

Laboratório Nacional de Computação Científica  
Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Acoplamento de Modelos Dimensionalmente  
Heterogêneos: Formulações Variacionais e Métodos  
Iterativos**

Por

**Karine Damásio Guimarães**

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2011

**ACOPLAMENTO DE MODELOS DIMENSIONALMENTE  
HETEROGÊNEOS: FORMULAÇÕES VARIACIONAIS E  
MÉTODOS ITERATIVOS**

**Karine Damásio Guimarães**

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO  
NACIONAL DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISI-  
TOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM  
CIÊNCIAS EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Aprovada por:

---

Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc.

(Presidente)

---

Prof. Abimael Fernando Dourado Loula, D.Sc.

---

Prof. Gustavo Carlos Buscaglia, D.Sc.

PETROPOLIS, RJ - BRASIL  
ABRIL DE 2011

Guimarães, Karine Damásio

G963a            Acoplamento de Modelos Dimensionalmente Heterogêneos: Formulações Variacionais e Métodos Iterativos / Karine Damásio Guimarães. Petrópolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2011.

xii, 120 p. : il.; 29 cm

Orientador: Pablo Javier Blanco

Dissertação (M.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2011.

1. Modelos Matemáticos. 2. Formulação Variacional. 3. Decomposição de Domínio. 4. Métodos Iterativos. 5. Elementos Finitos. I. Blanco, Pablo Javier. II. LNCC/MCT. III. Título.

CDD 518.25

... a saber, pois a forma de todo universo é do mais perfeito, e, de fato é desenhado pelo criador mais sábio, nada acontecerá no mundo sem que se destaque, de algum jeito, a presença de uma regra máxima ou mínima.

*Leonhard Euler (1707-1783)*

# Agradecimentos

Antes de tudo, quero agradecer a Deus por ser fonte inesgotável de luz que ilumina e guia todos os meus passos e por ter sido sustentação nestes anos de estudo que direcionaram a obtenção deste título.

Dando continuidade, dedico algumas palavras aqueles que fizeram parte deste trabalho direta ou indiretamente, partindo do contexto profissional ao pessoal.

As primeiras palavras são, portanto, dedicadas ao meu orientador Pablo. Agradeço por todo empenho, sabedoria, compreensão e, acima de tudo, exigência. Gostaria de ratificar a sua competência e agradecer pelo ensinamento em discussões pessoais, de um conhecimento que não se encontra nos livros. Agradeço, sobretudo, às correções, revisões e sugestões que fizeram com que concluíssemos este trabalho.

Agradeço aos membros da banca Abimael Loula e Gustavo Buscaglia, pelos valiosos comentários e sugestões que muito contribuíram para esta forma final do trabalho.

Aos companheiros de trabalho Sansuke, Daniel e Rafael pelos comentários e observações nas reuniões do grupo e pela permanente solicitude.

Às secretárias Angela, Natália e Ana Paula por tornarem factível a realização deste trabalho sendo prestativas quando precisei, e à Ana Neri pelo apoio, sendo uma profissional extremamente competente e dedicada e pelo carinho que sempre demonstrou por mim.

Aos meus colegas e professores do LNCC que contribuíram de forma direta ou indireta para a realização deste trabalho. E, finalmente, agradeço ao LNCC e ao CNPq por fornecerem o apoio necessário à realização da pesquisa e pelo apoio financeiro.

Passando aos agradecimentos pessoais, agradeço em primeiro lugar a todos os meus familiares. Meus pais, Maria e Gerson por contribuírem na minha educação e pela orações, sempre bem vindas, de minha mãe. Agradeço a ela pelo amor, pela força e incentivo nos meus estudos. À minha saudosa prima Luciana (*in memoriam*), que sempre me incentivava com lições de esperança e força.

Agradeço de todo o meu coração a Mattheus pela força, por todas as palavras de conforto, conselhos e apoio em horas de incerteza pelas quais passei ao chegar. Sou profundamente grata ao incentivo que me deu para que hoje eu esteja aqui neste Instituto.

A todos os amigos que conquistei no LNCC, em especial a Jonatha e Dany, pelos momentos inesquecíveis que passamos juntos, pelo companheirismo, apoio, amizade e pelas diversões compartilhadas. Obrigada por fazerem parte da minha vida e, assim, torná-la mais agradável. Claudinha, muito obrigada pelas palavras que sempre acalmaram meu coração nas horas difíceis ou simplesmente conversas com ensinamentos valiosos e conselhos sinceros. Sou extremamente grata pela sinceridade da nossa amizade. Ao meu querido amigo Sansuke, por simplesmente tornar real a existência de um anjo da guarda na terra, muito obrigada. Diego, agradeço afetuosamente pela ajuda incondicional e pela companhia carinhosa. Obrigada por estar por perto nos meus momentos difíceis e alegres. E a José, pelo convívio e amizade compartilhadas nesse tempo.

E, por último, mas não menos especiais, agradeço aos meus amados amigos da Bahia Alex, Thalita, Bruno e Gabeh. Estes que me acompanharam desde a graduação e continuarão a fazer parte da minha história, e que, mesmo à distância, fizeram chegar de diversas formas seus incentivos e carinhosos cuidados.

Resumo da Dissertação apresentada ao LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

**ACOPLAMENTO DE MODELOS DIMENSIONALMENTE  
HETEROGÊNEOS: FORMULAÇÕES VARIACIONAIS E  
MÉTODOS ITERATIVOS**

Karine Damásio Guimarães

Abril , 2011

**Orientador:** Pablo Javier Blanco, D.Sc.

O objetivo deste trabalho, por um lado, é estudar as bases teóricas, dentro do contexto variacional, a fim de formular o problema de acoplamento entre modelos matemáticos dimensionalmente heterogêneos. Por outro lado, devido às características do problema algébrico resultante e à necessidade de acesso completo a códigos numéricos de resolução aproximada, objetiva-se estudar o emprego de estratégias de decomposição de domínio para resolver o problema de forma iterativa através da sucessiva resolução de problemas dimensionalmente homogêneos, cuja resolução é mais simples e para os quais códigos já existentes estão disponíveis. Portanto, primeiramente estabelecemos um princípio variacional para o problema sob estudo. Logo, discretizamos o problema por meio do método dos elementos finitos e discutimos as características e dificuldades que o sistema algébrico compreende. A partir daí, empregamos técnicas baseadas na decomposição de domínios especialmente formuladas para problemas envolvendo modelos heterogêneos e, por fim, apresentamos vários exemplos numéricos a fim de mostrar o funcionamento da metodologia. Com esta abordagem passo-a-passo buscamos obter um ganho no entendimento dos conceitos teóricos envolvidos, assim como uma maior facilidade na aplicação destas ideias a novas situações.

Abstract of Dissertation presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Sciences (M.Sc.)

**COUPLING OF DIMENSIONALLY-HETEROGENEOUS MODELS:  
VARIATIONAL FORMULATIONS AND ITERATIVE METHODS**

Karine Damásio Guimarães

April, 2011

**Advisor:** Pablo Javier Blanco, D.Sc.

The objective of this work, on one hand, is to study the theoretical basis of dimensionally-heterogeneous coupled problems within a variational context. On the other hand, owing to the characteristics of the corresponding algebraic problem and the desire to make use of existing numerical codes, domain decomposition strategies will be studied in order to solve the dimensionally-heterogeneous problem by iteratively solving dimensionally-homogeneous problems, which are more simple to solve and are easily handled using existing code. First, we establish a variational principle for such a problem and then it is discretized using the finite element method, pointing out the characteristics and difficulties of the corresponding algebraic system. From here, we make use of domain decomposition techniques, specially tailored for this class of heterogeneous coupling. In addition, several numerical examples are presented to demonstrate the performance of the approach. With this step-by-step approach we not only gain understanding of the theoretical concepts involved, allowing us to easily extend the idea to new situations.

# Sumário

<b>1</b>	Introdução	1
<b>2</b>	Formulação do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos	7
2.1	Revisão sobre resultados de existência e unicidade . . . . .	7
2.2	Acoplamento de modelos 1D e 3D como problema de mínimo . . . .	10
2.3	Acoplamento de modelos 1D e 3D como problema de ponto de sela	16
2.4	Acoplamento de modelos 1D e 3D com restrição de volume . . . . .	22
<b>3</b>	Aproximação numérica pelo método de elementos finitos	26
3.1	Revisão sobre o método de elementos finitos . . . . .	26
3.2	Discretização do problema de acoplamento . . . . .	31
3.3	Precondicionamento do problema algébrico . . . . .	35
3.3.1	Sistemas algébricos ponto de sela . . . . .	36
3.3.2	Fatoração das matrizes ponto de sela . . . . .	37
3.3.3	Propriedades espectrais . . . . .	38
3.3.4	Precondicionadores para problemas de ponto de sela . . . . .	41
3.3.5	Precondicionadores triangulares por blocos . . . . .	44
3.4	Comentários finais . . . . .	45
<b>4</b>	Método de decomposição de domínio para modelos heterogêneos	47
4.1	Acoplamento em um problema homogêneo 1D . . . . .	48
4.1.1	Caso 1: Dirichlet-Dirichlet . . . . .	50
4.1.2	Caso 2: Dirichlet-Neumann . . . . .	52

4.1.3	Caso 3: Neumann-Neumann . . . . .	54
4.1.4	Caso 4: Neumann-Dirichlet . . . . .	55
4.1.5	Discussão sobre a escolha das condições de contorno . . . . .	57
4.2	Número de condição do problema de interface . . . . .	58
4.3	Acoplamento em um problema heterogêneo 1D-3D . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Estratégias de resolução iterativa para o problema de interface</b>	<b>67</b>
5.1	Montagem explícita do sistema de equações . . . . .	67
5.2	Métodos iterativos livres de matriz . . . . .	69
5.2.1	Métodos iterativos clássicos . . . . .	70
5.2.2	Método de Jacobi . . . . .	71
5.2.3	Método de Gauss-Seidel . . . . .	74
5.3	Métodos iterativos com propriedade de terminação finita . . . . .	76
5.3.1	Subespaço de Krylov . . . . .	76
5.3.2	Método de Arnoldi . . . . .	78
5.3.3	Método GMRES . . . . .	79
5.3.4	Método BICGSTAB . . . . .	81
5.4	Discussão sobre as metodologias propostas . . . . .	82
<b>6</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>84</b>
6.1	Considerações preliminares . . . . .	84
6.2	Componente 1D-1D com solução analítica . . . . .	85
6.3	Sistema 1D-3D com conexão em série . . . . .	87
6.4	Sistema 1D-3D com estrutura geométrica semelhante a um trocador de calor . . . . .	96
6.5	Sistema 1D-3D com estrutura geométrica semelhante à ponte de Brooklyn . . . . .	103
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>114</b>

# Lista de Figuras

## Figura

2.1	Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. . . . .	11
2.2	Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos com restrição sobre todo volume 3D . . . . .	22
3.1	Malha admissível (esquerda) e não-admissível (direita). . . . .	28
3.2	Discretização no modelo 1D (esquerda) e na interface de acoplamento do modelo 3D (direita). . . . .	34
4.1	Problema de difusão em um domínio 1D. . . . .	48
4.2	Decomposição de domínios em problema 1D . . . . .	49
4.3	Número de condição em função da relação $\frac{L-c}{c}$ para cada caso. . . . .	60
4.4	Número de condição em função da relação $\frac{k_1}{k_2}$ para cada caso. . . . .	61
4.5	Partição em subdomínios 1D e 3D . . . . .	63
6.1	Acoplamento de modelos 1D e 3D. . . . .	87
6.2	Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D. . . . .	89
6.3	Acoplamento em série 1D e 3D (4 componentes). . . . .	89
6.4	Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D. . . . .	90
6.5	Acoplamento em série 1D e 3D (6 componentes). . . . .	90
6.6	Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D. . . . .	91
6.7	Acoplamento em série 1D e 3D (8 componentes). . . . .	92
6.8	Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D. . . . .	93
6.9	Acoplamento em série 1D e 3D (10 componentes). . . . .	93

