

UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE
CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica

BRENO CECONELLO

**Estudo de Formulações de Elementos Finitos
H1-Conformes para Problemas de Poisson em
Grafos**

Campinas

2025

Breno Ceconello

Estudo de Formulações de Elementos Finitos H1-Conformes para Problemas de Poisson em Grafos

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Maicon Ribeiro Correa

Coorientadora: Sônia Maria Gomes

Este trabalho corresponde à versão final da Dissertação defendida pelo aluno Breno Ceconello e orientada pelo Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa.

Campinas

2025

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

C325e Ceconello, Breno, 1998-
Estudo de formulações de elementos finitos H1-conformes para problemas de Poisson em grafos / Breno Ceconello. – Campinas, SP : [s.n.], 2025.

Orientador: Maicon Ribeiro Correa.
Coorientador: Sônia Maria Gomes.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Método dos elementos finitos. 2. Análise numérica. 3. Problema de Poisson. 4. Acoplamento de domínios (Método dos elementos finitos). 5. Teoria dos grafos. I. Correa, Maicon Ribeiro, 1979-. II. Gomes, Sônia Maria, 1952-. III. Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Informações complementares

Título em outro idioma: Study of H1-conforming finite element formulations for Poisson problems on graphs

Palavras-chave em inglês:

Finite element methods

Numerical analysis

Poisson problem

Domain coupling (Finite element methods)

Graph theory

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Maicon Ribeiro Correa [Orientador]

Sandra Mara Cardoso Malta

Thiago de Oliveira Quinelato

Data de defesa: 20-02-2025

Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS)

Não se aplica

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-3476-6800>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/4767424936216230>

**Dissertação de Mestrado defendida em 20 de fevereiro de 2025 e aprovada
pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.**

Prof. Dr. MAICON RIBEIRO CORREA

Profa. Dra. SANDRA MARA CARDOSO MALTA

Prof. Dr. THIAGO DE OLIVEIRA QUINELATO

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Agradecimentos

A realização desta dissertação contou com o apoio e colaboração de diversas pessoas e instituições, às quais expresso minha sincera gratidão.

Primeiramente, agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa, por sua orientação, paciência e valiosas contribuições ao longo deste trabalho.

À minha co-orientadora, Profa. Dra. Sônia Maria Gomes, pela assistência, incentivo e ideias que enriqueceram significativamente esta pesquisa.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Aos meus familiares e amigos, pelo suporte emocional e encorajamento constantes durante toda a minha jornada acadêmica.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para a concretização deste trabalho, muito obrigado.

Resumo

Este trabalho investiga formulações H^1 -conformes do método de elementos finitos para a solução do problema de Poisson em grafos. A pesquisa abrange tanto aspectos teóricos quanto computacionais, adaptando conceitos de cálculo diferencial em curvas para o contexto de redes e apresentando uma metodologia numérica precisa e robusta para sua aproximação, baseada no Método dos Elementos Finitos. O estudo introduz uma formulação variacional primal para grafos, discute o método de Galerkin aplicado a essa formulação e procede com a construção de espaços de elementos finitos polinomiais por partes para a representação da solução aproximada. Além disso, a abordagem proposta é validada por meio de testes numéricos, analisando a convergência e aplicando o modelo a grafos de diferentes condições de contorno. O estudo também considera o acoplamento entre domínios bidimensionais e grafos, expandindo a aplicabilidade da metodologia desenvolvida.

Palavras-chave: Elementos Finitos; Grafos; Análise Numérica; Problema de Poisson; Acoplamento de Domínios.

Abstract

This work investigates H^1 -conforming formulations of the finite element method for solving the Poisson problem on graphs. The research encompasses both theoretical and computational aspects, adapting concepts of differential calculus on curves to the context of networks and presenting a precise and robust numerical methodology for their approximation, based on the Finite Element Method. The study introduces a primal variational formulation for graphs, discusses the Galerkin method applied to that formulation, and proceeds with the construction of piecewise polynomial finite element spaces for representing the approximate solution. Additionally, the proposed approach is validated through numerical tests, analyzing convergence and applying the model to graphs of different boundary conditions. The study also considers the coupling between two-dimensional domains and graphs, expanding the applicability of the developed methodology.

Keywords: Finite Elements; Graphs; Numerical Analysis; Poisson Problem; Domain Coupling.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Exemplos de funções de forma e os pontos associados aos graus de liberdade para $k = 1$, $k = 2$ e $k = 3$	22
Figura 2 – Exemplos de um domínio Ω dividido em uma malha triangular (à esquerda) e quadrilateral (à direita), ambos com $\max_{K \in \mathcal{T}_h} \text{diam}(K) = h$	23
Figura 3 – Graus de liberdade do tipo Lagrangiano para espaços polinomiais $\hat{P}_k = \mathbb{P}_k$	23
Figura 4 – Funções de forma locais em $P_1(K)$ sobre elementos triangulares (lado direito) e seu acoplamento em $\mathcal{U}_{h,1,\Delta}$	24
Figura 5 – Graus de liberdade do tipo Lagrangiano para espaços polinomiais $\hat{P}_k = \mathbb{Q}_{k,k}$	24
Figura 6 – Histórico de convergência da solução de elementos finitos do problema modelo (1.23) em malhas quadrilaterais e triangulares uniformes, para diferentes valores de h , com erros medidos nas normas de $L^2(\Omega)$ e de $H^1(\Omega)$	27
Figura 7 – Ilustração do mapeamento \mathbb{F}_Λ	29
Figura 8 – Ilustração do campo de vetores unitários axiais externos nos pontos \mathbf{a} e \mathbf{b} , assim como sua relação com o vetor tangente unitário $\frac{1}{g_\Lambda} \mathbf{J}_{\mathbb{F}_\Lambda}$ nesses pontos.	31
Figura 9 – Exemplo de uma realização geométrica de um grafo: $\mathcal{G} = (\mathcal{E}, \mathcal{V})$, com 8 vértices e 7 arestas.	34
Figura 10 – Exemplos de uma função $\phi \in H^1(\mathcal{G})$ (à esquerda) e $\ \boldsymbol{\theta}\ $, com $\boldsymbol{\theta} \in H(\text{div}; \mathcal{G})$ (à direita).	39
Figura 11 – Ilustração de funções de base em $\mathcal{B}_{h,1,\mathcal{G}}$ em um grafo \mathcal{G} em forma de “Y”, com uma subdivisão das arestas e condição de contorno nula em \mathcal{V}	46
Figura 12 – Representação da função $\phi(\mathbf{x})$ no domínio definido.	48
Figura 13 – Teste 1: Erros das soluções aproximadas de elementos finitos em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, medidos nas normas de $L^2(\mathcal{E})$ e de $H^1(\mathcal{G})$	49
Figura 14 – Teste 1: Soluções exatas e aproximadas em espaços $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$ e respectivas derivadas direcionais, com diferentes valores de subdivisões N por aresta.	50
Figura 15 – Teste 3 e Teste 4: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.	52
Figura 16 – Teste 3: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.	53
Figura 17 – Teste 4: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.	53
Figura 18 – Teste 3 e Teste 4: Soluções numéricas ϕ_h	54
Figura 19 – Teste 3 e Teste 4: Derivadas direcionais $D_{\mathcal{G}}\phi_h$ das soluções aproximadas.	55
Figura 20 – Teste 3 e Teste 4: Fluxos numéricos σ_h das soluções aproximadas.	56

Figura 21 – Teste 5 e Teste 6: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.	57
Figura 22 – Teste 5: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.	58
Figura 23 – Teste 6: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.	58
Figura 24 – Teste 5 e Teste 6: Soluções numéricas ϕ_h	59
Figura 25 – Teste 5 e Teste 6: Derivadas direcionais $D_{\mathcal{G}}\phi_h$	60
Figura 26 – Teste 5 e Teste 6: Fluxos numéricos σ_h	61
Figura 27 – Teste 7 e Teste 8: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.	62
Figura 28 – Teste 7: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.	63
Figura 29 – Teste 8: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.	63
Figura 30 – Teste 7 e Teste 8: Soluções aproximadas ϕ_h	64
Figura 31 – Teste 7 e Teste 8: Derivadas direcionais $D_{\mathcal{G}}\phi_h$ das soluções numéricas.	65
Figura 32 – Teste 7 e Teste 8: Fluxos numéricos σ_h das soluções numéricas.	66
Figura 33 – Acoplamento de um domínio Ω e um grafo \mathcal{G} (em laranja).	68
Figura 34 – Representação do acoplamento de K_{Λ} com K_{Ω} , com numeração dos graus de liberdade do domínio.	70
Figura 35 – Teste 9: Ilustração do domínio Ω discretizado, assim como o grafo \mathcal{G} (em laranja).	71
Figura 36 – Teste 9: Representação da solução aproximada (ϕ_h, p_h) do problema de Poisson acoplado, restrita ao domínio $(0, 1) \times (0, 1)$	72
Figura 37 – Teste 9: Fluxo $-\kappa\nabla p_h$ no domínio bidimensional.	72
Figura 38 – Teste 10: Domínio Ω discretizado, assim como o grafo \mathcal{G} (em laranja).	74
Figura 39 – Teste 10: Solução aproximada (ϕ_h, p_h) do problema de Poisson acoplado.	74
Figura 40 – Teste 10: Fluxo aproximado $-\kappa\nabla p_h$ no domínio bidimensional Ω	75
Figura 41 – Teste 10: Fluxo aproximado σ_h (em azul) observado sobre o grafo \mathcal{G}	75
Figura 42 – Teste 11: Acoplamento duplo do domínio Ω com o grafo \mathcal{G}_1 (em laranja) e o grafo \mathcal{G}_2 (em azul).	76
Figura 43 – Teste 11: Solução aproximada $(\phi_{h1}, \phi_{h2}, p_h)$ sob dois pontos de vista diferentes.	78
Figura 44 – Teste 11: Fluxo $-\kappa\nabla p_h$ no domínio bidimensional Ω	79
Figura 45 – Teste 11: Valor do fluxo aproximado σ_h observado sobre o grafo \mathcal{G}_1	79

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Teste 1: histórico de convergência da solução aproximada em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, em que N é o número de elementos por aresta do grafo.	49
Tabela 2	–	Teste 2: histórico de convergência da solução aproximada ϕ_h em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, em que N é o número de elementos por aresta do grafo.	51
Tabela 3	–	Teste 7 e Teste 8: Fluxos numéricos σ_{h7} e σ_{h8} , em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G} , bem como o fluxo de saída total σ_{out} em cada teste.	67
Tabela 4	–	Teste 10: Fluxo aproximado σ_h em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G} , bem como o fluxo de saída total σ_{out} nos vértices acoplados.	76
Tabela 5	–	Teste 11: Fluxo numérico σ_h em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G}_1 , bem como o fluxo de saída total σ_{out} nos vértices acoplados.	80

Sumário

Introdução	12
1 Fundamentos Matemáticos	15
1.1 Alguns Espaços de Hilbert	15
1.2 Problema de Poisson e sua Formulação Variacional Primal	17
1.3 Método de Galerkin	19
1.4 Método dos Elementos Finitos	20
2 Cálculo em Curvas Planas	28
2.1 Espaços de Hilbert em Curvas Planas	29
2.2 Curvas Afins	32
3 Cálculo em Grafos	34
3.1 Funções e Alguns Operadores Diferenciais em Grafos	35
3.2 Espaços Funcionais em Grafos	36
4 Problema de Poisson em Grafos	41
4.1 Formulação Primal de Poisson em Grafos	41
4.2 O Método de Galerkin para o Problema PV_G	43
5 Elementos Finitos em Grafos	45
5.1 Elementos Finitos	45
5.2 Detalhes da Implementação	47
5.3 Testes Numéricos de Convergência	47
5.3.1 Teste 1: Condição de Dirichlet Homogênea	48
5.3.2 Teste 2: Condições de Contorno Mistas	51
5.4 Experimentos Gerais em Grafos	51
5.4.1 Teste 3 e Teste 4: Condição de Dirichlet e Permeabilidade Heterogêneas	51
5.4.2 Teste 5 e Teste 6: Condições Mistas e Permeabilidades Heterogêneas	57
5.4.3 Teste 7 e Teste 8: Experimentos em um Grafo mais Complexo	62
6 Acoplamento Grafo-Domínio Bidimensional	68
6.1 Estratégia para o Acoplamento	69
6.2 Teste 9: Acoplamento em um Ponto	71
6.3 Teste 10: Acoplamento em Vários Pontos	73
6.4 Teste 11: Acoplamento Duplo	76
7 Conclusões	81
REFERÊNCIAS	83

Introdução

A modelagem matemática de problemas em domínios de grafos é uma ferramenta poderosa para a compreensão e simulação de sistemas complexos em diversas áreas da ciência e da engenharia. Grafos são estruturas compostas por vértices conectados por arestas [12] e oferecem uma representação simplificada e eficiente de redes, permitindo a análise de fenômenos que envolvem interconexões e fluxos. Entre as aplicações mais notáveis estão a simulação de órgãos humanos, como o sistema circulatório ou nervoso [19, 20, 7, 9]; e a análise de escoamento em fraturas geológicas [27], onde o grafo pode modelar fissuras em rochas porosas. Esses problemas frequentemente envolvem a solução de equações diferenciais parciais (EDPs) em domínios que podem ser representados por grafos, o que exige a adaptação de métodos numéricos tradicionais para essas estruturas.

Neste trabalho, focamos no desenvolvimento de um modelo para resolver a equação de Poisson em grafos. Esta é uma EDP fundamental que surge em diversos contextos físicos, como modelagem de fluxos de fluidos em meios porosos [29] (lei de Darcy), transferência de calor [2] (equação do calor) e potencial elétrico [30] (derivado das equações de Maxwell). Em geral, a equação de Poisson em grafos aparece naturalmente em problemas onde o domínio de interesse pode ser representado por uma rede de conexões unidimensionais, como no caso de escoamento em tubulações, redes de transporte, ou mesmo sistemas biológicos. A solução dessa equação em grafos requer a adaptação de métodos numéricos para domínios unidimensionais, mas com a complexidade adicional imposta pela estrutura de rede.

Para a resolução numérica do modelo matemático, utilizamos o Método dos Elementos Finitos [3]. Dentre as diferentes formulações existentes, tais como as formulações mistas [24] e híbridas [25], decidimos empregar uma formulação primal [3], que transporta o simples arcabouço de problemas variacionais em espaços de Sobolev H^1 para o contexto dos grafos. A formulação primal é especialmente apropriada para problemas que requerem a continuidade da solução, tal como ocorre em escoamentos em redes ou na distribuição de potencial em sistemas elétricos. Para adaptar a teoria tradicional de elementos finitos para a aplicação em grafos, é necessário expandir conceitos de geometria diferencial, como a definição de gradientes e divergentes em curvas e grafos. Em particular, a ideia de derivada direcional ao longo de uma aresta de um grafo é crucial para a formulação do problema variacional. Além disso, a técnica de integração por partes em grafos, que é uma extensão da fórmula clássica utilizada em domínios contínuos, desempenha um papel essencial na derivação da formulação fraca da equação de Poisson. Esta dissertação discute e apresenta em detalhe esses conceitos com o propósito de fornecer uma fundamentação teórica robusta para a aplicação do método de elementos finitos em grafos. Salientamos que o emprego do

método de elementos finitos em grafos possui literatura recente e é um tópico de interesse crescente em áreas da computação científica [14].

O texto está organizado em ordem crescente de complexidade, começando com os fundamentos matemáticos necessários para a compreensão do problema em situações tradicionais, passando pela adaptação desses conceitos para curvas e, posteriormente, grafos, e culminando na aplicação do método para resolver a equação de Poisson em grafos. A seguir, apresentamos um resumo dos capítulos que compõem este estudo.

No Capítulo 1, revisamos os conceitos tradicionais de espaços de Hilbert, formulações variacionais e método de Galerkin. Discutimos, também, o método de elementos finitos, com ênfase em sua aplicação para problemas unidimensionais e bidimensionais. Esse capítulo serve como base teórica para os desenvolvimentos posteriores, introduzindo as ferramentas matemáticas necessárias para a formulação e análise do problema de Poisson em grafos. Para esse capítulo, utilizamos principalmente as referências [4, 8].

Em seguida, no Capítulo 2, adaptamos os conceitos de cálculo diferencial para curvas planas a partir dos trabalhos [6, 26], definindo operadores como gradiente e divergente em variedades unidimensionais, visando estendê-los posteriormente para domínios interconectados (grafos). Discutimos também a parametrização de curvas e a definição de espaços funcionais apropriados, como $H^1(\Lambda)$ e $H(\text{div}, \Lambda)$, que serão utilizados posteriormente.

No Capítulo 3, estendemos os conceitos do Capítulo 2 para grafos, definindo medidas, espaços funcionais apropriados e operadores diferenciais em domínios ramificados. Apresentamos também a fórmula de integração por partes em grafos, que é fundamental para a formulação variacional do problema de Poisson. Os conceitos aqui estudados são extraídos e adaptados de [6, 26, 12, 15].

No capítulo seguinte, utilizamos os conceitos introduzidos no Capítulo 3, e tomamos inspiração na estrutura definida a modelos híbridos delineada em [15] para obter a formulação variacional primal do problema de Poisson em grafos e discutimos a aplicação do método de Galerkin para sua discretização. Também demonstramos a existência e unicidade da solução usando o teorema de Lax-Milgram e discutimos as condições de contorno de Dirichlet e Neumann no contexto de grafos. Esse capítulo estabelece as bases teóricas para a implementação numérica do método de elementos finitos.

No Capítulo 5 detalhamos a implementação do método de elementos finitos para grafos, adaptando o trabalho realizado em [15], incluindo a construção de espaços de aproximação e a montagem do sistema linear associado. Apresentamos também testes numéricos que demonstram a eficácia do método, com ênfase na taxa de convergência e na precisão das soluções obtidas. Discutimos ainda a aplicação do método para diferentes configurações de grafos e condições de contorno, de modo a verificar alguns conceitos

físicos como conservação de massa e queda de potencial. Para esses testes, foi realizada uma implementação computacional utilizando a linguagem de programação Python [23]. Nos programas, foram utilizadas as bibliotecas Numpy [17], para a criação e manipulação de arrays, assim como a solução de sistemas lineares para estas estruturas; Scipy [28], para o propósito de integração numérica e Matplotlib [18] para as várias representações gráficas que disponibilizamos no texto.

Por fim, no Capítulo 6, temos a culminação de todo o trabalho realizado até então, onde combinamos os conceitos estabelecidos nos Capítulos 2 a 5 com a estrutura exposta no Capítulo 1, para criar um problema simplificado de acoplamento entre um grafo e um domínio bidimensional. Essa configuração é particularmente relevante para aplicações como a modelagem de escoamento sanguíneo em órgãos, em que o grafo representa os dutos arteriais e o domínio bidimensional representa o meio poroso dos órgãos no qual o sangue escoar. Essa abordagem permite a simulação de problemas mais complexos, onde a interação entre diferentes escalas espaciais é crítica. A mesma metodologia computacional presente no Capítulo 5 foi empregada para os testes nesse capítulo. Aproveitamos para destacar que o problema de acoplamento de domínios unidimensionais com domínios de dimensão maior foi abordado de maneira mais exaustiva, inclusive com métodos de remoção de singularidades, nas referências [16, 13, 19, 9].

Ao longo deste trabalho, procuramos detalhar a construção de um método numérico eficiente para resolver a equação de Poisson em grafos, estabelecendo uma base teórica sólida que permita a extensão desses conceitos para outras aplicações. Acreditamos que a abordagem aqui apresentada pode ser útil em diversos contextos, desde a modelagem de redes biológicas até a simulação de escoamentos em meios porosos. A escolha da formulação primal, aliada à adaptação de conceitos de geometria diferencial, proporciona uma ferramenta versátil e robusta para a análise de problemas complexos em grafos. Esperamos que este trabalho contribua para o avanço da pesquisa nessa área, abrindo caminho para novas aplicações e desenvolvimentos teóricos.

1 Fundamentos Matemáticos

Este capítulo contém um sumário da teoria clássica de problemas de Poisson em domínios $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, com dimensão $d = 1$ ou 2 , passando pela sua formulação variacional primal e resultados de existência e unicidade. Em seguida, os mesmos resultados são estendidos para suas versões discretizadas de Galerkin usando o método de elementos finitos, incluindo estimativas de erro e resultados numéricos de verificação das taxas de convergência. Indicamos os livros [4, 10] como principais referências para este estudo.

1.1 Alguns Espaços de Hilbert

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ um domínio limitado com fronteira Lipschitz $\partial\Omega$ e normal exterior unitária \mathbf{n} . Inicialmente, consideramos o espaço de Lebesgue

$$L^2(\Omega) = \{q : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : \int_{\Omega} q^2 \, d\Omega < \infty\}. \quad (1.1)$$

Esse é um espaço de Hilbert, com o produto interno

$$(p, q)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} pq \, d\Omega \quad \forall p, q \in L^2(\Omega)$$

e norma

$$\|p\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |p|^2 \, d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall p, q \in L^2(\Omega).$$

Portanto, verifica-se a desigualdade de Cauchy-Schwarz:

$$(p, q)_{L^2(\Omega)} \leq \|p\|_{L^2(\Omega)} \|q\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall p, q \in L^2(\Omega).$$

O espaço

$$H^1(\Omega) = \{q \in L^2(\Omega) : \nabla q \in [L^2(\Omega)]^d\}$$

tem um papel destacado no estudo deste capítulo. É um espaço de Hilbert com produto interno

$$(p, q)_{H^1(\Omega)} = (p, q)_{L^2(\Omega)} + \left(\frac{dp}{dx}, \frac{dq}{dx} \right)_{L^2(\Omega)} \quad \forall p, q \in H^1(\Omega)$$

para o caso $d = 1$ e

$$(p, q)_{H^1(\Omega)} = (p, q)_{L^2(\Omega)} + \left(\frac{\partial p}{\partial x_1}, \frac{\partial q}{\partial x_1} \right)_{L^2(\Omega)} + \left(\frac{\partial p}{\partial x_2}, \frac{\partial q}{\partial x_2} \right)_{L^2(\Omega)} \quad \forall p, q \in H^1(\Omega)$$

para o caso $d = 2$. Esse espaço também possui norma associada

$$\|p\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{\|p\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{dp}{dx} \right\|_{L^2(\Omega)}^2} \quad \forall p \in H^1(\Omega)$$

no caso unidimensional e

$$\|p\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{\|p\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2} \quad \forall p \in H^1(\Omega)$$

no caso bidimensional, onde

$$\|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2} = \sqrt{\left\| \frac{\partial p}{\partial x_1} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial p}{\partial x_2} \right\|_{L^2(\Omega)}^2} \quad \forall p \in H^1(\Omega).$$

Um fato conhecido sobre funções $p \in H^1(\Omega)$ (ver, por exemplo, [4]) assegura a existência de um operador de traço $\gamma_0 p = p|_{\partial\Omega}$, cuja imagem define um espaço normado denotado por $H^{1/2}(\partial\Omega) \subset L^2(\partial\Omega)$, de tal forma que

$$\|\gamma_0(p)\|_{L^2(\partial\Omega)} \lesssim \|p\|_{H^1(\Omega)} \quad (1.2)$$

em que o símbolo \lesssim indica que a desigualdade é satisfeita a menos de uma multiplicação por uma constante. O espaço dual de $H^{1/2}(\partial\Omega)$ é denotado por $H^{-1/2}(\partial\Omega)$.

Outra propriedade de importância é a conhecida *Desigualdade de Poincaré*. Suponha que $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ tem medida não nula e seja $H_{0,D}^1(\Omega) = \{p \in H^1(\Omega); \gamma_0(p)|_{\Gamma_D} = 0\}$. Então existe uma constante C_P , que depende apenas de Ω , tal que (ver [10], Lema 2.3):

$$C_P \|p\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2, \quad \forall p \in H_{0,D}^1(\Omega). \quad (1.3)$$

No caso de domínios convexos e $\Gamma_D = \partial\Omega$, resulta que $C_P = \pi\delta_\Omega^{-1}$, δ_Ω sendo o diâmetro de Ω [22]. No entanto, determinar C_P em domínios de geometria genérica não é uma tarefa fácil. Em certas circunstâncias, podem-se obter estimativas para C_P numericamente, utilizando a relação dessa constante com o menor autovalor do Laplaciano em Ω , como proposto em [21].

Nas aplicações do presente estudo, também é útil ter em mente o espaço vetorial de Hilbert

$$H(\operatorname{div}; \Omega) = \{\mathbf{u} \in [L^2(\Omega)]^2 : \operatorname{div} \mathbf{u} \in L^2(\Omega)\},$$

com produto interno

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{H(\operatorname{div}; \Omega)} = (\mathbf{u}, \mathbf{v})_{[L^2(\Omega)]^2} + (\operatorname{div} \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{v})_{L^2(\Omega)} \quad \forall u, v \in H(\operatorname{div}; \Omega)$$

e norma

$$\|\mathbf{u}\|_{H(\operatorname{div}; \Omega)} = \sqrt{\|\mathbf{u}\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2}. \quad \forall u \in H(\operatorname{div}; \Omega)$$

Para funções vetoriais $\mathbf{u} \in H(\operatorname{div}; \Omega)$ é possível definir o traço normal $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega}$, o qual resulta ser uma função escalar pertencente a $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Sendo assim, para funções $q \in H^1(\Omega)$ e $\mathbf{u} \in H(\operatorname{div}; \Omega)$, faz sentido considerar a integral $\int_{\partial\Omega} q \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}|_{\partial\Omega} ds$ como o produto de dualidade entre o traço de q e o traço normal de \mathbf{u} sobre $\partial\Omega$.

Recordemos agora a regra usual de integração por partes válida para funções de várias variáveis, extraída do Lema 2.1.1 de [4].

Integração por partes: dadas funções $q \in H^1(\Omega)$ e $\mathbf{u} \in H(\text{div}; \Omega)$, verifica-se que

$$\int_{\Omega} (\text{div } \mathbf{u}) q \, d\Omega = \int_{\partial\Omega} q \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, ds - \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla q \, d\Omega. \quad (1.4)$$

1.2 Problema de Poisson e sua Formulação Variacional Primal

Seguindo a metodologia delineada em [3], sejam $f \in L^2(\Omega)$ um termo de fonte, $\kappa(\mathbf{x})$ uma função escalar limitada e estritamente positiva, com

$$0 < \kappa_{\text{inf}} \leq \kappa(\mathbf{x}) \leq \kappa_{\text{sup}} < \infty$$

e assumamos uma dada partição da fronteira $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, em que $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$. Por simplicidade, assume-se que Γ_D tem medida não nula, onde se impõe condição de Dirichlet homogênea. Sobre Γ_N considera-se uma condição de contorno de Neumann definida por uma dada função $\theta_N : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R}$.

Sendo assim, consideramos o seguinte problema:

Problema P *Encontrar uma função $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que*

$$-\text{div}(\kappa \nabla p) = f, \quad \text{em } \Omega, \quad (1.5a)$$

$$p = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_D, \quad (1.5b)$$

$$\kappa \nabla p \cdot \mathbf{n} = \theta_N, \quad \text{sobre } \Gamma_N. \quad (1.5c)$$

Para descrever a formulação variacional primal deste problema de Poisson, tomamos $H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)$ como o espaço de funções em que a solução será procurada. Devido às propriedades do operador de traço, este é um subespaço fechado de $H^1(\Omega)$, logo, é de Hilbert. Agora, multiplicando a equação (1.5a) dos dois lados por uma função teste $q \in H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)$ e integrando em Ω , obtém-se

$$-\int_{\Omega} \text{div}(\kappa \nabla p) q \, d\Omega = \int_{\Omega} f q \, d\Omega. \quad (1.6)$$

Supondo que $\kappa \nabla p \in H(\text{div}; \Omega)$ e aplicando a fórmula (1.4), obtemos

$$-\int_{\Omega} \text{div}(\kappa \nabla p) q \, d\Omega = -\int_{\partial\Omega} q \kappa \nabla p \cdot \mathbf{n} \, ds + \int_{\Omega} \kappa \nabla p \cdot \nabla q \, d\Omega.$$

Como $q \in H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)$ e $\kappa \nabla p \cdot \mathbf{n} = \theta_N$ em Γ_N , o termo $\int_{\partial\Omega} q \kappa \nabla p \cdot \mathbf{n} \, ds$ simplifica-se a $\int_{\Gamma_N} \theta_N q \, ds$. Logo a equação (1.6) reduz-se a

$$\int_{\Omega} \kappa \nabla p \cdot \nabla q \, d\Omega = \int_{\Omega} f q \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \theta_N q \, ds.$$

Desta forma, definindo

$$\mathcal{U} = H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega), \quad (1.7)$$

$$a(p, q) = \int_{\Omega} \kappa \nabla p \cdot \nabla q \, d\Omega, \text{ e} \quad (1.8)$$

$$L(q) = \int_{\Omega} f q \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \theta_N q \, ds, \quad (1.9)$$

obtemos a formulação variacional primal associada ao Problema P:

Problema PV *Encontrar $p \in \mathcal{U}$ tal que*

$$a(p, q) = L(q), \quad \forall q \in \mathcal{U}. \quad (1.10)$$

Nota-se que a condição de Dirichlet é imposta essencialmente no espaço \mathcal{U} , enquanto a condição de Neumann é resolvida naturalmente no processo de chegar à forma variacional, sendo assim chamada de condição de contorno natural [3].

A demonstração de que o Problema PV é bem posto é uma consequência do teorema de Lax-Milgram (ver [10], Teorema 2.1).

Teorema 1.1 (Lax-Milgram). *Sejam \mathcal{U} um espaço de Hilbert e $a : \mathcal{U} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ uma forma bilinear verificando as seguintes propriedades:*

a) *Continuidade: existe constante $0 < M < \infty$ tal que*

$$|a(p, q)| \leq M \|p\|_{\mathcal{U}} \|q\|_{\mathcal{U}}, \quad \forall p, q \in \mathcal{U}.$$

b) *Coercividade: existe constante $\alpha > 0$ tal que*

$$a(p, p) \geq \alpha \|p\|_{\mathcal{U}}^2, \quad \forall p \in \mathcal{U}.$$

Se $L : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma forma linear contínua, então o problema variacional

$$a(p, q) = L(q), \quad \forall q \in \mathcal{U}$$

possui uma única solução, que depende continuamente dos dados (estabilidade). Ou seja, $\|p\|_{\mathcal{U}} \leq \frac{1}{\alpha} \|L\|_{\mathcal{U}'}$, em que α é a constante da coercividade.

