

O exemplo de Runge, os Elementos Finitos, as notações o , \mathcal{O}

Carlos A. de Moura

demoura@ime.uerj.br

Instituto de Matemática e Estatística, UERJ

27-9-2004

Resumo

Mostramos, com um exemplo devido a Runge, que aumentar o grau do polinômio interpolador não é o caminho para melhorar a aproximação obtida via interpolação polinomial. Os elementos finitos surgem como uma alternativa extremamente bem sucedida. Apresentamos em seguida a notação clássica, o , \mathcal{O} , que foi reintroduzida principalmente graças aos estudos em Complexidade Computacional.

1 Uma releitura

Consideremos o problema da interpolação numérica dos valores de uma função real f definida em um intervalo $[a, b]$. Supondo conhecidos os valores $f(x_i)$ nos $N + 1$ pontos de

$$X = X_N := \{x_1, x_2, \dots, x_{N+1}\},$$

sabe-se existir um único polinômio $p = p_X$ de grau N , dito **interpolador** de f em X , tal que

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, N + 1.$$

À pergunta: usando-se esse instrumento, a interpolação polinomial, e tomando-se mais e mais pontos para o conjunto X , ou seja, conhecendo-se

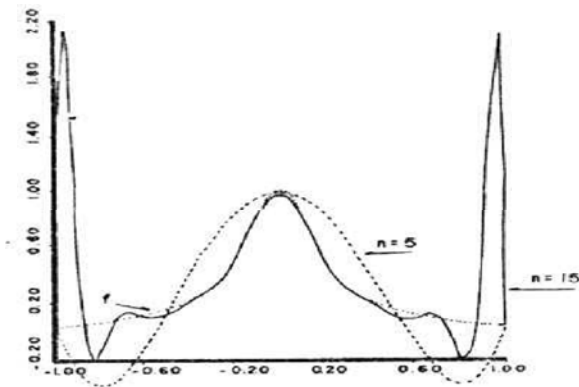


Figura 1: **Exemplo de Runge**

mais valores de f , melhora-se o nível da informação sobre aqueles valores desconhecidos no complemento de X ? Em termos mais precisos, como se comporta o **erro da interpolação**

$$e(x) := |p(x) - f(x)|, \quad x \neq x_i?$$

Há pouco mais de cem anos, Runge deu uma resposta taxativa, ao exhibir, cf. [10], a função

$$R(x) := \frac{1}{1 + 25x^2}$$

que, interpolada nos $2N + 1$ pontos do conjunto

$$\mathcal{X}_N := \{0, \pm 1/N, \pm 2/N, \dots, \pm 1 \mp 1/N, \pm 1\},$$

gera um polinômio cujo erro associado satisfaz

$$\max_{-1 < x < 1} e_N(x) \rightarrow \infty \quad \text{se } N \rightarrow \infty.$$

A Fig. 1 exhibe o gráfico de R e dos correspondentes polinômios interpoladores de grau 5 e 15.

O aprofundamento do estudo do erro $e(x)$ na interpolação permite quantificá-lo em termos do grau do polinômio, da distribuição dos pontos e da regularidade das derivadas da função interpolada. Este resultado se revelou básico no desenvolvimento da teoria do método dos elementos finitos (MEF), cf. [7]. Com este método, baseado na interpolação polinomial, se pode obter

precisão extremamente elevada, apesar de ser um prognóstico desanimador para a técnica de interpolação a leitura sugerida, à primeira vista, pelo exemplo de Runge. Assim, deve-se enfatizar a importância das informações sobre o comportamento assintótico do erro na interpolação como fundamental para o desenvolvimento de um instrumento alternativo, no caso, o MEF.