6.10	Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D. . . . .	94
6.11	Convergência do método GMRES para o problema de conexão em série de componentes 1D e 3D à medida que aumenta o número de elementos do circuito série. . . . .	95
6.12	Sistema 3D-1D com geometria semelhante a um trocador de calor. .	97
6.13	Numeração dos componentes 1D e respectivas interfaces. . . . .	98
6.14	Detalhes da estrutura geométrica do trocador de calor. . . . .	99
6.15	Solução do problema de acoplamento no sistema 1D-3D com geome- tria semelhante a um trocador de calor. . . . .	101
6.16	Detalhes da solução no sistema 1D-3D semelhante ao trocador de calor. . . . .	102
6.17	Convergência do método GMRES para o sistema 1D-3D semelhante ao trocador de calor. . . . .	103
6.18	Sistema 1D-3D usando a geometria de uma ponte. . . . .	104
6.19	Detalhes da estrutura da ponte. . . . .	105
6.20	Solução do sistema 3D-1D com estrutura de uma ponte. . . . .	109
6.21	Detalhes da solução. . . . .	109
6.22	Convergência do método GMRES para o problema com geometria de ponte. . . . .	110

# Lista de Tabelas

## Tabela

4.1	Comportamento do número de condição em casos extremos de $\frac{L-c}{c}$ .	61
4.2	Interpretações sobre os gráficos em função de $\frac{k_1}{k_2}$ .	62
6.1	Resultados para o problema de interface (2 componentes).	89
6.2	Resultados para o problema de interface (4 componentes).	90
6.3	Resultados para o problema de interface (6 componentes).	91
6.4	Resultados para o problema de interface (8 componentes).	93
6.5	Resultados para o problema de interface (10 componentes).	95
6.6	Resultados para o problema em sistema 1D-3D com geometria semelhante a um trocador de calor.	102
6.7	Resultado para o problema com geometria de ponte.	110

# Capítulo 1

## Introdução

Este capítulo de introdução resume brevemente os aspectos gerais do trabalho. Após uma breve discussão sobre a motivação do mesmo, apresenta-se o escopo, e logo depois o objetivo geral e objetivos particulares. O capítulo finaliza com uma descrição da estrutura do trabalho.

### Motivação

Com o desenvolvimento científico e tecnológico e o advento dos computadores, problemas altamente complexos puderam ser simulados computacionalmente resolvendo de maneira aproximada modelos matemáticos com um número muito maior de incógnitas. Tal foi o avanço que nos últimos anos, pesquisadores das áreas de engenharia, biologia e medicina começaram a introduzir ferramentas computacionais baseadas em modelos dentro da pesquisa médica. O atual grau de desenvolvimento alcançado pelas técnicas de modelagem computacional, juntamente com o rápido crescimento do desempenho dos computadores, têm permitido o estudo, desenvolvimento e solução de modelos mecânico-biológicos altamente elaborados capazes de antecipar, com razoável grau de precisão, a fenomenologia característica de diferentes sistemas fisiológicos.

No contexto da bioengenharia, e em particular da hemodinâmica computacional, um dos primeiros problemas abordados na literatura foi o da simulação numérica do escoamento de sangue nas artérias do corpo humano. Modelos unidi-

mensionais (1D) têm sido desenvolvidos a fim de contribuir qualitativa e quantitativamente para o estudo da gênese e progresso de diversas doenças cardiovasculares (Avolio, 1980; Hughes, 1974; Lanzarone et al., 2007; Olufsen, 1998; Spencer e Deninson, 1959; Stettler et al., 1981). Estes modelos são capazes de fornecer com um aceitável grau de precisão o comportamento de quantidades médias (pressão e fluxo) nos vasos sanguíneos. Por sua vez, com o avanço na capacidade de cálculo dos computadores, modelos mais complexos, começaram a ser utilizados a fim de modelar o escoamento sanguíneo de maneira mais precisa. Neste ponto os modelos geométricos tridimensionais (3D) começaram a ser introduzidos para capturar toda a complexidade da hemodinâmica que tem lugar em distritos específicos (Botnar et al., 2000; Cebal et al., 2005; Ma et al., 1997; Perktold et al., 1997; Pritchard et al., 1995; Tang et al., 2002; Taylor et al., 1998; Tu et al., 1992).

Como consequência deste avanço na capacidade descritiva dos modelos, surgiu a necessidade de se conhecer outros aspectos do sistema cardiovascular. Neste sentido, surgiram os modelos hetero-dimensionais acoplados 1D-3D (ou ainda 0D-3D, ou combinações destes), dando origem a uma nova linha de pesquisa que lida com o estudo do acoplamento de modelos de diferente dimensão (Formaggia et al., 1999, 2001, 2002, 2006; Urquiza et al., 2006; Vignon-Clementel et al., 2006; Blanco et al., 2009, 2010; Kim et al., 2009). A problemática da modelagem física mediante modelos heterogêneos não só atinge à hemodinâmica computacional, mas desperta interesse em diversos problemas da física e engenharia (Aufranc, 1989; Bernadou e Cubier, 1998a,b; Bernadou et al., 1989; Blanco et al., 2008; Ciarlet e Dret, 1989; Nazarov, 1996, 1999; Veneziani e Vergara, 2005). A formulação de uma teoria matemática consistente, baseada em princípios variacionais de forma a lidar com as incompatibilidades cinemáticas existentes entre esses modelos é um desafio interessante e com implicações nas áreas de mecânica dos fluidos, mecânica dos sólidos, transferência de calor, entre outros (Blanco, 2008).

De forma geral, é possível dizer que na modelagem de diversos problemas de alta complexidade é comum se deparar com situações nas quais é necessário

acoplar fenomenologias que respondem principalmente a diferentes escalas existentes dentro do problema sob estudo. Por exemplo, no caso do sistema cardiovascular comentado no parágrafo anterior podemos identificar a existência de uma escala global que rege a hemodinâmica do sistema arterial completo e uma escala local que determina a forma em que o escoamento está estabelecido através da geometria específica de um dado vaso arterial. Do ponto de vista da modelagem computacional, o objetivo seria obter uma formulação matemática de modo a englobar ambos os modelos e ainda, que a interação entre eles não fuja a física do problema, isto é, seja capaz de fornecer uma correta descrição da dinâmica do sistema envolvendo características como as descritas acima. Neste contexto, o uso de modelos dimensionalmente heterogêneos é uma opção natural devido à heterogeneidade dos modelos constituintes. E, ao mesmo tempo, leva a uma redução drástica nos custos computacionais dado que o detalhe na representação é feito somente em regiões de interesse.

### **Desafios teóricos e práticos**

Como já dito, ao se acoplar dois ou mais modelos com dimensionalidade diferente é necessário dispor de uma formulação matemática de modo que esses modelos funcionem como uma única entidade, e ainda, a interação entre eles seja tal que não escape à física do problema. Tal interação se consegue através das condições de acoplamento entre os modelos. Ao longo deste trabalho analisaremos o problema do ponto de vista variacional, isto é, entenderemos o problema envolvendo modelos dimensionalmente heterogêneos a partir do princípio variacional correspondente. Com este princípio variacional veremos como se derivam os modelos constituintes assim como também as condições de acoplamento entre eles.

No entanto, a solução dos sistemas de equações resultantes do acoplamento entre os modelos com dimensões diferentes é uma tarefa bastante complicada, se realizada de forma monolítica, devido a duas razões: (i) é necessário ter acesso aos códigos de forma a modificar a forma em que se montam os blocos algébricos

correspondentes a cada um dos sub-modelos assim como às condições de acoplamento e (ii) mesmo tendo acesso aos códigos, estes sistemas algébricos são mais difíceis de serem resolvidos que se resolvessemos modelos homogêneos desacoplados. Neste contexto, as técnicas de decomposição de domínio surgem como uma forma alternativa e interessante de abordar o problema dado que permite decompor o problema original de caráter heterogêneo em sub-problemas homogêneos. Em diversos problemas da física e da engenharia estas técnicas têm sido empregadas com sucesso (veja Quarteroni e Valli (1994); Mathew (2008) e as referências ali citadas), entretanto, na resolução de modelos dimensionalmente heterogêneos estas técnicas estão começando a tomar impulso nestes últimos anos (Leiva et al., 2010; Blanco et al., 2011; Leiva et al., 2011). Deste ponto de vista, a interação entre os domínios é feita apenas por meio de transferência de informações de fronteira, sendo que tais fronteiras nos submodelos constituintes são as interfaces de acoplamento entre os mesmos. Os algoritmos clássicos para resolver por meio da decomposição de domínios problemas desta classe estão baseados em duas abordagens: (i) métodos de Steklov-Poincaré - abordagem primal - (Quarteroni e Valli, 1994) e (ii) métodos FETI (**Finite Element Tearing and Interconnecting**) - abordagem dual - (Mathew, 2008). Em ambos os casos, o problema de acoplamento é transformado em um problema cujas incógnitas estão definidas sobre as interfaces de acoplamento. Essencialmente, seguimos aqui uma metodologia alternativa que leva proveito do pequeno número de incógnitas da interface quando acoplamos modelos dimensionalmente heterogêneos. As ideias aqui estudadas foram inicialmente propostas em (Leiva, 2010; Leiva et al., 2010). A diferença fundamental está em que na formulação do problema empregaremos como incógnitas definidas sobre as interfaces entre os modelos tanto a variável primal como a variável dual, o que dá maior flexibilidade no tocante à escolha de condições de contorno para os sub-problemas. Por último, a partir da formulação do problema de interface associado ao acoplamento dos modelos heterogêneos, a ideia principal consiste em resolver tal problema de forma iterativa, utilizando, por exemplo, um método como

o GMRES.

## **Escopo**

Embora o uso mais frequente das técnicas de acoplamento de modelos diferentes dimensões seja encontrado no campo da modelagem do sistema cardiovascular, inúmeras situações podem ser tratadas usando as ideias aqui formuladas. Neste sentido, o escopo deste trabalho possui uma tendência à análise teórica do problema, e ao fim do mesmo apresentam-se resultados numéricos no contexto da aplicação principal para o qual está orientada o texto.

Neste sentido, o escopo deste trabalho está em tratar todos os aspectos envolvidos no problema do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Isto implica desde o estudo da boa colocação do problema proposto, a derivação da formulação variacional, a discretização do problema, o estudo de estratégias numéricas para desacoplar os modelos de forma a resolver iterativamente o problema de acoplamento (decomposição de domínios) e chegando ao tratamento computacional do mesmo.

## **Objetivos**

O objetivo geral deste trabalho é estudar estratégias de decomposição de domínio para o problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos e mostrar o desempenho destas técnicas através de exemplos numéricos.

Particularmente iremos fornecer um tratamento matemático acerca de existência e unicidade da solução do problema formulado através de um problema de optimalidade, do qual se deriva a formulação variacional e equações de Euler-Lagrange associadas. E ainda, temos como objetivo estudar uma metodologia de decomposição de domínios alternativa às clássicas (Steklov-Poincaré e FETI) que leva proveito do pequeno número de incógnitas interface quando se acoplam modelos dimensionalmente heterogêneos. Apresentaremos exemplos numéricos mostrando o desempenho e viabilidade das estratégias estudadas.

Dado que este trabalho trata essa estratégia de decomposição de domínios de uma maneira diferente da abordagem clássica, isto é, seguindo as ideias desenvolvidas em (Leiva et al., 2010), temos que isto será uma contribuição para o mesmo já que este campo de pesquisa, o qual também possui extrema aplicabilidade em qualquer área da engenharia, é recente e encontra-se em pleno desenvolvimento.

