Conceitos fundamentais em uma dimensão – Bases

PME5425 – Métodos de Elementos Finitos de Alta Ordem com Aplicações em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor

Prof. Bruno S. Carmo

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

Sumário

1 Expansões polinomiais: extensão do tipo p

2 Definição do espaço de elementos hp em uma dimensão

3 Construção de uma base polinomial

- Decomposição contorno–interior
- Polinômios de Jacobi
- Base modal tipo p
- Base nodal

Bases de expansão unidimensionais

- Descreveremos as bases de expansão que são normalmente utilizadas em códigos de MEE/*hp*, assim como os procedimentos de diferenciação e integração necessários para calcular a matriz $\mathbf{A}$ e o vetor de carregamentos $\mathbf{b}$ do sistema $\mathbf{A}\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{b}$.

- Definição de um elemento padrão, Ω_{st} para o qual definiremos as expansões padrão.

- Por que polinômios? Uso histórico de séries de Taylor, regras de integração discretas que facilita implementação computacional.

Expansões polinomiais: extensão do tipo p

- Domínios complexos $\rightarrow$ dificuldade em identificar expansões globais analiticamente
- Geometrias complexas $\rightarrow$ diferentes escalas na solução, com estruturas localizadas
- A discretização do tipo h contribui para a solução destes empecilhos. Estender a discretização com uma abordagem do tipo p pode ser uma forma bastante eficiente do ponto de vista numérico de se chegar a uma solução com baixíssimo erro.

Definição do espaço de elementos *hp* em uma dimensão

Dado o elemento padrão, Ω_{st}, e o mapeamento de coordenadas $\chi^e(\xi)$ de Ω_{st} para a região elementar Ω^e, chamamos o espaço de todos os polinômios de grau P definidos no elemento padrão Ω_{st} de $\mathcal{P}_P(\Omega_{\mathrm{st}})$.

O espaço da expansão *hp* discreta $\mathcal{X}^\delta$ é o conjunto de todas as funções $u^\delta(x)$ que existem em H^1 e que são polinômios em ξ dentro de cada elemento (ou seja, $u^\delta(\chi^e(\xi)) \in \mathcal{P}_P(\Omega_{\mathrm{st}})$), formalmente descrito como

$$\mathcal{X}^\delta = \{u^\delta | u^\delta \in H^1, u^\delta(\chi^e(\xi)) \in \mathcal{P}_{P^e}(\Omega_{\mathrm{st}}), e = 1, \ldots, N_{\mathrm{el}}\}.$$

Esta definição permite que tanto o mapeamento $\chi^e(\xi)$ e a ordem do polinômio P^e variem de elemento a elemento, permitindo tanto o refinamento h, que altera $\chi^e(\xi)$ e N_{el}, quanto o refinamento p, que altera P^e.

Construção de uma base polinomial

- Base polinomiais adequadas são aquelas que são favoráveis dentro da região padrão e podem ser facilmente implementadas numericamente.
- As bases ditas favoráveis são aquelas que são ortogonais ou quase ortogonais dentro da região padrão.
- Estas bases são então modificadas de forma a facilitar a implementação.
- Tipicamente, a base é decomposta em modos de fronteira e interior porque isso simplifica a decomposição do domínio em elementos e facilita o atendimento de requisitos de continuidade.

Bases nodais e modais (ou hierárquicas) I

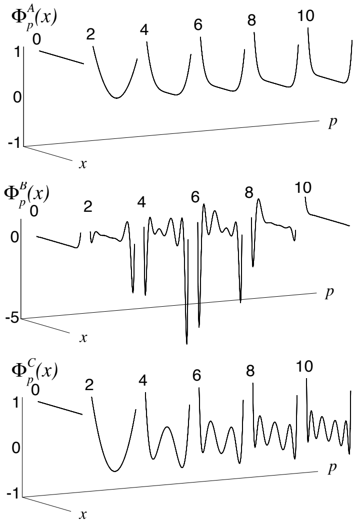
Para explicar a diferença entre estes tipos de base, definiremos três bases diferentes $\mathbf{\Phi}_p^A(x)$, $\mathbf{\Phi}_p^B(x)$ e $\mathbf{\Phi}_p^C(x)$ na região $\Omega_{\mathrm{st}} = \{x | -1 \leq x \leq 1\}$.