Um ponto que desejamos salientar é que as restrições práticas de problemas reais podem forçar os parâmetros presentes nos algoritmos numéricos – que, na teoria, devem ser tomados “*suficientemente grandes*” – a ficarem restritos a valores não tão elevados. De fato, é comum ocorrer mesmo a impossibilidade de serem eles tomados acima de um dado patamar, devido a vínculos reais, conforme ilustramos a seguir.¹

2 Os elementos finitos

Foi Richard Courant, em [4], quem pela primeira vez sugeriu os espaços de elementos finitos, em um artigo que passou despercebido até ser essa técnica redescoberta nos anos 60, na área da Engenharia Civil (é de Argyris[1] a primeira referência, sendo Clough[3] quem primeiro empregou o termo). Quando submetida, anos depois, ao rigoroso crivo matemático, demonstraram-se teoricamente algumas de suas propriedades já conhecidas – e utilizadas – computacionalmente.

O teorema descoberto em 1891 por Karl Weierstrass, cf. as notas² de Set.13 ou [12], pode ser descrito dizendo que os polinômios possuem a propriedade de *mimetizar* muito bem as funções contínuas: por melhor que seja o instrumento de medição de que disponhamos, dada uma função contínua arbitrária no intervalo $[a, b]$, existe um polinômio que consegue *confundir* nosso instrumento, o qual não vai poder distinguir entre esse polinômio e a função inicialmente introduzida. Como a avaliação numérica de um polinômio exige apenas operações algébricas (soma, multiplicação), facilmente processadas em um computador, este resultado parece indicar um caminho insuperável para a construção de algoritmos de aproximação.

¹Texto extraído de [6]

²<http://www.ime.uerj.br/~aprendiz/2semestre/matematicadiscreta/apostilas/Set13.pdf>

Mas sucede que a essência da tarefa de aproximação está não apenas em **encontrá-la**, mas principalmente em avaliar o **erro numérico** a ela associado, e o **esforço computacional** a ser dispendido. Melhor dizendo, são faces complementares do mesmo problema, nenhum objetivo existindo em resolver a primeira se informações não forem disponíveis para as outras duas. Como se demonstra que, para obter erros cada vez menores com as aproximações garantidas pelo Teorema de Weierstrass, polinômios com graus cada vez mais elevados são exigidos, essa aproximação conduz ainda a um outro tipo de erros, aqueles gerados pela aritmética de precisão finita da computação digital, os **erros de arredondamento**.

Dados $N+1$ pontos distintos de $[a, b]$, $\{x_j\}$, $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_N \leq b$, e uma função $f \in C^{N+1}(a, b)$, sendo $h := \max\{x_j - x_{j-1}, 1 \leq j \leq N\}$, a expressão do erro de truncamento na interpolação de f com o (único) polinômio $p_N = p_N(f)$ de grau N que coincide com f nesses pontos, chamados **nós de interpolação**, é dada por

$$|f(x) - p_N(x)| \leq C h^{N+1}, \quad a \leq x \leq b, \quad (1)$$

onde $C = C_N(f)$ é uma constante associada a limitações para derivadas de f em $[a, b]$.

Por um lado, (1) indica que buscar a redução dos erros na aproximação com polinômios, por meio da interpolação, não é um bom caminho, pois exige um grau elevado para esses polinômios. Mas deve-se observar que essa expressão indica também uma outra alternativa, justamente a que motivou a construção do método dos elementos finitos, como passamos a descrever.

Em vez de trabalhar com aproximações globais, tomam-se aproximações locais, ou seja, interpolações definidas separadamente em subintervalos do intervalo inicialmente considerado. Assim, é possível fazer $h \rightarrow 0$ sem que N cresça e, portanto, a estimativa (1) seja ameaçada pelo valor de C_N . Uma outra justificativa para este procedimento é que a função f pode não ter o grau de regularidade exigido por (1) para valores elevados de N . Lembremos ainda que funções seccionalmente polinomiais são utilizadas nas fórmulas repetidas de integração numérica.

Descreveremos agora como aproximar $C^1(\Omega)$ por elementos finitos quadráticos, no caso de $\Omega = [a, b] \subset \mathbb{R}$.

Certas dificuldades técnicas que ocorrem quando a região Ω tem dimensão maior que 1 permanecem ocultas na presente discussão, que apesar disso já introduz os aspectos mais relevantes da construção do método. Este, o objetivo de mantermos alguns detalhes na notação e na própria construção, os quais de fato só se justificariam para dimensões maiores.

