RELATÓRIO FINAL DE ATIVIDADES DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Análise de Estimativa de Erros à Posteriori no Método de Elementos Finitos em Meios Contínuos: Uma Abordagem Unidimensional

vinculado ao projeto

Estudo Numérico-Computacional de Uma Abordagem em Meio Contínuo Unidimensional (Sólido) com Estimativa de Erro à Posteriori Via MEF (Método de Elementos Finitos)

Luis Henrique Hatashita ☑

Voluntário PIVIC

Engenharia Mecânica

Data de Ingresso no Programa: 05/2021

Prof. Dr. Hilbeth Parente Azikri de Deus ☑

Área do Conhecimento: 3.05.01.04-0 — Principios Variacionais e Métodos Numéricos

LUIS HENRIQUE HATASHITA HILBETH PARENTE AZIKRI DE DEUS

ANÁLISE DE ESTIMATIVA DE ERROS À POSTERIORI NO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS EM MEIOS CONTÍNUOS: UMA ABORDAGEM UNIDIMENSIONAL

> Relatório de Pesquisa do Programa de Iniciação Científica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

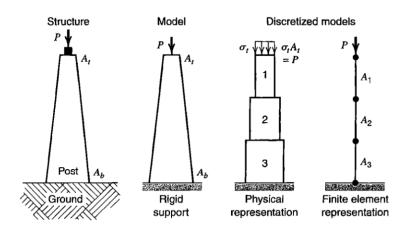
SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	3
MATERIAIS E MÉTODOS	5
RESULTADOS E DISCUSSÃO	9
CONCLUSÕES	17
AGRADECIMENTOS	17
REFERÊNCIAS	17

INTRODUÇÃO

É raro não encontrar um projeto de engenharia que exija uma simulação numérica, por exemplo pela análise de elementos finitos (AEF) como forma de validação. Sendo que a AEF agrega soluções de problemas de diversas origens, como análise de tensão e deformação, condução de calor, campos elétricos e magnéticos e entre outros [1]. Ademais, tem como principal método, o dos elementos finitos (MEF), o qual é uma ferramente recorrentemente utilizada para aproximações numéricas de equações diferenciais parciais [2], vide Figura 1. Dentre as obras de consulta, mencionam-se a de Ciarlet [3] como referência clássica ao tema e as de Galvis e Versieux [2] e Logg e Mardal [4] a título de introdução matemática.

Figura 1. Modelização em Elementos Finitos [5, p. 5].



Num contexto matemático simples, tal método se baseia na formulação variacional de equações diferenciais elípticas, cujas soluções podem ser descritas em espaços funcionais chamados de espaços de Sobolev, através da minimização em subespaços de dimensões finitas [6]. Haja vista tais enunciados, deve-se ressaltar ao leitor a importância de tomar conhecimento do campo de análise funcional, cujos resultados são necessários para a soluções dos problemas supracitados tanto em análises clássicas ou aplicadas [7]. E dado que uma das principais vantagens do MEF sobre o método de diferenças finitas (MDF) é o seu formalismo matemático [8], recomenda-se como leitura as obras de Atkinson [9], Brenner [8], Dautray [10] e Sobolev [11].

Apesar de todo o formalismo, as aproximações numéricas utilizadas possuem erros numéricos intrínsecos, visto que o processo de discretização do meio contínuo não é capaz de capturar todas as informações oriundas das equações integro-diferenciais [12]. Outrossim, as aproximações ainda podem ter seus resultados deteriorados em determinadas regiões, como singularidades. Portanto, torna-se necessário determinar e avaliar a exatidão das soluções numéricas de forma confiável [13].

Haja vista a problemática dos erros numéricos e a necessidade de mensurá-los e controlá-los, surgem as linhas de pesquisa referentes à estimativa de erro e adaptatividade de elementos (para reduzir a deterioração das aproximações em singularidades, por exemplo). Sendo que já são aplicadas atualmente a um determinado nível em que as estimativas são econômicas e confiáveis [1].

Dentre os dois grandes grupos de estimadores de erro, Logg e Mardal [4] condensam-os nas seguintes definições:

$$e = e(u), (1)$$

$$e = e\left(u_h\right),\tag{2}$$

onde u é a solução explícita e u_h é a solução discreta. E portanto, as expressões para estimar o erro total da aproximação é função ora da solução explícita para os estimadores a priori, ou ora da solução discreta para os a posteriori.

Em suma, os estimadores de erro *a priori* normalmente fornecem somente resultados referentes a convergência, estabilidade e breves informações do comportamento assintótico do erro [12]. Enquanto os *a posteriori* permitem determinar e calcular contribuições locais de erro, o que ainda permite associá-los a técnicas de adaptatividade. Assim, a exatidão da solução numérica é correlacionada a uma perturbação do problema original [14]. Tendo-se como sua principal vantagem a possibilidade de determinar o quão adequada é uma solução, mesmo sem um problema *benchmark* para comparação [15].

Como recomendação de leitura e consulta, recomendam-se ao leitor inicialmente, para um panorama geral do tema e uma listagem dos artigos clássicos, o artigo de Ladevèze e Moës [16], sendo que nele, são mencionados alguns dos artigos já mencionados como [14] e [15]. Posteriormente, tendo posto a contextualização, os principais resultados e dedução são referenciados de Ainsworth e Oden [12] (uma abordagem completa) e Logg e Mardal [4] (uma abordagem introdutória).

