

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
BACHARELADO EM ENGENHARIA COMPUTACIONAL

**Aplicação do método de elementos finitos e
FDA-NCP em problemas de
complementaridade**

Wesley da Silva Pereira

JUIZ DE FORA
NOVEMBRO, 2014

Aplicação do método de elementos finitos e FDA-NCP em problemas de complementaridade

WESLEY DA SILVA PEREIRA

Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Ciência da Computação
Bacharelado em Engenharia Computacional

Orientador: Sandro Rodrigues Mazorche

Co-orientador: Grigori Chapiro

JUIZ DE FORA
NOVEMBRO, 2014

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E FDA-NCP EM PROBLEMAS DE COMPLEMENTARIDADE

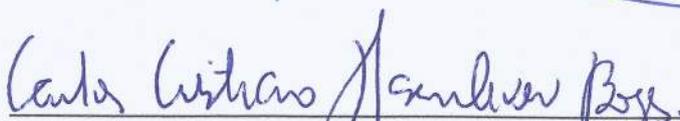
Wesley da Silva Pereira

MONOGRAFIA SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA, COMO PARTE INTEGRANTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE BACHAREL EM ENGENHARIA COMPUTACIONAL.

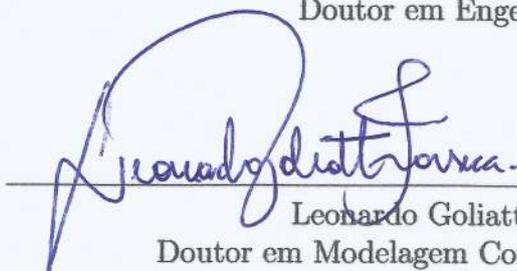
Aprovada por:



Sandro Rodrigues Mazorche
Doutor em Engenharia Mecânica



Carlos Cristiano Hasenclever Borges
Doutor em Engenharia Civil



Leonardo Goliatt da Fonseca
Doutor em Modelagem Computacional

JUIZ DE FORA

14 DE NOVEMBRO, 2014

Aos meus familiares e amigos. Pela felicidade compartilhada nos momentos de descontração e ajuda oferecida nos momentos difíceis.

Resumo

Diversos problemas em diferentes campos da ciência podem ser modelados por equações de complementaridade. Como exemplo, temos os problemas de contato da mecânica e o problema da difusão de oxigênio em tecidos, que é descrito no decorrer deste trabalho. Muitos destes problemas possuem dificuldades analíticas e numéricas de resolução, como por exemplo a determinação de uma fronteira móvel. Os problemas de complementaridade tratados neste trabalho envolvem coordenadas espaciais. Para tais problemas, é proposta a utilização do método de elementos finitos para a obtenção de formulações variacionais discretas na forma de complementaridade. O método FDA-NCP é utilizado para resolução dos problemas de complementaridade e, nos problemas dependentes do tempo, é utilizado um esquema implícito de diferenças finitas para discretização do modelo. Embora a abordagem seja apresentada como uma técnica geral, apenas um problema com uma dimensão espacial é resolvido numericamente no presente trabalho. Os resultados numéricos mostram concordância com outros resultados da literatura.

Palavras-chave: Complementaridade, Método de elementos finitos, FDA-NCP.

Abstract

A large number of problems in different disciplines lead to complementarity problems. This is the case of contact problems in Mechanics and the problem of oxygen diffusion in tissues, that is presented in this work. Many of these problems have analytical and numerical difficulties such as the determination of a moving boundary, which hinders their resolution. In this work we are considering complementarity problems that involves spatial coordinates. We propose a numerical strategy to solve this kind of problem based on the construction of variational formulations by using the finite element method. The FDA-NCP algorithm is used to solve the complementarity problems and, for time dependent models, we use an implicit finite-difference scheme to obtain the discrete formulation. Although this approach is presented as a general technique, only a one-dimensional spatial problem is numerically solved in the present work. The numerical results obtained show agreement with some other results from previous works.

Keywords: Complementarity, finite element method, FDA-NCP.

Agradecimentos

Primeiramente e principalmente, agradeço à Deus, pelos dons concedidos e por sempre ser a luz que me orienta na longa caminhada da vida.

À minha grande família, pelos muitos momentos felizes compartilhados. Especialmente aos meus pais, pela imensa ajuda oferecida sem limitação e por todos os conselhos, que contribuíram para minha formação.

Aos orientadores Sandro Rodrigues Mazorche e Grigori Chapiro, por me auxiliarem no desenvolvimento deste trabalho. Agradeço também pela motivação e grande confiança depositada em mim, fatores que contribuíram fortemente em importantes decisões na vida.

Aos professores Carlos Cristiano Hasenclever Borges e Leonardo Goliatt da Fonseca, por aceitarem o convite de participação da banca de defesa deste trabalho e pelas sugestões que contribuíram na finalização do mesmo. Agradeço também os ensinamentos compartilhados que me ajudaram a crescer como aluno e como ser humano.

Ao professor Maicon Ribeiro Correa, pelas oportunidades oferecidas, contínua orientação e ensinamentos, que constituem grande parte deste trabalho. Enfim, agradeço a enorme ajuda em diversas situações.

Aos amigos, Bruno e Ronaro, pelas discussões interessantes em assuntos diversos e pelo companheirismo de sempre; Helena, Letícia e Sandra, pela motivação constante e disponibilidade para ouvir e ajudar. À todos os amigos, mencionados ou não, agradeço pelos momentos agradáveis compartilhados e pelo tempo dedicado a ajudar. Com vocês, até os maiores desafios são reduzidos a quase imperceptíveis obstáculos.

Aos professores que eu tive a oportunidade de conhecer, pelo conhecimento compartilhado. Principalmente àqueles dos departamentos de Ciência da Computação, Mecânica Aplicada e Computacional, e Matemática.

À UFJF, agradeço o auxílio oferecido, que representou um papel importante durante todos esses anos de formação.

“Escolha sempre o caminho que pareça o melhor, mesmo que seja o mais difícil; o hábito brevemente o tornará fácil e agradável”.

Pitágoras

Sumário

Lista de Figuras	7
Lista de Tabelas	8
Lista de Abreviações	9
1 Introdução	10
1.1 Contextualização	10
1.2 Justificativa	11
1.3 Objetivos gerais e específicos	13
1.4 Metodologia	13
1.5 Estrutura do trabalho	14
2 Trabalhos relacionados	15
3 Descrição dos métodos numéricos	21
3.1 Noções de otimização	21
3.1.1 Sobre a convergência de algoritmos	21
3.1.2 A condição de Armijo	22
3.1.3 Problemas de complementaridade em \mathbb{R}^n	23
3.2 O algoritmo FDA-NCP	24
3.2.1 Resultados de convergência	27
3.3 O método de elementos finitos	28
3.3.1 O método de Galerkin	30
3.3.2 Discretização pelo método de elementos finitos	33
4 O problema da difusão de oxigênio	36
4.1 Modelo Físico	37
4.2 Modelagem matemática	40
4.2.1 Modelo discreto	41
4.3 Simulação numérica	43
5 Considerações finais	46
Referências Bibliográficas	47
A Noções de espaços de funções	50

Lista de Figuras

3.1	Cálculo da direção viável pelo método FDA-NCP. [Fonte: Gutierrez (2013)]	26
3.2	Exemplo de pseudocódigo para o algoritmo FDA-NCP.	27
3.3	Gráfico da função base φ_j no caso unidimensional.	35
4.1	Representação da difusão de oxigênio em uma célula. A figura à esquerda representa o primeiro estágio, onde o oxigênio é inserido até que o equilíbrio seja atingido. No segundo estágio, à direita, a superfície externa é selada e o oxigênio se difunde e é absorvido pelo meio. [Adaptado de: Chapiro et al. (2010)]	37
4.2	Concentração ao longo do tempo.	44
4.3	Concentração ao longo do tempo. [Fonte: Chapiro et al. (2010)]	44
4.4	Posição da fronteira móvel ao longo do tempo.	45
4.5	Posição da fronteira móvel ao longo do tempo. [Fonte: Chapiro et al. (2010)]	45

Lista de Tabelas

4.1	Posição da fronteira móvel em relação ao tempo. Algoritmos: CN-cub: (Chapiro et al., 2010); A: (AHMED, 2006); HH: (HANSEN E HOUGAARD, 1974); CG: (Crank e Gupta, 1972); G: (Gupta, 1973); GK: (GUPTA E KUMAR, 1981); MEF-FDA: algoritmo deste trabalho.	45
-----	---	----

Lista de Abreviações

EVn	Espaço Vetorial normado
FAIPA	<i>Feasible Arc Interior Point Algorithm</i>
FDA-NCP	<i>Feasible Directions Algorithm for Nonlinear Complementarity Problem</i>
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
MEF	método de elementos finitos
NCP	<i>Nonlinear Complementarity Problem</i>

1 Introdução

Diversos modelos em diferentes campos da ciência podem ser reformulados como problemas de complementaridade. Como exemplos, temos os problemas de contato e plasticidade que surgem em problemas de engenharia. Devido à dificuldade de obtenção de soluções analíticas para alguns problemas desta natureza, simulações computacionais são realizadas a fim de se obter estimativas para as soluções exatas.

Neste trabalho é proposta a aplicação conjunta do método de elementos finitos (MEF) e do Feasible Directions Algorithm for Nonlinear Complementarity Problem (FDA-NCP) para a obtenção de soluções aproximadas de problemas na forma de complementaridade. Esta ideia constitui uma continuação natural do esquema via diferenças finitas que já foi empregado em outras referências.

1.1 Contextualização

Em geral, um problema está na forma de complementaridade se este consiste em encontrar um elemento u , de um certo espaço V , que satisfaça o sistema:

$$u \geq 0, \tag{1.1}$$

$$F(u) \geq 0, \tag{1.2}$$

$$u \cdot F(u) = 0, \tag{1.3}$$

para um dada função F e um produto “ \cdot ” bem definido. Neste trabalho, são apresentados dois tipos de problema de complementaridade. Um deles é encontrado nos problemas com dependência espacial, onde u é uma função e o outro é tal que $V = \mathbb{R}^n$.

O FDA-NCP é um algoritmo de ponto interior para encontrar soluções para problemas de complementaridade em \mathbb{R}^n , e está descrito no trabalho de Mazorche (2007). A partir de um ponto inicial estritamente viável, o algoritmo gera uma sequência de pontos viáveis que reduz o valor da função potencial associada ao problema. Uma direção

de busca, viável e descendente para a função potencial, é determinada em cada iteração. A partir desta direção, uma busca linear certifica-se de encontrar um ponto viável e com potencial reduzido. A definição da direção de busca engloba ideias presentes nos trabalhos de Herskovits (1982, 1986) e no *Feasible Arc Interior Point Algorithm* (FAIPA), proposto por Herskovits e Santos (1998).

Neste trabalho, o método de elementos finitos é utilizado para transformar os problemas de complementaridade no espaço das funções em um problema de complementaridade em dimensão finita. Segundo Becker, Carey e Oden (1981), este método é uma técnica geral para a construção de soluções aproximadas, no sentido fraco, para problemas de valor de contorno. Tal método consiste em dividir o domínio do problema em um número finito de subdomínios, denominados elementos, e, utilizando conceitos variacionais, construir uma aproximação para a solução fraca do problema sobre a coleção de elementos.

1.2 Justificativa

Diversos modelos presentes em diferentes campos da ciência, tais como engenharia, física, economia e biologia, podem ser reescritos como problemas de complementaridade. Este é o caso do contato estático ou dinâmico e modelos de plasticidade, em problemas da mecânica; além de modelos gerais para problemas de fronteira livre, tais como o problema da difusão de oxigênio em tecidos e problema do dique; e problemas de obstáculo, tais como o problema de cavitação de mancais. Condições de otimalidade de problemas clássicos de otimização, tais como programas bi-nível ou equilíbrio de Nash-Cournot, também incluem condições de complementaridade. Apesar da vasta aplicabilidade, poucos estudos foram feitos em relação a métodos específicos para a resolução de problemas de complementaridade. Alguns trabalhos apresentam como solução a aplicações de métodos de Newton ou quasi-Newton.