Tomemos $N > 0$ um inteiro arbitrário e consideremos uma partição \mathcal{T} de $[a, b]$ composta de N intervalos fechados³, os quais denominaremos **elementos** e denotaremos por $e \in \mathcal{T}$.

Os dois pontos extremos e o ponto médio de cada elemento são ditos **nodos** desse elemento⁴ e denotados $e_1 < e_2 < e_3$, de modo que se tem

$$\begin{aligned} \bigcup_{\{e \in \mathcal{T}\}} e &= \bar{\Omega} \\ e \cap e' &= \begin{cases} \emptyset & \text{ou} \\ \{e_i\} = \{e'_j\}, & \text{com } \{i, j\} = \{1, 3\} \end{cases} . \end{aligned}$$

E, sendo

$$h_e := e_3 - e_1 = \text{diam } e, \quad (2)$$

$$h := \max_{e \in \mathcal{T}} \{h_e\}, \quad (2')$$

vale

$$|e_i - e_j| \leq h, \quad \forall e \in \mathcal{T}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

A própria definição (2) já enfatiza ser desnecessária a escolha de uma **partição regular**, ou seja, formada por intervalos de igual comprimento. Tal escolha precisa mesmo ser evitada em alguns problemas para melhorar a qualidade da aproximação, ver por exemplo [8].

O espaço $V_h \subset C^1(\Omega)$ a ser construído é formado por funções contínuas que, dentro de cada elemento, coincidem com um polinômio de grau ≤ 2 . Assim, cada função $v \in V_h$ fica completamente caracterizada pelos seus

³Estamos abusando do termo “partição”, já que há interseções não vazias.

⁴(para não confundir com os **nos** da partição)

valores nos nodos e_i , $i \in 1, 2, 3$, $e \in \mathcal{T}$. Sendo $\phi_{e_i} \in V_h$ as **funções de forma** definidas para $e \in \mathcal{T}$, $i, j = 1, 2, 3$ por

$$\phi_{e_i}(e_j) := \delta_{ij} \quad (\delta \text{ é o delta de Kronecker}), \quad (3)$$

e, denotando

$$v_e^i := v(e_i),$$

tem-se

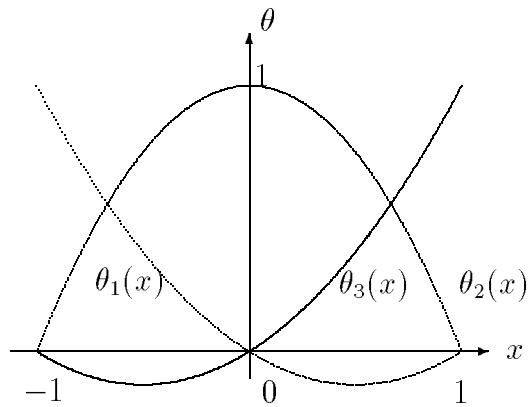
$$v(x) = \sum_{i=1}^3 v_e^i \phi_{e_i}(x), \quad \forall v \in V_h, \quad x \in e.$$

Esta é a chamada **representação local** de v , válida apenas no elemento $e \in \mathcal{T}$. Com relação a esta **base local**, v apresenta coeficientes bem simples: são os seus próprios valores nos 3 nodos e_i . Por outro lado, para qualquer elemento $e \in \mathcal{T}$, as funções ϕ_{e_i} podem ser calculadas em pontos quaisquer do elemento por meio das mesmas funções de interpolação

$$\theta_i : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$$

dadas por (ver figura que segue)

$$\begin{cases} \theta_1(s) := s(s-1)/2 \\ \theta_2(s) := 1-s^2 \\ \theta_3(s) := s(s+1)/2 \end{cases},$$



e das mudanças de coordenadas

$$\xi_e(x) := 2 \frac{x - e_1}{e_3 - e_1} - 1, \quad x \in e,$$

ou seja,

$$x_e(\xi) := [\xi(e_3 - e_1) + e_3 + e_1]/2, \quad -1 \leq \xi \leq 1.$$

De fato, vale

$$\phi_{e_i}(x) = \theta_i(\xi_e(x)), \quad x \in e, \quad \forall e \in \mathcal{T}.$$