Por conseguinte, define-se um problema de estudo a fim de explorar e compreender a metodologia do MEF e os resultados oriundos do estimador de erros *a posteriori*. Conforme supracitado [1, 2], a modelagem de problemas de diversas áreas (como física, engenharia, biologia, finanças e entre outros) é feita por intermédio de equações integro-diferenciais.

Tem-se como um exemplo a equação de Laplace [17, 18], cuja interpretação física reside na densidade de determinada quantidade em equilíbrio e que seu fluxo líquido através de uma região é zero. Portanto, tal fluxo é proporcional ao gradiente da densidade, conforme descrita por $\mathbf{F} = -aDu$ (a > 0). Como exemplos, mencionam-se as aplicações de tal equação na Tabela 1:

uNome da EquaçãoConcentração QuímicaLei de Difusão de FickTemperaturaLei de Condução de Calor de FourierPotencial eletrostáticoLei de Condução Elétrica de Ohm

Tabela 1. Aplicações da equação de Laplace [18].

Dada a importância das equações diferenciais ordinárias e parciais, e suas respectivas aplicações, realizando a modelização de fenômenos físicos, utiliza-se como problema modelo o laplaciano de uma dimensão com condição de contorno de Dirichlet [2], descrito conforme:

Encontrar
$$u : [0,1] \to \mathbb{R}$$
 tal que
$$\begin{cases}
-u''(x) = -1, & \text{para } 0 < x < 1, \\
u(0) = 1, u(1) = 1.
\end{cases}$$
(3)

Explicitamente, definem-se como objetivo geral: realizar um estudo numérico-computacional de uma abordagem em um meio contínuo unidimensional (sólido) com estimativa de erros à posteriori via MEF, e como os objetivos específicos:

- desenvolver o equacionamento para o modelo teórico em meios contínuos via MEF;
- implementar e validar o código computacional para o meio contínuo elaborado;
- deduzir e derivar o estimador de erro, aplicado ao problema em meio contínuo;
- aplicar o estimador de erro elaborado para o refinamento de malha h adaptativo.

Por fim, haja vista a introdução ao tema apresentada, esclarece-se a estrutura do relatório como: uma seção de materiais e métodos com as definições de pesquisa e as respectivas deduções, em seguida uma seção de resultados e discussão, apresentando todos os resultados quantitativos e qualitativos referentes ao estimador de erro, e finalmente, fecha-se com as conclusões.

MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia a ser aplicada consiste numa análise quantitativa dos resultados, comparando os tipos de refinos de malha, e numa análise qualitativa para a validação do estimador de erro empregado contrastado com outro. A Figura 2 apresenta a rotina de execução para a resolução do problema e a implementação do refino do tipo h-adaptativo.

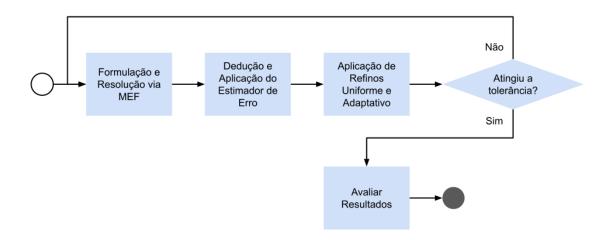


Figura 2. Rotina de resolução do problema e implementação do refino adaptativo.

Tal rotina será utilizada para avaliar os resultados independentemente dos parâmetros de entrada escolhidos no processo de implementação numérica. E ao longo da execução das análises quantitativa e qualitativa, nas quais os respectivos parâmetros serão variados dentro de um intervalo pré-definido, manter-se-á o mesmo procedimento.

Portanto, tendo posto o método base, posteriormente, realizar-se-á a verificação da conformidade e consistência dos resultados a fim de constatar a veracidade das hipóteses da pesquisa em questão, são elas:

- 1. o estimador de erro *a posteriori* garante uma aproximação adequada da solução numérica;
- 2. o refino h-adaptativo apresenta uma melhoria na performance da aproximação numérica.

Materiais. Dentre os materiais utilizados para a execução do projeto, devem-se destacar apenas o requisitado para a implementação numérica, visto que as demais etapas de formulação e dedução não exigem ferramentas específicas, exceto de uma revisão bibliográfica.

O estudo computacional é realizado no ambiente da linguagem de programação *Python*, dado que a mesma permite uma rápida implementação, replicabilidade e acima de tudo inteligibilidade do código [19].

Menciona-se por fim que utilizou-se como ambiente de desenvolvimento integrado a plataforma *Spyder*, ideal para análises científicas [20]. E a título de menção, recomenda-se em caso de prosseguimento na mesma linha de pesquisa, familiarizar-se com as bibliotecas *Numpy* e *Matplotlib*, amplamente utilizadas neste e em outros projetos [21, 22].

Métodos. Haja vista o contexto geral da metodologia aplicada e dos materiais utilizados, inicia-se a exposição dos métodos. Aponta-se as etapas para o postulado da resolução do problema e implementação do estimador de erro *a posteriori*, tendo a seguinte divisão:

- 1. formulação MEF:
 - (a) formulação variacional;
 - (b) definição da base nodal, aproximações e funções de forma;
 - (c) sistema linear para a resolução do problema;
- 2. dedução do estimador de erro *a posteriori*:
 - (a) dedução do estimador de base;
 - (b) dedução do segundo estimador para comparação;
- 3. implementação numérica:
 - (a) definição de parâmetros.

MEF. Por conseguinte, inicia-se a formulação do problema via MEF [2], com a obtenção da formulação variacional ou fraca. Multiplicando a Equação 3 por uma função v qualquer pertencente a V_0 , onde $V_0 = \{v \in V[0,1]; \ v(0) = v(1) = 1\}$, obtém-se a Equação 4.