$$\mathbf{\Phi}_p^A(x) = x^p, \qquad p = 0, \ldots, P;$$

$$\mathbf{\Phi}_p^B(x) = \frac{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x - x_q)}{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x_p - x_q)}, \quad p = 0, \ldots, P;$$

$$\mathbf{\Phi}_p^C(x) = L_p(x), \qquad p = 0, \ldots, P.$$

Bases nodais e modais (ou hierárquicas) II



Bases modais (ou hierárquicas)

$$\begin{aligned} \mathbf{\Phi}_p^A(x) &= x^p, & p &= 0, \ldots, P; \\ \mathbf{\Phi}_p^C(x) &= L_p(x), & p &= 0, \ldots, P. \end{aligned}$$

As expansões $\mathbf{\Phi}_p^A(x)$ e $\mathbf{\Phi}_p^C(x)$ são *modais* ou *hierárquicas*: a base de ordem $P-1$ está contida na base de ordem P.

A expansão $\mathbf{\Phi}_p^C(x)$ além de hierárquica é também *ortogonal*

$$(L_p(x), L_q(x)) = \int_{-1}^{1} L_p(x) L_q(x) \mathrm{d}x = \frac{2}{2p+1}\delta_{pq}.$$

Bases nodais

$$\mathbf{\Phi}_p^B(x) = \frac{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x-x_q)}{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x_p-x_q)}, \quad p = 0,\ldots,P.$$

Já a base definida pelos polinômios $\mathbf{\Phi}_p^B(x)$ é uma base *nodal* e não hierárquica. Esta base tem a propriedade $\mathbf{\Phi}_p^B(x_q) = \delta_{pq}$ e, por consequência:

$$u^\delta(x_q) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \mathbf{\Phi}_p^B(x_q) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \delta_{pq} = \hat{u}_q,$$

ou seja, os coeficientes $\hat{u}_q$ são iguais à solução aproximada em x_q.

Escolha de uma base I

A escolha de uma base dependerá de fatores como eficiência numérica, condicionamento das matrizes geradas, independência linear da base e propriedades da aproximação.

Para ilustrar, consideraremos as expansões $\mathbf{\Phi}_p^A(x)$, $\mathbf{\Phi}_p^B(x)$ e $\mathbf{\Phi}_p^C(x)$ numa projeção de Galerkin (ou projeção L^2), que é achar $u^\delta \in \mathcal{X}^\delta$ tal que

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

Não vamos especificar condições de contorno por enquanto (não é necessário).

Escolha de uma base II

Fazendo $u^\delta(x) = v^\delta(x) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \boldsymbol{\Phi}_p(x)$, este problema equivale a resolver a equação matricial

$$\boldsymbol{M}\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{f},$$

onde

$$M_{pq} = (\boldsymbol{\Phi}_p, \boldsymbol{\Phi}_q), \quad \hat{\mathbf{u}} = [\hat{u}_0, \cdots, \hat{u}_P]^\top, \quad \mathbf{f}_p = (\boldsymbol{\Phi}_p, f).$$

A matriz $\boldsymbol{M}$ é chamada de *matriz de massa*, uma matriz quadrada, não-singular de ordem $P+1$ que pode ser invertida para determinar a solução

$$\hat{\mathbf{u}} = \boldsymbol{M}^{-1}\mathbf{f}.$$

O custo computacional é composto de duas partes: construção da matriz e inversão da matriz. Tanto um quanto o outro tornam-se mais baratos quando a matriz tem algum tipo de estrutura conhecida.

Escolha de uma base III

$\mathbf{\Phi}_p^A(x)$: Matriz $\boldsymbol{M}$ tem apenas metade dos elementos, mas a inversa é cheia.

$$\boldsymbol{M}[p][q] = (\mathbf{\Phi}_p^A, \mathbf{\Phi}_q^A) = \int_{-1}^{1} x^p x^q \mathrm{d}x = \left[\frac{x^{p+q+1}}{p+q+1}\right]_{-1}^{1}$$
$$= \begin{cases} \frac{2}{p+q+1}, & p+q \text{ par,} \\ 0, & p+q \text{ ímpar.} \end{cases}$$

$\mathbf{\Phi}_p^B(x)$: Se os nós forem equispaçados, $\boldsymbol{M}$ e $\boldsymbol{M}^{-1}$ são cheias.