A notação introduzida em (3) é propositadamente ambígua, pois a mesma função ϕ aparece com índices distintos conforme um nodo seja considerado como em um ou noutro elemento. Ora, a família $\{\phi_{e_i}\}_{i=1,2,3; e \in \mathcal{T}}$ é uma base de $\{V_h\}$, com $N_h = 2N + 1$ elementos, logo podemos indicia-la na forma $\{\phi_j\}_{1 \leq j \leq N_h}$, o que corresponde a reindicar os nodos: temos agora uma indiciação global $\{x_j\}_{1 \leq j \leq N_h}$ e uma **representação global**

$$v(x) = \sum_{j=1}^{N_h} v(x_j) \phi_j(x). \quad (4)$$

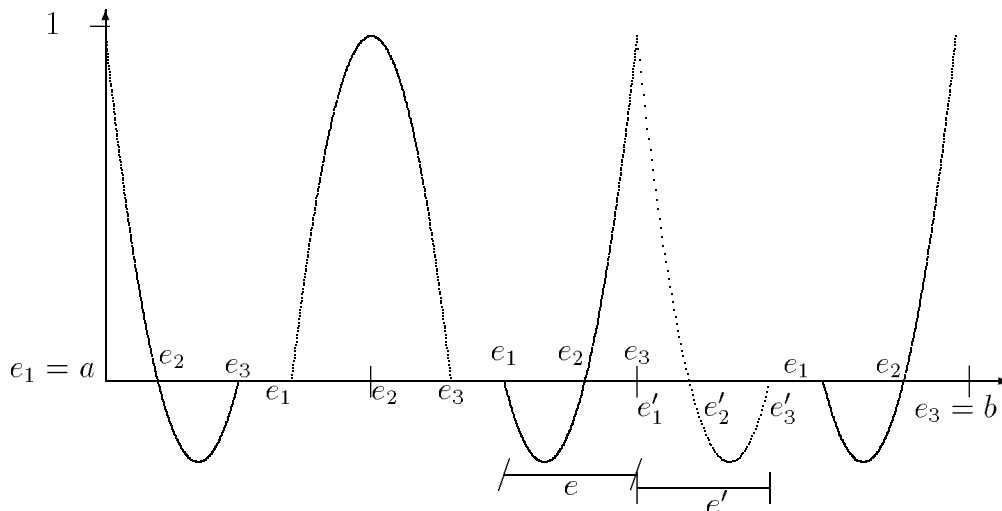
As funções ϕ_j apresentam os perfis descritos na figura que segue. Observa-se que o suporte de cada uma delas intersecciona no máximo o suporte de outras **quatro**. Dessa forma, o conjunto $\{\phi_j\}$ é apenas *quase* ortogonal: os produtos internos $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$ só podem ser distintos de zero para no máximo **cinco** pares (i, j) . Na solução numérica de equações diferenciais, esta propriedade dos elementos finitos assegura que os sistemas lineares gerados pelo algoritmo de resolução correspondem a matrizes esparsas (de fato, matrizes de banda), o que conduz a importante economia em esforço computacional.

Algumas funções ϕ_j da base global que construímos são “rasgadas” quando consideradas na base local que corresponde a um dos elementos onde elas não se anulam. As informações geradas a nível de elemento necessitam assim ser “costuradas” a fim de produzir as informações globais. É o que se chama a **montagem** da matriz global do sistema a partir das matrizes associadas às equações locais.