### **Estrutura do trabalho**

Este trabalho está dividido em seis capítulos. O Capítulo 2 apresenta os conceitos teóricos seguindo uma visão variacional, enquanto que o Capítulo 3 dedica-se à discretização do problema contínuo. No Capítulo 4 apresenta-se de forma simples a aplicação do método de decomposição de domínio a um problema com solução analítica. No Capítulo 5 é feita uma revisão dos métodos iterativos que poderiam ser considerados para resolver o sistema linear obtido após aplicação do método de decomposição de domínio. Finalmente no Capítulo 6 apresentam-se diversos exemplos que mostram o funcionamento da metodologia e visam estudar o comportamento dos métodos iterativos empregados nesta classe de problemas. Por fim, as conclusões e as referências citadas ao longo do texto são apresentadas.

# Capítulo 2

## Formulação do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos

Este capítulo está organizado em quatro seções. Na Seção 2.1 introduzem-se dois resultados utilizados para mostrar existência e unicidade de soluções dos problemas tratados nas seções seguintes. Na Seção 2.2 apresenta-se a formulação do problema 1D-3D como problema de mínimo, partindo dos funcionais 1D e 3D respectivamente, aplicando a variação de Gatêaux, chegando à formulação variacional e finalmente derivando as equações de Euler. Na Seção 2.3, segue o mesmo problema, porém, formulado como um problema de ponto de sela, e novamente partindo do funcional Lagrangiano associado, encontra-se a formulação variacional mista associada e as correspondentes equações de Euler. Finalmente na seção 2.4, apresenta-se um outro exemplo de problema envolvendo o acoplamento de modelos 1D-3D, porém considerando restrições definidas sobre todo o volume do modelo 3D.

### 2.1 Revisão sobre resultados de existência e unicidade

Nesta seção introduzimos resultados que utilizamos para mostrar a existência e unicidade dos problemas que serão tratados ao longo das seções seguintes. Vamos portanto recordar dois resultados clássicos de análise funcional. Para isso, considere

o problema variacional: encontre  $u \in \mathcal{V}$  tal que

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \mathcal{V} \quad (2.1)$$

O teorema de Lax-Milgram garante a existência e unicidade da solução para esse tipo de problema, se as propriedades de linearidade e continuidade das formas  $a(\cdot, \cdot)$  e  $f(\cdot, \cdot)$ , e ainda a coercividade da forma  $a(\cdot, \cdot)$  forem garantidas, como enunciado a seguir.

**Teorema 2.1** (Teorema de Lax-Milgram). Seja  $\mathcal{V}$  um espaço de Hilbert munido da norma  $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$  e produto interno  $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{V}}$ , e  $\mathcal{V}'$  o seu dual. Seja  $a : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$  uma forma bilinear. Suponha ainda que  $a(\cdot, \cdot)$  é contínua, isto é,

$$\exists \alpha > 0 : |a(u, v)| \leq \alpha \|u\|_{\mathcal{V}} \|v\|_{\mathcal{V}}, \quad \forall u, v \in \mathcal{V} \quad (2.2)$$

e coerciva, ou seja,

$$\exists \beta > 0 : |a(v, v)| \geq \beta \|v\|_{\mathcal{V}}^2, \quad \forall v \in \mathcal{V}. \quad (2.3)$$

Seja  $f : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$  uma forma linear e contínua, isto é,  $f \in \mathcal{V}'$ . Então existe uma única  $u \in \mathcal{V}$  solução do problema variacional (2.1).  $\square$

**Prova.** Veja (Brézis, 1984)

Considere agora um problema onde o campo  $u$  está sujeito a alguma restrição, e que em sua forma variacional está dado por: encontre  $u \in \mathcal{V}$ ,  $p \in \mathcal{Q}$  tal que

$$a(u, v) + b(v, p) = \langle f, v \rangle_{\mathcal{V}' \times \mathcal{V}}, \quad \forall v \in \mathcal{V}; \quad (2.4)$$

$$b(u, q) = \langle g, q \rangle_{\mathcal{Q}' \times \mathcal{Q}}, \quad \forall q \in \mathcal{Q}. \quad (2.5)$$

Da forma bilinear  $b(\cdot, \cdot)$  se define um operador linear  $B : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{Q}'$ , e seu transposto  $B^t : \mathcal{Q} \rightarrow \mathcal{V}'$ , definido por

$$\langle Bv, q \rangle_{\mathcal{Q}' \times \mathcal{Q}} = \langle v, B^t q \rangle_{\mathcal{V} \times \mathcal{V}} = b(v, q), \quad \forall v \in \mathcal{V}, \forall q \in \mathcal{Q}. \quad (2.6)$$

Além disso, a condição  $g \in \text{Im } B$  é claramente necessária e deve ser satisfeita. Como veremos a seguir, as propriedades do operador  $B$  são fundamentais no estudo desta classe de problemas.

Este problema ajusta-se à classe de formulações mistas abstratas estudadas por Brezzi, Babuska e outros (Brezzi e Fortin, 1991). O teorema de Brezzi afirma que esse problema tem solução única se as propriedades de continuidade das formas  $a(\cdot, \cdot)$  e  $b(\cdot, \cdot)$ , coercividade de  $a(\cdot, \cdot)$  em um subespaço apropriado de  $\mathcal{V}$ , e a condição de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi ou LBB, como enunciado a seguir.

**Teorema 2.2** (Teorema de Brezzi). Seja  $\mathcal{V}$  um espaço de Hilbert munido da norma  $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$  e produto interno  $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{V}}$  e seja  $a(\cdot, \cdot)$  linear e contínua sobre  $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ , e  $b(\cdot, \cdot)$  linear e contínua sobre  $\mathcal{V} \times \mathcal{Q}$ . Suponhamos que a imagem do operador  $B$  associado a  $b(\cdot, \cdot)$  é fechada em  $\mathcal{Q}'$ , ou seja, existe  $k_0 > 0$  tal que

$$\sup_{v \in \mathcal{V}} \frac{b(v, q)}{\|v\|_{\mathcal{V}}} \geq k_0 \|q\|_{\mathcal{Q}/\text{Ker } B^t} \quad \forall q \in \mathcal{Q}/\text{Ker } B^t$$

Além disso, considere que  $a(\cdot, \cdot)$  é coerciva sobre  $\text{Ker } B$ , isto é, existe  $\alpha_0 > 0$ , tal que

$$a(v_0, v_0) \geq \alpha_0 \|v_0\|_{\mathcal{V}}^2, \quad \forall v_0 \in \text{Ker } B$$

então existe uma única solução  $(u, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{Q}$  para o problema variacional (2.5).  $\square$

**Prova.** Veja Brezzi e Fortin (1991)

Com estes dois resultados temos as ferramentas teóricas que precisamos para mostrar existência e unicidade para os problemas de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos que serão tratados a seguir.

## 2.2 Acoplamento de modelos 1D e 3D como problema de mínimo

Considere o problema de modelar a transferência de calor em um corpo sólido, levando em conta fenômenos difusivos, reativos e uma fonte de calor. Por motivos que dependem das características do problema considere que neste corpo sólido podem ser identificadas duas regiões de características geométricas diferentes. Uma região muito delgada e ao mesmo tempo longa, e uma região cuja forma é arbitrária. Na região delgada e longa admite-se que é razoável considerar um modelo 1D enquanto que a região de forma arbitrária requer de um modelo 3D para capturar toda a complexidade do fenômeno. Os funcionais associados a este problema, são dados para os modelos 1D e 3D, respectivamente, por:

$$J_{1D}(u_1) = \frac{1}{2} \int_0^L \left( \frac{du_1}{dx} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L u_1^2 dx - \int_0^L f_1 u_1 dx \quad (2.7)$$

$$J_{3D}(u_3) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u_3|^2 d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} u_3^2 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 u_3 d\Omega \quad (2.8)$$

onde os espaços sobre os quais estão definidos estes funcionais são  $U_1 = H^1(0, L)$  e  $U_3 = H^1(\Omega)$ , respectivamente. O objetivo é formular o acoplamento dessas duas formulações matemáticas, para o qual é preciso impor uma condição que as vincule. Esta condição, que chamaremos de restrição de acoplamento, implica em prescrever a continuidade do campo  $u$ , representado pelo par  $(u_1, u_3)$  em algum sentido conveniente, do ponto de vista físico e matemático. De forma genérica podemos escrever o acoplamento entre estes dois modelos como uma equação da forma

$$\psi_1(u_1) = \psi_3(u_3) \quad (2.9)$$

Por simplicidade na apresentação das idéias, nesta parte do trabalho o sentido que será dado à continuidade vem dado pela equação

$$u_1(0) = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma \quad (2.10)$$

onde  $\Gamma$  é a que será denominada interface de acoplamento e além disso  $A$  é a medida da superfície  $\Gamma$ . Neste caso esta superfície do modelo 3D é acoplada ao ponto  $x = 0$  pertencente ao modelo 1D, como mostra a Figura 2.1. Aqui, esta restrição impõe a continuidade da solução em um sentido da média a um e outro lado da interface de acoplamento. A motivação para escolher este sentido para a continuidade depende do problema sob análise e as formas de  $\psi_1$  e  $\psi_3$  na equação (2.9) acima podem ser diferentes, como veremos com um exemplo no final do presente capítulo.



Figura 2.1: Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos.

Neste contexto, o funcional do problema acoplado será dado por

$$\mathcal{J}(u_1, u_3) = J_{1D}(u_1) + J_{3D}(u_3) \quad (2.11)$$

onde o espaço sobre o qual está definido este funcional é denominado  $U$  e deve ser definido de forma a introduzirmos a restrição (2.10). Assim sendo resulta

$$U = \left\{ (u_1, u_3) \in U_1 \times U_3 ; u_1(0) = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma \right\} \quad (2.12)$$

Assim sendo, o problema de acoplar os modelos 1D e 3D através da restrição (2.10) é formulado como problema de mínimo como segue: encontre  $(u_1, u_3) \in U$  tal que

$$\mathcal{J}(u_1, u_3) = \min_{(v_1, v_3) \in U} \mathcal{J}(v_1, v_3) \quad (2.13)$$

Em busca da formulação variacional associada a este problema, calculamos a variação do funcional (2.11) em  $(u_1, u_3) \in U$  na direção  $(v_1, v_3) \in U$ , a qual é dada

por

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{J}(u_1, u_3, v_1, v_3) &= \left. \frac{d}{d\tau} \mathcal{J}(u_1 + \tau v_1, u_3 + \tau v_3) \right|_{\tau=0} = \\
& \frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^L \left( \frac{d(u_1 + \tau v_1)}{dx} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L (u_1 + \tau v_1)^2 dx - \int_0^L f_1(u_1 + \tau v_1) dx \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla(u_3 + \tau v_3)|^2 d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u_3 + \tau v_3)^2 d\Omega - \int_{\Omega} f_3(u_3 + \tau v_3) d\Omega \right\} \Big|_{\tau=0} \quad (2.14)
\end{aligned}$$

Assim sendo, o diferencial de Gâteaux do funcional  $\mathcal{J}$  resulta

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{J}(u_1, u_3, v_1, v_3) &= \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx \\
& + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega \quad (2.15)
\end{aligned}$$

Portanto, obtemos a formulação variacional que consiste em determinar  $(u_1, u_3) \in U$  tal que

$$\begin{aligned}
\int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega \\
+ \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega = 0 \quad \forall (v_1, v_3) \in U \quad (2.16)
\end{aligned}$$