Em alguns casos, a modelagem de problemas via complementaridade pode facilitar a solução dos mesmos. Este é o caso de certos problemas de fronteira móvel implícita, onde, transformando o modelo em um problema de complementaridade, é possível definir um domínio fixo para o problema, como feito por Chapiro et al. (2010). Outra caracte-

rística interessante deste tipo de formulação é que algumas restrições físicas, inerentes do problema em questão, são incorporadas nas desigualdades do problema de complementaridade, fazendo com que a solução do problema já atenda a tais restrições, como feito no trabalho de Gutierrez (2013).

São conhecidas poucas técnicas de resolução de problemas de complementaridade que trabalham somente com pontos da região viável. A utilização de algoritmos de ponto interior possuem dificuldades tanto na escolha de pontos iniciais quanto na taxa de convergência, que pode ser prejudicada. Porém, a viabilidade é uma característica essencial da solução de um problema de otimização e, em certos problemas, as funções envolvidas só fazem sentido, ou só são definidas, dentro da região viável. A aplicação de algoritmos de direções viáveis em problemas de otimização com restrições também apresenta outras vantagens que podem ser vistas em (ARORA, 2004), (HERSKOVITS et al., 2005) e (VANDERPLAATS, 1999).

Como foi mencionado anteriormente, o FDA-NCP é um algoritmo que trabalha apenas dentro região de viabilidade. Além desta característica, a convergência global do algoritmo pode ser assegurada se algumas hipóteses são atendidas, assim como convergência local superlinear. Assumindo hipóteses mais fortes, a convergência quadrática também é verificada. Tais resultados serão descritas no decorrer deste trabalho e foram retiradas do trabalho de Mazorche (2007).

A aplicação do método de elementos finitos em problemas que podem ser escritos na forma de complementaridade não é novidade. Diversos programas comerciais utilizados na engenharia, tais como Abaqus[®] e ANSYS[®], utilizam este método para resolver problemas de contato entre estruturas, por exemplo. Porém, são conhecidos poucos trabalhos que envolvem algoritmos de pontos interior aliados ao método de elementos finitos para a resolução de problemas de complementaridade.

A utilização do método de elementos finitos para a discretização espacial de problemas de complementaridade apresenta algumas vantagens em relação à aplicação de esquemas de diferenças finitas, presentes nos trabalhos de Chapiro et al. (2010); Pachas (2013); Gutierrez (2013). Com o método de elementos finitos, por exemplo, torna-se mais fácil aplicar o problema em domínios com geometrias não triviais, bem como em

casos onde mais de uma dimensão espacial é necessária. Além disso, como este trabalha com formulações fracas, espera-se que haja uma aplicabilidade a um conjunto maior de problemas.

1.3 Objetivos gerais e específicos

Apresentar um método para resolução de problemas de complementaridade que envolvem coordenadas espaciais, utilizando o método de elementos finitos e o algoritmo FDA-NCP.

Como objetivos específicos podem ser destacados:

1. Apresentar uma revisão sobre problemas de complementaridade e algoritmo FDA-NCP. Nesta revisão, será abordada a aplicação dos problemas de complementaridade ao longo dos anos e apresentará o algoritmo FDA-NCP que surgiu como uma alternativa de resolução deste tipo de problema.
2. Construir uma implementação numérica e aplicar a metodologia proposta em modelos encontrados na literatura. Como exemplo de aplicação, será utilizado o problema da difusão de oxigênio em tecidos, que pode ser considerado um problema de referência na área de problemas de complementaridade.

1.4 Metodologia

Inicialmente, foi realizada uma pesquisa bibliográfica exploratória, para o estudo do método de elementos finitos e FDA-NCP, e a determinação da classe de problemas onde estes são aplicados. Em seguida, foi proposto um método para obtenção de soluções fracas aproximadas para um modelo geral de problema na forma de complementaridade. O método é embasado na discretização espacial utilizada no método de elementos finitos e uma discretização via diferenças finitas no tempo, quando este estiver presente no modelo. Foi desenvolvido um código em linguagem de programação Julia para o teste do método construído. Com o método implementado, foram escolhidos alguns problemas da literatura para aplicação da mesma, dando prioridade para os que já foram simulados via técnicas numéricas. Por fim, foi feita a análise do método, comparando os resultados

obtidos com resultados presentes em outras referências.

1.5 Estrutura do trabalho

Esta monografia está estruturada em cinco capítulos que seguem este capítulo de introdução.

No capítulo 2, é realizada a revisão de alguns trabalhos da literatura que abordam assuntos relativos ao contido neste trabalho.

O capítulo 3, apresenta a fundamentação teórica necessária para o bom entendimento do restante do texto.

No capítulo 4, é apresentado o método de elementos finitos e é feita a aplicação deste em um problema geral na forma de complementaridade.

O capítulo 5 é destinado a apresentar o algoritmo FDA-NCP, bem como fornecer uma versão de pseudo-código para o mesmo.

No capítulo 6, é apresentado o problema da difusão de oxigênio e as simulações numéricas realizadas aplicando a abordagem descrita nos capítulos anteriores.

No capítulo 7, são apresentadas as considerações finais.

2 Trabalhos relacionados

Neste capítulo é feita uma revisão dos trabalhos relacionados com o presente texto.

Ao longo de aproximadamente cinco décadas de pesquisa, os problemas de complementaridade vem sendo cada vez mais utilizados em diversas áreas, tais como engenharia, física, economia e biologia. Uma importante razão para tal utilização consiste no fato de que o conceito de complementaridade é sinônimo da noção de equilíbrio de sistemas, segundo Ferris e Pang (1997). Diversos trabalhos foram desenvolvidos a fim de documentar a teoria básica, algoritmos desenvolvidos e aplicações para esse tipo de problema, e seu relacionamento com a teoria de otimização.

No trabalho de Harker e Pang (1990), foi realizado um resumo sobre a teoria, algoritmos e aplicações relacionados com o tema Inequações Variacionais e Problemas de Complementaridade Não Linear em espaços de dimensão finita, desenvolvidos até o momento. Foram apresentados conceitos como: problema de inequação variacional, problema de complementaridade não linear e problema de complementaridade generalizado; bem como proposições, teoremas e resultados de equivalência relacionados. Também foram listados alguns resultados de existência e unicidade para os problemas definidos. Observou-se apenas um pequeno número de algoritmos existentes para a solução de problemas de inequações variacionais e problemas complementaridade não linear em dimensão finita, até a publicação do trabalho. Neste contexto, o algoritmo desenvolvido por Cottle (1966) foi citado como o primeiro a apresentar uma solução para problemas de complementaridade não linear.

Harker e Pang (1990) também apresentaram uma metodologia geral para obtenção de soluções de um problema inequação variacional e um estudo de estabilidade envolvendo problemas desta natureza. Foram apresentadas algumas aplicações nas quais a teoria e os algoritmos de inequações variacionais e problemas complementaridade não linear causaram um impacto efetivo. Segundo o artigo, a utilização de inequações variacionais frequentemente leva a um melhor entendimento das condições onde o equilíbrio existe e é único, e na análise de sensibilidade do equilíbrio.

Em um trabalho um pouco mais recente, Ferris e Pang (1997) publicaram um artigo apresentando diversas aplicações de problemas de complementaridade não linear em engenharia e economia, e, em contraste com o que se observou no trabalho de Harker e Pang (1990), Ferris e Pang (1997) notaram que o desenvolvimento de algoritmos robustos e eficientes para a solução desta classe de problemas estava recebendo grande atenção em trabalhos de pesquisa recentes. Os métodos computacionais incluem: extensões do método de Newton para equações não lineares, método de caminho de busca, algoritmos baseados em programação quadrática, otimização diferenciável baseada em métodos descendentes, técnicas de suavização e métodos de ponto interior.

As aplicações de engenharia apresentadas por Ferris e Pang (1997) englobam as seguintes categorias: problemas de contato mecânico, problemas de mecânica estrutural, problemas de obstáculo não lineares, problemas de lubrificação elasto-hidrodinâmica e problemas de equilíbrio de tráfego. Em cada aplicação, foi dada uma breve explicação física do problema, juntamente com a apresentação das equações que definem o modelo e, em seguida, apresentadas as formulações de complementaridade para os funcionais do modelo. Para as aplicações na área de economia, foram apresentados: o problema do equilíbrio geral, o problema do estoque de capital invariante, modelos teóricos de jogos em economia, equilíbrio espacial de preços e o National Energy Modeling System (NEMS), criado pelo U.S. Department of Energy.

O algoritmo para solução de problemas de complementaridade utilizado no presente trabalho foi desenvolvido por Mazonche (2007). Na tese, são propostas novas técnicas de ponto interior para a resolução de problemas de complementaridade não linear, baseadas na filosofia do FAIPA, desenvolvido por Herskovits e Santos (1998). Os algoritmos iterativos FDA-NCP, para complementaridade, e *Feasible Directions Algorithm for Mixed Nonlinear Complementarity Problems* (FDA-MNCP), para complementaridade mista, que geram uma sequência de pontos na região viável do problema, reduzindo monotonicamente o valor de uma função potencial definida de forma conveniente. Para ambos os algoritmos, foram demonstrados resultados de convergência global e local superlinear e/ou quadrática, sobre certas condições. Alguns experimentos numéricos para problemas testes da literatura e problemas clássicos da engenharia mecânica foram realizados, ob-

tendo resultados que concordam com a análise assintótica de convergência e indicando que os algoritmos propostos são eficientes e robustos. Também foram realizados testes comparativos entre o algoritmo FDA-NCP com outros algoritmos de complementaridade, inclusive com o algoritmo FAIPA.

Pode-se extrair da literatura alguns trabalhos que utilizam o algoritmo FDA-NCP como ferramenta para encontrar soluções para problemas de complementaridade. No trabalho desenvolvido por Chapiro et al. (2010), o algoritmo foi aplicado a um problema de fronteira móvel implícita, o problema da difusão de oxigênio em um tecido absorvedor, que foi primeiramente estudado por Crank e Gupta (1972). Os maiores desafios de tal problema consistem em determinar: a posição da fronteira móvel que representa o limite de penetração de oxigênio no tecido e a distribuição da função concentração de oxigênio no meio a qualquer instante de tempo. Neste trabalho, Chapiro et al. (2010) propõem um método numérico baseado na combinação de um esquema de diferenças finitas central implícito no tempo e espaço com o método FDA-NCP, e fazem a comparação deste com outros métodos utilizados previamente para o mesmo problema.

O problema da difusão de oxigênio em tecidos pode ser considerado um problema *benchmark*, pois diversos métodos numéricos e analíticos já foram utilizados para a obtenção de uma solução do mesmo. Este problema é muito interessante para a área de complementaridade, já que, no trabalho de Baiocchi e Pozzi (1975), foi provada a equivalência entre o modelo linear do problema via equações diferenciais e o modelo na forma de problema de complementaridade para o mesmo. Recentemente, Pereira et al. (2014) apresentaram um trabalho utilizando o método de elementos finitos, via formulação clássica de Galerkin, para a discretização espacial do modelo de complementaridade para o problema da difusão de oxigênio, o método de Euler Implícito para a discretização no tempo e o método FDA-NCP para a resolução do problema de complementaridade não linear obtido em cada iteração. Este método, diferente do proposto por Chapiro et al. (2010), encontra uma aproximação para a solução fraca do problema, o que é uma característica do método de elementos finitos. Os resultados obtidos neste último artigo mostraram concordância com as simulações anteriormente utilizadas.

Na dissertação de Pachas (2013), foi realizado um estudo teórico das inequações

variacionais e sua aplicação no problema do obstáculo. A partir de um estudo para tal problema, foi verificado que o problema do obstáculo torna-se um problema de complementaridade quando algumas condições de regularidade são satisfeitas. O problema do dique retangular foi descrito e foram apresentados resultados resultados de equivalência deste com o problema do obstáculo. Neste mesmo trabalho, foram realizadas simulações numéricas do problema do obstáculo bidimensional utilizando sua formulação via complementaridade. Foram utilizados o método de diferenças finitas centrais com *stencil* de 5 pontos para a discretização espacial do modelo e o algoritmo FDA-NCP para a solução do problema de complementaridade linear resultante.

