

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

LUÍS HENRIQUE HATASHITA

ANÁLISE DE ESTIMADOR DE ERRO *A POSTERIORI*

CURITIBA

2022

LUÍS HENRIQUE HATASHITA

ANÁLISE DE ESTIMADOR DE ERRO *A POSTERIORI*

***A posteriori* error estimator analysis**

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação apresentado como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica do Curso de Bacharelado em Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Hilbeth Parente Azikri de Deus

CURITIBA

2022



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Esta licença permite download e compartilhamento do trabalho desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es), sem a possibilidade de alterá-lo ou utilizá-lo para fins comerciais. Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.

LUÍS HENRIQUE HATASHITA

ANÁLISE DE ESTIMADOR DE ERRO A *POSTERIORI*

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação apresentado como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica do Curso de Bacharelado em Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná.

Data de aprovação: 10/maio/2022

Hilbeth Parente Azikri de Deus
Doutorado em Engenharia Mecânica
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Ivan Moura Belo
Doutorado em Engenharia Mecânica
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Marcio Henrique de Avelar Gomes
Doutorado em Engenharia Mecânica
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

CURITIBA
2022

Dedico este trabalho à minha família, amigos e
professores que me auxiliaram e me
acompanharam durante toda minha trajetória
na UTFPR.

AGRADECIMENTOS

Meras palavras não são capazes de representar minha gratidão perante as pessoas que me auxiliaram direta e indiretamente para no planejamento e execução de meu trabalho de conclusão de curso.

O percurso foi indubitavelmente árduo e penoso não só física como mentalmente. Contudo, pude por meio de certas pessoas trilhar um caminho na UTFPR desde o curso técnico até a graduação em engenharia mecânica.

Em primeiro lugar, agradeço a minha família pelo apoio essencial no período final, principalmente durante o período de reclusão requerido pelo isolamento social necessário à pandemia do COVID-19.

Aos meus colegas, não só da engenharia mecânica, como de outros cursos, os quais me propiciaram com conselhos e momentos de descontração. Em especial a Gabriel Kuhnen, Gabriel Espinola, Matheus Todt e Vinicius Inoue.

Ao corpo docente que me auxiliou não somente na reta final como nos próximos passos à graduação. Particularmente ao meu orientador Prof. Dr. Hilbeth Parente Azikri de Deus e ao Prof. Dr. Carlos Henrique da Silva.

Ademais, gostaria ainda de mencionar o quanto sou grato pela oportunidade de ter passado nove anos desde o início de minha trajetória na UTFPR e por todas as pessoas que pude conhecer e conviver. Prezo pela relação com todos e espero que o caminho de todos seja livre, brilhante e feliz.

RESUMO

Simulações computadorizadas trazem consigo inevitavelmente erros numéricos, independentemente do quão sofisticado seja o modelo matemático. Portanto, a teoria de estimativa de erro se fez essencial e vem ganhando espaço pelo benefício que traz para prover as bases de simulações de fenômenos físicos essenciais em aplicações de engenharia. Em determinados casos, como em Mecânica Estrutural, faz-se juz ainda à confiabilidade dos resultados obtidos e ainda caso não haja um problema *Benchmark* para validação, a estimativa *a posteriori* provem uma forma de segurança. Logo, o presente trabalho aspira desenvolver e validar um estimador de erro *a posteriori* através de um problema modelo baseado na equação de Laplace. A validação de tal estimador consiste na comparação entre seus semelhantes encontrados na literatura e na comparação entre tipos de refino do tipo h , uniforme e adaptativo. Encontraram-se resultados promissores em termos de erro total para o estimador proposto, o qual produz resultados coerentes comparado a um segundo estimador. Contudo, ainda exige-se um estudo mais aprofundado em termos de gasto computacional. Enfim, permitiu-se então a evolução dessa linha de pesquisa na UTFPR com a realização de tal investigação e ainda sugerem-se temas para seguimento de tais estudos.

Palavras-chave: fem; equação de laplace; análise funcional; estimativa de erros *a posteriori*.

ABSTRACT

Computational simulations undoubtedly bring numerical errors alongside them, even if the mathematical model is sophisticated. Therefore, the theory of error estimation became essential and is gaining space due to the benefits it promotes by providing the simulation basis for the essential physical phenomenon in engineering applications. In certain cases, such as Structural Mechanics, it is also required a degree of reliability and there can not be a benchmark problem for its validation, whereas *a posteriori* error estimation supplies this aspect of safety. Consequently, the present project wishes to develop and validate an *a posteriori* error estimator through a model problem based on the Laplace equation. The validation of such estimator requires a comparison within others of the same type and within h refinement types, uniform and adaptive. Promising results of total error were achieved for the proposed estimator, which produces coherent results when compared to a second one. Nonetheless, a more in-depth analysis of computational processing expenditure is required. Finally, the advancement of this line of research at UTFPR was allowed by the investigation and other subjects are suggested as a form of extension of such studies.

Keywords: fem; laplace equation; functional analysis; *a posteriori* error estimation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Fluxo MEF	15
Figura 2 – Ímã permanente: demonstrativo de linhas equipotenciais	16
Figura 3 – Intersecção Áreas de Pesquisa	21
Figura 4 – Diagrama de Venn dos Espaços de Funções	23
Figura 5 – Modelização em Elementos Finitos	32
Figura 6 – Etapas de AEF	33
Figura 7 – Elementos CG_q de Lagrange	35
Figura 8 – Triangulação 2D	35
Figura 9 – a) Partição não regular. b) Partição regular.	36
Figura 10 – a) Triângulo Quártico de Hermit. b) Triângulo Quinto de Argyris.	37
Figura 11 – a) Base Global. b) Base Local.	39
Figura 12 – Mapa Afim do Triângulo de Referência para o Elemento	40
Figura 13 – Algoritmo de Adaptatividade	45
Figura 14 – Fluxograma da metodologia	48
Figura 15 – Esquemático Elementos Finitos	52
Figura 16 – IDE - Spyder	56
Figura 17 – Comportamento iterativo da solução e do estimador de erro	59
Figura 18 – Parcelas de resíduo interno e de borda por tipo de refino	61
Figura 19 – Distribuições de gasto computacional por tipo de refino	62
Figura 20 – Erro total para refinamentos uniforme e adaptativo e estimadores um e dois	64
Figura 21 – Erro total e parcelas de resíduo por tipo de refino para $N_e = 10$ e $tol_e = 0,0001$	64
Figura 22 – Tempo gasto para refinamentos uniforme e adaptativo e estimadores um e dois	65
Figura 23 – Tempo gasto por tipo de refino e estimador para $N_e = 10$ e $tol_e = 0,0001$	65
Figura 24 – Comparação de tipos de refino através da média η_K e da soma η_K	67
Figura 25 – Erro absoluto do erro total (soma η_K)	67
Figura 26 – Erro relativo do erro total (soma η_K)	68
Figura 27 – Histograma dos refinamentos do domínio	68
Figura 28 – Comportamento iterativo da solução e do estimador de erro - pares (2) e (3)	70
Figura 29 – Gasto computacional para os pares (2) e (3)	71

Figura 30 – Influência do número de elementos inicial através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total	72
Figura 31 – Influência da tolerância de erro individual através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total	73
Figura 32 – Erro total para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual	74
Figura 33 – Tempo gasto para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual	75

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros de entrada para análise inicial	59
Tabela 2 – Medições de tempo gasto em segundos	61
Tabela 3 – Parâmetros de entrada para avaliar consistência dos resultados	69
Tabela 4 – Pares de parâmetros de entrada para avaliar comportamento da solução e do estimador	69
Tabela 5 – Iterações necessárias por tipo de refino	69
Tabela 6 – Gasto computacional por tipo de refino	70
Tabela 7 – Erro total e número de elementos final com tolerância de erro individual = 0,0001	72
Tabela 8 – Tempo gasto e número de iterações com tolerância de erro individual = 0,0001	73

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Siglas

AEF	Análise de Elementos Finitos
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
IDE	<i>Integrated Development Environment</i> , do inglês, ambiente de desenvolvimento integrado
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
UTFPR	Universidade Tecnológica Federal do Paraná

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Método dos elementos finitos	15
1.2	Estimadores de erro	17
1.2.1	Tipos de Estimador de Erros <i>a Posteriori</i>	18
1.3	Equações diferenciais parciais	18
1.3.1	Equação de Laplace	19
1.4	Justificativa	20
1.5	Objetivos	21
1.5.1	Objetivo Geral	21
1.5.2	Objetivos Específicos	21
1.6	Estrutura	21
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
2.1	Análise funcional	23
2.1.1	Espaços Vetoriais	24
2.1.1.1	Norma	25
2.1.1.2	Produto interno	26
2.1.1.3	Completude	27
2.1.1.4	Derivada fraca	28
2.1.1.5	Espaços de Sobolev	28
2.1.1.5.1	<i>Propriedades dos espaços de Sobolev</i>	29
2.1.2	Formulação Variacional	29
2.1.3	Existência e Unicidade de Solução	31
2.2	MEF	32
2.2.1	Métodos de Aproximação	33
2.2.2	Triangulação	34
2.2.2.1	Tipos de elementos	36
2.2.3	Espaços dos Elementos Finitos	37
2.2.3.1	Bases nodais	37
2.2.3.2	Funções de forma	38
2.2.4	Integração Numérica	40

2.3	Estimador de erro	40
2.3.1	Requisitos de Construção de Estimador de Erro	41
2.3.2	Dedução de Estimador <i>A Posteriori</i>	42
2.3.3	Adaptatividade	45
2.3.4	Validação de Estimador	46
3	METODOLOGIA	48
3.1	Revisão bibliográfica	48
3.1.1	Problema Modelo	49
3.2	Formulação variacional	49
3.3	Definição de base nodal e funções de forma	51
3.3.1	Funções de Forma em Coordenadas Globais e Locais	51
3.4	Resolução do problema	52
3.5	Aplicação do estimador de erro	54
3.6	Processo iterativo de adaptatividade	55
3.7	Avaliação das hipóteses	55
3.8	Implementação numérica	55
4	RESULTADOS	57
4.1	Hipóteses	57
4.2	Parâmetros	57
4.2.1	Parâmetros de entrada	58
4.2.2	Parâmetros de saída	58
4.3	Comportamento iterativo da solução	59
4.3.1	Gasto computacional	61
4.3.2	Comparação com segundo estimador	62
4.3.2.1	<u>Derivação do segundo estimador</u>	63
4.3.2.2	<u>Erro total e tempo gasto para o segundo estimador</u>	63
4.3.2.3	<u>Síntese de comparação com o segundo estimador</u>	66
4.3.3	Refino uniforme e adaptativo	66
4.4	Variando parâmetros de entrada	69
4.4.1	Comportamento iterativo da solução com outros pares de parâmetro	69
4.4.2	Influência do número de elementos inicial	71
4.4.3	Influência da tolerância de erro individual	73

4.4.4	Abordagem ampla de parâmetros de entrada	74
5	CONCLUSÃO	76
	REFERÊNCIAS	77

1 INTRODUÇÃO

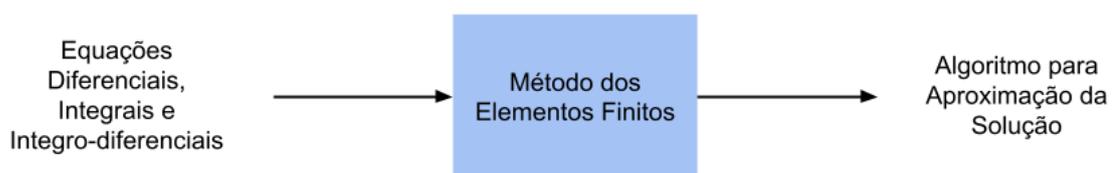
O presente capítulo destina-se a apresentar um contexto geral sobre o método dos elementos finitos, estimadores de erro e a equação da difusão de calor, visando prover os elementos necessários para descrever a situação problema e conseqüentemente justificar a proposta. Posteriormente estabelecer os objetivos gerais e específicos e evidenciar a estrutura da monografia.

1.1 Método dos elementos finitos

Zienkiewicz e Taylor (2000) inicialmente evidenciam uma possível origem do método de elementos finitos (MEF¹) através da concatenação de duas abordagens, de matemáticos e engenheiros. Enquanto os primeiros elaboravam técnicas aplicadas a equações diferenciais, como aproximações por diferenças finitas e procedimentos de resíduos ponderados variados. Por outro lado, os segundos, criaram uma analogia entre elementos reais discretos e porções finitas do domínio contínuo, trazendo assim uma abordagem mais intuitiva.

MEF garante o formalismo necessário para obter as soluções aproximadas das equações diferenciais através de discretização do problema. Portanto, o método transforma o espaço de dimensão infinita, no qual equações diferenciais (problemas de valor de borda) estão definidas, em uma discretização finita do problema, gerando uma aproximação para a respectiva solução conforme a Figura 1 (BRENNER, 1994).

Figura 1 – Fluxo MEF



Fonte: Autoria própria (2021).

Logo, vem a seguinte descrição de MEF por Zienkiewicz e Taylor (2000) com relação ao método de aproximação em meios contínuos:

1. o meio contínuo é dividido em um número finito de partes (elementos), cujo comportamento é especificado por um número finito de parâmetros, e
2. a solução do sistema completo, como um conjunto, segue precisamente as mesmas regras às aplicadas aos problemas discretos.

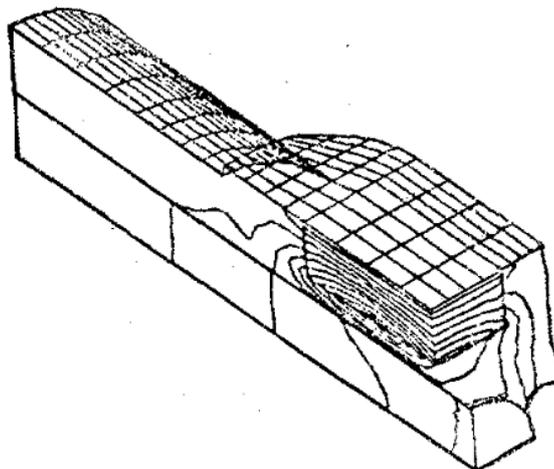
¹ Método dos Elementos Finitos

A versatilidade de aplicações em diversas geometrias, proporcionada pela aplicação do MEF, é sua principal vantagem. Portanto, a habilidade de lidar com condições de contornos genéricas e ainda incluir propriedades de materiais não homogêneos e anisotrópicos se destaca. Logo, essas propriedades garantem que sistemas formados por regiões de materiais diferentes também possam ser tratados, nos quais as propriedades dos materiais podem variar livremente no espaço. E além disso, pode-se adicionar outro grau de flexibilidade quanto aos carregamentos e condições de contorno (AKIN, 2005).

E segundo Nagel (2012), sob o ponto de vista metodológico, MEF é similar ao método de diferenças finitas (MDF²) pela forma de obter as soluções aproximadas e também permite a resolução dos mesmos problemas físicos. Contudo, MEF é mais vantajoso em relação ao MDF por permitir que seus pontos de referência sejam atribuídos em posições mais ajustáveis, enquanto o outro somente permite grades retangulares. Isso ocorre pelo fato que MEF não simplesmente aproxima numericamente o campo da derivada parcial das equações diferenciais, e, em alguns casos, visa minimizar a energia total contida no sistema de elementos ou volumes discretos quando associado a um fenômeno físico.

Dentre aplicações práticas, MEF inclui problemas de análise de tensão, condução de calor, campos elétricos e magnéticos, como visto na Figura 2 por exemplo. E ainda permite a solução de problemas não lineares como a equação de Navier-Stokes (NAGEL, 2012; AKIN, 2005).

Figura 2 – Ímã permanente: demonstrativo de linhas equipotenciais



Fonte: Adaptado de Coulomb (1981).

Por fim, Akin (2005) reitera que o contexto de análises de elementos finitos (AEF³) é tão recorrente que raramente se identificam projetos que não a necessitam na engenharia moderna. E atualmente, estimadores de erro aplicados na metodologia de adaptatividade de malha atingiu um nível, garantindo que a simulação seja econômica computacionalmente e confiável.

² Método das Diferenças Finitas

³ Análise de Elementos Finitos

AEF é uma área de pesquisa ativa, visando maior acuracidade enquanto minimiza o custo computacional. Suas tendências são a utilização de estimadores de erro e adaptatividade automática de malha, mais especificamente ligado a modificações de forma e otimização de processos (AKIN, 2005). Portanto, a próxima seção visa elaborar um descritivo inicial dos estimadores de erro, bem como algumas aplicações.

1.2 Estimadores de erro

Erro numérico é intrínseco a esses problemas no panorama de MEF, visto que é necessário realizar um processo de discretização para transformar um modelo contínuo em outro adequado, pois computadores não são capazes de capturar todas as características provenientes do modelo sob a forma de equações diferenciais parciais ou equações integrais (AINSWORTH; ODEN, 2000).

Ademais, conforme Verfurth (1996), em soluções numéricas, tem-se os seguintes problemas: dificuldade em manter a precisão geral da aproximação numérica em torno de singularidades, como cantos agudos ou camadas internas ou de fronteira; e estimar a precisão da solução com confiabilidade.

Estimativas *a priori*, fornecem dados de convergência e estabilidade de diversos algoritmos e em suma não necessitam de nenhuma solução prévia para cálculo. E são obtidos de quantificadores oriundos de análise funcional. Seus usuários têm conhecimento da presença de erros numéricos, porém, não visam quantificá-los. E portanto, fazem uso de argumentos heurísticos ou físicos, possivelmente errôneos, baseados em seus próprios julgamentos (AINSWORTH; ODEN, 2000).

Portanto, visando contornar a problemática supracitada, surge a necessidade de um estimador de erro capaz de ser extraído da solução numérica e dos dados do modelo. O estimador de erro *a posteriori* deve ser calculado localmente e prover limites superior e inferior para o erro calculado para uma norma especificada. O limite superior global permite avaliar a precisão da solução de acordo com uma tolerância prescrita, enquanto o inferior local é necessário para que a malha seja refinada corretamente. E conseqüentemente, tem-se o balanço de precisão e eficiência computacional (VERFURTH, 1996).

Pode-se condensar as definições de estimadores de erro *a priori* e *a posteriori* conforme as Equações (1) e (2) respectivamente (LOGG; MARDAL, 2021):

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

$$e = e(u_h), \quad (2)$$

onde u é a solução explícita e u_h é a solução discreta.

Desse modo, torna-se evidente que o estimador de erro *a posteriori* é função da aproximação numérica e se faz ainda mais necessário em problemas sem solução explícita, mesmo que provado existência, unicidade e estabilidade, alguns casos para estimadores *a priori*.

1.2.1 Tipos de Estimador de Erros *a Posteriori*

Segundo Verfurth (1996), os estimadores de erro *a posteriori* podem ser classificados em:

1. *Erro residual*: erro estimado a partir de uma norma especificada do residual com relação a forma forte da equação diferencial.
2. *Solução de problemas locais*: resolver localmente problemas discretos mais simples que o modelo global e estimar o erro local a partir de uma norma especificada.
3. *Base hierárquica*: avaliar o residual da solução, comparando com espaço de elementos finitos de ordem superior ou malha mais refinada.
4. *Médias*: faz uso de extrapolações locais ou técnicas de média para estimar o erro.

1.3 Equações diferenciais parciais

Na metade do século XX, a teoria das equações diferenciais parciais (EDPs) era considerada como o pináculo da matemática, pela dificuldade e significância dos problemas, cuja solução era possibilitada pela tal. Dentre as fontes de EDPs, encontra-se principalmente em modelos matemáticos de meio contínuo e física teórica. Ademais, surgem princípios e conceitos físicos como o de Huygen, transformação de Legendre e a dualidade de onda e partícula, e em conjunto com o desenvolvimento de áreas matemáticas como a teoria das séries de Fourier, análise funcional e teoria de assíntotas de integrais. A familiaridade com os conceitos citados é essencial para todo matemático (ARNOLD, 2004).

Assim sendo, uma classe importante de equações funcionais é a das EDPs, são equações ou sistemas de equações cujas variáveis são funções com mais de uma dimensão. E como analogia, pode-se referir às EDPs que estão para as funções assim como equações polinomiais (como $x^2 + y^2 = 1$) estão para números. Além disso, o fator que distingue as EDPs, com relação às outras equações funcionais mais genéricas, é que incluem variáveis funcionais e suas respectivas derivadas parciais. Outras classes relevantes de equações funcionais são as equações integrais, as quais envolvem integrais das variáveis funcionais, e equações diferenciais ordinárias (EDOs), nas quais a variável funcional possui apenas uma dimensão (KLAINERMAN, 2010).

Não obstante, Evans (1998) evidencia que não há uma teoria geral conhecida com relação a solvabilidade de todas as EDPs. A existência de tal teoria é incerta, devido a vasta va-

riedade fenômenos físicos, geométricos e probabilísticos que podem ser modelados por EDPs. Consequentemente, pesquisas têm como foco problemas particulares, cujas aplicações dentro e fora da matemática são relevantes, e visam paralelamente encontrar relações para suas soluções a partir das origens das EDPs modeladas. Isto posto, a próxima sub seção tem por objetivo propor o contexto necessário para uma das aplicações mais conhecidas dentre as EDPs lineares.

1.3.1 Equação de Laplace

DiBenedetto (1995, p. 51), descreve o problema:

Para Ω um domínio em \mathbf{R}^N , $N \geq 2$, cuja fronteira $\partial\Omega$ é de classe C^1 . Pontos em Ω são denotados por $x \equiv (x_1, x_2, \dots, x_N)$. A função $u \in C^2(\Omega)$ é harmônica em Ω se

$$\Delta u = \operatorname{div} Du = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} u = 0 \quad \text{em } \Omega \quad (3)$$

onde o operador formal Δ é chamado de Laplaciano.

Evans (1998, p. 20) evidencia as interpretações físicas a partir da equação de Laplace vêm de diferentes contextos. Normalmente, u denota a densidade de alguma quantidade em equilíbrio (como a concentração química, por exemplo). Então, se V é qualquer sub região lisa dentro de U , o fluxo líquido de u através de ∂V é zero conforme a Equação (4):

$$\int_{\partial V} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS = 0, \quad (4)$$

\mathbf{F} denota a densidade do fluxo e $\boldsymbol{\nu}$ o vetor unitário normal à superfície.