Dado que o funcional  $\mathcal{J}$  é quadrático e estamos procurando a solução em  $U$  que é um conjunto convexo, segue claramente que o problema variacional (2.16) é equivalente ao problema de mínimo (2.13). Introduzindo uma notação mais compacta, temos

$$\begin{aligned}
a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) &= \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx \\
& + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega \quad (2.17a)
\end{aligned}$$

$$f((v_1, v_3)) = \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega \quad (2.17b)$$

o problema variacional (2.16) toma a forma: encontre  $(u_1, u_3) \in U$  tal que

$$a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) = f((v_1, v_3)) \quad \forall (v_1, v_3) \in U \quad (2.18)$$

De maneira a obter as equações de Euler-Lagrange associadas à formulação variacional (2.16) assumimos que  $(v_1, v_3)$  é suficientemente regular e integramos por partes na mesma, obtendo

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dx} v_1 \Big|_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} \left( \frac{du_1}{dx} \right) v_1 dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx \\ + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\Gamma + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\partial\Omega \setminus \Gamma - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\nabla u_3) v_3 d\Omega \\ + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega = 0 \quad \forall (v_1, v_3) \in U \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde temos dividido o contorno do domínio  $\Omega$ , denominado  $\partial\Omega$ , na fronteira de acoplamento  $\Gamma$  e no seu complemento  $\partial\Omega \setminus \Gamma$ . Daqui resulta

$$\begin{aligned} \left( \frac{du_1}{dx} \right) (L) v_1(L) - \left( \frac{du_1}{dx} \right) (0) v_1(0) - \int_0^L \frac{d}{dx} \left( \frac{du_1}{dx} \right) v_1 dx + \int_0^L u_1 v_1 dx \\ - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\Gamma + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\partial\Omega \setminus \Gamma \\ - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\nabla u_3) v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega = 0 \quad \forall (v_1, v_3) \in U \end{aligned} \quad (2.20)$$

Considere agora a seguinte decomposição

$$v_3 = v_3^0 + \tilde{v}_3 \quad (2.21)$$

onde  $v_3^0$  é contante em  $\Gamma$ , em particular,  $v_3^0 = v_1(0)$ . De (2.20), temos

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dx}(0) v_3^0 + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} (v_3^0 + \tilde{v}_3) d\Gamma = 0 \quad \forall (v_3^0, \tilde{v}_3) \in \tilde{U}_{\Gamma} \\ \frac{du_1}{dx}(0) v_3^0 + v_3^0 \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} \tilde{v}_3 d\Gamma = 0 \quad \forall (v_3^0, \tilde{v}_3) \in \tilde{U}_{\Gamma} \\ \left( \frac{du_1}{dx}(0) + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} d\Gamma \right) v_3^0 + \int_{\Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} \tilde{v}_3 d\Gamma = 0 \quad \forall (v_3^0, \tilde{v}_3) \in \tilde{U}_{\Gamma} \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde

$$\tilde{U}_\Gamma = \mathbb{R} \times \left\{ \tilde{v}_3 \in H^{1/2}(\Gamma); \int_\Gamma \tilde{v}_3 d\Gamma = 0 \right\} \quad (2.23)$$

Do segundo termo da (2.22) segue-se que  $\nabla u_3 \cdot \mathbf{n}$  é constante sobre  $\Gamma$ , pois é ortogonal a uma função de valor médio nulo sobre  $\Gamma$ , enquanto que do primeiro termo entre parêntese da (2.22) segue-se que essa constante é igual à derivada de  $u_1$  no ponto de acoplamento  $x = 0$ . Logo, as equações de Euler-Lagrange do problema acoplado são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{d^2 u_1}{dx^2} + u_1 = f_1 & \text{em } (0, L), \\ \frac{du_1}{dx}(L) = 0 & \text{em } x = L, \\ -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma, \\ u_1(0) = \frac{1}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma & \text{em } x = 0, \\ \frac{du_1}{dx}(0) = A(\nabla u_3) \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right. \quad (2.24)$$

As condições de acoplamento são dadas pelas duas últimas equações, sendo importante salientar que estas não constituem condições de contorno para nenhum dos dois modelos. De fato, neste caso estas condições são naturalmente obtidas da formulação do problema. Dado que temos um problema variacional linear, a existência e unicidade da solução deste problema são garantidos pelo teorema de Lax-Milgram (ver Teorema 2.1 na Seção 2.1), de onde obtemos o seguinte resultado.

**Proposição 2.1** Dados  $f_1 \in L^2(0, L)$  e  $f_3 \in L^2(\Omega)$ , existe uma única solução  $(u_1, u_3) \in U$  da equação (2.16).

**Prova.** Devemos mostrar que o problema satisfaz as hipóteses do Teorema 2.1. Neste caso  $U$  definido em (2.12) é um espaço de Hilbert com uma norma definida por  $\|(u_1, u_3)\|_U = \|u_1\|_{H^1(0, L)} + \|u_3\|_{H^1(\Omega)}$ . Claramente podemos observar que  $a(\cdot, \cdot)$

é linear. Vejamos a continuidade da mesma. Com efeito, tem-se

$$\begin{aligned}
|a((u_1, u_3), (v_1, v_3))| &= \\
&\leq \left| \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx \right| + \left| \int_0^L u_1 v_1 dx \right| + \left| \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega \right| + \left| \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega \right| \\
&\leq \left( \int_0^L \left( \frac{du_1}{dx} \right)^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^L \left( \frac{dv_1}{dx} \right)^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} + \left( \int_0^L u_1^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^L v_1^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + \left( \int_{\Omega} |\nabla u_3|^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} |\nabla v_3|^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} + \left( \int_{\Omega} u_3^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} v_3^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \alpha \left[ \int_0^L \left( \left( \frac{du_1}{dx} \right)^2 + u_1^2 \right) dx \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \int_0^L \left( \left( \frac{dv_1}{dx} \right)^2 + v_1^2 \right) dx \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\quad + \alpha \left[ \int_{\Omega} (|\nabla u_3|^2 + u_3^2) d\Omega \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \int_{\Omega} (|\nabla v_3|^2 + v_3^2) d\Omega \right]^{\frac{1}{2}} \\
&= \alpha [\|u_1\|_{H^1(0,L)} \|v_1\|_{H^1(0,L)} + \|u_3\|_{H^1(\Omega)} \|v_3\|_{H^1(\Omega)}] \\
&\leq \alpha [\|u_1\|_{H^1(0,L)} \|v_1\|_{H^1(0,L)} + \|u_1\|_{H^1(0,L)} \|v_3\|_{H^1(\Omega)} \\
&\quad + \|u_3\|_{H^1(\Omega)} \|v_1\|_{H^1(0,L)} + \|u_3\|_{H^1(\Omega)} \|v_3\|_{H^1(\Omega)}] \\
&= \alpha \|(u_1, u_3)\|_U \|(v_1, v_3)\|_U \quad \forall (u_1, u_3), (v_1, v_3) \in U \quad (2.25)
\end{aligned}$$

e portanto segue que a forma bilinear é contínua. Vejamos agora a coercividade

$$\begin{aligned}
a((v_1, v_3), (v_1, v_3)) &= \int_0^L \left( \frac{dv_1}{dx} \right)^2 dx + \int_0^L v_1^2 dx + \int_{\Omega} |\nabla v_3|^2 d\Omega + \int_{\Omega} v_3^2 d\Omega \\
&= \|v_1\|_{H^1(0,L)}^2 + \|v_3\|_{H^1(\Omega)}^2 \\
&\geq \beta [\|v_1\|_{H^1(0,L)}^2 + 2\|v_1\|_{H^1(0,L)} \|v_3\|_{H^1(\Omega)} + \|v_3\|_{H^1(\Omega)}^2] = \beta \|(v_1, v_3)\|_U^2 \\
&\quad \forall (v_1, v_3) \in U \quad (2.26)
\end{aligned}$$

Logo, a forma bilinear é coerciva. Claramente  $f(\cdot)$ , é linear. Vamos mostrar que é

contínua,

$$\begin{aligned}
f((v_1, v_3)) &= \left| \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega \right| \leq \left| \int_0^L f_1 v_1 dx \right| + \left| \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega \right| \\
&\leq \left( \int_0^L f_1^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^L v_1^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} + \left( \int_{\Omega} f_3^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} v_3^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= K_1 \|v_1\|_{L^2(0,L)} + K_3 \|v_3\|_{L^2(\Omega)} \leq K_1 \|v_1\|_{H^1(0,L)} + K_3 \|v_3\|_{H^1(\Omega)} \\
&\leq K \|(v_1, v_3)\|_U \quad \forall (v_1, v_3) \in U \quad (2.27)
\end{aligned}$$

Logo, isto assegura a existência e unicidade da solução do problema variacional (2.16).  $\square$

É importante salientar que se este problema não tivesse o termo de reação, seria necessário que o espaço de funções admissíveis fosse diferente, ou seja, aqui não aplicamos condições de contorno sobre a fronteira, o que seria necessário para o caso em questão.

Em busca de uma solução aproximada para o problema (2.16), usaremos o método de elementos finitos a partir do Capítulo 3. Com isso em mente veja que, a implementação de uma restrição do tipo (2.10) não é trivial, devido a que construir um espaço de funções de interpolação de elementos finitos para  $U$  dado por (2.12) implicaria que as funções de interpolação satisfizessem (2.10). Dessa forma, vamos fazer uso de uma estratégia alternativa conforme discutido na seção a seguir.

### 2.3 Acoplamento de modelos 1D e 3D como problema de ponto de sela

Transformaremos o problema (2.16) em um problema de ponto de sela ao introduzirmos um multiplicador de Lagrange de forma a relaxar a restrição (2.10). Como a restrição a relaxar é uma única equação escalar definida no ponto de acoplamento correspondente à superfície  $\Gamma$ , o multiplicador de Lagrange será uma única quantidade escalar definida nesse ponto. Neste novo contexto o funcional

Lagrangiano do problema acoplado é dado por

$$\mathcal{L}_\Gamma(u_1, u_3, \lambda) = J_{1D}(u_1) + J_{3D}(u_3) + \langle R_\Gamma(u_1, u_3), \lambda \rangle \quad (2.28)$$

para este caso o espaço em que está definido o funcional é denominado  $\tilde{U}$  e é definido como segue

$$\tilde{U} = \dot{U} \times \mathbb{R} \quad (2.29)$$

com

$$\dot{U} = U_1 \times U_3 \quad (2.30)$$

e onde, além disso tem-se

$$R_\Gamma(u_1, u_3) = u_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma \quad (2.31)$$

de modo que  $\langle R_\Gamma(u_1, u_3), \lambda \rangle$  é um produto de dualidade, para o nosso caso o produto entre números reais, pois  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Com efeito, como dito, a restrição é uma equação em  $\mathbb{R}$  e o dual de  $\mathbb{R}$  é o próprio  $\mathbb{R}$ . Portanto, o problema de mínimo (2.13) se reformula como um problema de min – max, como enunciado a seguir: encontre  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  tal que

$$\mathcal{L}_\Gamma(u_1, u_3, \lambda) = \min_{(v_1, v_3) \in \dot{U}} \max_{v_\lambda \in \mathbb{R}} \mathcal{L}_\Gamma(v_1, v_3, v_\lambda) \quad (2.32)$$

Logo, a variação do funcional (2.28) em  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  na direção  $(v_1, v_3, v_\lambda) \in \tilde{U}$

