório, e sabemos que a derivada da soma é a soma das derivadas, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a} &= \frac{\partial}{\partial a}\left[\sum_{i=1}^{N} (y_i - (ax_i + b))^2\right] = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial a}\Big[(y_i - ax_i - b)^2\Big] = \sum_{i=1}^{N} \Big[2(y_i - ax_i - b)(-x_i)\Big] \\ &= 2\sum_{i=1}^{N} \Big[-x_i y_i + a x_i^2 + b x_i\Big] = 0 \quad \longrightarrow \quad a\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{N} x_i = \sum_{i=1}^{N} (x_i y_i) \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left[\sum_{i=1}^{N}(y_i - p_1(x_i))^2\right] = \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial a}\Big[(y_i - p_1(x_i))^2\Big] = \sum_{i=1}^{N}\left[2p_1(x_i)\frac{\partial p_1(x_i)}{\partial a}\right] \tag{3.8}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial b} &= \frac{\partial}{\partial b}\left[\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2\right] = \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial b}\Big[(y_i - ax_i - b)^2\Big] = \sum_{i=1}^{N}\Big[2(y_i - ax_i - b)(-1)\Big] \\ &= 2\sum_{i=1}^{N}\Big[-y_i + ax_i + b\Big] = 0 \quad \longrightarrow \quad a\sum_{i=1}^{N}x_i + b\sum_{i=1}^{N}1 = \sum_{i=1}^{N}y_i\end{aligned} \tag{3.9}$$

Juntando (3.8) e (3.9) podemos escrever o sistema matricial:

$$\begin{bmatrix} \displaystyle\sum_{i=1}^{N}x_i^2 & \displaystyle\sum_{i=1}^{N}x_i \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{N}x_i & N \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \displaystyle\sum_{i=1}^{N}x_iy_i \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{N}y_i \end{bmatrix} \tag{3.10}$$

Satisfazer o sistema assim é uma **condição necessária** para que um ponto (a, b) seja mínimo da função $E(a, b)$, mas ainda **não garante** que este ponto seja um mínimo local de E (menos ainda que seja global). Para garantir que encontramos um ponto (a, b) que minimize o erro, devemos olhar para as propriedades da matriz hessiana e da convexidade de E. Para não nos estendermos demais, assumiremos apenas que a solução de (3.10) minimiza o erro E. Mais detalhes podem ser encontrados em **??**.

Note que a escolha da função de erro é fundamental para o funcionamento do método. Poderíamos ter pensado em escolher o erro de f num ponto x_i como sendo, por exemplo, $|y_i - f(x_i)|$. Contudo, não teríamos uma função diferenciável (a função módulo tem "bicos") e não poderíamos aplicar essa tática de minimização, baseada em derivadas, que apresentamos.

Só pra garantir, vamos ver a **hessiana**:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 E}{\partial a^2} &= \frac{\partial}{\partial a}\left[2\sum_{i=1}^{N}(-x_iy_i + ax_i^2 + bx_i)\right] = 2\sum_{i=1}^{N}x_i^2 \\ \frac{\partial}{\partial a}\frac{\partial E}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\frac{\partial E}{\partial a} &= \frac{\partial}{\partial b}\left[2\sum_{i=1}^{N}(-x_iy_i + ax_i^2 + bx_i)\right] = 2\sum_{i=1}^{N}x_i \\ \frac{\partial^2 E}{\partial b^2} &= \frac{\partial}{\partial b}\left[2\sum_{i=1}^{N}(-y_i + ax_i + b)\right] = 2N\end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\mathbf{H}_E = 2\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N} x_i^2 & \sum_{i=1}^{N} x_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i & N \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \det \mathbf{H}_E = 2\left[N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2\right] \geq 0 \tag{3.12}$$

Caso exista ao menos um ponto $x_i \neq 0$, então podemos afirmar que $\det \mathbf{H}_E > 0$. Segundo Diva Flemming, se $\det \mathbf{H}_E > 0$ e $\frac{\partial^2 E}{\partial a^2}$ em um ponto (a, b), então este ponto é um mínimo local de E. Se E for convexa ($\mathbf{H}_E$ é positiva semi-definida), garantimos que esse mínimo é global.

Essa parte da Hessiana pode ficar de fora, ou ir para algum apêndice. Até porque, se for provar pro caso geral vai ser um inferno.

Partiu falar do caso geral?

- O que são resíduos ponderados?
- O que são métodos de regressão?
- Falar de projeção e espaços

Capítulo 4

Interpolação

4.1 Interpoladores de Lagrange

Capítulo 5

Problema exemplo I

5.1 Formulação fraca

O que é projeção e o que é formulação variacional?

5.2 Aproximação polinomial

5.3 Elemento de referência

Qual o melhor momento pra falar disso? Primeiro dá um exempli e depois estende com jacobiana e tudo mais?

Capítulo 6

Métodos de Elementos Finitos

Métodos de elementos finitos são técnicas numéricas para a resolução de equações diferenciais estacionárias. Estas consistem principalmente na discretização do domínio físico do problema em diversos subdomínios (elementos) sobre os quais são obtidas aproximações para a solução do problema **?**.

Na Figura 6.1 é mostrado o exemplo de uma discretização de um domínio unidimensional Ω em quatro subdomínios Ω_{e_1} a Ω_{e_4}. Nesta Figura, é representada a solução u do problema em questão.