Para aplicar o teorema de Lax-Milgram ao Problema PV, temos que verificar as suas hipóteses.

a) *Continuidade de $a(\cdot, \cdot)$ e $L(\cdot)$.* Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos que

$$\begin{aligned} a(p, q) &= \int_{\Omega} \kappa \nabla p \cdot \nabla q \, d\Omega \\ &\leq \kappa_{\text{sup}} \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2} \|\nabla q\|_{[L^2(\Omega)]^2} \\ &\leq \kappa_{\text{sup}} \|p\|_{H^1(\Omega)} \|q\|_{H^1(\Omega)} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
L(q) &= \int_{\Omega} f q \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \theta_N q \, ds \\
&\leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \|q\|_{L^2(\Omega)} + \|\theta_N\|_{L^2(\Gamma_N)} \|\gamma_0 q\|_{L^2(\Gamma_N)} \\
&\leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \|q\|_{H^1(\Omega)} + C \|\theta_N\|_{L^2(\Gamma_N)} \|q\|_{H^1(\Omega)} \\
&\leq (\|f\|_{L^2(\Omega)} + C \|\theta_N\|_{L^2(\Gamma_N)}) \|q\|_{H^1(\Omega)}
\end{aligned}$$

onde, na terceira linha, foi usado o teorema do traço indicado na Equação (1.2), com C sendo a constante da desigualdade referida.

b) *Coercividade de $a(\cdot, \cdot)$ em \mathcal{U} .* Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz e a desigualdade de Poincaré (1.3), obtemos

$$\begin{aligned}
a(p, p) &= \int_{\Omega} \kappa \nabla p \cdot \nabla p \, d\Omega \\
&\geq \kappa_{\inf} \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2 \\
&= \frac{\kappa_{\inf}}{2} \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2 + \frac{\kappa_{\inf}}{2} \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2 \\
&\geq \frac{\kappa_{\inf} C_P}{2} \|p\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\kappa_{\inf}}{2} \|\nabla p\|_{[L^2(\Omega)]^2}^2 \\
&\geq \frac{\kappa_{\inf}}{2} \min\{1, C_P\} \|p\|_{H^1(\Omega)}^2.
\end{aligned}$$

Tendo os resultados de a) e b), a existência, unicidade e estabilidade da solução p do Problema PV ficam demonstradas como uma aplicação do Teorema de Lax-Milgram.

1.3 Método de Galerkin

Esta seção dedica-se à discretização do Problema PV usando o método de Galerkin, que consiste em obter um subespaço $\tilde{\mathcal{U}} \subset \mathcal{U}$ de dimensão finita e resolver o problema variacional restrito a tal subespaço. Seguimos o delineamento contido em [3].

Problema PVG *Encontrar $\tilde{p} \in \tilde{\mathcal{U}}$ tal que*

$$a(\tilde{p}, q) = L(q) \quad \forall q \in \tilde{\mathcal{U}}. \quad (1.11)$$

A existência e unicidade de solução para o Problema PVG é imediata, uma vez que a coercividade e continuidade da forma $a(\cdot, \cdot)$, assim como a continuidade da forma $L(\cdot)$ são herdadas do espaço \mathcal{U} .

Se p e \tilde{p} são as únicas soluções dos Problemas PV e PVG, respectivamente, então vale a ortogonalidade de Galerkin

$$a(p - \tilde{p}, q) = 0, \quad \forall q \in \tilde{\mathcal{U}}. \quad (1.12)$$

Ou seja, \tilde{p} é a projeção ortogonal de p sobre $\tilde{\mathcal{U}}$ com relação ao produto interno induzido sobre \mathcal{U} pela forma bilinear limitada e coerciva $a(\cdot, \cdot)$. É importante notar que essa forma bilinear também define uma norma em \mathcal{U} , dada por

$$\|p\|_a = \sqrt{a(p, p)}. \quad (1.13)$$

De fato, devido à condição de Dirichlet sobre Γ_D , a única função para a qual $\|p\|_a = 0$ é $p = 0$. Essa norma é usualmente denominada *norma da energia*. A partir dos resultados acima estabelecidos, vale o seguinte Lema ([10] - Lema 2.2.2):

Lema de Céa - *Se p e \tilde{p} satisfazem a ortogonalidade de Galerkin, então*

$$\|p - \tilde{p}\|_a = \inf_{q \in \tilde{\mathcal{U}}} \|p - q\|_a.$$

Consequentemente,

$$\|p - \tilde{p}\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{q \in \tilde{\mathcal{U}}} \|p - q\|_{H^1(\Omega)}, \quad (1.14)$$

em que M e α são as constantes de continuidade e coercividade de $a(\cdot, \cdot)$, respectivamente.

Sendo assim, a convergência do método de Galerkin depende do potencial de aproximação do espaço $\tilde{\mathcal{U}}$ escolhido e da regularidade de p .

1.4 Método dos Elementos Finitos

O método dos elementos finitos consiste em uma escolha estratégica de subespaços $\tilde{\mathcal{U}} \subset \mathcal{U}$ para o Problema PVG. Seja $\mathcal{T} = \{K\}$ uma partição de Ω por elementos K , de forma que $\bar{\Omega} = \cup \bar{K}$. Os subespaços de elementos finitos $\tilde{\mathcal{U}} := \mathcal{U}_{h,k}$ são indexados pelo parâmetro de malha $h = \max_{K \in \mathcal{T}} \text{diam}(K)$ e pelo grau k dos polinômios usados em sua construção. Precisamente,

$$\mathcal{U}_{h,k} = \{q \in \mathcal{U} : q|_K \in P_k(K)\}, \quad (1.15)$$

em que $P_k(K)$ são espaços de funções locais com dimensão finita a serem definidos posteriormente. Observa-se que, para $\mathcal{U}_{h,k}$ ser de fato um subespaço H^1 -conforme de \mathcal{U} , devemos ter $P_k(K) \subset H^1(K)$ e o acoplamento desses subespaços locais deve ser contínuo na interface entre os elementos K . Além disso, a condição de contorno de Dirichlet deve ser imposta fortemente no sentido do traço: $\gamma_0(q)|_{\Gamma_D} = 0$, $\forall q \in \mathcal{U}_{h,k}$.

Para construir uma família de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k}$, pela definição de Ciarlet [8], são necessárias as seguintes etapas:

1. A geometria do elemento: para cada $K \in \mathcal{T}$, escolhemos um elemento de referência \hat{K} e um mapeamento invertível $F_K : \hat{K} \rightarrow K$ de tal forma que $K = F_K(\hat{K})$.

2. Espaço polinomial \hat{P}_k de dimensão \hat{N}_k : O índice k está associado ao grau dos polinômios em \hat{P}_k .
3. Graus de liberdade: são formas lineares $\{\hat{\lambda}_i\}_{1 \leq i \leq \hat{N}_k}$ linearmente independentes. Um elemento finito é do tipo Lagrangiano se seus graus de liberdade forem valores pontuais. Ou seja, dados pontos $\{\hat{a}_i\}_{1 \leq i \leq \hat{N}_k}$ em \hat{K} , definem-se

$$\hat{\lambda}_i(\hat{q}) = \hat{q}(\hat{a}_i).$$

4. Base $\hat{\mathcal{B}}_k = \{\hat{\varphi}_i, 1 \leq i \leq \hat{N}_k\}$ para \hat{P}_k : podem ser definidas pelos graus de liberdade $\hat{\lambda}_i$ de tal forma que $\hat{\lambda}_i(\hat{\varphi}_j) = \delta_{i,j}$. As funções $\hat{\varphi}_i$ são conhecidas como funções de forma.
5. Espaços de aproximação locais $P_k(K)$: formados pelas funções $q = \hat{q} \circ F_K^{-1}$, para cada $\hat{q} \in \hat{P}_k$.
6. Bases locais $\mathcal{B}_k(K) = \{\varphi_i(K), 1 \leq i \leq \hat{N}_k\}$ para $P_k(K)$: definindo $\varphi_i(K) = \hat{\varphi}_i \circ F_K^{-1}$, $\hat{\varphi}_i \in \hat{\mathcal{B}}_k$.
7. Base global $\mathcal{B}_{h,k} = \{\Phi_j, 1 \leq j \leq N_{h,k}\}$ para $\mathcal{U}_{h,k}$: obtida pela montagem H^1 -conforme das bases locais $\varphi_i(K)$ e pela imposição da condição homogênea de Dirichlet.

Tendo em mãos o espaço de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k}$ e sua base \mathcal{B}_k , podemos estabelecer um algoritmo de resolução do Problema PVG associado. Para isso, expandimos a solução aproximada em termos da base $\mathcal{B}_{h,k}$:

$$\tilde{p} := p_h = \sum_{j=1}^{N_{h,k}} c_j \Phi_j \in \mathcal{U}_{h,k}, \quad (1.16)$$

e inserimos funções teste $q = \Phi_i \in \mathcal{B}_{h,k}$ para obter as equações:

$$a \left(\sum_{j=0}^{N_{h,k}} c_j \Phi_j, \Phi_i \right) = L(\Phi_i).$$

Esse sistema linear é representado na forma matricial por

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{L}, \quad (1.17)$$

com matriz $\mathbf{A} = [A_{i,j}]$ e vetor $\mathbf{L} = [L_i]$, em que $A_{i,j} = a(\Phi_j, \Phi_i)$ e $L_i = L(\Phi_i)$. A solução desse sistema linear nos proporciona os coeficientes $\mathbf{c} = (c_j)$ que determinam a solução aproximada pela sua expansão dada em (1.16).

Caso Unidimensional

Para simplificar a explicação e para uso nos próximos capítulos, seja um domínio $\Omega = (0, L) \subset \mathbb{R}$, com $\partial\Omega = \{0\} \cup \{L\}$. Em Ω , determinamos uma partição uniforme $\mathcal{T} = \{K_e\}$ em que $K_e = (x_{e-1}, x_e)$ ($e \in \{1, 2, \dots, M\}$), com $h_{K_e} = h = L/M$, sendo $x_0 = 0$ e $x_M = L$.

Seguindo a metodologia descrita acima, definimos o elemento de referência $\hat{K} = (0, 1)$, os mapeamentos $F_{K_e} : \hat{K} \rightarrow K_e$, para cada $K_e \in \mathcal{T}$, e consideramos $\hat{P}_k = \mathbb{P}_k$ dado pelos polinômios de grau $\leq k$, cuja dimensão é $\hat{N}_k = k + 1$.

Em termos práticos, podemos usar os graus de liberdade Lagrangianos $\lambda_i(\hat{q}) = q(\xi_i)$, em que $\xi_1 = 0 < \xi_2 < \dots < \xi_{k+1} = 1$ é um conjunto de pontos escolhidos em \hat{K} . Uma ilustração das funções de forma associadas a esses graus de liberdade em \hat{K} encontra-se na Figura 1 para diferentes famílias de polinômios \mathbb{P}_k .

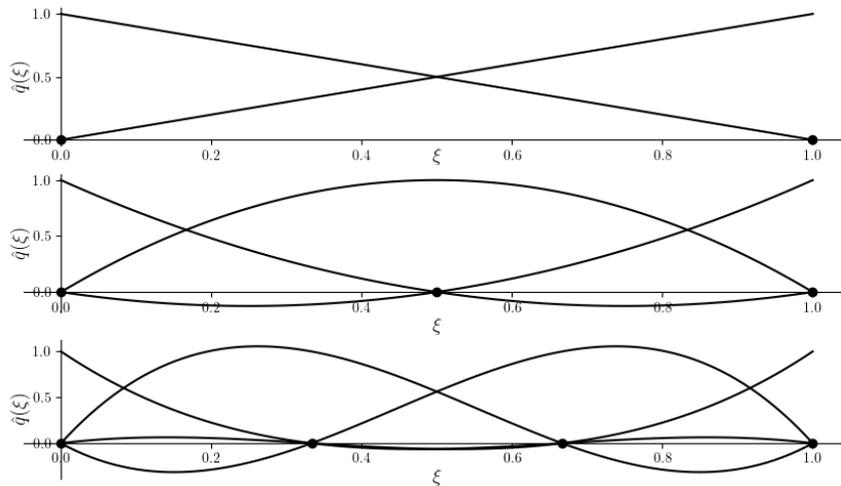


Figura 1 – Exemplos de funções de forma e os pontos associados aos graus de liberdade para $k = 1$, $k = 2$ e $k = 3$.

Mais adiante, no Capítulo 2 utilizaremos espaços de elementos finitos como em (1.15), definidos sobre domínios unidimensionais $\Omega = \check{\Lambda}$ e resultantes dos procedimentos detalhados nos passos de 5 a 7. Tais espaços serão denotados por $\mathcal{U}_{h,k,\check{\Lambda}}$.

Caso Bidimensional

No caso bidimensional, um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ pode ser particionado em elementos com diferentes geometrias. A seguir, descrevemos os elementos Lagrangianos mais comuns e a construção dos espaços de elementos finitos associados, seguindo a mesma estrutura da seção anterior.

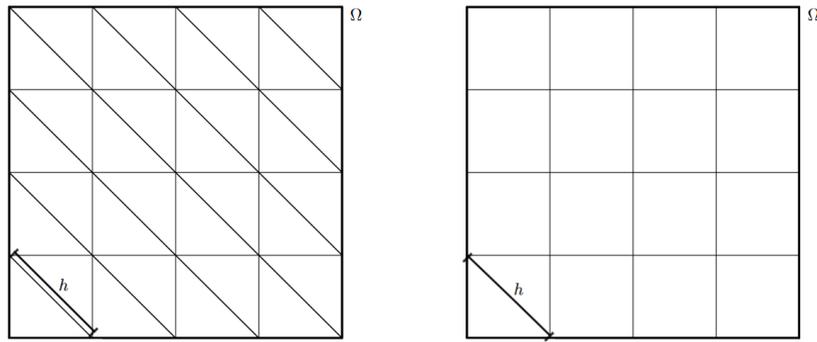


Figura 2 – Exemplos de um domínio Ω dividido em uma malha triangular (à esquerda) e quadrilateral (à direita), ambos com $\max_{K \in \mathcal{T}_h} \text{diam}(K) = h$.

Elementos Triangulares

Seja \mathcal{T} uma partição triangular do domínio Ω . Um exemplo dessa partição está na Figura 2, à esquerda. Para essa partição, definimos um elemento triangular de referência \hat{K} , com vértices $(0, 0)$, $(1, 0)$ e $(0, 1)$, e a família de mapeamentos invertíveis $F_K : \hat{K} \rightarrow K$. Definimos, também, o espaço de polinômios de grau total $\leq k$ em \hat{K} , com dimensão $\frac{(k+1)(k+2)}{2}$:

$$\hat{P}_k := \mathbb{P}_k = \left\{ \hat{q}(\xi, \eta) = \sum_{i+j \leq k} \alpha_{ij} \xi^i \eta^j : (\xi, \eta) \in \hat{K} \right\}.$$

Os graus de liberdade Lagrangianos em \mathbb{P}_k são definidos como os valores nodais em pontos apropriadamente escolhidos em \hat{K} . No caso $k = 1$, esses pontos são os vértices do triângulo. Para $k > 1$, além dos vértices, é costumeiro escolher pontos com igual espaçamento nas arestas e pontos baricêntricos no interior, como ilustrado na Figura 3

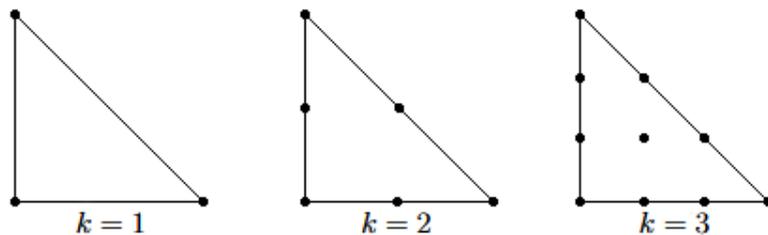


Figura 3 – Graus de liberdade do tipo Lagrangiano para espaços polinomiais $\hat{P}_k = \mathbb{P}_k$.

Nos exemplos numéricos mostrados mais adiante para malhas triangulares, os espaços de elementos finitos resultantes são denotados por $\mathcal{U}_{h,k,\Delta}$.

Um exemplo ilustrativo de funções de forma locais em $P_1(K)$ nos elementos de uma malha triangular e seu acoplamento contínuo para formar uma base global do tipo “chapéu” encontra-se na Figura 4.



Figura 4 – Funções de forma locais em $P_1(K)$ sobre elementos triangulares (lado direito) e seu acoplamento em $\mathcal{U}_{h,1,\Delta}$.

Elementos Quadrilaterais

O procedimento para elementos quadrilaterais é similar. Primeiro, definimos a partição \mathcal{T} do domínio em elementos quadrilaterais, como exemplificado na Figura 2, à direita. Depois, definimos um elemento de referência \hat{K} , que é o quadrado unitário $(0, 1) \times (0, 1)$, e a família de mapeamentos $F_K : \hat{K} \rightarrow K$. Estabelecemos agora o espaço de polinômios de grau $\leq k$ em cada variável em \hat{K} :

$$\hat{P}_k := \mathbb{Q}_{k,k} = \left\{ \hat{q}(\xi, \eta) = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^k \alpha_{ij} \xi^i \eta^j \right\},$$

com dimensão $\hat{N}_k = (k+1)^2$. Em geral, os graus de liberdade Lagrangianos são escolhidos em grades de pontos uniformemente espaçados, conforme ilustrado na Figura 5. Nos exemplos

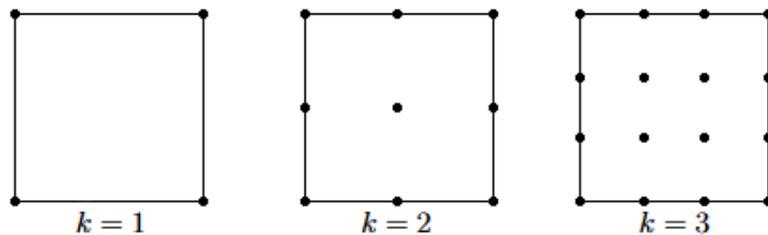


Figura 5 – Graus de liberdade do tipo Lagrangiano para espaços polinomiais $\hat{P}_k = \mathbb{Q}_{k,k}$.

numéricos mostrados mais adiante, os espaços de elementos finitos para quadriláteros são denotados por $\mathcal{U}_{h,k,\square}$.

Estimativas de erro

Seja p_h a solução aproximada dada pelo Problema PVG associado a um espaço de elementos finitos $\tilde{\mathcal{U}} = \mathcal{U}_{h,k}$. De acordo com o Lema de Céa, temos:

$$\|p - p_h\|_a = \inf_{q \in \mathcal{U}_{h,k}} \|p - q\|_a. \quad (1.18)$$

Usualmente, para avaliar a estimativa ótima em (1.18), utiliza-se um operador interpolante para obter uma cota superior dada em termos do erro nesta interpolação, o qual depende

da geometria da malha e da regularidade de p . Em primeiro lugar, suponhamos que a solução exata é suficientemente suave, $p \in H^{k+1}(\Omega)$, em que

$$H^{k+1}(\Omega) = \{q \in L^2(\Omega) : D^\gamma p \in L^2(\Omega), 0 < |\gamma| \leq k + 1\}.$$

Nesta definição, $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)$ é um multi-índice com componentes inteiras $\gamma_i \geq 0$ e

$$D^\gamma p = \frac{\partial^{|\gamma|} p}{\partial x_1^{\gamma_1} \partial x_2^{\gamma_2}},$$

em que $|\gamma| = \gamma_1 + \gamma_2$. Quanto à regularidade da malha, a hipótese é que os elementos tenham o fator h_K/ρ_K uniformemente limitado, em que ρ_K é o diâmetro máximo das bolas inscritas em K .

Sendo assim, é possível obter uma função interpolante $p_I \in \mathcal{U}_h$ da solução exata, tal que:

$$\|p - p_I\|_{H^1(\Omega)} \lesssim h^k \|p\|_{H^{k+1}(\Omega)}, \quad (1.19)$$

Essa estimativa decorre de resultados clássicos de interpolação em elementos finitos [5, 10]. Portanto, dadas as condições de regularidade mencionadas acima e substituindo a desigualdade (1.19) na equação (1.18), obtém-se a estimativa de erro

$$\|p - p_h\|_a \lesssim h^k \|p\|_{H^{k+1}(\Omega)}. \quad (1.20)$$

Usando a coercividade da forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$, concluímos que

$$\|p - p_h\|_{H^1(\Omega)} \lesssim h^k \|p\|_{H^{k+1}(\Omega)}. \quad (1.21)$$

Para obter a estimativa do erro na norma $L^2(\Omega)$, emprega-se o argumento de Aubin-Nitsche, válido em regiões Ω suaves ou convexas. O primeiro ingrediente é um problema dual auxiliar, em que $r \in \mathcal{U}$ é tal que

$$a(r, q) = (p - p_h, q)_{L^2(\Omega)}, \quad \forall q \in \mathcal{U}.$$

Desta forma, a solução $r \in H^2(\Omega)$ e vale a propriedade de estabilidade $\|r\|_{H^2(\Omega)} \lesssim \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$. Denotando por $r_{I,1}$ o interpolante de r para $k = 1$, temos ainda o resultado $\|r - r_{I,1}\|_{H^1(\Omega)} \lesssim h \|r\|_{H^2(\Omega)}$, obtido diretamente da aplicação de (1.19) ao problema auxiliar. Sendo assim,

$$\begin{aligned} \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}^2 &= (p - p_h, p - p_h)_{L^2(\Omega)} \\ &= a(r, p - p_h) && \text{(Definição do problema dual)} \\ &= a(r - r_{I,1}, p - p_h) && \text{(Ortogonalidade de Galerkin)} \\ &\lesssim \|r - r_{I,1}\|_{H^1(\Omega)} \|p - p_h\|_{H^1(\Omega)} && \text{(Continuidade de } a(\cdot, \cdot)\text{)} \\ &\lesssim h \|r\|_{H^2(\Omega)} \|p - p_h\|_{H^1(\Omega)} && \text{(Erro de interpolação de } r_{I,1}\text{)} \\ &\lesssim h \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \|p - p_h\|_{H^1(\Omega)}. && \text{(Estabilidade do problema dual)} \end{aligned}$$

Dividindo ambos os lados desta desigualdade por $\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)}$, obtemos a estimativa do erro na norma L^2 , cuja ordem é uma unidade acima do erro medido na norma H^1 :

$$\|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \lesssim h \|p - p_h\|_{H^1(\Omega)}. \quad (1.22)$$

Verificação Numérica de Convergência

De modo a verificar a ordem de convergência estimada anteriormente, tomemos um exemplo simples, com solução analítica conhecida, do problema de Poisson. Seja $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, $\partial\Omega$ sua fronteira, $\kappa(\mathbf{x}) = 1$ e $f(\mathbf{x}) = 2\pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$. O problema modelo consiste em encontrar $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

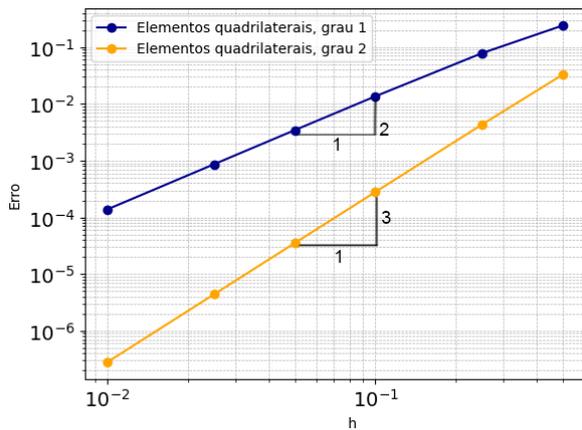
$$-\Delta p(\mathbf{x}) = 2\pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2), \quad \text{em } \Omega, \quad (1.23a)$$

$$p(\mathbf{x}) = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega. \quad (1.23b)$$

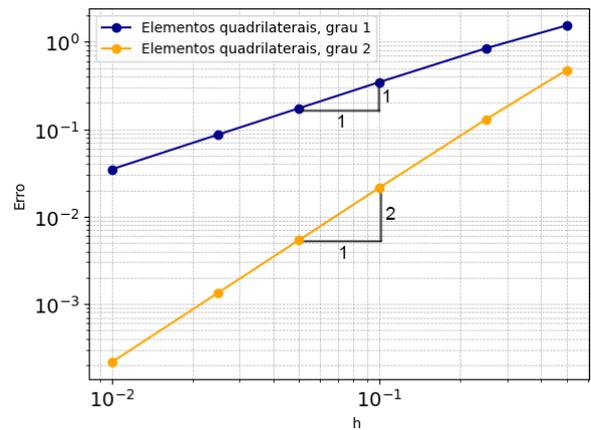
Esse problema tem solução exata $p(\mathbf{x}) = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$, e podemos compará-la na norma $L^2(\Omega)$ e na norma $H^1(\Omega)$ com a solução aproximada do Problema PVG associado usando os subespaços de elementos finitos descritos nesta seção.

Para tal, foi feito um código em Python que implementa aproximações para diversos tamanhos de malha h , e graus polinomiais $k = 1$ e $k = 2$, tanto para elementos triangulares quanto para elementos quadrilaterais. O erro foi calculado para cada tamanho de malha tanto na norma $L^2(\Omega)$ quanto na norma $H^1(\Omega)$.

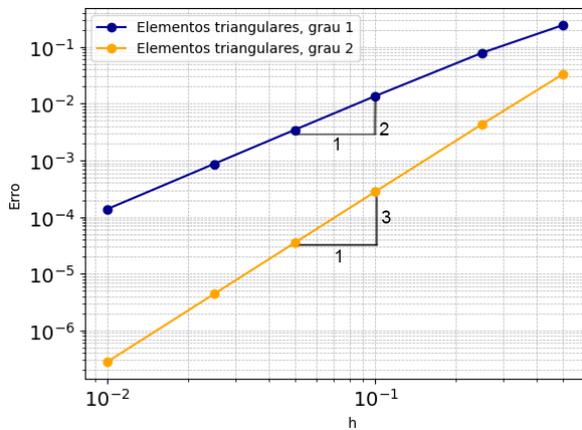
Os resultados de erros versus h estão representados graficamente na Figura 6. Verificamos taxas consistentes com as estimativas esperadas, em ambas as famílias de elementos utilizadas. Ou seja, medindo o erro na norma $H^1(\Omega)$, obtém-se aproximação de primeira ordem para polinômios de grau $k = 1$ e quadrática para polinômios de grau $k = 2$. Já o erro medido na norma $L^2(\Omega)$ mostra ordem de aproximação quadrática para polinômios de grau $k = 1$ e cúbica para polinômios de grau $k = 2$, uma unidade acima dos erros na norma H^1 , como previsto na teoria.



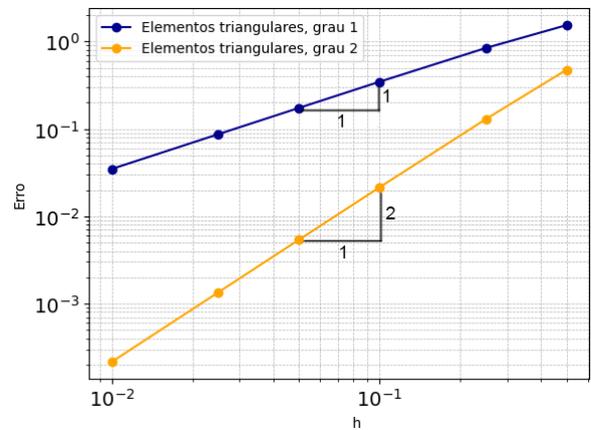
(a) Quadriláteros, $k = 1$ e 2 , norma $L^2(\Omega)$.



(b) Quadriláteros, $k = 1$ e 2 , norma $H^1(\Omega)$.



(c) Triângulos, $k = 1$ e 2 , norma $L^2(\Omega)$.



(d) Triângulos, $k = 1$ e 2 , norma $H^1(\Omega)$.

Figura 6 – Histórico de convergência da solução de elementos finitos do problema modelo (1.23) em malhas quadrilaterais e triangulares uniformes, para diferentes valores de h , com erros medidos nas normas de $L^2(\Omega)$ e de $H^1(\Omega)$.

2 Cálculo em Curvas Planas

Este capítulo trata de conceitos básicos sobre operadores diferenciais e espaços funcionais definidos em curvas imersas em \mathbb{R}^2 , adaptados de [26, 6]. Estes conceitos são a base para a construção dos mesmos tipos de espaços em domínios de grafos, tema do Capítulo 3.

Seja Λ uma curva simples (sem laços), unindo seus pontos de fronteira $\mathcal{V} = \{\mathbf{a}, \mathbf{b}\}$, de forma que seja possível definir um difeomorfismo $\mathbf{F}_\Lambda : \check{\Lambda} \rightarrow \Lambda$, em que $\check{\Lambda}$ é o intervalo de parametrização. Optamos, de modo a simplificar os cálculos, por uma parametrização por comprimento de arco tal como feito em [11], introduzindo o parâmetro $\xi \in \check{\Lambda} = (0, L)$, em que L é o comprimento da curva. Desta forma, um ponto $\mathbf{x} \in \Lambda$ e seu respectivo parâmetro $\xi \in \check{\Lambda}$ estão relacionados por:

$$\mathbf{x} = \mathbf{F}_\Lambda(\xi) \quad \text{e} \quad \xi = \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}).$$

A matriz Jacobiana desta transformação é dada por $\mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi) = \nabla_\xi \mathbf{F}_\Lambda(\xi)$. Ou seja, se $\mathbf{F}_\Lambda = [F_1(\xi), F_2(\xi)]$, então

$$\mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \xi} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \xi} \end{bmatrix}(\xi).$$

O espaço tangente $T_{\mathbf{x}}(\Lambda)$ da curva Λ é definido em cada ponto $\mathbf{x} = \mathbf{F}_\Lambda(\xi) \in \Lambda$ pelo espaço gerado pelo vetor Jacobiano. Ou seja,

$$T_{\mathbf{x}}(\Lambda) = \{\lambda \mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi(\mathbf{x})), \lambda \in \mathbb{R}\}.$$

A função escalar

$$G_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi) = \mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda}^T(\xi) \mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi)$$

é denominada primeira forma fundamental da curva (métrica), que, neste caso unidimensional, resulta ser uma função escalar positiva. Finalmente, temos a função

$$g_{\mathbf{F}_\Lambda} = \sqrt{G_{\mathbf{F}_\Lambda}},$$

que define o pseudo-determinante do Jacobiano.

Ao trabalhar com uma parametrização por comprimento de arco, o Jacobiano é um vetor unitário, e a primeira forma fundamental se reduz a $G_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi) = 1, \forall \xi \in \check{\Lambda}$, [11]. Um exemplo demonstrativo desta propriedade será trabalhado em mais detalhes ao fim deste capítulo.

2.1 Espaços de Hilbert em Curvas Planas

Consideramos funções definidas na curva Λ através de mapeamentos definidos sobre funções com domínio no intervalo de parametrização $\check{\Lambda}$ [6]. Supomos que tais funções possuem regularidade suficiente para que as operações aplicadas sobre elas sejam bem definidas, de forma a serem transmitidas para as correspondentes funções mapeadas sobre Λ .