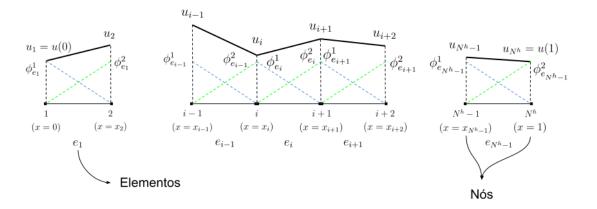
Encontrar
$$u : [0,1] \to \mathbb{R}$$
 tal que
$$\begin{cases}
-\int_0^1 u'' v \, dx = -\int_0^1 v \, dx, & \forall v \in V_0, \\
u(0) = 1, u(1) = 1,
\end{cases}$$
(4)

e realizando a integração por partes, vem:

Encontrar
$$u : [0,1] \to \mathbb{R}$$
 tal que
$$\begin{cases} \int_0^1 u'v' \, dx = -\int_0^1 v \, dx, & \forall v \in V_0, \\ u(0) = 1, u(1) = 1, \end{cases}$$
(5)

Previamente ao seguimento da formulação, deve-se apresentar a nomenclatura utilizada para a descrição do domínio na Figura 3. Onde tem-se N^h nós e consequentemente, N^h-1 elementos (notação simplificada de N_e), e para o elemento e_i , denota-se seus respectivos nós i e i+1, dada a indexação à esquerda.

Figura 3. Esquemático e nomenclatura do domínio.



Adiante, definem-se os elementos necessários para a obtenção da solução discreta proveniente das aproximações [8]. Como base nodal, denota-se $\{\phi_i: 1 \le i \le N^h\}$. E associadas a base nodal, descrevem-se as funções de forma lineares de Lagrange para um elemento $K \in T^h$

qualquer, cujos nós são a e b, conforme a Equação 6:

$$\phi_1 = \frac{b - x}{b - a},$$

$$\phi_2 = \frac{x - a}{b - a}.$$
(6)

Isto posto, define-se a aplicação de Galerkin para $u^h \in V_0^h$, a qual se estende para v^h :

$$u^h = \sum_{j=1}^{N^h} \alpha_j \phi_j. \tag{7}$$

Substituindo as aproximações provenientes da Equação 7 no sistema da Equação 5, vem:

$$\sum_{j=1}^{N^h} \alpha_j \int_0^1 (\phi_j)' (\phi_i)' dx = -\int_0^1 (\phi_i) dx, \quad \forall i \in \{1, 2, ..., N^h\}.$$
 (8)

Realiza-se então a transformação de coordenadas global para local, a fim de simplificar as integrações múltiplas. E com o auxílio da integração numérica, obtém-se o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} \dots & \dots & & & & \\ \dots & 2.B^{-1} & B^{-1} & 0 & & \\ -B^{-1} & 2.B^{-1} & -B^{-1} & & \\ 0 & -B^{-1} & 2.B^{-1} & \dots & & \\ & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \dots & & & \\ \alpha_{i} & & & \\ \alpha_{i+1} & & & \\ \alpha_{i+2} & & & \\ \dots & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dots & & \\ -B & & \\ -B & & \\ \dots & & \end{pmatrix},$$
(9)

onde a cada linha, tem-se um novo elemento, cujo $B_{e_i} = (x_{i+1} - x_i)$. Deve-se posteriormente adicionar as condições de contorno às linhas 1 e N^h . Por fim, dado o sistema sob a forma $A\alpha = b$, visa-se obter α para enfim aplicar a Equação 7.

Estimador de erros *a posteriori*. À vista disso, realiza-se a dedução do estimador de erros *a posteriori* a ser utilizado em paralelo a um segundo à título da análise qualitativa de comparação. O contexto da expressão do estimador surge da Equação 4, a qual pode ser descrita como $B(u,v) = L(v) \ \forall v \in V_0$. Utiliza-se o artifício da ortogonalidade de Galerkin [4], onde $e = u - u^h$:

$$B(e,v) = B(u - u^h, v) = B(u,v) - B(u^h, v) = L(v) - B(u^h, v) \quad \forall v \in V_0.$$
 (10)

Expande-se a Equação 10 e utiliza-se a desigualdade de Cauchy-Scharwz [4] para obter a expressão do estimador de erro *a posteriori*. Dedução completa para problema semelhante, encontra-se em [12].

$$B(e,e) = ||e||^2 \le C \sum_{K \in T_h} \left\{ h_h^2 ||r||_{L_2(K)}^2 + h_h ||R||_{L_2(\partial K)}^2 \right\}. \tag{11}$$

Conforme Ainsworth e Oden [12], o termo de erro residual interno r é descrito para um elemento e_i :

$$||r||_{L_2(e_i)}^2 = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[-1 + \frac{d^2}{dx^2} \left(u_i \phi_{e_i}^1 + u_{i+1} \phi_{e_i}^2 \right) \right]^2 dx, \tag{12}$$

e do termo residual de fronteira ou borda *R* para o mesmo elemento, vem:

$$||R||_{L_{2}(\partial e_{i})}^{2} = \left[-\frac{d}{dx} (u_{i}\phi_{e_{i}}^{1} + u_{i+1}\phi_{e_{i}}^{2}) + \frac{d}{dx} (u_{i-1}\phi_{e_{i-1}}^{1} + u_{i}\phi_{e_{i-1}}^{2}) \right]_{x=x_{i}}^{2} + \left[-\frac{d}{dx} (u_{i+1}\phi_{e_{i+1}}^{1} + u_{i+2}\phi_{e_{i+1}}^{2}) + \frac{d}{dx} (u_{i}\phi_{e_{i}}^{1} + u_{i+1}\phi_{e_{i}}^{2}) \right]_{x=x_{i+1}}^{2}.$$

$$(13)$$

Ademais, para o segundo estimador, utiliza-se de um artifício de aplicação de um operador adjunto Φ à Equação 11 [12].