Ainda seguindo a linha de aplicação do método FDA-NCP, pode ser destacado o trabalho de dissertação de Gutierrez (2013). Neste trabalho, foi realizado um estudo de um modelo de combustão *in situ* em meios porosos, descrito por equações diferenciais parciais (edp's) parabólicas e não lineares. O estudo levou em conta as soluções do problema de Riemann associado ao modelo, onde podem ser observadas uma onda de combustível e uma onda térmica, associada à temperatura. Para evitar oscilações nas frentes de onda, foi proposta uma formulação via complementaridade para tal problema. Foram realizadas simulações numéricas para o modelo proposto utilizando o método FDA-NCP aliado a um esquema de diferenças finitas baseado no método Crank-Nicolson. Para verificação das soluções obtidas, foi utilizado o método de Crank-Nicolson com o método de Newton para a solução do modelo inicial descrito por equações diferenciais. Observou-se que as soluções obtidas nos dois diferentes modelos apresentam grandes semelhanças, obtendo um erro menor que 3% em relação às velocidade das ondas térmicas, por exemplo, além de evidenciar a convergência de ambos os métodos para a mesma solução. A vantagem de se usar a formulação via complementaridade está no fato de que a solução atende às restrições físicas de positividade, diferente do outro modelo.

Alguns trabalhos na área de complementaridade que utilizam outras abordagens são descritos a seguir. Em todos os trabalhos, os métodos numéricos desenvolvidos baseiam-se no *semi-smooth Newton method* e o problema está relacionados com aplicações em meios porosos.

No trabalho de Lauser et al. (2011) é apresentada uma nova abordagem para o

tratamento do fluxo multifásico e multicomponente em meios porosos. Baseado na observação de que uma fase fluida aparece, ou desaparece, sempre que uma dada quantidade física excede certos limites, foram formuladas condições de presença local de fases fluidas como condições de complementaridade, ou de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), o que leva o problema ao campo de inequações variacionais. No mesmo trabalho, as condições de KKT foram reformuladas como um problema de complementaridade não linear equivalente. Foram apresentados resultados numéricos para a verificação de viabilidade da abordagem proposta, utilizando o *semi-smooth Newton method*. O esquema baseado na formulação via complementaridade aumentou a robustez do modelo com respeito à transição de fases e à inicialização da distribuição das mesmas, de tal forma que passos maiores puderam ser utilizados. Segundo Lauser et al. (2011), esta nova abordagem é diretamente aplicável a sistemas com um grande número de fases e componentes, e se mostra muito conveniente em aplicações reais de engenharia.

Ben Gharbia e Jaffré (2011) estudaram o problema de aparecimento e desaparecimento de fases gasosas, presente no *couplex-Gas benchmark*, proposto por Andra e MoMas com a finalidade de melhorar a simulação da migração de hidrogênio produzido pela corrosão de pacotes de lixo nuclear em compartimentos enterrados. A formulação resultante consiste de um conjunto de equações diferenciais e restrições de complementaridade e, segundo Ben Gharbia e Jaffré (2011), os engenheiros que utilizavam o *benchmark* estava encontrando dificuldades em lidar com este problema. Tendo em vista esta dificuldade, as condições de complementaridade eram frequentemente contornadas pela reformulação do problema. Foi proposta, então, a aplicação do *semi-smooth Newton method* para solucionar o problema de complementaridade não linear do modelo, bem como a apresentação de testes que o modelo, juntamente o método apresentado, resolvem de maneira eficiente o problema de aparecimento e desaparecimento de uma fase. Para a discretização, foram utilizados o esquema de Euler implícito de primeira ordem para o tempo e volumes finitos centrados nas células para o espaço.

Um trabalho intimamente relacionado com os anteriores foi proposto por Marchand, Müller e Knabner (2012, 2013), dividido em duas publicações. Neste trabalho, é apresentada um método para aproximação de soluções para um sistema de equações de

conservação não lineares dependentes do tempo, baseada na técnica *hybrid-mixed finite element*. Os autores afirmaram que a técnica é eficiente, precisa e geral o bastante para representar a maior parte das formulações existentes para fluxo de dois componentes, líquido e gasoso, em meios porosos, considerando troca de fases e qualquer efeito de aparecimento e desaparecimento de uma das fases. A utilização da formulação em termos de condições de complementaridade implica em uma solução eficiente e estável pelo *semi-smooth Newton method*, segundo Marchand, Müller e Knabner (2013). Foram realizadas simulações uni e bidimensionais utilizando o algoritmo proposto para o fluxo de água e hidrogênio envolvendo a situação de aparecimento e desaparecimento da fase gasosa.

3 Descrição dos métodos numéricos

3.1 Noções de otimização

Para o bom entendimento do algoritmo FDA-NCP, alguns conceitos de otimização são necessários e são apresentados a seguir. O conteúdo foi retirado dos trabalhos de Friedlander (1994), Heath (1997) e Mazorche (2007).

3.1.1 Sobre a convergência de algoritmos

A maioria dos métodos de resolução de sistemas não lineares são iterativos e, neste caso, geram uma sequência $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$ que espera-se convergir para uma solução x^* do problema.

Definição 3.1.1. Um método iterativo é dito localmente convergente se existe $\epsilon > 0$ tal que o algoritmo seja capaz de gerar uma sequência de pontos que converge para uma solução x^* do problema, para qualquer ponto inicial x_0 que satisfaça $\|x_0 - x^*\| < \epsilon$.

Definição 3.1.2. Um método iterativo é dito globalmente convergente se é capaz de gerar uma sequência de pontos que converge para uma solução x^* do problema, para qualquer ponto inicial x_0 dado.

A fim de comparar a eficiência de diferentes métodos iterativos, é necessário definir a ordem de convergência dos mesmos. Denote por $e_k = x_k - x^*$ o erro da iteração k da sequência gerada pelo método.

Definição 3.1.3. Um método iterativo é convergente de ordem $r > 0$ se a sequência gerada por este satisfaz

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|e_{k+1}\|}{\|e_k\|^r} = C, \quad (3.1)$$

para uma dada constante $C > 0$. A taxa de convergência é dita: linear, se $r = 1$ e $C < 1$, superlinear, se $1 < r < 2$, e quadrática, se $r = 2$.

3.1.2 A condição de Armijo

Seja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Deseja-se obter uma solução $x^* \in \mathbb{R}^n$ que minimize a função f .

Definição 3.1.4. Um vetor $d \in \mathbb{R}^n$ é uma direção descendente para f em $x \in \mathbb{R}^n$ se existe $\delta > 0$ tal que $f(x + td) < f(x)$, para todo $t \in (0, \delta)$.

Proposição 3.1.1. *Sejam $f \in C^1$ e $x, d \in \mathbb{R}^n$, tais que $\nabla f(x) \neq 0$ e $\nabla f(x) \cdot d < 0$. Então d é uma direção descendente para f em x .*

A existência dessas direções sugere um modelo geral de iteração para minimizar a função f . Se $\nabla f(x^k) \neq 0$ então:

- **Passo 1:** Escolher $d^k \in \mathbb{R}^n$ tal que $\nabla f(x^k) \cdot d^k < 0$;
- **Passo 2:** Calcular $t^k > 0$ tal que $f(x^k + t^k d^k) < f(x^k)$ (busca linear);
- **Passo 3:** $x^{k+1} = x^k + t^k d^k$.

De tal forma que o processo termina quando $\nabla f(x^k) = 0$, chegando em um ponto estacionário.

O passo da busca linear deve ser escolhido com cuidado, pois o algoritmo pode não gerar uma sequência que converge para um vetor que minimize a função f . Como exemplo temos a função $f(x) = x^2$, cujo único minimizador é $x^* = 0$. A sequência definida por

$$x^k = 1 + 1/k, \quad k \geq 1, \quad (3.2)$$

pode ser gerada pelo algoritmo já que

$$f(x^k) = (1 + 1/(k + 1))^2 < (1 + 1/k)^2 = f(x^k). \quad (3.3)$$

Porém $x^k \rightarrow 1$.

Para impedir este efeito, a condição no passo 2 é substituída por:

$$f(x^k + t^k d^k) \leq f(x^k) + t^k \eta \nabla f(x^k) \cdot d^k, \quad (3.4)$$

onde $\eta \in (0, 1)$ é uma constante. Esta condição é chamada de **condição de Armijo**, também conhecida como condição de decréscimo suficiente.

Observe que, como d^k é uma direção de decida, $t^k \eta \nabla f(x^k) \cdot d^k < 0$ e, portanto, essa condição é mais restritiva, diminuindo a faixa de valores para t^k . Ou seja, a condição de Armijo impede a efetivação de passos grandes com pouco decréscimo para a função f .

3.1.3 Problemas de complementaridade em \mathbb{R}^n

As notações abaixo são postas a fim de facilitar o entendimento dos problemas de complementaridade.

Definição 3.1.5. Um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ é não negativo, ou $x \geq 0$, se

$$x_i \geq 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.5)$$

A notação é utilizada de maneira análoga para outras desigualdades, como por exemplo para $x < 0$.

Definição 3.1.6. O produto de Hadamard entre dois pontos $x, y \in \mathbb{R}^n$, denotado pelo símbolo \bullet , é definido por:

$$x \bullet y = \begin{pmatrix} x_1 y_1 \\ x_2 y_2 \\ \vdots \\ x_n y_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n. \quad (3.6)$$

Com as duas definições acima, o problema de complementaridade em \mathbb{R}^n pode ser formalmente definido.

Definição 3.1.7. Seja $F : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função vetorial. Um problema de complementaridade consiste em determinar um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ que satisfaça:

$$F(x) \geq 0, \quad (3.7)$$

$$x \geq 0, \quad (3.8)$$

$$x \bullet F(x) = 0. \quad (3.9)$$

Este tipo de problema é geralmente associado à sigla NCP, *Nonlinear Complementarity Problem*, já que os casos mais interessantes para ocorrerem quando F é um operador não linear. Neste trabalho também é utilizada a sigla NCP para referenciar o problema de complementaridade definido em (3.1.7).

Apesar de a definição para o NCP utilizar o produto de Hadamard como operador, um problema de complementaridade também pode ser definido utilizando outros tipos de produto, como por exemplo o produto escalar em \mathbb{R}^n .

Definição 3.1.8. A região de viabilidade para (3.1.7) consiste no seguinte conjunto:

$$\Upsilon = \{x \in \mathbb{R}^n; x \geq 0, F(x) \geq 0\}. \quad (3.10)$$

Os pontos em Υ são chamados de pontos viáveis. Caso um ponto satisfaça as desigualdades estritas: $x > 0, F(x) > 0$, este será dito ponto estritamente viável.

Definição 3.1.9. Um vetor $d \in \mathbb{R}^n$ é viável em $x \in \Upsilon$ se existe $\delta > 0$ tal que $x + td \in \Upsilon$, para todo $t \in [0, \delta)$.

Definição 3.1.10. Uma solução de (3.1.7) é dita degenerada se existe $i \in \mathbb{N}$ tal que $x_i = F_i(x) = 0$.

3.2 O algoritmo FDA-NCP

O FDA-NCP é um algoritmo iterativo de ponto interior criado para resolver NCPs, definidos em 3.1.7. Em cada iteração, a partir de um ponto viável, o algoritmo calcula uma direção viável e descendente para a função Φ , que é a função potencial associada ao problema, e procura um novo ponto viável nesta direção. O processo continua até que algum critério de parada seja satisfeito.

Seja (P) um NCP com função associada $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ e defina a função $H : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ com a lei $H(x) = x \bullet F(x)$. Se Υ é a região de viabilidade de (P) , então o problema de complementaridade (P) é equivalente ao problema: Encontrar $x \in \Upsilon$ tal que $H(x) = 0$.