Funções escalares $\phi : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ podem ser definidas a partir de funções $\check{\phi} : \check{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}$ através da transformação

$$\phi = \mathbb{F}_\Lambda \check{\phi} := \check{\phi} \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}, \quad (2.1)$$

conforme a ilustração da Figura 7. De forma similar, definimos o mapeamento $\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda \check{\boldsymbol{\theta}}$ de funções vetoriais $\check{\boldsymbol{\theta}} = \begin{bmatrix} \check{\theta}_1 \\ \check{\theta}_2 \end{bmatrix}$, ou seja,

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda \check{\boldsymbol{\theta}} := \begin{bmatrix} \mathbb{F}_\Lambda \check{\theta}_1 \\ \mathbb{F}_\Lambda \check{\theta}_2 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

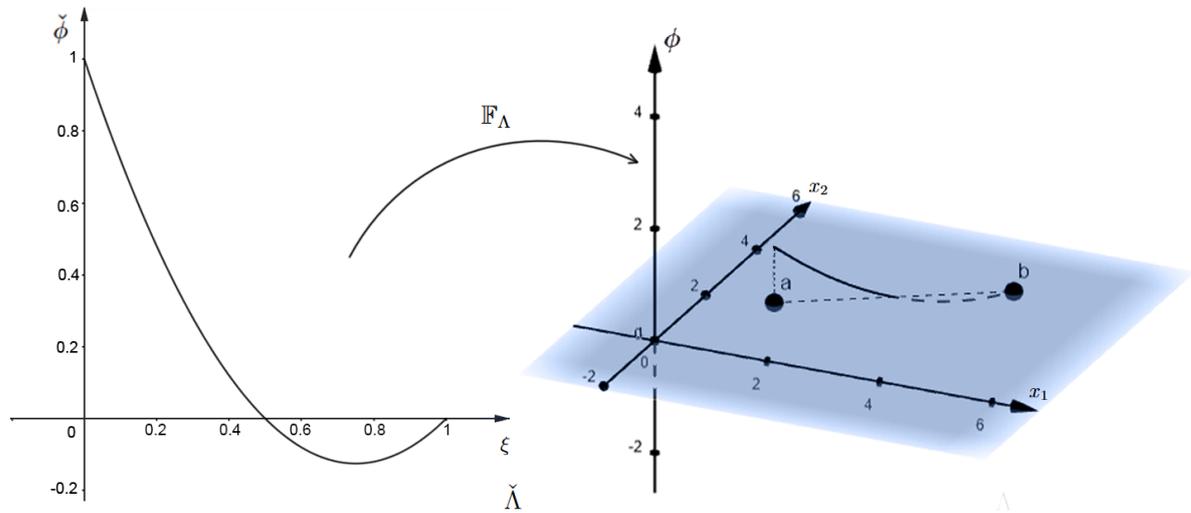


Figura 7 – Ilustração do mapeamento \mathbb{F}_Λ .

Essa mudança de coordenadas nos permite considerar a integral de $\phi = \mathbb{F}_\Lambda \check{\phi}$ sobre Λ da seguinte maneira:

$$\int_\Lambda \phi(\mathbf{x}) d\Lambda = \int_{\check{\Lambda}} \check{\phi}(\xi) g_{\mathbf{F}_\Lambda}(\xi) d\xi. \quad (2.3)$$

Dessa forma, podemos considerar o produto interno

$$(\phi, \psi)_\Lambda = \int_\Lambda \phi \psi d\Lambda,$$

gerando a norma

$$\|\phi\|_{L^2(\Lambda)} = \sqrt{(\phi, \phi)_\Lambda},$$

que conduz ao espaço

$$L^2(\Lambda) = \left\{ \phi : \Lambda \rightarrow \mathbb{R} : \|\phi\|_{L^2(\Lambda)} < \infty \right\}. \quad (2.4)$$

Cabe também introduzir o gradiente de funções escalares $\phi = \mathbb{F}_\Lambda \check{\phi}$, nos pontos $\mathbf{x} = \mathbf{F}_\Lambda(\xi) \in \Lambda$, com imagem no espaço tangente $T_x(\Lambda)$, pela seguinte expressão

$$\nabla_\Lambda \phi = \mathbb{F}_\Lambda \left[\frac{1}{G_{\mathbf{F}_\Lambda}} \frac{d\check{\phi}}{d\xi} \mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda} \right]. \quad (2.5)$$

Observando que $[\nabla_\Lambda \phi]^T \nabla_\Lambda \phi = \mathbb{F}_\Lambda \left(\frac{d\check{\phi}}{d\xi} \right)^2$, conclui-se que

$$\nabla_\Lambda \phi \in [L^2(\Lambda)]^2, \text{ desde que } \frac{d\check{\phi}}{d\xi} \in L^2(\check{\Lambda}).$$

Esse fato implica que \mathbb{F}_Λ é um isomorfismo entre $H^1(\check{\Lambda})$ e o espaço

$$H^1(\Lambda) = \{ \phi \in L^2(\Lambda) : \nabla_\Lambda \phi \in [L^2(\Lambda)]^2 \}, \quad (2.6)$$

munido da norma

$$\|\phi\|_{H^1(\Lambda)} = \sqrt{\|\phi\|_{L^2(\Lambda)}^2 + \|\nabla_\Lambda \phi\|_{[L^2(\Lambda)]^2}^2}.$$

Consequentemente, como ocorre no caso de $H^1(\check{\Lambda})$, funções de $H^1(\Lambda)$ são contínuas em Λ .

Sendo assim, está bem definido o traço de funções $\phi \in H^1(\Lambda)$ sobre a fronteira \mathcal{V} , dado pelos valores pontuais $\phi(\mathbf{a})$ e $\phi(\mathbf{b})$. Então, introduzimos a integral

$$\int_{\mathcal{V}} \phi d\mathcal{V} := \phi(\mathbf{a}) + \phi(\mathbf{b}), \quad (2.7)$$

e a norma

$$\|\phi\|_{\ell^2(\mathcal{V})} := \sqrt{\phi(\mathbf{a})^2 + \phi(\mathbf{b})^2}. \quad (2.8)$$

Um outro tipo de mapeamento, usualmente chamado de transformada contravariante de Piola [6], é adequado para definir funções vetoriais sobre curvas. Ou seja, associada a uma função escalar $\check{\theta} : \check{\Lambda} \rightarrow \mathbb{R}$, define-se a função vetorial

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda^{\text{div}} \check{\theta} := \mathbb{F}_\Lambda \left[\frac{\check{\theta}}{g_{\mathbf{F}_\Lambda}} \mathbf{J}_{\mathbf{F}_\Lambda} \right]. \quad (2.9)$$

Observa-se que a imagem de $\boldsymbol{\theta}$ está incluída no espaço tangente $T_x(\Lambda)$, tendo como divergente a função escalar

$$\text{div}_\Lambda \boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda \left[\frac{1}{g_{\mathbf{F}_\Lambda}} \frac{d\check{\theta}}{d\xi} \right]. \quad (2.10)$$

Para esse tipo de campos vetoriais é possível definir o traço $\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}|_{\mathcal{V}}$, em que \mathbf{n} é o campo de vetores unitários axiais externos nos pontos de \mathcal{V} . Ou seja, tem-se $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\Lambda,a}$ e $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\Lambda,b}$. Quanto à natureza do vetor axial \mathbf{n} , no caso de curvas planas, o Jacobiano \mathbf{J}_{F_Λ} é um vetor tangencial, e g_Λ corresponde à sua norma. Assim, a extensão do vetor $\frac{1}{g_\Lambda} \mathbf{J}_{F_\Lambda}$ para os pontos extremos de Λ coincide, a menos de uma possível inversão de sentido, com o vetor \mathbf{n} . Essa relação é ilustrada na Figura 8, onde se observa que, no ponto inicial \mathbf{a} , $\mathbf{n}_{\Lambda,a} = -\frac{1}{g_\Lambda} \mathbf{J}_{F_\Lambda}$, enquanto no ponto final \mathbf{b} , $\mathbf{n}_{\Lambda,b} = \frac{1}{g_\Lambda} \mathbf{J}_{F_\Lambda}$.

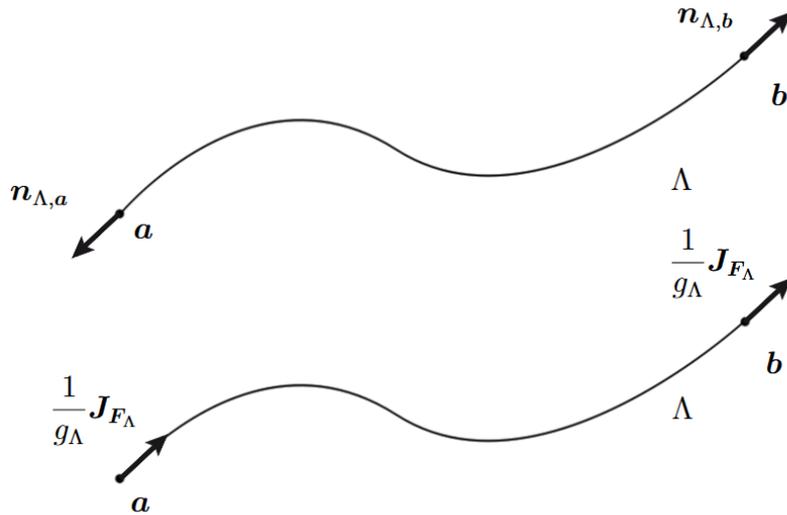


Figura 8 – Ilustração do campo de vetores unitários axiais externos nos pontos \mathbf{a} e \mathbf{b} , assim como sua relação com o vetor tangente unitário $\frac{1}{g_\Lambda} \mathbf{J}_{F_\Lambda}$ nesses pontos.

Com esta estrutura, definindo

$$\int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} \, d\mathcal{V} = \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda,a} + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda,b}, \quad (2.11)$$

verifica-se o Teorema da Divergência em curvas Λ .

Teorema 2.1 (Teorema da Divergência). *Se $\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda^{\text{div}} \check{\boldsymbol{\theta}}$ e \mathbf{n} é campo de vetores unitários axiais externos nos pontos de \mathcal{V} , então*

$$\int_\Lambda \text{div}_\Lambda \boldsymbol{\theta} \, d\Lambda = \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} \, d\mathcal{V}. \quad (2.12)$$

Além disso, se $\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda^{\text{div}} \check{\boldsymbol{\theta}}$ e $\phi = \mathbb{F}_\Lambda \check{\phi}$, as seguintes identidades são obtidas a partir de adaptações de fórmulas equivalentes válidas em espaços Cartesianos ou em variedades de dimensões superiores [4, 6]:

$$\int_\Lambda \boldsymbol{\theta} \cdot \nabla_\Lambda \phi \, d\Lambda = \int_\Lambda \check{\boldsymbol{\theta}} \frac{d\check{\phi}}{d\xi} \, d\check{\Lambda}, \quad (2.13a)$$

$$\int_\Lambda \phi \, \text{div}_\Lambda \boldsymbol{\theta} \, d\Lambda = \int_\Lambda \check{\phi} \frac{d\check{\boldsymbol{\theta}}}{d\xi} \, d\check{\Lambda}, \quad (2.13b)$$

$$\langle \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}, \phi \rangle_{\mathcal{V}} = \langle \check{\boldsymbol{\theta}}, \check{\phi} \rangle_{\check{\mathcal{V}}}. \quad (2.13c)$$

O termo do lado esquerdo da última equação (2.13c) é dado por

$$\langle \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}, \phi \rangle_{\mathcal{V}} := \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} \phi \, d\mathcal{V} = \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda, \mathbf{b}} \phi(\mathbf{b}) + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}_{\Lambda, \mathbf{a}} \phi(\mathbf{a}),$$

representando o produto de dualidade entre os traços $\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}|_{\mathcal{V}}$ de funções

$$\boldsymbol{\theta} \in H(\operatorname{div}; \Lambda) := \mathbb{F}_{\Lambda}^{\operatorname{div}} \left(H(\operatorname{div}; \check{\Lambda}) \right)$$

e os traços $\phi|_{\mathcal{V}}$ de funções $\phi \in H^1(\Lambda)$. De forma análoga, o termo do lado direito de (2.13c),

$$\langle \check{\boldsymbol{\theta}}, \check{\phi} \rangle_{\check{\mathcal{V}}} := \check{\boldsymbol{\theta}}(L) \check{\phi}(L) - \check{\boldsymbol{\theta}}(0) \check{\phi}(0),$$

também pode ser interpretado como um produto de dualidade do mesmo estilo.

As identidades em (2.13) implicam que o mapeamento contravariante de Piola $\mathbb{F}_{\Lambda}^{\operatorname{div}}$ define um isomorfismo entre o espaço $H(\operatorname{div}; \check{\Lambda}) \equiv H^1(\check{\Lambda})$ e o espaço $H(\operatorname{div}; \Lambda) := \mathbb{F}_{\Lambda}^{\operatorname{div}} \left(H(\operatorname{div}; \check{\Lambda}) \right) \equiv \mathbb{F}_{\Lambda}^{\operatorname{div}} \left(H^1(\check{\Lambda}) \right)$. Sendo assim, segue que $H(\operatorname{div}; \Lambda)$ é um espaço de Hilbert, de forma análoga ao que ocorre com seu correspondente $H(\operatorname{div}; \check{\Lambda})$ no intervalo de parametrização. Além disso, a seguinte regra de integração por partes é satisfeita:

Integração por partes - Para $\boldsymbol{\theta} \in H(\operatorname{div}; \Lambda)$ e $\phi \in H^1(\Lambda)$ vale o seguinte resultado

$$\int_{\Lambda} \phi \operatorname{div}_{\Lambda} \boldsymbol{\theta} \, d\Lambda = \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} \phi \, d\mathcal{V} - \int_{\Lambda} \boldsymbol{\theta} \cdot \nabla_{\Lambda} \phi \, d\Lambda. \quad (2.14)$$

2.2 Curvas Afins

Seja $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$ um segmento de reta conectando um ponto $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ até um ponto $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$. Estabelecemos o parâmetro ξ no intervalo $\check{\Lambda} = (0, L)$, com $L = \sqrt{(b_1 - a_1)^2 + (b_2 - a_2)^2} = \|\mathbf{b} - \mathbf{a}\|$. Então

$$\mathbf{F}_{\Lambda}(\xi) = \begin{bmatrix} a_1 + \frac{\xi}{L}(b_1 - a_1) \\ a_2 + \frac{\xi}{L}(b_2 - a_2) \end{bmatrix}$$

é um mapeamento afim cuja inversa é $\mathbf{F}_{\Lambda}^{-1}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{a}\|$. Além disso, sua matriz Jacobiana $\mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda}} = \frac{1}{L} \begin{bmatrix} b_1 - a_1 \\ b_2 - a_2 \end{bmatrix}$ é constante, e pela natureza da parametrização, é unitária, $\|\mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda}}\| = 1$. Logo, também temos que $g_{\Lambda} = 1$.

Sendo assim, para $\phi = \mathbb{F}_{\Lambda} \check{\phi}$ e $\boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_{\Lambda}^{\operatorname{div}} \check{\boldsymbol{\theta}}$, valem as expressões

$$\int_{\Lambda} \phi \, d\Lambda = \int_0^L \check{\phi}(\xi) \, d\xi, \quad (2.15)$$

$$\nabla_{\Lambda} \phi = \mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda}} \mathbb{F}_{\Lambda} \left(\frac{d\check{\phi}}{d\xi} \right), \quad (2.16)$$

$$\operatorname{div}_\Lambda \boldsymbol{\theta} = \mathbb{F}_\Lambda \left(\frac{d\check{\boldsymbol{\theta}}}{d\xi} \right). \quad (2.17)$$

Note também que, para este exemplo de curva afim, $\mathbb{F}_\Lambda^{\operatorname{div}}(\check{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{J}_{\mathbb{F}_\Lambda} \mathbb{F}_\Lambda(\check{\boldsymbol{\theta}})$. Portanto, temos equivalência entre os espaços

$$H(\operatorname{div}; \Lambda) = \mathbb{F}_\Lambda^{\operatorname{div}} \left(H(\operatorname{div}; \check{\Lambda}) \right) \equiv \mathbb{F}_\Lambda^{\operatorname{div}} \left(H^1(\check{\Lambda}) \right) \quad \text{e} \quad H^1(\Lambda) = \mathbb{F}_\Lambda \left(H^1(\check{\Lambda}) \right).$$

Espaços de Elementos Finitos em Λ

Os espaços de elementos finitos para esse tipo de domínio Λ podem ser definidos a partir do que foi realizado na Seção 1.4. De fato, como $\Lambda = \mathbf{F}_\Lambda \check{\Lambda}$, a estrutura unidimensional definida em $\check{\Lambda}$ pode ser mapeada para $\Lambda \subset \mathbb{R}^2$ através da transformação \mathbb{F}_Λ . Especificamente, defina sobre $\check{\Lambda}$ uma partição uniforme $\check{\mathcal{T}} = \{K\}$, cada elemento K com comprimento h . Sejam os espaços de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k,\check{\Lambda}} \subset H^1(\check{\Lambda})$ de funções definidas por partes sobre $\check{\mathcal{T}}$ por polinômios de grau k . A partir desse arcabouço, definimos o espaço de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k,\Lambda}$ em Λ simplesmente pelo mapeamento das funções do domínio original por meio de \mathbb{F}_Λ , ou seja

$$\mathcal{U}_{h,k,\Lambda} = \mathbb{F}_\Lambda \mathcal{U}_{h,k,\check{\Lambda}}. \quad (2.18)$$

Uma base $\mathcal{B}_{h,k,\Lambda} = \{\Psi_j(\Lambda), 1 \leq j \leq N_{h,k,\check{\Lambda}}\}$ para $\mathcal{U}_{h,k,\Lambda}$ pode ser obtida pelo mapeamento $\Psi_j = \mathbb{F}_\Lambda \Psi_j(\check{\Lambda})$ de funções de forma de uma base $\mathcal{B}_{h,k,\check{\Lambda}} = \{\Psi_j(\check{\Lambda}), 1 \leq j \leq N_{h,k,\check{\Lambda}}\}$ para $\mathcal{U}_{h,k,\check{\Lambda}}$, conforme a construção descrita na Seção 1.4 para o domínio unidimensional $\check{\Lambda} = (0, L) \subset \mathbb{R}$.

3 Cálculo em Grafos

Dando continuidade aos estudos do capítulo anterior sobre os conceitos de cálculo em curvas planas, o foco agora é sobre conceitos semelhantes para funções definidas em grafos, provenientes das referências [12, 15].

Denota-se por $G = (V, E)$ um grafo com vértices $V = \{v_1, \dots, v_m\}$ e arestas $E = \{e_1, \dots, e_n\}$. Assumimos que cada aresta e_i está associada a um segmento de reta Λ_i imerso em \mathbb{R}^2 por meio de um mapeamento afim, unindo dois vértices $\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i \in V$ e parametrizada por $\xi \in \check{\Lambda}_i = (0, L_i) \subset \mathbb{R}$, conforme definido na seção anterior. Ou seja, existem correspondentes difeomorfismos $\mathbb{F}_{\Lambda_i} : \check{\Lambda}_i \rightarrow \Lambda_i$ e espaços tangentes $T(\Lambda_i)$. O vértice \mathbf{a}_i é classificado como vértice de entrada, e o vértice \mathbf{b}_i é classificado como o vértice de saída, conduzindo a uma orientação em Λ_i .

Sendo assim, denotamos por \mathcal{G} a realização geométrica do grafo G [12], caracterizada da seguinte forma:

$$\mathcal{G} = \mathcal{E} \cup \mathcal{V} = \left(\bigcup_{i=1}^n \Lambda_i \right) \cup \left(\bigcup_{j=1}^m v_j \right). \quad (3.1)$$

Uma ilustração dessa realização geométrica é mostrada na Figura 9.

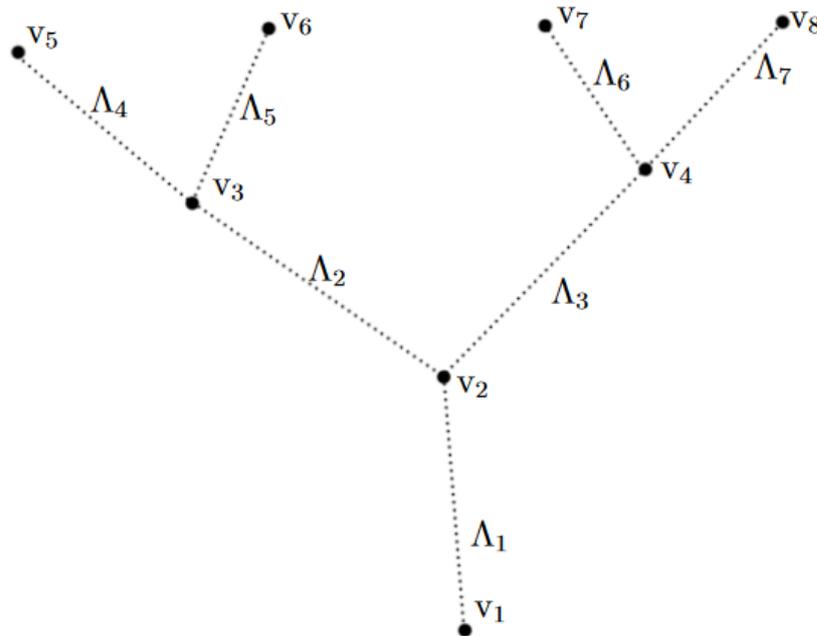


Figura 9 – Exemplo de uma realização geométrica de um grafo: $\mathcal{G} = (\mathcal{E}, \mathcal{V})$, com 8 vértices e 7 arestas.

Para cada vértice v_j , definimos $\mathcal{E}_{in}(v_j)$ como o conjunto das arestas Λ_i que tenham $v_j = \mathbf{b}_i$ como vértice de saída, e $\mathcal{E}_{out}(v_j)$ como o conjunto das arestas Λ_i que

tenham $v_j = \mathbf{a}_i$ como vértice de entrada na orientação adotada. Por fim, denotamos por

$$\partial\mathcal{V} \subset \mathcal{V} \quad (3.2)$$

o conjunto dos vértices que só estão conectados com uma única aresta, ou seja, dos vértices externos da rede. Por outro lado, seja

$$\mathcal{I} = \mathcal{V} \setminus \partial\mathcal{V} \quad (3.3)$$

o conjunto dos vértices internos da rede. Por exemplo, no grafo ilustrado na Figura 9, supondo que as arestas estejam orientadas de baixo para cima, temos: $\mathcal{E}_{in}(v_2) = \{\Lambda_1\}$, $\mathcal{E}_{out}(v_2) = \{\Lambda_2, \Lambda_3\}$, $\mathcal{I} = \{v_2, v_3, v_4\}$ e $\partial\mathcal{V} = \{v_1, v_5, v_6, v_7, v_8\}$.

3.1 Funções e Alguns Operadores Diferenciais em Grafos

Conforme a caracterização geométrica (3.1), uma função $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ possui duas componentes, $\phi_e = \phi|_{\mathcal{E}}$ e $\phi_v = \phi|_{\mathcal{V}}$. As funções $\phi_e : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$ são definidas por partes sobre \mathcal{E} , de tal forma que $\phi_{e,i} = \phi_e|_{\Lambda_i} = \mathbb{F}_{\Lambda_i} \check{\phi}_i$, conforme definido em (2.1). Já as funções $\phi_v : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ são definidas sobre os vértices de \mathcal{V} .

Definimos o espaço de funções contínuas $C^0(\mathcal{G})$ como sendo funções com componentes $\phi_{e,i}$ contínuas em cada aresta Λ_i , e cujos valores em cada um de seus vértices internos coincidem com aqueles obtidos pelas extensões de $\phi_{e,j}$ em todas as arestas Λ_j conectadas a esses vértices. As definições são extraídas de [12, 15].

- Para funções ϕ definidas em \mathcal{G} , com componentes $\phi_{e,i} = \mathbb{F}_{\Lambda_i} \check{\phi}_i$ suficientemente regulares em Λ_i , o gradiente $\nabla_{\mathcal{G}}\phi$ é definido por partes sobre \mathcal{E} ,

$$\nabla_{\mathcal{G}}\phi|_{\Lambda_i} = \nabla_{\Lambda_i}\phi_{e,i} = \mathbf{J}_{\mathbb{F}_{\Lambda_i}} \mathbb{F}_{\Lambda_i} \left[\frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right] \in T(\Lambda_i), \quad (3.4)$$

exatamente como na equação (2.16).

- Sejam funções vetoriais $\boldsymbol{\theta}$ definidas por partes sobre \mathcal{E} pela transformada de Piola em cada aresta. Ou seja, $\boldsymbol{\theta}_i := \boldsymbol{\theta}|_{\Lambda_i} = \mathbb{F}^{\text{div}} \check{\boldsymbol{\theta}}_i$ nas arestas $\Lambda_i \subset \mathcal{E}$. Sendo assim, define-se o operador de divergência $\text{div}_{\mathcal{G}} \boldsymbol{\theta}$, dando origem a funções escalares definidas em todo o domínio geométrico \mathcal{G} . Precisamente, recordando a fórmula (2.17), seja

$$\text{div}_{\mathcal{G}} \boldsymbol{\theta} = \begin{cases} \text{div}_{\Lambda_i} \boldsymbol{\theta}_i = \mathbb{F}_{\Lambda_i} \left[\frac{d\check{\boldsymbol{\theta}}_i}{d\xi} \right], & \text{em } \Lambda_i \subset \mathcal{E} \\ \llbracket \boldsymbol{\theta} \rrbracket_j, & \text{em } v_j \in \mathcal{V} \end{cases}, \quad (3.5)$$

sendo $\llbracket \boldsymbol{\theta} \rrbracket_j$ o salto generalizado de $\boldsymbol{\theta}$ no vértice v_j , definido por:

$$\llbracket \boldsymbol{\theta} \rrbracket_j = \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}_{in}(v_j)} \check{\boldsymbol{\theta}}_i \circ \mathbb{F}_{\Lambda_i}^{-1}(v_j) - \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}_{out}(v_j)} \check{\boldsymbol{\theta}}_i \circ \mathbb{F}_{\Lambda_i}^{-1}(v_j).$$

3.2 Espaços Funcionais em Grafos

Seguimos, nesta Seção, o caminho traçado em [15]. No espaço métrico composto \mathcal{E} existe a medida usual $d\mathcal{E}$, definindo integrais

$$\int_{\mathcal{E}} \phi \, d\mathcal{E} = \sum_{i=1}^n \int_{\Lambda_i} \phi \, d\Lambda_i, \quad (3.6)$$

em que as integrais no somatório são realizadas conforme (2.3). Dessa forma, o produto interno padrão para funções definidas em \mathcal{E} é definido por

$$(\phi, \psi)_{\mathcal{E}} = \sum_{i=1}^n \int_{\Lambda_i} \phi_i \psi_i \, d\Lambda_i,$$

gerando a norma

$$\|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})} = \sqrt{\sum_{i=1}^n \int_{\Lambda_i} \phi_i^2 \, d\Lambda_i},$$

que conduz ao espaço $L^2(\mathcal{E})$ padrão

$$L^2(\mathcal{E}) = \left\{ \phi : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R} : \|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})} < \infty \right\}. \quad (3.7)$$

Sendo assim, $L^2(\mathcal{E}) \sim L^2(\Lambda_1) \times \cdots \times L^2(\Lambda_n)$ é um espaço de Hilbert, por ser representado como um produto cartesiano de espaços de Hilbert.

Em grafos, há outra forma de medida $d\mathcal{G}$, que é possível de se empregar em todo o \mathcal{G} , levando em conta a diferença dimensional entre vértices e arestas. Precisamente, para $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$, com componentes ϕ_e e ϕ_v , define-se

$$\int_{\mathcal{G}} \phi \, d\mathcal{G} := \int_{\mathcal{E}} \phi_e \, d\mathcal{E} + \int_{\mathcal{V}} \phi_v \, d\mathcal{V}, \quad (3.8)$$

em que $\int_{\mathcal{V}} \phi_v \, d\mathcal{V} = \sum_{j=1}^m \phi_v(v_j)$. Essa fórmula dá origem a um novo produto interno

$$(\phi, \psi)_{\mathcal{G}} = \int_{\mathcal{G}} \phi \psi \, d\mathcal{G} = (\phi_e, \psi_e)_{\mathcal{E}} + (\phi_v, \psi_v)_{\mathcal{V}}, \quad (3.9)$$

em que

$$(\phi_v, \psi_v)_{\mathcal{V}} := \int_{\mathcal{V}} \phi_v \psi_v \, d\mathcal{V},$$

e a uma nova norma

$$\|\phi\|_{L^2(\mathcal{G})} = \sqrt{(\phi, \phi)_{\mathcal{G}}}, \quad (3.10)$$

conduzindo a um novo espaço

$$L^2(\mathcal{G}) = \left\{ \phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R} : \|\phi\|_{L^2(\mathcal{G})} < \infty \right\}. \quad (3.11)$$

Da representação $L^2(\mathcal{G}) \sim L^2(\mathcal{E}) \times \ell^2(\mathcal{V})$, concluímos que $L^2(\mathcal{G})$ é um espaço de Hilbert, da mesma forma que suas componentes o são. Note que $C^0(\mathcal{G}) \subset L^2(\mathcal{G})$.

Com base nesses conceitos, definem-se a seguir os espaços $H^1(\mathcal{E})$, $H^1(\mathcal{G})$ e $H(\text{div}; \mathcal{G})$.

- Como em [1], introduzimos o espaço

$$H^1(\mathcal{E}) = \left\{ \phi \in L^2(\mathcal{E}) : \nabla_{\mathcal{G}}\phi \in L^2(\mathcal{E}) \right\} \quad (3.12)$$

munido da norma

$$\|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})} = \sqrt{\|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})}^2 + \|\nabla_{\mathcal{G}}\phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2},$$

em que o gradiente está definido em (3.4). Este é também um espaço de Hilbert, podendo ser representado como um produto cartesiano de espaços de Hilbert $H^1(\mathcal{E}) \sim H^1(\Lambda_1) \times \cdots \times H^1(\Lambda_n)$. Ademais, a desigualdade do traço em (1.2), válida para espaços $H^1(\Omega)$ em domínios cartesianos, pode ser estendida para o contexto de grafos, como no seguinte teorema.

Teorema 3.1 (Teorema do Traço em Grafos). *Se $\phi \in H^1(\mathcal{E})$ e $\phi_i = \phi|_{\Lambda_i}$, então*

$$\sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \left[\phi_i(\mathbf{a}_i)^2 + \phi_i(\mathbf{b}_i)^2 \right] \lesssim \|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})}^2. \quad (3.13)$$

Demonstração. Sendo $\phi_i = \check{\phi}_i \circ \mathbf{F}_{\Lambda_i}^{-1}$, em que $\check{\phi}_i \in H^1([0, L_i])$, pelo teorema do traço em $H^1([0, L_i])$ temos que

$$\phi_i(\mathbf{a}_i)^2 + \phi_i(\mathbf{b}_i)^2 = \check{\phi}_i(0)^2 + \check{\phi}_i(L_i)^2 \leq C_i \|\check{\phi}_i\|_{H^1([0, L_i])}^2.$$

Ao tomar $C = \max C_i$, concluímos que

$$\begin{aligned} \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \left[\phi_i(\mathbf{a}_i)^2 + \phi_i(\mathbf{b}_i)^2 \right] &\leq C \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \|\check{\phi}_i\|_{H^1([0, L_i])}^2 \\ &= C \left[\sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \|\check{\phi}_i\|_{L^2([0, L_i])}^2 + \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \left\| \frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right\|_{L^2([0, L_i])}^2 \right] \\ &= C \left[\sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \|\phi_i\|_{L^2(\Lambda_i)}^2 + \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \|\nabla_{\Lambda_i}\phi_i\|_{[L^2(\Lambda_i)]^2}^2 \right] \\ &= C \left[\|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})}^2 + \|\nabla_{\mathcal{G}}\phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2 \right] \\ &= C \|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})}^2. \end{aligned}$$

A passagem da segunda para a terceira linha é justificada pelas equações (2.15) e (2.16).

