# Conceitos fundamentais em uma dimensão: operações elementares

## 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

# Introdução

- Trataremos de integração e diferenciação.
- Para integração usaremos quadratura de Gauss, uma técnica muito acurada e para a qual necessitamos conhecer o valor do integrando numa série de pontos no intervalo de integração.
- Portanto, para a formulação de Galerkin, necessitaremos conhecer o valor das derivadas de uma função nestes pontos discretos.
- Em ambos os casos, precisamos de procedimentos automáticos.

# Integração numérica – quadratura de Gauss I



O procedimento de integração numérica consiste em aproximar uma integral por uma somatória ponderada na forma

$$\int_{-1}^{1} u(\xi)\mathrm{d}\xi \approx \sum_{i=0}^{Q-1} w_i u(\xi_i)$$

onde $w_i$ são os pesos e $\xi_i$ os $Q$ pontos discretos ao longo do intervalo $-1 \leq \xi \leq 1$.

Vamos representar a função $u(\xi)$ com polinômios de Lagrange $h_i(\xi)$:

$$u(\xi) = \sum_{i=0}^{Q-1} u(\xi_i)h_i(\xi) + \epsilon(u),$$

onde $\epsilon(u)$ é o erro da aproximação.

# Integração numérica – quadratura de Gauss II

Fazendo a integral desta expressão:

$$\int_{-1}^{1} u(\xi)\mathrm{d}\xi = \sum_{i=0}^{Q-1} w_i u(\xi_i) + R(u),$$

onde

$$w_i = \int_{-1}^{1} h_i(\xi)\mathrm{d}\xi \quad \text{e} \quad R(u) = \int_{-1}^{1} \epsilon(u)\mathrm{d}\xi.$$

Como a aproximação é um polinômio de ordem $Q-1$, a integração será exata se $u(\xi)$ for um polinômio de ordem menor ou igual $Q-1$, independente da escolha dos pontos de integração $\xi_i$.

Entretanto, há uma escolha melhor de zeros que permite que a integração seja exata para polinômios de ordem maior do que $Q-1$. Esta é a essência da quadratura de Gauss.

# Tipos de quadratura de Gauss I



$$\int_{-1}^{1} u(\xi)\mathrm{d}\xi \approx \sum_{i=0}^{Q-1} w_i u(\xi_i)$$

Há três tipos de quadratura de Gauss:

1. *Gauss* inclui pontos interiores ao intervalo;
2. *Gauss–Radau* inclui um dos pontos extremos do intervalo ($\xi = -1$ ou $\xi = 1$); e
3. *Gauss-Lobatto* ambos os pontos extremos do intervalo ($\xi = \pm 1$).

# Tipos de quadratura de Gauss II

Chamando de $\xi_{i,P}^{\alpha,\beta}$ os $P$ zeros do polinômio de Jacobi $P_P^{\alpha,\beta}$, tal que

$$P_P^{\alpha,\beta}(\xi_{i,P}^{\alpha,\beta}) = 0, \quad i = 0,1,\ldots,P-1,$$

onde

$$\xi_{0,P}^{\alpha,\beta} < \xi_{1,P}^{\alpha,\beta} < \cdots < \xi_{P-1,P}^{\alpha,\beta}$$

podemos definir os zeros e pesos apropriados para cada quadratura da seguinte forma.

1. *Gauss–Legendre*

$$\xi_i = \xi_{i,Q}^{0,0}, \quad i = 0,\ldots,Q-1,$$

$$w_i^{0,0} = \frac{2}{1-(\xi_i)^2}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}(L_Q(\xi))\Big|_{\xi=\xi_i}\right]^{-2}, \quad i = 0,\ldots,Q-1,$$

$$R(u) = 0 \quad \text{se } u(\xi) \in \mathcal{P}_{2Q-1}([-1,1])$$

# Tipos de quadratura de Gauss III

2. *Gauss–Radau–Legendre* incluindo ponto $\xi = -1$

$$\xi_i = \begin{cases} -1, & i = 0, \\ \xi^{0,1}_{i-1,Q-1}, & i = 1, \ldots, Q-1, \end{cases}$$

$$w^{0,0}_i = \frac{1-\xi_i}{Q^2[L_{Q-1}(\xi_i)]^2}, \quad i = 0, \ldots, Q-1,$$

$$R(u) = 0 \quad \text{se } u(\xi) \in \mathcal{P}_{2Q-2}([-1,1])$$

3. *Gauss–Lobatto–Legendre*

$$\xi_i = \begin{cases} -1, & i = 0, \\ \xi^{1,1}_{i-1,Q-2}, & i = 1, \ldots, Q-2, \\ 1, & i = Q-1, \end{cases}$$

$$w^{0,0}_i = \frac{2}{Q(Q-1)[L_{Q-1}(\xi_i)]^2}, \quad i = 0, \ldots, Q-1,$$

$$R(u) = 0 \quad \text{se } u(\xi) \in \mathcal{P}_{2Q-3}([-1,1])$$

# Cálculo dos zeros de um polinômio de Jacobi I

Não há forma explícita para o cálculo dos zeros $\xi_i$, isso tem que ser feito numericamente. Um algoritmo para o cálculo dos zeros de um polinômio de Jacobi qualquer, usando o método de Newton com deflação polinomial, é:

**for** $k = 0 : m - 1$ **do**
  $r = x_{k,m}^{-1/2,-1/2}$
  **if** $(k > 0)$ **then**
    $r = (r + x_{k-1})/2$
  **end if**
  **repeat**
    $s = \sum_{i=0}^{k-1} 1/(r - x_i)$
    $\delta = -P_m^{\alpha,\beta}(r)/([P_m^{\alpha,\beta}(r)]' - P_m^{\alpha,\beta}(r)s)$
    $r = r + \delta$
  **until** $(\delta < \epsilon)$
  $x_k = r$
**end for**

# Cálculo dos zeros de um polinômio de Jacobi II

$\epsilon$ é uma tolerância especificada, e

$$x_{k,m}^{-1/2,-1/2} = -\cos\left(\frac{2i+1}{2m}\pi\right), \quad i = 0, \ldots, m-1,$$

são os zeros do polinômio de Chebyshev, que é um polinômio de Jacobi que tem fórmula explícita para os zeros, e que portanto servem como estimativa inicial para o cálculo dos zeros dos outros polinômios de Jacobi.

# Diferenciação

Assumindo um polinômio da forma

$$u^{\delta}(x) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \phi_p(\chi^{-1}) = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \phi_p(\xi),$$

diferenciamos usando a regra da cadeia

$$\frac{\mathrm{d}u^{\delta}(\xi)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}u^{\delta}(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x} = \sum_{p=0}^{P} \hat{u}_p \frac{\mathrm{d}\phi_p(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}.$$

Portanto precisamos avaliar $\frac{\mathrm{d}\phi_p(\xi)}{\mathrm{d}\xi}$ e $\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}$.

Consideraremos que $\phi_p(\xi)$ é um polinômio de Lagrange para avaliar a sua derivada; esta técnica é conhecida como diferenciação no espaço físico ou diferenciação de colocação. Qualquer expansão polinomial modal pode ser representada em termos de polinômios de Lagrange.

# Diferenciação de colocação I

Assumindo que $u^\delta(\xi) \in \mathcal{P}_P([-1,1])$, podemos expressar a aproximação em termos de polinômios de Lagrange $h_i(\xi)$ usando um conjunto de $Q$ nós $\xi_i$ $(0 \leq i \leq Q-1)$

$$u(\xi) = \sum_{i=0}^{Q-1} u(\xi_i) h_i(\xi), \qquad h_i(\xi) = \frac{\prod_{j=0,j\neq i}^{Q-1}(\xi - \xi_j)}{\prod_{j=0,j\neq i}^{Q-1}(\xi_i - \xi_j)},$$

onde $Q \geq P + 1$.

A derivada de $u(\xi)$ é então

$$\frac{\mathrm{d}u(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = \sum_{i=0}^{Q-1} u(\xi_i) \frac{\mathrm{d}h_i(\xi)}{\mathrm{d}\xi}$$

# Diferenciação de colocação II

Normalmente, só precisamos da derivada nos nós $\xi_i$

$$\left.\frac{\mathrm{d}u(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_i} = \sum_{j=0}^{Q-1} d_{ij}u(\xi_j), \quad \text{onde } d_{ij} = \left.\frac{\mathrm{d}h_j(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_i}$$

Assim, chamando $ud[i] = \mathrm{d}u/\mathrm{d}\xi|_{\xi_i}$, $D[i][j] = d_{ij}$ e $u[i] = u(\xi_i)$, podemos formular o seguinte algoritmo,

$ud[i] = 0$
**for** $i = 0 : Q-1$ **do**
  **for** $j = 0 : Q-1$ **do**
    $ud[i] = ud[i] + D[i][j]u[j]$
  **end for**
**end for**

# Matriz de diferenciação I



Para montar a matriz de diferenciação $D$, é mais conveniente utilizar uma representação alternativa do polinômio de Lagrange:

$$h_i(\xi) = \frac{g_q(\xi)}{g'_Q(\xi)(\xi - \xi_i)}, \qquad g_Q(\xi) = \prod_{j=0}^{Q-1} (\xi - \xi_j).$$