$$||e||_{L_2(\Omega)}^2 = B(e, \Phi_e),$$
 (14)

onde, com auxílio de outros teoremas, obtém-se a expressão para o estimador mais convergente:

$$||e||_{L_2(\Omega)}^2 \le C \sum_{K \in P} \left\{ h_K^4 ||r||_{L_2(K)}^2 + h_K^3 ||R||_{L_2(\partial K)}^2 \right\}. \tag{15}$$

Implementação numérica. Mencionada previamente na seção de materiais utilizados, dessarte, ressalta-se a possibilidade de colaboração em Hatashita [23]. Haja vista a dedução do equacionamento a ser implementado computacionalmente, descrevem-se portanto os parâmetros utilizados para ocasionar e mensurar as variações nas soluções numéricas. São eles, de entrada e de saída, respectivamente. Subdividem-se de acordo com sua definição e forma de obtenção e suas respectivas funções no sistema.

Como parâmetros de entrada, os quais oferecem influência sobre os resultados finais obtidos, destacam-se:

- 1. $N_{e,0}$: número de elementos inicial;
- 2. tol_e: tolerância de erro individual.

A Tabela 2 apresenta os intervalos de parâmetros de entrada a serem avaliados ao longo da exploração dos resultados:

Tabela 2. Parâmetros de entrada para avaliar consistência dos resultados.

Números de elementos inicial	Tolerância de erro individual
5	0,01
10	0,005
25	0,001
50	0,0005
100	0,0001

Observar-se-á posteriormente que $N_{e,0}$ terá uma interferência superior no erro total $\sum \eta_K$, enquanto tol $_e$ resultará numa variação de tempo total gasto. E conforme mencionado alguns dos parâmetros de saída, elaboram-se tais, os quais quantificam não só a qualidade de solução como o gasto computacional associado.

- 1. Qualidade de solução:
 - (a) N_e : número de elementos final;
 - (b) $\sum \eta_K$: erro total do estimador:
 - i. erro absoluto [%];
 - ii. erro relativo [%];
- 2. Gasto computacional:
 - (a) número de iterações para atingir a tolerância definida;
 - (b) t: tempo gasto [s].

Por fim, dentre os parâmetros de saída, destacam-se o erro total, o qual será utilizado para avaliar a qualidade de solução, comparando estimadores e tipos de refino, e o tempo gasto como forma de mensurar o gasto computacional associado.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Observam-se as etapas apresentadas referentes ao métodos a serem aplicados a fim de obter as análises quantitativas e qualitativas dos resultados do estimador de erro *a posteriori* e do refino adaptativo do tipo h. Acresce-se a tal descritivo as macro etapas a serem expostas e discutidas:

- 1. comportamento de base do estimador e refinos;
- 2. comparação entre estimadores;
- 3. comparação dos refinos;
- 4. influência dos parâmetros de entrada:
 - (a) $N_{e,0}$;
 - (b) tol_e ;
- 5. síntese geral.

Deve-se ressaltar que para todos os resultados a serem apresentados, todas as etapas dos métodos expostas anteriormente são executadas, exceto pelas deduções, *i.e.*, cada iteração do problema resolve o problema pelo MEF, aplica o estimador de erro e posteriormente realiza o refino uniforme e adaptativo até que a tolerância seja atingida, reiterando esse processo até tal.

Comportamento de base. Haja vista o descritivo dos parâmetros de entrada e seus respectivos intervalos. Define-se inicialmente o primeiro par, conforme a Tabela 3, a fim de traçar o panorama de base dos resultados, avaliando as soluções obtidas, o erro total e gasto computacional associado para ambos os tipos de refino.

Tabela 3. Parâmetros de entrada para análise inicial.

Número de elementos inicial	Tolerância de erro individual
5	0,01

As Figuras 4 e 5 exibem a evolução da solução ao decorrer das iterações de refino e os respectivos gastos computacionais associados, respectivamente.

Inicialmente, observa-se na Figura 4 a diferença entre as soluções para cada refino, enquanto o uniforme exige três iterações e apresenta um caráter homogêneo, o refino adaptativo exige uma iteração a mais e apresenta um perfil linear nos elementos de borda, visto que o termo residual de fronteira não é definido para tais e portanto, não permitindo o refino nessa região. Contudo, constata-se que em termos de qualidade de solução, o estimador de erro identifica que o refino adaptativo exibe resultado inferior absoluto para o refino adaptativo. Portanto, pode-se questionar o motivo pelo qual o uniforme apresenta um valor maior de erro total, e pode-se supor que o termo residual de borda, dado o número maior de elementos, passa a se tornar relevante. Verifica-se-á posteriormente na próxima seção os detalhes a respeito de tal questionamento.

Ademais, deve-se avaliar o gasto computacional associado a tal calculo para enfim afirmar que em ambos os termo de benefício e custo, o refino adaptativo demonstra superioridade. Retomando a primeira constatação referente ao número de iterações nos gráficos (a) e (b) da Figura 4, o refino adaptativo requere uma iteração a mais de execução do algoritmo. Porém, considerando o tempo gasto, observa-se que a diferença estatística significativa não é evidente. Pode-se inferir então que, para esse par de parâmetros em questão, o refino adaptativo é mais performante.