é dada por

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L}_\Gamma(u_1, u_3, \lambda, v_1, v_3, v_\lambda) &= \frac{d}{d\tau}\mathcal{L}_\Gamma(u_1 + \tau v_1, u_3 + \tau v_3, \lambda + \tau v_\lambda) \Big|_{\tau=0} = \\
&\frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^L \left( \frac{d(u_1 + \tau v_1)}{dx} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^L (u_1 + \tau v_1)^2 dx - \int_0^L f_1(u_1 + \tau v_1) dx \right. \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla(u_3 + \tau v_3)|^2 + \int_\Omega (u_3 + \tau v_3)^2 d\Omega - \int_\Omega f_3(u_3 + \tau v_3) d\Omega \\
&\quad \left. + (\lambda + \tau v_\lambda) \left( (u_1 + \tau v_1)(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma (u_3 + \tau v_3) d\Gamma \right) \right\} \Big|_{\tau=0} \quad (2.33)
\end{aligned}$$

Assim sendo, o diferencial de Gatêaux do funcional  $\mathcal{L}_\Gamma$  resulta

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L}_\Gamma(u_1, u_3, \lambda, v_1, v_3, v_\lambda) &= \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx \\
&\quad + \int_\Omega \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_\Omega u_3 v_3 d\Omega - \int_\Omega f_3 v_3 d\Omega \\
&\quad + \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma v_3 d\Gamma \right] + v_\lambda \left[ u_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma \right] \quad (2.34)
\end{aligned}$$

Logo, obtemos a formulação variacional que consiste em determinar  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  tal que

$$\begin{aligned}
&\int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_\Omega \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_\Omega u_3 v_3 d\Omega \\
&\quad - \int_\Omega f_3 v_3 d\Omega + \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma v_3 d\Gamma \right] + v_\lambda \left[ u_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma \right] = 0 \\
&\qquad\qquad\qquad \forall (v_1, v_3, v_\lambda) \in \tilde{U} \quad (2.35)
\end{aligned}$$

Utilizando uma notação mais compacta,

$$\begin{aligned}
a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) &= \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx \\
&\quad + \int_\Omega \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_\Omega u_3 v_3 d\Omega \quad (2.36a)
\end{aligned}$$

$$b((v_1, v_3), \lambda) = \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma v_3 d\Gamma \right] \quad (2.36b)$$

$$f((v_1, v_3)) = \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_\Omega f_3 v_3 d\Omega \quad (2.36c)$$

o problema variacional (2.35) toma a forma : encontre  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  tal que

$$a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) + b((u_1, u_3), v_\lambda) + b((v_1, v_3), \lambda) = f((v_1, v_3))$$

$$\forall (v_1, v_3, v_\lambda) \in \tilde{U} \quad (2.37)$$

De forma a obter as equações de Euler-Lagrange associadas assumimos  $(v_1, v_3, v_\lambda)$  suficientemente regular e integramos por partes na expressão (2.35) como segue

$$\begin{aligned} & \frac{du_1}{dx} v_1 \Big|_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} \left( \frac{du_1}{dx} \right) v_1 dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx \\ & + \int_\Gamma (\nabla u_3) \cdot \mathbf{n} v_3 d\Gamma + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\partial\Omega \setminus \Gamma - \int_\Omega \operatorname{div}(\nabla u_3) v_3 d\Omega \\ & + \int_\Omega u_3 v_3 d\Omega - \int_\Omega f_3 v_3 d\Omega + \lambda v_1(0) - \frac{\lambda}{A} \int_\Gamma v_3 d\Gamma + v_\lambda u_1(0) - \frac{v_\lambda}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma = 0 \end{aligned}$$

$$\forall (v_1, v_3, v_\lambda) \in \tilde{U} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{du_1}{dx} \right) (L) v_1(L) + \left( \lambda - \frac{du_1}{dx}(0) \right) v_1(0) - \int_0^L \frac{d}{dx} \left( \frac{du_1}{dx} \right) v_1 dx + \int_0^L u_1 v_1 dx \\ & - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_\Gamma \left( \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} - \frac{\lambda}{A} \right) v_3 d\Gamma + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\partial\Omega \setminus \Gamma \\ & - \int_\Omega \operatorname{div}(\nabla u_3) v_3 d\Omega + \int_\Omega u_3 v_3 d\Omega - \int_\Omega f_3 v_3 d\Omega + \left( u_1(0) - \frac{1}{A} \int_\Gamma u_3 d\Gamma \right) v_\lambda = 0 \end{aligned}$$

$$\forall (v_1, v_3, v_\lambda) \in \tilde{U} \quad (2.39)$$

Logo, as equações de Euler-Lagrange do problema acoplado são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{d^2 u_1}{dx^2} + u_1 = f_1 & \text{em } (0, L), \\ \frac{du_1}{dx}(L) = 0 & \text{em } x = L, \\ -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma, \\ \lambda = \frac{du_1}{dx}(0) & \text{em } x = 0, \\ u_1(0) = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma & \text{em } x = 0, \\ \frac{du_1}{dx}(0) = A \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right. \quad (2.40)$$

Novamente é importante notar que as duas últimas expressões constituem as condições de acoplamento entre os modelos 1D e 3D, que são idênticas às obtidas em (2.24), e evidentemente não representam condições de contorno para nenhum dos dois modelos, como já citado anteriormente. A existência e unicidade da solução para este problema de ponto de sela são garantidos pelo teorema de Brezzi. Com efeito, baseados no Teorema 2.2 visto na Seção 2.1, temos o seguinte resultado.

**Proposição 2.2** Dados  $f_1 \in L^2(0, L)$  e  $f_3 \in L^2(0, L)$ , existe uma única solução  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  da equação (2.35).

**Prova.** Note que mostrar a continuidade da forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$ , ou seja,

$$|a((u_1, u_3), (v_1, v_3))| \leq \alpha_1 \| (u_1, u_3) \|_{\dot{U}} \| (v_1, v_3) \|_{\dot{U}}$$

é idêntico ao que já foi feito em (2.25). Logo, como a norma dos espaços  $U$  e  $\dot{U}$  são idênticas segue que a forma bilinear é contínua. Vejamos a coercividade.

De (2.26) segue que essa forma é coerciva em  $\dot{U}$ , mas  $\text{Ker } B \subset \dot{U}$  portanto também é em  $\text{Ker } B$ , de fato,

$$\langle B(v_1, v_3), \lambda \rangle_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} = b((v_1, v_3), \lambda) \quad \forall (v_1, v_3) \in \dot{U}, \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

assim sendo,

$$\text{Ker } B = \left\{ (v_1, v_3) \in \dot{U}; v_1(0) - \frac{1}{A} \int_{\Gamma} v_3 d\Gamma = 0 \right\} \subset \dot{U}. \quad (2.41)$$

então, a forma bilinear é coerciva no  $\text{Ker } B$ .

Vejamos agora a continuidade da forma bilinear  $b(\cdot, \cdot)$ , isto é,

$$\begin{aligned} |b((v_1, v_3), \lambda)| &\leq |\lambda| \left| v_1(0) - \frac{1}{A} \int_{\Gamma} v_3 d\Gamma \right| \leq |\lambda| \left| v_1(0) + \frac{1}{A} \int_{\Gamma} v_3 d\Gamma \right| \\ &\leq |\lambda| \left[ \|v_1\|_{\mathbb{R}} + \frac{1}{|A|} \|v_3\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \right] \leq \gamma |\lambda| \| (v_1, v_3) \|_{\dot{U}}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

logo, segue que  $b(\cdot, \cdot)$  é contínua. Agora devemos mostrar que

$$\sup_{(v_1, v_3) \in \dot{U}} \frac{b((v_1, v_3), \lambda)}{\| (v_1, v_3) \|_{\dot{U}}} \geq k_0 |\lambda| \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

Consideremos que  $\lambda > 0$  e tomemos  $v_1^* = e^{-x}$  e  $v_3^* = 0$ , temos portanto

$$\frac{\lambda v_1^*(0) - \frac{\lambda}{A} \int_{\Gamma} v_3^* d\Gamma}{\|v_1^*\|_{H^1(0,L)} + \|v_3^*\|_{H^1(\Omega)}} = \frac{|\lambda|}{\sqrt{-e^{-2L} + 1}} \quad (2.43)$$

e assim temos que

$$\sup_{(v_1, v_3) \in \dot{U}} \frac{b((v_1, v_3), \lambda)}{\| (v_1, v_3) \|_{\dot{U}}} \geq \frac{\lambda v_1^*(0) - \frac{\lambda}{A} \int_{\Gamma} v_3^* d\Gamma}{\|v_1^*\|_{H^1(0,L)} + \|v_3^*\|_{H^1(\Omega)}} = k_0 |\lambda|_{\Lambda} \quad (2.44)$$

onde  $k_0 = \frac{1}{\sqrt{-e^{-2L} + 1}}$ . Então, existe uma única solução  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  para o problema variacional (2.35).  $\square$

É importante salientar que as escolhas feitas anteriormente para  $\lambda$ ,  $v_1^*$  e  $v_3^*$  são arbitrárias e dependem fortemente do caso estudado.

## 2.4 Acoplamento de modelos 1D e 3D com restrição de volume

Com o intuito de exemplificar o uso e manejo de modelos heterogêneos consideraremos um exemplo similar ao visto nas seções anteriores. Assim, tomamos os mesmos funcionais anteriores dados por (2.7) e (2.8) para representar o modelo 1D e 3D, respectivamente. Entretanto, vamos considerar a seguinte restrição de acoplamento

$$u_1(0) = \frac{1}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega \quad (2.45)$$

ou seja, o problema 1D é acoplado através do valor do campo  $u_1$  em  $x = 0$  com o valor médio do campo  $u_3$  em todo o volume do modelo 3D. Este tipo de problema pode surgir ao modelar mecanismos de controle externos ao problema 3D. De fato, a restrição neste caso visa modelar um mecanismo de controle externo da temperatura média de um corpo 3D. Por sua vez, o modelo 1D representa o tal mecanismo de controle, o qual poderia ser substituído por qualquer outra representação matemática. É importante notar que o valor médio agora se dá em todo o volume do domínio 3D, diferente do problema anterior onde a média era feita ao longo da superfície  $\Gamma$ . A Figura 2.2 representa essa situação.

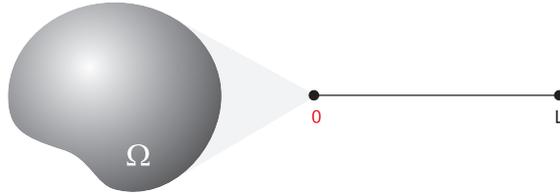


Figura 2.2: Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos com restrição sobre todo volume 3D

Com isto, colocamos o problema diretamente como um problema de ponto de sela, para o qual o funcional Lagrangeano é dado por

$$\mathcal{L}_{\Omega}(u_1, u_3, \lambda) = J_{1D}(u_1) + J_{1D}(u_3) + \langle R_{\Omega}(u_1, u_3), \lambda \rangle. \quad (2.46)$$

Neste caso o espaço em que está definido o funcional é o mesmo dado por (2.29) onde,

$$R_{\Omega}(u_1, u_3) = u_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega$$

e  $\langle R_{\Omega}(u_1, u_3), \lambda \rangle$  é um produto de dualidade e assim como na Seção 2.3, é um produto entre números reais, e sendo  $V$  a medida do domínio  $\Omega$ .