$\mathbf{\Phi}_p^C(x)$: Matriz diagonal (base ortogonal).

$$\boldsymbol{M}[p][q] = (\mathbf{\Phi}_p^C, \mathbf{\Phi}_q^C) = \int_{-1}^{1} L_p(x) L_q(x) \mathrm{d}x = \frac{2}{2p+1}\delta_{pq}$$

Escolha de uma base IV

Outro aspecto importante diz respeito ao condicionamento da matriz $\boldsymbol{M}$, que está relacionado à independência linear da expansão e é importante na operação de inversão da matriz.

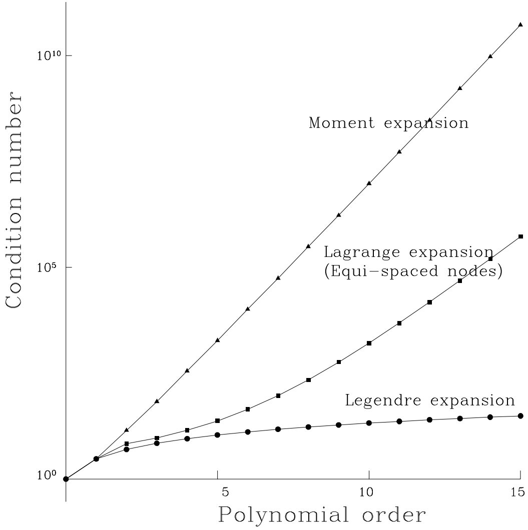
O número de condicionamento κ_2 é dado por

$$\kappa_2 = ||\boldsymbol{M}||_2 \cdot ||\boldsymbol{M}^{-1}||_2.$$

Quando a matriz é mal condicionada, erros de arredondamento nos valores da matriz podem levar a a um grande erro na solução do sistema matricial.

Além disso, quando procedimentos iterativos são utilizados para a resolução do sistema, a convergência do procedimento é pior para sistemas mal condicionados.

Escolha de uma base V



Decomposição contorno–interior I

- Existe uma dificuldade em utilizar a melhor base polinomial (ortogonal e hierárquica) em uma decomposição elemental do tipo h, mantendo um grau de continuidade (tipicamente C^0) na fronteira dos elementos.

- Aplicar este requisito de continuidade diretamente nas bases modais acopla todos os modos de elementos vizinhos, e destrói a ortogonalidade do sistema global.

$$\sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p^e \phi_p^e(1) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p^{e+1} \phi_p^{e+1}(-1)$$

Decomposição contorno–interior II

A solução normalmente adotada é construir bases que tenham apenas alguns poucos modos com magnitude não nula no contorno, e o restante homogêneo no contorno.

Por exemplo, para uma expansão definida em $\Omega_{\mathrm{st}} = \{\xi | -1 \leq \xi \leq 1\}$ tal que

$$\phi_p(-1) = \begin{cases} 1, & p = 0, \\ 0, & p \neq 0, \end{cases} \qquad \phi_p(1) = \begin{cases} 1, & p = P, \\ 0, & p \neq P, \end{cases}$$

continuidade C^0 é imposta assegurando que

$$\hat{u}_P^e \phi_P^e(1) = \hat{u}_0^{e+1} \phi_0^{e+1}(-1).$$

Os modos não nulos na fronteira são chamados de *modos de fronteira* ou *contorno* e os outros são chamados de *modos de interior* ou *bolha*.

Decomposição contorno–interior III

- Expansões nodais já tem este tipo de decomposição naturalmente, desde que nós sejam definidos na fronteira.
- Para bases modais o que no normalmente se faz é acrescentar polinômios de grau 1 à base para serem os modos de fronteira. Como os modos de interior terão grau igual ou maior a 2, é possível assegurar que tenham valor nulo na fronteira.
- As bases modais são normalmente baseadas em polinômios de Jacobi, com extensão para assegurar continuidade C^0.