Figura 4. Comportamento iterativo da solução e do estimador de erro

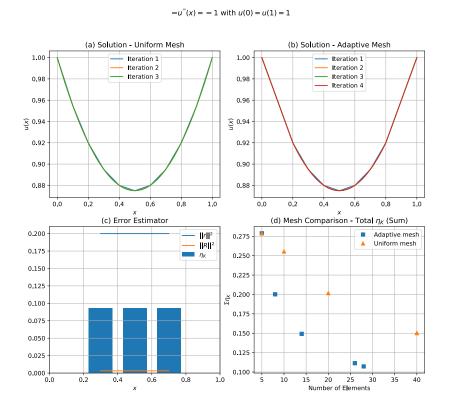
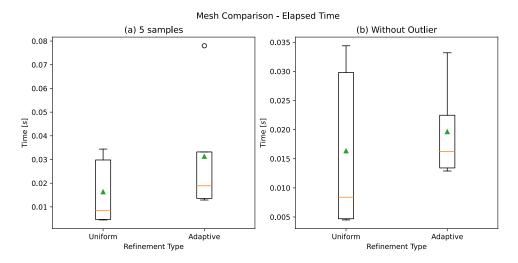


Figura 5. Distribuições de gasto computacional por tipo de refino



Comparação com segundo estimador. A fim de avaliar qualitativamente os resultados previamente apresentados referentes ao estimador um, propôs-se a comparação com um segundo estimador de erro *a posteriori*, tal decisão é justificada pelo contexto no qual tais estimadores são utilizados em que normalmente não se tem solução ou *Benchmark* disponível para comparação [15]. E portanto,, o raciocínio lógico é julgar os resultados partindo do mesmo pressuposto.

Sugere-se, além do par de parâmetros de entrada indicado na Tabela 3, outro par que mostrou-se crítico para o primeiro estimador conforme a Tabela 4, com o objetivo de traçar dois

cenários.

Tabela 4. Parâmetros de entrada crítico.

Número de elementos inicial	Tolerância de erro individual
10	0,0001

Assim sendo, obtêm-se as Figuras 6 e 7 para os compilados de erro total e porções de erro para os pares um e crítico, respectivamente.

Figura 6. Erro total para refinos uniforme e adaptativo e estimadores um e dois.

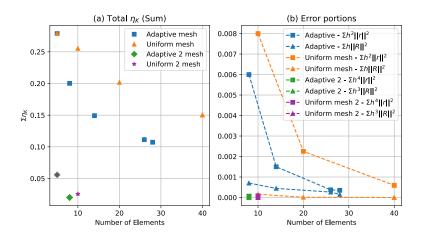
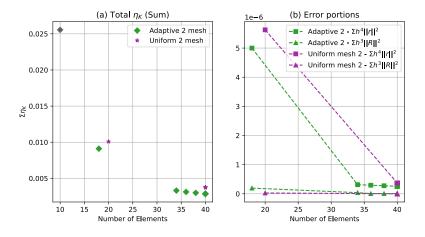


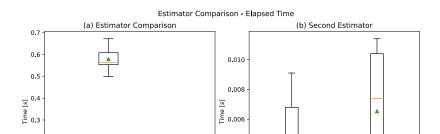
Figura 7. Erro total e parcelas de resíduo por tipo de refino para o par crítico.



Em termos de erro total, a primeira constatação a se levantar é que o refino adaptativo apresenta em cada uma das combinações um resultado inferior, portanto, melhor quando se comparado ao refino uniforme. E normalmente necessitando de iterações a mais do algoritmo para atingir o objetivo de tolerância de erro individual estabelecido. Ademais, revisita-se a análise referente às porções dos residuais mencionada na seção precedente, na qual questionou-se a possibilidade da parcela de borda se sobressair para um número maior de elementos final, desencadeando um erro total maior. Porém, conforme observado nos gráficos (b) das Figuras 6 e 7, a ordem do residual de fronteira é inferior ao residual interno, tornando-se praticamente

negligenciável. Consequentemente, o fator preponderante no resultado final de erro total é o residual interno, amplificado com um número maior de elementos.

Constata-se portanto a coerência dos resultados obtidos com relação ao erro total para ambos os estimadores, em que tem-se uma qualidade superior de solução para o refino adaptativo, apresentando um erro total menor. Contudo, não deve-se omitir os resultados referentes ao gasto computacional. Verificando-se então tal para o par de parâmetros crítico na Figura 8.



0.004

0.002

Adaptive 2

0.1

Adaptive 1

Uniform 2

Adaptive 2

Figura 8. Tempo gasto por tipo de refino e estimador para o par crítico.

Nota-se o caráter crítico para tal par de parâmetros, no qual há uma diferença estatisticamente significativa para o estimador um. Por outro lado, para o segundo estimador, dada sua maior convergência observada em sua expressão [12], ainda não identifica-se diferença significativa. Isto posto, para o critério de custo, identifica-se a inconsistência de resultados para o tempo gasto. Porém, ressalta-se que apesar de serem utilizados os mesmos parâmetros à título de comparação, não pode ser descartar a possibilidade de encontrar uma combinação que reflita em tal diferença. Visto que verifica-se a necessidade de redefinir os intervalos referentes aos parâmetros de entrada para o segundo estimador.

Comparação entre refinos. Como segunda abordagem dos resultados, propôs-se avaliar a eficiência do refino h-adaptativo, visto que inicialmente foi sugerido para a resolução do problema. Previamente, em termos absolutos, constante-se, a partir das Figuras 4, 6 e 7, que o refino adaptativo provê um decréscimo superior quando comparado ao refino uniforme.