É importante relacionar algumas das propriedades da técnica dos elementos finitos:

- A manipulação das funções ϕ_j é simples, essencialmente conduzida no nível de *máquina*, não exigindo esquemas numéricos de aproximação, como ocorre, por exemplo, quando se escolhe a expansão em auto-funções, as quais exibem a aparente vantagem de produzir um sistema não apenas esparso, mas diagonal;

- Os próprios coeficientes de uma dada função com relação à base ϕ_j já fornecem importantes dados sobre essa função – são seus valores nos nós e_j . Trata-se de uma importante propriedade quando a função a ser aproximada é “dada” por outras propriedades, por exemplo, a solução de um sistema de equações diferenciais.
- A rotina de construção de soluções aproximadas para um sistema de equações diferenciais envolve grande número de passagens também presentes em outros problemas, permitindo assim a criação ágil de programotecas com esse fim.
- A escolha da indexação $e_1 < e_2 < e_3$ e $x_j < x_{j+1}$ implica terem as matrizes associadas a forma de **matrizes de banda**. Claro que esta é também a indexação natural em uma dimensão. Tal propriedade deixa de ser válida para dimensões maiores, fazendo-se necessário pesquisar a ordem mais conveniente para a indexação. Também a correspondência entre índices globais e locais não fica tão simples, introduzindo-se para isso as matrizes de incidência, cf.[9].



Quantifiquemos agora o grau de precisão – ou o nível do erro – na aproximação gerada pelas funções que construímos. Definimos a chamada função de interpolação

$$\begin{aligned} \Pi_h : C^1(\Omega) &\rightarrow V_h \\ w &\rightarrow \Pi_h(w) := w_h, \end{aligned}$$

caracterizada por satisfazer as condições

$$w_h(x_j) = v(x_j), \quad j = 1, \dots, N_k,$$

o que equivale, tendo em vista (4), a

$$w_h(x) := \sum_{j=1}^{N_h} w(x_j) \phi_j(x). \quad (4')$$

Recordando a notação para h introduzida em (2) e denotando por

$$\Delta := \min_{e \in \mathcal{T}} \{h_e\},$$

afirmamos, cf. [11], que, para toda função $w \in C^2(\Omega)$, vale

$$\|w - \Pi_h w\|_{C^1} \leq \mathcal{C}(w) \frac{h^3}{\Delta},$$

onde a constante $\mathcal{C}(w)$ depende de w – de fato, de derivadas até segunda ordem de w , e se define a notação $\|w\|_{C^1}$ por

$$\|w\|_{C^1} := \sqrt{\int_a^b [|f(x)|^2 + |f'(x)|^2] dx}.$$

Conseqüentemente, tendo em vista ser o subespaço $C^2(\Omega)$ **denso**⁵ em $C^1(\Omega)$, vale o seguinte

Teorema (aproximações seccionalmente quadráticas). Dada $f \in C^1(\Omega)$, pode-se construir uma seqüência de reais $\{h_n\}$, com $h_n \rightarrow 0$, e uma seqüência de funções $f_n \in V^{h_n}$ que satisfazem⁶

$$\|f_n - f\|_{C^1} = \mathcal{O}(h_n^2).$$

Uma formulação mais geral das propriedades de interpolação para elementos finitos unidimensionais, com malha uniforme é o conteúdo do

⁵Um subconjunto $A \subset B$ é denso (em B) se todo elemento de B pode ser aproximado, no nível de precisão que decidirmos, por elementos de A .

⁶A notação \mathcal{O} está definida na seção seguinte.

Teorema (aproximações seccionalmente polinomiais). Para r, ℓ, N inteiros, $0 < r < \ell - 1$ e $h = 1/(N + 1)$, consideremos o espaço $S_h^{\ell,r}$ das funções seccionalmente polinomiais, de classe $C^r(0, 1)$, que coincidem com um polinômio de grau $\leq \ell - 1$ em cada subintervalo. O operador de interpolação nestes espaços

$$\begin{aligned} \Pi_h : C^1(0, 1) &\rightarrow S_h^{\ell,r} \\ v &\rightarrow V_h \end{aligned}$$

satisfaz

$$\|v - V_h\|_{C^1} = \mathcal{O}(h^{\ell-1}) .$$

Formulações mais completas podem ser consultadas em [2].⁷

3 A antiquada notação nova

Até talvez o final da década de 60, pelo menos no meio matemático, era considerada antiquada a notação que passamos a descrever e que se foi tornando cada vez mais atual e utilizada justamente com o desenvolvimento da computação, mais particularmente, do estudo da **complexidade computacional**. Já discutimos a necessidade de conhecer detalhes de como ocorrem determinados limites os quais sabemos se aproximam do ∞ , como quando analisamos o fatorial. A fórmula de Stirling,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^N e^{-n} \sqrt{(2\pi n)}}{n!} = 1$$