De fato, em primeiro lugar temos

$$\|\phi_i\|_{L^2(\Lambda_i)}^2 = \int_{\Lambda_i} \phi_i^2 d\Lambda_i = \int_0^{L_i} \check{\phi}_i^2 d\xi = \|\check{\phi}_i\|_{L^2(\check{\Lambda}_i)}^2.$$

Para o termo do gradiente, vale $\nabla_{\Lambda_i}\phi_i = \mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda_i}} \frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \circ \mathbf{F}_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x})$. Portanto

$$[\nabla_{\Lambda_i}\phi_i]^T \nabla_{\Lambda_i}\phi_i = \mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda_i}}^T \mathbf{J}_{\mathbf{F}_{\Lambda_i}} \left(\frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right)^2 \circ \mathbf{F}_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x}).$$

Mas como $\mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}}$ é um vetor constante unitário, concluímos que

$$\|\nabla_{\Lambda_i}\phi_i\|_{[L^2(\Lambda_i)]^2}^2 = \mathbb{F}_{\Lambda_i} \left(\frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right)^2.$$

Logo, usando novamente a equação (2.15), concluímos o resultado desejado

$$\|\nabla_{\Lambda_i}\phi_i\|_{[L^2(\Lambda_i)]^2}^2 = \int_{\Lambda_i} \|\nabla_{\Lambda_i}\phi_i\|^2 d\Lambda_i = \int_0^{L_i} \left| \frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right|^2 d\xi = \left\| \frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right\|_{L^2(\check{\Lambda}_i)}^2.$$

□

- Em nossos estudos também utilizamos o espaço

$$H^1(\mathcal{G}) = H^1(\mathcal{E}) \cap C^0(\mathcal{G}) \quad (3.14)$$

com a norma $\|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})}$ herdada de $H^1(\mathcal{E})$.

Proposição 3.2. *O espaço $H^1(\mathcal{G})$ é um subespaço completo, portanto, de Hilbert.*

Demonstração. Consideramos uma sequência $\{\phi_k\}$ de Cauchy em $H^1(\mathcal{G}) \subset H^1(\mathcal{E})$. Como $H^1(\mathcal{E})$ é completo, existe subsequência $\{\phi_{k_m}\}$ convergente (na norma de $H^1(\mathcal{E})$) para uma função $\phi \in H^1(\mathcal{E})$. Ou seja, sendo $\psi_{k_m} = \phi - \phi_{k_m}$, então $\|\psi_{k_m}\|_{H^1(\mathcal{E})}^2 \rightarrow 0$. Precisamos mostrar que $\phi \in C^0(\mathcal{G})$. Pelo Teorema 3.1 aplicado a ψ_{k_m} , segue que

$$\sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} [\psi_{k_m,i}(\mathbf{a}_i)^2 + \psi_{k_m,i}(\mathbf{b}_i)^2] \lesssim \|\psi_{k_m}\|_{H^1(\mathcal{E})}^2 \rightarrow 0.$$

Sendo assim, temos que $\psi_{k_m,i}(\mathbf{a}_i) \rightarrow 0$ e $\psi_{k_m,i}(\mathbf{b}_i) \rightarrow 0$. Sem perda de generalidade, suponhamos que v é um vértice interno, sendo de saída de uma aresta Λ_i e de entrada de outra aresta Λ_j . Ou seja, $v = \mathbf{F}_{\Lambda_i}(L_i) = \mathbf{b}_i$ e $v = \mathbf{F}_{\Lambda_j}(0) = \mathbf{a}_j$. Por continuidade de ϕ_{k_m} , temos $\psi_{k_m,i}(v) = \phi_{k_m,i}(\mathbf{b}_i) - \phi_i(\mathbf{b}_i)$. Analogamente, $\psi_{k_m,j}(v) = \phi_{k_m,j}(\mathbf{a}_j) - \phi_j(\mathbf{a}_j)$. Consequentemente,

$$\phi_j(\mathbf{a}_j) - \phi_i(\mathbf{b}_i) = \psi_{k_m,j}(v) - \psi_{k_m,i}(v) \rightarrow 0,$$

implicando que ϕ é contínua nos vértices internos $v = \mathbf{b}_i = \mathbf{a}_j$. Como ϕ_i é contínua em todas as arestas Λ_i e em todos os vértices internos de \mathcal{G} , concluímos que $\phi \in H^1(\mathcal{G}) = H^1(\mathcal{E}) \cap C^0(\mathcal{G})$, o que significa que $H^1(\mathcal{G})$ é completo. □

Convém considerar para as funções $\phi \in H^1(\mathcal{G})$ o conceito de derivada direcional $D_{\Lambda}\phi$, conforme a seguinte definição:

$$D_{\Lambda}\phi|_{\Lambda_i} := \nabla_{\Lambda_i}\phi_{e,i} \cdot \mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}} = \mathbb{F}_{\Lambda_i} \left(\frac{d\check{\phi}_i}{d\xi} \right). \quad (3.15)$$

Ressaltamos que a derivada direcional é, em módulo, equivalente à forma $\nabla_{\mathcal{G}}\phi \cdot \mathbf{n}$ usada anteriormente - o vetor \mathbf{n} é exatamente $\mathbf{J}_{F_{\Lambda}}$ neste caso, a menos de uma possível inversão de sentido.

- Usando o operador de divergente definido em (3.5), introduzimos o espaço

$$H(\operatorname{div}; \mathcal{G}) = \{\boldsymbol{\theta} \in [L^2(\mathcal{E})]^2 : \operatorname{div}_{\mathcal{G}} \boldsymbol{\theta} \in L^2(\mathcal{G})\}. \quad (3.16)$$

Notamos que as funções em $H(\operatorname{div}; \mathcal{G})$ podem ser descontínuas nos vértices do grafo, diferentemente das funções em $H^1(\mathcal{E})$, que são contínuas, por definição. Na Figura 10 ilustramos exemplos de uma função $\phi \in H^1(\mathcal{G})$ e o módulo de uma função $\boldsymbol{\theta} \in H(\operatorname{div}; \mathcal{G})$.



Figura 10 – Exemplos de uma função $\phi \in H^1(\mathcal{G})$ (à esquerda) e $\|\boldsymbol{\theta}\|$, com $\boldsymbol{\theta} \in H(\operatorname{div}; \mathcal{G})$ (à direita).

Finalizamos este capítulo enunciando dois resultados fundamentais para o estudo à continuação de problemas de Poisson em grafos.

- *Integração por partes em grafos* [12, Proposição 2.20]:

Proposição 3.3 (Integração por Partes). *Para $\phi \in H^1(\mathcal{G})$ e $\boldsymbol{\theta} \in H(\operatorname{div}; \mathcal{G})$, vale a fórmula:*

$$\int_{\mathcal{G} \setminus \partial \mathcal{V}} (\operatorname{div}_{\mathcal{G}} \boldsymbol{\theta}) \phi \, d\mathcal{G} = \int_{\partial \mathcal{V}} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n} \phi \, d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{E}} \boldsymbol{\theta} \cdot (\nabla_{\mathcal{G}} \phi) \, d\mathcal{E}. \quad (3.17)$$

em que $\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{v}) = \boldsymbol{\theta}_i \cdot \mathbf{n}_{\Lambda_i, \mathbf{v}}$.

- *Desigualdade de Poincaré em grafos*: seja $\Pi_D \subset \partial \mathcal{V}$, $\Pi_D \neq \emptyset$ e defina

$$\mathcal{U} = H_{0, \Pi_D}^1(\mathcal{G}) := \{\psi \in H^1(\mathcal{G}); \psi|_{\Pi_D} = 0\}. \quad (3.18)$$

Por uma lógica análoga à utilizada na demonstração da Proposição 3.2, verifica-se que o espaço \mathcal{U} é completo, portanto, de Hilbert.

A questão é provar a existência de uma constante $C_P > 0$, que depende apenas de \mathcal{G} , tal que

$$C_P \|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})}^2 \leq \|\nabla_{\mathcal{G}} \phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2, \quad \forall \phi \in \mathcal{U}. \quad (3.19)$$

A demonstração dessa desigualdade em domínios de grafos está além do escopo desta dissertação. No entanto, acreditamos que um possível caminho a seguir seria

acompanhando os passos do Lema 2.3 em [10], em que o problema é tratado para espaços $H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)$ em domínios cartesianos Ω genéricos. Vale também lembrar que resultados sobre o chamado quociente de Rayleigh

$$\frac{\|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})}^2}{\|\nabla_{\mathcal{G}}\phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2} = C_P^{-1}$$

são mostrados em [12, Sec. 5], para funções definidas em grafos, pela transferência de resultados clássicos equivalentes válidos em domínios cartesianos.

4 Problema de Poisson em Grafos

Finalmente, utilizamos os resultados obtidos nas seções anteriores para definir o problema de Poisson, sua formulação variacional primal e sua aproximação pelo Método de Elementos Finitos em domínios de grafos, um dos principais objetivos do presente estudo.

4.1 Formulação Primal de Poisson em Grafos

Para definir o problema no domínio geométrico de um grafo $\mathcal{G} = (\mathcal{E}, \mathcal{V})$, primeiramente estipulamos os seguintes dados:

- Termo de fonte $f \in L^2(\mathcal{G})$ tal que

$$f(v) = 0 \quad \forall v \in \mathcal{I},$$

em que \mathcal{I} é o conjunto dos vértices internos, como definido em (3.3).

- Uma função limitada e estritamente positiva $\kappa : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$. Quando o problema é associado a um contexto físico de hidrodinâmica, a função κ corresponde à permeabilidade do meio.
- Condições de contorno: considere uma partição $\partial\mathcal{V} = \Pi_D \cup \Pi_N$, com $\Pi_N \cap \Pi_D = \emptyset$, dos vértices de fronteira do grafo (ou seja, dos vértices que estão conectados com apenas uma aresta). Por simplicidade, supomos que $\Pi_D \neq \emptyset$, onde uma condição homogênea de Dirichlet é imposta. A condição de contorno sobre Π_N é imposta por $\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \mathbf{n} = \theta_N$, em que $\theta_N : \Pi_N \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função dada e \mathbf{n} é o campo unitário axial sobre os pontos de Π_N , como descrito no Capítulo 2.

Portanto, o problema de Poisson a ser considerado sobre o grafo \mathcal{G} se expressa da seguinte forma:

Problema $P_{\mathcal{G}}$ *Encontrar uma função $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:*

$$-\operatorname{div}_{\mathcal{G}}(\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi) = f, \quad \text{em } \mathcal{G}, \quad (4.1a)$$

$$\phi = 0, \quad \text{sobre } \Pi_D, \quad (4.1b)$$

$$\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \mathbf{n} = \theta_N, \quad \text{sobre } \Pi_N. \quad (4.1c)$$

A formulação variacional do Problema $P_{\mathcal{G}}$ é obtida de forma análoga à dos casos de domínios cartesianos em \mathbb{R}^2 , como mencionado no Capítulo 1. Para tal procedimento,

tomamos o espaço de Hilbert $\mathcal{U} = H_{0,\Pi_D}^1(\mathcal{G}) \subset H^1(\mathcal{G})$, conforme definição em (3.18), onde se espera encontrar uma solução do Problema $P_{\mathcal{G}}$.

Multiplicando ambos os lados de (4.1a) por uma função teste $\psi \in \mathcal{U}$, integrando sobre $\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}$ como em (3.8), usando a fórmula de integração por partes da Proposição 3.3 obtemos:

$$\int_{\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}} -\operatorname{div}_{\mathcal{G}}(\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi) \psi \, d\mathcal{G} = \int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathcal{E} - \int_{\partial\mathcal{V}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \mathbf{n} \psi \, d\mathcal{V} = \int_{\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}} \psi f \, d\mathcal{G},$$

o que nos leva a

$$\int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathcal{E} = \int_{\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}} \psi f \, d\mathcal{G} + \sum_{v \in \partial\mathcal{V}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi(v) \cdot \mathbf{n} \psi(v). \quad (4.2)$$

Usando a condição de Dirichlet nula sobre Π_D e a condição de contorno sobre Π_N , o segundo termo do lado direito desta equação reduz-se a

$$\sum_{v \in \partial\mathcal{V}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi(v) \cdot \mathbf{n} \psi(v) = \sum_{v \in \Pi_N} \theta_N(v) \psi(v) = \int_{\Pi_N} \theta_N \psi \, d\mathcal{V}. \quad (4.3)$$

Já o primeiro termo do lado direito de (4.2), resultante da integral do termo de fonte, pode ser escrito como

$$\int_{\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}} \psi f \, d\mathcal{G} = \int_{\mathcal{E}} \psi f \, d\mathcal{E} + \sum_{v_j \in \mathcal{I}} f(v_j) \psi(v_j).$$

Utilizando a hipótese de que $f|_{\mathcal{I}} = 0$, temos

$$\int_{\mathcal{G} \setminus \partial\mathcal{V}} \psi f \, d\mathcal{G} = \int_{\mathcal{E}} \psi f \, d\mathcal{E}. \quad (4.4)$$

Finalmente, aplicando (4.3) em (4.2) e utilizando (4.4), temos a relação

$$\int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathcal{E} = \int_{\mathcal{E}} \psi f \, d\mathcal{E} + \int_{\Pi_N} \theta_N \psi \, d\mathcal{V}.$$

Portanto, definindo

$$\mathcal{A}(\phi, \psi) = \int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathcal{E}, \text{ e } \mathcal{L}(\psi) = \int_{\mathcal{E}} \psi f \, d\mathcal{E} + \int_{\Pi_N} \theta_N \psi \, d\mathcal{V},$$

obtemos a formulação variacional primal do Problema $P_{\mathcal{G}}$.

Problema $PV_{\mathcal{G}}$ Encontrar $\phi \in \mathcal{U}$ satisfazendo

$$\mathcal{A}(\phi, \psi) = \mathcal{L}(\psi), \quad \forall \psi \in \mathcal{U}. \quad (4.5)$$

Para aplicar a teoria de Lax-Milgram do Teorema 1.1 ao Problema $PV_{\mathcal{G}}$, devemos mostrar que a forma $\mathcal{A}(\cdot, \cdot)$ é contínua e coerciva em \mathcal{U} e que $\mathcal{L}(\cdot)$ é contínua em \mathcal{U} . Procedendo como no caso do Problema PV em domínios cartesianos discutido no Capítulo 1, esses resultados podem ser obtidos pelo seguinte roteiro:

a) *Continuidade de $\mathcal{A}(\cdot, \cdot)$ e $\mathcal{L}(\cdot)$.* Pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos que

$$\begin{aligned} |\mathcal{A}(\phi, \psi)| &= \left| \int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathcal{E} \right| \\ &\leq \kappa_{\text{sup}} \|\nabla_{\mathcal{G}} \phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2} \|\nabla_{\mathcal{G}} \psi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2} \\ &\leq \kappa_{\text{sup}} \|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})} \|\psi\|_{H^1(\mathcal{E})} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} |\mathcal{L}(\psi)| &\leq \left| \int_{\mathcal{E}} f \psi \, d\mathcal{E} \right| + \int_{\Pi_N} \theta_N \psi \, d\mathcal{V} \\ &\leq \|f\|_{L^2(\mathcal{E})} \|\psi\|_{L^2(\mathcal{E})} + \|\psi\|_{L^2(\Pi_N)} \|\theta_N\|_{L^2(\Pi_N)} \\ &\lesssim (\|f\|_{L^2(\mathcal{E})} + \|\theta_N\|_{L^2(\Pi_N)}) \|\psi\|_{H^1(\mathcal{E})}. \end{aligned}$$

Na passagem da segunda para a última linha, foi aplicado o Teorema 3.1.

b) *Coercividade:* dispondo da desigualdade de Poincaré (3.19) para funções em \mathcal{U} e com a ajuda da desigualdade de Cauchy-Schwarz, é possível obter a propriedade de coercividade para $\mathcal{A}(\cdot, \cdot)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\phi, \phi) &= \int_{\mathcal{E}} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \phi \, d\mathcal{E} \\ &\geq \frac{\kappa_{\text{inf}}}{2} \|\nabla_{\mathcal{G}} \phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2 + \frac{\kappa_{\text{inf}}}{2} \|\nabla_{\mathcal{G}} \phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2 \\ &\geq \frac{\kappa_{\text{inf}} C_P}{2} \|\phi\|_{L^2(\mathcal{E})}^2 + \frac{\kappa_{\text{inf}}}{2} \|\nabla_{\mathcal{G}} \phi\|_{[L^2(\mathcal{E})]^2}^2 \\ &\geq \frac{\kappa_{\text{inf}}}{2} \min\{1, C_P\} \|\phi\|_{H^1(\mathcal{E})}^2. \end{aligned}$$

Em resumo, nas circunstâncias especificadas acima, as restrições do teorema de Lax-Milgram são sustentadas, demonstrando a existência, unicidade e estabilidade de solução ϕ do Problema $PV_{\mathcal{G}}$.

4.2 O Método de Galerkin para o Problema $PV_{\mathcal{G}}$

Finalmente, apresentamos o método de Galerkin para o Problema $PV_{\mathcal{G}}$ descrito em (4.5), com base em um subespaço de dimensão finita $\tilde{\mathcal{U}} \subset \mathcal{U}$.

Problema $PVG_{\mathcal{G}}$ Encontrar $\tilde{\phi} \in \tilde{\mathcal{U}}$ satisfazendo

$$\mathcal{A}(\tilde{\phi}, \psi) = \mathcal{L}(\psi), \quad \forall \psi \in \tilde{\mathcal{U}}. \quad (4.6)$$

Sendo uma formulação H^1 -consistente, o Problema $PVG_{\mathcal{G}}$ herda as propriedades de existência e unicidade válidas para o Problema $PV_{\mathcal{G}}$. Além disso, visto que a

ortogonalidade de Galerkin $\mathcal{A}(\phi - \tilde{\phi}, \psi) = 0, \forall \psi \in \tilde{\mathcal{U}}$ é válida, a convergência da solução aproximada $\tilde{\phi}$ para a solução exata ϕ é assegurada pelo Lema de Céa:

$$\|\phi - \tilde{\phi}\|_{\mathcal{A}} \lesssim \inf_{\psi \in \tilde{\mathcal{U}}} \|\phi - \psi\|_{\mathcal{A}}, \quad (4.7)$$

em que a constante liderando o lado direito da desigualdade depende diretamente da constante de continuidade e inversamente da constante de coercividade de $\mathcal{A}(\cdot, \cdot)$.

5 Elementos Finitos em Grafos

Neste capítulo, descrevemos brevemente a aplicação do Método de Elementos Finitos ao Método de Galerkin em grafos, comentamos detalhes de sua implementação computacional e apresentamos um conjunto representativo de experimentos numéricos em grafos, testando a precisão da metodologia numérica para grafos com diferentes configurações, sob condições de contorno distintas.

5.1 Elementos Finitos

A construção de espaços de elementos finitos em grafos segue um procedimento semelhante ao descrito na Seção 2.2 para uma curva afim unidimensional (segmento de reta). Mais especificamente, trata-se de uma aplicação do processo repetidas vezes, para cada aresta Λ_i do grafo em questão. Indicamos [15, 1] como principais referências para a criação dessa estrutura em grafos, assim como [3, 8] como referências para o método de elementos finitos clássico.

Seja $\mathcal{G} = \mathcal{E} \cup \mathcal{V}$ uma realização geométrica de um grafo, com $\mathcal{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ e $\mathcal{E} = \{\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_m\}$. Em tal domínio, tomando o Problema variacional $\text{PVG}_{\mathcal{G}}$ descrito na Equação (4.6), o objetivo é construir espaços de elementos finitos $\tilde{\mathcal{U}}$ adequados. Para esta tarefa, tomamos os seguintes ingredientes em cada aresta Λ_i do grafo:

- O domínio de parametrização $\check{\Lambda}_i = (0, L_i)$, o mapeamento geométrico invertível \mathbf{F}_{Λ_i} e o correspondente mapeamento de funções \mathbb{F}_{Λ_i} , como definido em (2.1).
- O espaço de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k,\Lambda_i}$, construído na Seção 2.2, a partir do espaço $\mathcal{U}_{h_i,k,\check{\Lambda}_i}$, de funções polinomiais de grau k definidas por partes sobre uma partição $\check{\mathcal{T}}_i$ de $\check{\Lambda}_i$ com espaçamento uniforme h_i .

Com toda essa estrutura em mãos, construímos o seguinte espaço de elementos finitos em \mathcal{G} , em que $h = \max\{h_i, 1 \leq i \leq n\}$:

$$\mathcal{U}_{h,k,\mathcal{G}} = \left\{ \psi \in H^1(\mathcal{G}) : \psi|_{\Lambda_i} \in \mathcal{U}_{h,k,\Lambda_i} \right\}. \quad (5.1)$$

A partir de bases locais $\mathcal{B}_{h_i,k,\Lambda_i} = \{\Psi_j(\Lambda_i), 1 \leq j \leq N_{h_i,k,\check{\Lambda}_i}\}$ para $\mathcal{U}_{h_i,k,\Lambda_i}$, como descrito na Seção 2.2, definimos uma base global $\mathcal{B}_{h,k,\mathcal{G}} = \{\Psi_\ell, 1 \leq \ell \leq N_{h,k,\mathcal{G}}\}$ para $\mathcal{U}_{h,k,\mathcal{G}}$, obtida pela montagem contínua das bases locais $\Psi_j(\Lambda_i)$ sobre os vértices internos em \mathcal{I} e pela imposição da condição homogênea de Dirichlet sobre Π_D .

Uma ilustração das funções neste conjunto de bases locais para $k = 1$ está na Figura 11. Nela, o grafo \mathcal{G} , em forma de Y, é formado por três arestas Λ_1, Λ_2 e Λ_3 , três

vértices externos v_1, v_3 e v_4 , e um único vértice interno v_2 , compartilhado por todas as arestas. Cada aresta é subdividida uma vez e a condição de contorno nula é aplicada em $\Gamma_D = \partial\mathcal{V}$. São mostradas as funções de forma locais associadas aos graus de liberdade dos pontos centrais de Λ_i . Destaca-se em azul a função de forma associada ao vértice interno comum v_1 .

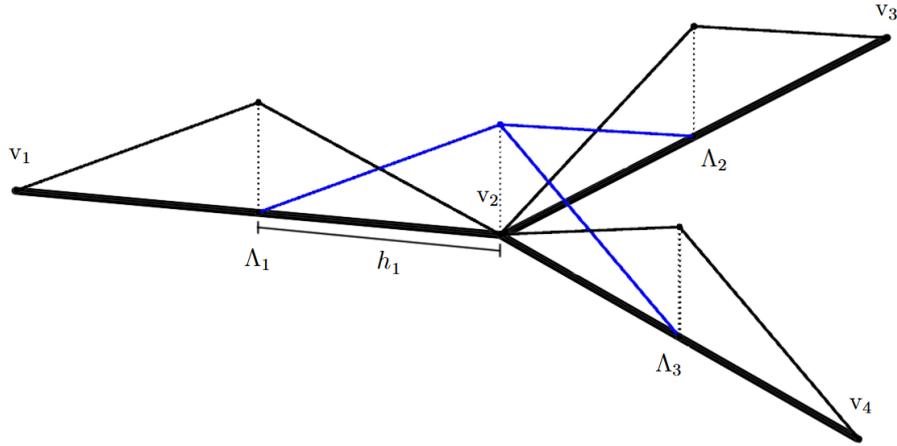


Figura 11 – Ilustração de funções de base em $\mathcal{B}_{h,1,\mathcal{G}}$ em um grafo \mathcal{G} em forma de “Y”, com uma subdivisão das arestas e condição de contorno nula em \mathcal{V} .

Tendo em mãos o espaço de elementos finitos $\mathcal{U}_{h,k,\mathcal{G}}$ e sua base $\mathcal{B}_{h,k,\mathcal{G}}$, estabeleçamos um algoritmo de resolução do Problema $\text{PVG}_{\mathcal{G}}$ associado. Para isso, expandimos a solução aproximada em termos da base $\mathcal{B}_{h,k,\mathcal{G}}$:

$$\phi_h = \sum_{j=1}^{N_{h,k,\mathcal{G}}} c_j \Psi_j \in \mathcal{U}_{h,k,\mathcal{G}}, \quad (5.2)$$

e inserimos funções teste $q = \Psi_\ell \in \mathcal{B}_{h,k,\mathcal{G}}$ para obter as equações:

$$\mathcal{A}\left(\sum_{j=1}^{N_{h,k,\mathcal{G}}} c_j \Psi_j, \Psi_\ell\right) = \mathcal{L}(\Psi_\ell).$$

Este sistema linear é representado na forma matricial por

$$\mathbf{A}_{\mathcal{G}} \mathbf{c} = \mathbf{L}_{\mathcal{G}},$$

em que a matriz de rigidez $\mathbf{A}_{\mathcal{G}} = [A_{\ell,j}]$ e o vetor de carga $\mathbf{L}_{\mathcal{G}} = [L_\ell]$ possuem coordenadas $A_{\ell,j} = \mathcal{A}(\Psi_j, \Psi_\ell)$ e $L_\ell = \mathcal{L}(\Psi_\ell)$. Observa-se que, embora a matriz de rigidez mantenha as propriedades de esparsidade e simetria — características dos casos unidimensional e bidimensional —, sua estrutura de banda limitada é perdida em relação a esses casos, o que impacta a estratégia de solução do sistema associado. A solução desse sistema linear nos proporciona os coeficientes $\mathbf{c} = (c_j)$ que determinam a solução aproximada ϕ_h pela expansão dada em (5.2).

5.2 Detalhes da Implementação

Doravante neste trabalho, apenas utilizaremos elementos finitos com $k = 1$. O método é facilmente estendido para comportar elementos de graus mais elevados, porém a natureza linear da solução numérica é suficiente para a proposta deste estudo.

O código adotado é composto por três etapas principais, que serão detalhadas nesta seção.

1. No primeiro passo, fornecemos os dados geométricos do domínio (grafo) e o número de subdivisões desejado para cada aresta (por simplicidade, neste trabalho supomos que todas as arestas são subdivididas pelo mesmo número de intervalos). Utilizando esses dados, é gerada uma lista contendo todos os nós da malha subdividida, além de uma matriz de conectividade que representa os índices dos pontos iniciais e finais de cada elemento na lista de nós fornecida. Isso define uma malha global \mathcal{T} sobre o grafo.
2. O segundo passo é utilizar os itens fornecidos para construir a matriz de rigidez $\mathbf{A}_{\mathcal{G}}$ e o vetor de carga $\mathbf{L}_{\mathcal{G}}$ correspondentes ao problema. A montagem dessas estruturas é feita pelo espalhamento das matrizes locais, montadas para cada elemento de \mathcal{T} . Devido à natureza nodal dos graus de liberdade e ao uso de elementos com $k = 1$, supomos que as incógnitas estão numeradas segundo a numeração dos nós da malha e a matriz de conectividade é suficiente para a montagem das estruturas globais.
3. Por fim, resolvemos o sistema linear $\mathbf{A}_{\mathcal{G}} \mathbf{c} = \mathbf{L}_{\mathcal{G}}$ para obter os coeficientes \mathbf{c} da expansão da solução numérica ϕ_h em termos da base do espaço $\mathcal{B}_{h,k,\mathcal{G}}$, conforme a equação (5.2).

Para esse processo, utilizamos a linguagem de programação Python [23], aliada às bibliotecas Numpy [17], para geração e manuseio de listas (arrays), e Scipy [28], para as integrações numéricas realizadas na montagem de $\mathbf{A}_{\mathcal{G}}$ e $\mathbf{L}_{\mathcal{G}}$.

5.3 Testes Numéricos de Convergência

Nesta seção, estudamos o comportamento da convergência do método de elementos finitos, usando os espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$ descritos anteriormente para o caso $k = 1$ e adotando a função $\kappa \equiv 1$. Para tal, definimos um problema de Poisson com solução exata conhecida em um grafo simples em formato de “Y”, com quatro vértices $\mathcal{V} = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ e três arestas $\mathcal{E} = \{\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3\}$, conforme ilustrado na Figura 11. Os vértices externos são $v_1 = (0, 0)$, $v_3 = \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ e $v_4 = \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$, enquanto $v_2 = (1, 0)$ é o único vértice interno.

A função analítica utilizada é definida por

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \text{sen} \left(\frac{\pi}{2} \xi \right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_1, \\ \text{sen} \left(\frac{\pi}{2} (\xi + 1) \right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_2, \Lambda_3 \end{cases}$$

e está representada na Figura 12.

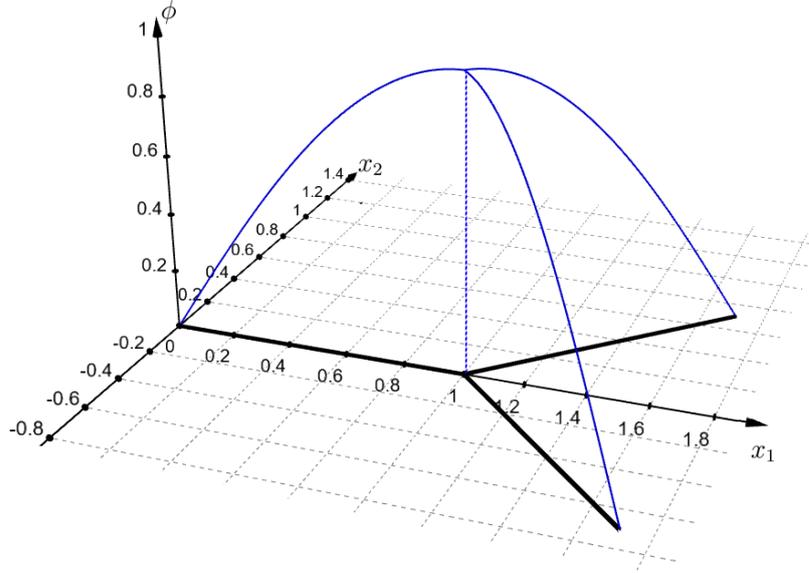


Figura 12 – Representação da função $\phi(\mathbf{x})$ no domínio definido.

Ao tomar o gradiente e, subsequentemente, o divergente dessa função usando as relações (3.4) e (3.5), obtemos

$$\text{div}_{\mathcal{G}}(\nabla_{\mathcal{G}}\phi(\mathbf{x})) := f(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{\pi^2}{4} \text{sen} \left(\frac{\pi}{2} \xi \right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_1, \\ -\frac{\pi^2}{4} \text{sen} \left(\frac{\pi}{2} (\xi + 1) \right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_2, \Lambda_3 \\ 0, & \text{se } \mathbf{x} = (1, 0). \end{cases}$$

Em todos os testes numéricos, as arestas Λ_i são subdivididas N vezes, com $N = 2^s, s = 3, \dots, 7$.