E através do teorema de Gauss-Green, tem-se a Equação (5):

$$\begin{aligned} \int_V \operatorname{div} \mathbf{F} \, dx &= \int_{\partial V} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS = 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{F} &= 0 \quad \text{em } U, \end{aligned} \quad (5)$$

como V é arbitrário. É comum assumir que o fluxo \mathbf{F} é proporcional ao gradiente Du , porém no sentido oposto (pois o fluxo ocorre de regiões de maior para menor concentração).

Além do mais, vem a Equação (6):

$$\mathbf{F} = -aDu \quad (a > 0). \quad (6)$$

Substituindo a Equação (6) na Equação (5) vem a Equação (3).

Resumidamente, Evans (1998) exemplifica as aplicações da equação de Laplace para concentração química, temperatura e potencial eletrostático, as respectivas leis:

- lei de Difusão de Fick;

- lei de Condução de Calor de Fourier;
- lei de Condução Elétrica de Ohm.

Pode-se agregar ainda ao compilado a área de aplicação mecânica da Equação (3), foco do trabalho, a qual representa o comportamento de uma membrana elástica.

DiBenedetto (1995) também declara mais especificamente algumas implicações físicas à equação de Laplace, como:

- Condução de calor em regime permanente em um corpo homogêneo com capacitância e condutividade de calor constantes;
- Fluxo de fluido incompressível em regime permanente em meio poroso com permeabilidade constante;
- Potencial gravitacional em \mathbf{R}^N gerado por distribuição de massa uniforme.

Outra característica relevante do operador, sob o ponto de vista matemático, é sua invariância com relação a rotações e translações dos eixos de coordenada. Essa propriedade é chamada de simetria esférica do Laplaciano em \mathbf{R}^N (DIBENEDETTO, 1995). Tendo em vista as proposições anteriormente postas, elabora-se na sessão seguinte a caracterização da situação problema e a justificativa para o estudo de tal.

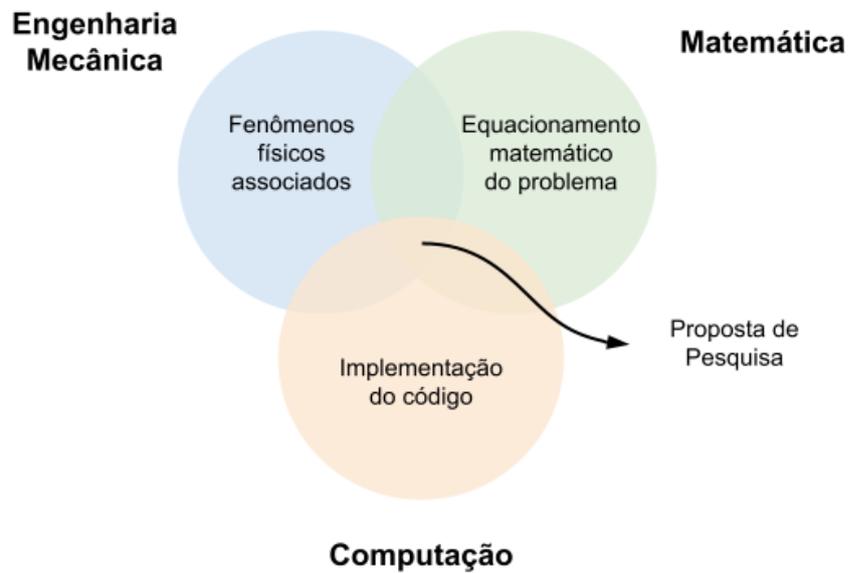
1.4 Justificativa

Dado os panoramas sobre simulações numéricas com seus respectivos erros associados e a modelização teórica de fenômenos físicos a partir de equacionamentos matemáticos, evidencia-se essa área de intersecção apresentada na Figura 3 base para a execução do trabalho.

Inicialmente para o desenvolvimento do modelo teórico da equação de Laplace, tópicos de existência e unicidade de solução serão abordados para prover todo o equacionamento e hipóteses necessárias. A implementação da solução discreta pelo método de elementos finitos e do respectivo estimador de erro à posteriori requerirá conhecimentos de programação. Por fim, o resultado obtido garantirá a compreensão de fenômenos físicos como a condução de calor em regime permanente em meio contínuo com capacitância e condutividade constantes.

A seção 1.5.2 apresentará mais detalhadamente os objetivos a serem cumpridos para a execução da pesquisa. Dentre eles, tópicos em cada área apresentada na Figura 3 serão apresentados e discutidos e ao final a validação do estimador de erro proposto permitirá uma visão geral do contexto abordado.

Figura 3 – Intersecção Áreas de Pesquisa



Fonte: Autoria própria (2021).

1.5 Objetivos

Os objetivos foram divididos em objetivo geral e específicos, apresentados a seguir:

1.5.1 Objetivo Geral

O objetivo geral é realizar um estudo numérico-computacional de uma abordagem em um meio contínuo unidimensional (sólido) com estimativa de erros à posteriori.

1.5.2 Objetivos Específicos

Para atingir o objetivo geral, os seguintes objetivos específicos devem ser cumpridos:

1. Desenvolver o equacionamento para o modelo teórico em meios contínuos via MEF.
2. Implementar o código computacional para o meio contínuo elaborado.
3. Deduzir e derivar o estimador de erro, aplicado ao problema em meio contínuo.
4. Aplicar o estimador de erro elaborado para o refinamento de malha h adaptativo.

1.6 Estrutura

O presente trabalho foi dividido em cinco sessões: introdução, revisão bibliográfica, metodologia, resultados e conclusão.

A seção 1 apresenta o contexto geral necessário para o descritivo inicial do problema proposto e os respectivos objetivos necessários para a execução da pesquisa. Posteriormente, a seção 2 evidencia toda a base científica requisitada para o desenvolvimento do trabalho.

O desenvolvimento da pesquisa exige evidenciar a forma de execução apresentada na seção 3 através da metodologia científica utilizada, dedução do equacionamento e ferramentas necessárias para a implementação numérica. Haja vista os requisitos, os respectivos resultados são apresentados em conjunto com o descritivo de hipóteses, experimentos e discussões na seção 4.

Enfim, finaliza-se o desenvolvimento e dá-se início a síntese de conclusões na seção 5 e adicionam-se as referências bibliográficas utilizadas em sua sequência.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O presente capítulo visa fornecer o referencial teórico necessário para a execução da proposta de pesquisa.

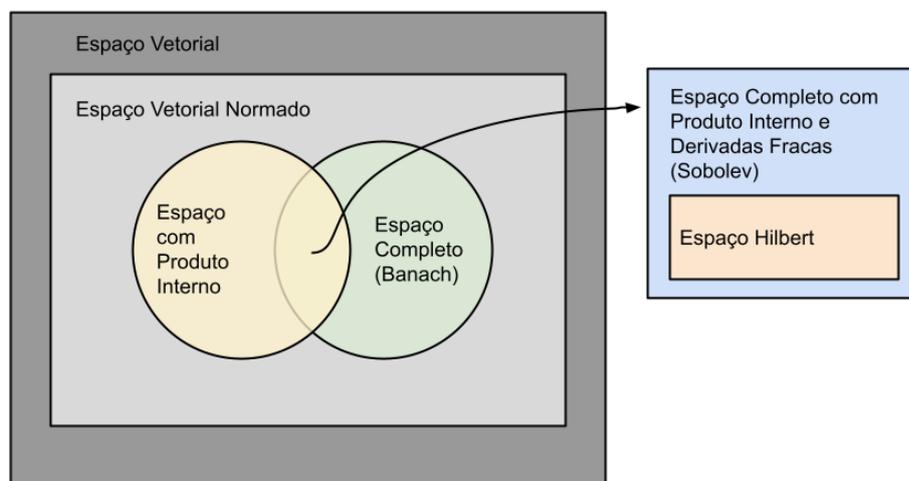
2.1 Análise funcional

O surgimento do campo de análise funcional é oriundo da generalização de diversos conceitos e métodos de ramos da matemática clássica. A derivação de soluções de problemas provenientes da análise clássica e matemática aplicada é o principal resultado ofertado por essa disciplina. E mais especificamente, pode-se identificar que teorias modernas de aproximação, equações diferenciais e física matemática são usuários de tais conceitos fornecidos (SMIRNOV, 1964).

Tais conceitos são base do formalismo postulado pelo MEF, principal vantagem do método quando comparado com MDF. Baseia-se na formulação variacional de problemas de valor de borda, através da redefinição do mesmo anteriormente delimitado em espaços de dimensões infinitas para outros de dimensões finitas. O que ainda permite que propriedades de convergência sejam derivadas (BRENNER, 1994).

Tendo em vista que o MEF pode ser classificado como um *framework* de resolução de EDPs, devem ser introduzidos conceitos e notações oriundos da análise funcional (LOGG; MARDAL, 2021). A Figura 4 apresenta a composição dos espaços vetoriais a serem posteriormente abordados.

Figura 4 – Diagrama de Venn dos Espaços de Funções



Fonte: Adaptado de (LOGG; MARDAL, 2021).

Apesar dos axiomas, definições e teoremas referentes a topologia de espaços vetoriais serem amplamente difundidos, realiza-se uma verificação da literatura de base, cf. (ATKINSON, 2009), (BRENNER, 1994), (DAUTRAY, 1988) e (SOBOLEV, 1991).

2.1.1 Espaços Vetoriais

Problemas analisados em sua maioria não se restringem apenas a uma função, métrica ou operador específicos, contudo, abrangem classes maiores desses objetos. Dentre as quais se destacam espaços vetoriais, podendo conter escalares reais ou complexos. E conforme supracitado, esses espaços são munidos com métricas ou topologias adequadas para suprir a aplicação de limites que descrevem as relações entre seus objetos (RUDIN, 1991).

Espaços vetoriais (ou lineares) ainda são utilizados para resolver a maior parcela de problemas oriundos de equações diferenciais, integrais e integro-diferenciais, onde são a configuração padrão. Permitem também solucionar e caracterizar a teoria de aproximação, teoria de otimização e outros tópicos em matemática aplicada (ATKINSON, 2009). Logo, vem a seguinte definição do mesmo autor:

Definição 2.1.1. *Tem-se V um conjunto de objetos, a serem chamados de vetores; e tem-se \mathbb{K} um conjunto de escalares, reais \mathbb{R} ou complexos \mathbb{C} . No qual se assumem duas operações: $(u, v) \mapsto u + v \in V$ e $(\alpha, v) \mapsto \alpha v \in V$, chamados de **adição** e **multiplicação escalar** respectivamente, definidos $\forall u, v \in V$ e $\forall \alpha \in \mathbb{K}$. Obtêm-se então as seguintes regras a partir dessas operações:*

1. $u + v = v + u \forall u, v \in V$ (*propriedade comutativa*);
2. $(u + v) + w = u + (v + w) \forall u, v, w \in V$ (*propriedade associativa*);
3. $\exists 0 \in V$ tal qual $0 + v = v \forall v \in V$ (*existência do elemento zero*);
4. $\forall v \in V$, tem um elemento $-v \in V$ tal qual $v + (-v) = 0$ (*existência de elementos negativos*);
5. $1v = v \forall v \in V$;
6. $\alpha(\beta v) = (\alpha\beta)v \forall v \in V$, e $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{K}$ (*propriedade associativa para multiplicação escalar*);
7. $\alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v$ e $(\alpha + \beta)v = \alpha v + \beta v \forall u, v \in V, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{K}$ (*propriedade distributiva*).

Então vem que V é um **espaço linear**, ou um **espaço vetorial** (ATKINSON, 2009, p. 1).

A partir da definição 2.1.1 verifica-se que é possível utilizar notações compactas de soma como $\sum_{i=1}^n u_i$, pois as propriedades comutativa e associativa de soma garantem que a ordem

da operação gera ambiguidade. E também define-se a operação de subtração pela existência de elementos zero e negativos (ATKINSON, 2009).

2.1.1.1 Norma

Um descritivo completo sobre espaços métricos pode ser encontrado em (KOLMOGOROV; FOMIN, 1957), porém, restringe-se o estudo a espaços com norma devido ao contexto da pesquisa.

No contexto de análises numéricas, questiona-se com recorrência o quão próximo a solução numérica se encontra da solução exata. E para que se realize essa quantificação da magnitude dessa diferença, propõe-se a norma de um vetor em um espaço vetorial como fonte (ATKINSON, 2009). Outro interesse de espaços normados (como espaços de Banach e de Hilbert, a serem posteriormente ilustrados) é a sua aplicação para a medição global de grandezas físicas. Um exemplo específico seria o espaço $H^1(\Omega)$ também conhecido como espaço de energia, visto que modela problemas em sistemas com energia finita (DAUTRAY, 1988). Tendo em vista esse contexto, vem a seguinte definição de norma:

Definição 2.1.2. *Dado um espaço linear (vetorial) V , a norma, $\|\cdot\|$, é uma função em V , cujos valores são não negativos reais, com as seguintes propriedades:*

1. $\|v\| \geq 0 \forall v \in V$ e $\|v\| = 0 \Leftrightarrow v = 0$;
2. $\|c \cdot v\| = |c| \cdot \|v\| \forall c \in \mathbb{R}, v \in V$;
3. $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\| \forall v, w \in V$ (inequação triangular ou inequação de Minkowski).

Então vem que V é um **espaço linear normado**, no qual o espaço vetorial apresenta a norma $\|\cdot\|$ utilizada para definir uma noção de distância, ou métrica, $d(v, w) = \|v - w\|$ para os pontos $v, w \in V$ (BRENNER, 1994, p. 24).

Atkinson (2009) evidencia certas remarcas com relação à definição 2.1.2. Os axiomas apresentados representam analogamente no \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3 a noção de distância de um vetor. O primeiro evidencia que somente o vetor zero possui norma zero, enquanto todos os outros apresentam normas não negativas. O segundo é conhecido também como homogeneidade positiva e o último é uma extensão direta da inequação triangular no plano, na qual o comprimento de cada lado é limitado pela soma dos outros dois.

Para que uma função $\rho(x)$ seja uma norma permissível, além de ser homogênea e não negativa, deve apresentar convexidade com relação ao seus argumentos. Conforme supracitado, a norma de um espaço funcional serve como generalização do conceito geométrico de comprimento de um vetor, e normalmente tem-se adicionado à notação um subscrito com a identificação do espaço no qual a norma é definida, como $\|\cdot\|_{L_p}$ para a norma do espaço L_p (SOBOLEV, 1991).

Tem-se as seguintes normas para alguns espaços vetoriais conhecidos (ATKINSON, 2009):

1. Para $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T$,

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^d x_i^2 \right)^{1/2}, \quad (7)$$

chamada de norma Euclideana, definida nos espaços \mathbb{R}^d ;

2. Para $1 \leq p \leq \infty$,

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^d |x_i|^p \right)^{1/p} \quad \text{para } 1 \leq p \leq \infty, \quad (8)$$

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq d} |x_i|, \quad (9)$$

tem-se que $\|\cdot\|_p$ é chamada de norma-p e $\|\cdot\|_\infty$ norma máxima ou infinita, ambas definidas em \mathbb{R}^d ;

3. Para um inteiro $k > 0$,

$$\|f\|_{k,\infty} = \max_{1 \leq j \leq k} \|f^{(j)}\|_\infty, \quad f \in C^k[a,b], \quad (10)$$

onde $\|f\|_{k,\infty}$ é a norma padrão em $C^k[a,b]$.

2.1.1.2 Produto interno

No contexto de problemas lineares, introduz-se o conceito de espaços com produto interno, nos quais a norma pode ser definida através desse produto e é possível induzir a noção de ortogonalidade entre dois elementos. Num âmbito geral de espaços, o produto interno é a generalização do produto escalar nos espaços \mathbb{R}^2 e \mathbb{R}^3 (ATKINSON, 2009).

Brenner (1994, p. 49) apresenta a seguinte definição de produto interno:

Definição 2.1.3. Uma **forma bilinear**, $b(\cdot, \cdot)$, num espaço linear V é mapa $b : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ tal qual cada mapa $v \rightarrow b(v, w)$ e $w \rightarrow b(v, w)$ é uma forma linear em V . É **simétrico** se $b(v, w) = b(w, v) \forall v, w \in V$. O **produto interno** (real) é uma forma simétrica bilinear no espaço linear V e deve satisfazer:

1. $(v, v) \geq 0 \forall v \in V$;
2. $(v, v) = 0 \Leftrightarrow v = 0$.

Logo, um espaço linear V com um produto interno definido é chamado de **espaço com produto interno** e é identificado por $(V, (\cdot, \cdot))$.

Todo produto interno pode induzir uma norma. Porém, nem toda norma pode ser definida através um produto interno (ATKINSON, 2009). Portanto, identifica-se a veracidade do caráter de que os espaços com produto interno estão contidos nos espaços normados, conforme a Figura 4 (LOGG; MARDAL, 2021).

Dentre os espaços com produto interno conhecidos, pode-se citar (BRENNER, 1994, p. 49):

1. $V = \mathbb{R}^n, (x, y) := \sum_{i=1}^n x_i y_i$;
2. $V = L^2(\Omega), \Omega \subseteq \mathbb{R}^n, (u, v)_{L^2(\Omega)} := \int_{\Omega} u(x)v(x)dx$;
3. $V = W^{k,2}(\Omega), \Omega \subseteq \mathbb{R}^n, (u, v)_k := \sum_{|\alpha| \leq k} (D^\alpha u, D^\alpha v)_{L^2(\Omega)}$.

2.1.1.3 Completude

A definição de um espaço métrico completo V é indicado em (ATKINSON, 2009, p. 15), (BRENNER, 1994, p. 24), (DAUTRAY, 1988, p. 272) e (SOBOLEV, 1991, p. 10). Portanto, vem:

Definição 2.1.4. *Um espaço métrico V é caracterizado como completo se toda sequência de Cauchy v_j de elementos de V tem um limite $v \in V$. E para um espaço linear normado, a sequência de Cauchy é aquela na qual $\|v_j - v_k\| \rightarrow 0$ com $j, k \rightarrow \infty$, e completude significa que $\|v - v_j\| \rightarrow 0$ com $j \rightarrow \infty$.*

Sobolev (1991) apresenta o Teorema de Riesz-Fischer de forma a demonstrar que o espaço L_p é completo. Outro exemplo de espaço completo (conhecidos também como espaços de Banach) é o $C([a, b])$ com sua respectiva norma (ATKINSON, 2009). Dautray (1988) complementa com a definição de espaços completos metrificáveis¹ topológicos convexos localmente, também conhecidos como espaços de Fréchet.

Atkinson (2009) evidencia que além de se trabalhar diretamente com espaços completos, pode-se requisitar que determinado espaço normado seja utilizado. E para tal, descreve um teorema que demonstra que para um espaço normado V , existe um espaço normado completo único W com certas propriedades (vide (ATKINSON, 2009, p. 15)). Esse teorema se faz importante quando se lida com problemas definidos em espaços de funções integráveis por Lebesgue. A partir do qual resultados podem ser provados se referindo somente ao espaço original e sua respectiva norma, mesmo não sendo completo, pois o teorema garante que um espaço de Banach seja obtido.

¹ Um espaço topológico é considerado como metrificável se sua topologia pode ser definida por uma distância

2.1.1.4 Derivada fraca

Dentre as definições de derivadas, a formulação variacional, abordada na seção 2.1.2, requisita uma abordagem global distante da proposta por disciplinas de cálculo, conforme apresenta na Equação (11). Isso decorre da não requisição de valores pontuais de derivada e que para funções nos espaços de Lebesgue esses valores também são irrelevantes. Portanto, desenvolve-se uma definição global adequada para tais espaços (BRENNER, 1994).

$$u'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(x+h) - u(x)}{h}, \quad (11)$$

Para definir o conceito de derivada fraca (generalizada), Atkinson (2009, p. 278) introduz o conceito de função localmente integrável, a qual pode se comportar arbitravelmente mal na vizinhança $\partial\Omega$:

Definição 2.1.5. Para $1 \leq p < \infty$. Uma função $v : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada de localmente p -integrável, $v \in L^p_{\text{loc}}$, se $\forall x \in \Omega$, existe uma vizinhança aberta Ω' de x tal qual $\overline{\Omega'} \subset \Omega$ e $v \in L^p(\Omega')$.

Logo, vem a definição de derivada fraca (ATKINSON, 2009, p. 278), também presente em (SOBOLEV, 1991, p. 32):

Definição 2.1.6. Para Ω um conjunto não vazio em \mathbb{R}^d , $v, w \in L^1_{\text{loc}}(\Omega)$. Então w é chamada de α -ésima derivada fraca de v se

$$\int_{\Omega} v(\mathbf{x}) \partial^\alpha \phi(\mathbf{x}) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} w(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) dx \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega). \quad (12)$$

Onde w também é chamada de derivada fraca de v de ordem $|\alpha|$.

Esse nova definição de derivada é semelhante à apresentada na Equação (11) sempre que a função a ser diferenciada é suficientemente regular. Porém, em casos como a função $f(x) = 1 - |x|$, a noção clássica apresenta uma descontinuidade em $x = 0$, enquanto a derivada fraca garante sua existência (BRENNER, 1994).

2.1.1.5 Espaços de Sobolev

Espaços de Sobolev são indispensáveis para a resolução de equações diferenciais e integrais em âmbitos teórico e numérico (ATKINSON, 2009). Dautray (1988) acrescenta que esses espaços também proporcionam a ferramentas necessárias para a solução de certos problemas não lineares, e que propriedades injetoras entre esses espaços são úteis para problemas lineares.

Atkinson (2009, p. 283) apresenta a definição de regularidade de borda necessária para espaços de Sobolev antes de os definir, conforme abaixo:

Definição 2.1.7. Para k um inteiro não negativo, e $p \in [1, \infty]$. O espaço de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ é um conjunto de todas as funções $v \in L^p(\Omega)$ tal qual $\forall \alpha$ com $|\alpha| \leq k$, a α -ésima derivada fraca $\partial^\alpha v$ existe e $\partial^\alpha v \in L^p(\Omega)$. A norma nesse espaço $W^{k,p}(\Omega)$ é definida por:

$$\|v\|_{W^{k,p}(\Omega)} = \begin{cases} \left[\sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha v\|_{L^p(\Omega)}^p \right]^{1/p}, & 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha v\|_{L^\infty(\Omega)}, & p = \infty. \end{cases} \quad (13)$$

Para $p = 2$, tem-se que $H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega)$, também conhecido como espaço de Hilbert.