Expande-se então tal análise, avaliando-a em termos relativos, a partir da Figura 9. Logo, a partir da Equação 16 e dos parâmetros de saída, vem:

Erro relativo =
$$\frac{\left|\Sigma \eta_K \right|_i - \Sigma \eta_K \right|_{i-1}}{\Sigma \eta_K |_{i-1}}.$$
 (16)

Identifica-se que para o refino adaptativo, o erro relativo do erro total, converge ao final do algoritmo (menos de 5% na última iteração), enquanto o uniforme é abruptamente interrompido. Portanto, mesmo requisitando uma iteração a mais, observa-se um caráter de eficiência no refino adaptativo utilizado, visto que ao se aproximar do objetivo, somente o necessário é modificado e calculado, limitando em parte o processamento.

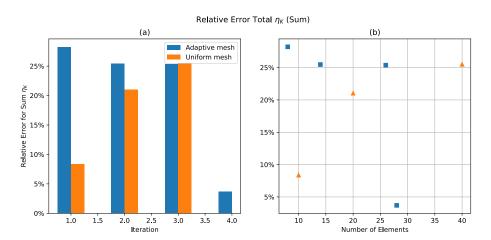


Figura 9. Erro relativo do erro total (soma η_K).

Influência do número de elementos inicial $N_{e,0}$. Tendo posto as primeiras três macro etapas dos resultados, fornecendo um panorama inicial e avaliando duas hipóteses de aplicação da metodologia proposta, requere-se então avaliar a consistência dos mesmos ao longo de todo o intervalo de parâmetros de entrada propostos na Tabela 2.

Portanto, para as 25 combinações possíveis, buscou-se traçar o paralelo de custo, através do tempo e número de iterações gasto, em conjunto com o benefício, por meio do erro total e do número final de elementos.

A primeira análise referente ao número de elementos inicial $N_{e,0}$, avalia tais parâmetros de saída para tolerâncias discretas de erro individual variando o $N_{e,0}$ ao longo de seu intervalo previamente definido. Obtendo-se a Figura 10.

Deve-se ressaltar que o objetivo principal é identificar se o comportamento superior do refino adaptativo se mantém ao longo de todo o intervalo de $N_{e,0}$ para todos os valores discretos de tolerância de erro individual.

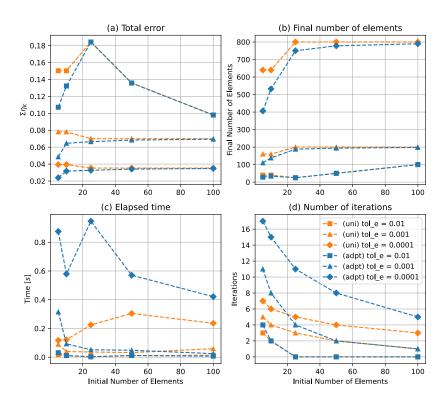
Quanto ao erro total, descrito em parte pelo número de elementos final, constata-se nos gráficos (a) e (b) da Figura 10 que, ao menos para a faixa inicial de $N_{e,0}$, há tal superioridade, visto que o erro é sempre menor para o refino h-adaptativo. Porém, aumentando o $N_{e,0}$, verifica-se uma convergência de resultados.

Por outro lado, o gasto computacional medido nos gráficos (c) e (d) da Figura 10, quando comparando tipos de refino, não se comporta consistentemente segundo as hipóteses. Primeiro, para tolerância de erro individual de 0,01, há pouca divergência entre refinos. Segundo, para a tolerância fina, há uma divergência completa, na qual o refino uniforme demanda menos iterações e consequentemente menos tempo. Por fim, para o valor intermediário, constata-se um composto de ambos os comportamentos.

Em suma, identificou-se a divergência desejada entre refinos somente para o erro total em uma zona específica, com $N_{e,0}$ menores (cinco e 10). Contudo, não observou-se a diferença de comportamentos consistentemente para o gasto computacional, indicando que tal parâmetro de saída tem correlação superior com o parâmetro de entrada tol_e, a ser discutido em seguida.

Figura 10. Influência do número de elementos inicial através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total.

Influence of initial number of elements



Influência da tolerância de erro individual tol_e. Analogamente à discussão anterior, propõe-se valores discretos de $N_{e,0}$ variando tol_e ao longo de todo seu intervalo pré-definido. Ademais, busca-se identificar a divergência entre refinos para todos os valores discretos de $N_{e,0}$ no intervalo inteiro de tol_e ou em alguma faixa. A partir da Figura 11, verifica-se:

Uma observação a se fazer à representação gráfica apresentada, optou-se por manter o sentido de refino do domínio semelhante à Figura 10, da esquerda para a direita. Contudo, tal sentido característico decorre de forma inversa para a tol_e . Portanto, o eixo x de tol_e em todos os gráficos é invertido e posto na escala logarítmica.

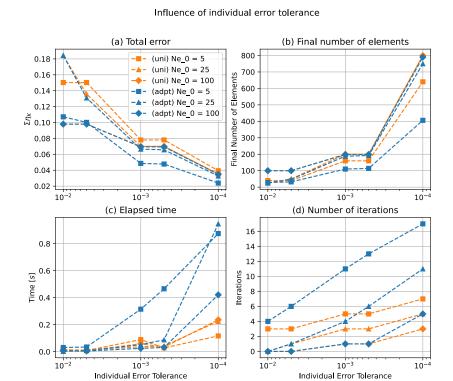
Primeiramente, quanto ao erro total, identifica-se nos gráficos (a) e (b) da Figura 11 o mesmo modo inconsistente para a variação de tol_e, visto que a divergência só se observa para um $N_{e,0}$ de cinco elementos, condizente com a análise anterior.