5.3.1 Teste 1: Condição de Dirichlet Homogênea

Primeiramente, definimos o problema com condição de contorno de Dirichlet homogênea em todos os vértices externos, i.e. $\Gamma_D = \partial\mathcal{V}$. Seguindo o procedimento detalhado na Seção 5.2, obtém-se uma solução aproximada $\phi_h \in \mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$ e calculam-se as normas $L^2(\mathcal{E})$ e $H^1(\mathcal{G})$ do erro $\phi - \phi_h$. Os resultados estão graficamente ilustrados na Figura 13 e detalhados na Tabela 1. As taxas de convergência obtidas numericamente são compatíveis com as estimativas esperadas em um domínio formado por um único intervalo.

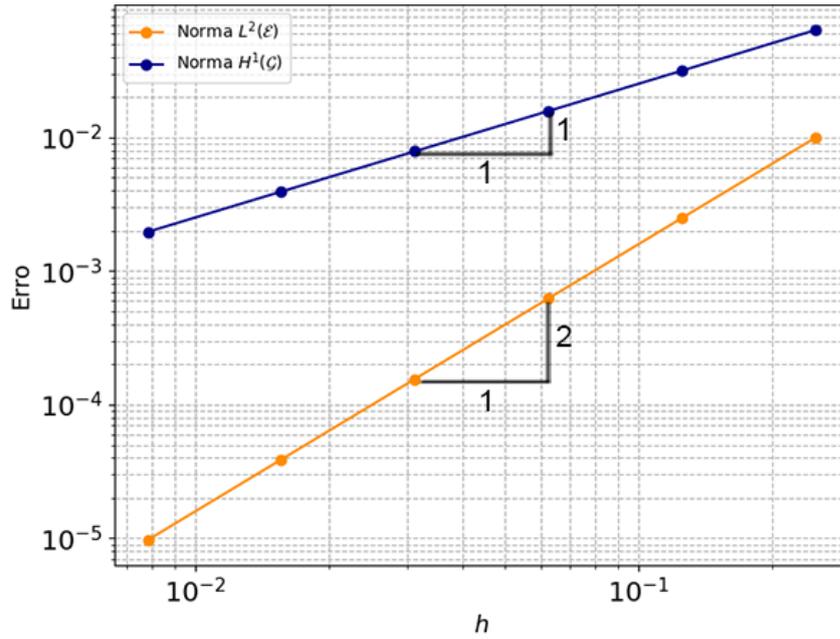


Figura 13 – Teste 1: Erros das soluções aproximadas de elementos finitos em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, medidos nas normas de $L^2(\mathcal{E})$ e de $H^1(\mathcal{G})$.

N	$\ \phi - \phi_h\ _{L^2(\mathcal{E})}$	Ordem	$\ \phi - \phi_h\ _{H^1(\mathcal{G})}$	Ordem
8	2.4865×10^{-3}	—	3.1556×10^{-2}	—
16	6.2202×10^{-4}	2.00	1.5749×10^{-2}	1.00
32	1.5553×10^{-4}	2.00	7.8709×10^{-3}	1.00
64	3.8884×10^{-5}	2.00	3.9350×10^{-3}	1.00
128	9.7210×10^{-6}	2.00	1.9674×10^{-3}	1.00

Tabela 1 – Teste 1: histórico de convergência da solução aproximada em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, em que N é o número de elementos por aresta do grafo.

Uma representação gráfica da solução exata ϕ e de sua derivada direcional $D_{\mathcal{G}}\phi$ encontra-se na Figura 14, em que

$$D_{\mathcal{G}}\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{\pi}{2}\xi\right) \circ \mathbf{F}_{\Lambda}^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_1, \\ \frac{\pi}{2} \cos\left(\frac{\pi}{2}(\xi + 1)\right) \circ \mathbf{F}_{\Lambda}^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_2, \Lambda_3. \end{cases}$$

A Figura 14 também apresenta os gráficos das respectivas aproximações obtidas.

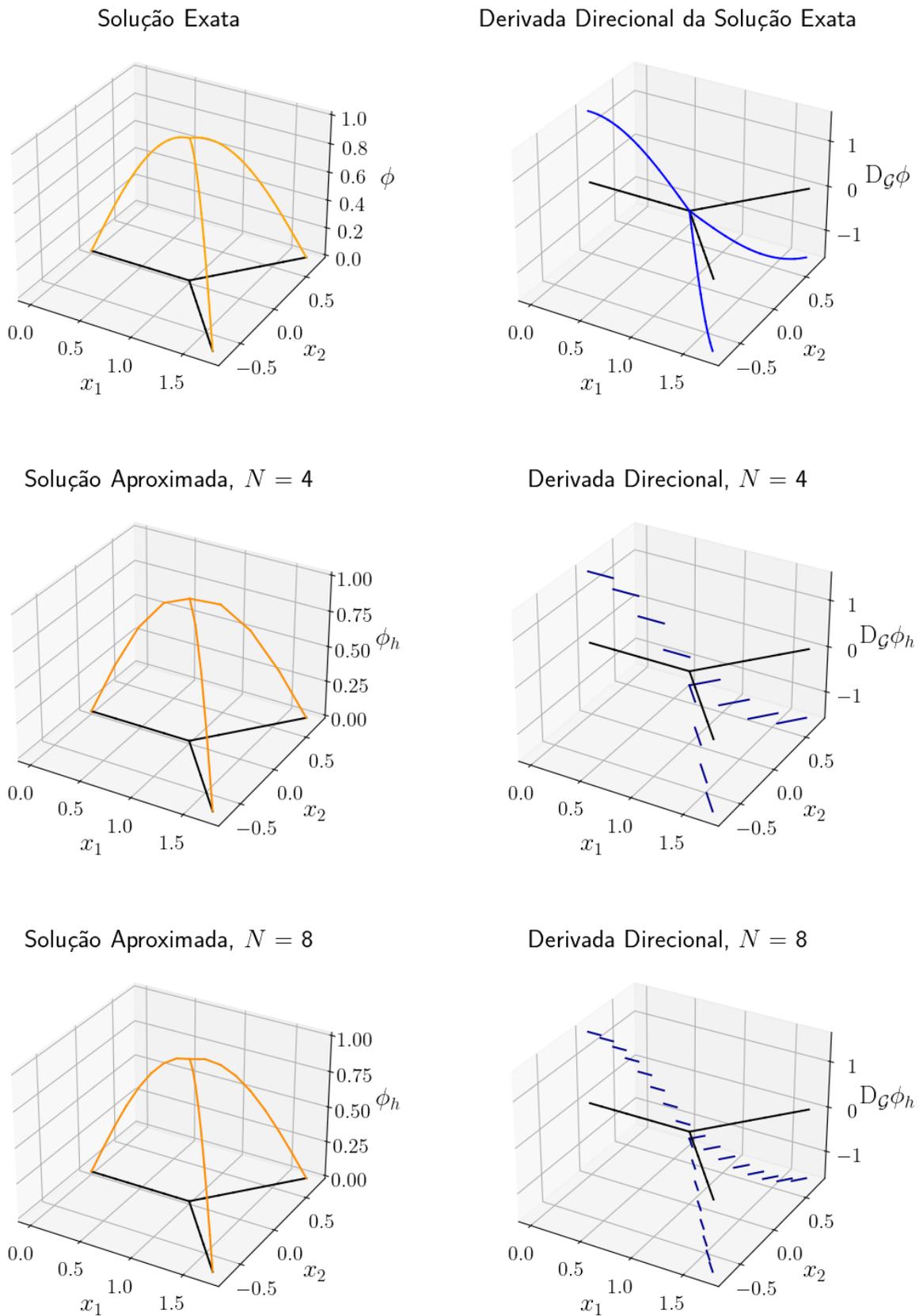


Figura 14 – Teste 1: Soluções exatas e aproximadas em espaços $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$ e respectivas derivadas direcionais, com diferentes valores de subdivisões N por aresta.

5.3.2 Teste 2: Condições de Contorno Mistas

Agora utilizamos a implementação para checar a convergência da solução numérica do método aplicado a um problema com condições de contorno mistas. Utilizamos a mesma função analítica ϕ definida na seção anterior, mas impomos uma condição de Dirichlet em v_1 e de Neumann não homogênea nos vértices v_3 e v_4 .

A Tabela 2 detalha o histórico de convergência nas diferentes normas para este experimento numérico. Estes resultados, quando comparados aos da Tabela 1, indicam que as soluções numéricas são similares em termos de precisão para os dois tipos de condições de contorno, ilustrando a convergência do método.

N	$\ \phi - \phi_h\ _{L^2(\mathcal{E})}$	Ordem	$\ \phi - \phi_h\ _{H^1(\mathcal{G})}$	Ordem
8	2.4865×10^{-3}	—	3.1556×10^{-2}	—
16	6.2201×10^{-4}	2.00	1.5749×10^{-2}	1.00
32	1.5553×10^{-4}	2.00	7.8708×10^{-3}	1.00
64	3.8884×10^{-5}	2.00	3.9350×10^{-3}	1.00
128	9.7210×10^{-6}	2.00	1.9674×10^{-3}	1.00

Tabela 2 – Teste 2: histórico de convergência da solução aproximada ϕ_h em espaços de aproximação $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$, em que N é o número de elementos por aresta do grafo.

5.4 Experimentos Gerais em Grafos

Após utilizar os testes de convergência para verificar a correta implementação do método dos elementos finitos proposto para a resolução do Problema $\text{PVG}_{\mathcal{G}}$, nesta seção procedemos com testes em casos mais gerais. Por exemplo:

- Estendemos o problema de Poisson para o tratamento de condição de Dirichlet imposta sobre Π_D por uma função dada $\phi_D : \Pi_D \rightarrow \mathbb{R}$ não nula.
- Também tratamos alguns casos genéricos para avaliar o efeito causado por diferentes coeficientes de permeabilidade do meio κ . Em tais contextos, o campo vetorial $-\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi$ corresponde ao fluxo do fluido estudado.

5.4.1 Teste 3 e Teste 4: Condição de Dirichlet e Permeabilidade Heterogêneas

Os experimentos desta seção são baseados no grafo ilustrado na Figura 15, com 6 arestas e 6 vértices, definindo $\Pi_D = \partial\mathcal{V} = \{v_1, v_6\}$, com $\phi_D(v_1) = 1$ e $\phi_D(v_6) = 0$. Dois testes são considerados, Teste 3 e Teste 4, usando permeabilidades diferentes. Escolhemos permeabilidades κ constantes por partes sobre \mathcal{E} e o termo fonte $f(\mathbf{x}) = 0$ em todo o domínio. O objetivo destes experimentos é verificar o comportamento da solução

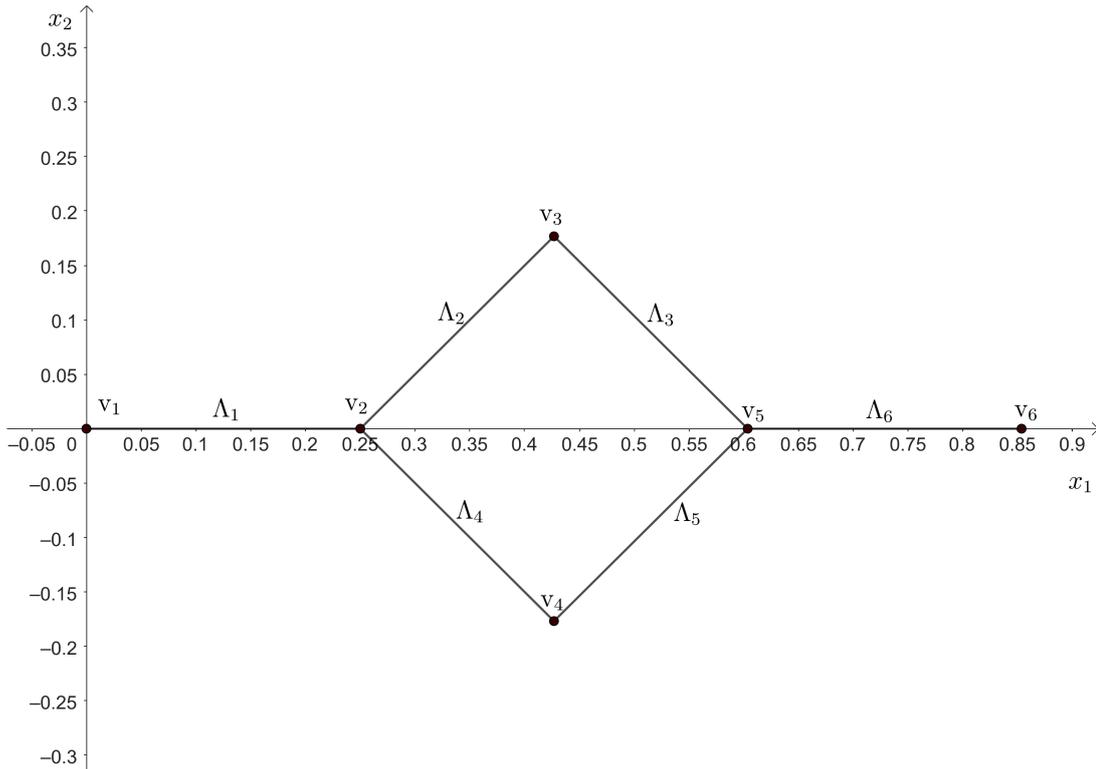


Figura 15 – Teste 3 e Teste 4: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.

aproximada no contexto de uma diferença de potencial. O que se espera da solução é que o valor de ϕ decaia linearmente por partes ao longo das arestas, partindo de $\phi(v_1) = 1$ no vértice inicial da esquerda e indo para $\phi(v_6) = 0$, no vértice final à direita.

Para as implementações, cada aresta foi subdividida apenas uma vez, resultando em 12 sub-elementos ao todo. Isto é suficiente para obter resultados adequados devido à natureza linear por partes do problema. Uma vez computada a solução aproximada ϕ_h , também foi calculada a grandeza

$$\tilde{\sigma} := -\kappa D_{\mathcal{G}} \phi_h \quad (5.3)$$

de modo a verificar se os resultados obtidos condizem com a natureza física dos problemas.

Desta forma, para avaliar os efeitos no comportamento da solução numérica quando se muda o valor de κ , consideramos os seguintes testes:

- Teste 3: inicialmente, foi testado o caso em que a permeabilidade κ é constante e igual a 1 em todas as arestas, conforme ilustração da Figura 16.
- Teste 4: neste experimento alteramos a permeabilidade para $\kappa = 0.5$ nas arestas Λ_4 e Λ_5 , conforme indicado na Figura 17.

Para efeito de comparação, os resultados destes dois experimentos estão disponibilizados, simultaneamente, nas Figuras 18, 19 e 20. Em todas as figuras, o grafo \mathcal{G} está

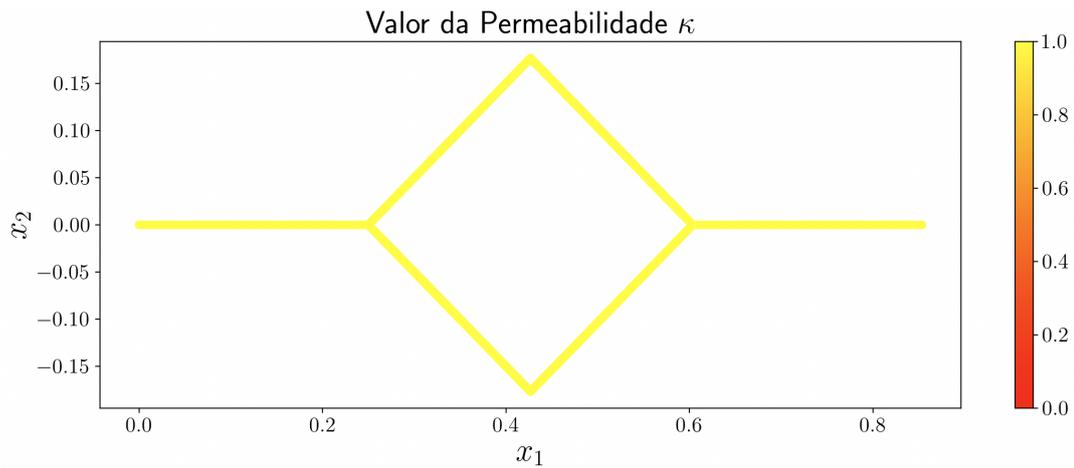


Figura 16 – Teste 3: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.

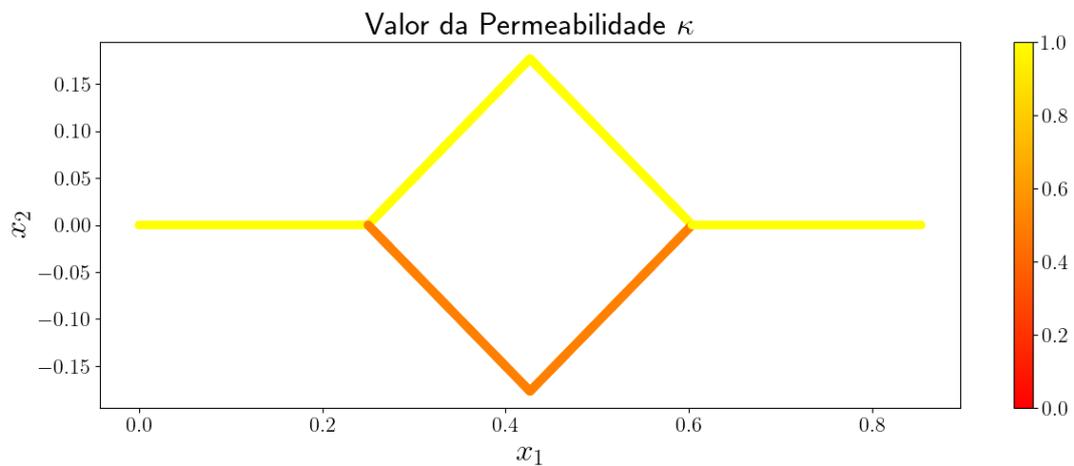
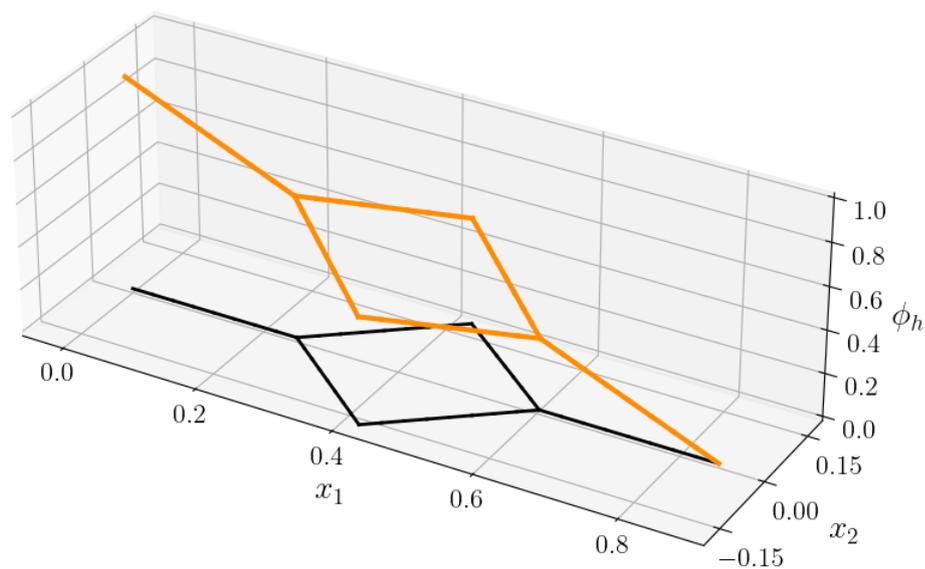


Figura 17 – Teste 4: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.

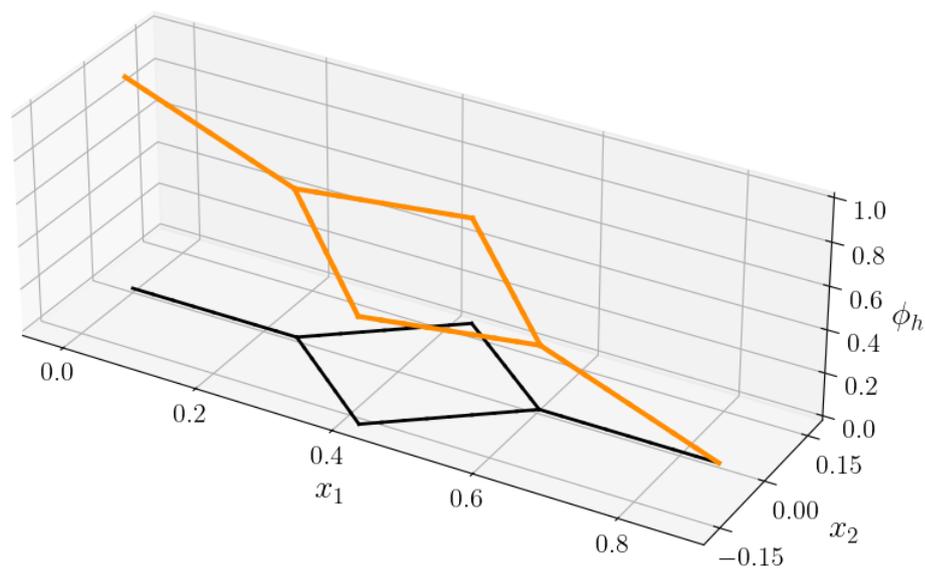
indicado por linhas negras.

Como esperado, observa-se um comportamento linear por partes das soluções aproximadas ϕ_h , com um decaimento de seus valores entre o vértice inicial e o vértice final do grafo.

A alteração na permeabilidade causa uma pequena modificação na solução aproximada ϕ_h e em suas derivadas direcionais, conforme indicado nas Figuras 18 e 19, respectivamente. Por outro lado, quando analisamos o fluxo σ_h do Teste 4 apresentado na Figura 20, vemos que há uma assimetria, com seu valor sendo maior nos locais do domínio em que a permeabilidade tem valor maior. Uma possível analogia destes resultados pode ser traçada com a eletrodinâmica onde, quando dois fios condutores são conectados em paralelo sob uma mesma diferença de potencial, há uma corrente maior no caminho de menor resistência.

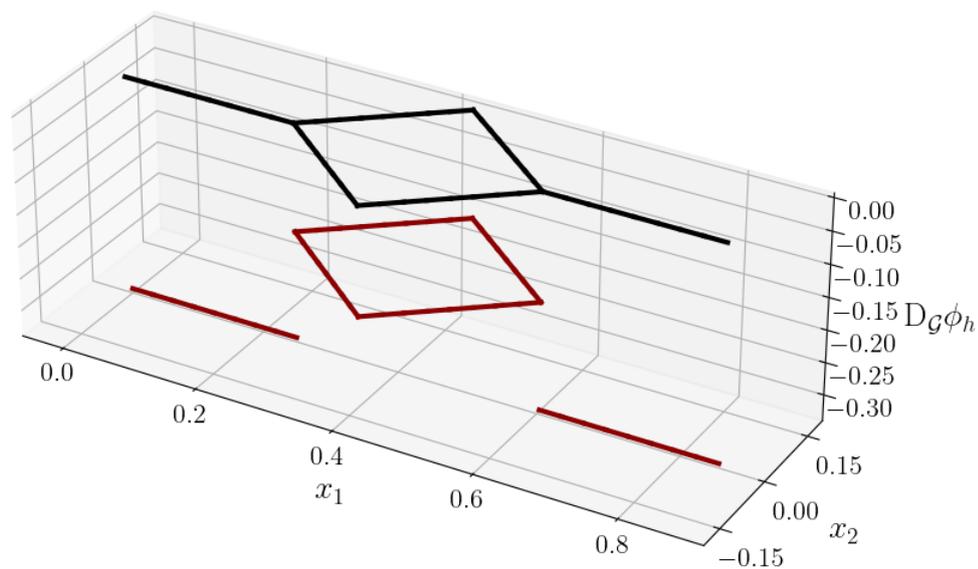


(a) Teste 3: Permeabilidade homogênea.

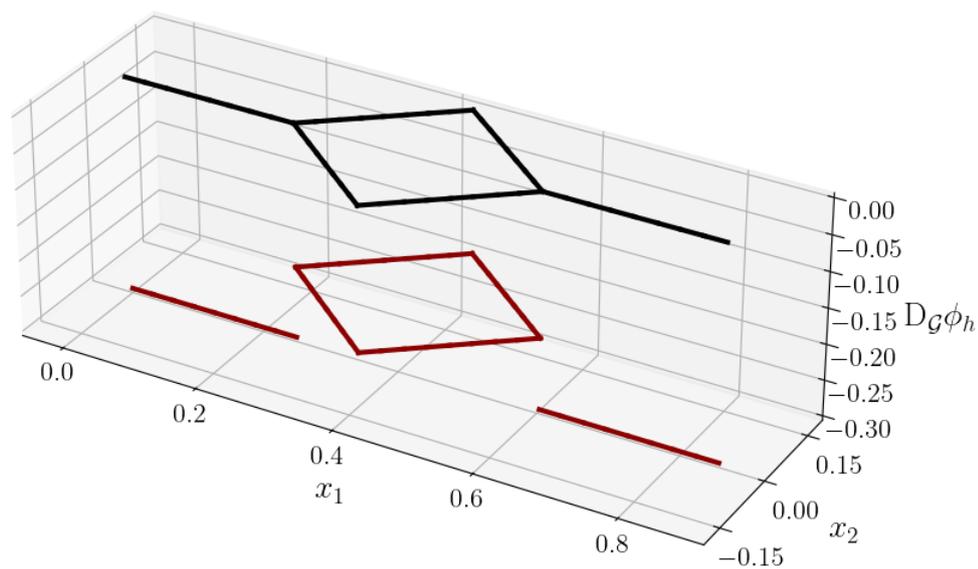


(b) Teste 4: Permeabilidade heterogênea.

Figura 18 – Teste 3 e Teste 4: Soluções numéricas ϕ_h .

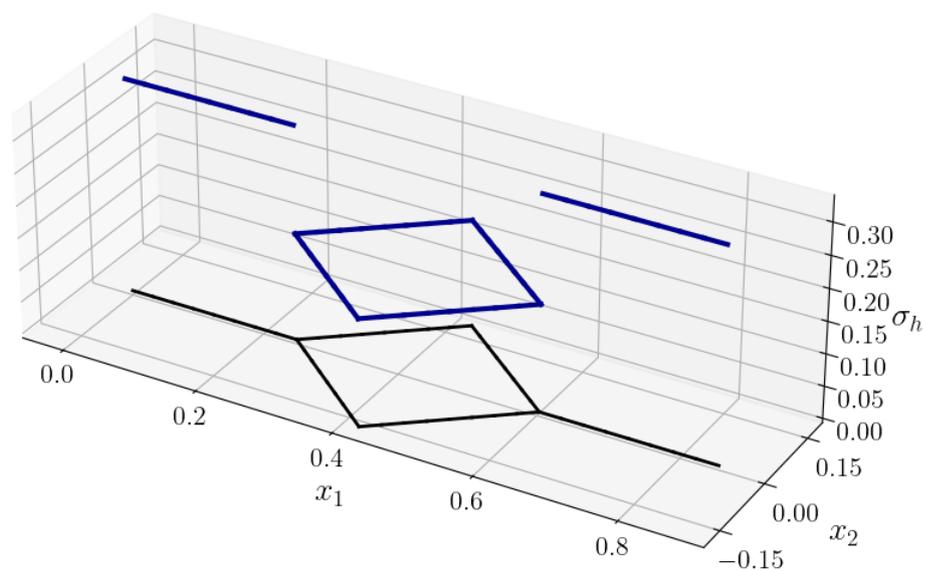


(a) Teste 3: Permeabilidade homogênea.

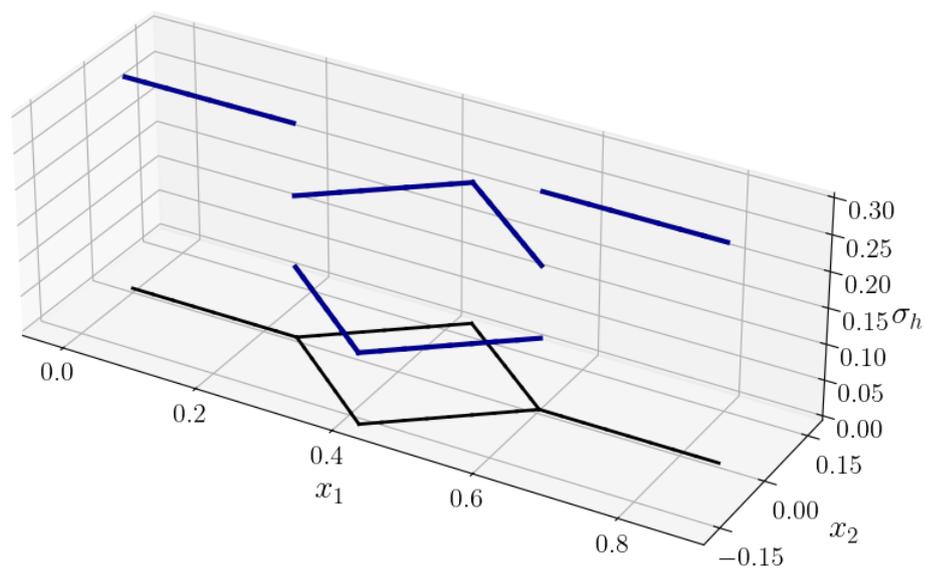


(b) Teste 4: Permeabilidade heterogênea.

Figura 19 – Teste 3 e Teste 4: Derivadas direcionais $D_G \phi_h$ das soluções aproximadas.



(a) Teste 3: Permeabilidade homogênea.



(b) Teste 4: Permeabilidade heterogênea.

Figura 20 – Teste 3 e Teste 4: Fluxos numéricos σ_h das soluções aproximadas.

5.4.2 Teste 5 e Teste 6: Condições Mistas e Permeabilidades Heterogêneas

Retornamos ao grafo \mathcal{G} da Figura 11, plotado novamente na Figura 21, para o qual realizamos dois testes numéricos, denominados por Teste 5 e Teste 6.