A derivada de $h_i(\xi)$ é então

$$\frac{\mathrm{d}h_i(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = \frac{g'_Q(\xi)(\xi - \xi_i) - g_Q(\xi)}{g'_Q(\xi_i)(\xi - \xi_i)^2}.$$

# Matriz de diferenciação II

Quando $\xi \to \xi_i$, o numerador e o denominador desta expressão vão para zero. Usando a regra de L'Hospital:

$$\lim_{\xi \to \xi_i} \frac{\mathrm{d}h_i(\xi)}{\mathrm{d}\xi} = \lim_{\xi \to \xi_i} \frac{g''_Q(\xi)}{2g'_Q(\xi_i)} = \frac{g''_Q(\xi_i)}{2g'_Q(\xi_i)},$$

de forma que os elementos $d_{ij}$ podem ser determinados por

$$d_{ij} = \begin{cases} \frac{g'_Q(\xi_i)}{g'_Q(\xi_j)} \frac{1}{\xi_i - \xi_j}, & i \neq j, \\ \frac{g''_Q(\xi_i)}{2g'_Q(\xi_i)}, & i = j. \end{cases}$$

Esta é a representação geral da matriz de derivadas utilizando polinômios de Lagrange. Escolhendo os nós de forma conveniente, podemos chegar a formas alternativas de $g'_Q(\xi)$ e $g''_Q(\xi_i)$.

# Matriz de diferenciação III

A situação mais comum na formulação de Galerkin é que necessitemos dos valores das derivadas para depois realizar uma integração. Assim, partindo do pressuposto de que utilizaremos a quadratura de Gauss para calcular as integrais, necessitaremos então dos valores das derivadas nos pontos da quadratura.

Sendo $\xi_{i,P}^{\alpha,\beta}$ os $P$ zeros do polinômio de Jacobi $P_P^{\alpha,\beta}(\xi)$

$$P_P^{\alpha,\beta}(\xi_{i,P}^{\alpha,\beta}) = 0, \quad i = 0,1,\ldots,P-1,$$

a matriz de derivadas $d_{ij}$ usada para calcular $\mathrm{d}u(\xi)/\mathrm{d}\xi$ em $\xi_i$, isto é,

$$\left.\frac{\mathrm{d}u(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_i} = \sum_{j=0}^{Q-1} d_{ij}u(\xi_j),$$

é definida da seguinte maneira, de acordo com a regra de quadratura empregada:

# Matriz de diferenciação: Gauss–Legendre

1. *Gauss–Legendre*

$$\xi_i = \xi_{i,Q}^{0,0}, \quad i = 0, \ldots, Q-1,$$

$$d_{ij} = \begin{cases} \frac{L_Q'(\xi_i)}{L_Q'(\xi_j)(\xi_i - \xi_j)}, & i \neq j,\ 0 \leq i, j \leq Q-1, \\ \frac{\xi_i}{1-\xi_i^2}, & i = j. \end{cases}$$

# Matriz de diferenciação: Gauss–Radau–Legendre

2. *Gauss–Radau–Legendre* incluindo ponto $\xi = -1$

$$\xi_i = \begin{cases} -1, & i = 0, \\ \xi^{0,1}_{i-1,Q-1}, & i = 1, \ldots, Q-1, \end{cases}$$

$$d_{ij} = \begin{cases} \frac{-(Q-1)(Q+1)}{4}, & i = j = 0, \\ \frac{L_{Q-1}(\xi_i)}{L_{Q-1}(\xi_j)} \frac{1-\xi_j}{(1-\xi_i)(\xi_i-\xi_j)}, & i \neq j,\ 0 \leq i, j \leq Q-1, \\ \frac{1}{2(1-\xi_i)}, & 1 \leq i = j \leq Q-1. \end{cases}$$

# Matriz de diferenciação: Gauss–Lobatto–Legendre

3. *Gauss–Lobatto–Legendre*

$$\xi_i = \begin{cases} -1, & i = 0, \\ \xi^{1,1}_{i-1,Q-2}, & i = 1, \dots, Q-2, \\ 1, & i = Q-1, \end{cases}$$

$$d_{ij} = \begin{cases} \frac{-Q(Q-1)}{4}, & i = j = 0, \\ \frac{L_{Q-1}(\xi_i)}{L_{Q-1}(\xi_j)} \frac{1}{\xi_i - \xi_j}, & i \neq j,\ 0 \leq i, j \leq Q-1, \\ 0, & i \leq i = j \leq Q-2, \\ \frac{Q(Q-1)}{4}, & i = j = Q-1. \end{cases}$$