A variação do funcional (2.46) em  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  na direção  $(v_1, v_3, v_{\lambda}) \in \tilde{U}$  é dada por

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L}_{\Omega}(u_1, u_3, \lambda, v_1, v_3, v_{\lambda}) &= \left. \frac{d}{d\tau} \mathcal{L}_{\Omega}(u_1 + \tau v_1, u_3 + \tau v_3, \lambda + \tau v_{\lambda}) \right|_{\tau=0} = \\ &= \frac{d}{d\tau} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^L \left( \frac{d(u_1 + \tau v_1)}{dx} \right)^2 dx + \int_0^L (u_1 + \tau v_1)^2 dx - \int_0^L f_1(u_1 + \tau v_1) dx \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla(u_3 + \tau v_3)|^2 d\Omega + \int_{\Omega} (u_3 + \tau v_3)^2 d\Omega - \int_{\Omega} f_3(u_3 + \tau v_3) d\Omega \right. \\ &\quad \left. (\lambda + \tau v_{\lambda}) \left( (u_1 + \tau v_1)(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} (u_3 + \tau v_3) d\Omega \right) \right\} \Big|_{\tau=0} \quad (2.47) \end{aligned}$$

Segue que o diferencial de Gâteaux do funcional  $\mathcal{L}_{\Omega}$  é dado por

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L}_{\Omega}(u_1, u_3, \lambda, v_1, v_3, v_{\lambda}) &= \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega - \int_{\Omega} f_3 v_3 dx \\ &\quad + \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} v_3 d\Omega \right] + v_{\lambda} \left[ u_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega \right] \quad (2.48) \end{aligned}$$

Logo a formulação variacional consiste em determinar  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  tal que

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega \\ - \int_{\Omega} f_3 v_3 dx + \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} v_3 d\Omega \right] + v_{\lambda} \left[ u_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega \right] = 0 \\ \forall (v_1, v_3, v_{\lambda}) \in \tilde{U} \quad (2.49) \end{aligned}$$

Utilizando uma notação mais compacta,

$$a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) = \int_0^L \frac{du_1}{dx} \frac{dv_1}{dx} dx + \int_0^L u_1 v_1 dx + \int_{\Omega} \nabla u_3 \cdot \nabla v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 d\Omega \quad (2.50a)$$

$$b((v_1, v_3), \lambda) = \lambda \left[ v_1(0) - \frac{1}{V} \int_{\Omega} v_3 d\Omega \right] \quad (2.50b)$$

$$f((v_1, v_3)) = \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega \quad (2.50c)$$

o problema variacional (2.49) toma a forma : encontre  $(u_1, u_3, \lambda) \in \tilde{U}$  tal que

$$a((u_1, u_3), (v_1, v_3)) + b((u_1, u_3), v_{\lambda}) + b((v_1, v_3), \lambda) = f((v_1, v_3)) \quad \forall (v_1, v_3, v_{\lambda}) \in \tilde{U} \quad (2.51)$$

De modo a obter as equações de Euler assumimos que  $(v_1, v_3, v_{\lambda})$  é suficientemente regular, integramos por partes na expressão (2.49), obtendo

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dx} v_1 \Big|_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} \left( \frac{du_1}{dx} \right) v_1 dx + \int_0^L u_1 v_1 dx - \int_0^L f_1 v_1 dx + \int_{\partial\Omega} \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} v_3 d\Omega \\ - \int_{\Omega} \operatorname{div}(\nabla u_3) v_3 d\Omega + \int_{\Omega} u_3 v_3 - \int_{\Omega} f_3 v_3 d\Omega + \lambda v_1(0) - \frac{\lambda}{V} \int_{\Omega} v_3 d\Omega \\ + v_{\lambda} u_1(0) - \frac{v_{\lambda}}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega = 0 \quad \forall (v_1, v_3, v_{\lambda}) \in \tilde{U} \end{aligned} \quad (2.52)$$

As equações de Euler-Lagrange, do problema acoplado são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{d^2 u_1}{dx^2} + u_1 = 0 & \text{em } (0, L), \\ \frac{du_1}{dx}(L) = 0 & \text{em } x = L, \\ \frac{du_1}{dx}(0) = -V(\Delta u_3 - u_3 + f) & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega, \\ u_1(0) = \frac{1}{V} \int_{\Omega} u_3 d\Omega & \text{em } x = 0. \end{array} \right. \quad (2.53)$$

Note que neste caso em que a restrição de acoplamento é dada pelo valor médio

do campo  $u_3$  em todo o volume do domínio 3D, temos como consequência uma condição de Neumann homogênea dada pela quarta equação que sai naturalmente da formulação, além disso a condição de acoplamento dada pela terceira equação é sobre todo o volume de  $\Omega$ , dado que a derivada da solução do modelo 1D no ponto de acoplamento  $x = 0$  atua como uma fonte de calor no modelo 3D distribuída em todo o volume. A outra condição de acoplamento é dada pela última equação, que é similar a obtida em (2.24) e (4.3), a não ser pelo fato de que a média é sobre todo o volume  $\Omega$ .

# Capítulo 3

## Aproximação numérica pelo método de elementos finitos

Este capítulo está dividido em quatro seções. Na Seção 3.1 é feita uma breve revisão sobre o método de elementos finitos. Na Seção 3.2 o problema variacional (2.35) é introduzido em um espaço de dimensão finita, e as incógnitas do problema discretizado são definidas, apresentando ainda uma decomposição das incógnitas de forma a termos uma forma matricial em blocos para melhor visualização do sistema a ser resolvido. Na Seção 3.3 se discute brevemente a resolução do problema algébrico monolítico e as implicações do ponto de vista do condicionamento destes sistemas. E por último, na Seção 3.4 se motiva o emprego de estratégias de particionamento para a resolução do problema em forma iterativa, tema que será abordado no Capítulo 4.

### 3.1 Revisão sobre o método de elementos finitos

Nesta seção fazemos uma revisão com o objetivo de revisar conceitos relacionados com a aproximação de equações variacionais que serão usados na seção seguinte para o problema do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. A solução de alguns problemas na sua forma analítica de forma exata só é possível para sistemas muito simples, assim, para sistemas mais complexos envolvendo geometrias e condições de contorno mais sofisticadas, como os problemas tratados no capítulo anterior, não é possível se obter uma solução exata. Nestes

casos deve-se optar por procedimentos de aproximação com precisão aceitável para o modelo em questão. O método de elementos finitos é uma ferramenta numérica poderosa para resolver equações diferenciais parciais. A idéia básica do método de elementos finitos é realizar uma divisão do domínio de integração de um sistema de interesse em um conjunto de pequenas regiões, chamadas de elementos finitos transformando o domínio do problema de contínuo para discreto.

Consideremos inicialmente uma aproximação por elementos finitos para um problema elíptico linear em um único campo, como apresentado em (2.18), que é dado como segue: encontre  $u \in U$  tal que

$$a(u, v) = f(v) \quad \forall v \in U \quad (3.1)$$

Como vimos no capítulo anterior, existência e unicidade de solução para esta classe de problemas variacionais podem ser demonstradas pelo teorema de Lax-Milgram, apresentado na Seção 2.1. Essas propriedades de existência e de unicidade de solução serão herdadas por toda aproximação variacional conforme, isto é, aproximações construídas em qualquer espaço de dimensão finita satisfazendo  $U_h \subset U$ , como veremos mais adiante.

A idéia básica da aproximação numérica dos métodos variacionais consiste em resolver o problema em um espaço de dimensão finita  $U_h$ , onde  $h$  é o parâmetro característico ao espaço de aproximação. Então, o problema (3.1) é aproximado pelo seguinte: encontre  $u_h \in U_h$  tal que

$$a(u_h, v_h) = f(v_h) \quad \forall v_h \in U_h \quad (3.2)$$

que corresponde ao clássico método de Galerkin.

No método de elementos finitos  $U_h$  é construído de modo que é feita uma discretização do domínio  $\Omega$  em subdomínios  $\Omega^e$ , ou elementos finitos, sendo as funções  $u_h$  de  $U_h$  geradas a partir de interpolantes locais, em geral polinômios definidos no interior de cada elemento. A solução aproximada  $u_h, v_h \in U_h$  do problema (3.2)

converge para a solução exata  $u$  do problema contínuo (3.1) dependendo da escolha do espaço  $U_h$ , já que este deverá se aproximar do espaço  $U$  quando  $h \rightarrow 0$ . Não discutiremos a convergência da solução encontrada pelo método de elementos finitos dado que não é o foco do presente trabalho. Consideremos por exemplo o caso dos espaços de elementos finitos contidos em  $H^1(\Omega)$ . Então, seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n = 2, 3$ , um domínio poligonal, isto é,  $\Omega$  é um subconjunto aberto limitado tal que  $\bar{\Omega}$  é a união de um número finito de poliedros. Por simplicidade, aqui nos restringiremos ao caso bidimensional admitindo que  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  e consideramos que a decomposição finita é feita em  $N_e$  elementos, de modo que

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{N_e} \bar{\Omega}^e \quad \Omega^e \cap \Omega^f = \emptyset, \quad e \neq f \quad e, f = 1, \dots, N_e \quad (3.3)$$

onde  $\Omega^e$  é o interior do elemento genérico  $\Omega^e$ , e  $\bar{\Omega}^e$  o seu fecho. E ainda, se  $F = \Omega^e \cap \Omega^f$  ( $\Omega^e$  e  $\Omega^f$  elementos distintos), então  $F$  é uma face, lado ou vértice comum entre  $\Omega^e$  e  $\Omega^f$ . Assim, uma malha que é triangularizada satisfazendo (3.3) e ainda a condição anterior para  $F$  é dita admissível, caso contrário é dita não-admissível, assim como está representada na Figura 3.1.

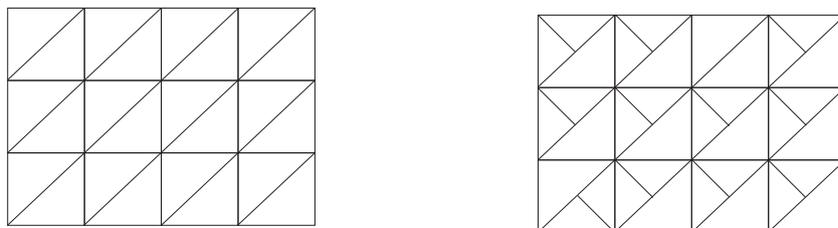


Figura 3.1: Malha admissível (esquerda) e não-admissível (direita).

O parâmetro da malha é dado por  $h = \max h_e$ , com  $e = 1, 2, \dots, N_e$ , e  $h_e$  é o diâmetro do elemento  $e$ . Agora, seja

$$X_h = X_h^k := \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}); v_{h|e} \in \mathbb{P}_k\} \quad (3.4)$$

onde  $v_{h|e}$  é a restrição de  $v_h$  ao elemento  $\Omega^e$ , e  $\mathbb{P}_k$  é o conjunto dos polinômios

definidos em cada elemento  $\Omega^e$ , com graus menores ou igual a  $k$  nas variáveis  $x_1 x_2$ . Este é um espaço de elementos finitos para elementos triangulares. Enquanto que para elementos retangulares, temos

$$X_h = X_h^k := \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}); v_h|_e \in \mathbb{P}_{k,k}\} \quad (3.5)$$

onde  $\mathbb{P}_{k,l}$  é o conjunto dos polinômios definidos no elemento  $e$ , com graus menores ou iguais a  $k$  e  $l$  nas variáveis espaciais  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente. Note que em ambos os casos (3.4) e (3.5) temos

$$X_h^k \subset H^1(\Omega) \quad (3.6)$$

Este fato é consequência do resultado a seguir.

**Proposição 3.1** Uma função  $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  pertence à  $H^1(\Omega)$  se e somente se

- i.  $v|_{\Omega^e} \in H^1(\Omega)$ ,  $e = 1, \dots, N_e$
- ii. para cada face comum  $F = \Omega^e \cap \Omega^f$ ,  $F \neq \emptyset$ , o traço em  $F$  de  $v|_{\Omega^e}$  e  $v|_{\Omega^f}$  é o mesmo, com  $e, f = 1, \dots, N_e$ .