Se F é diferenciável então H também o é. Portanto para cada $i = 1, \dots, n$ temos:

$$H'_i(x) = F_i(x)e_i + x_i F'_i(x). \quad (3.11)$$

Olhando em termos de matrizes:

$$J_H(x) = D_{F(x)} + D_x J_F(x), \quad (3.12)$$

onde D_y representa uma matriz diagonal onde $[D_y]_{(i,i)} = y_i$, para todo $i = 1, \dots, n$, e $J_g(x)$ representa a matriz jacobina de g no ponto x .

Para a iteração k do algoritmo, a direção de Newton d_1^k é definida pela resolução do sistema linear matricial

$$J_H(x^k)d_1^k = -H(x^k). \quad (3.13)$$

Como foi observado no trabalho de Mazorche (2007), a aplicação direta do método de Newton com a finalidade de encontrar raízes para H não garante que a direção seja viabilidade dos pontos encontrados. Com esta motivação, é definida a direção de restauração d_2^k pela resolução do sistema linear matricial

$$J_H(x^k)d_2^k = \rho^k E, \quad (3.14)$$

onde $\rho^k \in \mathbb{R}$ é um escalar positivo fixado e $E \in \mathbb{R}^n$ é o vetor com entradas $E_i = 1$. A direção de busca d^k é definida pela soma das direções de Newton e de restauração, de modo que

$$J_H(x^k)d^k = -H(x^k) + \rho^k E. \quad (3.15)$$

Para verificar a viabilidade da direção d^k , consideremos a seguinte proposição válida em um NCP:

Proposição 3.2.1. *Sejam $d \in \mathbb{R}^n$ e $x \in \Upsilon$. Se a direção d satisfaz as condições:*

1. $d_i > 0$ se $x_i = 0$ e
2. $d \cdot \nabla F_i(x) > 0$ se $F_i(x) = 0$,

então d é uma direção viável no ponto x .

Suponha que $J_H(x^k)$ seja inversível. Então, a i -ésima linha da Eq. (3.15) é dada por

$$[F_i(x^k)e_i + x_i^k \nabla F_i(x^k)] \cdot d^k = -x_i^k F_i(x^k) + \rho^k, \quad (3.16)$$

e portanto se $F_i(x^k) > 0$ ou $x_i^k > 0$. Logo

1. se $x_i^k = 0$ então $d_i^k = \frac{\rho^k}{F_i(x^k)} > 0$ e
2. se $F_i(x^k) = 0$ então $\nabla F_i(x^k) \cdot d^k = \frac{\rho^k}{x_i^k} > 0$.

Então, segue da proposição 3.2.1 que d^k é viável.

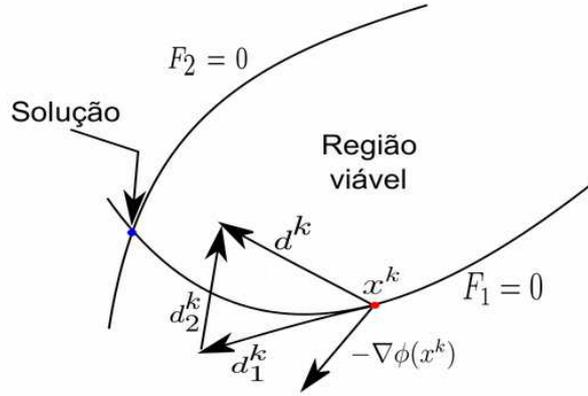


Figura 3.1: Cálculo da direção viável pelo método FDA-NCP. [Fonte: Gutierrez (2013)]

A função potencial associada ao método FDA-NCP é definida por

$$\Phi(x) = x \cdot F(x). \quad (3.17)$$

Sejam $\rho_0 \in (0, +\infty)$ e $\beta \in [1, 2]$. Foi provado no trabalho de Mazorche (2007) que escolhendo

$$\rho^k = \rho_0 \frac{\Phi(x^k)^\beta}{n}, \quad (3.18)$$

a direção d^k é descendente para a função potencial Φ sempre que $\rho_0 \Phi(x^k)^{\beta-1} < 1$.

Portanto, a cada iteração k , o algoritmo FDA-NCP gera uma direção viável e descendente para a função potencial Φ chamada de d^k a partir da Eq. 3.15, desde que $J_H(x^k)$ seja inversível e $\rho_0 \Phi(x^k)^{\beta-1} < 1$. Uma busca é realizada nesta direção a partir do ponto x^k a fim de encontrar um ponto em $x^{k+1} \in \Upsilon$ que reduza o valor de Φ . Assim como feito no trabalho de Mazorche (2007), será utilizada a busca de Armijo para encontrar o

ponto x^{k+1} .

Um pseudocódigo para o algoritmo FDA-NCP pode ser visto em Algoritmo 1.

Algoritmo 1: FDA-NCP

Entrada: $\rho_0 > 0$, $\beta \in [1, 2]$, F , $x^0 \in \Upsilon$.

1 **início**

2 $k \leftarrow 0$;

3 **enquanto** *condição de parada não é satisfeita* **faça**

4 $\rho^k \leftarrow \frac{\rho_0 \Phi(x^k)^\beta}{n}$;

5 Resolver o sistema linear $J_H(x^k)d^k = -H(x^k) + \rho^k E$;

6 Busca de Armijo para encontrar x^{k+1} ;

7 $k \leftarrow k + 1$;

8 **fim enqto**

9 **retorna** x^k ;

10 **fim**

Figura 3.2: Exemplo de pseudocódigo para o algoritmo FDA-NCP.

Nesta versão do algoritmo, dois critérios de parada são utilizados: o número máximo de iterações realizadas pelo algoritmo e uma tolerância pré-estabelecida para a função potencial.

3.2.1 Resultados de convergência

Uma vez apresentada a ideia geral do algoritmo, são apresentados alguns resultados de convergência do FDA-NCP. Para cada constante $c \in \mathbb{R}$ positiva, defina o conjunto

$$\Upsilon_c = \{x \in \Upsilon; \Phi(x) \leq c\}. \quad (3.19)$$

São adotadas as seguintes hipóteses:

1. Existe um número $c > 0$ tal que o conjunto Υ_c é compacto e tem interior não vazio. Além disso, cada $x \in \overset{\circ}{\Upsilon}_c$ é estritamente viável.
2. As funções F_i são de classe $C^1(\Upsilon_c)$ e F' é localmente Lipschitziana em Υ_c , com constante de Lipschitz γ_0 positiva, ou seja, para cada $z \in \Upsilon_c$, existe um aberto $V_z \in \Upsilon_c$ tal que

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq \gamma_0 \|x - y\|, \quad \forall x, y \in V_z. \quad (3.20)$$

3. A matriz $J_H(x)$ tem inversa para todo $x \in \Upsilon_c$.

De forma resumida, note que a primeira hipótese garante a existência de pontos estritamente viáveis em Υ_c . A terceira hipótese garante que as componentes de x e $F(x)$ não se anulam simultaneamente em Υ_c , além de a Eq. (3.15) possuir solução única.

Pela segunda hipótese tem-se $H \in [C^1(\Upsilon_c)]^n$ e então J_H é contínua. Como a operação de inversão de matrizes é de classe C^∞ , então $inv \circ J_H$ também é contínua. A primeira hipótese indica que Υ_c é compacto, então pelo Teorema de Weierstrass existem constantes positivas κ_0, κ tais que:

$$\|J_H(x)\| \leq \kappa_0, \quad \|J_H(x)^{-1}\| \leq \kappa, \quad \forall x \in \Upsilon_c \quad (3.21)$$

Foi provado que no trabalho de Mazonche (2007), que dado um ponto inicial x_0 estritamente viável em Υ_c , existe uma subsequência de $(x^k)_{k=1}^\infty$, gerada pelo algoritmo FDA-NCP, que converge para uma solução do problema de complementaridade. O que é um resultado de convergência global do método.

No mesmo trabalho foi provado o seguinte teorema:

Teorema 3.2.1 (Convergência assintótica). *Considere uma sequência $(x^k)_{k=1}^\infty$, gerada pelo algoritmo FDA-NCP, que converge para uma solução x^* do problema de complementaridade. Então:*

1. *Tomando $\beta \in (1, 2)$, então $t^k = 1$ para k suficientemente grande e a taxa de convergência do algoritmo é superlinear.*
2. *Se $\beta = 2$ e $t^k = 1$ para k suficientemente grande, então a taxa de convergência do algoritmo é quadrática.*

3.3 O método de elementos finitos

O método de elementos finitos consiste de uma técnica geral para solução numérica de equações. Este foi introduzido por engenheiros no fim da década de 50 e início da década de 60 para solução numérica de problemas estruturais de engenharia. No princípio, pensava-se que o MEF se tratava apenas de uma generalização de métodos anteriormente

utilizados na engenharia, onde estruturas tais como barras e placas eram subdivididas em partes menores, chamadas de elementos finitos e que apresentavam um comportamento simples e conhecido. Em meados da década de 60, iniciou-se um estudo matemático do método de elementos finitos, e logo ficou claro que o método na verdade se tratava de uma técnica numérica geral para solução de equações diferenciais embasada nos métodos variacionais, introduzidos no início do século. Durante as décadas de 60 e 70, o método foi aprimorado por engenheiros, matemáticos e especialistas em análise numérica como uma técnica geral para obtenção de soluções aproximadas de equações diferenciais e integrais aplicável em diversos campos da ciência. Atualmente, o método de elementos finitos é largamente utilizado em diversas áreas, inclusive como parte fundamental de alguns famosos simuladores comerciais.

A ideia básica da maioria dos métodos numéricos para equações diferenciais consiste em discretizar um dado problema de tal forma que possa ser implementado e resolvido por um computador. A forma clássica de discretização é conhecida como método de diferenças finitas, onde as derivadas das equações do modelo são substituídas por equações de diferenças, que envolvem um número finito de pontos em um certo conjunto.

O processo de discretização por elementos finitos é diferente. Neste caso, inicia-se transformando o problema em um problema variacional relacionado. Em casos básicos de equações elípticas o problema variacional consiste de um problema de minimização da forma:

$$(M) \quad \text{Encontrar } u \in V \text{ tal que } F(u) \leq F(v) \text{ para todo } v \in V,$$

onde V é um conjunto de funções admissíveis e $F : V \rightarrow \mathbb{R}$ é o funcional energia associado ao problema. Como em geral V tem dimensão infinita, o problema (M) não pode ser resolvido de forma exata. A ideia é resolver o problema em um subconjunto $V_h \subset V$, que depende de um número finito de parâmetros, levando ao problema discreto:

$$(M_h) \quad \text{Encontrar } u_h \in V_h \text{ tal que } F(u_h) \leq F(v_h) \text{ para todo } v_h \in V_h,$$

que já pode ser resolvido numericamente. Espera-se que a solução u_h seja uma aproximação suficientemente boa da solução u .

Segundo Johnson (1987), resolver uma equação diferencial ou integral usando o método de elementos finitos consiste em seguir basicamente os seguintes passos:

1. Formulação variacional para o problema,
2. Discretização usando MEF: construção do espaço de dimensão finita V_h ,
3. Solução do problema discreto,
4. Implementação do método em um computador.

A discretização usando MEF é o passo que caracteriza o método, onde em geral é escolhido um conjunto de funções polinomiais por partes. A escolha depende da formulação variacional utilizada, regularidade requerida da solução aproximada, erro da aproximação, etc.

Apesar de o termo “o método de elementos finitos” ser usado frequentemente na literatura, inclusive neste trabalho, existe uma grande variedade de métodos que utilizam esta abordagem. O processo de discretização através de problemas variacionais de minimização, como feito acima, é conhecido como método de Ritz-Galerkin, criado no início do século XX. O MEF utilizado neste trabalho é baseado no método de Galerkin, que é tanto conhecido como um método variacional na área de edp’s quanto como um método de resíduos ponderados na análise numérica, e tem a característica de utilizar formulações variacionais mais gerais.