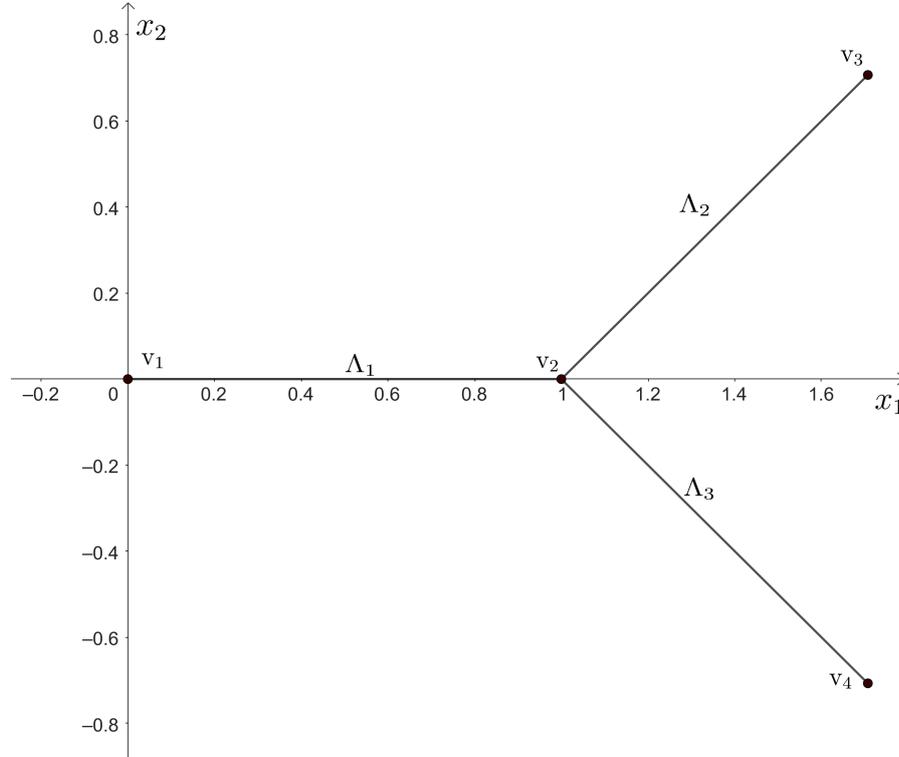


Figura 21 – Teste 5 e Teste 6: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.

Neste grafo definimos $\Pi_N = \{v_1\}$, com

$$\theta_N(v_1) = -1,$$

e $\Pi_D = \{v_3, v_4\}$, com $\phi_D \equiv 0$. Com tais condições de contorno, consideramos os seguintes testes:

- Teste 5: permeabilidade homogênea $\kappa \equiv 1$, em todas as arestas, conforme indicado na Figura 22.
- Teste 6: caso heterogêneo, modificando a permeabilidade para $\kappa = 0.5$ nas arestas Λ_4 e Λ_5 , conforme indicado na Figura 23.

Como a imposição da condição de Neumann é equivalente à de que o fluxo de entrada seja $\tilde{\sigma} = 1.0$, precisamos determinar qual é o fluxo de saída. Para tanto, foi colocada no software uma função que determina o somatório dos fluxos em cada vértice de saída do grafo.

Para facilitar a comparação, nas Figuras 24, 25 e 26 disponibilizamos, em pares, os gráficos dos resultados dos dois experimentos. Em todas as figuras, o grafo \mathcal{G}

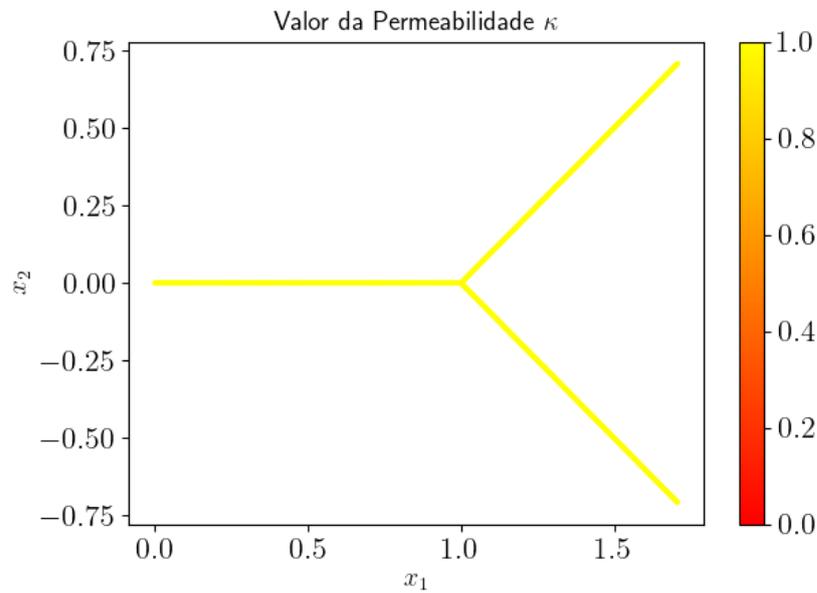


Figura 22 – Teste 5: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.

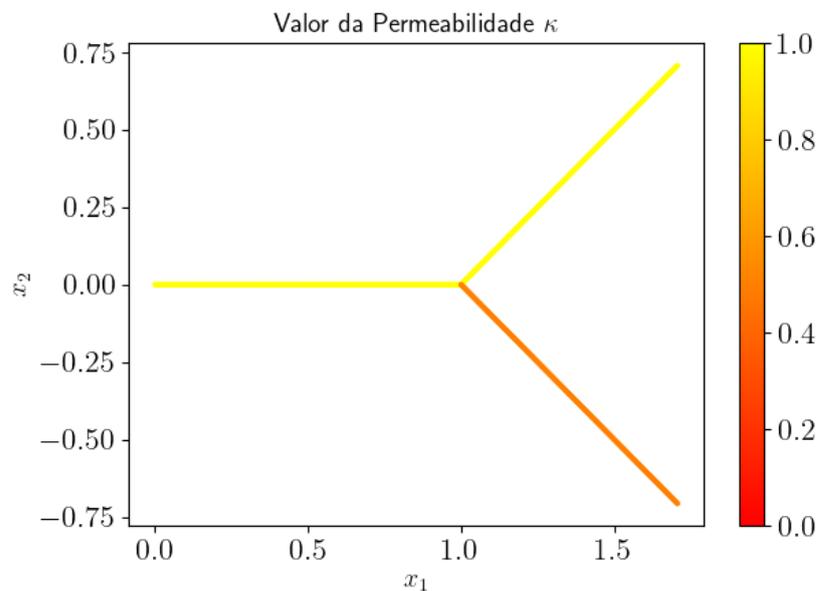
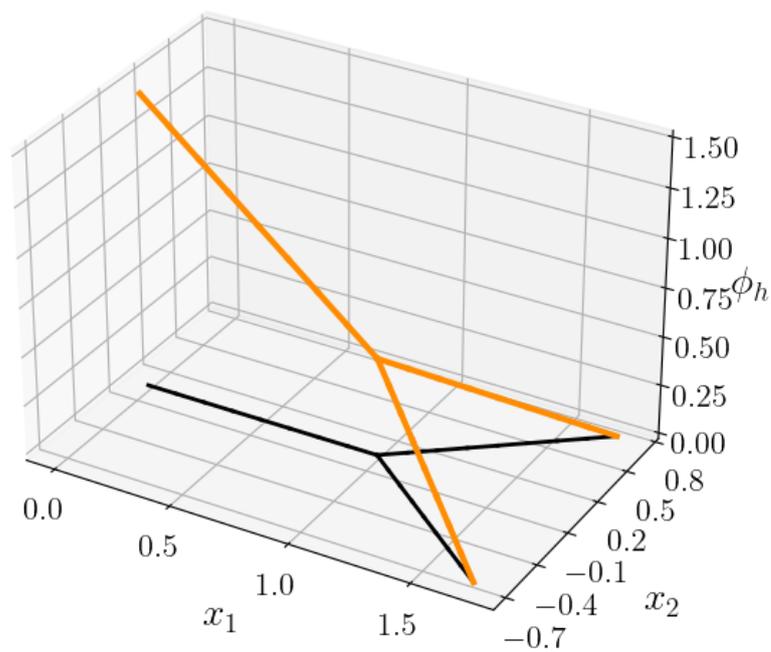
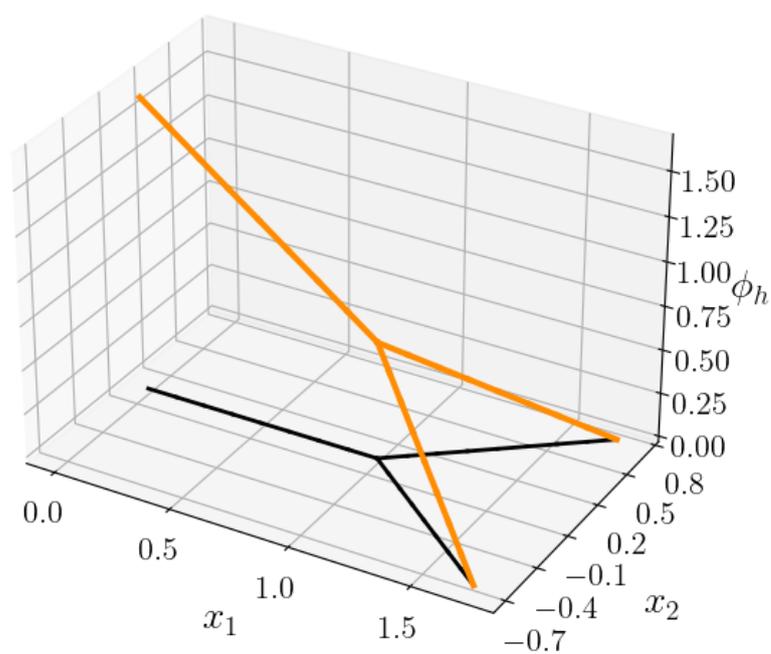


Figura 23 – Teste 6: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.

está indicado por linhas negras. Para o primeiro experimento, na Figura 26(a), notamos imediatamente que os fluxos nos dois vértices de saída v_3 e v_4 são iguais, e o valor retornado é 0.5 em cada um, totalizando 1.0. Já nos resultados da Figura 26(b), em que a permeabilidade da aresta Λ_3 é menor, notamos uma diferença no valor do fluxo entre as duas. Numericamente, o valor do fluxo em Λ_3 é $\frac{1}{3}$, e em Λ_2 é $\frac{2}{3}$, totalizando o mesmo fluxo 1.0 que entra no domínio e verificando que o modelo respeita uma lei de conservação, mesmo ao variar a sua permeabilidade.

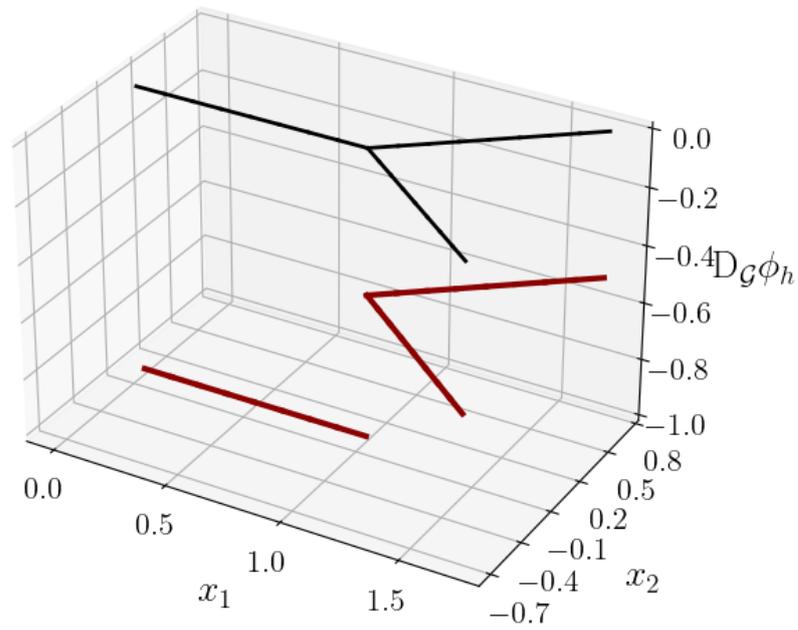


(a) Teste 5: Permeabilidade homogênea.

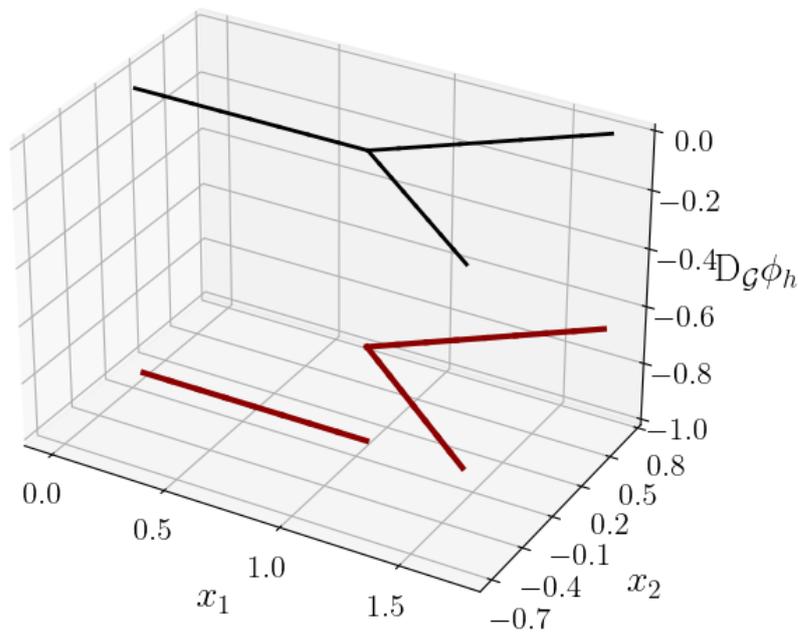


(b) Teste 6: Permeabilidade heterogênea.

Figura 24 – Teste 5 e Teste 6: Soluções numéricas ϕ_h .

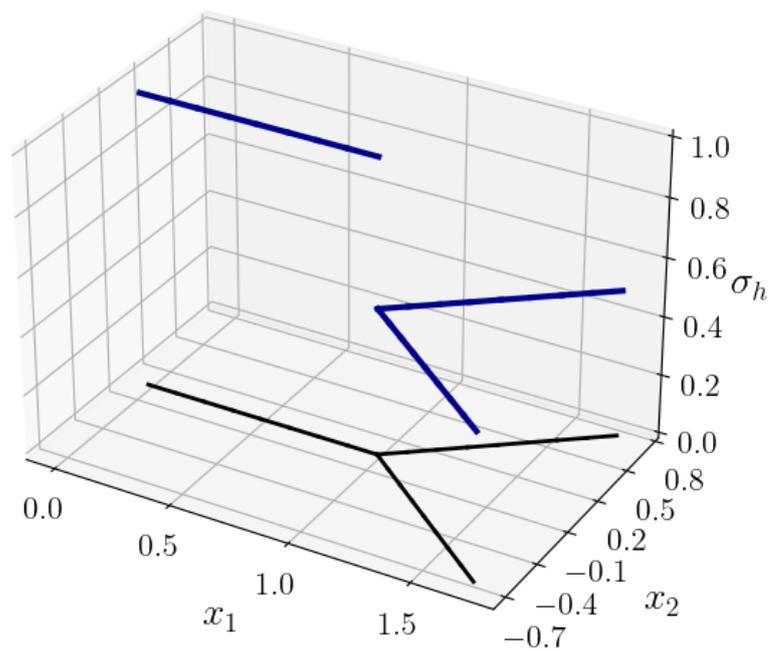


(a) Teste 5: Permeabilidade homogênea.

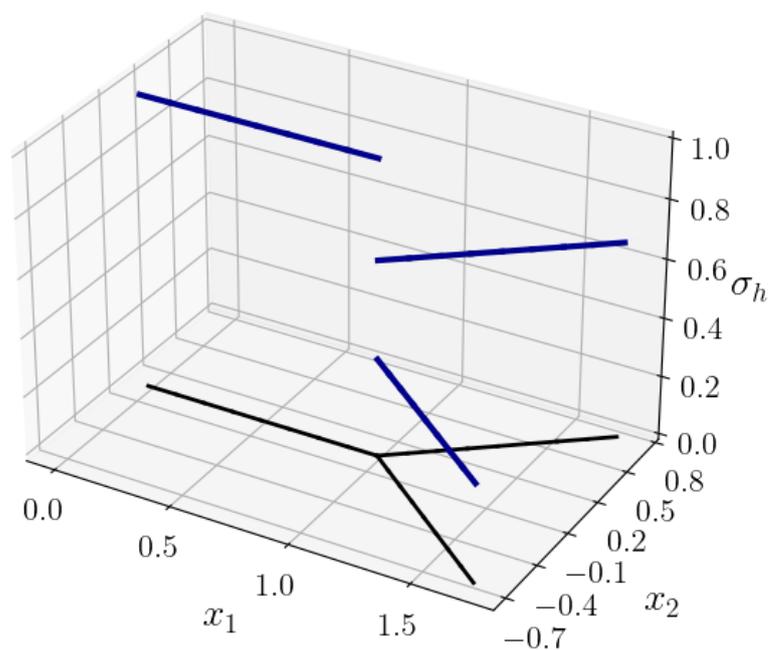


(b) Teste 6: Permeabilidade heterogênea.

Figura 25 – Teste 5 e Teste 6: Derivadas direcionais $D_G \phi_h$.



(a) Teste 5: Permeabilidade homogênea.



(b) Teste 6: Permeabilidade heterogênea.

Figura 26 – Teste 5 e Teste 6: Fluxos numéricos σ_h .

5.4.3 Teste 7 e Teste 8: Experimentos em um Grafo mais Complexo

Os experimentos da presente seção investigam a solução em um grafo mais complexo do que aqueles dos testes anteriores. Desta vez, o grafo \mathcal{G} adotado está representado na Figura 27, com 16 vértices e 15 arestas. Já adiantamos que o mesmo será aplicado no próximo capítulo em acoplamento com um problema de Poisson em um domínio bidimensional. Por esta razão, os vértices escolhidos estão colocados em locais estratégicos, coincidindo com alguns nós de uma malha quadrilateral de 32×32 segmentos de fronteira.

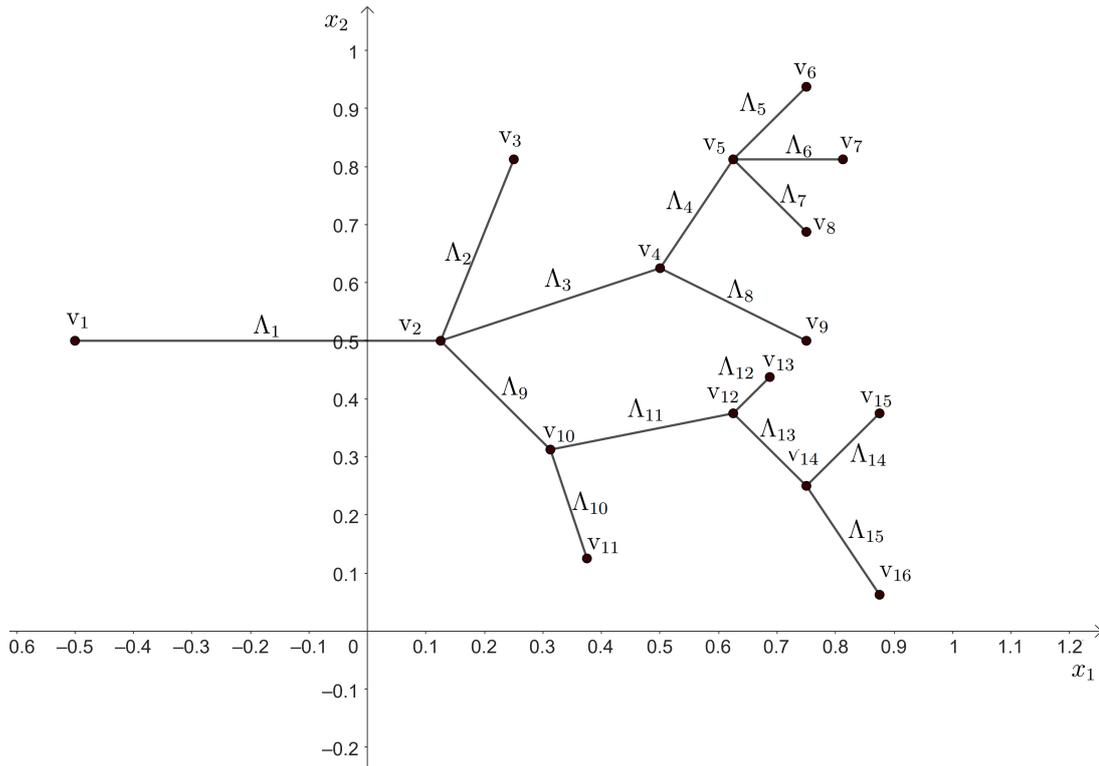


Figura 27 – Teste 7 e Teste 8: Grafo utilizado nos experimentos, com o rotulamento de seus vértices e arestas.

Escolhemos o vértice v_1 para aplicar a condição de Neumann para $\theta_N(v_1) = -1$, enquanto nos vértices externos restantes $\{v_3, v_6, v_7, v_8, v_9, v_{11}, v_{13}, v_{15}, v_{16}\}$ é aplicada uma condição de Dirichlet nula. O termo fonte $f \equiv 0$ se mantém nulo em todo o grafo, ao passo que a permeabilidade κ pode variar conforme o teste em questão.

- Teste 7: $\kappa \equiv 1$ ao longo de todo o grafo, conforme indicado na Figura 28.
- Teste 8: permeabilidade heterogênea: $\kappa = 0.5$ nas arestas $\Lambda_2, \Lambda_4, \Lambda_6, \Lambda_{11}$ e Λ_{15} , $\kappa = 0.1$ em Λ_9 e Λ_{10} , e $\kappa = 1$ nas demais arestas. A representação desta permeabilidade heterogênea encontra-se na Figura 29.

Os resultados obtidos no Teste 7 e no Teste 8 estão dispostos, simultaneamente, nas Figuras 30, 31 e 32. Como nos experimentos anteriores, o grafo \mathcal{G} está indicado por linhas negras em todas essas figuras.

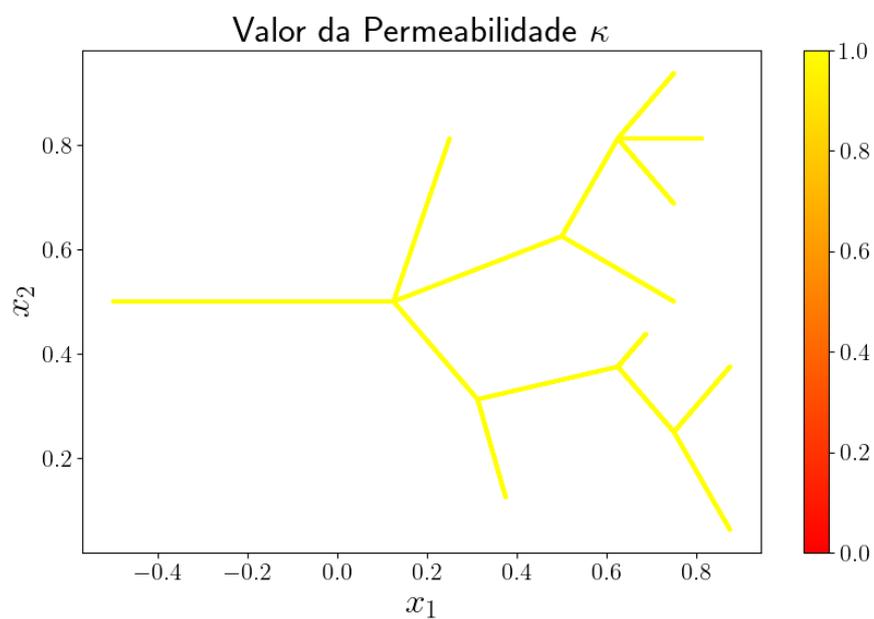


Figura 28 – Teste 7: Representação gráfica da permeabilidade homogênea.

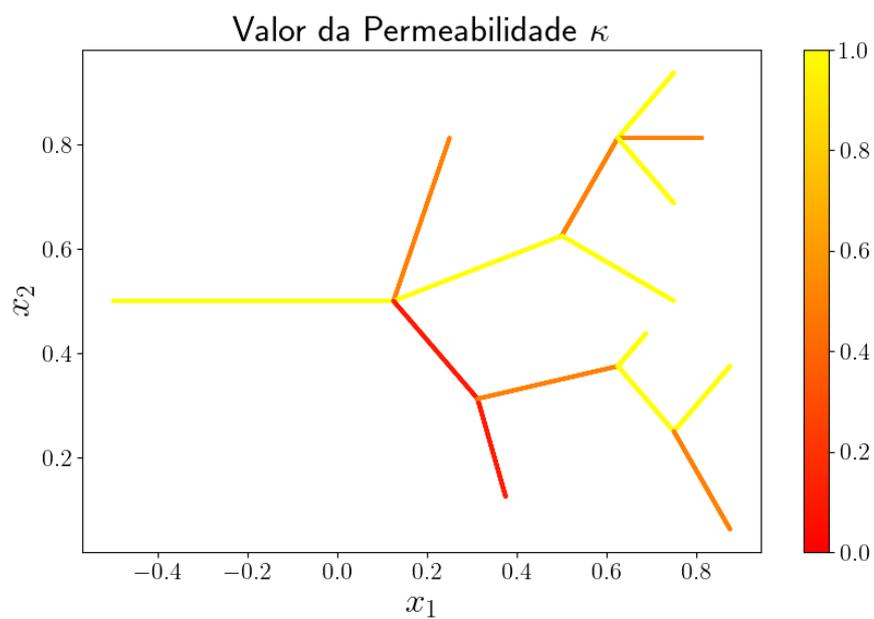
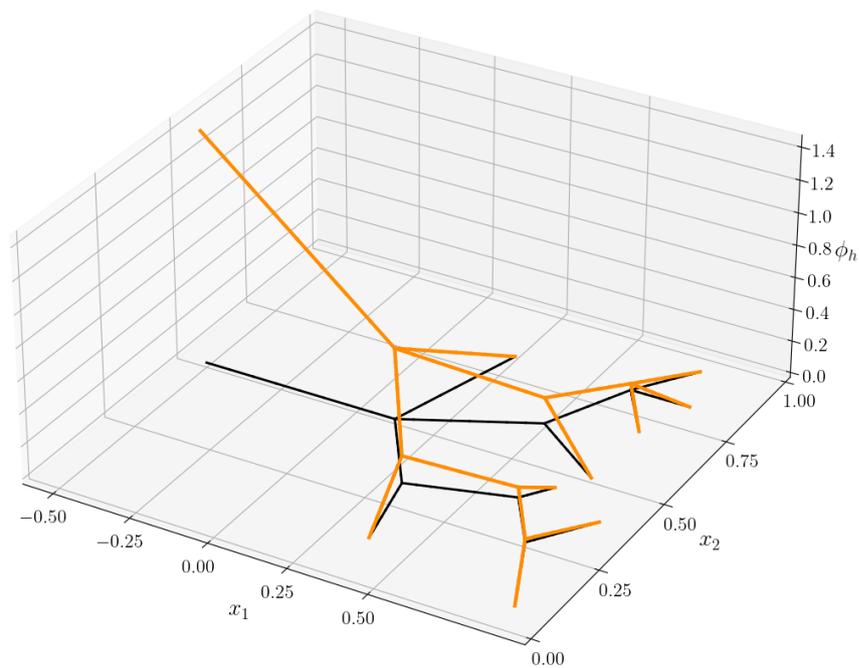
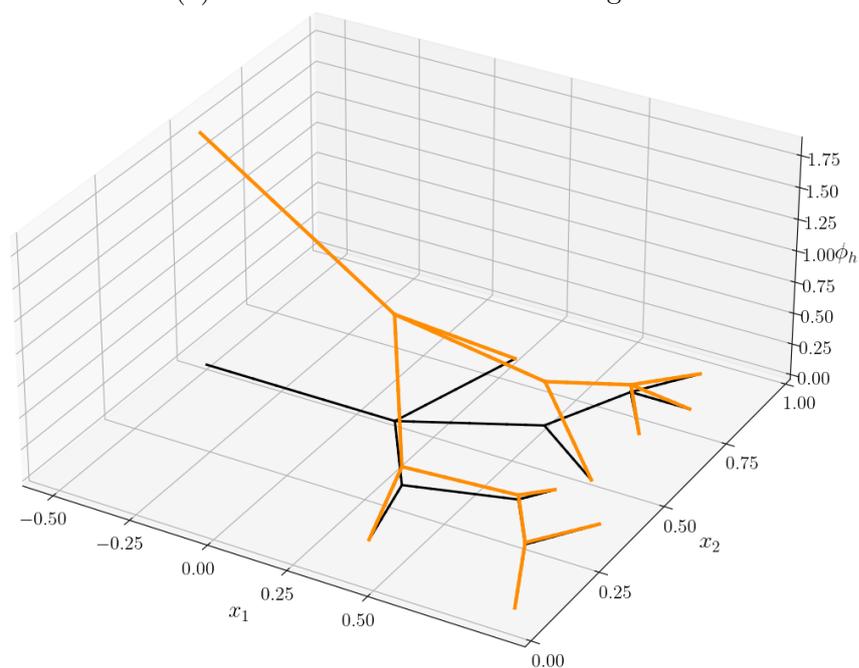


Figura 29 – Teste 8: Representação gráfica da permeabilidade heterogênea.

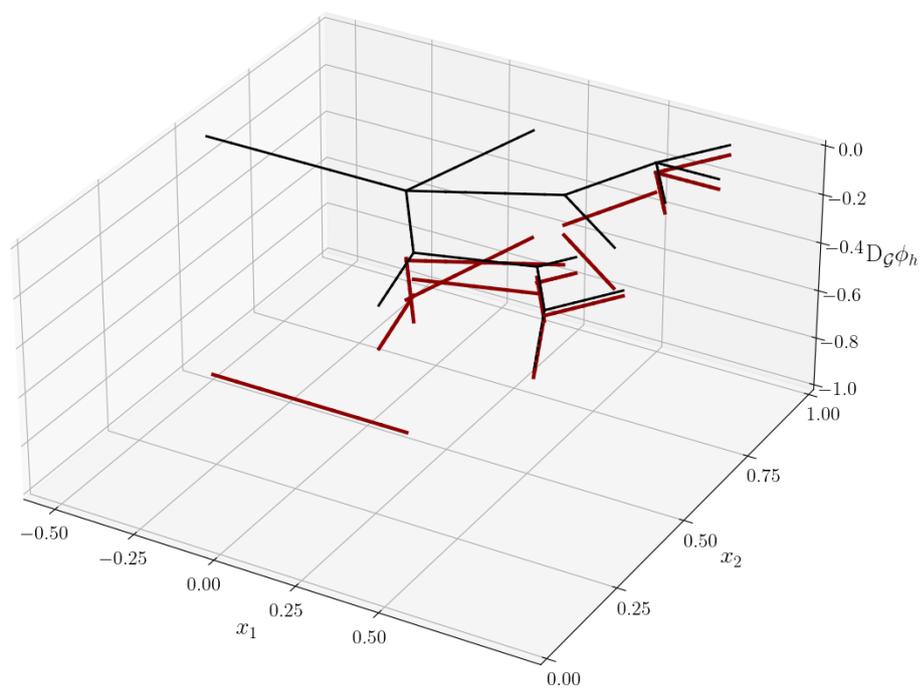


(a) Teste 7: Permeabilidade homogênea.