□

**Prova.** A prova pode ser encontrada em (Quarteroni e Valli, 1999)

A maneira mais natural de se construir os espaços  $X_h^k$  é utilizando polinômios de Lagrange. Assim,  $v_h \in X_h^k$  é interpolado no interior de um elemento genérico por

$$v_h^e(x) = \sum_{j=1}^E v_j^e \phi_j^e(x), \quad (3.7)$$

onde  $E$  é o número de graus de liberdade do elemento  $e$ , que neste caso é igual ao número de nós, e  $\phi_i^e(x)$  é o polinômio de Lagrange de grau  $k$  associado ao nó  $i$  do elemento  $e$ , tal que  $\phi_i^e(x_j) = \delta_{ij}$ , sendo  $x_j$  a coordenada do nó  $j$  e  $\delta_{ij}$  o delta de Kronecker.

Por sua vez, em todo o domínio  $v_h$  é interpolado por

$$v_h(x) = \sum_{j=1}^G v_j \phi_j(x), \quad (3.8)$$

onde  $G$  é o número total de graus de liberdade adotado na discretização por elementos finitos, de forma geral é o número de nós em problemas de um único campo escalar, e  $\phi_i(x)$  é a função de interpolação global associada ao nó  $i$ , construída a partir das interpolantes locais  $\phi_i^e(x)$  que incidem nesse nó.

Agora, substituindo (3.8) em (3.1), obtemos

$$\sum_{i=1}^G a(\phi_i, \phi_j) u_i = f(\phi_j) \quad j = 1, \dots, G \quad (3.9)$$

que é equivalente ao problema matricial: encontre o vetor  $X$  que satisfaz o sistema de equações algébricas

$$AX = f \quad (3.10)$$

onde  $X = u_j$  é o vetor de incógnitas nodais, e

$$A_{ij} = a(\phi_j, \phi_i), \quad i, j = 1, 2, \dots, G \quad (3.11)$$

$$F_j = f(\phi_j) \quad j = 1, 2, \dots, G. \quad (3.12)$$

É importante notar, como já foi citado antes, que do fato de serem adotadas aproximações conformes, o problema discreto herda muitas das propriedades do problema contínuo correspondente. Assim, se a forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  do problema contínuo é coerciva então a matriz  $A$  do problema discreto (3.10) é também coerciva, o que assegura existência e unicidade de solução para a aproximação de elementos finitos  $u_h$ , pela imediata aplicação do lema de Lax ao problema (3.2). Se além disso a forma bilinear  $a(\cdot, \cdot)$  for simétrica a matriz  $A$  também será simétrica, e mais, será positiva definida.

### 3.2 Discretização do problema de acoplamento

Em busca da solução aproximada para o problema visto no capítulo anterior, uma vez que, a solução analítica não está disponível, faremos uso do método de elementos finitos. Como dito anteriormente, a implementação de uma restrição do tipo (2.10) não é trivial, o que nos remeteu a transformar o problema (2.16) em um problema de ponto de sela, dado por (2.35). Vamos introduzir este problema em um espaço de dimensão finita  $U_h^1 \subset H^1(0, L)$ ,  $U_h^3 \subset H^1(\Omega)$  e  $\lambda_h \in \mathbb{R}$ , de modo que, seguindo a notação introduzida na seção anterior

$$U_h^1 = U_h^{k1} := \{v_{1h} \in C^0[0, L]; v_{1h}|_{e_1} \in \mathbb{P}_{k1}\} \quad (3.13)$$

e

$$U_h^3 = U_h^{k3} := \{v_{3h} \in C^0(\bar{\Omega}); v_{3h}|_{e_3} \in \mathbb{P}_{k3}\} \quad (3.14)$$

são os espaço de elementos finitos triangulares para os problema 1D e 3D, respectivamente. De modo que,  $v_{1h} \in U_h^{k1}$  e  $v_{3h} \in U_h^{k3}$  são interpolados por

$$v_{1h}(x) = \sum_{j=1}^{N1} v_{1j} \phi_j^{1D}(x), \quad v_{3h}(x) = \sum_{j=1}^{N3} v_{3j} \phi_j^{3D}(x) \quad (3.15)$$

onde  $N1$  e  $N3$  são as dimensões dos espaços  $U_h^{k1}$  e  $U_h^{k3}$ , respectivamente. Substituindo as aproximações dadas por (3.15) no problema variacional (2.35), obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{N1} \left[ \int_0^L \left( \frac{d\phi_i^{1D}}{dx} \frac{d\phi_j^{1D}}{dx} + \phi_i^{1D} \phi_j^{1D} \right) dx \right] u_{1i} + \sum_{m=1}^{N3} \left[ \int_{\Omega} (\nabla \phi_m^{3D} \cdot \nabla \phi_n^{3D} + \phi_m^{3D} \phi_n^{3D}) d\Omega \right] u_{3m} \\ & + \sum_{i=1}^{N1} v_{\lambda} \phi_i^{1D}(0) + \lambda_h \phi_j^{1D}(0) - \frac{1}{A} \sum_{m=1}^{N3} v_{\lambda} \int_{\Gamma} \phi_m^{3D} d\Gamma - \frac{1}{A} \lambda_h \int_{\Gamma} \phi_n^{3D} d\Gamma = \\ & \int_0^L f_1 \phi_j^{1D} dx + \int_{\Omega} f_3 \phi_n^{3D} d\Omega \\ & j = 1, \dots, N1, \quad n = 1, \dots, N3 \quad (3.16) \end{aligned}$$

Introduzindo uma notação mais compacta

$$a_1(\phi_i^{1D}, \phi_j^{1D}) = \int_0^L \left( \frac{d\phi_i^{1D}}{dx} \frac{d\phi_j^{1D}}{dx} + \phi_i^{1D} \phi_j^{1D} \right) dx \quad (3.17a)$$

$$a_3(\phi_m^{3D}, \phi_n^{3D}) = \int_{\Omega} (\nabla \phi_m^{3D} \cdot \nabla \phi_n^{3D} + \phi_m^{3D} \phi_n^{3D}) d\Omega \quad (3.17b)$$

$$b_1(\phi_j^{1D}, 1) = \phi_j^{1D}(0) \quad (3.17c)$$

$$b_3(\phi_n^{3D}|_{\Gamma}, 1) = -\frac{1}{A} \int_{\Gamma} \phi_n^{3D} d\Gamma \quad (3.17d)$$

$$b_1(\phi_i^{1D}, v_{\lambda}) = v_{\lambda} \phi_i^{1D}(0) \quad (3.17e)$$

$$b_3(\phi_m^{3D}|_{\Gamma}, v_{\lambda}) = -\frac{v_{\lambda}}{A} \int_{\Gamma} \phi_m^{3D} d\Gamma \quad (3.17f)$$

$$f_1(\phi_j^{1D}) = \int_0^L f_1 \phi_j^{1D} dx \quad (3.17g)$$

$$f_3(\phi_n^{3D}) = \int_{\Omega} f_3 \phi_n^{3D} d\Omega \quad (3.17h)$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{N1} a_1(\phi_i^{1D}, \phi_j^{1D}) u_{1i} + \sum_{m=1}^{N3} a_3(\phi_m^{3D}, \phi_n^{3D}) u_{3i} \\ & + \sum_{i=1}^{N1} b_1(\phi_i^{1D}, v_{\lambda}) u_{1i} + \sum_{m=1}^{N3} b_3(\phi_m^{3D}|_{\Gamma}, v_{\lambda}) u_{3m} + b_1(\phi_j^{1D}, 1) \lambda_h + b_3(\phi_n^{3D}|_{\Gamma}, 1) \lambda_h = \\ & f_1(\phi_j^{1D}) + f_3(\phi_n^{3D}) \quad j = 1, \dots, N1, \quad n = 1, \dots, N3 \end{aligned} \quad (3.18)$$

que é equivalente ao problema matricial: Achar o vetor  $X$  que satisfaz

$$A_h X_h = f_h. \quad (3.19)$$

Vamos considerar o problema através de uma decomposição por blocos. Vejamos a estrutura do problema nesta configuração,

$$\begin{pmatrix} A_h^{11} & 0 & A_h^{1\lambda} \\ 0 & A_h^{33} & A_h^{3\lambda} \\ A_h^{\lambda 1} & A_h^{\lambda 3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1h} \\ u_{3h} \\ \lambda_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{1h} \\ f_{3h} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

onde  $X_h = (u_{1h}, u_{3h}, \lambda_h)$  é o vetor de incógnitas nodais (aqui houve abuso de notação já que  $u_{1h}$  e  $u_{3h}$  denotam as coleções de valores nodais  $\{u_{1i}\}_{i=1}^{N_1}$  e  $\{u_{3i}\}_{i=1}^{N_3}$ , respectivamente), e os blocos matriciais no problema discreto são dados como segue

$$(A_h^{11})_{ij} = \int_0^L \frac{d\phi_i^{1D}}{dx} \frac{d\phi_j^{1D}}{dx} dx + \int_0^L \phi_i^{1D} \phi_j^{1D} dx \quad i, j = 1, \dots, N_1 \quad (3.21a)$$

$$(A_h^{1\lambda})_j = \begin{cases} 1 & j = 1 \\ 0 & j = 2, \dots, N_1 \end{cases} \quad (3.21b)$$

$$(A_h^{33})_{mn} = \int_{\Omega} \nabla \phi_m^{3D} \cdot \nabla \phi_n^{3D} d\Omega + \int_{\Omega} \phi_m^{3D} \phi_n^{3D} d\Omega \quad m, n = 1, \dots, N_3 \quad (3.21c)$$

$$(A_h^{3\lambda})_m = -\frac{1}{A} \int_{\Gamma} \phi_m^{3D} d\Gamma \quad m \in \zeta \quad (3.21d)$$

$$(A_h^{\lambda 1})_i = \begin{cases} 1 & i = 1 \\ 0 & i = 2, \dots, N_1 \end{cases} \quad (3.21e)$$

$$(A_h^{\lambda 3})_n = -\frac{1}{A} \int_{\Gamma} \phi_n^{3D} d\Gamma \quad n \in \zeta \quad (3.21f)$$

$$(f_{1h})_j = \int_0^L f_1 \phi_j^{1D} dx \quad (3.21g)$$

$$(f_{3h})_n = \int_{\Omega} f_3 \phi_n^{3D} d\Omega \quad (3.21h)$$

com  $\zeta$  o conjunto de índices dos nós sobre a fronteira  $\Gamma$ . Denotaremos por  $M_3 = \text{card}\{\zeta\}$  a cardinalidade do conjunto  $\zeta$ . Note que  $\phi_i^{1D}(0)$  só será diferente de zero no nó que corresponde à fronteira  $x = 0$ . De fato, note que temos assumido que o ponto  $x = 0$  se corresponde com o nó 1 da discretização do modelo 1D. Daí, segue que os blocos  $A_h^{1\lambda}$  e  $A_h^{\lambda 1}$  contêm elementos nulos menos a entrada correspondente ao nó 1 do modelo 1D. O mesmo acontece com  $\phi_{j|\Gamma}^{3D}$  que será diferente de zero somente nos nós que estão sobre a fronteira  $\Gamma$  (para melhor visualização ver Figura 3.2). Por sua vez,  $\lambda, v_\lambda \in \mathbb{R}$  e em particular, por simplicidade escolhemos fazer  $\lambda = 1$  e  $v_\lambda = 1$ .