Deve-se ressaltar que a definição apresentada é referente a espaços de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ de ordem inteira positiva, podendo ser expandida para qualquer ordem real e transferir propriedades como densidade de funções lisas e teoremas de extensão e de incorporação. Sendo que esse contexto abrangente permite verificar seu estado através de fronteiras e garantir o teorema de traços de Sobolev (ATKINSON, 2009).

Teoremas quanto a completude dos espaços de Sobolev podem ser encontrados em (BRENNER, 1994, p. 29) e em (SOBOLEV, 1991, p. 64).

2.1.1.5.1 Propriedades dos espaços de Sobolev

Dentre as propriedades e resultados obtidos dos espaços de Sobolev, pode-se citar (ATKINSON, 2009):

- Aproximação por funções lisas;
- Extensões;
- Teoremas de incorporação, em problemas de valor de borda, tornam-se relevantes para a análise de regularidade de sua solução fraca;
- Teoremas dos traços, solucionam o problema de má definição do valor de borda de funções de Sobolev;
- Equivalência de normas, facilita o estudo da formulação fraca, em que se pode requerir o comportamento entre espaços e subespaços de Sobolev;
- Espaço quociente, necessário para análise de erro em MEF;

2.1.2 Formulação Variacional

No contexto de física matemática, para determinados problemas, equações de Euler podem ser encontradas, como na Equação (14). Em alguns casos é possível encontrar a solução

explícita diretamente. Contudo, a formulação variacional permite a resolução por outro meio, reduzindo a ordem do problema, no qual o cálculo se reduz a análise de variações (SOBOLEV, 1991).

$$\int_{\Omega} F \left(u, \frac{\partial u}{\partial x_j}, x_j \right) d\Omega + \int_S \Phi \left(u, \frac{\partial u}{\partial x_j}, x_j \right) dS, \quad (14)$$

onde S é a fronteira do domínio Ω .

A formulação forte (Equação (15)) é caracterizada pelo conjunto de equações e condições de contorno, enquanto a formulação fraca (ou variacional) pode ser descrita como na Equação (16). Essa segunda forma remove o requisito de alta suavidade da solução, facilitando a obtenção da mesma. Além disso, questões sobre unicidade e existência da solução podem ser obtidas mais satisfatoriamente na forma fraca e a partir dela métodos numéricos do tipo Galerkin são conduzidos mais naturalmente (ATKINSON, 2009).

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{on } \Gamma. \end{cases} \quad (15)$$

$$u \in H_0^1(\Omega), \quad \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (16)$$

Dautray (1988) apresenta os mesmos argumentos, porém, por outro lado, acrescenta que para analisar a regularidade da solução, outros métodos e hipóteses se fazem necessários.

Pode-se classificar os problemas na forma variacional em simétricos e assimétricos, cujas condições exigidas são (BRENNER, 1994, p. 57):

1. $(H, (\cdot, \cdot))$ é um espaço de Hilbert;
2. V é um subespaço (fechado) de H ;
3. $a(\cdot, \cdot)$ é limitado, e uma forma simétrica (ou não, para o problema assimétrico) bilinear coerciva em V .

O problema é dado $F \in V'$, encontre $u \in V$ tal qual $a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V$ (BRENNER, 1994, p. 58).

E para ambos os casos, Brenner (1994, p. 58,59) apresenta a aproximação de Galerkin, na qual dado um subespaço de dimensão finita $V_h \subset V$ e $F \in V'$, deve-se encontrar $u_h \in V_h$ tal qual $a(u_h, v) = F(v) \quad \forall v \in V_h$. Para o problema simétrico, o Teorema de representação de Riesz garante a existência e unicidade de solução em V para o produto interno e espaços definidos. Entretanto, outro teorema se fará necessário para o segundo caso e será apresentado na seção 2.1.3.

2.1.3 Existência e Unicidade de Solução

A forma variacional é apresentada sob a forma de operadores lineares, a existência de solução para o problema pode ser derivada do seguinte Teorema 2.1.8. Onde uma equação de operador linear, com domínio \mathfrak{D} , imagem \mathfrak{R} e núcleo \mathfrak{N} , deve ser apresentada na Equação (17) (ATKINSON, 2009, p. 330):

$$u \in V, \quad Lu = f, \quad (17)$$

onde $L : \mathfrak{D}(L) \subset V \rightarrow W$, V e W são espaços de Hilbert, e $f \in W$. A solubilidade da equação vem da propriedade $\mathfrak{R}(L) = W$, enquanto a unicidade vem de $\mathfrak{N}(L) = \{0\}$ (ATKINSON, 2009, p. 330).

Teorema 2.1.8. *Para V e W espaços de Hilbert, $L: \mathfrak{D}(L) \subset V \rightarrow W$ um operador linear. Então $\mathfrak{R}(L) = W$ se e somente se $\mathfrak{R}(L)$ é fechado e $\mathfrak{R}(L)^\perp = \{0\}$ (ATKINSON, 2009, p. 330).*

A prova é dada por contradição e demonstrada logo em seguida ao Teorema 2.1.8.

Enquanto a unicidade de solução é verificado com auxílio do Teorema 2.1.9 (ATKINSON, 2009, p. 331).

Teorema 2.1.9. *Para V e W espaços de Hilbert, $L: \mathfrak{D}(L) \subset V \rightarrow W$ um operador linear fechado. Assume-se uma constante $c > 0$, e vem a seguinte estimativa a priori:*

$$\|Lv\|_W \geq c\|v\|_V \quad \forall v \in \mathfrak{D}(L), \quad (18)$$

comumente chamado de estimador de estabilidade. E com $\mathfrak{R}(L)^\perp = \{0\}$. Então $\forall f \in W$, tem-se a solução única (ATKINSON, 2009, p. 331).

Brenner (1994) prova a existência e unicidade de solução através da aproximação da solução, descrevendo o sistema matricial $\mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{F}$, no qual a segunda é equivalente à primeira visto que é finito. A prova é dada por contradição, verificando a não existência de outro valor \mathbf{V} diferente de zero que satisfaz $\mathbf{K}\mathbf{V} = \mathbf{0}$. E para o caso não simétrico, necessita-se do Teorema 2.1.10.

Teorema 2.1.10. *(Lax-Milgram) Para o espaço de Hilbert $(V, (\cdot, \cdot))$, a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ deve ser contínua e coerciva e o operador linear funcional $F \in V'$ deve ser contínuo, então vem uma solução única $u \in V$ tal qual:*

$$a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V. \quad (19)$$

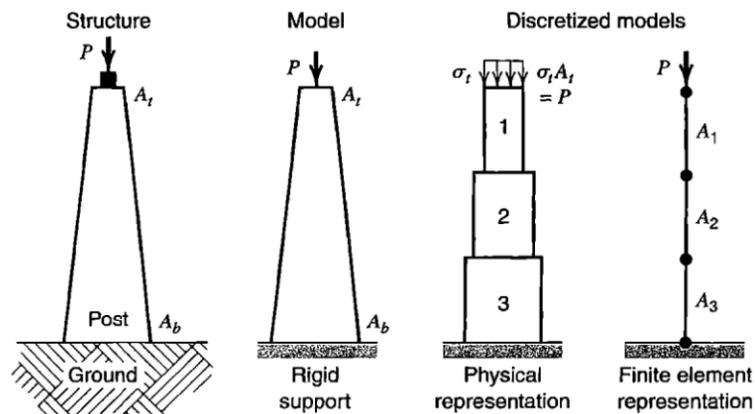
Dautray (1988, p. 425) evidencia os fatores necessário para determinar a regularidade da solução de um problema na forma variacional. Enquanto a regularidade interna depende somente dos coeficientes do operador, e regularidade global, depende da geometria do conjunto e do tipo de condição de contorno.

1. Regularidade dos coeficientes do operador elíptico;
2. Regularidade da fronteira do conjunto aberto Ω e sua geometria;
3. Tipo da condição de contorno do problema.

2.2 MEF

Para a resolução de equações diferenciais, integrais e integro diferenciais na forma variacional, utiliza-se com recorrência o MEF para toda a tratativa matemática, na qual a solução é descrita no espaços de Sobolev (vide seção 2.1.1.5). Porém, a solução discreta é oriunda de um espaço de dimensões finitas por se tratar de uma resolução computacional (BRAESS, 2007).

Figura 5 – Modelização em Elementos Finitos



Fonte: (COOK, 2001, p. 5).

Dentre os métodos de aproximação utilizados para discretizar a formulação (posteriormente abordados na seção 2.2.1), destaca-se o método de Ritz-Galerkin. Esse reduz o problema a um sistema linear de equações, cuja propriedades podem ser otimizadas pelo MEF. Utilizam-se funções de forma com pequeno suporte e pontualmente contínuas, reduzindo assim o número de condição da matriz de rigidez (ATKINSON, 2009).

Ciarlet (1978) complementa que MEF na sua forma mais simplista é uma aproximação de Galerkin com algumas características específicas, além de ser útil para a resolução de problemas de segunda e quarta ordem na forma variacional. MEF, nesse caso, apresenta uma triangulação (união de elementos) como domínio discreto, a solução aproximada é contínua por partes e a base é composta por funções com pequeno suporte.

Atkinson (2009) apresenta os passos usuais, compilados na Figura 6, para a resolução dos problemas supracitados, servindo de guia para a discussão dos conceitos necessários para a execução da proposta.

Em suma, a formulação variacional é aproximada a partir de uma partição (comumente denominada de triangulação). A solução numérica é definida em um espaço específico com

Figura 6 – Etapas de AEF



Fonte: Autoria própria (2021).

funções de forma mantendo o caráter contínuo por partes. Resultando num sistema linear, cuja matriz de rigidez possui zeros dispersos. Por fim, realiza-se a estimativa de erros abordados na seção 2.3 (ATKINSON, 2009).

Braess (2007, p. 27) apresenta um contexto histórico com relação ao surgimento dessa metodologia, porém, evita-se abordá-la para não gerar qualquer polêmica relacionada.

Cita-se frequentemente na literatura o potencial do método na análise computacional de mecânica estrutural. E recomenda-se (BRAESS, 2007) e (COOK, 2001) para esse foco. Contudo, o autor visa o embasamento teórico do tema, cf. (ATKINSON, 2009), (BRAESS, 2007), (BRENNER, 1994), (CIARLET, 1978), (GALVIS; VERSIEUX, 2011) e (LOGG; MARDAL, 2021).

Inicia-se com a definição de elemento finito de Ciarlet (1978, p. 78), *apud* Braess (2007, p. 70), Brenner (1994, p. 69) e Logg e Mardal (2021, p. 35).

Definição 2.2.1. Para

1. $K \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto fechado limitado com interior não vazio e fronteira lisa por partes (domínio);
2. P um espaço de dimensão finita de funções em K (espaço das funções de forma);
3. $N = \{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ a base para P (conjunto de nós)

Então (K, P, N) é chamado de um **elemento finito**.

2.2.1 Métodos de Aproximação

Conforme previamente citado, dentre os métodos de aproximação de problemas na forma variacional, destaca-se o de Ritz-Galerkin, o qual inclui como caso específico o MEF.

A Equação (16) não permite solução explícita diretamente, pois seu espaço possui dimensão infinita. Logo, subdividindo o domínio em subespaços de dimensão finita, obtém-se (ATKINSON, 2009):

$$u_h \in V_h, \quad a(u_h, v) = l(v) \quad \forall v \in V_h. \quad (20)$$

De acordo com o Teorema 2.1.10, tem-se que a solução u_h é única, porém não há uma sobreposição completa com relação a solução explícita u . Contudo, aumentando a dimensão de V_h , u_h se aproxima de u (ATKINSON, 2009).

Galvis e Versieux (2011) acrescenta que para o espaço V_h de dimensão finita, tem-se uma base $\{\phi_i\}_i^{N^h}$, a partir da qual a solução aproximada pode ser descrita:

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^{N^h} \alpha_i \phi_i(x). \quad (21)$$

Rescrevendo a Equação 20 na base $\{\phi_i\}_i^{N^h}$, obtém-se o sistema:

$$A\alpha = b, \quad (22)$$

onde A também é chamada de matriz de rigidez, previamente mencionada.

O presente trabalho se restringe a esse método, porém, Braess (2007) também expõe:

- *Método de Rayleigh-Ritz*: remanejando a Equação 20 para a forma de um operador J , o método propõe a solução a partir de $(\partial/\partial\alpha_i)J(\sum_k \alpha_k \phi_k) = 0$;
- *Método de Petrov-Galerkin*: utilizado quando deve se lidar com singularidades, e portanto, os espaços da solução e da função v tornam-se distintos.

Ciarlet (1978) complementa o Método de Petrov-Galerkin, adicionando que além de singularidades, pode ser empregado na presença de fronteiras curvas no domínio Ω .

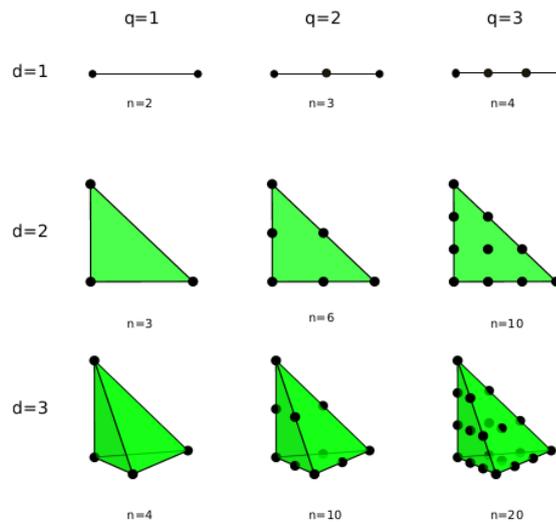
2.2.2 Triangulação

Conforme a Figura 6, postulada a forma variacional, realiza-se a partição do domínio Ω em subdomínios (finitos), conhecidos como elementos. Para uma dimensão, obtém-se segmentos de reta. Para duas, triângulos ou quadriláteros. E em três dimensões, tetraedros, cubos, paralelepípedos e entre outros (BRAESS, 2007).

A Figura 7 apresenta elementos de Lagrange separadamente para cada grau de dimensão d , e a Figura 8 demonstra os subdomínios formados pelos elementos triangulares (LOGG; MARDAL, 2021).

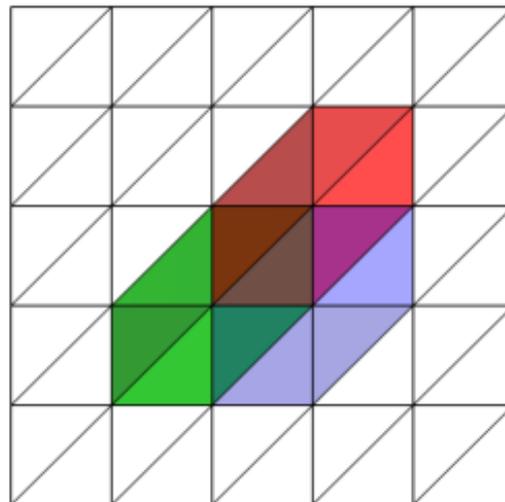
Ciarlet (1978, p. 38) descreve as propriedades necessárias para um triangulação T_h sobre o domínio $\bar{\Omega}$ subdividido em elementos K :

Figura 7 – Elementos CG_q de Lagrange



Fonte: (LOGG; MARDAL, 2021, p. 42).

Figura 8 – Triangulação 2D

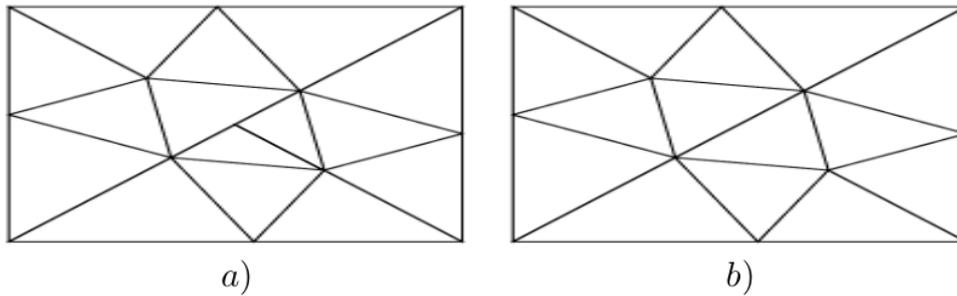


Fonte: Adaptado de (LOGG; MARDAL, 2021, p. 37).

1. $\bar{\Omega} = \cup_{K \in T_h} K$;
2. $\forall K \in T_h$, o subconjunto K é fechado e seu interior $\overset{\circ}{K}$ não é vazio;
3. $\forall K_1, K_2$ distintos $\in T_h$, tem-se que $\overset{\circ}{K}_1 \cap \overset{\circ}{K}_2 = \emptyset$;
4. $\forall K \in T_h$, a fronteira ∂K é Lipschitz contínua.

Destaca-se a característica de regularidade a nível bidimensional, no qual evita-se adicionar vértices ao interior de arestas, exceto em casos em que se decompõe domínios ou realizam-se refinamentos pontuais de malha. A Figura 9 apresenta partições regulares e não regulares (GALVIS; VERSIEUX, 2011):

Figura 9 – a) Partição não regular. b) Partição regular.



Fonte: (GALVIS; VERSIEUX, 2011, p. 20).

2.2.2.1 Tipos de elementos

A escolha do tipo de elemento deve considerar três aspectos: a geometria do problema, para domínio tridimensionais, os tetraedros são recomendados por se adequarem com maior simplicidade; a ordem do postulado, no MEF conforme, os elementos devem ser ao mínimo de classe \mathcal{C}^0 ou \mathcal{C}^1 ; número de condição da matriz de rigidez, evita-se descrever as funções com alto suporte em regiões sem necessidade (CIARLET, 1978).

Como diretrizes para redução de custo computacional na montagem da matriz de rigidez, Ciarlet (1978) indica preferencialmente o uso de subconjuntos com o mesmo número de graus de liberdade e garantir que cada nó seja comum a maior parte dos elementos. Apesar disso, em mecânica dos sólidos, recomenda-se elementos retangulares sobre triângulos (BRAESS, 2007).

Em conjunto com as funções de forma definidas nos espaços dos elementos finitos, Brenner (1994) classifica os tipos de partições para o caso bidimensional em elementos triangulares e retangulares.

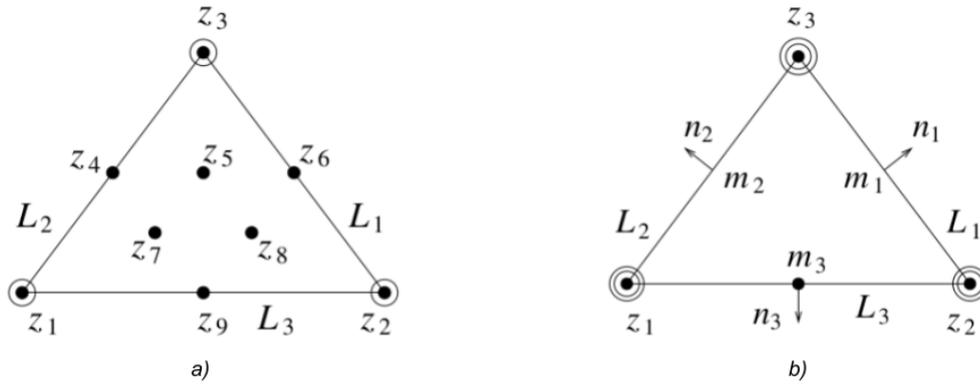
Para elementos triangulares:

- *Elemento de Lagrange* apresenta apenas a avaliação nodal da grandeza, indicado na Figura 7;
- *Elemento de Hermit* adiciona a avaliação do gradiente do centro do elemento;
- *Elemento de Argyris* adiciona a avaliação das segundas derivadas do centro e derivadas normais nos pontos médios das arestas;

Brenner (1994) classifica os elementos retangulares em:

- *Elementos de Produto Tensorial*;
- *Elementos Serendipity* apresentam uma vantagem por não possuírem nós internos, reduzindo as dimensões da matriz de rigidez.

Figura 10 – a) Triângulo Quártico de Hermit. b) Triângulo Quinto de Argyris.



Fonte: Adaptado de (BRENNER, 1994, p. 76).

2.2.3 Espaços dos Elementos Finitos

Brenner (1994) questiona a forma como o espaço dos elementos finitos a fim de descrever todos os conceitos associados. Destaca-se a forma da função, como a função será descrita e quais as restrições em um ponto em comum (nó) no dado subintervalo.

Propriedades de continuidade e diferenciabilidade de caráter global da solução são normalmente definidas nas condições do interpolador. Cita-se o elemento C^k que deve estar contido em $C^k(\Omega)$. E de acordo com o Lema de Céa, a precisão da solução numérica dependerá do espaço funcional escolhido, de modo que aproxime da melhor maneira possível a solução u (BRAESS, 2007).

Previamente à seleção das bases nodais, deve-se garantir as condições de continuidade para $v_h \in V_h$ da Equação 20. Constrói-se um espaço finito V_h de funções lisas por parte para V (ATKINSON, 2009).

$$V_h = \{v_h \in V \mid v_h|_K \in \mathbb{P}_1 \forall K \in T_h\}, \quad (23)$$

onde K são os elementos que compõe a triangulação T_h . Como mencionado acima, a condição que satisfaz que v_h seja lisa é que $v_h \in C(\bar{\Omega})$.

2.2.3.1 Bases nodais

Portanto, Atkinson (2009) expõe que pode-se descrever a função $v_h \in V_h$ por seus valores nos nós. Assim, vem a base nodal do espaço V_h , $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq N_h}$, na qual as funções de base ϕ_i satisfazem:

$$\phi_i \in V_h, \quad \phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq N_h, \quad (24)$$

onde a função δ_{ij} representa o operador delta de Kronecker. E permite descrever as funções u_h e v_h como:

$$u_h = \sum_{i=1}^{N_h} u_i \phi_i, \quad (25)$$

$$v_h = \sum_{j=1}^{N_h} v_j \phi_j. \quad (26)$$

Braess (2007, p. 65) complementa com a definição de base nodal:

Definição 2.2.2. *Dado um espaço de elementos finitos V_h , tem-se um conjunto de pontos que podem descrever qualquer função através de seus valores nos pontos. Então o conjunto de funções nos espaços com condição de valor nulo em um dos pontos formam uma base para esse espaço, chamada de base nodal.*

Segundo a definição 2.2.1, para o conjunto (K, P, N) , a base $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq N_h}$ de P é dual de N e é chamada de base nodal de P (BRENNER, 1994).