Quando comparado ao método de diferenças finitas, o método de elementos finitos apresenta a vantagem de que geometrias complicadas, condições de fronteira gerais e propriedades não lineares ou variáveis envolvidas podem ser tratadas de forma relativamente fácil. Além disso, o método de elementos finitos tem uma fundamentação teórica bem estabelecida que fornece maior confiabilidade e, na maioria dos casos, possibilita a análise matemática e estimativa de erro da solução aproximada.

3.3.1 O método de Galerkin

O método de Galerkin é uma técnica utilizada tanto na verificação de existência e unicidade quanto na obtenção de soluções aproximadas para problemas envolvendo equações

diferenciais e integrais. Este foi apresentado inicialmente como uma generalização do método de Ritz no trabalho de Galerkin (1915), onde o novo método apresenta um desligamento entre a solução aproximada e a forma variacional do problema, possibilitando a aplicação em um conjunto maior de problemas e a criação de novas formulações variacionais. O método de Galerkin é conhecido também como método de Bubnov-Galerkin, já que I. G. Bubnov desenvolveu uma metodologia similar anos antes da publicação do artigo, porém ainda muito vinculado ao problema físico em questão.

Um dos fatos interessantes sobre o método de Galerkin é que este teve grande participação nas formulações variacionais do método de elementos finitos ao longo da história, ampliando a robustez deste último método. Devido a este fato, o método de Galerkin também é conhecido como método de Galerkin clássico e diversas variações do método são encontradas na literatura, tais como: Galerkin descontínuo, (Johnson, 1987) e Petrov-Galerkin, (Brooks e Hughes, 1982). Apesar de o método de Galerkin ser classificado como um método de resíduos ponderados na área de método numéricos, atualmente este também é utilizado como método para verificação de existência de soluções de EDPs, como pode ser visto no trabalho de Souza (2005).

De posse da formulação de um problema via equações diferenciais, o método de Galerkin pode ser dividido nas etapas:

1. Criação de uma formulação fraca para o problema baseada em um único espaço vetorial V de funções;
2. Criação do problema discreto associado, em um subespaço de V de dimensão finita m .
3. Resolução do problema discreto, encontrando uma aproximação da solução do problema inicial.

Em se tratando de um método para verificação de existência de soluções, o último passo é dividido nos seguintes:

- 3.1. Para cada $m \in \mathbb{N}$, provar a existência de uma solução u_m do problema discreto;
- 3.2. Provar que existe uma subsequência de $(u_m)_{m=1}^{\infty}$ que converge para uma solução fraca do problema.

Neste trabalho, porém, o foco é tratar a aplicação numérica do método do contexto de elementos finitos e portanto os passos de (1) a (3) serão seguidos.

Aplicação em problemas de complementaridade

Como exemplo, considere o seguinte problema de complementaridade:

Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ uma função. Encontrar u tal que:

$$-\Delta u - f \geq 0 \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (3.22)$$

$$u \geq 0 \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (3.23)$$

$$u(-\Delta u - f) = 0 \quad \text{em} \quad \Omega, \quad (3.24)$$

$$u = 0 \quad \text{sobre} \quad \partial\Omega. \quad (3.25)$$

Este é um problema simples que surge na modelagem de uma membrana elástica na presença de um obstáculo rígido. Neste caso, a função u é relacionada à distância da membrana em relação ao obstáculo e a função f , relacionada ao carregamento transversal aplicado sobre a membrana. O método de Galerkin será aplicado sobre este problema.

Para facilitar a criação da formulação fraca para o problema, são introduzidas as seguintes notações:

$$(u, v) = \int_{\Omega} u(x)v(x) dx, \quad (u, v)_H = \int_{\Omega} \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) dx.$$

Suponha que β seja uma base de funções não negativas para $V = H_0^1(\Omega)$, que será o espaço de funções teste. Baseando-se no método de Galerkin, multiplique a Ineq (3.22) por uma função $\varphi \in \beta$ e integre em Ω . Então:

$$(-\Delta u - f, \varphi) \geq 0, \quad \forall \varphi \in \beta \quad (3.26)$$

Aplicando a definição de derivação fraca:

$$(-\Delta u, \varphi) = \sum_{i=1}^n -(u_{x_i x_i}, \varphi) = \sum_{i=1}^n (u_{x_i}, \varphi_{x_i}) = (u, \varphi)_H, \quad \forall \varphi \in \beta \quad (3.27)$$

Portanto formulação uma formulação fraca para o problema é:

Encontrar $u \in V$ tal que, para toda função $\varphi \in \beta$, satisfaça:

$$(u, \varphi)_H - (f, \varphi) \geq 0, \quad (3.28)$$

$$u \geq 0, \quad (3.29)$$

$$u[(u, \varphi)_H - (f, \varphi)] = 0. \quad (3.30)$$

Neste momento deve-se definir uma formulação discreta para o problema. Sejam V_h um subespaço de V de dimensão m e $\{\varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ um base para V_h tal que:

$$v = \sum_{j=1}^m \alpha_j \varphi_j \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \alpha \geq 0, \quad \forall v \in V_h. \quad (3.31)$$

Esta condição é suficiente para que possamos escrever um problema de complementaridade em função das coordenadas.

Defina $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ e $F, G \in \mathbb{R}^m$ tais que:

$$A_{ij} = (\varphi_j, \varphi_i)_H, \quad F_i = (f, \varphi_i), \quad G_i = (g, \varphi_i)_H, \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, m.$$

A formulação discreta para o problema é:

Encontrar $\alpha \in \mathbb{R}^m$ tal que:

$$A\alpha - F \geq 0, \quad (3.32)$$

$$\alpha \geq 0, \quad (3.33)$$

$$\alpha \bullet (A\alpha - F) = 0. \quad (3.34)$$

É necessário escolher um subespaço adequado $V_h \subset V$ e uma base com propriedades já mencionadas anteriormente. O método de elementos finitos auxilia nesta escolha.

3.3.2 Discretização pelo método de elementos finitos

Para finalizar o entendimento do método de elementos finitos, é necessário saber como são construídos os espaços de dimensão finita, também chamados de espaços de elementos

finitos. Para exemplificar, será apresentado um espaço V_h onde seja possível aplicar a técnica, considerando Ω um domínio em \mathbb{R}^n , $n = 1, 2$ ou 3 , com fronteira poligonal.

Segundo Johnson (1987), para definir um espaço de elementos finitos V_h , é necessário especificar:

1. uma **triangulação** $T_h = \{K\}$ para o domínio Ω ;
2. a natureza das funções $v \in V_h$ em cada **elemento** K ;
3. os parâmetros a serem usados para descrever as funções.

Seja $T_h = \{K\}$ uma triangulação do domínio Ω , ou seja, T_h é um conjunto de subdivisões de Ω , chamadas de elementos, satisfazendo algumas propriedades, dadas abaixo. Para $n = 1$, os elementos serão intervalos, para $n = 2$, triângulos, e para $n = 3$, tetraedros.

1. A reunião dos elementos é igual a $\bar{\Omega}$;
2. Dois elementos podem apenas ter pontos em comum em suas respectivas fronteiras;
3. Os vértices de um elemento podem apenas intersectar vértices de outros elementos.

Seja V_h o espaço das funções v que são afins em cada elemento K e tais que $v = 0$ sobre $\partial\Omega$. Este é um espaço muito utilizado em elementos finitos e, com esta definição, V_h é subespaço de $V = H_0^1(\Omega)$. No entanto, para que o espaço seja aplicável no problema anterior, este possuir um base que satisfaça a condição (3.31).

Seja $P = \{p_i\}$ o conjunto de vértices gerados pela triangulação. Para cada vértice p_j que não pertença à fronteira de Ω , defina a função $\varphi_j \in V_h$ da forma:

$$\varphi_j(p_i) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}, \quad \forall p_i \in P. \quad (3.35)$$

O conjunto β , formado pelas m funções φ_j definidas anteriormente, é base para o espaço V_h . Além disso, satisfaz a condição (3.31). De fato, seja $v = \sum_{j=1}^m \alpha_j \varphi_j$.

- Se $v \geq 0$, então $v(p_j) = \alpha_j \geq 0$, para cada vértice p_j que não pertença à fronteira de Ω . Logo $\alpha \geq 0$.

- Se $\alpha \geq 0$, então v é um somatório de funções não negativas e, portanto, $v \geq 0$.

Além de satisfazer a condição necessária, esta escolha de base apresenta outras vantagens. As matrizes geradas na simulação são esparsas e, dependendo da escolha de numeração dos vértices, são favoráveis ao armazenamento Skyline ou em banda. Além disso, para diversos problemas, essas matrizes são simétricas, ou até positivas definidas, o que permite a utilização de técnicas numéricas mais eficientes na resolução de sistemas lineares.

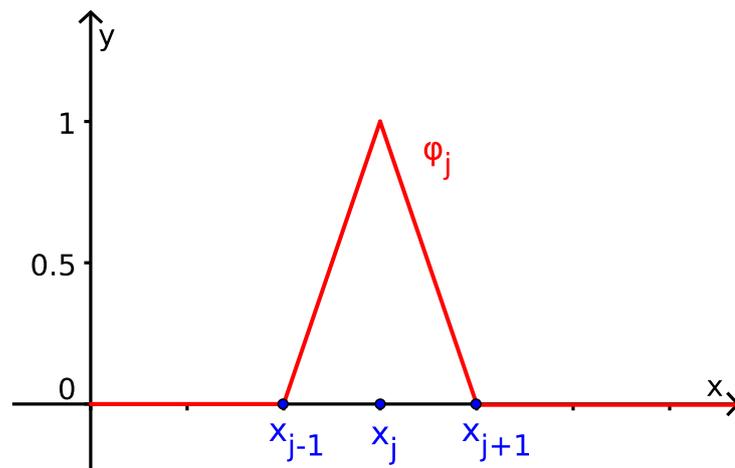


Figura 3.3: Gráfico da função base φ_j no caso unidimensional.

4 O problema da difusão de oxigênio

Este capítulo tem o intuito de apresentar o problema da difusão de oxigênio unidimensional e aplicar as formulações anteriormente descritas a fim de obter uma solução aproximada para este.

O problema da difusão de oxigênio em tecidos é um problema parabólico que aparece em diversas aplicações, como por exemplo, no tratamento de células cancerígenas, que absorvem uma maior quantidade de oxigênio em relação às células normais. Este problema foi estudado inicialmente por Crank e Gupta (1972), onde um modelo matemático de difusão biológica simula a injeção de oxigênio em uma célula infectada.

A presença de oxigênio favorece a absorção da radiação no tecido, então, uma primeira fase do problema permite que o oxigênio se difunda no meio, parte do oxigênio é absorvida pelo meio e a concentração de oxigênio na superfície é deixada constante. Esta fase continua até uma situação estacionária, em que o equilíbrio é atingido e o oxigênio para de penetrar. Na segunda fase, a superfície é selada e o oxigênio fica confinado no domínio. O meio continua a absorver o oxigênio e, como consequência, a fronteira que indica a penetração máxima de oxigênio começa a retroceder em direção à superfície selada.

O maior desafio é determinar a posição da fronteira móvel bem como a distribuição de oxigênio ao longo do tempo. Este tipo de problema é conhecido como problema de fronteira móvel implícita.

Alguns métodos numéricos e analíticos já foram utilizados a fim de obter uma solução para este problema. Crank e Gupta (1972) utilizaram uma solução analítica aproximada nos instantes iniciais quando a fronteira se move lentamente e um esquema numérico com malha fixa para velocidades maiores.

Em (HANSEN E HOUGAARD, 1974), utilizou-se uma equação integral para a função que define a posição da fronteira móvel e outra para a distribuição de concentração de oxigênio. Em (GUPTA E KUMAR, 1981), foi utilizado o método de Crank-Nicolson, um esquema implícito de diferenças finitas, evitando o grande número de passos no tempo

exigidos para os métodos anteriores. Devido à fronteira móvel implícita, uma equação integral foi utilizada para determinar os passos no tempo. Um método semi-analítico foi proposto em (GUPTA E BANIK, 1989). E em (BOUREGHDA, 2006), o problema da difusão de oxigênio foi estudado analiticamente.