Polinômios de Jacobi: definição

Representados por $P_p^{\alpha,\beta}(x)$, são a família de soluções polinomiais a um problema singular de Sturm-Liouville que na região $-1 < x < 1$ é descrito por

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x)^{1+\alpha}(1+x)^{1+\beta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u_p(x)\right] = \lambda_p(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}u_p(x),$$

onde $u_p(x) = P_p^{\alpha,\beta}(x)$ e $\lambda_p = -p(\alpha+\beta+p+1)$.

Fórmula de Rodriguez $(\alpha, \beta > -1)$:

$$P_n^{\alpha,\beta}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}]$$

Polinômios de Jacobi: relação de ortogonalidade

Estes polinômios tem uma relação importante de ortogonalidade com relação ao peso $(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$:

$$\int_{-1}^{1}(1-x)^\alpha(1+x)^\beta P_p^{\alpha,\beta}(x)P_q^{\alpha,\beta}(x)\mathrm{d}x = C\delta_{pq},$$

onde C é dado por:

$$C = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2p+\alpha+\beta+1}\frac{\Gamma(p+\alpha+1)\Gamma(p+\beta+1)}{p!\Gamma(p+\alpha+\beta+1)}$$

Quando $\alpha=\beta$, estes polinômios são chamados de ultraesféricos. Casos bastante conhecidos são os polinômios de Legendre ($\alpha=\beta=0$) e de Chebyshev de primeiro e segundo tipo ($\alpha=\beta=\mp\frac{1}{2}$).

Polinômios de Jacobi: construção recursiva

Polinômios de Jacobi podem ser construídos usando a seguinte relação recursiva:

$$
\begin{aligned}
P_0^{\alpha,\beta}(x) &= 1,\\
P_1^{\alpha,\beta}(x) &= \frac{1}{2}[\alpha - \beta + (\alpha + \beta + 2)x],\\
a_n^1 P_{n+1}^{\alpha,\beta}(x) &= (a_n^2 + a_n^3 x) P_n^{\alpha,\beta}(x) - a_n^4 P_{n-1}^{\alpha,\beta}(x),\\
a_n^1 &= 2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta),\\
a_n^2 &= (2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2),\\
a_n^3 &= (2n+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta+2),\\
a_n^4 &= 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2).
\end{aligned}
$$

Derivada de polinômios de Jacobi

Construção recursiva:

$$b_n^1(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_n^{\alpha,\beta}(x) = b_n^2(x)P_n^{\alpha,\beta}(x) + b_n^3(x)P_{n-1}^{\alpha,\beta}(x),$$
$$b_n^1(x) = (2n+\alpha+\beta)(1-x^2),$$
$$b_n^2(x) = n[\alpha-\beta-(2n+\alpha+\beta)x],$$
$$b_n^3(x) = 2(n+\alpha)(n+\beta).$$

Relação especial:

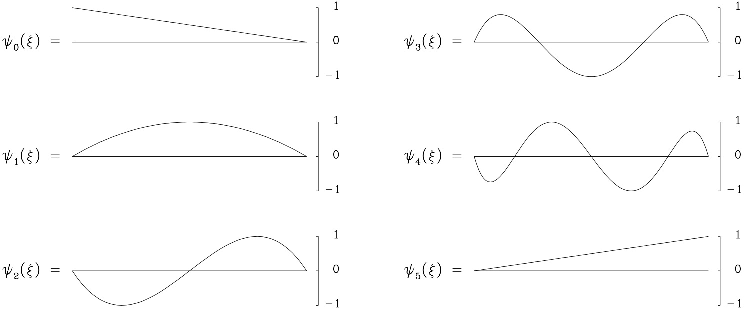
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_n^{\alpha,\beta}(x) = \frac{1}{2}(\alpha+\beta+n+1)P_{n-1}^{\alpha+1,\beta+1}(x)$$

Base modal tipo p I

Definimos a expansão $\psi_p(\xi)$ no intervalo $\Omega_{\mathrm{st}} = \{\xi | -1 \leq \xi \leq 1\}$

$$\phi_p(\xi) \mapsto \psi_p(\xi) = \begin{cases} \frac{1-\xi}{2}, & p = 0, \\ \left(\frac{1-\xi}{2}\right)\left(\frac{1+\xi}{2}\right) P_{p-1}^{1,1}(\xi), & 0 < p < P, \\ \frac{1+\xi}{2}, & p = P. \end{cases}$$