2.2.3.2 Funções de forma

Dado o questionamento de Brenner (1994), após realizar a discretização do domínio, e determinar a base nodal, resta a caracterização do espaço P , espaço das funções de forma.

Ciarlet (1978) complementa que o espaço P contém polinômios, ou funções próximas. A descrição desse espaço funcional garantirá todos os resultados de convergência e tem a influência na simplicidade do sistema linear resultante. E além disso, garante que existe ao menos um base "canônica" no espaço V_h .

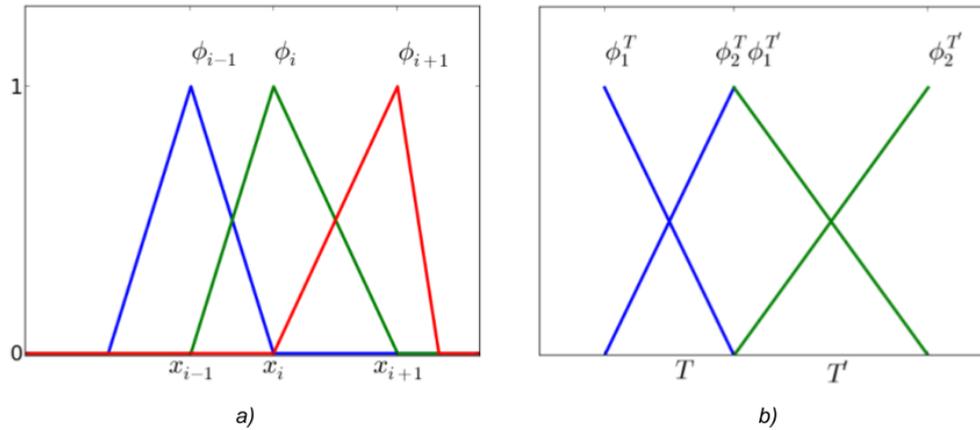
A ordem de aproximação determina a suavidade da solução, para polinômios. Porém, aumentar indefinidamente a ordem não resultará numa precisão maior, visto que em problemas de valor de borda, a suavidade perto da fronteira é afetada. Logo, recomenda-se combinar o refinamento da malha e o ajuste de polinômios lisos por partes, conhecido como método h - p (BRAESS, 2007).

A base nodal especificada por Atkinson (2009) descreve o caráter discreto da função. Porém, a sua continuidade por partes requer o conceito de funções de forma. Para o domínio $\bar{\Omega}$ com os nós x_1, \dots, x_N e para $i = 1, \dots, N - 1$, vem as funções chapéu (caso unidimensional com funções lineares):

$$\phi_i(x) = \begin{cases} (x - x_{i-1})/h_i, & x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ (x_{i+1} - x)/h_{i+1}, & x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ 0, & \text{caso contrario.} \end{cases} \quad (27)$$

Os subdomínios de Ω podem ser conectados por tipos distintos de função como mencionado. Logg e Mardal (2021) apresentam como são construídas as funções de forma em termos do tipo de coordenada utilizada na Figura 11.

Figura 11 – a) Base Global. b) Base Local.



Fonte: Adaptado de (LOGG; MARDAL, 2021, p. 36, 37).

Para problemas de dimensões de ordem maior, introduz-se o conceito de elementos de referência, essenciais para estimativa de erro e implementação do MEF. Visto que a construção da matriz de rigidez exige cálculos exaustivos de integrais, e esse conceito permite replicar as integrais do elemento de referência para todo o domínio (ATKINSON, 2009).

Ciarlet (1978) acrescenta a noção de famílias afim, as quais transladam a imagem obtida através do elemento de referência. Pode-se citar um lema da construção desse método (GALVIS; VERSIEUX, 2011, p. 28).

Lema 2.2.3. Para o elemento K_i da triangulação T_h com vértices $u = (u_1, u_2)$, $v = (v_1, v_2)$ e $z = (z_1, z_2)$ (ordenados em sentido anti-horário), vem as respectivas funções de forma $\phi_1 = \phi_u$, $\phi_2 = \phi_v$ e $\phi_3 = \phi_z$. E para \hat{K} , triângulo de referência, e $F_{K_i} : \hat{K} \rightarrow K$, função afim tal que $F_{K_i}(\hat{K}) = K_i$ e $F_{K_i}(0) = u$, vem:

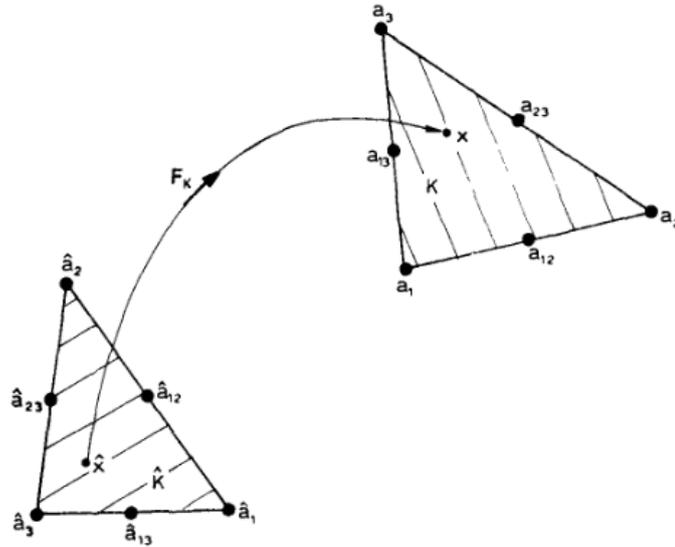
$$F_{K_i}(\hat{K}) = \begin{bmatrix} v_1 - u_1 & z_1 - u_2 \\ v_2 - u_1 & z_2 - u_2 \end{bmatrix} \hat{x} + \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}, \quad \hat{x} \in \hat{K}, \quad (28)$$

e para cada $x \in K_i$, as funções de forma no elemento K_i são:

$$\phi_j(x) = \hat{\phi}_j(\hat{x}), \quad \forall \hat{x} = F_{K_i}^{-1}(x), \quad j = 1, 2, 3. \quad (29)$$

A Figura 12 apresenta uma representação visual do mapa F_{K_i} .

Figura 12 – Mapa Afim do Triângulo de Referência para o Elemento



Fonte: (CIARLET, 1978, p. 83).

2.2.4 Integração Numérica

A estruturação tanto da matriz de rigidez quanto do vetor de carga dependem do cálculo de integrais oriundas da formulação variacional, porém, normalmente não de forma analítica. Portanto, quadratura numérica, como a de Gauss, são requeridas (ATKINSON, 2009).

Galvis e Versieux (2011) reiteram que no processo de implementação do MEF integrais são aproximadas numericamente através da quadratura de Gauss, por exemplo. Cita-se como exemplo, em \mathbb{R}^2 , para o elemento de referência \hat{K} , vem:

Lema 2.2.4. (Quadratura de sete pontos no triângulo). Para a função $g : \hat{K} \rightarrow \mathbb{R}$, vem a aproximação:

$$\int_{\hat{K}} g(\hat{x}) d\hat{x} \approx \sum_{i=1}^7 g(\zeta_i) \omega_i, \quad (30)$$

com ζ_i sendo os pontos de quadratura e ω_i os respectivos pesos (GALVIS; VERSIEUX, 2011, p. 29).

Nota-se que o cálculo é feito no elemento de referência e portanto, utiliza-se o Lema 2.2.3 para a mudança de variáveis.

2.3 Estimador de erro

A teoria para a estimativa de erro surgiu pela inevitabilidade da existência de erros numéricos oriundos de simulações, mesmo para modelos matemáticos sofisticados. E ainda visto que procedimentos numéricos trouxeram grandes benefícios para prover bases de simulação de fenômenos físicos essenciais em aplicações de engenharia, exigiu-se o desenvolvimento

dessa linha de pesquisa. Estimadores provêm os requisitos para a adaptatividade de malha e eficiência de implementações computacionais desse gênero (AINSWORTH; ODEN, 2000).

Babuska e Rheinboldt (1979) acrescentam que em aplicações de engenharia, como mecânica estrutural, os resultados obtidos de simulações não devem ser somente precisos, porém, prover confiabilidade. E para tal, os custos computacionais acabam por ampliar, requerendo assim obter estimadores *a posteriori*, os quais, quando comparados com os *a priori*, apresentam maior eficiência em aferir "fronteiras" de erro.

Outra dificuldade apresentada na validação de resultados computacionais é a possibilidade de não existir um problema *Benchmark* com leis físicas e naturais que determinam a aceitação de tal (KELLY *et al.*, 1983).

A ideia precursora da aplicação de estratégias de estimativa de erro *a posteriori* para confiabilidade e eficiência de MEF veio por Babuska e Rheinboldt (1978). O sucesso de aplicações semelhantes em problemas de valor inicial para EDOs, nas quais a precisão da solução numérica se relacionava com perturbações da solução anterior e o aspecto adaptativo já era empregado para garantir que tais perturbações não ultrapassassem determinada tolerância.

Kelly *et al.* (1983) destacam que apesar dos estimadores *a priori* clássicos obterem resultados de precisão da solução, necessitam de análises subsequentes com malhas cada vez mais refinadas, exigindo um custo computacional mais elevado. Enquanto a estratégia *a posteriori* oferecem uma alternativa mais "barata" para prever o erro da solução.

Ladevèze e Moës (1998) trazem um panorama do processo de pesquisa inicial do ramo de estimativa de erro *a posteriori*. E destacam conseqüentemente as seguintes referências: a introdução dos primeiros conceitos de estimadores *a posteriori* e o respectivo uso em adaptatividade de algoritmos de MEF veio por (BABUSKA; RHEINBOLDT, 1978) e (BABUSKA; RHEINBOLDT, 1979); a tradução para um contexto de engenharia por (KELLY *et al.*, 1983) e (GAGO *et al.*, 1983); um compilado dos métodos em forma de livro por (AINSWORTH; ODEN, 2000); a adaptação para permitir a implementação em softwares por (ZIENKIEWICZ; ZHU, 1987); e o procedimento de validação dos estimadores por (BABUSKA *et al.*, 1994) e (BABUŠKA; STROUBOLIS; UPADHYAY, 1994).

Restringe-se à aplicação de estimadores de erro *a posteriori* explícitos para o problema de valor de borda auto adjunto linear.

2.3.1 Requisitos de Construção de Estimador de Erro

Logg e Mardal (2021) apresentam os requisitos necessário para a construção de um estimador num âmbito geral, são eles:

- Ortogonalidade de Galerkin;
- Estimadores por interpolação, base para estimadores *a priori* e *a posteriori*;

- Coercividade.

Estimadores de erro tem como base $u - u_h$. Representando-a a partir da formulação variacional da Equação (16) vem a expressão para a ortogonalidade de Galerkin (BRENNER, 1994, p. 58):

$$a(u - u_h, v) = 0 \quad \forall v \in V_h, \quad (31)$$

obtida através da subtração de $a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V$ por $a(u_h, v) = F(v) \quad \forall v \in V_h$.

Um resultado relevante para a perspectiva *a priori* vem do Lema 2.3.1 *apud* (BRAESS, 2007, p. 55) e (BRENNER, 1994, p. 64).

Lema 2.3.1. (Céa) *Para as hipóteses apresentadas na subseção 2.1.2, vem:*

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{C}{\alpha} \min_{v \in V_h} \|u - v\|_V, \quad (32)$$

com C , a constante de continuidade, e α , a constante de coercividade, da forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ em V .

Tal lema permite fornecer fronteira de erro para aproximações por elementos finitos (BRAESS, 2007).

A coercividade descrita por Brenner (1994, p. 57) e Logg e Mardal (2021, p. 27):

Definição 2.3.2. *Para a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ no espaço normado linear H , vem:*

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|_H^2 \quad \forall v \in V, \quad (33)$$

onde $a(\cdot, \cdot)$ é dita coerciva se $\exists \alpha > 0$, respeitando a expressão.

A propriedade de coercividade permite expressar naturalmente um problema variacional num espaço de Hilbert, mesmo tendo que seu respectivo espaço não tenha um produto interno (BRENNER, 1994).

2.3.2 Dedução de Estimador *A Posteriori*

A fim de demonstrar a dedução de um estimador de erro *a posteriori*, Ainsworth e Oden (2000, p. 15) propõe o seguinte problema de base: para o domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ com fronteira $\partial\Omega$ Lipschitz contínua, deve-se encontrar u tal que,

$$\begin{cases} -\Delta u + cu = f & \text{em } \Omega, \\ \partial u / \partial n = g & \text{em } \Gamma_N, \\ u = 0 & \text{em } \Gamma_D. \end{cases} \quad (34)$$

Dado que $V = \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ em } \Gamma_D\}$, vem a seguinte formulação variacional para o problema:

$$B(u, v) = L(v) \quad \forall v \in V, \quad (35)$$

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v + cuv) dx = \int_{\Omega} f v dx + \int_{\Gamma_N} g v ds. \quad (36)$$

A ortogonalidade de Galerkin trás que para $e = u - u_h$, tem-se que:

$$B(e, v) = B(u - u_h, v) = B(u, v) - B(u_h, v) = L(v) - B(u_h, v) \quad \forall v \in V, \quad (37)$$

$$B(e, v) = \int_{\Omega} (\nabla e \cdot \nabla v + cev) dx = \int_{\Omega} f v dx + \int_{\Gamma_N} g v ds - \int_{\Omega} (\nabla u_h \cdot \nabla v + cu_h v) dx. \quad (38)$$

O produto de gradientes da terceira integral em Ω pode ser reescrito como:

$$- \int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} \Delta u_h v dx - \int_{\partial\Omega} (v \nabla u_h) \cdot \underline{n} ds. \quad (39)$$

Logo, substituindo a Equação (39) em Equação (38), vem:

$$B(e, v) = \int_{\Omega} f v dx + \int_{\Gamma_N} g v ds + \int_{\Omega} \Delta u_h v dx - \int_{\partial\Omega} (v \nabla u_h) \cdot \underline{n} ds - \int_{\Omega} cu_h v dx. \quad (40)$$

Subdivide-se o a fronteira $\partial\Omega$ em $\partial\Omega \cap \Gamma_N$ e $\partial\Omega \setminus \Gamma_N$.

$$B(e, v) = \int_{\Omega} v(f + \Delta u_h - cu_h v) dx + \int_{\partial\Omega \cap \Gamma_N} v(g - \nabla u_h \cdot \underline{n}) ds - \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_N} (v \nabla u_h) \cdot \underline{n} ds. \quad (41)$$

Ainsworth e Oden (2000, p. 21) define r como *residual*:

$$r = f + \Delta u_h - cu_h. \quad (42)$$

Rescrevendo a Equação (41) em termos da somatória da parcela de cada elemento K da triangulação T_h , obtém-se:

$$B(e,v) = \sum_{K \in T_h} \left\{ \int_K vr \, dx + \int_{\partial K \cap \Gamma_N} v(g - \nabla u_h \cdot \underline{n}) \, ds - \int_{\partial K \setminus \Gamma_N} (v \nabla u_h) \cdot \underline{n} \, ds \right\}, \quad (43)$$

com r em K , residual interno e R , residual de fronteira:

$$R = g - \nabla u_h \cdot \underline{n} \text{ em } \partial K \cap \Gamma_N. \quad (44)$$

Analisa-se então a contribuição de R para elementos K no interior da partição T_h . Os saltos de descontinuidade de derivada permitem reescrever a Equação (44) como:

$$R = - [\nabla u_h \cdot \underline{n}]. \quad (45)$$

Então vem,

$$B(e,v) = \sum_{K \in T_h} \int_K vr \, dx + \sum_{\gamma \in \partial T_h} \int_{\gamma} vR \, ds \quad \forall v \in V, \quad (46)$$

onde γ são os saltos de descontinuidade entre elementos.

A Equação (31) permite reescrever a Equação (46), utilizando o conceito de interpolante I_h *apud* Brenner (1994, p. 77):

$$0 = \sum_{K \in T_h} \int_K r I_h v \, dx + \sum_{\gamma \in \partial T_h} \int_{\gamma} R I_h v \, ds. \quad (47)$$

Subtrai-se a Equação 47 da Equação 46:

$$B(e,v) = \sum_{K \in T_h} \int_K r(v - I_h v) \, dx + \sum_{\gamma \in \partial T_h} \int_{\gamma} R(v - I_h v) \, ds \quad \forall v \in V, \quad (48)$$

Aplicando a desigualdade de Cauchy-Scharwz (LOGG; MARDAL, 2021, p. 13), obtém-se:

$$B(e,e) = \|e\|^2 \leq C \sum_{K \in T_h} \{h_h^2 \|r\|_{L_2(K)}^2 + h_h \|R\|_{L_2(\partial K)}^2\}, \quad (49)$$

Adaptar-se-á a Equação (49) na seção 3.5 para adequar ao problema proposto.

2.3.3 Adaptatividade

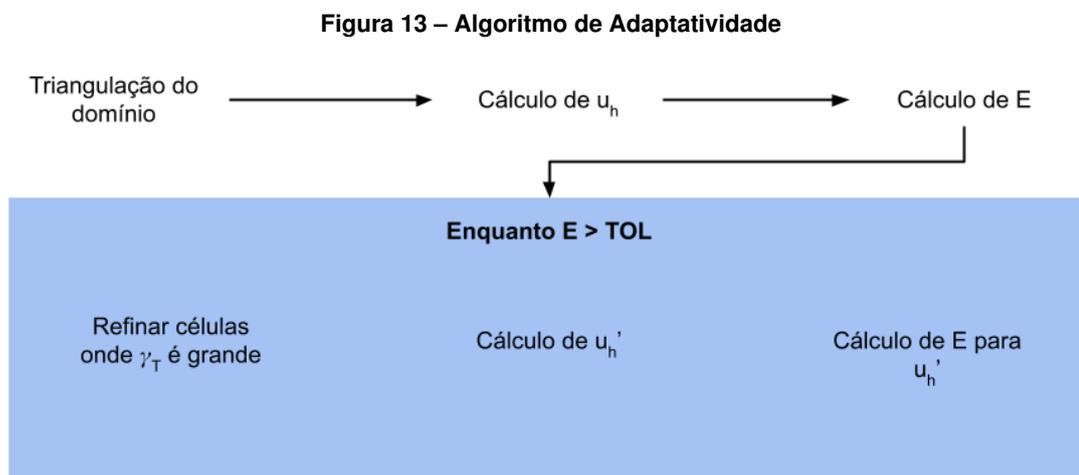
Em determinados problemas relacionados a EDPs, as respectivas soluções podem variar substancialmente em determinadas regiões do domínio. Portanto, a adaptatividade de malha trás um benefício de acompanhar oscilações pontuais, onde a diferença de utilizá-a ou não é considerável (BRENNER, 1994).

O processo básico para tal segue o condicional lógico de se o estimador de erro exceder a tolerância preestabelecida, prossegue-se com o refino de acordo com o indicador de erro. Assim sendo, os algoritmos adaptativos finalizam somente em dois cenários (GAGO *et al.*, 1983):

1. Precisão alcançada, a norma do erro especificada atinge a tolerância;
2. Limite computacional ou temporal, para situações que a tolerância estabelecida é inalcançável.

Gago *et al.* (1983) reiteram a diferença entre os dois conceitos de indicador e estimador de erro. Enquanto o primeiro apresenta a informação para identificar a região a ser refinada, o segundo determina quando parar.

Logg e Mardal (2021) apresentam um algoritmo para a adaptatividade de malha, adaptado pelo autor sob forma de figura.



Fonte: Adaptado de (LOGG; MARDAL, 2021, p. 31).

Onde E é o estimador de erro e TOL a tolerância preestabelecida.

O respectivo trabalho concentra-se no refino do tipo h , previamente elaborado. Gago *et al.* (1983) acrescentam a existência do método p , no qual adiciona-se ordens maiores às funções de forma do elemento. Ainda evidenciam a possibilidade de agregar as duas formas, obtendo o método hp , o qual apresenta em alguns casos melhores taxas de convergência.

2.3.4 Validação de Estimador

Devido a sua importância para estimativa de erro, aqueles *a posteriori* se tornaram essenciais em AEF. Apesar de alguns apresentarem embasamento matemático, outros foram definidos heurísticamente. A validação numérica ocorre por meio de problemas exemplo, contudo, recorrentemente falha-se em isolar os fatores principais que determinam a performance de cada estimador (BABUSKA *et al.*, 1994).

Portanto, Babuska *et al.* (1994) proporam uma metodologia para determinar a qualidade e robustez de estimadores *a posteriori*. Tal analisa os fatores que realmente influenciam a qualidade do estimador, são eles: geometria local da malha e estrutura do solução. Identifica-se então que a performance em ω_0^h dependerá da geometria ω_s^h que o envolve.

Por conseguinte, vem a definição do *indicador de eficiência* por Babuska *et al.* (1994, p. 1074):

$$\kappa_{\omega_0^h} := \frac{\varepsilon_{\omega_0^h}}{\|e_h\|_{\omega_0^h}} \quad \text{onde} \quad \varepsilon_{\omega_0^h} := \left\{ \sum_{\substack{\tau \in T_h \\ \tau \cap \omega_0^h \neq \emptyset}} \eta_\tau^2 \right\}^{1/2}, \quad (50)$$

com $\|e_h\|_{\omega_0^h}$, a norma sobre ω_0^h , e $\varepsilon_{\omega_0^h}$ o estimador de erro para essa norma, computada sobre os indicadores de erro η_τ sobre os elementos τ da triangulação T_h .

O indicador global de eficiência κ_Ω pode ser transcrito localmente como $\kappa_{\omega_0^h}$ dentro de certas barreiras (BABUSKA *et al.*, 1994, p. 1075):

$$0 \leq C_L^{\omega_0^h} \leq \kappa_{\omega_0^h} \leq C_U^{\omega_0^h} < \infty \quad (51)$$

onde as constantes $C_L^{\omega_0^h}$ e $C_U^{\omega_0^h}$ dependem somente da geometria local e camadas em volta do elemento ω_0^h .