Chapiro et al. (2010); Gutierrez (2013) apresentaram um modelo na forma de um problema de complementaridade para o problema da difusão de oxigênio. Utilizou-se a ideia do método de Crank-Nicolson para a discretização espaço-temporal e o FDA-NCP para a resolução do problema de complementaridade não-linear resultante. Recentemente, Pereira et al. (2014) apresentaram um trabalho utilizando o método de elementos finitos, via formulação clássica de Galerkin, para a discretização espacial do modelo de complementaridade para o problema, o método de Euler Implícito para a discretização no tempo e o método FDA-NCP para a resolução do problema de complementaridade não linear obtido em cada iteração.

4.1 Modelo Físico

Nesta seção é apresentado o modelo físico para a difusão de oxigênio em uma célula. Por simplicidade, adota-se a hipótese de que o meio absorve e imobiliza o oxigênio a uma taxa constante. A fronteira móvel indica o limite de penetração do oxigênio.

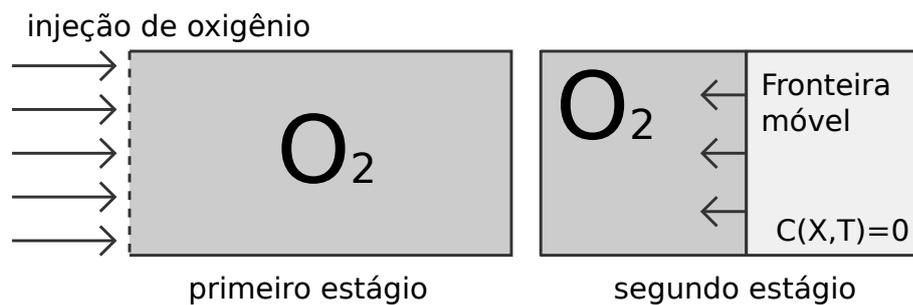


Figura 4.1: Representação da difusão de oxigênio em uma célula. A figura à esquerda representa o primeiro estágio, onde o oxigênio é inserido até que o equilíbrio seja atingido. No segundo estágio, à direita, a superfície externa é selada e o oxigênio se difunde e é absorvido pelo meio. [Adaptado de: Chapiro et al. (2010)]

Denote por $C(X, T)$ a concentração de oxigênio livre para difusão à uma distância X da superfície externa do meio (mais à esquerda) no tempo T . Além disso, D é o coeficiente de difusão e r , a taxa de consumo de oxigênio por unidade de volume no

meio (assumida constante quando $C(X, T) > 0$). O estado estacionário para a função concentração, que representa o primeiro estágio completo, é dado pela solução da equação

$$D\partial_{XX}C - r = 0, \quad (4.1)$$

onde C satisfaz as condições

$$C = \partial_X C = 0, \quad X_0 \leq X, \quad (4.2)$$

$$C = C_0 = cte, \quad X = 0, \quad (4.3)$$

em que X_0 indica a penetração máxima de oxigênio.

A função que descreve concentração de oxigênio ao longo da célula ao final do primeiro estágio pode ser calculada analiticamente:

$$C = \frac{r}{2D}(X - X_0)^2, \quad X_0 = \sqrt{\frac{2DC_0}{r}}. \quad (4.4)$$

Com o selamento da superfície externa em $X = 0$, dá-se início ao segundo estágio do modelo, o qual foi simulado neste trabalho. Não é conhecida solução analítica para este estágio, fator que torna interessante sua simulação. A posição do retrocesso da fronteira de oxigênio é dada por $X_0(T)$ e o problema a ser resolvido torna-se:

$$\partial_T C = D\partial_{XX}C - r, \quad 0 < X < X_0(T), \quad T > 0, \quad (4.5)$$

$$\partial_X C = 0, \quad X = 0, \quad T > 0, \quad (4.6)$$

$$C = \partial_X C = 0, \quad X = X_0(T), \quad T > 0, \quad (4.7)$$

$$C(X, 0) = \frac{r}{2D}(X - X_0)^2, \quad 0 \leq X \leq X_0, \quad (4.8)$$

onde o instante $T = 0$ indica o momento em que a superfície foi selada. Fazendo a substituição de variáveis

$$x = \frac{X}{X_0}, \quad t = \frac{D}{X_0^2}T, \quad c = \frac{C}{2C_0}, \quad (4.9)$$

e denotando por $s(t)$ o valor de x correspondente à $X_0(T)$, o sistema anterior pode ser escrito na forma adimensional:

$$\partial_t c = \partial_{xx} c - 1, \quad 0 < x < s(t), \quad t > 0, \quad (4.10)$$

$$\partial_x c = 0, \quad x = 0, \quad t > 0, \quad (4.11)$$

$$c = \partial_x c = 0, \quad x = s(t), \quad t > 0, \quad (4.12)$$

$$c(x, 0) = \frac{1}{2}(1 - x)^2 = c_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (4.13)$$

Seguindo o que foi feito por Baiocchi e Pozzi (1975), este sistema adimensional pode ser posto na forma de um problema de complementaridade equivalente sobre o intervalo $(0, 1)$, cujo domínio não depende mais da fronteira móvel. De modo que para $x \in (0, 1)$ e $t > 0$ vale o problema de complementaridade

$$\partial_t c - \partial_{xx} c + 1 \geq 0, \quad (4.14)$$

$$c \geq 0, \quad (4.15)$$

$$(\partial_t c - \partial_{xx} c + 1) c = 0, \quad (4.16)$$

com condição inicial dada na Eq. (4.13) e condições de fronteira

$$\partial_x c(0, t) = 0, \quad (4.17)$$

$$c(1, t) = \partial_x c(1, t) = 0. \quad (4.18)$$

Note que para $0 \leq x \leq s(t)$ a desigualdade dada em Eq. (4.14) se transforma em igualdade, como na Eq. (4.10). Já para o caso em que $s(t) \leq x \leq 1$ a desigualdade dada em Eq. (4.15) se transforma em igualdade, já que a fronteira móvel determina a presença ou não de oxigênio livre. Observe, também, que são dadas duas condições de contorno no ponto $x = 1$, Eq. (4.18). A condição de Dirichlet $c(1, t) = 0$ é utilizada neste trabalho, e $\partial_x c(1, t) = 0$ é obtida de maneira implícita.

4.2 Modelagem matemática

Nesta seção são apresentados os modelos matemáticos: contínuo, semi-discreto e discreto, para o problema de complementaridade descrito em Eq. (4.14)-(4.18).

Seja $V = \{v \in H^1(0,1); v(1) = 0\}$ o espaço vetorial das funções teste e (\cdot, \cdot) , $(\cdot, \cdot)_H$ como em Eq. (3.3.1).

Seja β uma base não negativa para V , ou seja, $\varphi \geq 0$, $\forall \varphi \in \beta$. Para um $t > 0$ fixo, repita o procedimento feito no problema modelo do capítulo 3. O que resulta em encontrar $c : (0, +\infty) \rightarrow V$ tal que, para cada $t > 0$ fixo e toda função $\varphi \in \beta$, satisfaça

$$c \geq 0, \quad (4.19)$$

$$(\partial_t c, \varphi) + (c, \varphi)_H + (1, \varphi) \geq 0, \quad (4.20)$$

$$[(\partial_t c, \varphi) + (c, \varphi)_H + (1, \varphi)]c = 0. \quad (4.21)$$

Em geral, a condição inicial utilizada no método de Galerkin é a função $c \in V$ que satisfaz:

$$(c, \varphi) = (c_0, \varphi), \quad \forall \varphi \in \beta. \quad (4.22)$$

Porém, utilizar tal função não garante a positividade da condição inicial. Baseado no fato de que a função c_0 é estritamente positiva em $(0,1)$, foi escolhido tratar a solução inicial através da resolução do seguinte problema de complementaridade:

$$c \geq 0, \quad (4.23)$$

$$(c, \varphi) - (c_0, \varphi) \geq 0, \quad (4.24)$$

$$[(c, \varphi) - (c_0, \varphi)]c = 0. \quad (4.25)$$

Portanto pode ser apresentada a seguinte formulação variacional para o problema da difusão de oxigênio em uma célula:

Encontrar $c : [0, +\infty) \rightarrow V$ tal que, para cada $t \geq 0$ fixo e toda função $\varphi \in \beta$, satisfaça

$$c \geq 0, \quad (4.26)$$

$$(\partial_t c, \varphi) + (c, \varphi)_H + (1, \varphi) \geq 0, \quad t > 0, \quad (4.27)$$

$$[(\partial_t c, \varphi) + (c, \varphi)_H + (1, \varphi)]c = 0, \quad t > 0, \quad (4.28)$$

$$(c, \varphi) - (c_0, \varphi) \geq 0, \quad t = 0, \quad (4.29)$$

$$[(c, \varphi) - (c_0, \varphi)]c = 0, \quad t = 0. \quad (4.30)$$

4.2.1 Modelo discreto

Para resolver o problema numericamente, é necessário definir um problema discreto cuja solução aproxima-se do problema contínuo. Sejam V_h um subespaço de V de dimensão m e $\{\varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ uma base que satisfaça (3.31).

As funções admissíveis para o problema discreto podem ser definidas por $c_m : [0, 1] \times [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ da forma:

$$c_m(x, t) = \sum_{j=1}^m \alpha_j(t) \varphi_j(x), \quad (4.31)$$

Definindo $A, K \in \mathbb{R}^{m \times m}$ e $F, F_0 \in \mathbb{R}^m$ tais que:

$$A_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j), \quad K_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_H, \quad F_i = (1, \varphi_i), \quad F_{0i} = (c_0, \varphi_i), \quad (4.32)$$

pode-se escrever a Ineq. (4.27), para cada $i = 1, 2, \dots, m$ e $t > 0$ fixado, como:

$$(\partial_t c_m(t), \varphi_i) + (c_m(t), \varphi_i)_H + (1, \varphi_i) = \sum_{j=1}^m (\alpha'_j(t) A_{ij} + \alpha_j(t) K_{ij}) + (1, \varphi_i). \quad (4.33)$$

Logo, a formulação semi-discreta para o problema da difusão de oxigênio em uma célula é:

Encontrar $\alpha : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^m$ tal que

$$\alpha \geq 0, \quad (4.34)$$

$$A\alpha' + K\alpha + F \geq 0, \quad t > 0, \quad (4.35)$$

$$(A\alpha' + K\alpha + F) \bullet \alpha = 0, \quad t > 0, \quad (4.36)$$

$$A\alpha - F_0 \geq 0, \quad t = 0, \quad (4.37)$$

$$(A\alpha - F_0) \bullet \alpha = 0, \quad t = 0. \quad (4.38)$$

Para que seja possível realizar a simulação computacional, é necessária a construção de um esquema totalmente discreto. Para tanto, defina o intervalo de tempo de simulação como $[0, t_f]$, onde t_f representa o tempo final. Seja $0 = t_0 < \dots < t_{n_t} = t_f$ uma discretização do intervalo $[0, t_f]$. O passo de tempo é denotado por $\Delta t_k = t_k - t_{k-1}$ para cada $k = 1, 2, \dots, n_t$.

Foi utilizada a seguinte aproximação para a derivada no tempo:

$$\frac{\alpha^k - \alpha^{k-1}}{\Delta t_k} := \alpha'(t_k) \approx \frac{\alpha(t_k) - \alpha(t_{k-1})}{\Delta t_k}, \quad (4.39)$$

inspirada no método de Euler Implícito.