Base modal tipo *p* II



Base modal tipo p III

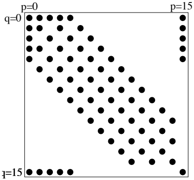
Qualquer polinômio de Jacobi que satisfizesse condições de contorno homogêneas poderia ser utilizado, mas o polinômio $P_{p-1}^{1,1}$ mantém um alto grau de ortogonalidade e gera uma matriz pentadiagonal.

$$\boldsymbol{M}^e[p][q] = \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-\xi}{2}\right) \left(\frac{1+\xi}{2}\right) P_{p-1}^{1,1}(\xi)\psi_q(\xi)\mathrm{d}\xi.$$

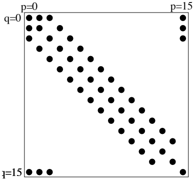
$P_p^{0,0}$ gera uma matriz heptadiagonal e $P_p^{2,2}$ uma matriz diagonal com forte acoplamento contorno-interior.

Base modal tipo p IV

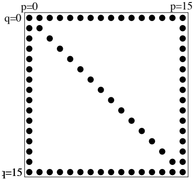
Matrizes de Massa:



$P_p^{0,0}$



$P_p^{1,1}$

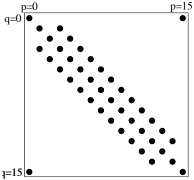


$P_p^{2,2}$

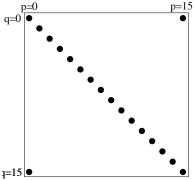
Base modal tipo *p* V

Entretanto, considerando a matriz laplaciana $\boldsymbol{L}^e[p][q] = (\mathrm{d}\psi_p(\xi)/\mathrm{d}\xi, \mathrm{d}\psi_q(\xi)/\mathrm{d}\xi)$, $P_p^{0,0}$ gera uma matriz pentadiagonal, $P_p^{1,1}$ gera uma matriz diagonal e $P_p^{2,2}$ uma matriz cheia. Por este motivo, a escolha natural é $P_p^{1,1}$.

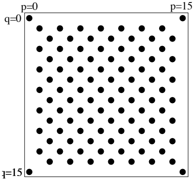
Matrizes Laplacianas:



$P_p^{0,0}$



$P_p^{1,1}$



$P_p^{2,2}$

Expansões polinomiais nodais

- É necessário que os nós incluam os pontos do contorno; fora isso, podemos escolher arbitrariamente os pontos nodais interiores ao domínio.
- Uma escolha eficiente em termos de estabilidade e condicionamento do sistema é tomar os zeros da regra de integração de Gauss–Legendre–Lobatto, pois esta escolha evita que apareçam oscilações próximo aos pontos extremos.

Polinômios de Lagrange

Dado um conjunto de $P+1$ pontos nodais, denotados por x_q $(0 \leq q \leq P)$, o polinômio de Lagrange $h_p(x)$ é o polinômio (único) de ordem P que tem valor unitário em x_p e é zero em $x_q \quad (p \neq q)$. Ou seja, $h_p(x_q) = \delta_{pq}$.

Este polinômio pode ser escrito na forma

$$h_p(x) = \frac{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x - x_q)}{\prod_{q=0,q\neq p}^{P}(x_p - x_q)}$$

Interpolação polinomial:

$$\mathcal{I}u(x) = \sum_{p=0}^{P} u(x_p)h_p(x)$$

Base nodal tipo p I

Usar um polinômio de Lagrange com zeros da regra de integração de Gauss–Legendre–Lobato, que são as raízes do polinômio $g(\xi) = (1-\xi)(1+\xi)L'_P(\xi)$, equivale à seguinte expansão:

$$\phi_p(\xi) \mapsto h_p(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi = \xi_p, \\ \frac{(\xi-1)(\xi+1)L'_P(\xi)}{P(P+1)L_P(\xi_p)(\xi_p-\xi)}, & \xi \neq \xi_p, \end{cases} \qquad 0 \leq p \leq P.$$

A matriz de massa gerada com regra de quadratura de Gauss–Legendre–Lobatto com $P+1$ pontos é diagonal, equivalente à matriz de massa concentrada (lumped).

A matriz laplaciana é cheia, independente do número de pontos de quadratura.

Base nodal tipo *p* II