Segundo, avalia-se então a observação da seção anterior referente ao gasto computacional, na qual não foi possível verificar a divergência desejada entre refinos. Nos gráficos (c) e (d) da Figura 11, para a zona de tol $_e$ mais fina de 0,0005 a 0,0001, há um requisito superior de recursos computacionais, dada a necessidade de um número maior de iterações do algoritmo de base, para o refino adaptativo, resultando num tempo de execução maior.

Concisamente, pode-se então enunciar que enquanto o $N_{e,0}$ influencia no erro total para valores menores, a tol_e influencia sobre o tempo gasto para valores mais finos, i.e., cada parâmetro de entrada reflete sobre outro de saída separadamente. Haja vista tal constatação, posteriormente será abordada uma inferência de zona, situação e aplicação ideal para as ferramentas prospostas.

Outrossim, acresce-se à discussão uma abordagem quantitativa para ambos os resultados. Dado o caráter de maior divergência para tol $_e$ mais finas, estabelece-se uma comparação entre um

Figura 11. Influência da tolerância de erro individual através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total.



 $N_{e,0}$ menor de cinco e outro maior de 100 para uma tol $_e$ de 0,0001, resultando nas Tabelas 5 e 6.

Tabela 5. Erro total e número de elementos final com tolerância de erro individual = 0,0001

Número de	Refino	Erro Total	Número de
elementos inicial		Ello lotal	elementos final
5	Uniforme	0,0394	640
3	Adaptativo	0,0239	406
100	Uniforme	0,0353	800
	Adaptativo	0,0348	790

Tabela 6. Tempo gasto e número de iterações com tolerância de erro individual = 0,0001

Número de	Refino	Tempo	Número de
elementos inicial		gasto [s]	iterações
	Uniforme	0,1171	7
3	Adaptativo	0,8750	17
100	Uniforme	0,2362	3
	Adaptativo	0,4214	5

Novamente, pode-se constatar que, em termos de erro total, um $N_{e,0}$ menor fornece uma vantagem superior para o resultado final, visto que a malha final obtida possui um número de

elementos final bem menor, conforme observado na Tabela 5.

Ademais, independentemente do $N_{e,0}$, o tempo gasto para o refino adaptativo é sempre superior, dada a necessidade de executar o algoritmo mais vezes, conforme a Tabela 6. Portanto, um questionamento a se levantar é o quão custoso é tal execução ao usuário final.

Síntese geral. Haja vista todas as discussões apresentadas, retorna-se a observação de em qual zona, situação e aplicação recomenda-se as ferramentas e com quais parâmetros de entrada. Propõe-se uma abordagem qualitativa visual a partir de mapas de calor para o erro total e tempo gasto nas Figuras 12 e 13, respectivamente.

Figura 12. Erro total para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual.

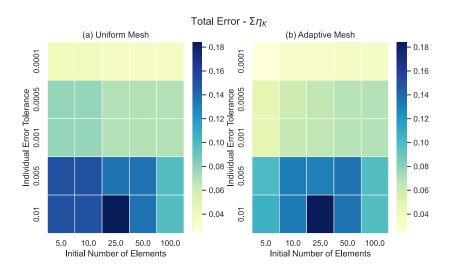
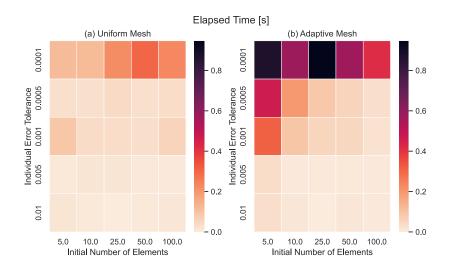


Figura 13. Tempo gasto para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual.



Novamente, observa-se que a divergência se encontra para $N_{e,0}$ menores (Figura 12) e tol_e mais finas (Figura 13). Propondo-se então uma zona ideal com $N_{e,0}$ menores e tol_e intermediária ou robustas, o que é condizente com as situações de aplicação de estimadores de erro *a posteriori*, nas quais não se tem um *benchmark* de referência para comparação [15]. E portanto, busca-se uma solução inicial para traçar um panorama de base de forma eficiente.

CONCLUSÕES

A pesquisa proposta tinha como objetivo formular, implementar e avaliar a resolução do laplaciano de uma dimensão por meio do MEF, estimador de erro *a posteriori* e adaptatividade de malha.

Deve-se reiterar que a dedução da resolução por MEF e dos estimadores foi realizada e demonstrada na seção de Materiais e Métodos e que é necessária ser feita apenas uma vez. Visto que ao implementar tal sistema computacionalmente, os *loops* executam a tarefa.

Por meio das macro etapas dos resultados, observaram-se o processo de resolução do problema através do panorama inicial, posteriormente a avaliação da coerência dos resultados com a comparação entre estimadores e refinos, e por fim, sua consistência variando os parâmetros de entrada $N_{e,0}$ e tol_e.

Com esses resultados, tornou-se possível validar a aplicação dos estimadores de erro a posteriori em conjunto com o refino de malha do tipo h-adaptativo, ao menos para uma faixa específica de $N_{e,0}$ menores, onde tal conjunto demonstrou-se eficaz. Ademais à validação, as hipóteses estabelecidas, de que tanto o estimador era coerente e que o refino adaptativo era superior, foram confirmadas.