Tais constantes permitem a derivação dos algoritmos de adaptatividade de malha, estabelecendo limites de "ultra"refino e critério superior de parada (BABUSKA *et al.*, 1994, p. 1075).

$$1 \leq \kappa'_{\omega_0^h} := \frac{\varepsilon'_{\omega_0^h}}{\|e_h\|_{\omega_0^h}} \leq \frac{C_U^{\omega_0^h}}{C_L^{\omega_0^h}} \quad (52)$$

$$\frac{C_L^{\omega_0^h}}{C_U^{\omega_0^h}} \leq \kappa''_{\omega_0^h} := \frac{\varepsilon''_{\omega_0^h}}{\|e_h\|_{\omega_0^h}} \leq 1$$

Outro indicador proposto por Babuska *et al.* (1994, p. 1075) é o de Robustez, o qual expressa a confiabilidade do estimador e é definido por:

$$R_{\omega_0^h} := \max \left\{ (|1 - C_U^{\omega_0^h}| + |1 - C_L^{\omega_0^h}|), \left(\left| 1 - \frac{1}{C_U^{\omega_0^h}} \right| + \left| 1 - \frac{1}{C_L^{\omega_0^h}} \right| \right) \right\} \quad (53)$$

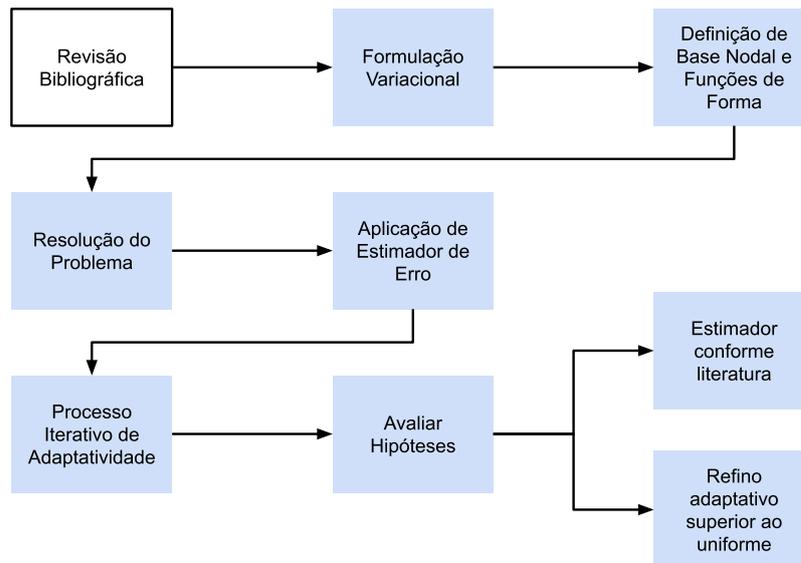
Vem o indicador global de robustez para uma classe de malha T , cuja triangulação é T_h :

$$R(T) := \max_{T_h \in T} R_{T_h} \quad \text{onde} \quad R_{T_h} := \max_{\omega_0^h \in C(T_h)} R_{\omega_0^h}. \quad (54)$$

3 METODOLOGIA

A metodologia de análise quantitativa utilizada para a execução da pesquisa é apresentada sob forma de fluxograma na Figura 14.

Figura 14 – Fluxograma da metodologia



Fonte: Autoria própria (2022).

O objetivo principal da metodologia é realizar a comparação entre o refino uniforme e adaptativo em conjunto com a aplicação de estimadores de erro *a posteriori*. E as seções subsequentes discutirão cada etapa proposta.

3.1 Revisão bibliográfica

Conforme abordado no capítulo 2, três tópicos principais foram abordados, são eles: análise funcional, MEF e estimadores de erro.

As referências bases para a formulação matemática necessária para a aplicação do MEF são (ATKINSON, 2009) e (BRENNER, 1994). Referências pontuais são utilizadas quando necessário, porém, deve-se destacar o papel de (CIARLET, 1978) através de todas as definições referentes ao MEF. E para uma abordagem introdutória, recomenda-se (LOGG; MARDAL, 2021).

A bibliografia completa referente a estimadores de erro *a posteriori* se encontra na seção 2.3, contudo, deve-se realçar a orientação fornecida por (LADEVÈZE; MOËS, 1998).

3.1.1 Problema Modelo

O problema foco do estudo foi inspirado na proposta de (GALVIS; VERSIEUX, 2011) sobre a equação de Laplace com condição de Dirichlet no caso unidimensional, e pode ser descrito como:

$$\begin{aligned} & \text{Encontrar } u : [0,1] \rightarrow \mathbb{R} \text{ tal que} \\ & \left\{ \begin{array}{l} -u''(x) = -1, \quad \text{para } 0 < x < 1, \\ u(0) = 1, u(1) = 1. \end{array} \right. \end{aligned} \quad (55)$$

3.2 Formulação variacional

A formulação variacional segue a metodologia apresentada por Galvis e Versieux (2011).

Para $v \in V_0$ onde $V_0 = \{v \in V[0,1]; v(0) = v(1) = 1\}$ inicialmente dado, vem a formulação variacional:

$$\begin{aligned} & \text{Encontrar } u : [0,1] \rightarrow \mathbb{R} \text{ tal que} \\ & \left\{ \begin{array}{l} -\int_0^1 u'' v \, dx = -\int_0^1 v \, dx, \quad \forall v \in V_0, \\ u(0) = 1, u(1) = 1, \end{array} \right. \end{aligned} \quad (56)$$

onde a primeira equação pode ser reescrita com auxílio de integração por partes.

$$\begin{aligned} -\int_0^1 u'' v \, dx &= -\left[u'v \Big|_0^1 - \int_0^1 u' v' \, dx \right] \\ &= -\left[(u'(1)v(1) - u'(0)v(0)) - \int_0^1 u' v' \, dx \right] \\ &= \int_0^1 u' v' \, dx \end{aligned} \quad (57)$$

Logo, substituindo a Equação (57) em (56), obtém-se:

Encontrar $u : [0,1] \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\begin{cases} \int_0^1 u' v' dx = - \int_0^1 v dx, & \forall v \in V_0, \\ u(0) = 1, u(1) = 1, \end{cases} \quad (58)$$

Aplica-se então a aproximação de Galerkin para $u^h, v^h \in V_0^h$, onde:

$$\begin{aligned} u^h &= \sum_{j=1}^{N^h} \alpha_j \phi_j, \\ v^h &= \sum_{i=1}^{N^h} \beta_i \phi_i, \end{aligned} \quad (59)$$

onde ϕ_i e ϕ_j são as funções de forma descritas na próxima subseção.

Substituem-se os termos da Equação (59) no primeiro termo da Equação (57).

$$\int_0^1 \left(\sum_{j=1}^{N^h} \alpha_j \phi_j \right)' \left(\sum_{i=1}^{N^h} \beta_i \phi_i \right)' dx = - \int_0^1 \left(\sum_{i=1}^{N^h} \beta_i \phi_i \right) dx, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N^h\}. \quad (60)$$

Os coeficientes de v^h podem ser eliminados e portanto, vem:

$$\sum_{j=1}^{N^h} \alpha_j \int_0^1 (\phi_j)' (\phi_i)' dx = - \int_0^1 (\phi_i) dx, \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N^h\}. \quad (61)$$

Definem-se os seguintes termos para a montagem do sistema linear:

$$A = (a_{ij}), \quad \text{onde} \quad a_{ij} = \int_{\Omega} (\phi_j)' (\phi_i)' dx, \quad (62)$$

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_{N^h})^t, \quad \text{onde} \quad b_i = \int_{\Omega} \phi_i dx, \quad (63)$$

$$\alpha_i = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{N^h})^t, \quad (64)$$

onde tem-se o sistema $A\alpha = b$, tal que $A \in \mathbb{R}^{N^h \times N^h}$ e $\alpha, b \in \mathbb{R}^{N^h}$.

3.3 Definição de base nodal e funções de forma

Denota-se a base nodal referente ao problema $\{\phi_i : 1 \leq i \leq N^h\}$, segundo Brenner (1994). Onde o interpolante de u^h é definido conforme a Equação (59).

3.3.1 Funções de Forma em Coordenadas Globais e Locais

As funções de forma lineares de Lagrange padrões para coordenadas globais são para um elemento $K \in T^h$ qualquer, cujos nós são a e b :

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{b-x}{b-a}, \\ \phi_2 &= \frac{x-a}{b-a}.\end{aligned}\tag{65}$$

Porém, recomenda-se a adoção do sistema local de coordenadas onde o elemento padrão \hat{K} com nós $x_1 = 0$ e $x_2 = 1$ e $\forall \hat{x} \in \hat{K}$, vem:

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_1 &= \frac{1-\hat{x}}{1-0} = 1-\hat{x}, \\ \hat{\phi}_2 &= \frac{\hat{x}-0}{1-0} = \hat{x},\end{aligned}\tag{66}$$

Logo, obtém-se para um elemento qualquer $K_i \in T^h$ com vértices x_1 e x_2 :

$$\begin{aligned}F_{K_i}(\hat{K}) &= K_i \quad \text{e} \quad F_{K_i}(0) = x_1, \\ F_{K_i}(\hat{x}) &= (x_2 - x_1)\hat{x} + x_1,\end{aligned}\tag{67}$$

vem ainda que:

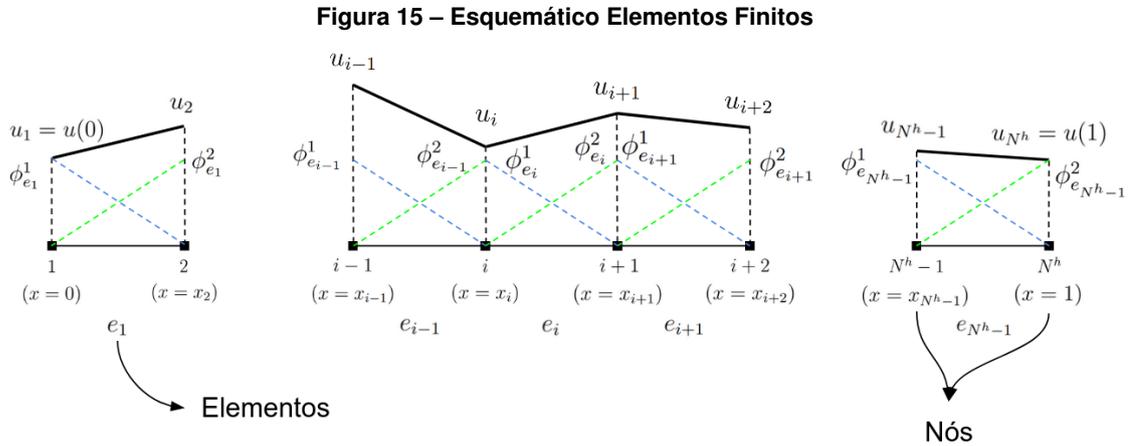
$$\begin{aligned}\phi_j(x) &= \hat{\phi}_j(\hat{x}) \quad \forall \hat{x} = F_{K_i}^{-1}(x), j = 1, 2, \\ \nabla_x \phi_j &= \nabla_{\hat{x}} \hat{\phi}_j \cdot B_{K_i}^{-1} \quad \text{com} \quad B_{K_i} = x_2 - x_1,\end{aligned}\tag{68}$$

Por fim, para a montagem da matriz de rigidez de referência, utiliza-se da definição de integral em domínio de elemento de referência:

$$\int_{K_i} g(x) dx = \int_{\hat{K}} g(F_{K_i}(\hat{x})) |\det B_{K_i}| d\hat{x},\tag{69}$$

3.4 Resolução do problema

A Figura 15 apresenta o modelo esquemático para a montagem da modelagem numérica do sistema e da aplicação posterior do estimador de erro.



Fonte: Autoria própria (2021).

Deve-se notar que para o elemento $e_i \in T^h$, a função aproximada u^h é composta pela soma dos coeficientes α_i da Equação (63) e de suas respectivas funções de forma ϕ_i^1 e ϕ_i^2 .

Para a montagem do sistema linear referente ao elemento e_i , necessitar-se-á também das derivadas das funções de forma, conforme as Equações (65) e (67):

$$\begin{aligned}\phi_1' &= \hat{\phi}_1' \cdot B_{e_i}^{-1} = -B_{e_i}^{-1}, \\ \phi_2' &= \hat{\phi}_2' \cdot B_{e_i}^{-1} = B_{e_i}^{-1},\end{aligned}\tag{70}$$

com $B_{e_i}^{-1} = (x_{i+1} - x_i)^{-1}$.

Portanto, vem os componentes a_{ij} da matriz de rigidez base A_{e_i} para um elemento e_i :

$$\begin{aligned}A_{e_i}(\phi_1, \phi_1) &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_1' \phi_1' dx = \int_0^1 (\hat{\phi}_1' \cdot B_{e_i}^{-1})(\hat{\phi}_1' \cdot B_{e_i}^{-1}) |\det B_{e_i}| d\hat{x}, \\ &= B_{e_i}^{-2} \int_0^1 B_{e_i} d\hat{x} = B_{e_i}^{-1},\end{aligned}\tag{71}$$

$$\begin{aligned}A_{e_i}(\phi_1, \phi_2) &= A_{e_i}(\phi_2, \phi_1) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_2' \phi_1' dx = \int_0^1 (\hat{\phi}_2' \cdot B_{e_i}^{-1})(\hat{\phi}_1' \cdot B_{e_i}^{-1}) |\det B_{e_i}| d\hat{x}, \\ &= -B_{e_i}^{-2} \int_0^1 B_{e_i} d\hat{x} = -B_{e_i}^{-1},\end{aligned}\tag{72}$$

$$\begin{aligned}
A_{e_i}(\phi_2, \phi_2) &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_2' \phi_2' dx = \int_0^1 (\hat{\phi}_2' \cdot B_{e_i}^{-1})(\hat{\phi}_2' \cdot B_{e_i}^{-1}) |\det B_{e_i}| d\hat{x}, \\
&= B_{e_i}^{-2} \int_0^1 B_{e_i} d\hat{x} = B_{e_i}^{-1}.
\end{aligned} \tag{73}$$

O vetor de carregamento b_i , pode ser descrito como:

$$\begin{aligned}
b_{e_i}(\phi_1) &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_1 dx = - \int_0^1 (\hat{\phi}_1 |\det B_{e_i}|) d\hat{x}, \\
&= -B_{e_i} \int_0^1 (1 - \hat{x}) d\hat{x},
\end{aligned} \tag{74}$$

$$\begin{aligned}
b_{e_i}(\phi_2) &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_2 dx = - \int_0^1 (\hat{\phi}_2 |\det B_{e_i}|) d\hat{x}, \\
&= -B_{e_i} \int_0^1 (\hat{x}) d\hat{x},
\end{aligned} \tag{75}$$

Para o cálculo das integrais de $b_{e_i}(\phi_1)$ e $b_{e_i}(\phi_2)$, pode-se utilizar uma adaptação da quadratura de Gauss apresentada na seção 2.2.4, onde:

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) \tag{76}$$

Logo, vem a seguinte mudança de variável para:

$$\int_0^1 g(x) dx = \int_{-1}^1 f(y) dy, \tag{77}$$

$$x = \frac{y+1}{2} \quad \text{com} \quad dx = \frac{dy}{2}, \tag{78}$$

$$\int_0^1 g(x) dx \approx \frac{1}{2} \left[g\left(\frac{\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)+1}{2}\right) + g\left(\frac{\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)+1}{2}\right) \right]. \tag{79}$$

Substituindo a Equação (79) em (74) e (75), vem:

$$b_{e_i}(\phi_1) = -B_{e_i} \cdot \frac{1}{2} \left[\left(1 - \left(\frac{3 - \sqrt{3}}{6}\right)\right) + \left(1 - \left(\frac{3 + \sqrt{3}}{6}\right)\right) \right] = -\frac{B_{e_i}}{2}, \tag{80}$$

$$b_{e_i}(\phi_2) = -B_{e_i} \cdot \frac{1}{2} \left[\left(\frac{3 - \sqrt{3}}{6} \right) + \left(\frac{3 + \sqrt{3}}{6} \right) \right] = -\frac{B_{e_i}}{2}. \quad (81)$$

Nota-se que até polinômios de grau 3, a integral presente na Equação (76) é exata.

O sistema linear final é apresentado na Equação (82), sem as condições de contorno.

$$\begin{bmatrix} \dots & \dots & & & & & \\ \dots & 2.B^{-1} & B^{-1} & 0 & & & \\ & -B^{-1} & 2.B^{-1} & -B^{-1} & & & \\ & & 0 & -B^{-1} & 2.B^{-1} & \dots & \\ & & & & \dots & \dots & \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ \alpha_i \\ \alpha_{i+1} \\ \alpha_{i+2} \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dots \\ -B \\ -B \\ -B \\ \dots \end{pmatrix} \quad (82)$$

Para uma malha uniforme, B_{e_i} é constante. Porém agregando a adaptatividade, deve-se ressaltar que $B_{e_i} = (x_{i+1} - x_i)$.

3.5 Aplicação do estimador de erro

Reescreve-se a Equação (49) em termos de η_K para determinar as contribuições locais de erro.

$$B(e, e) = \|e\|^2 \leq C \sum_{K \in T_h} \eta_K^2, \quad (83)$$

onde

$$\eta_K^2 = h_K^2 \|r\|_{L_2(K)}^2 + h_K \|R\|_{L_2(\partial K)}^2. \quad (84)$$

O termo de erro residual interno, apresentado na Equação (42), é descrito unidimensionalmente para o elemento e_i :

$$r = -1 + \frac{d^2}{dx^2} u^h \quad \therefore \quad \|r\|_{L_2(e_i)}^2 = \int_{e_i} \left(-1 + \frac{d^2}{dx^2} u^h \right)^2 dx, \quad (85)$$

$$\|r\|_{L_2(e_i)}^2 = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[-1 + \frac{d^2}{dx^2} (u_i \phi_{e_i}^1 + u_{i+1} \phi_{e_i}^2) \right]^2 dx. \quad (86)$$

A descontinuidade de derivada nos nós induz o termo de erro de borda, apresentado na Equação (45), vem para o elemento e_i :

$$R = - \left[\frac{\partial}{\partial n} u \right] = - \left[\frac{d}{dx} u^h \right], \quad (87)$$

dados que para os saltos γ_i

$$\|R\|_{L_2(\gamma_i)}^2 = \|R\|_{L_2(\partial e_i)}^2, \quad (88)$$

vem

$$\begin{aligned} \|R\|_{L_2(\partial e_i)}^2 = & \left[-\frac{d}{dx}(u_i\phi_{e_i}^1 + u_{i+1}\phi_{e_i}^2) + \frac{d}{dx}(u_{i-1}\phi_{e_{i-1}}^1 + u_i\phi_{e_{i-1}}^2) \right]_{x=x_i}^2 \\ & + \left[-\frac{d}{dx}(u_{i+1}\phi_{e_{i+1}}^1 + u_{i+2}\phi_{e_{i+1}}^2) + \frac{d}{dx}(u_i\phi_{e_i}^1 + u_{i+1}\phi_{e_i}^2) \right]_{x=x_{i+1}}^2. \end{aligned} \quad (89)$$

3.6 Processo iterativo de adaptatividade

Executa-se a resolução do sistema apresentado na Equação (82) para as variáveis α , seguindo a metodologia de Gago *et al.* (1983) para o método h-adaptativo:

1. Estabelece-se uma tolerância para o erro local ou global;
2. Resolução do problema;
3. Aplicação do estimador de erro local e global;
4. Verifica-se a condição lógica de estimador de erro maior que tolerância:
 - Caso sim, realizar refino onde o erro local ultrapassa o definido;
 - Caso não, finaliza-se a resolução.

3.7 Avaliação das hipóteses

Haja vista o processo de aplicação do estimador e do respectivo refino de malha h-adaptativo. Identifica-se a necessidade de validar tal processo através das hipóteses descritas na seção 4.1. Em suma, visa-se avaliar separadamente o estimador e posteriormente os refinamentos a fim de certificar as funcionalidades de cada um. Por fim, apresenta-se uma abordagem generalizada do conjunto.

3.8 Implementação numérica

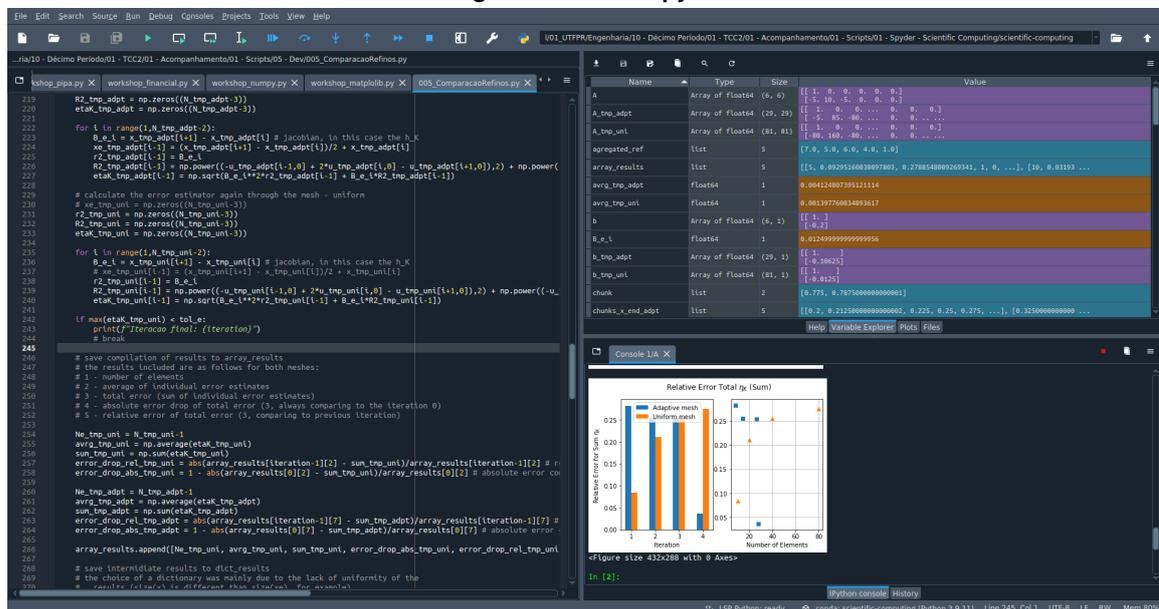
Posto o descritivo das etapas metodológicas da análise quantitativa de comparação entre refinamentos em conjunto com a aplicação do estimador de erro *a posteriori*. Requer-se apresentar as ferramentas para aplicação numérica.

A fim de garantir o prosseguimento da linha de pesquisa, é recomendável de linguagens de programação não proprietárias, bem como a respectiva interface de desenvolvimento.

Portanto, conforme Python (2022), utilizou-se *Python* como a linguagem de programação, pois permite rápida implementação, replicabilidade e otimização de processamento do código numérico.