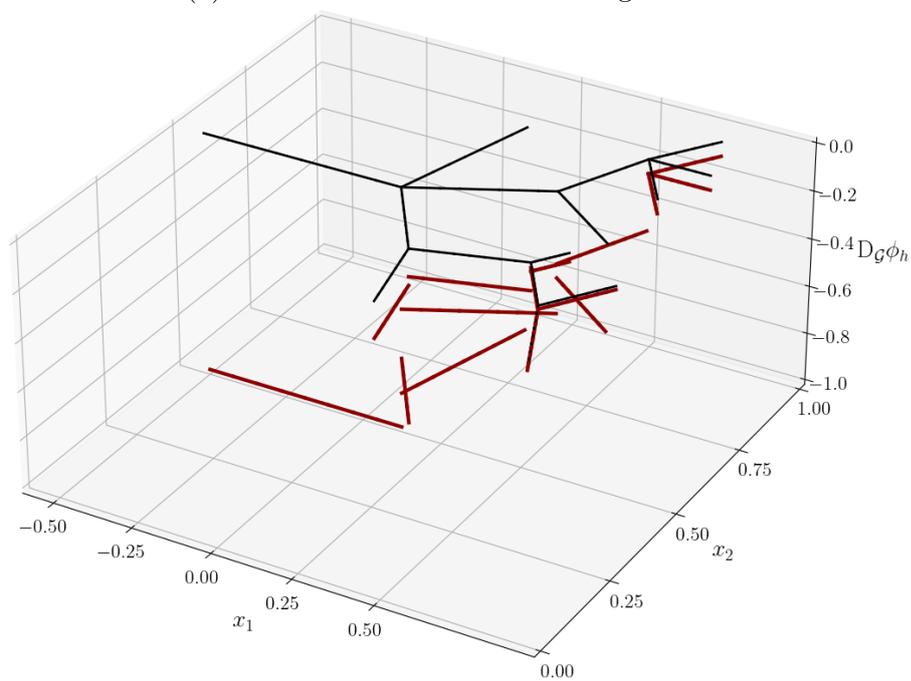


(b) Teste 8: Permeabilidade heterogênea.

Figura 30 – Teste 7 e Teste 8: Soluções aproximadas ϕ_h .

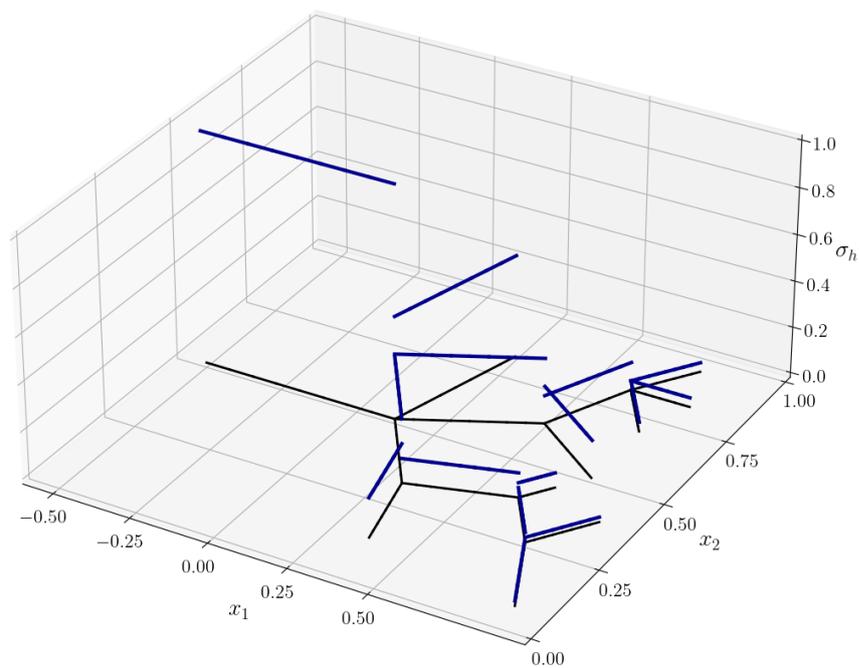


(a) Teste 7: Permeabilidade homogênea.

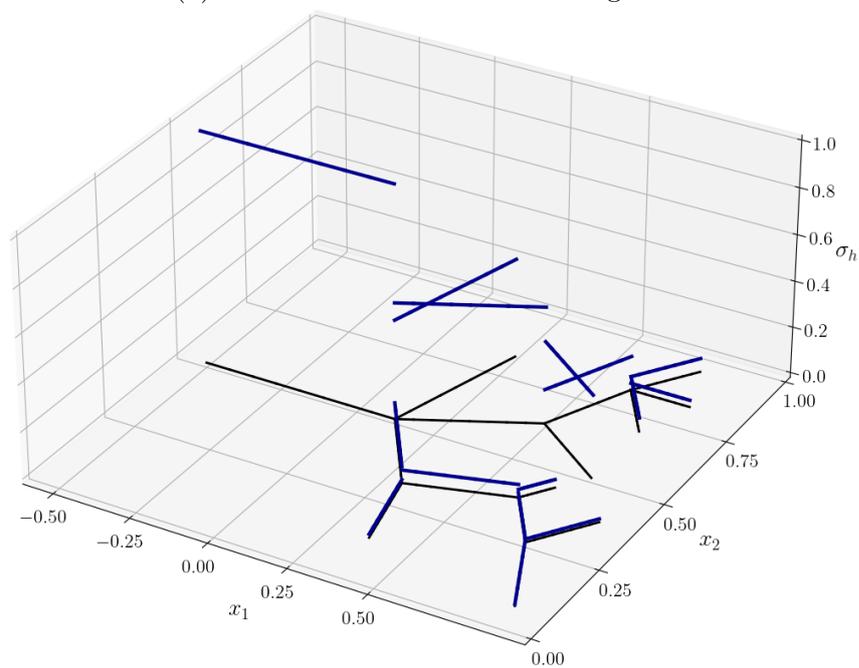


(b) Teste 8: Permeabilidade heterogênea.

Figura 31 – Teste 7 e Teste 8: Derivadas direcionais $D_{\mathcal{G}}\phi_h$ das soluções numéricas.



(a) Teste 7: Permeabilidade homogênea.



(b) Teste 8: Permeabilidade heterogênea.

Figura 32 – Teste 7 e Teste 8: Fluxos numéricos σ_h das soluções numéricas.

Em cada um dos testes, o valor do fluxo σ_h em cada uma das arestas, e o fluxo em $v_i \in \Pi_D$ foi somado para obter o fluxo de saída total. Os resultados estão dispostos na Tabela 3, em que a notação σ_{h7} e σ_{h8} é usada para indicar a proveniência dos resultados do Teste 7 e do Teste 8, respectivamente.

Λ_i	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_4	Λ_5	Λ_6	Λ_7	Λ_8
σ_{h7}	1.0000	0.4434	0.2821	0.1209	0.0403	0.0403	0.0403	0.1612
σ_{h8}	1.0000	0.4277	0.5015	0.1475	0.0590	0.0295	0.0590	0.3540
Λ_i	Λ_9	Λ_{10}	Λ_{11}	Λ_{12}	Λ_{13}	Λ_{14}	Λ_{15}	σ_{out}
σ_{h7}	0.2745	0.1689	0.1056	0.0633	0.0422	0.0211	0.0211	1.0000
σ_{h8}	0.0708	0.0147	0.0561	0.0351	0.0210	0.0140	0.0070	1.0000

Tabela 3 – Teste 7 e Teste 8: Fluxos numéricos σ_{h7} e σ_{h8} , em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G} , bem como o fluxo de saída total σ_{out} em cada teste.

Em um domínio mais vasto, mesmo com permeabilidade variada, verifica-se a lei de conservação, do ponto de vista numérico, no Teste 7 e no Teste 8. Nestas configurações testadas, um fenômeno notável é a tendência do fluxo em seguir caminhos de menor resistência. Observamos que o valor em Λ_2 não exhibe mudanças significativas, mesmo quando reduzimos sua permeabilidade pela metade. Percebe-se que existe um caminho “desimpedido” para o fluxo ao longo das arestas Λ_1, Λ_3 , e Λ_8 , onde, apesar da heterogeneidade na permeabilidade, essas três arestas mantêm conexões com $\kappa = 1.0$. No entanto, o fluxo através de Λ_8 ainda se mostra inferior ao de Λ_2 .

6 Acoplamento Grafo-Domínio Bidimensional

O presente capítulo é dedicado ao estudo do acoplamento de um problema de Poisson definido em uma região $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ e outro definido em um grafo $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^2$. Neste estudo inicial, o acoplamento se dará exclusivamente através de vértices de fronteira do grafo, que também serão pontos de Ω . Um exemplo desses dois domínios está ilustrado na Figura 33, em que o grafo da Figura 27 é superposto a uma região $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$.

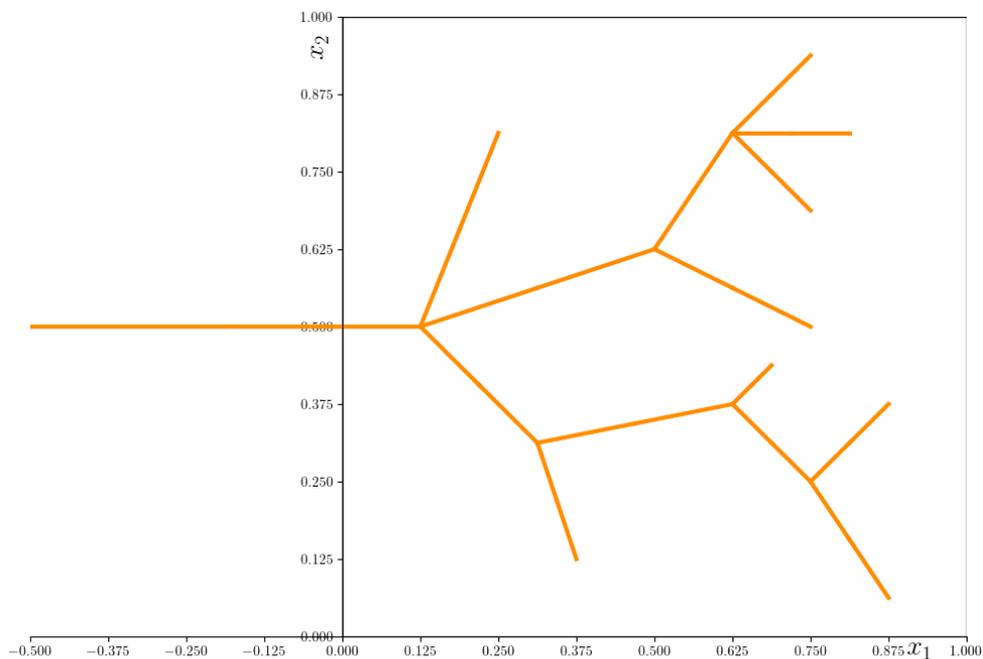


Figura 33 – Acoplamento de um domínio Ω e um grafo \mathcal{G} (em laranja).

Sobre a fronteira $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$, com $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$, são impostas condições de contorno apropriadas. Já os vértices da fronteira $\partial\mathcal{V}$ poderão estar sujeitos a condições de contorno de Dirichlet ou de Neumann, ou ao acoplamento com o domínio Ω . Assim, assumimos que $\partial\mathcal{V} = \Pi \cup \mathcal{X}$, com $\Pi \cap \mathcal{X} = \emptyset$, onde $\Pi = \Pi_D \cup \Pi_N$ é o conjunto de vértices do grafo onde são impostas condições de contorno e \mathcal{X} é o conjunto de pontos de acoplamento, sobre os quais as soluções dos dois problemas são assumidas como iguais. É importante ressaltar que as condições de contorno sobre $\partial\Omega$ e sobre $\partial\mathcal{V}$ devem ser compatíveis, de forma que o problema global esteja bem posto. De uma forma geral, essa compatibilidade é atendida exigindo que haja pelo menos um trecho de $\partial\Omega$ ou um vértice de $\partial\mathcal{V}$ sujeito à condição de contorno de Dirichlet.

Nesta configuração, definimos dois problemas de Poisson, ambos já tratados

nas Seções 1.4 e 5.2, e impomos uma condição de acoplamento. Para tal, são dadas funções de fonte, f_Ω , $f_\mathcal{G}$, de permeabilidade κ_Ω , $\kappa_\mathcal{G}$, e de contorno ϕ_D, ϕ_N, p_D, p_N , satisfazendo todas as hipóteses necessárias em cada caso.

Problema $\mathbf{P}_{\mathcal{G}-\Omega}$ - Encontrar um par de funções (ϕ, p) , com $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ e $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, de tal forma que $p(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ e

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}_\mathcal{G}(\kappa_\mathcal{G}\nabla_\mathcal{G}\phi) &= f_\mathcal{G}, & \text{em } \mathcal{G}, \\ \phi &= \phi_D, & \text{sobre } \Pi_D, \\ \kappa_\mathcal{G}\nabla_\mathcal{G}\phi \cdot \mathbf{n} &= \phi_N, & \text{sobre } \Pi_N, \\ \\ -\operatorname{div}(\kappa_\Omega\nabla p) &= f_\Omega, & \text{em } \Omega, \\ p &= p_D, & \text{sobre } \Gamma_D, \\ \kappa_\Omega\nabla p \cdot \mathbf{n} &= p_N, & \text{sobre } \Gamma_N. \end{aligned}$$

6.1 Estratégia para o Acoplamento

Neste trabalho, utilizamos a continuidade nodal do método de elementos finitos Lagrangianos em H^1 para realizar o acoplamento entre os problemas. O procedimento adotado segue os seguintes pontos:

- As formulações variacionais em cada domínio são definidas exatamente como descrito nos Capítulos 1 e 4.
- É definida uma malha global composta por segmentos de retas e por elementos bidimensionais (sempre assumindo $k = 1$), a partir da respectiva discretização das arestas dos grafos e do domínio bidimensional.
- As incógnitas globais estarão univocamente associadas aos nós desta malha global.
- Os vértices onde ocorrem o acoplamento deverão ser pontos nodais da malha global pertencentes tanto a um elemento de aresta quanto a um elemento bidimensional. Com isso, cada nó acoplado estará associado a um único grau de liberdade global, ou seja, $c_i = \phi_h(\mathbf{x}) = p_h(\mathbf{x})$ para $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$.
- A montagem do sistema global é idêntica à realizada nos Capítulos referidos, com os nós acoplados recebendo contribuições das matrizes de rigidez de Ω assim como de \mathcal{G} .

Note que tal procedimento garante a construção de uma solução global nodalmente contínua e o consequente acoplamento dos problemas. Para ilustrar como é

feito este acoplamento, tomemos o exemplo de um único elemento unidimensional K_Λ conectado a um único elemento quadrado K_Ω , ilustrado na Figura 34. Nessa construção, não consideraremos condições de contorno pois estamos apenas ilustrando a natureza das matrizes em dois elementos acoplados.

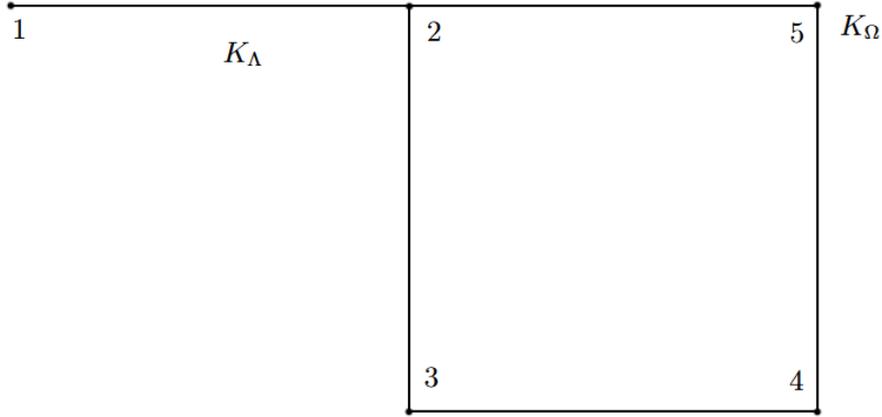


Figura 34 – Representação do acoplamento de K_Λ com K_Ω , com numeração dos graus de liberdade do domínio.

Neste caso ilustrado, a matriz de rigidez teria a forma

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}(\psi_1, \psi_1) & \mathcal{A}(\psi_2, \psi_1) & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{A}(\psi_1, \psi_2) & \mathcal{A}(\psi_2, \psi_2) + a(q_2, q_2) & a(q_3, q_2) & a(q_4, q_2) & a(q_5, q_2) \\ 0 & a(q_2, q_3) & a(q_3, q_3) & a(q_4, q_3) & a(q_5, q_3) \\ 0 & a(q_2, q_4) & a(q_3, q_4) & a(q_4, q_4) & a(q_5, q_4) \\ 0 & a(q_2, q_5) & a(q_3, q_5) & a(q_4, q_5) & a(q_5, q_5) \end{bmatrix}$$

E o vetor de cargas teria a forma

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathcal{L}(\psi_1) \\ \mathcal{L}(\psi_2) + L(q_2) \\ L(q_3) \\ L(q_4) \\ L(q_5) \end{bmatrix}$$

Ao final da montagem, resolve-se o sistema linear $\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{L}$. Ressaltamos que este método, em sua simplicidade de execução, funciona precisamente em virtude da natureza nodalmente contínua dos elementos Lagrangianos, e indicamos as referências [15, 19, 16] para um estudo mais aprofundado de acoplamento em modelagens mais complexas.

A seguir, apresentamos três estudos numéricos, variando a geometria dos domínios e parâmetros de modo a testar o método em outros cenários. Nos exemplos estudados, é utilizada uma malha de elementos quadrilaterais uniformes e os grafos são definidos de forma que seus vértices que estão sobre Ω coincidam com um nó da malha de quadriláteros.

6.2 Teste 9: Acoplamento em um Ponto

Inicialmente, para nos familiarizar com a natureza do problema, escolhamos para \mathcal{G} apenas um segmento de reta ligando os pontos $(-0.5, 0.5)$ e $(0.5, 0.5)$. Tomamos $\kappa_{\mathcal{G}} = \kappa_{\Omega}1$, $f_{\mathcal{G}} = f_{\Omega} = 0$, $\Pi_N = (-0.5, 0.5)$, em que $\phi_N(-0.5, 0.5) = -1$, de modo a impor um fluxo unitário neste ponto de entrada. O outro ponto $(0.5, 0.5)$ exterior do grafo \mathcal{G} é escolhido como ponto de acoplamento. Sendo assim, o conjunto \mathcal{X} é formado apenas pelo ponto $(0.5, 0.5)$, resultando em $\Pi_D = \emptyset$. Para Ω , tomamos $\Gamma_D = \{\mathbf{x} \in \Omega \mid x_1 = 1\}$, $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$, onde $p_D = p_N = 0$. Dividimos o domínio em uma malha quadrilateral de refinamento 8×8 e subdividimos \mathcal{G} em dois elementos. Uma ilustração dessa geometria acoplada segue na Figura 35.

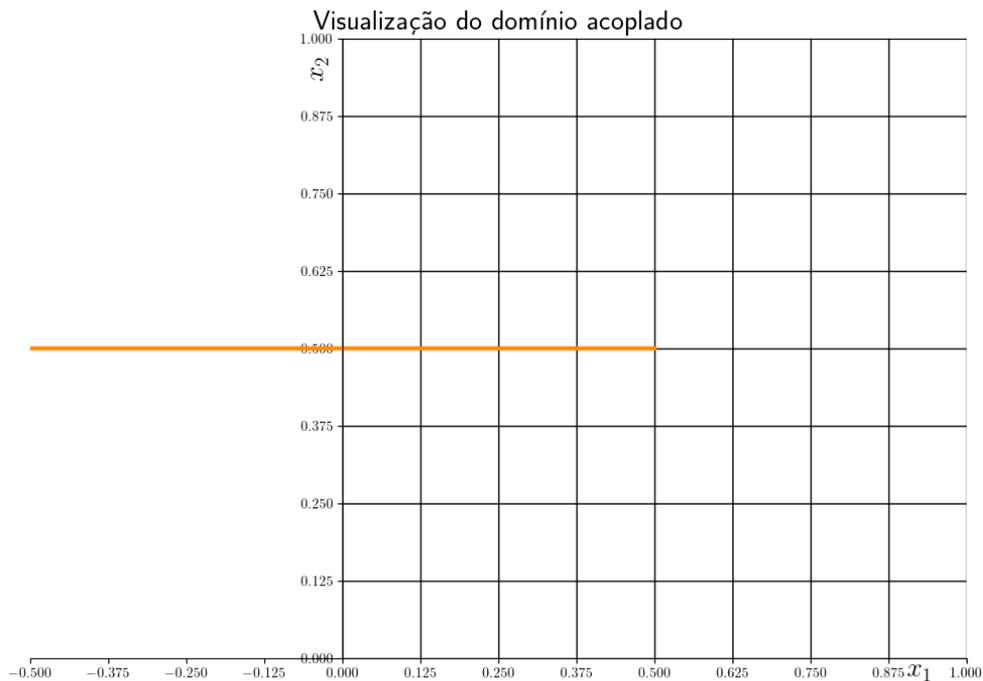


Figura 35 – Teste 9: Ilustração do domínio Ω discretizado, assim como o grafo \mathcal{G} (em laranja).

Em termos hidrodinâmicos, neste problema estamos impondo um fluxo de fluido de valor 1.0 através do domínio unidimensional que escoo para o domínio bidimensional, e fechamos as saídas deste fluido em três das bordas de Ω , enquanto impomos potencial zero em Γ_D . Almejamos verificar, posteriormente, se o fluxo total que escoo pela borda restante $\int_{\Gamma_D} -\kappa \nabla p \cdot \hat{\mathbf{n}} dS$ vai ser, de fato, 1.0, satisfazendo a lei de conservação de massa numericamente.

Novamente, são utilizados elementos unidimensionais e quadrilaterais lineares e bilineares por partes, respectivamente. Utilizando o método de elementos finitos para

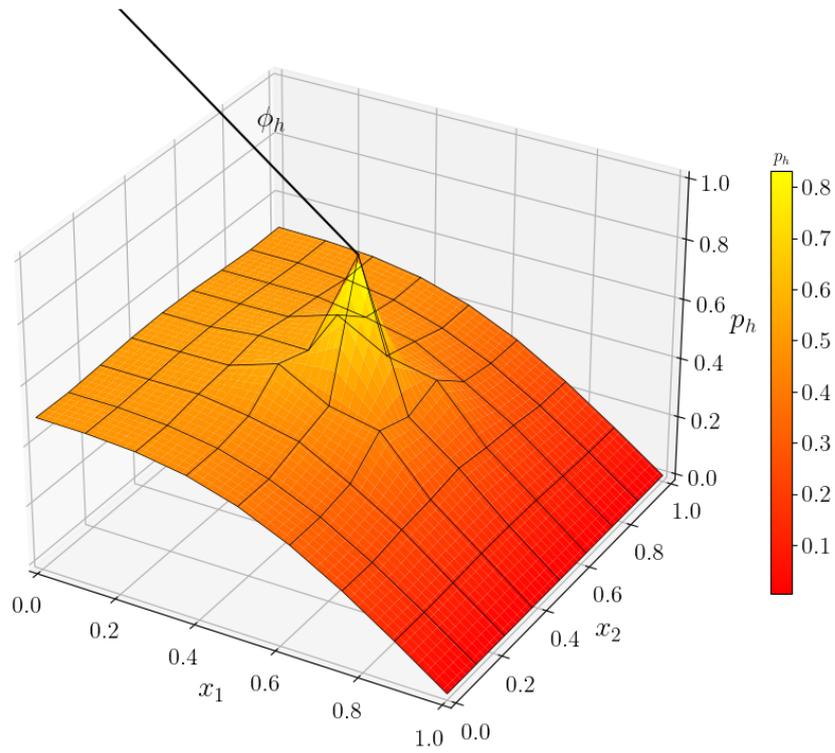


Figura 36 – Teste 9: Representação da solução aproximada (ϕ_h, p_h) do problema de Poisson acoplado, restrita ao domínio $(0, 1) \times (0, 1)$.

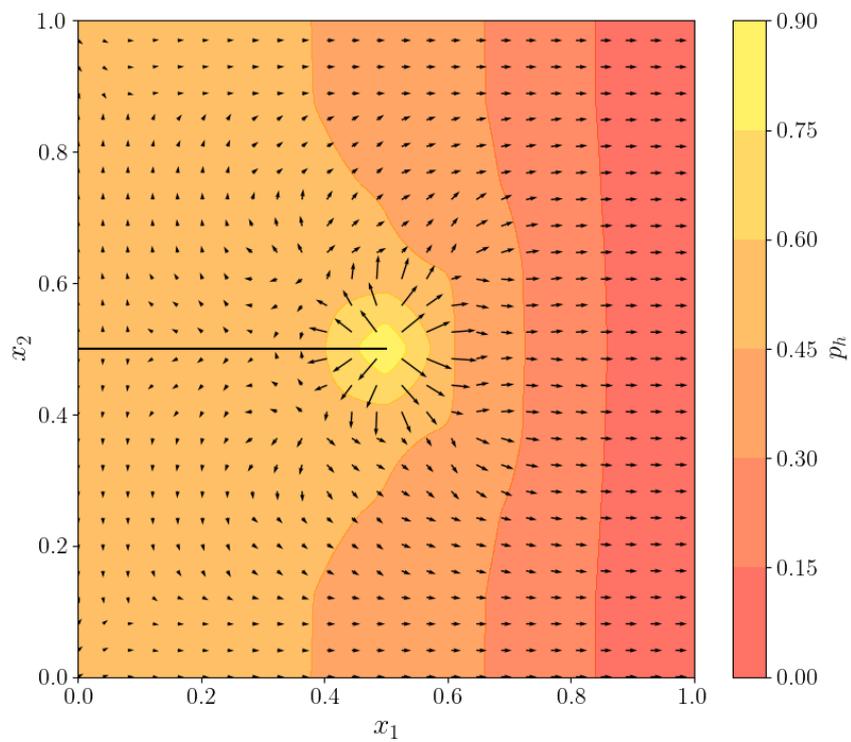


Figura 37 – Teste 9: Fluxo $-\kappa \nabla p_h$ no domínio bidimensional.

resolver o Problema $P_{G-\Omega}$, a representação gráfica do par de soluções (ϕ_h, p_h) , restritas à região Ω , encontra-se na Figura 36, em que ϕ_h está representada por uma linha negra, enquanto p_h é representada pela superfície colorida. Na Figura 37 o campo vetorial de fluxo $-\kappa\nabla p_h$ no domínio Ω está superposto a um fundo colorido representando a magnitude de p_h , conforme a tabela de cores ao lado.

A implementação computacional do problema acoplado também realizou o cálculo aproximado do fluxo que escoar ao longo da aresta $x_1 = 1$, dando como resultado o mesmo valor unitário 1.00 do fluxo exato de entrada, confirmando que o modelo ainda respeita a lei de conservação. Outra característica a ser notada é que a natureza linear por partes da queda de potencial no grafo se manteve, mesmo com o acoplamento. Com este resultado, permanecemos usando uma malha mais grossa (de dois elementos por aresta) para os grafos nos próximos experimentos, visto que a expectativa é de um decaimento linear por partes.

6.3 Teste 10: Acoplamento em Vários Pontos

A fim de verificar a robustez do método em uma configuração não tão simples, revisitamos o grafo da Figura 27 usando no Teste 7 e Teste 8, em que impomos a condição de contorno de Neumann no vértice $v_1 = (-0.5, 0.5)$. Desta vez, os demais vértices de $\partial\mathcal{V}$ são usados para compor \mathcal{X} , em que a condição de acoplamento é imposta, resultando que $\Pi_D = \emptyset$. Sobre $\partial\Omega$, as mesmas condições de contorno do Teste 9 são impostas.

Cada aresta Λ_i do grafo é subdividida uma vez. No domínio bidimensional Ω , empregamos uma malha de 32×32 elementos quadrilaterais uniformes, de modo a obter mais detalhes na visualização dos dados ao final do processo. O grafo foi construído de forma que os vértices de \mathcal{X} coincidam com as posições dos nós da malha discretizada. Uma ilustração do acoplamento segue na Figura 38. Os resultados da solução aproximada (ϕ_h, p_h) e do fluxo $-\kappa\nabla\phi_h$ estão representados graficamente nas Figuras 39 e 40, respectivamente, restritos ao domínio Ω , e seguindo o mesmo padrão gráfico empregado no Teste 9.

Adicionalmente, verificamos, novamente, que a integral do fluxo sobre a aresta de Dirichlet resulta em 1.00, confirmando que a lei de conservação é verificada numericamente. Outro ponto a ser notado é que o potencial no grafo permanece com um decaimento linear. Isto é ainda mais perceptível pela Figura 41, onde vemos que o fluxo é constante em cada aresta. De modo a melhor visualizar os dados, oferecemos a Tabela 4 com os valores numéricos do fluxo em cada aresta, assim como o fluxo de saída, tal como foi feito na Seção 5.4.3. Como esperado, o somatório do fluxo nos nós de acoplamento é o mesmo de entrada, 1.00.

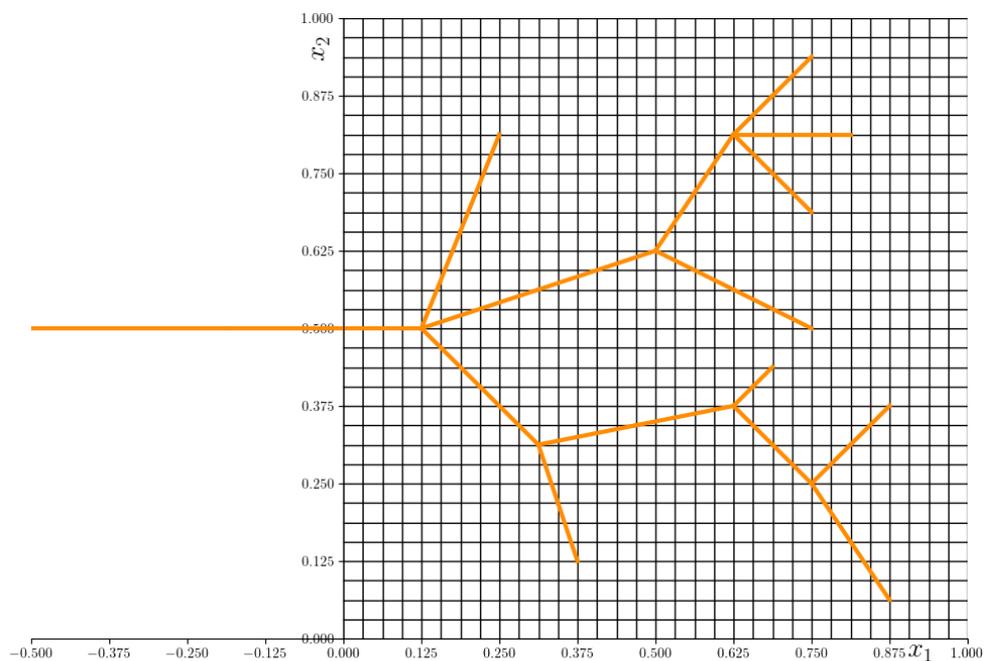


Figura 38 – Teste 10: Domínio Ω discretizado, assim como o grafo \mathcal{G} (em laranja).