Por outro lado, os autores ainda identificam tópicos a ser mais explorados, dado que os resultados mostram-se dúbios. Portanto, propõe-se os seguintes trabalhos futuros:

- avaliar mais profundamente o tempo gasto, tendo em mente a possibilidade de ponderação do mesmo para criar curvas de custo/benefício;
- avaliar o mesmo problema com outro estimador;
- avaliar outro problema com o mesmo estimador.

Haja vista todos os enunciados supra-citados, visa-se que o desenvolvimento da pesquisa em conjunto com os resultados tragam novas considerações tal área de pesquisa, com o objetivo de otimizar simulações numéricas, as quais podem viabilizar projetos com um menor custo e consequentemente possibilitar uma melhoria na qualidade de vida de todos.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), pela participação no Programa de Voluntariado em Iniciação Científica e Tecnológica (Edital PROPPG 2021/2022 — PIVICT) do acadêmico Luis Henrique Hatashita.

REFERÊNCIAS

- [1] AKIN, J. Finite Element Analysis with Error Estimators: An Introduction to the FEM and Adaptive Error Analysis for Engineering Students. [S. l.]: Elsevier Science, 2005. ISBN 9780080472751. Disponível em:
 - https://books.google.com.br/books?id=uUsm99d8WBAC.
- [2] GALVIS, J. e VERSIEUX, H. Introdução à aproximação numérica de equações diferenciais parciais via o método de elementos finitos. [S. l.]: IMPA, 2011. [Publicações matemáticas]. Disponível em:
 - https://books.google.com.br/books?id=3DeKoAEACAAJ.
- [3] CIARLET, P. *The finite element method for elliptic problems*. Amsterdam New York New York: North-Holland Pub. Co. Sole distributors for the U.S.A. e Canada, Elsevier North-Holland, 1978. ISBN 0-444-85028-7.

- [4] LOGG, A. e MARDAL, K.-A. Lectures on the Finite Element Method. [S. l.], 2021.
- [5] COOK, R. Concepts and applications of finite element analysis. New York, NY: Wiley, 2001. ISBN 978-0-471-35605-9.
- [6] BRAESS, D. *Finite elements : theory, fast solvers, and applications in elasticity theory.* Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0-511-27910-2.
- [7] SMIRNOV, V. I. *A course of higher mathematics*. Oxford New York Reading: Pergamon Press Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 1964. ISBN 9781483197470.
- [8] BRENNER, S. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. New York, NY: Springer New York, 1994. ISBN 978-1-4757-4340-1.
- [9] ATKINSON, K. *Theoretical numerical analysis : a functional analysis framework.* Dordrecht New York: Springer, 2009. ISBN 978-1-4419-0457-7.
- [10] DAUTRAY, R. *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology*. Berlin New York: Springer-Verlag, 1988. ISBN 3540190457.
- [11] SOBOLEV, S. Some Applications of Functional Analysis in Mathematical Physics: Third Edition. Providence: American Mathematical Society, 1991. ISBN 0821819372.
- [12] AINSWORTH, M. e ODEN, J. T. *A posteriori error estimation in finite element analysis*. New York: Wiley, 2000. ISBN 0-471-29411-X.
- [13] VERFURTH, R. A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques. Chichester New York: Wiley-Teubner, 1996. ISBN 9780471967958.
- [14] BABUSKA, I. e RHEINBOLDT, W. C. A-posteriori error estimates for the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 12, n. 10, p. 1597–1615, 1978. DOI: https://doi.org/10.1002/nme.1620121010. eprint: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.1620121010. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620121010.
- [15] KELLY, D. W. et al. A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: Part I—error analysis. International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 19, n. 11, p. 1593–1619, 1983. DOI: https://doi.org/10.1002/nme.1620191103. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620191103.
- [16] LADEVÈZE, P. e MOËS, N. A Posteriori Constitutive Relation Error Estimators for Nonlinear Finite Element Analysis and Adaptive Control. *In*: LADEVÈZE, P. e ODEN, J. [Ed.]. *Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*. [S. l.]: Elsevier, 1998. v. 47. [Studies in Applied Mechanics]. P. 231–256. DOI: https://doi.org/10.1016/S0922-5382(98)80013-5. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0922538298800135.
- [17] DIBENEDETTO, E. *Partial differential equations*. Boston: Birkhäuser, 1995. ISBN 978-1-4899-2840-5.
- [18] EVANS, L. *Partial differential equations*. Providence, R.I: American Mathematical Society, 1998. ISBN 978-0821807729.
- [19] PYTHON. Welcome to Python.org. [S. l.: s. n.], 2022. Disponível em: https://www.python.org/about/. Acesso em: 5 abr. 2022.

- [20] ANACONDA. The Scientific Python Development Environment. [S. l.: s. n.], 2022. Disponível em: https://anaconda.org/anaconda/spyder. Acesso em: 5 abr. 2022.
- [21] NUMPY. *NumPy Documentation*. [S. l.: s. n.], 2022. Disponível em: https://numpy.org/doc/stable/. Acesso em: 5 abr. 2022.
- [22] MATPLOTLIB. *Matplotlib 3.5.1 documentation*. [S. l.: s. n.], 2022. Disponível em: https://matplotlib.org/stable/index.html. Acesso em: 5 abr. 2022.
- [23] HATASHITA, L. Github repository for numerical implementation. [S. l.: s. n.], 2022. Disponível em: https://github.com/luishhatashita/a_posteriori_error_estimator. Acesso em: 29 abr. 2022.

Hilbeth Parente Azikri de Deus	Luis Henrique Hatashita