Como ambiente de desenvolvimento integrado (IDE¹), fez-se uso da plataforma *Spyder*, por permitir análise e *debugging* de forma compreensível, adequada para estudos científicos (ANACONDA, 2022). A Figura 16 apresenta uma captura do ambiente de trabalho, na qual identificam-se também uma janela de exploração de variáveis no canto superior direito (facilitando o controle de variáveis intermediárias, necessárias para a execução e solução do problema em questão) e o console integrado no canto inferior direito (para a visualização das imagens geradas).

Figura 16 – IDE - Spyder



Fonte: Autoria própria (2022).

Por fim, aplicaram-se duas bibliotecas específicas do *Python*, são elas: *NumPy* para a manipulação de domínios, soluções e estimadores sobre a forma de vetores e; *Matplotlib* para visualização de resultados. A documentação das respectivas bibliotecas podem ser resgatadas em (NUMPY, 2022) e (MATPLOTLIB, 2022). Acrescenta-se também que todos os resultados obtidos são apresentados em inglês, pois os códigos fonte foram escritos de tal forma a fim de que possam ser replicados por qualquer outro pesquisador.

Para colaboração e seguimento da linha de pesquisa, dirigir-se a (HATASHITA, 2022).

¹ Integrated Development Environment

4 RESULTADOS

A análise quantitativa mencionada ao início da seção 3 exige ponderar duas hipóteses, uma referente ao estimador de erro *a posteriori* e outra referente ao refino do domínio. Para posteriormente identificar se a utilização de ambos garante uma performance adequada do processo de resolução numérica do problema apresentado na seção 3.1.1.

Portanto, a discretização da análise quantitativa é feita de acordo com as seções de hipóteses, parametrização e comportamento iterativo da solução. Por fim, na seção de variação de parâmetros de entrada, identificam-se as influências de cada parâmetro de entrada e apresenta-se uma abordagem ampla para avaliar a consistência do conjunto estimador e refino h-adaptativo.

4.1 Hipóteses

Haja vista a proposta de obtenção dos resultados, separam-se a investigação do comportamento iterativo da solução em duas hipóteses principais:

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.

Previamente ao seguimento da exposição dos resultados, deve-se ressaltar que seria possível mensurar a qualidade da aproximação numérica a partir da solução analítica do problema para a primeira hipótese. Contudo, a fim de verificar sua validade, realizar-se-á uma comparação com outro estimador de mesma natureza, *a posteriori*, visto que essencialmente, além de serem aplicados pela maior eficiência, são requisitados em casos sem solução explícita. Consequentemente, simulando uma situação real, a qual poderá não apresentar solução explícita, propõe-se tal modo.

4.2 Parâmetros

Os parâmetros são definidos de modo a mensurar quaisquer variações presentes nas soluções numéricas. Estão divididos de acordo com a etapa de definição/obtenção e de acordo com a função que exercem no sistema. Portanto, tem-se os parâmetros de entrada, necessários para delimitar a primeira etapa de discretização e conter os erros residuais interno e de borda ao limite selecionado. Por outro lado, os parâmetros de saída, quantificam as métricas de qualidade da solução final e o respectivo gasto para a obtenção de tal.

4.2.1 Parâmetros de entrada

Apesar de ao todo, a implementação numérica requisitar três parâmetros ao início de sua execução. O número máximo de iterações apenas impede o *loop* infinito do programa, não influenciando a estimativa de erro e o refino adaptativo. Portanto, não será avaliado com maior criticidade, apenas, deve-se mencionar que, para um número máximo de 25 iterações, em nenhuma das combinações tal limite foi atingido.

Ademais, destacam-se os dois parâmetros a seguir com influência sobre um dos comportamentos analisados:

1. N_e : número de elementos inicial;
2. tol_e : tolerância de erro individual.

O primeiro interfere no número de iterações totais da solução e conseqüentemente no tempo total de execução. O segundo atua diretamente na discretização subsequente do refino adaptativo e por conseguinte no erro total do estimador, bem como no tempo total de execução. Uma discussão mais significativa será apresentada nas seções 4.3 e 4.4, visando elaborar os conceitos e explorar a conformidade dos resultados identificados com a variação de tais especificações, respectivamente.

4.2.2 Parâmetros de saída

Dentre os parâmetros de saída, caracterizam-se de acordo com suas respectivas funções.

Tem-se os seguintes, com os quais descreve-se a qualidade da solução final:

1. N_e final: número final de elementos da solução;
2. $\Sigma\eta_K$: erro total do estimador;
3. queda absoluta e relativa do erro total do estimador;

O número final de elementos da solução permite identificar o quão refinado é o domínio da solução. E o erro total do estimador, soma das parcelas individuais η_K do erro estimado, em conjunto com sua queda descrevem a convergência da solução e propiciam a comparação entre tipos de refino e entre diferentes parâmetros de entrada.

Em contrapartida, o processamento gasto para convergência da solução desejada é mensurado a partir dos parâmetros abaixo:

1. número de iterações para atingir a tolerância definida;
2. t : tempo gasto.

O número de iterações identifica quantas repetições do processo de refino de malha foram necessárias para a obtenção do resultado desejado. Outrossim, o tempo gasto viabiliza uma forma de mensurar o custo computacional requisitado para a execução do processo.

4.3 Comportamento iterativo da solução

Inicia-se a análise da forma com que o algoritmo, o estimador de erro e os tipos de refino se comportam. Para tal, define-se um par de parâmetros de entrada, conforme a Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros de entrada para análise inicial

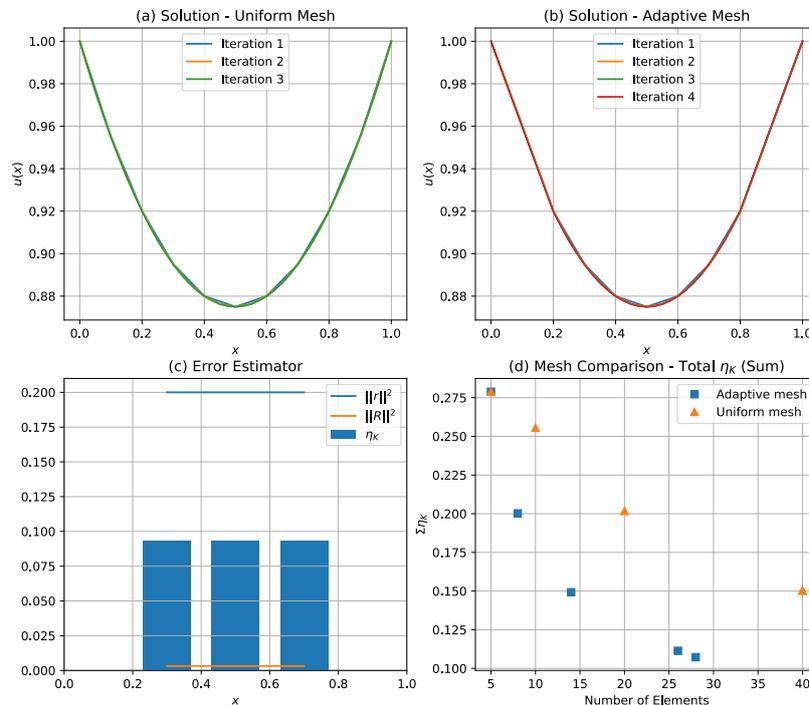
Número de elementos inicial	Tolerância de erro individual
5	0,01

Fonte: Autoria própria (2022).

A partir da qual, obtém-se a Figura 17, a evolução da solução é descrita ao decorrer das iterações de refino, para ambas as formas, uniforme e adaptativo. Além de demonstrar o comportamento base do estimador e sua respectiva progressão iterativa.

Figura 17 – Comportamento iterativo da solução e do estimador de erro

$$-u''(x) = -1 \text{ with } u(0) = u(1) = 1$$



Fonte: Autoria própria (2022).

A Figura 17 apresenta um compêndio de resultados, categorizados em:

- comparação entre soluções obtidas através do refino uniforme e adaptativo (a e b);

- forma das soluções obtidas através dos refinamentos supracitados (a e b);
 - limitação do estimador de erro (c);
- progressão do erro total ao decorrer das iterações (d).

Portanto, elaborar-se-á tais pontos.

Inicialmente, observa-se as legendas dos gráficos (a) e (b). Identifica-se que o refinamento uniforme requereu um número menor de iterações para atingir a tolerância definida na Tabela 1. Presume-se em alguns casos que o custo computacional, o tempo requerido, do refinamento uniforme seria inferior devido ao seu menor número de iterações. Apesar disso, tal inferência deve ser verificada, pois, conforme o gráfico (c) aponta, a última iteração apresenta um número maior de elementos (40) quando se comparado ao refinamento adaptativo (28). Onde, o respectivo sistema linear que representa o problema aumenta em dimensão com um número mais elevado de elementos. Tal reflexão será explorada mais a fundo na seção 4.4.

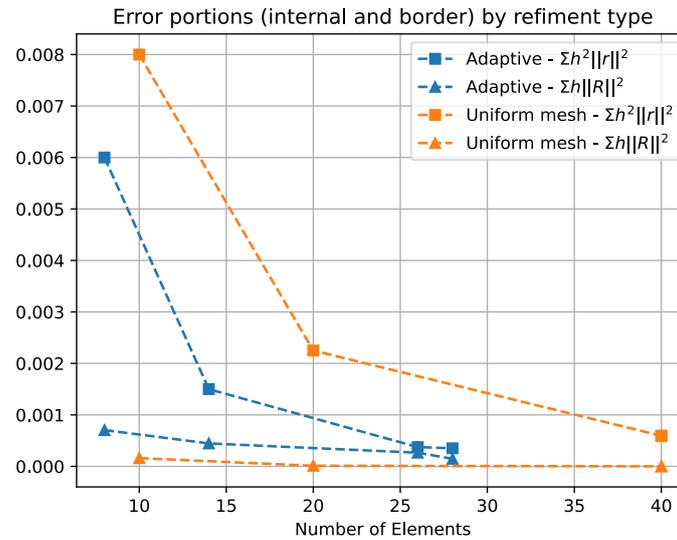
Destaca-se também a sutil diferença entre as formas de ambas soluções. Entre os intervalos de $[0; 0,2]$ e $[0,8; 1]$ no gráfico (b), é possível verificar a linearidade de solução. Tal comportamento é devido a limitação de definição do estimador de erro, apresentado no gráfico (c), no qual, para os referidos intervalos, o mesmo não é definido. Pois, segundo a expressão apresentada na Equação 89, o termo de borda, necessita dos elementos adjacentes em ambos os lados, o que não ocorre nos contornos do domínio, ao menos que a condição de contorno seja substituída para o tipo Neumann (fluxo). Entretanto, dentro da zona interna do domínio, na qual o estimador é definido, as soluções convergem para um mesmo formato.

Quanto ao comportamento intrínseco ao estimador, apresentado no gráfico (c), o fato de sua limitação de definição foi abordado previamente. Ademais, observa-se a prevalência para a iteração inicial apresentada do termo residual interno $||r||^2$, o qual é função do comprimento do elemento, sobre o termo de borda $||R||^2$. Contudo, isso não implica que quanto menor o elemento, menor será o erro total, conforme visualizado no gráfico (d), apesar de elementos menores em maior número para o refinamento uniforme, o erro total do refinamento adaptativo o supera com menos elementos.

Por fim, expande-se o raciocínio supramencionado, no gráfico (d), identifica-se novamente que o número de iterações para o refinamento uniforme é menor (três) em comparação ao adaptativo (quatro), excluindo a iteração inicial zero a qual parte de cinco elementos. Não obstante, o refinamento adaptativo compensa a iteração extra, convergindo somente para a tolerância necessária nas regiões adequadas, *i.e.*, de 26 elementos a quarta iteração exige somente dois elementos a mais (totalizando 28), o que limita a parcela do termo de borda $||R||^2$, balanceando o erro total.

Por outro lado, verifica-se a evolução do resultado encontrado no gráfico (c) da Figura 17 a partir da Figura 18, na qual a influência de cada parcela de erro, definidas pelos primeiro e segundo termos da expressão dada na Equação 84 para o resíduo interno e de borda respectivamente, é apresentada.

Figura 18 – Parcelas de resíduo interno e de borda por tipo de refino



Fonte: Aatoria própria (2022).

A Figura 18 apresenta a partir da primeira iteração o comportamento de ambas as parcelas para ambos os tipos de refino. Identifica-se inicialmente que a parcela de erro residual de borda para ambos os tipos de refino é de ordem menor ao erro residual interno. Contudo a hipótese de que o erro residual de borda se sobressai ao interno nas últimas iterações do refino uniforme é falsa, visto que a mesma tende a zero. A razão pela superioridade de resultado ao erro total do refino adaptativo sobre o refino uniforme é a quantidade de elementos final que se sobressai no primeiro, induzindo portanto uma soma menor.

4.3.1 Gasto computacional

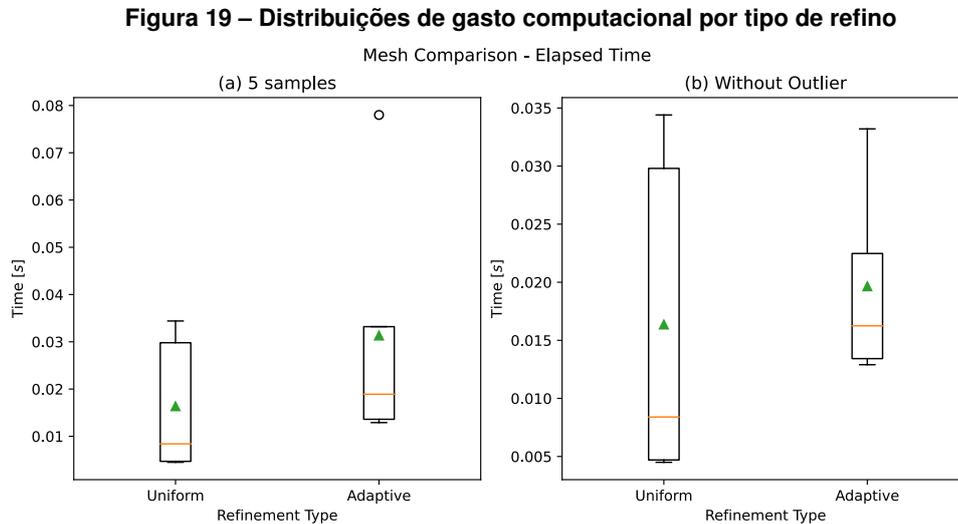
Conforme, supracitado na seção 4.2.2, a segunda forma de medição do gasto computacional é dada em tempo. Deve-se destacar que foi observado ao longo da execução da pesquisa, que tais medições possuíam uma variação relevante, propondo-se assim cinco medições para cada tipo de refino. Sendo a Tabela 2 um reflexo de tal variação, apresentada a partir das medições obtidas.

Tabela 2 – Medições de tempo gasto em segundos

Medição	Uniforme	Adaptativo
1	0,00445	0,01288
2	0,02984	0,01894
3	0,03439	0,03324
4	0,00470	0,01355
5	0,00837	0,07805

Fonte: Aatoria própria (2022).

Visa-se então, a partir das medições, avaliar o comportamento das duas distribuições. Por conseguinte propõe-se a Figura 19 na forma de gráfico *boxplot*, o qual permite identificar a forma e os parâmetros principais de ambas as distribuições.



Fonte: Autoria própria (2022).

O primeiro gráfico (a) da Figura 19 apresenta ambas as distribuições completas por tipo de refino. Ademais, a partir da qual, observa-se inicialmente a presença de um *outlier*, *i.e.*, valores drasticamente fora da distribuição, como os círculos pretos. Tal comportamento induz uma outra verificação sem tal dado, apresentada ao lado. Além disso, como os triângulos verdes, observam-se as respectivas médias aritméticas.

Deste modo, requiere-se a análise sem a presença de tal valor discrepante (medição 5 para o refino adaptativo) observada no segundo gráfico (b). Constata-se então que a média aritmética do tempo gasto para o refino uniforme mantém-se inferior quando comparada ao adaptativo.

Em suma, verifica-se que tais medições não são significativamente diferentes independente do tipo de refino, pois as distribuições possuem zonas de intersecção relevantes. E portanto, identifica-se que o parâmetro de erro total prevalece no balanço final para o par de parâmetros de entrada em questão.

4.3.2 Comparação com segundo estimador

Na seção 4.1, menciona-se a hipótese um, a qual visa avaliar a coerência do estimador proposto para a pesquisa. Portanto, devido a natureza de problemas analisados sobre a perspectiva da estimativa de erro *a posteriori*, a solução analítica de tal problema é descartada, direcionado-se assim a outro estimador encontrado na literatura de base.

Ainsworth e Oden (2000) apresenta em seguida ao estimador, previamente proposto e derivado no trabalho em questão, outro semelhante obtido a partir de uma técnica utilizada para

a obtenção de estimadores *a priori* em normas diferentes da L_2 . Tal técnica também pode ser utilizada em estimadores *a posteriori*.

4.3.2.1 Derivação do segundo estimador

O ponto de partida supra-mencionado é a aplicação de um operador adjunto Φ ao problema original, cujo domínio Ω é convexo, tal que:

$$\|e\|_{L_2(\Omega)}^2 = B(e, \Phi_e). \quad (90)$$

Aplica-se então tal relação na Equação 48, obtendo-se:

$$B(e, \Phi_e) = \sum_{K \in P} \int_K r(\Phi_e - I_X \Phi_e) dx + \sum_{\gamma \in \partial P} \int_{\gamma} R(\Phi_e - I_X \Phi_e) ds. \quad (91)$$

Faz-se uso de outros teoremas e seus respectivos resultados abaixo, *apud* Ainsworth e Oden (2000, p. 33), e da inequação de Cauchy-Schwarz:

$$\|\Phi_e - I_X \Phi_e\|_{L_2(K)} \leq C h_K^2 \|\Phi_e\|_{H_2(\tilde{K})} \quad (92)$$

e

$$\|\Phi_e - I_X \Phi_e\|_{L_2(\partial K)} \leq C h_K^{3/2} \|\Phi_e\|_{H_2(\tilde{K})}, \quad (93)$$

para obter:

$$\|e\|_{L_2(\Omega)}^2 \leq C \sum_{K \in P} \{h_K^4 \|r\|_{L_2(K)}^2 + h_K^3 \|R\|_{L_2(\partial K)}^2\}. \quad (94)$$

A diferença da Equação 94 para a 49 jaz na ordem superior do tamanho do elemento de malha h_K , refletindo uma taxa de convergência superior da aproximação da norma L_2 .

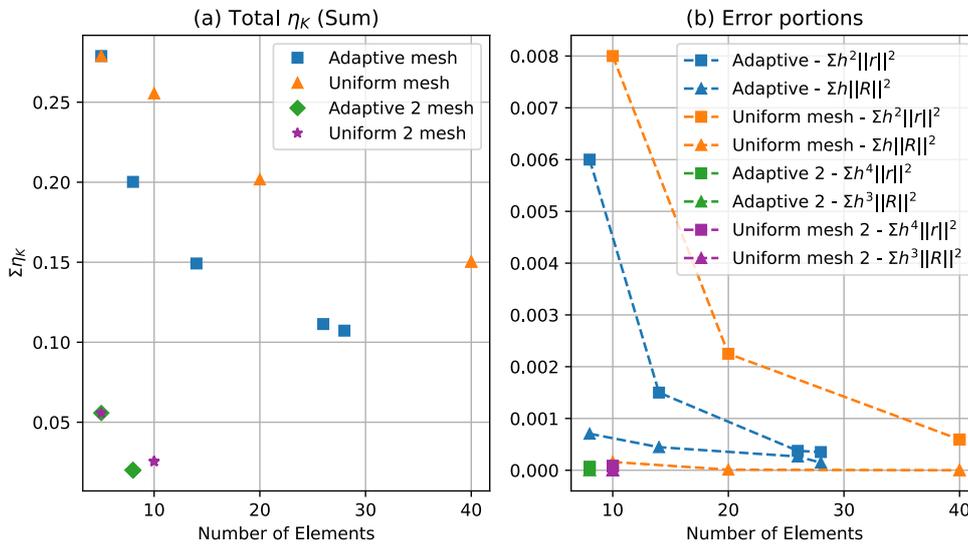
4.3.2.2 Erro total e tempo gasto para o segundo estimador

A verificação da consistência do estimador de erro *a posteriori* será dada pela avaliação entre os resultados de erro total e tempo gasto obtidos a partir do segundo estimador e comparados com o já obtido previamente.

A análise inicial consiste de avaliar tais resultados para o par de parâmetros de entrada inicial apresentado na Tabela 1 e posteriormente verificar sua consistência para outro par de parâmetros de entrada, neste caso, 10 elementos iniciais e 0,0001 de tolerância de erro individual, o qual foi identificado como um dos mais crítico conforme a Figura 33.

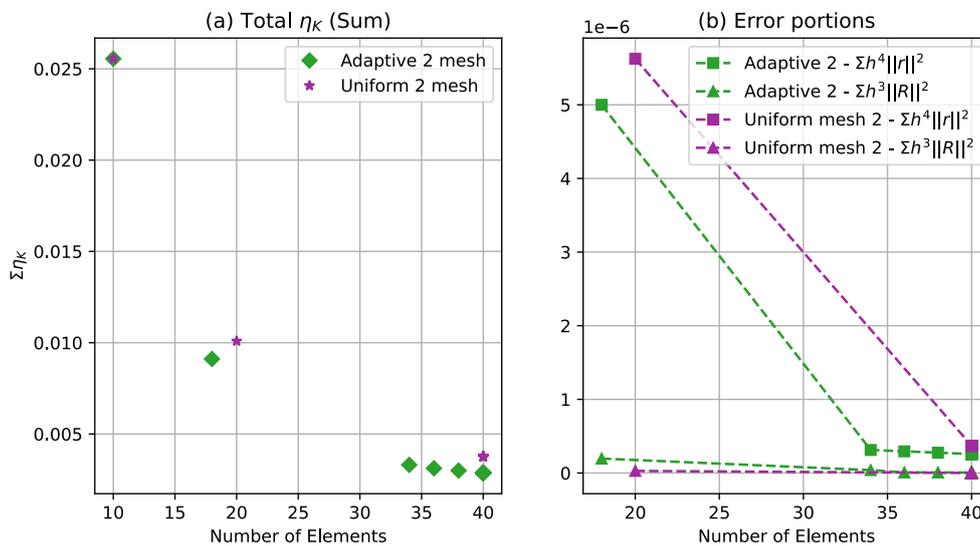
Obtém-se então as Figuras 20 e 21, para ambos pares de parâmetros de entrada, as quais apresentam o erro total por número de elementos e suas respectivas parcelas de erro residual interno e de borda.