Para cada $k = 0, 1, 2, \dots, n_t$, defina as funções vetoriais $F^k : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ como

$$F^k(\alpha) = \begin{cases} (A + \Delta t_k K)\alpha - A\alpha^{k-1} + \Delta t_k F, & k > 0, \\ A\alpha - F_0, & k = 0. \end{cases} \quad (4.40)$$

cujas derivadas podem ser expressas por:

$$\nabla F^k(\alpha) = \begin{cases} A + \Delta t_k K, & k > 0, \\ A, & k = 0. \end{cases} \quad (4.41)$$

Pode, então, ser introduzida a formulação discreta para o modelo:

Para cada $k = 0, 1, \dots, n_t$, encontrar $\alpha^k \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\alpha^k \geq 0, \quad (4.42)$$

$$F^k(\alpha^k) \geq 0, \quad (4.43)$$

$$F^k(\alpha^k) \bullet \alpha^k = 0. \quad (4.44)$$

4.3 Simulação numérica

Nesta seção, são apresentados alguns comentários sobre a implementação dos esquemas discretos construídos na seção anterior, bem como os parâmetros de simulação que foram utilizados e os resultados obtidos. Também mostramos uma comparação com outros métodos utilizados para resolver o problema da difusão de oxigênio em uma célula.

O espaço de elementos finitos utilizado é o espaço de funções contínuas e lineares por partes, descrito no capítulo 3. Como ponto de partida para o passo k no método FDA-NCP, foi utilizada a solução obtida no passo $k - 1$ somada uma perturbação, a fim de afastar o ponto da fronteira da região de viabilidade. Afastar o ponto da fronteira da região viável é interessante, já que pontos muito próximos da fronteira necessitam de mais iterações para encontrar uma direção viável.

Como no trabalho de Pereira et al. (2014), foram realizadas simulações numéricas utilizando os parâmetros:

$$t_f = 0,2; \quad m = 800; \quad n_t = 20000; \quad (4.45)$$

$$h_j = \frac{1}{M} = 1,25 \times 10^{-3}; \quad \Delta t_k = \frac{t_f}{N} = 10^{-5}; \quad tol = 10^{-14}; \quad (4.46)$$

onde tol representa o potencial Φ , descrito na Eq. (3.17), que deve ser atingido para a convergência do algoritmo FDA-NCP.

Os resultados obtidos são mostrados nas Fig. 4.2 e 4.4. As Fig.4.3 e 4.5 mostram a simulação obtida no trabalho de Chapiro et al. (2010). A Tab. 4.1, apresenta a comparação dos valores da posição da fronteira móvel ao longo do tempo com outros métodos propostos.

Através da comparação dos gráficos, podemos perceber uma semelhança entre os

perfis de solução obtidos. Os valores da tabela Tab. 4.1 apresentam os valores de posição da fronteira móvel e mostram que o método utilizado neste trabalho, denominado MEF-FDA, possui semelhança com métodos anteriormente aplicados ao problema. Como a maneira de se calcular a posição da fronteira móvel varia de trabalho para trabalho e, em alguns trabalhos, o nível de discretização utilizado não é apresentado, a comparação dos dados serve somente como indicativo de que o método se comporta de maneira semelhante aos demais.

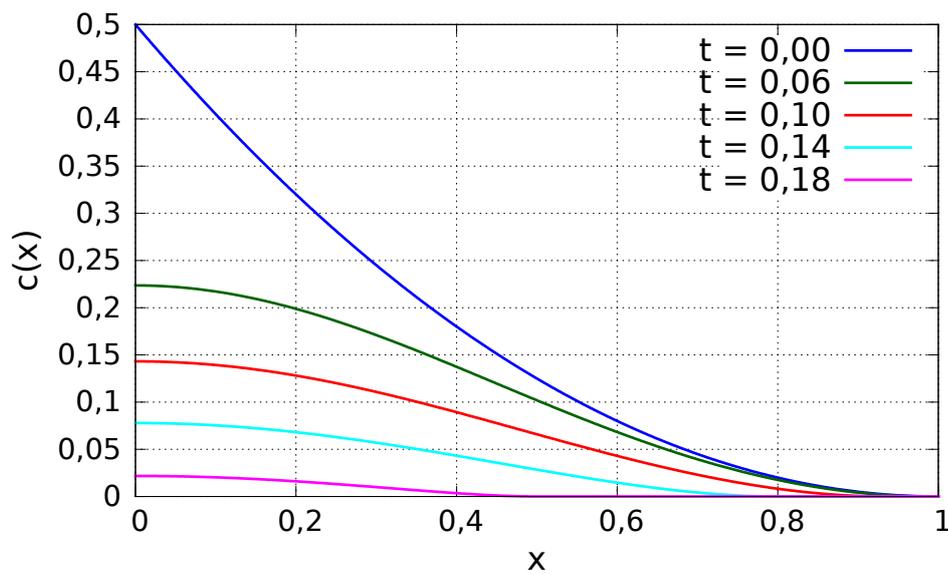


Figura 4.2: Concentração ao longo do tempo.

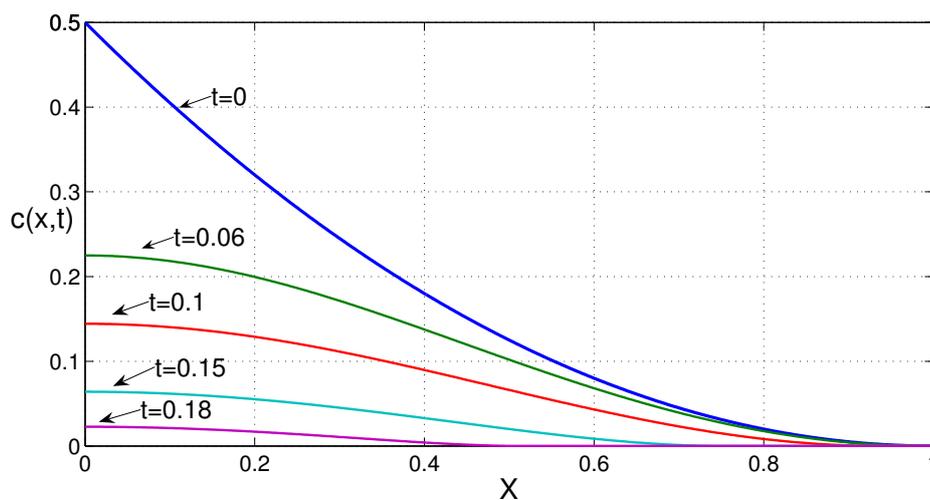


Figura 4.3: Concentração ao longo do tempo. [Fonte: Chapiro et al. (2010)]

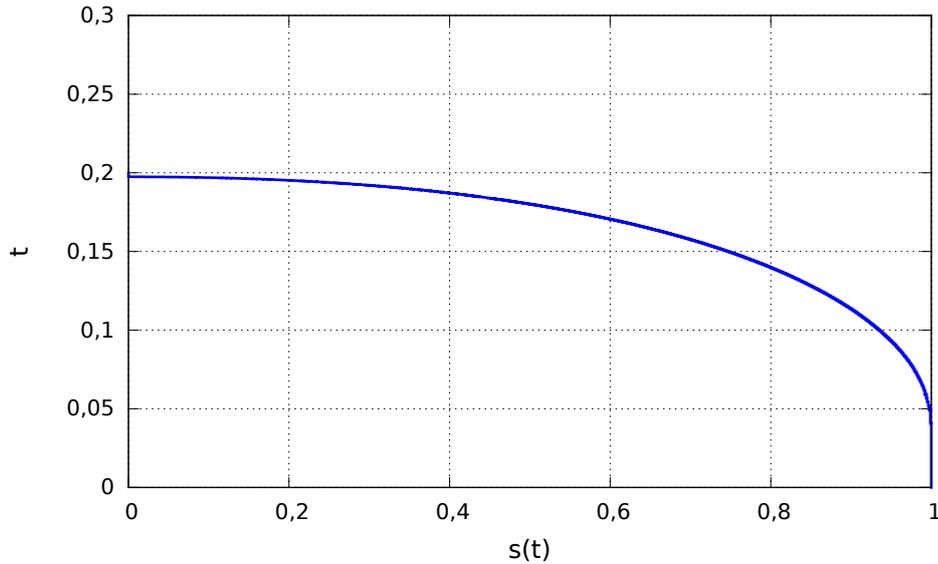


Figura 4.4: Posição da fronteira móvel ao longo do tempo.

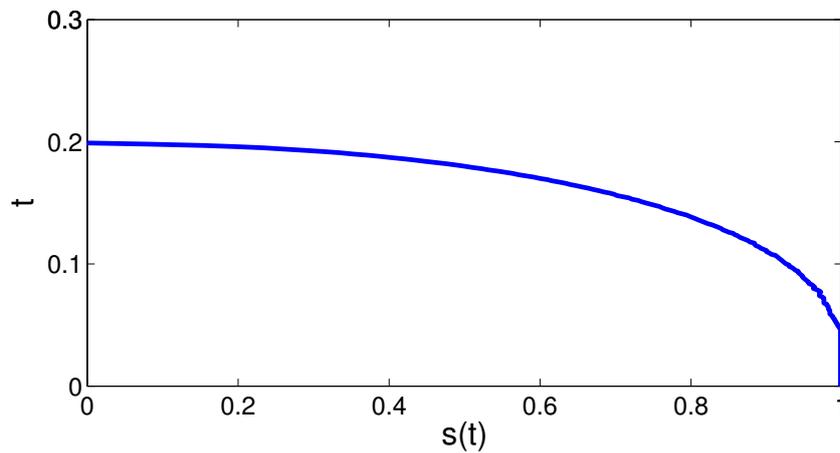


Figura 4.5: Posição da fronteira móvel ao longo do tempo. [Fonte: Chapiro et al. (2010)]

Tabela 4.1: Posição da fronteira móvel em relação ao tempo. Algoritmos: CN-cub: (Chapiro et al., 2010); A: (AHMED, 2006); HH: (HANSEN E HOUGAARD, 1974); CG: (Crank e Gupta, 1972); G: (Gupta, 1973); GK: (GUPTA E KUMAR, 1981); MEF-FDA: algoritmo deste trabalho.

t	MEF-FDA	CN-cub	A	HH	CG	G	GK
0,000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	-	-	-
0,020	1,0000	1,0000	0,9992	1,0000	-	-	-
0,040	1,0000	1,0000	0,9983	0,9992	0,9988	0,9988	0,9950
0,060	0,9925	0,9840	0,9921	0,9992	0,9905	0,9903	0,9899
0,080	0,9725	0,9640	0,9663	0,9716	0,9650	0,9613	0,9623
0,100	0,9350	0,9303	0,9313	0,9350	0,9312	0,9301	0,9249
0,120	0,8800	0,8730	0,8750	0,8792	0,8747	0,8719	0,8703
0,140	0,7988	0,7928	0,7937	0,7989	0,7912	0,7882	0,7916
0,160	0,6838	0,6748	0,6784	0,6834	0,6756	0,6682	0,6825
0,180	0,5012	0,4942	0,4909	0,5011	0,4849	0,4766	0,4768
0,190	0,3462	0,3419	0,3401	0,3454	-	-	-
0,195	0,2088	0,2049	0,2012	0,2065	-	-	-

5 Considerações finais

Neste trabalho foi apresentada uma abordagem numérica para o tratamento de problemas de complementaridade que envolvem coordenadas espaciais, utilizando o método de elementos finitos e o algoritmo FDA-NCP. A metodologia foi aplicada em um problema estudado previamente em outras referências, o problema da difusão de oxigênio em uma célula, e os resultados obtidos nas Fig. 4.2 e 4.4 e Tab. 4.1 mostram concordância com os demais trabalhos.

Além do objetivo principal, este trabalho serve como divulgação do assunto Problemas de Complementaridade, que é um tema pouco difundido, além de apresentar uma técnica simples de resolução desta classe de problemas, que é o algoritmo FDA-NCP. O método de elementos finitos, também muito conhecido na engenharia, é apresentado com sua formulação baseada no método de Galerkin, o que serve também como conteúdo de divulgação geral.

Apesar de a aplicação numérica ter sido feita apenas para problemas com uma dimensão espacial, a técnica desenvolvida pode ser aplicada em problemas que extrapolam tal restrição, como no exemplo feito na seção 3.3. Por ser utilizado o método de elementos finitos, é possível inclusive aplicar a técnica em domínios com formas irregulares de maneira mais simplificada do que com a utilização de outros métodos, como o de diferenças finitas. Além disso, o exemplo resolvido numericamente gera um problema de complementaridade linear, ou seja, a função F associada é linear, porém a metodologia numérica de resolução proposta pode ser aplicada a problemas não lineares.