é expressa na notação mencionada como

$$n! = \mathcal{O} \left(n^N e^{-n} \sqrt{(2\pi n)} \right) \quad \text{para } n \rightarrow \infty .$$

Em geral, dadas duas funções reais f, g , ambas tendendo para infinito, para $x \rightarrow \infty$, dizemos que $f = \mathcal{O}(g), x \rightarrow \infty$, se existem constantes positivas K, M tais que

$$\left| \frac{f(x)}{g(x)} \right| \leq K, \quad \forall x \geq M .$$

⁷Texto extraído de [5]

Isso quer dizer que, para valores grandes do argumento, o quociente das duas funções não passa da constante K , ou seja, que elas “vão para infinito com a mesma velocidade”.

Se uma delas, digamos g , vai para infinito mais rapidamente que a outra, a notação que se usa é $f = \mathbf{o}(g)$, $x \rightarrow \infty$, querendo dizer que

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{f}{g} = 0.$$

Por exemplo, tem-se que $\log(x) = \mathbf{o}(x^n)$, $n \geq 1$ e que $x^n = \mathbf{o}(e^x) \forall n > 0$. Esta notação é empregada também para qualquer outro ponto de $\overline{\mathbb{R}}$ para o qual duas funções aproximem o mesmo limite, p.ex., $|\log(x)| = \mathbf{o}(x^{-n})$, $x \rightarrow 0^+$, $\forall n < 0$.

Um outro exemplo de comparação de limites que citamos foi a **constante de Euler**, γ : sabe-se que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\sum_{n=1}^N \frac{1}{n} - \log N \right] = \gamma,$$

sendo que essa constante até hoje não foi caracterizada como racional ou irracional.

Referências

- [1] J.H. Argyris. Energy theorems and structural analysis, part i: General theory. *Aircraft Engin.*, 26-27:347–356, 383–387, 397; 42–58, 80–94, 125–134, 1954–55.
- [2] P.G. Ciarlet and J.-L. Lions (eds.). *Handbook of Numerical Analysis*, volume II (Part 1). North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [3] P.W. Clough. The finite element method in plane stress analysis. In *Proc. of the 2nd ASCE Conference on Electronic Computation*, Pittsburgh, PA, USA, 1960.
- [4] R. Courant. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 49:1–23, 1943.
- [5] C.A. de Moura. *Análise Funcional para Aplicações – Posologia*. Ed. Ciência Moderna, Rio de Janeiro, 2002.
- [6] C.A. de Moura. *Computação Científica × Análise Funcional*. Tese de Livre Docência, IME/UERJ, 2003. Cadernos do IME/UERJ, Série Matemática, 15-02, Dez.2003.
- [7] C.A. de Moura. Análise Numérica do Método dos Elementos Finitos. In *Anais do 2^o Curso de Mecânica Teórica e Aplicada*, pages 273–288, LCC/CNPq, Rio de Janeiro, RJ, Jul., 1984.
- [8] P. L. George. *MODULEF: Génération automatique de maillages*. Collection Didactique, INRIA, Rocquencourt, France, 1986.
- [9] J.T. Oden and J.N. Reddy. *An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements*. Wiley Interscience, New York, 1976.
- [10] C. Runge. Über die Darstellung willkürlicher Funktionen und die Interpolation zwischen äquidistanten Ordinaten. *Z. Math. Phys.*, 46:224–243, 1901.
- [11] G. Strang and G.J. Fix. *An Analysis of the Finite Element Method*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1973.
- [12] K. Weierstrass. *Mathematische Werke*. Mayer und Müller, Berlin, 1894.