Figura 20 – Erro total para refinamentos uniforme e adaptativo e estimadores um e dois



Fonte: Autoria própria (2022).

Figura 21 – Erro total e parcelas de resíduo por tipo de refino para $N_e = 10$ e $tol_e = 0,0001$



Fonte: Autoria própria (2022).

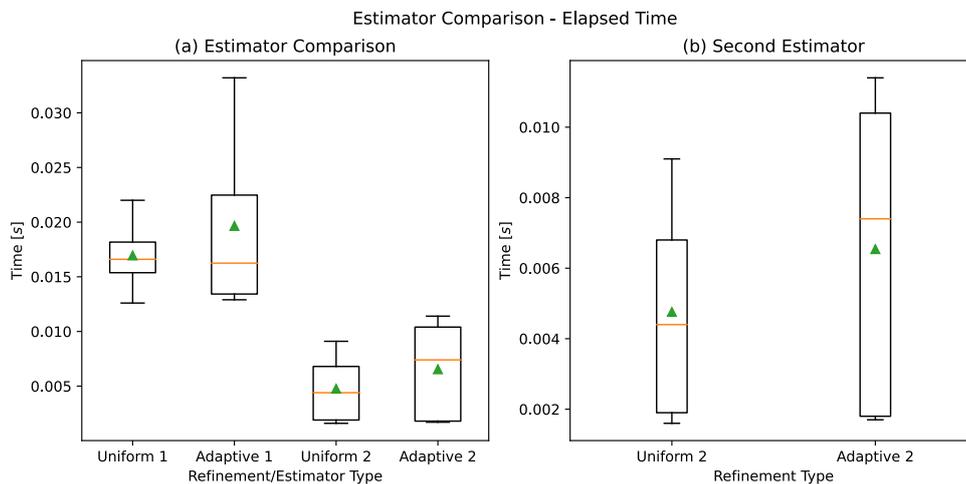
Observa-se inicialmente que o segundo estimador, em verde para o refino adaptativo e roxo para o uniforme, apresenta maior convergência conforme mencionado na literatura de base. Porém, deve-se concentrar a atenção para o comportamento comparando os tipos de refino. Identifica-se a mesma tendência para o refino adaptativo, mesmo para o segundo estimador, de um melhor resultado de erro total, *i.e.*, erro total inferior, e ainda com um menor número de elementos final neste caso.

Por outro lado, devido a maior convergência, torna-se impraticável avaliar a evolução das porções de erro para o primeiro par de parâmetros. Haja vista o segundo par de parâmetros, permite-se observar enfim na Figura 21 (b) o comportamento das porções de erro, além de avaliar a sua consistência.

Novamente constata-se a superioridade do refino adaptativo, atingindo valores menores de erro total com um número superior de iterações (vide gráfico (a) da Figura 21). Ademais, observa-se que para ambos os refinamentos a porção residual interna se sobressai enquanto a porção de borda tende a zero. E que o refino adaptativo se torna superior visto que sua parcela de erro residual interno é inferior ao refino uniforme.

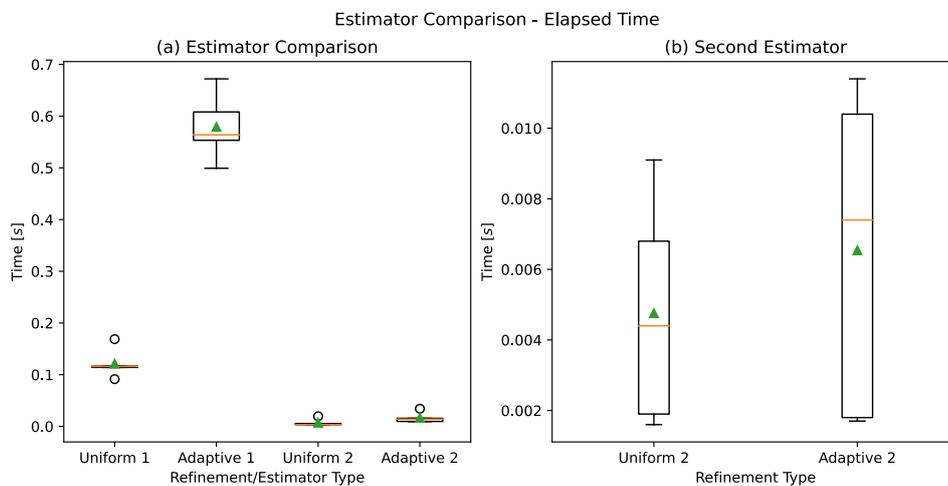
Em contrapartida, deve-se avaliar o custo computacional necessário para obter tais resultados. Portanto, sobre as mesmas circunstâncias e parâmetros de entrada das Figuras 20 e 21, obtém-se para o tempo gasto com os algoritmos as Figuras 22 e 23.

Figura 22 – Tempo gasto para refinamentos uniforme e adaptativo e estimadores um e dois



Fonte: Autoria própria (2022).

Figura 23 – Tempo gasto por tipo de refino e estimador para $N_e = 10$ e $tol_e = 0,0001$



Fonte: Autoria própria (2022).

A convergência de iterações necessárias observadas previamente influencia no tempo gasto (vide gráfico (a) da Figura 22). Ainda identifica-se que o par de parâmetros de entrada um não resulta numa diferença estatisticamente significativa entre refinamentos, mesmo que a média de medições seja superior para o refino adaptativo (vide gráfico (b) da Figura 22).

Devido a convergência superior de tal estimador, não é possível até para o caso mais crítico (par de parâmetros dois) encontrar a diferença significativa para o gasto computacional entre os refinamentos, apesar de apresentarem médias diferentes.

4.3.2.3 Síntese de comparação com o segundo estimador

Por fim, deve-se sintetizar os resultados obtidos com relação a comparação entre os dois estimadores a fim de avaliar a coerência do primeiro. Quanto ao erro total, identificou-se um comportamento semelhante entre ambos, trazendo resultados superiores para o refino adaptativo e em geral com um número de elementos final menor. Ademais, quanto ao gasto computacional, a discussão prévia não pode apontar com clareza a distinção entre eles, visto que o segundo possui uma convergência mais elevada, introduzindo outros fatores às medições de tempo gasto. Contudo, há uma leve tendência para o refino adaptativo apresentar um tempo maior por necessitar de mais iterações. Sugere-se, caso o pesquisador deseje avaliar com cautela tais resultados, selecionar outros intervalos de parâmetros de entrada mais condizentes com a convergência superior do estimador dois.

Diante disso, constata-se uma coerência nos resultados obtidos para o estimador um e em seguida, realizar-se-ão outros experimentos para avaliar propriedades intrínsecas a tal.

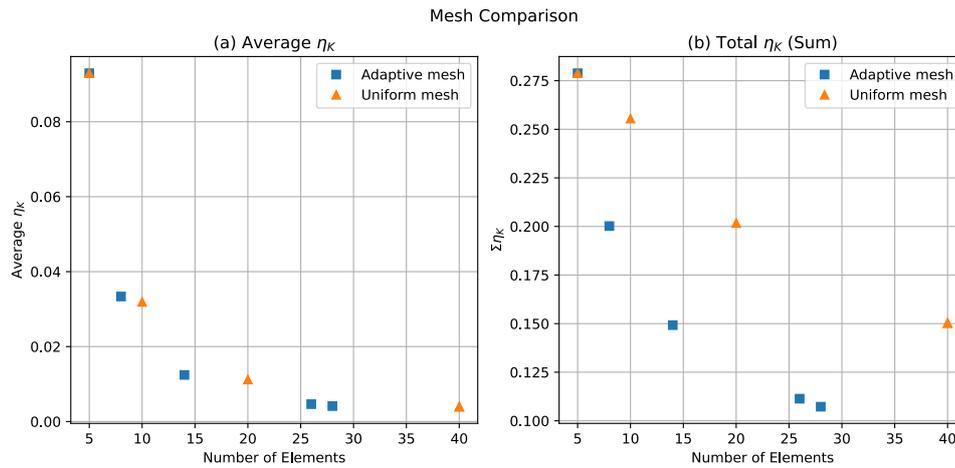
4.3.3 Refino uniforme e adaptativo

As Figuras 24, 25 e 26 apresentam os resultados referentes às comparações entre os refinamentos uniforme e adaptativo, considerando a média da parcela individual do erro η_K , o erro total (soma η_K) e os erros absoluto e relativo do erro total. Para tal, os mesmos parâmetros de entrada apresentados na Tabela 1 foram utilizados.

Apesar da média das parcelas individuais do erro estimado η_K ser inferior para a última iteração do refino uniforme em relação ao refino adaptativo, conforme visualizado no gráfico (a) da Figura 24, o número de elementos final superior (40) amplifica a estimativa de erro. Observa-se então que o refino adaptativo compensa a iteração extra, cuja média das parcelas individuais de erro é ligeiramente superior ao outro tipo de refino, com um número de elementos final reduzido, e conseqüentemente um balanço de erro total mais vantajoso (identificado no gráfico (b)).

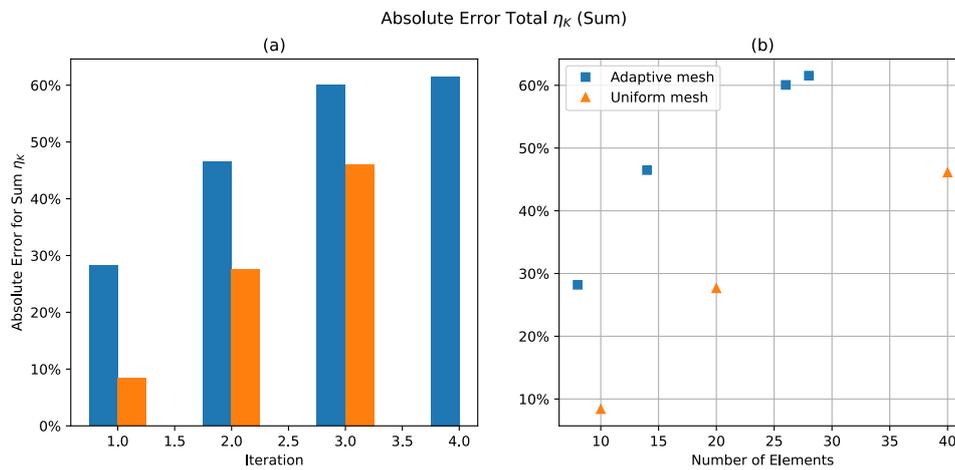
As Figura 25 e 26 permitem avaliar o quão superior o refino adaptativo é em relação ao uniforme, conforme identificado na Figura 24 (b). Destaca-se inicialmente que o erro absoluto

Figura 24 – Comparação de tipos de refino através da média η_K e da soma η_K



Fonte: Autoria própria (2022).

Figura 25 – Erro absoluto do erro total (soma η_K)



Fonte: Autoria própria (2022).

do erro total (soma η_K), descrito pela Equação 95, é superior para o refino adaptativo em todas as iterações.

$$\text{Erro absoluto} = \frac{|\Sigma\eta_K|_i - \Sigma\eta_K|_0|}{\Sigma\eta_K|_0}. \quad (95)$$

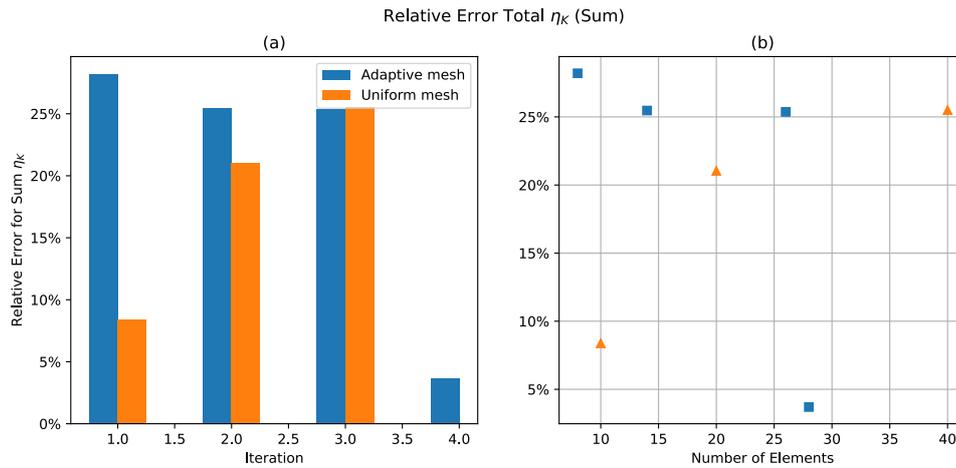
Ademais, identifica-se que para o refino adaptativo o erro relativo do erro total, descrito pela Equação 96, converge ao final do algoritmo (menos de 5% na última iteração), enquanto o refino uniforme é abruptamente interrompido.

$$\text{Erro relativo} = \frac{|\Sigma\eta_K|_i - \Sigma\eta_K|_{i-1}|}{\Sigma\eta_K|_{i-1}}. \quad (96)$$

Enfim, propõe-se avaliar o domínio final para identificar as zonas de maior refino para cada tipo de refino. A Figura 27 apresenta tal análise.

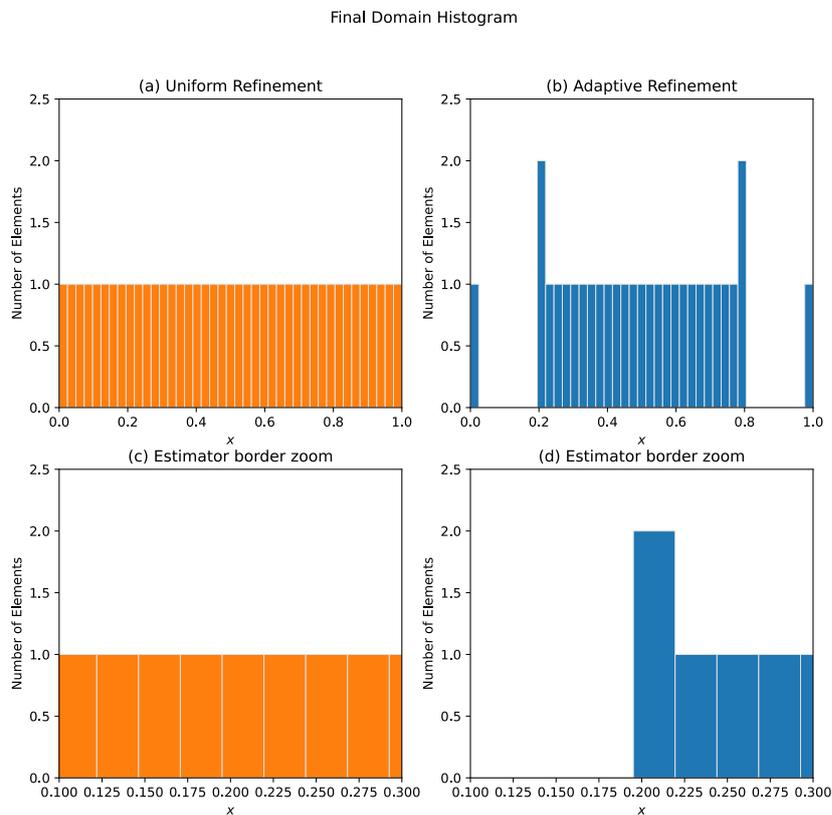
Constata-se pelo contraste entre os gráficos (a) e (b) da Figura 27 que dentro do domínio válido do estimador de erro para o refino adaptativo (entre $[0,2; 0,8]$), apresenta-se um refino

Figura 26 – Erro relativo do erro total (soma η_K)



Fonte: Autoria própria (2022).

Figura 27 – Histograma dos refinamentos do domínio



Fonte: Autoria própria (2022).

maior, enquanto o refino uniforme permanece constante ao longo de $[0; 1]$. Apesar do gráfico (d) não apresentar um elemento entre $[0; 0,2[$, tem-se apenas um grande elemento entre tal intervalo, o qual é contado na borda esquerda ($x = 0$) do gráfico (b).

4.4 Variando parâmetros de entrada

Tabela 3 – 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

Fonte: Autoria própria (2022).

Uma vez identificados os resultados para um par específico de parâmetros de entrada, torna-se necessário ampliar a análise para diferentes valores. Portanto, propõe-se os parâmetros de entrada apresentados na Tabela 3. Posteriormente, são sugeridas análises de influência de cada parâmetro individualmente, variando somente o número inicial e somente a tolerância de erro individual, para por fim, ampliar até todas as respectivas combinações possíveis. Para tal, os parâmetros de saída serão o erro total e o gasto computacional medido em segundos.

4.4.1 Comportamento iterativo da solução com outros pares de parâmetro

Conforme os pares de parâmetro de entrada da Tabela 4, avaliar-se-ão os resultados obtidos com relação ao erro total do estimador, quantidades de iterações necessárias e tempo gasto.

Tabela 4 – Pares de parâmetros de entrada para avaliar comportamento da solução e do estimador

Par	Número de elementos inicial	Tolerância de erro individual
2	25	0,001
3	100	0,0001

Fonte: Autoria própria (2022).

Obtém-se então a Figura 28 e as Tabelas 5 e 6 para os respectivos pares (2) e (3) apresentados na Tabela 4.

Tabela 5 – Iterações necessárias por tipo de refino

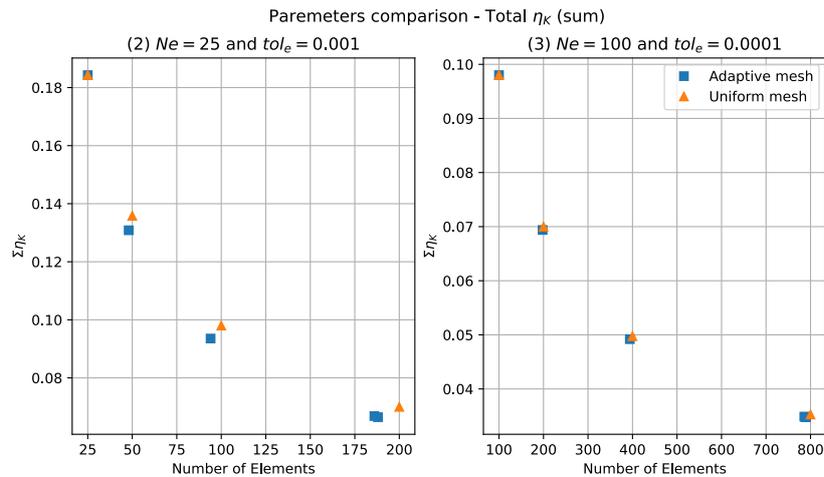
Par	Iteração Final	
	Refino Uniforme	Refino Adaptativo
2	3	4
3	3	5

Fonte: Autoria própria (2022).

Realiza-se a mesma análise de gasto computacional demonstrada na seção 4.3.1 para os pares (2) e (3), a partir da qual, obtém-se a Figura 29.

Identifica-se novamente que para ambos os pares, o refino adaptativo exige uma ou duas iterações a mais do que o refino uniforme. Ademais, observa-se que o refino adaptativo provém

Figura 28 – Comportamento iterativo da solução e do estimador de erro - pares (2) e (3)



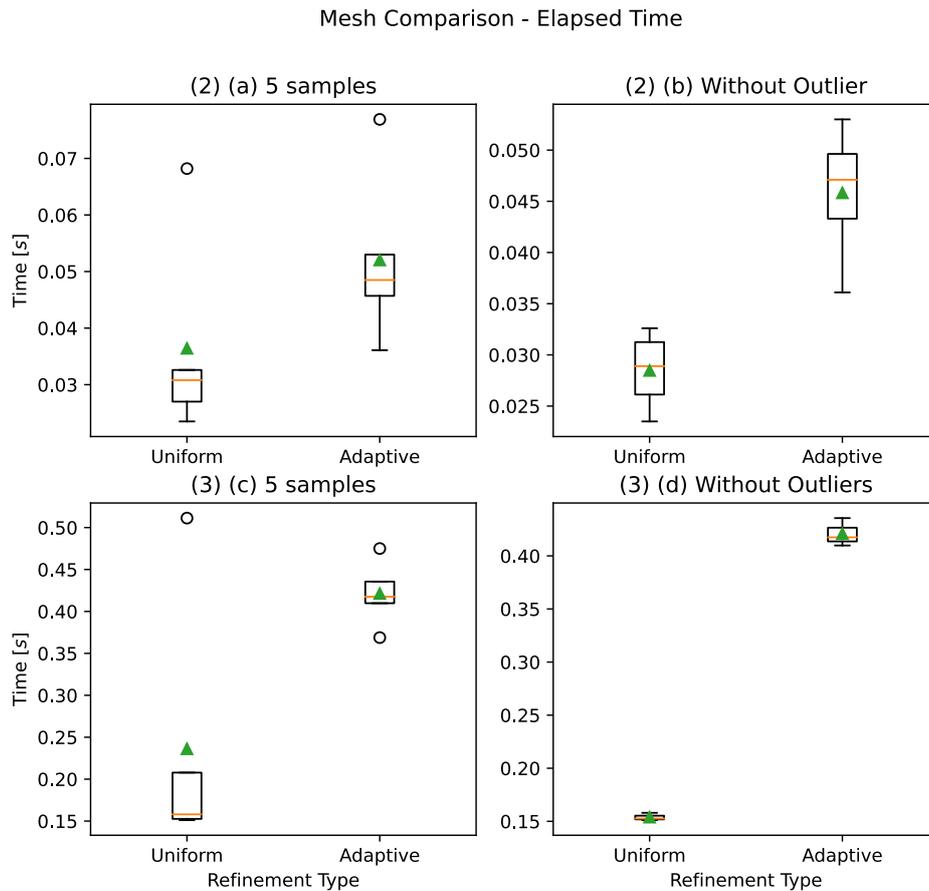
Fonte: Autoria própria (2022).