A partir deste trabalho, surgem algumas ideias que motivam trabalhos futuros. Uma delas é encontrar outros espaços de elementos finitos que possuam bases satisfazendo a condição (3.31), de tal forma que o raciocínio desenvolvido neste trabalho continue aplicável. Uma outra ideia é buscar condições, possivelmente mais gerais, que possibilitem a aplicação da técnica. Outro estudo interessante é verificar condições necessárias e/ou suficientes para que haja equivalência entre as formulações forte, fraca e discretas.

Referências Bibliográficas

- Ahmed, S. A numerical method for oxygen diffusion and absorption in a sike cell. **Applied Mathematics and Computation**, v.173, n.1, p. 668–682, 2006.
- Arora, J. S. **Introduction to optimum design**. 2. ed., Academic, London, 2004.
- Bouregghda, A. Numerical solution of the oxygen diffusion in absorbing tissue with a moving boundary. **Communications in Numerical Methods in Engineering**, v.22, n.9, p. 933–942, 2006.
- Baiocchi, C.; Pozzi, G. An evolution variational inequality related to a diffusion-absorption problem. **Applied Mathematics and Optimization**, v.2, n.4, p. 304–314, 1975.
- Becker, E. B.; Carey, G. F. ; Oden, J. T. **Finite Elements, An Introduction**, volume I. 3. ed., Prentice-Hall, Inc., 1981.
- Ben Gharbia, I.; Jaffré, J. **Gas phase appearance and disappearance as a problem with complementarity constraints**. INRIA report, 2011.
- Brooks, A. N.; Hughes, T. J. Streamline upwind/ Petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, v.32, n.1, p. 199–259, 1982.
- Chapiro, G.; Mazorche, S. R.; Norman, J. H. ; Roche, J. R. Solution of the non-linear parabolic problems using nonlinear complementarity algorithm (fda-ncp). **Mecânica Computacional**, v.XXIX, n.21, p. 2141–2153, 2010.
- Cottle, R. W. Nonlinear programs with positively bounded jacobians. **SIAM Journal on Applied Mathematics**, v.14, n.1, p. 147–158, 1966.
- Crank, J.; Gupta, R. A moving boundary problem arising from the diffusion of oxygen in absorbing tissue. **IMA Journal of Applied Mathematics**, v.10, n.1, p. 19–33, 1972.
- Furtado, M. **Notas de EDP2 (versão 1.2)**. Universidade de Brasília, 2012.
- Ferris, M. C.; Pang, J.-S. Engineering and economic applications of complementarity problems. **Siam Review**, v.39, n.4, p. 669–713, 1997.
- Friedlander, A. **Elementos de programação não-linear**. Editora da UNICAMP, 1994.
- Gupta, R.; Kumar, D. Variable time step methods for one-dimensional stefan problem with mixed boundary condition. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.24, p. 251–259, 1981.
- Gupta, R.; Banik, N. Approximate method for the oxygen diffusion problem. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.32, n.4, 1989.

- Galerkin, B. G. Sterzhni i plastinki. ryady v nekotorykh voprosakh uprugogo ravnovesiya sterzhney i plastin. **Vestnik inzhenerov i tekhnikov**, v.19, 1915. (Tradução: Barras e placas. As séries em algumas questões de equilíbrio elástico de barras e placas. Notícias de engenheiros e técnicos, v.19, 1915).
- Gupta, R. **Tese**. 1973. Tese de Doutorado - Brunel University.
- Gutierrez, A. E. R. **Aplicação do método de complementaridade não linear para o estudo de combustão de oxigênio in situ**. 2013. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Juiz de Fora.
- Hansen, E.; Hougaard, P. On a moving boundary problem from biomechanics. **IMA Journal of Applied Mathematics**, v.13, n.3, p. 385–398, 1974.
- Herskovits, J.; Mapp, P.; Goulart, E. ; Soares, C. M. M. Mathematical programming models and algorithms for engineering design optimization. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.194, n.30–33, p. 3244–3268, 2005.
- Harker, P. T.; Pang, J.-S. Finite-dimensional variational inequality and nonlinear complementarity problems: a survey of theory, algorithms and applications. **Mathematical programming**, v.48, n.1-3, p. 161–220, 1990.
- Heath, M. T. **Scientific Computing: An Introduction Survey**. University of Illinois, Urbana-Champaign, 1997.
- Herskovits, J. **Développement d'une méthode numérique pour l'Optimisation non linéaire**. 1982. Tese de Doutorado - Paris IX University, INRIA-Rocquencourt. (em inglês).
- Herskovits, J. A two-stage feasible directions algorithm for nonlinear constrained optimization. **Math Program**, v.36, p. 19–38, 1986.
- Herskovits, J.; Santos, G. **Feasible arc interior point algorithms for nonlinear optimization**. In: Fourth World Congress on Computational Mechanics, 1998.
- Johnson, C. **Numerical solution of partial differential equations by the finite element method**. Cambridge University Press, 1987.
- Lauser, A.; Hager, C.; Helmig, R. ; Wohlmuth, B. A new approach for phase transitions in miscible multi-phase flow in porous media. **Advances in Water Resources**, v.34, n.8, p. 957–966, 2011.
- Marchand, E.; Müller, T. ; Knabner, P. Fully coupled generalised hybrid-mixed finite element approximation of two-phase two-component flow in porous media. part ii: numerical scheme and numerical results. **Computational Geosciences**, v.16, n.3, p. 691–708, 2012.
- Marchand, E.; Müller, T. ; Knabner, P. Fully coupled generalized hybrid-mixed finite element approximation of two-phase two-component flow in porous media. part i: formulation and properties of the mathematical model. **Computational Geosciences**, v.17, n.2, p. 431–442, 2013.
- Mazorche, S. R. **Algoritmos para Problemas de Complementaridade Não Linear**. 2007. Tese de Doutorado - UFRJ.

- Pachas, D. A. G. **Inequações variacionais e aplicações em problemas tipo obstáculo com resolução numérica via complementaridade**. 2013. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Juiz de Fora.
- Pereira, W. S.; Gutierrez, A. E. R.; Mazorche, S. R. ; Chapiro, G. **Simulação de um problema de difusão de oxigênio utilizando o método de elementos finitos e fda-ncp**. In: SIMMEC / EMMCOMP, volume XI, 2014.
- de Souza, T. R. **Aplicação do método de galerkin para equações e sistemas elípticos**. Agosto 2005. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Campina Grande.
- Vanderplaats, P. **Numerical optimization techniques for engineering design**. 3. ed., VR&D, Colorado Springs, 1999.

A Noções de espaços de funções

Neste apêndice são apresentadas algumas definições e resultados básicos, retirados de (FURTADO, 2012), necessários para o bom entendimento dos espaços de funções presentes no método de elementos finitos.

Definição A.0.1. Seja V um Espaço Vetorial normado (EVn). Uma sequência $(x_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset V$ converge para x^* se, para todo $\epsilon > 0$, existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|x_n - x^*\| < \epsilon, \quad \forall n \geq n_0. \quad (\text{A.1})$$

Para um conjunto A em um EVn, os conjuntos $\overset{\circ}{A}$, ∂A e \bar{A} , representam o interior, a fronteira e o fecho de A , respectivamente.

Definição A.0.2. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ e $1 \leq p < \infty$. Define-se o operador

$$\|f\|_p := \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (\text{A.2})$$

Definição A.0.3. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$. A classe de equivalência de uma função $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é definida por

$$[f] := \{g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; f = g \text{ em quase todos os pontos}\}. \quad (\text{A.3})$$

Definição A.0.4. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$ e $1 \leq p < \infty$. Define-se o conjunto

$$L^p(\Omega) := \{ [f]; f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ e } \|f\|_p < \infty \}. \quad (\text{A.4})$$

Proposição A.0.1. Se $1 \leq p < \infty$, $L^p(\Omega)$ é um EVn com as operações

$$[f] + [g] := [f + g] \quad \text{e} \quad \lambda[f] := [\lambda f], \quad \forall [f], [g] \in L^p(\Omega) \quad \text{e} \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.5})$$

e com norma

$$\|[f]\|_p := \|f\|_p, \quad \forall [f] \in L^p(\Omega). \quad (\text{A.6})$$

Por facilidade de notação, sempre que uma operação envolver uma classe de $L^p(\Omega)$, será escolhida uma função desta classe para realizar a operação.

Corolário A.0.1. $L^2(\Omega)$ é um espaço vetorial com o produto interno

$$\langle f, g \rangle := \int_{\Omega} |f(x)g(x)| dx. \quad (\text{A.7})$$

Denota-se por $C(\Omega)$, ou $C^0(\Omega)$, o conjunto das funções reais contínuas em Ω .

O vetor α com entradas em $\mathbb{N} \cup \{0\}$ é dito multi-índice, e $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$ é a ordem de α . Se $|\alpha| > 0$ e $u \in C(\Omega)$ denotamos

$$D^\alpha u := \frac{\partial^k u}{\partial^{\alpha_1} x_1 \cdots \partial^{\alpha_n} x_n}, \quad (\text{A.8})$$

quando a derivada mista existe.

Definição A.0.5. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$ e $k \in \mathbb{N}$. São definidos os conjuntos

$$C^k(\Omega) := \{u \in C(\Omega); \text{ existe } D^\alpha u \in C(\Omega), 0 < |\alpha| \leq k\} \quad \text{e} \quad (\text{A.9})$$

$$C^\infty(\Omega) := \bigcap_{k \in \mathbb{N}} C^k(\Omega). \quad (\text{A.10})$$

Definição A.0.6. Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Define-se o suporte de f por

$$\text{supp } f := \overline{\{x \in D; f(x) \neq 0\}}. \quad (\text{A.11})$$

Definição A.0.7. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$ e $k \in \mathbb{N}$. É definido o conjunto

$$C_0^k(\Omega) := \{u \in C^k(\Omega); \text{ supp } u \subset \Omega\}, \quad k \in \mathbb{N} \cup \{0, \infty\}. \quad (\text{A.12})$$

Definição A.0.8. Sejam $\Omega \in \mathbb{R}^n$ um aberto, $u \in L^2(\Omega)$ e α um multi-índice. Se

$$\int_{\Omega} u(x) D^\alpha \varphi(x) dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v(x) \varphi(x) dx, \quad \forall \varphi \in C_0^\infty(\Omega), \quad (\text{A.13})$$

então v é a α -ésima derivada fraca de u .

Proposição A.0.2. *A α -ésima derivada fraca, quando existe, é única, a menos de um conjunto de medida nula.*

Proposição A.0.3. *Se uma função u possui uma α -ésima derivada no sentido clássico, então u possui tal derivada no sentido fraco e esta coincide com a primeira.*

A notação utilizada para a α -ésima derivada fraca de uma função u , também é $D^\alpha u$, devido aos resultados anteriores.

Definição A.0.9. Sejam o aberto $\Omega \in \mathbb{R}^n$ e $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. O espaço $H^k(\Omega)$ é definido por

$$H^k(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega); D^\alpha u \in L^2(\Omega), |\alpha| \leq k\}. \quad (\text{A.14})$$

Neste trabalho, o espaço $H^1(\Omega)$ será utilizado para encontrar soluções para os problemas. Particularmente, este é um EVn com a função norma definida por:

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{\|u\|_2^2 + \int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 dx} := \sqrt{\|u\|_2^2 + \|\nabla u\|_2^2} \quad (\text{A.15})$$

Definição A.0.10. Seja o aberto $\Omega \in \mathbb{R}^n$. O espaço $H_0^1(\Omega)$ é definido por

$$H_0^1(\Omega) = \overline{C_0^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}}. \quad (\text{A.16})$$

e pode ser entendido como o conjunto das funções em $H^1(\Omega)$ que, num certo sentido, se anulam no bordo.

Este também é um EVn com a função norma definida por:

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} = \|\nabla u\|_2 \quad (\text{A.17})$$