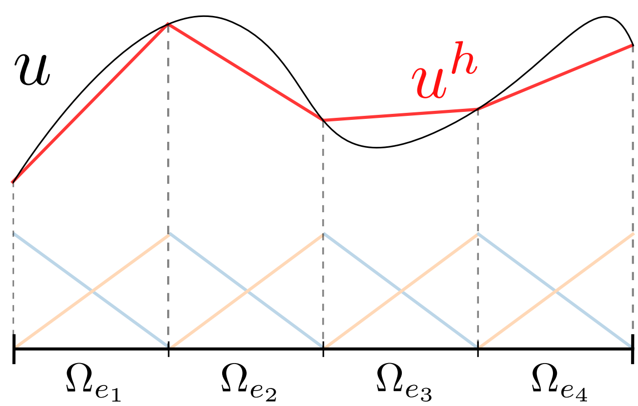

Figura 6.1: Exemplo de discretização de um domínio unidimensional $\Omega = \bigcup_{i=1}^{4} \Omega_{e_i}$, onde u é a solução analítica do problema e u_h é a solução aproximada por um método de elementos finitos.

A aproximação de u, denotada por u_h, é obtida a partir da combinação linear de funções de uma base definida em cada subdomínio Ω_{e_i}. Frequentemente são adotadas funções polinomiais, mais especificamente, bases de Lagrange. No exemplo da Figura 6.1 são mostradas, em azul e laranja, bases do espaço de polinômios lineares.

Os polinômios de uma base de Lagrange de ordem p são obtidos a partir de $p+1$ pontos de referência do domínio (x_i, $i \in [1, p+1]$). A base é constituída por $p+1$ polinômios $\phi_i^p(x)$ definidos por (6.1).

$$\phi_i^p(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{p+1} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad \begin{array}{c} x_a \neq x_b \Leftrightarrow a \neq b \\ 1 \leq i, j \leq p+1 \end{array} \tag{6.1}$$

As Figuras 6.2 a 6.4 ilustram as funções de Lagrange para algumas ordens de polinômios. Cabe observar que $\phi_i^p(x_j)$ é unitário se $i = j$ e nulo se $i \neq j$. Bases de ordens mais altas apresentam maior capacidade de aproximar a solução, possibilitando a melhoria das aproximações pelo que se denomina refinamento p.

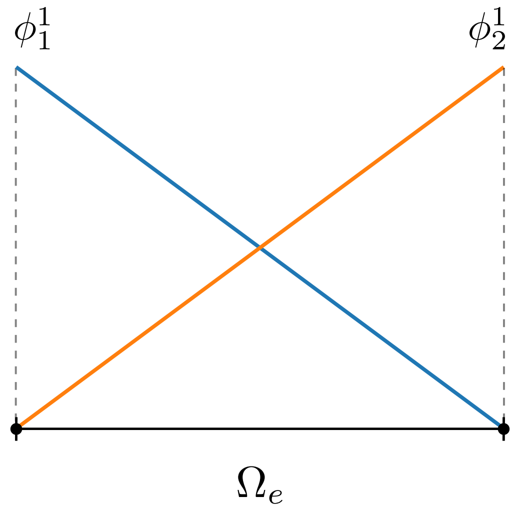

Figura 6.2: Polinômios de Lagrange de ordem $p = 1$.

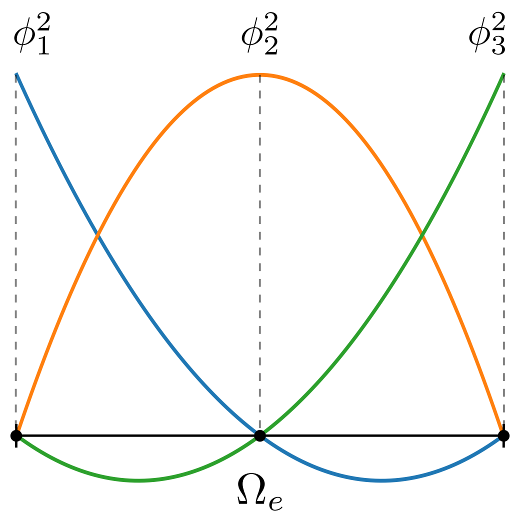

Figura 6.3: Polinômios de Lagrange de ordem $p = 2$.

A partir destas discretizações é possível aproximar a solução u por uma combinação linear de uma base de Lagrange com coeficientes, obtendo-se u_h:

$$u(x) \approx u^h(x) = \sum_{i=1}^{p+1} \psi_i \phi_i^p(x), \quad \psi_i \in \mathbb{R} \tag{6.2}$$

Os métodos de elementos finitos são obtidos a partir da adoção de uma formulação fraca para a equação diferencial do problema e da discretização da variável de interesse e sua função

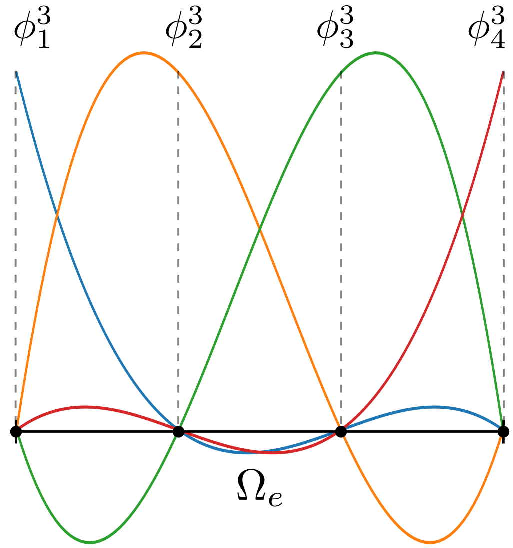

Figura 6.4: Polinômios de Lagrange de ordem $p = 3$.

de ponderação em cada elemento do domínio. Comumente os modelos recaem em resolução e sistemas de equações. Na formulação apresentada para o problema deste trabalho, obtém-se um equação de autovalores generalizados (Seção **??**).