Tabela 6 – Gasto computacional por tipo de refino

Par	Gasto computacional (s)	
	Refino Uniforme	Refino Adaptativo
2	0,0270	0,0457
	0,0682	0,0361
	0,0308	0,0530
	0,0235	0,0769
	0,0326	0,0485
3	0,1511	0,4098
	0,5113	0,3688
	0,2078	0,4356
	0,1580	0,4750
	0,1526	0,4175

Fonte: Autoria própria (2022).

um resultado superior ao uniforme considerando o erro total em ambos os casos. Contudo, tal ganho em erro total, é mais expressivo para o par (2) e demanda um maior gasto computacional, conforme visualizado no gráfico (b) da Figura 29. Constata-se ainda que tal diferença torna-se significativa, visto que para ambos os pares, tal diferença entre os refinamentos é observada sem a zona de intersecção de medições. Portanto, verifica-se uma nova necessidade de análise, avaliar qual refino apresenta um melhor balanço de custo/benefício ou se algum parâmetro prevalece sobre o outro, a qual será realizada e apresentada na seção 4.4.4

Figura 29 – Gasto computacional para os pares (2) e (3)

Fonte: Autoria própria (2022).

4.4.2 Influência do número de elementos inicial

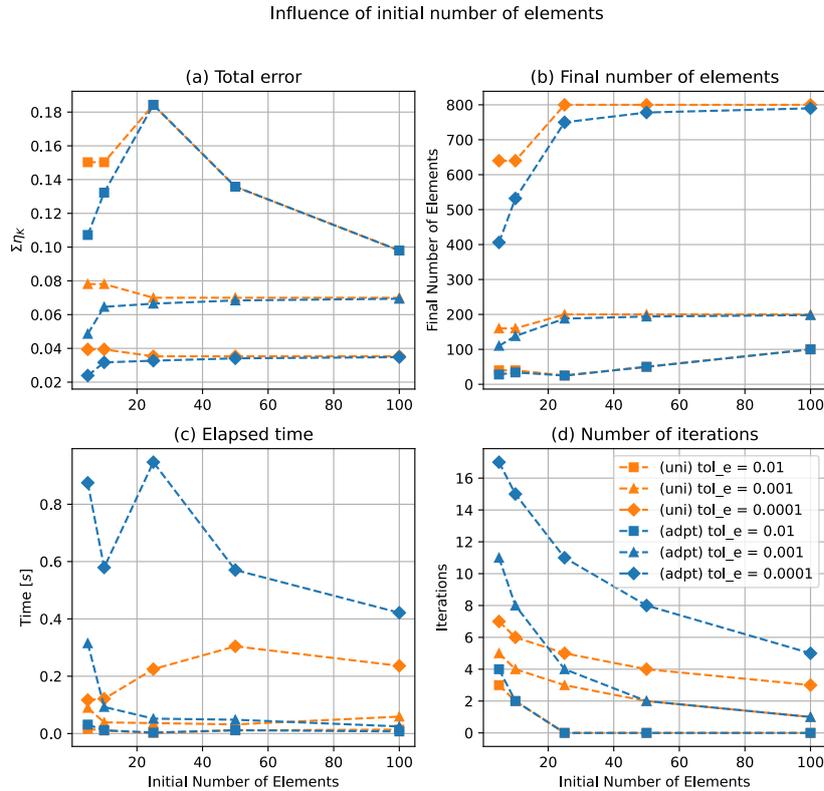
As duas seções a seguir visam avaliar o erro total ao final do algoritmo, *i.e.*, na última iteração, e o gasto computacional total, variando o número de elementos inicial e variando o valor de tolerância do erro individual a fim de analisar de influência de cada parâmetro de entrada nos parâmetros de saída, os quais representam a qualidade final da solução e seu custo embutido.

Portanto, propõe-se, para valores discretos de tolerância do erro individual e para ambos os tipos de refino, conforme visualizado na legenda de referência, a Figura 30.

A Figura 18 previamente apresentada identifica a não correlação do erro total para o refino uniforme superior ao adaptativo com a parcela de erro residual de borda. À vista disso, sugere-se avaliar o número de elementos final do domínio do problema (gráfico (b) da Figura 30).

Tal análise conjunta dos gráficos (a) e (b) permite constatar que para um número de elementos inicial menor (de cinco a dez), indiferentemente da tolerância de erro individual estabelecida, o refino adaptativo apresenta resultado superior quando comparado ao uniforme,

Figura 30 – Influência do número de elementos inicial através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total



Fonte: Autoria própria (2022).

visto que apresenta um domínio ajustado ao necessário. Por exemplo, a Tabela 7 apresenta tais resultados para uma tolerância de erro individual de 0,0001.

Tabela 7 – Erro total e número de elementos final com tolerância de erro individual = 0,0001

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

Fonte: Autoria própria (2022).

Por outro lado, a qualidade superior do resultado vem a custo de um tempo de execução do algoritmo maior (vide gráfico (c)), visto que o refino adaptativo necessita de mais iterações (vide gráfico (d)) para atingir a tolerância exigida na borda de seu domínio. A Tabela 8 apresenta os valores para a mesma tolerância de 0,0001 e para ambos os extremos de número de elementos inicial de cinco e 100.

O tempo gasto torna-se mais discrepante para tolerâncias de erro individual mais finas (0,0001 nesse caso). Entretanto, para tolerâncias mais robustas o tempo gasto é tão ínfimo que a diferença entre os refinamentos é desprezível. Ademais, para um número de elementos inicial maior, a indiferença do tipo de refino também é negligenciável.

Tabela 8 – Tempo gasto e número de iterações com tolerância de erro individual = 0,0001

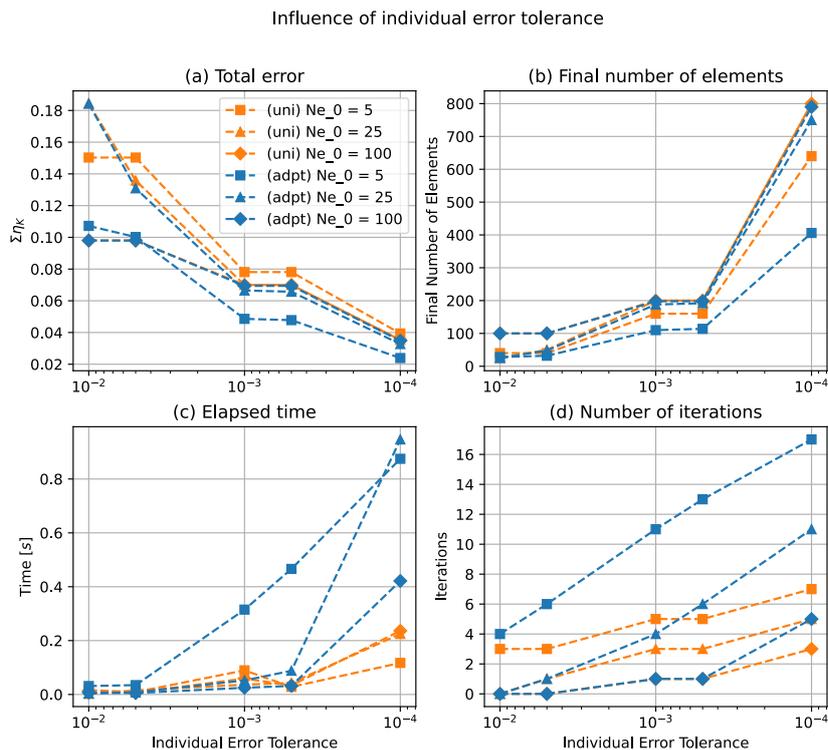
Número de elementos inicial	Refino	Tempo gasto [s]	Número de iterações
5	Uniforme	0,1171	7
	Adaptativo	0,8750	17
100	Uniforme	0,2362	3
	Adaptativo	0,4214	5

Fonte: Autoria própria (2022).

4.4.3 Influência da tolerância de erro individual

A análise referente a influência da tolerância de erro individual propõe valores discretos de número de elementos inicial, variando-a em conjunto com o tipo de refino. Deve-se atentar à Figura 31 cujo eixo x foi formatado em escala logarítmica inversa para maior clareza, apresentando o mesmo sentido de maior refino da esquerda para a direita.

Figura 31 – Influência da tolerância de erro individual através de erro total, número de elementos final, tempo gasto e número de iterações total



Fonte: Autoria própria (2022).

Utiliza-se a mesma abordagem da seção 4.4.2, avaliando inicialmente o erro total e posteriormente o tempo gasto.

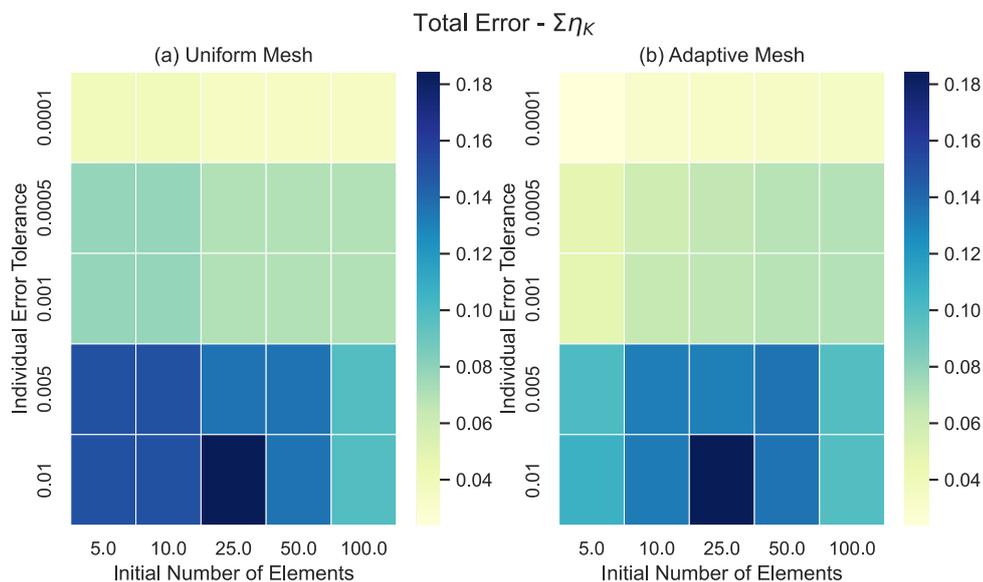
Os gráficos (a) e (b) da Figura 31 permitem confirmar a constatação previamente elaborada com relação ao resultado superior do refino adaptativo sobre o uniforme para um número de elementos inicial menor sobre toda a faixa de tolerâncias, visto que o número de elementos final é sempre inferior para tal.

Contudo, para o tempo gasto identifica-se que, para tolerâncias mais refinadas, o refino adaptativo necessita de mais tempo de execução quando comparado ao uniforme (vide gráfico (c)), visto que necessita de mais iterações do algoritmo, exceto para um número de elementos inicial maior (vide gráfico (d)).

4.4.4 Abordagem ampla de parâmetros de entrada

Identifica-se então a oportunidade de ampliar tal análise de variação de parâmetros considerando todas as 25 combinações possíveis da Tabela 3 apresentada na seção 4.4. Obtendo-se assim as Figuras 32 e 33 para os resultados de erro total e tempo gasto, respectivamente.

Figura 32 – Erro total para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual



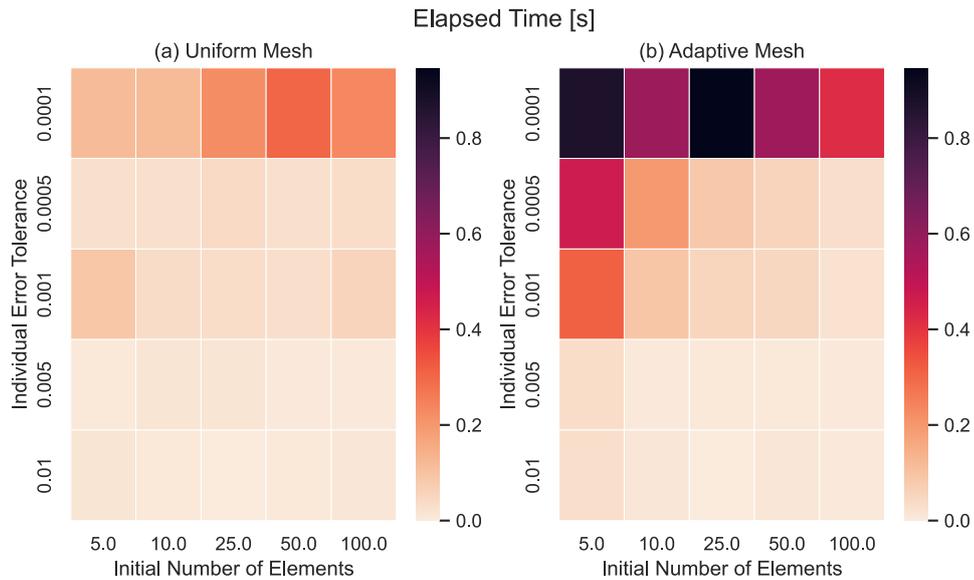
Fonte: Autoria própria (2022).

Inicialmente, deve-se ressaltar que tal abordagem amplia os resultados observados nas seções 4.4.2 e 4.4.3, nas quais cada parâmetro foi avaliado ao longo de seu respectivo domínio considerando alguns valores discretos do outro. Por exemplo, observa-se o erro total e tempo gasto para a variação do número de elementos inicial nas linhas um, três e cinco dos mapas de calor apresentados. Enquanto, para a variação de tolerância de erro individual nas colunas um, três e cinco.

Constata-se novamente que para números de elementos iniciais menores (cinco e 10, colunas um e dois), obtém-se melhores resultados para o erro total, porém gasta-se um tempo maior para tal, cuja diferença entre refinamentos é menor para 10 elementos iniciais se comparado a cinco. E para números iniciais maiores (acima de 25), não há diferença relevante entre refinamentos para o erro total, somente para tolerâncias de erro individual muito finas (0,0001), o tempo gasto para o refino adaptativo é superior.

Portanto, identifica-se uma zona ideal para o uso do refino adaptativo, número de elementos inicial menor e tolerância de erro mais robusta, garantindo assim uma estimativa inicial

Figura 33 – Tempo gasto para combinações de número de elementos inicial e tolerância de erro individual



Fonte: Autoria própria (2022).

confiável e obtida eficientemente. Situação recorrente para problemas do gênero, na qual visa-se principalmente obter uma estimativa coerente de maneira rápida mesmo sem conhecer toda complexidade e detalhes envolvidos.

Por fim, ressalta-se a última remarca referente ao tempo gasto. Em suma, para a maioria das combinações de parâmetros, o refino uniforme é superior, porém, deve-se avaliar o quão relevante é tal primazia, visto que mesmo para a pior situação o tempo máximo gasto não ultrapassa um segundo. Uma análise mais detalhada dos respectivos pesos de cada resultado deve ser realizada para traçar curvas de custo/benefício.

5 CONCLUSÃO

A linha de pesquisa de estimativa de erros *a posteriori* apresentada cumpriu os objetivos sugeridos na seção 1 desde o desenvolvimento do equacionamento teórico, para implementação do MEF e dedução do estimador de erro, até sua implementação numérica a fim de finalmente avaliar as hipóteses apresentadas na seção 4.1.

Deve-se destacar que os experimentos apresentados na seção 4 vão além dos objetivos sugeridos, e tais permitiram uma avaliação detalhada do comportamento do estimador de erro *a posteriori* deduzido para o problema modelo em questão.

A implementação numérica pode ser considerada sucedida em partes, visto que ainda apresenta oportunidades de melhoria em questões de eficiência de código, a qual permitirá uma confiabilidade superior de medições de tempo computacional, equiparando de melhor forma ambos os refinamentos.

Por conseguinte, sintetizam-se as conclusões levantadas a partir das hipóteses e dos respectivos resultados dos experimentos de teste. O estimador apresentado comporta-se de acordo com outros semelhantes encontrados na literatura em questões de erro total e custo computacional, permitindo que o refino adaptativo apresente resultados melhores de erro total (em 100% das combinações de parâmetros de entrada) enquanto necessita de um tempo superior de execução (em 76% das combinações - 19).

Por outro lado, ressalta-se novamente e ainda sugere-se que um estudo mais detalhado com relação ao peso dos resultados de saída do estimador como o tempo gasto, para assim garantir e estabelecer uma avaliação final da razão custo/benefício. Visto que apesar do refino adaptativo apresentar um tempo de execução superior na maioria das combinações de parâmetros de entrada, o pior caso não ultrapassa a ordem do segundo. Portanto, questiona-se poderia tal parâmetro de saída ser depreciado?

Ademais, sugerem-se outras linhas de estudo para a continuidade do tema, utilizando-se da mesma profundidade de experimentos:

- avaliar o mesmo problema com outro estimador;
- avaliar outro problema com o mesmo estimador.

Por fim, enuncia-se que tal área de pesquisa tem implicação em diversos setores da engenharia. Portanto, o aprimoramento no tema por parte do autor e a possível abertura de novas linhas de pesquisa posteriormente agregará não somente à UTFPR, porém também ao contexto internacional de simulação, atividade cada vez mais visada pelo custo/benefício de validações de modelos.

Acredita-se ainda que o presente trabalho agrega conceitos de disciplinas de Engenharia Mecânica, Matemática e Computação, o que propicia uma oportunidade abranger diferentes perspectivas e trazer novas ideias para o contexto industrial mecânico.

REFERÊNCIAS

- AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. **A posteriori error estimation in finite element analysis**. New York: Wiley, 2000. ISBN 0-471-29411-X.
- AKIN, J. **Finite Element Analysis with Error Estimators: An Introduction to the FEM and Adaptive Error Analysis for Engineering Students**. Elsevier Science, 2005. ISBN 9780080472751. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=uUsm99d8WBAC>.
- ANACONDA. **The Scientific Python Development Environment**. 2022. Disponível em: <https://anaconda.org/anaconda/spyder>. Acesso em: 5 abr. 2022.
- ARNOLD, V. I. **Lectures on partial differential equations**. Berlin New York: Springer-Verlag, 2004. ISBN 978-3-662-05441-3.
- ATKINSON, K. **Theoretical numerical analysis : a functional analysis framework**. Dordrecht New York: Springer, 2009. ISBN 978-1-4419-0457-7.
- BABUSKA, I.; 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. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620121010>.
- BABUSKA, I.; RHEINBOLDT, W. C. Adaptive approaches and reliability estimations in finite element analysis. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 17-18, p. 519–540, 1979. ISSN 0045-7825. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782579900422>.
- BABUSKA, I. *et al.* Validation of a posteriori error estimators by numerical approach. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 37, n. 7, p. 1073–1123, 1994. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620370702>.
- BABUŠKA, I.; STROUBOULIS, T.; UPADHYAY, C. A model study of the quality of a posteriori error estimators for linear elliptic problems. error estimation in the interior of patchwise uniform grids of triangles. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 114, n. 3, p. 307–378, 1994. ISSN 0045-7825. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782594901775>.
- BRAESS, D. **Finite elements : theory, fast solvers, and applications in elasticity theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0-511-27910-2.
- BRENNER, S. **The Mathematical Theory of Finite Element Methods**. New York, NY: Springer New York, 1994. ISBN 978-1-4757-4340-1.
- 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. and Canada, Elsevier North-Holland, 1978. ISBN 0-444-85028-7.
- COOK, R. **Concepts and applications of finite element analysis**. New York, NY: Wiley, 2001. ISBN 978-0-471-35605-9.
- COULOMB, J.-L. Finite elements three dimensional magnetic field computation. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 17, n. 6, p. 3241–3246, 1981.
- DAUTRAY, R. **Mathematical analysis and numerical methods for science and technology**. Berlin New York: Springer-Verlag, 1988. ISBN 3540190457.

DIBENEDETTO, E. **Partial differential equations**. Boston: Birkhauser, 1995. ISBN 978-1-4899-2840-5.

EVANS, L. **Partial differential equations**. Providence, R.I: American Mathematical Society, 1998. ISBN 978-0821807729.

GAGO, J. P. D. S. R. *et al.* A posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method: Part ii—adaptive mesh refinement. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 19, n. 11, p. 1621–1656, 1983. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620191104>.

GALVIS, J.; VERSIEUX, H. **Introdução à Aproximação Numérica de Equações Diferenciais Parciais Via o Método de Elementos Finitos**. [S.l.]: IMPA, 2011. ISBN 978-85-244-325-5.

HATASHITA, L. **GitHub repository for numerical implementation**. 2022. Disponível em: https://github.com/luishhatashita/a_posteriori_error_estimator. Acesso em: 29 abr. 2022.

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. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620191103>.

KLAINERMAN, S. Iv.12 partial differential equations. In: GOWERS, T.; BARROW-GREEN, J.; LEADER, I. (Ed.). **The Princeton Companion to Mathematics**. Princeton University Press, 2010. p. 455–483. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/9781400830398.455>.

KOLMOGOROV, A.; FOMIN, S. **Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis**. Rochester, N.Y: Graylock Press, 1957.

LADEVÈZE, P.; MOËS, N. A posteriori constitutive relation error estimators for nonlinear finite element analysis and adaptive control. In: LADEVÈZE, P.; ODEN, J. (Ed.). **Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics**. Elsevier, 1998, (Studies in Applied Mechanics, v. 47). p. 231–256. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0922538298800135>.

LOGG, A.; MARDAL, K.-A. **Lectures on the Finite Element Method**. 2021.

MATPLOTLIB. **Matplotlib 3.5.1 documentation**. 2022. Disponível em: <https://matplotlib.org/stable/index.html>. Acesso em: 5 abr. 2022.

NAGEL, J. R. **Introduction to the finite element method**. 2012.

NUMPY. **NumPy Documentation**. 2022. Disponível em: <https://numpy.org/doc/stable/>. Acesso em: 5 abr. 2022.

PYTHON. **Welcome to Python.org**. 2022. Disponível em: <https://www.python.org/about/>. Acesso em: 5 abr. 2022.

RUDIN, W. **Functional analysis**. New York: McGraw-Hill, 1991. ISBN 0070542368.

SMIRNOV, V. I. **A course of higher mathematics**. Oxford New York Reading: Pergamon Press Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 1964. ISBN 9781483197470.

SOBOLEV, S. **Some Applications of Functional Analysis in Mathematical Physics : Third Edition**. Providence: American Mathematical Society, 1991. ISBN 0821819372.

VERFURTH, R. **A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques**. Chichester New York: Wiley-Teubner, 1996. ISBN 9780471967958.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. **The Finite Element Method**. 5th. ed. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2000. ISBN 0750650494.

ZIENKIEWICZ, O. C.; ZHU, J. Z. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 24, n. 2, p. 337–357, 1987. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1620240206>.