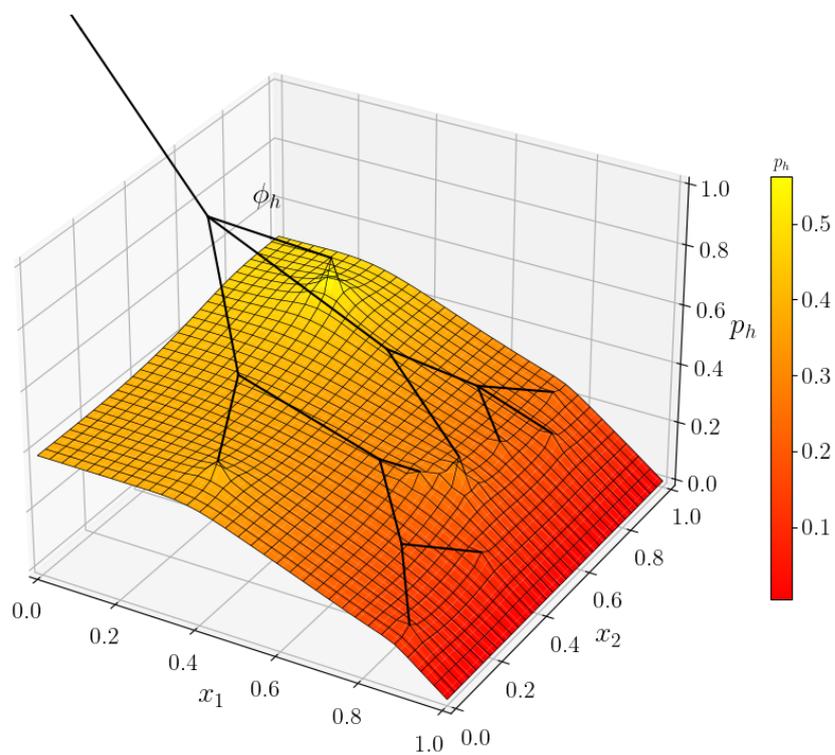


Figura 39 – Teste 10: Solução aproximada (ϕ_h, p_h) do problema de Poisson acoplado.

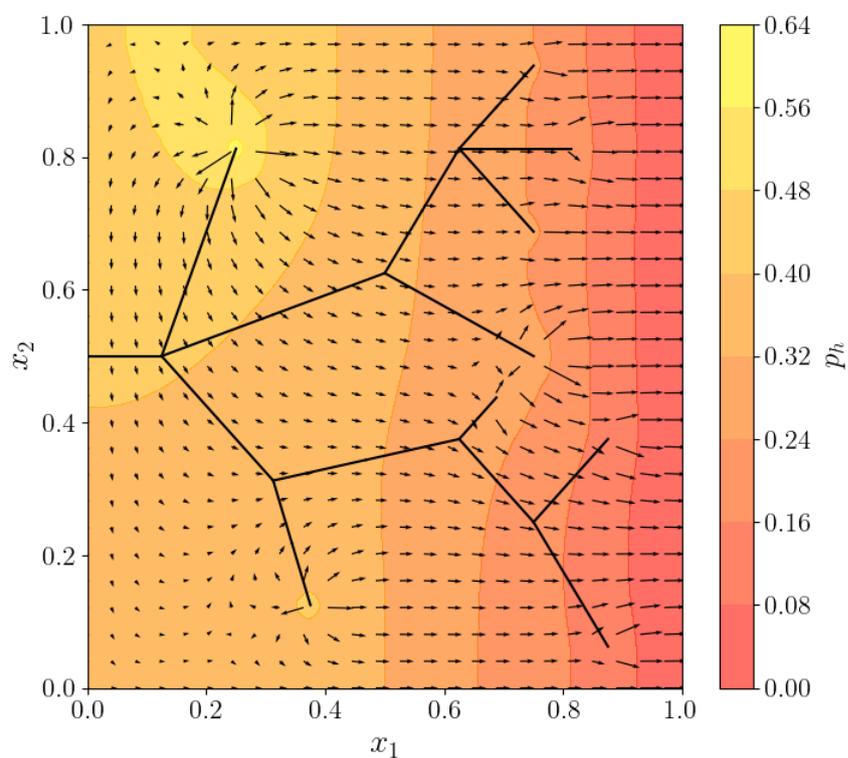


Figura 40 – Teste 10: Fluxo aproximado $-\kappa \nabla p_h$ no domínio bidimensional Ω .

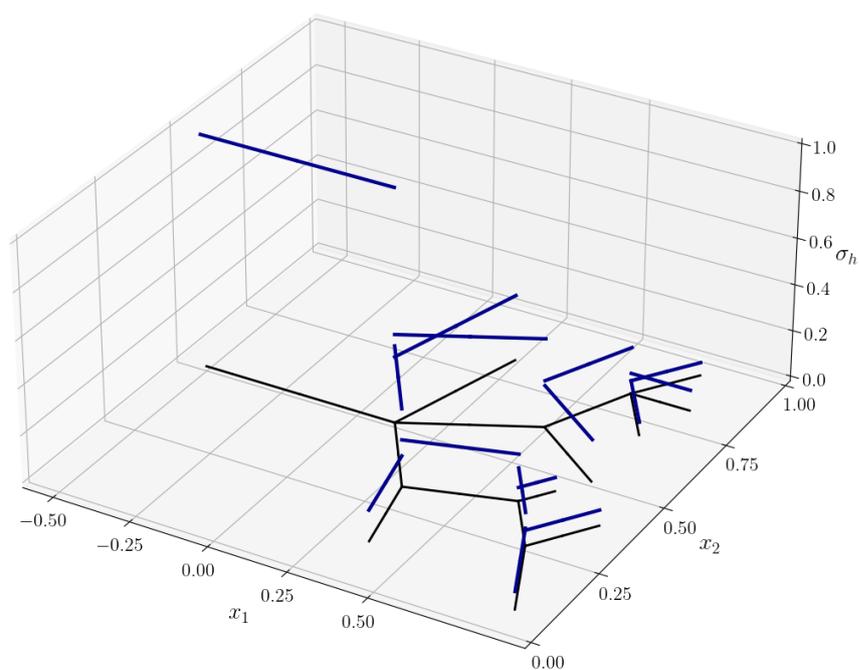


Figura 41 – Teste 10: Fluxo aproximado σ_h (em azul) observado sobre o grafo \mathcal{G} .

Λ_i	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_4	Λ_5	Λ_6	Λ_7	Λ_8
σ_h	1.0000	0.2854	0.3818	0.2017	0.0566	0.0889	0.0562	0.1801
Λ_i	Λ_9	Λ_{10}	Λ_{11}	Λ_{12}	Λ_{13}	Λ_{14}	Λ_{15}	σ_{out}
σ_h	0.3328	0.1320	0.2009	0.0587	0.1421	0.0667	0.0754	0.9999

Tabela 4 – Teste 10: Fluxo aproximado σ_h em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G} , bem como o fluxo de saída total σ_{out} nos vértices acoplados.

6.4 Teste 11: Acoplamento Duplo

Por fim, simulamos o acoplamento de dois grafos por meio de um domínio bidimensional. Este é um exemplo interessante onde sistemas de canais são conectados por um meio intermediário, sem que haja ligação direta entre eles.

O domínio Ω e o primeiro grafo, \mathcal{G}_1 são os mesmos do Teste 10. O segundo grafo, \mathcal{G}_2 , sendo apenas um segmento de reta, é inserido diretamente no centro do domínio Ω . Como antes, o domínio Ω é particionado por uma malha de 32×32 e as arestas dos grafos são subdivididas uma vez. Uma ilustração desse conjunto geométrico está na Figura 42.

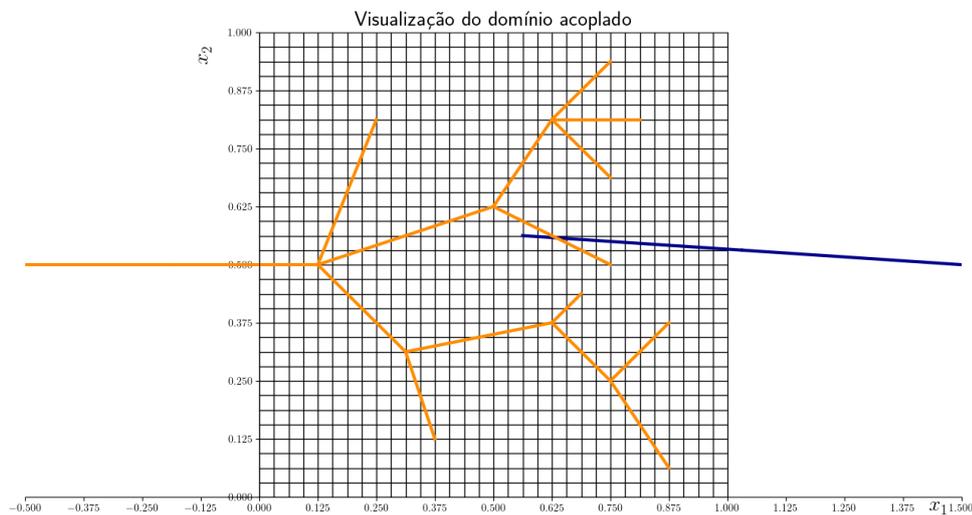


Figura 42 – Teste 11: Acoplamento duplo do domínio Ω com o grafo \mathcal{G}_1 (em laranja) e o grafo \mathcal{G}_2 (em azul).

Sobre esses dois grafos, definimos dois conjuntos \mathcal{X}_1 e \mathcal{X}_2 para os pontos de acoplamento – um para cada grafo, correspondentes aos vértices externos de cada um dos grafos incluídos no interior de Ω . Para impor as condições de contorno, escolhemos $\Pi_{D,1} = \Pi_{N,2} = \Gamma_D = \emptyset$, $\Gamma_N = \partial\Omega$ onde impomos $p_N = 0$, $\Pi_{N_1} = \{v_1\}$ com $\phi_{N_1} = 1$. Por fim, $\Pi_{D_2} = \{\partial\mathcal{V}_2 \setminus \mathcal{X}_2\}$, com $\phi_{D,2} = 0$.

Em resumo, são adotadas as seguintes condições de contorno: Neumann não homogênea sobre o vértice de entrada de \mathcal{G}_1 , Neumann homogênea sobre todo o contorno $\partial\Omega$ e Dirichlet homogênea sobre o vértice de saída de \mathcal{G}_2 . Com isso, dadas as permeabilidades $\kappa_\Omega, \kappa_{\mathcal{G}_1}, \kappa_{\mathcal{G}_2}$, montamos o seguinte problema acoplado.

Problema $\mathbf{P}_{\mathcal{G}_1-\Omega-\mathcal{G}_2}$ - Encontrar a tríade de funções (ϕ_1, ϕ_2, p) , em que $\phi_1 : \mathcal{G}_1 \rightarrow \mathbb{R}$, $\phi_2 : \mathcal{G}_2 \rightarrow \mathbb{R}$ e $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, tais que $p(\mathbf{x}) = \phi_1(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}_1$, $p(\mathbf{x}) = \phi_2(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathcal{X}_2$, satisfazendo os sistemas

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}_{\mathcal{G}_1}(\kappa_{\mathcal{G}_1} \nabla_{\mathcal{G}_1} \phi_1) &= 0, & \text{em } \mathcal{G}_1, \\ \kappa_{\mathcal{G}_1} \nabla_{\mathcal{G}_1} \phi_1 \cdot \mathbf{n} &= 1, & \text{sobre } \Pi_{N_1}, \\ \\ -\operatorname{div}_{\mathcal{G}_2}(\kappa_{\mathcal{G}_2} \nabla_{\mathcal{G}_2} \phi_2) &= 0, & \text{em } \mathcal{G}_2, \\ \phi_2 &= 0, & \text{sobre } \Pi_{D_2}, \\ \\ -\operatorname{div}(\kappa_\Omega \nabla p) &= 0, & \text{em } \Omega, \\ \kappa_\Omega \nabla p \cdot \mathbf{n} &= 0, & \text{sobre } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Em problemas de Poisson clássicos, uma condição de Neumann sobre toda a fronteira $\partial\Omega$ gera uma matriz singular, a menos que imponhamos outras restrições no problema variacional. No entanto, observamos que, com as condições impostas no acoplamento, a solvabilidade do problema é recuperada.

A solução aproximada em cada domínio, assim como o fluxo σ_h observado em Ω , são mostrados nas Figuras 43 e 44, seguindo o mesmo padrão gráfico empregado em testes anteriores.

Ao fim do processo, foi novamente calculado o fluxo de saída no grafo \mathcal{G}_2 , e verificamos um fluxo de valor 1.00, exatamente como o imposto pela condição de contorno de Neumann. Verificamos que, mesmo com um domínio intrincado, com dois acoplamentos e um único ponto de saída, a lei de conservação se mantém, e toda a diferença de potencial e o fluxo são modelados numericamente como previsto fisicamente através das interações entre os sistemas de equações. Disponibilizamos graficamente, na Figura 45, e numericamente, na Tabela 5 os fluxos constantes observados em cada aresta de \mathcal{G}_1 . O valor do fluxo no grafo \mathcal{G}_2 é constante em todo o domínio, e seu valor observado é de 1.00, como dito anteriormente.

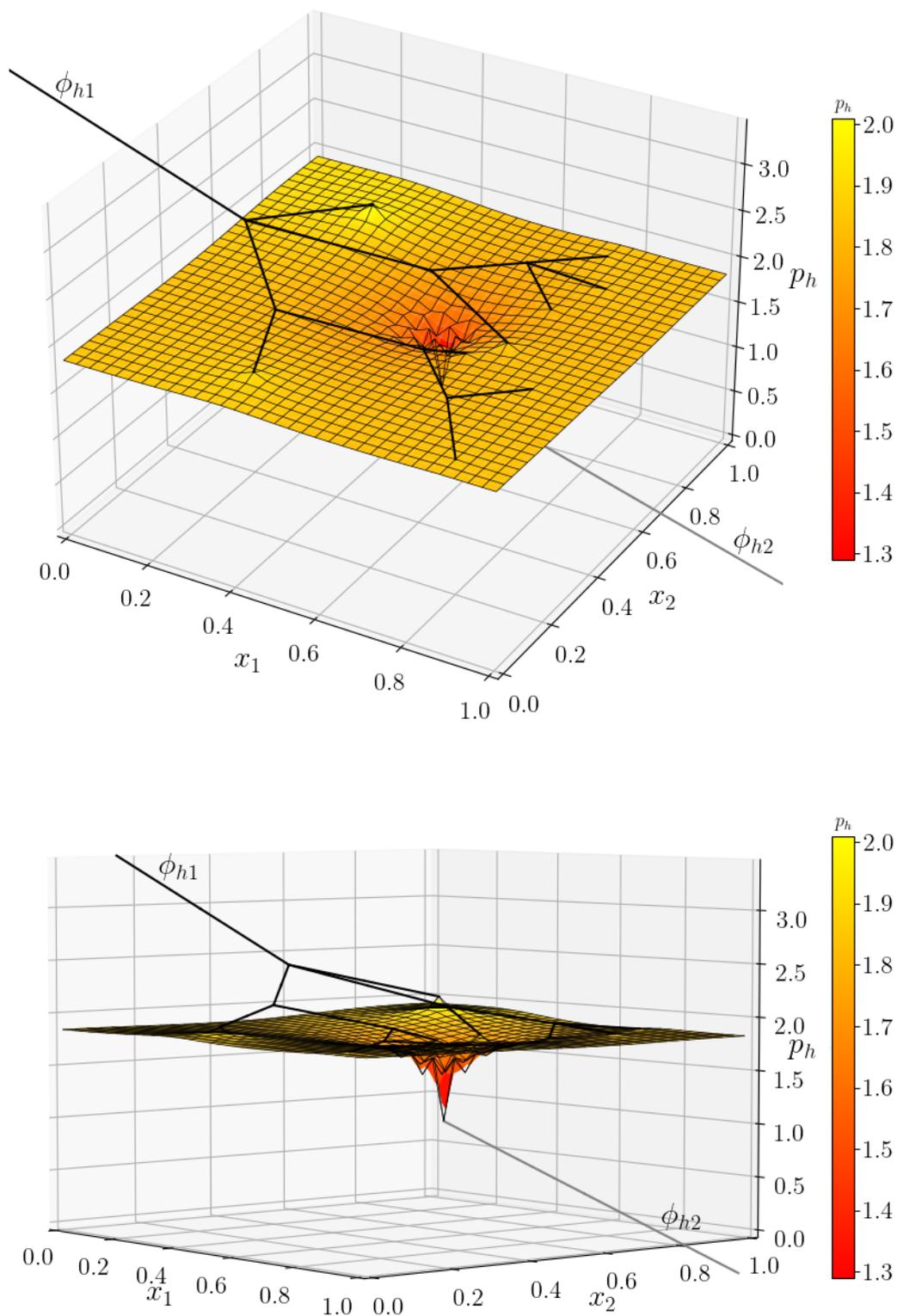


Figura 43 – Teste 11: Solução aproximada $(\phi_{h1}, \phi_{h2}, p_h)$ sob dois pontos de vista diferentes.

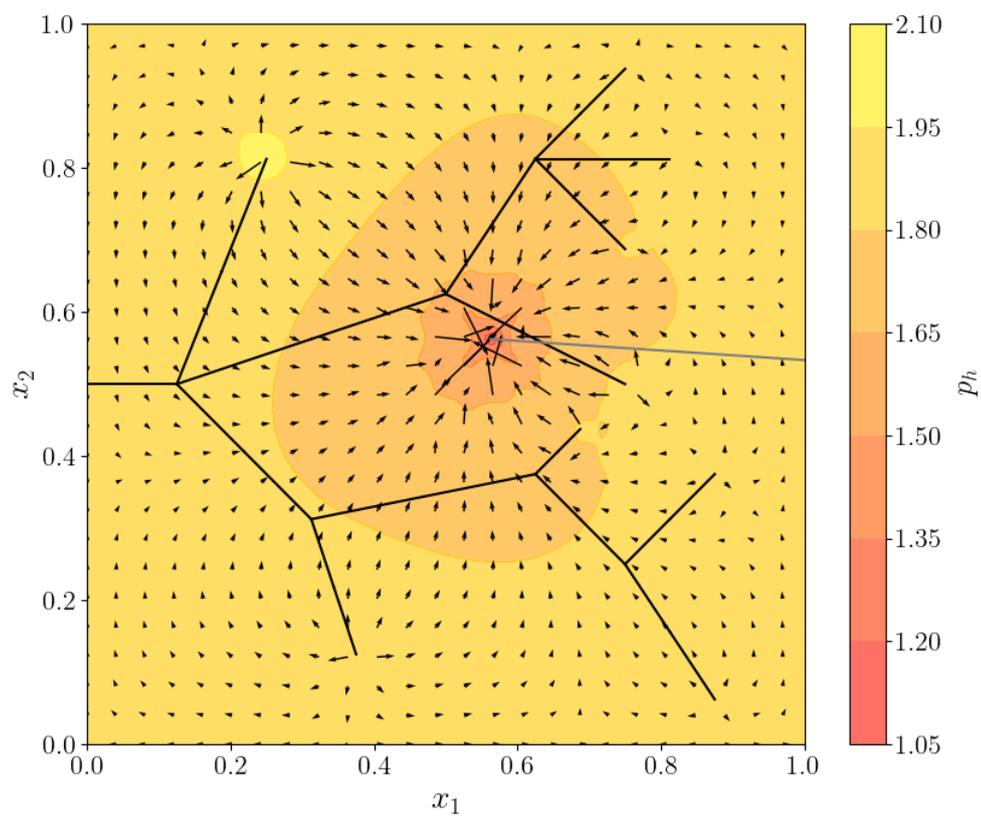


Figura 44 – Teste 11: Fluxo $-\kappa\nabla p_h$ no domínio bidimensional Ω .

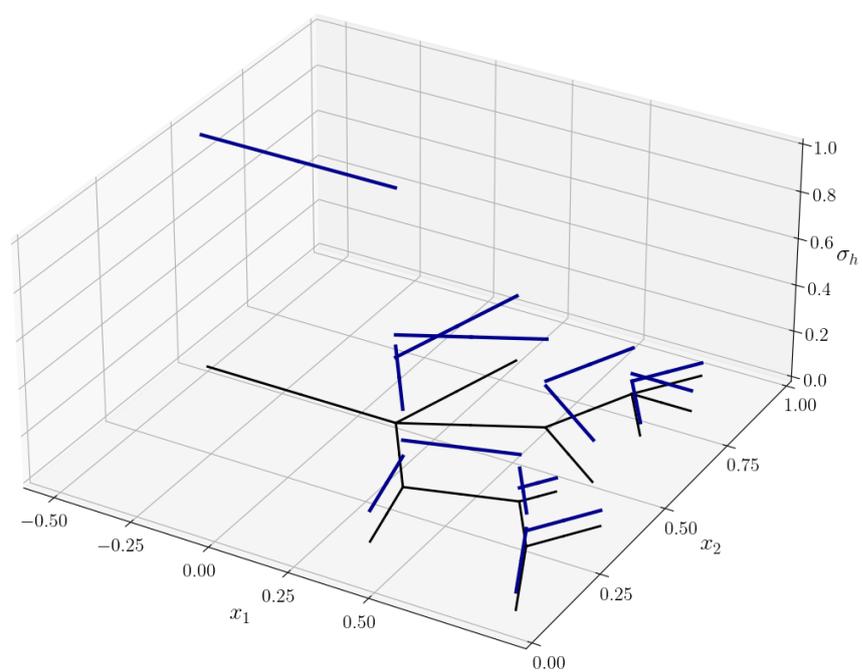


Figura 45 – Teste 11: Valor do fluxo aproximado σ_h observado sobre o grafo \mathcal{G}_1 .

Λ_i	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_4	Λ_5	Λ_6	Λ_7	Λ_8
σ_h	1.0000	0.3375	0.3460	0.1686	0.0454	0.0500	0.0732	0.1774
Λ_i	Λ_9	Λ_{10}	Λ_{11}	Λ_{12}	Λ_{13}	Λ_{14}	Λ_{15}	σ_{out}
σ_h	0.3166	0.1565	0.1601	0.1030	0.0571	0.0325	0.0245	1.0000

Tabela 5 – Teste 11: Fluxo numérico σ_h em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G}_1 , bem como o fluxo de saída total σ_{out} nos vértices acoplados.

7 Conclusões

Ao longo deste trabalho, elaboramos uma base teórica sólida para a aproximação numérica da equação de Poisson em grafos por meio do método de elementos finitos aplicado à abordagem de Galerkin em sua formulação primal em espaços H^1 . Essa abordagem nos permitiu adaptar conceitos clássicos de análise numérica e equações diferenciais parciais para o contexto de grafos, abrindo caminho para a modelagem de problemas complexos em redes. Os Capítulos 1 e 2 foram dedicados a uma revisão detalhada de resultados clássicos [8, 3, 10, 6, 26], estabelecendo as ferramentas matemáticas necessárias para a formulação e análise do referido problema em grafos. Essa revisão foi essencial para garantir que os desenvolvimentos posteriores fossem fundamentados em uma teoria bem estabelecida.

É relevante destacar que, embora o estudo e o desenvolvimento de métodos numéricos para a resolução de EDPs em domínios de grafos seja um tema de grande interesse do ponto de vista teórico e de aplicações [15, 14, 1, 19, 13], há pouca cobertura de referências bibliográficas na língua portuguesa. Nesse sentido, este texto buscou o equilíbrio no detalhamento dos procedimentos teóricos e numéricos. Em particular, delineamos a demonstração da existência e unicidade de solução para a formulação variacional do problema de Poisson em grafos utilizando o teorema de Lax-Milgram, assim como verificamos numericamente a convergência do método para diferentes condições de contorno, obtendo resultados compatíveis com os observados nos métodos clássicos para uma e duas dimensões [10, 3]. Esses resultados validam a precisão e robustez do método proposto e reforçam sua aplicabilidade em problemas práticos.

Diversos testes numéricos foram apresentados, explorando a solução do problema de Poisson em grafos com diferentes geometrias e sob diferentes condições de contorno. Os resultados obtidos indicam que os objetivos do trabalho foram alcançados, com as soluções dos testes numéricos apresentando comportamento consistente com a teoria. No Capítulo 6, apresentamos uma abordagem simplificada, baseada em soluções H^1 -conformes, do acoplamento entre um grafo e um domínio bidimensional, uma configuração de grande interesse para aplicações mencionadas ao longo do texto, tais como o escoamento em meios porosos fraturados [27] e a modelagem de escoamentos em redes em aplicações biológicas [19, 13, 7]. Esses resultados nos motivam a seguir com estudos futuros, explorando novas direções e aprimorando a metodologia aqui desenvolvida.

Entre as possíveis contribuições futuras, destacamos a necessidade de uma exploração mais aprofundada de alguns resultados teóricos do texto, tal como a desigualdade de Poincaré (aliada a uma estimativa numérica de sua constante homônima), tópico mencionado na Seções 3.2 e 4.1. Esses resultados nos permitiriam uma análise mais geral

da existência e unicidade de solução do problema estudado em grafos. Outra linha de pesquisa promissora é a extensão da metodologia para formulações de elementos finitos mistas e híbridas [24, 25, 4]. Um estudo comparativo entre os resultados obtidos neste trabalho e as novas formulações seria fundamental para avaliar as vantagens e desvantagens de cada abordagem.

Além disso, pretendemos investigar as estratégias e abordagens de acoplamento nos métodos supracitados, que requerem um aporte teórico mais robusto e um estudo muito mais aprofundado. Com estes resultados, a etapa seguinte consistiria no estudo de outras EDPs no domínio, tais como as equações de Stokes e de Brinkman seguindo o caminho traçado na literatura. Em especial, destacamos interesse particular na referência [15], que aborda a equação de Stokes em formulações mistas com aplicação em modelos biofísicos.

Em síntese, este trabalho representa uma contribuição inicial no desenvolvimento de métodos numéricos para a solução de EDPs em grafos, buscando estabelecer uma base teórica e prática que possa ser útil para futuras investigações. Reconhecemos que há muito a ser explorado e aprimorado e esperamos que as ideias aqui apresentadas possam servir como ponto de partida para pesquisas futuras. Acreditamos que os resultados obtidos demonstram o potencial da abordagem proposta e abrem caminho para aplicações em problemas reais de interesse científico e tecnológico e que possam inspirar novos estudos nessa área promissora.

Referências

- [1] M. Arioli and M. Benzi. A finite element method for quantum graphs. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 38(3):1119–1163, 2018.
- [2] A. K. Aziz and P. Monk. Continuous finite elements in space and time for the heat equation. *Mathematics of Computation*, 52(186):255–274, 1989.
- [3] E. B. Becker, G. F. Carey, and J. T. Oden. Finite elements - an introduction. 1981.
- [4] D. Boffi, F. Brezzi, and M. Fortin. *Mixed Finite Element Methods and Applications*. Springer Series in Computational Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [5] S. C. Brenner and L. R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, volume 15 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, 2008.
- [6] D. A. Castro, P. R. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes, and O. Durán. Hierarchical high order finite element bases for $H(\text{div})$ spaces based on curved meshes for two-dimensional regions or manifolds. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 301:241–258, 2016.
- [7] L. Cattaneo and P. Zunino. A computational model of drug delivery through microcirculation to compare different tumor treatments. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 30(11):1347–1371, 2014.
- [8] P. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Studies in Mathematics and its Applications. North Holland, 1978.
- [9] C. D’angelo and A. Quarteroni. On the coupling of 1d and 3d diffusion-reaction equations: application to tissue perfusion problems. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 18(08):1481–1504, 2008.
- [10] L. Demkowicz. *Mathematical Theory of Finite Elements*. Computational Science and Engineering. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2023.
- [11] M. P. Do Carmo. *Geometria diferencial de curvas e superficies*. Sociedade Brasileira de Matemática, 2010.
- [12] J. Friedman and J.-P. Tillich. Calculus on graphs. 2004.
- [13] I. G. Gjerde. Analysis and approximation of coupled 1d-3d flow models. 2020.
- [14] I. G. Gjerde. Graphnics: Combining fenics and networkx to simulate flow in complex networks, 2022.

-
- [15] I. G. Gjerde, M. Kuchta, M. E. Rognes, and B. Wohlmuth. Directional flow in perivascular networks: mixed finite elements for reduced-dimensional models on graphs. *Journal of Mathematical Biology*, 89(6):60, 2024.
- [16] I. G. Gjerde, K. Kumar, and J. M. Nordbotten. A singularity removal method for coupled 1d-3d flow models, 2019.
- [17] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. F. del Río, M. Wiebe, P. Peterson, P. Gérard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Abbasi, C. Gohlke, and T. E. Oliphant. Array programming with NumPy. *Nature*, 585:357–362, 2020.
- [18] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3):90–95, 2007.
- [19] T. Köppl, E. Vidotto, and B. Wohlmuth. A 3d-1d coupled blood flow and oxygen transport model to generate microvascular networks. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 36(10):e3386, 2020.
- [20] T. T. Köppl. *Multi-scale modeling of flow and transport processes in arterial networks and tissue*. PhD thesis, Technische Universität München, 2015.
- [21] D. Pauly and J. Valdman. Poincaré-friedrichs type constants for operators involving grad, curl, and div: theory and numerical experiments. *Comput Math Appl*, 79(11):13027–3067, 2020.
- [22] L. E. Payne and H. F. Weinberger. An optimal poincaré inequality for convex domains. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 5(1):286–292, 1960.
- [23] Python Software Foundation. *Python: A Dynamic, Open Source Programming Language*, 2024.
- [24] P. Raviart and J. Thomas. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. *Lecture Notes in Mathematics*, 606:292–315, 1977.
- [25] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas. Primal hybrid finite element methods for 2nd order elliptic equations. *Mathematics of computation*, 31(138):391–413, 1977.
- [26] M. E. Rognes, D. A. Ham, C. J. Cotter, and A. T. T. McRae. Automating the solution of PDEs on the sphere and other manifolds in FEniCS 1.2. *Geoscientific Model Development*, 6(6):2099–2119, 2013.
- [27] D. J. Sanderson, D. C. Peacock, C. W. Nixon, and A. Rotevatn. Graph theory and the analysis of fracture networks. *Journal of Structural Geology*, 125:155–165, 2019.

-
- [28] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. Carey, I. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and S. . Contributors. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, 17:261–272, 2020.
- [29] S. Whitaker. Flow in porous media i: A theoretical derivation of Darcy’s law. *Transport in Porous Media*, 1:3–25, 1986.
- [30] S. Yildırım et al. Exact and numerical solutions of poisson equation for electrostatic potential problems. *Mathematical Problems in Engineering*, 2008:1–11, 2008.