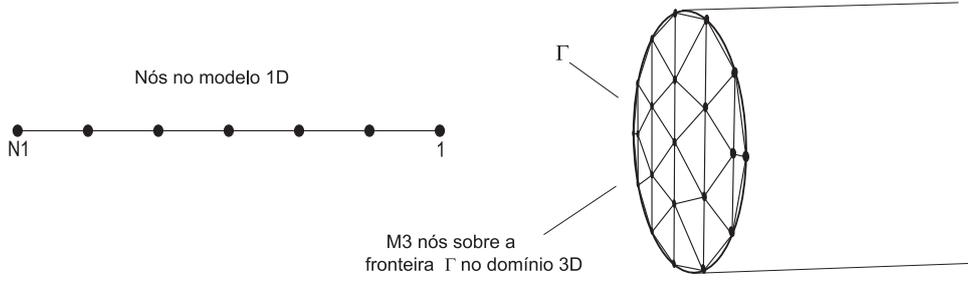


Figura 3.2: Discretização no modelo 1D (esquerda) e na interface de acoplamento do modelo 3D (direita).

De maneira a detalhar melhor a decomposição anterior, se cada nó do vetor  $u_{1h} = (u_{1h}^I, u_{1h}^F)^T$  e  $u_{3h} = (u_{3h}^I, u_{3h}^F)^T$ , correspondem aos nós do interior de cada domínio denotados por (I) e aos nós da fronteira denotados por (F), as matrizes  $A_{11}^h$  e  $A_{33}^h$ , terão respectivamente as seguintes estruturas em bloco:

$$A_h^{11} = \begin{pmatrix} A_h^{11(II)} & A_h^{11(IF)} \\ A_h^{11(FI)} & A_h^{11(FF)} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A_h^{33} = \begin{pmatrix} A_h^{33(II)} & A_h^{33(IF)} \\ A_h^{33(FI)} & A_h^{33(FF)} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

e ainda,

$$A_h^{\lambda 1} = \begin{pmatrix} 0 & A_h^{\lambda 1(F)} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A_h^{\lambda 3} = \begin{pmatrix} 0 & A_h^{\lambda 3(F)} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Substituindo em (3.20) obtemos:

$$\begin{pmatrix} A_h^{11(II)} & A_h^{11(IF)} & 0 & 0 & 0 \\ A_h^{11(FI)} & A_h^{11(FF)} & 0 & 0 & A_h^{\lambda 1} \\ 0 & 0 & A_h^{33(II)} & A_h^{33(IF)} & 0 \\ 0 & 0 & A_h^{33(FI)} & A_h^{33(FF)} & A_h^{\lambda 3} \\ 0 & A_h^{\lambda 1} & 0 & A_h^{\lambda 3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1h}^I \\ u_{1h}^F \\ u_{3h}^I \\ u_{3h}^F \\ \lambda_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{1h}^I \\ f_{1h}^F \\ f_{3h}^I \\ f_{3h}^F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

a primeira e a segunda linha da matriz estão associadas ao modelo 1D, de modo que obtemos  $N1 - 1$  equações para os nós no interior do domínio, e uma equação para o nó correspondente à fronteira. A terceira e a quarta linha da matriz, dizem a respeito do modelo 3D, e na última linha estão os blocos associados a  $\lambda_h$ , que são

os que realizam o acoplamento na formulação. Note que estes blocos associados a  $\lambda_h$  produzem o acoplamento de um grande número de incógnitas. Isso se torna computacionalmente um inconveniente já que o sistema algébrico é mais difícil de resolver quando são empregados métodos iterativos, em contrapartida ao caráter intrinsecamente esparsos do método de elementos finitos. Uma estratégia para contornar este problema é empregar preconditionadores para o sistema algébrico (3.24), questão que é analisada na seção que segue.

### 3.3 Precondicionamento do problema algébrico

O precondicionamento de um problema consiste em modificar o problema original de forma que o novo problema seja equivalente ao anterior, no sentido de possuir a mesma solução, porém, que seja melhor condicionado, sendo mais fácil de resolver empregando métodos numéricos. Portanto, seja  $P$  um preconditionador (ou seja, uma matriz responsável pela transformação do problema), o sistema linear

$$Ax = b \tag{3.25}$$

pode ser equivalentemente reformulado como

$$P^{-1}Ax = P^{-1}b \tag{3.26}$$

Idealmente  $P^{-1}$  deveria parecer com  $A^{-1}$ , mas ao mesmo tempo um bom preconditionador não deve ser muito custoso. Uma maneira para determinar um condicionador para o sistema é fatorar a matriz  $A$ . A idéia seguida aqui é obtida de (Benzi et al., 2005) e consiste em construir um preconditionador para o complemento de Schur do sistema (3.20).

### 3.3.1 Sistemas algébricos ponto de sela

Consideremos os sistemas lineares em blocos  $2 \times 2$  com a seguinte estrutura:

$$\begin{pmatrix} A & B_1^T \\ B_2 & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

no qual

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, B_1 \text{ e } B_2 \in \mathbb{R}^{m \times n} \text{ e } C \in \mathbb{R}^{m \times m}, \text{ com } m \leq n, \quad (3.28)$$

ou, chamando

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & B_1^T \\ B_2 & -C \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

o sistema anterior pode ser resumido como

$$\mathcal{A}x = b. \quad (3.30)$$

O caso em que  $A$  e/ou  $B_1$  ou  $B_2$  ou ambas sejam nulas é excluído.

**Definição 3.1** Um sistema linear na forma (3.27) e (3.28) descreve um problema de ponto de sela, se os blocos  $A$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  e  $C$  satisfazem pelo menos uma das seguintes condições:

- (1)  $A$  é simétrica:  $A = A^T$
- (2) a parte simétrica de  $A$ :  $H = \frac{1}{2}(A + A^T)$  é semi-definida positiva
- (3)  $B_1 = B_2 = B$
- (4)  $C$  é simétrica ( $C = C^T$ ) e semi-definida positiva
- (5)  $C = 0$ .

A matriz  $\mathcal{A}$  é chamada matriz ponto de sela.

Note que 5. implica 4. O caso mais simples é quando todas as condições anteriores são satisfeitas. Neste caso  $A$  é simétrica, semi-definida positiva e sob estas condições o sistema (3.27) resulta em um sistema linear simétrico da forma

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

que é justamente o sistema linear apresentado na Seção 3.2 deste capítulo (ver equações (3.20) ou (3.24)), considerando o seguinte particionamento

$$A = \begin{pmatrix} A_{11}^h & 0 \\ 0 & A_{33}^h \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} A_{\lambda 1}^h & A_{\lambda 3}^h \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad C = 0. \quad (3.32)$$

### 3.3.2 Fatoração das matrizes ponto de sela

Uma situação ideal ao se resolver sistemas lineares, são os casos nos quais a matriz  $\mathcal{A}$  do sistema é triangular. Uma maneira de se obter matrizes com estruturas mais simples é fatorar a matriz  $\mathcal{A}$ , ou seja, decompor a matriz como o produto de duas ou mais matrizes com estruturas mais simples. Assim, o sistema linear pode ser reescrito como a resolução de dois ou mais sistemas de equações cujas estruturas matricias são mais simples que o sistema original.

Observe que a matriz  $A$  dada por (3.32) é não singular, de fato, segue fácil mostrar da proposição que os blocos  $A_{11}^h$  e  $A_{33}^h$  são não singulares. Então, a matriz  $\mathcal{A}$  dada em (3.31) admite a seguinte fatoração

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ BA^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B^T \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

onde  $S = -(BA^{-1}B^T)$  é o complemento de Schur de  $A$  em  $\mathcal{A}$ .

Também é útil a fatoração equivalente

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B^T \\ 0 & I \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Das fatorações anteriores, podemos observar que sendo  $A$  inversível, a matriz  $\mathcal{A}$  é não singular se, e somente se, o complemento de Schur também é inversível.

### 3.3.3 Propriedades espectrais

O estudo das propriedades espectrais, isto é, dos autovalores da matriz  $\mathcal{A}$  é muito importante para o desenvolvimento dos métodos de resolução do sistema, bem como na análise de convergência deles. Embora este não seja o foco do presente trabalho, este fato é o que motiva essa subseção, de forma a complementar o estudo teórico dos sistemas algébricos derivados da classe de problemas aqui tratados.

Antes porém, vejamos algumas propriedades matriciais que serão úteis (para maiores detalhes e demonstrações veja (Quarteroni et al., 1991)).

**Definição 3.2** Duas matrizes  $A$  e  $B$  são ditas **congruentes**, se existe uma matriz  $P$  inversível tal que  $P^T A P = B$ .

A seguir, vejamos alguns resultados referentes à congruência de matrizes, começando com a relação de equivalência.

**Lema 3.1** A congruência é uma relação de equivalência. Além disso, têm-se as seguintes propriedades

- (1) Duas matrizes congruentes têm o mesmo posto.
- (2) Sejam  $A$  e  $B$  matrizes congruentes, então  $A$  é definida positiva (negativa) se, e somente se,  $B$  é definida positiva (negativa).

Outro conceito que adquire importância no momento de obter informações acerca dos autovalores de uma matriz é o conceito de inércia da matriz, definido como segue.

**Definição 3.3** Seja  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  uma matriz simétrica. A **Inércia** de  $A$  é a terna ordenada dada por

$$i(A) = (i_+(A), i_-(A), i_0(A)) \quad (3.35)$$

onde  $i_+(A)$ ,  $i_-(A)$  e  $i_0(A)$  são respectivamente, as quantidades de autovalores positivos, negativos e nulos de  $A$ , contando multiplicidade. Note que o posto( $A$ ) é igual a  $i_+(A) + i_-(A)$ .

**Proposição 3.1** Lei da Inércia de Sylvester: Duas matrizes simétricas são congruentes, se e somente têm a mesma inércia, isto é, a mesma quantidade de autovalores positivos, negativos e nulos.

Agora sim, estamos em condições de estudar algumas propriedades referentes aos autovalores das matrizes presentes no sistema algébrico de ponto de sela. Seja o sistema algébrico (3.31). Dado que a matriz  $A$  é simétrica e definida positiva,  $B$  com suas colunas linearmente independentes (de fato estas matrizes retangulares em nosso caso são vetores), então de (3.34) temos

$$\begin{pmatrix} A & 0 \\ B & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A^{-1}B^T \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

onde  $S = -BA^{-1}B^T$  é simétrica definida negativa. Logo  $\mathcal{A}$  é congruente à matriz do lado direito da (3.36).

Resulta da lei da Inércia de Sylvester que a matriz dada pelo lado direito da (3.36) é indefinida, pois tem  $n$  autovalores positivos, que são os autovalores da matriz  $A$  e tem  $m$  autovalores negativos, que correspondem à matriz  $S$ , então segue que  $\mathcal{A}$  é indefinida, com  $n$  autovalores positivos e  $m$  autovalores negativos. O mesmo aconteceria se  $B$  tivesse posto incompleto (o que não é nosso caso), ou suas colunas não forem linearmente independentes, pois  $S$  continua sendo definida negativa. No caso em que  $S$  tem posto deficiente, por exemplo  $m - r$ , então  $S$  tem  $m - r$  autovalores negativos e  $r$  nulos. Isso implica que  $\mathcal{A}$  teria  $n$  autovalores positivos,  $m - r$  negativos e  $r$  nulos.

O seguinte resultado estabelece um limitante para os autovalores da matriz  $\mathcal{A}$ . Em particular consideraremos o caso do sistema derivado do problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Neste caso, a matriz  $B$  possui um único valor singular. Além disso, vale lembrar que foi empregado o método de elementos finitos na discretização espacial do problema.

**Proposição 3.2** Sejam  $A$ ,  $B$  e  $C$  como na (2.32), isto é,  $A$  é simétrica definida positiva,  $B$  tem posto completo e igual a 1, e  $C = 0$ . Seja  $\mu_1$  e  $\mu_n$  o maior e o menor autovalor de  $A$ , respectivamente, e seja  $\xi$  o valor singular de  $B$ . Então, o espectro da matriz  $\mathcal{A}$ , denotado por  $\sigma(\mathcal{A})$ , é tal que

$$\sigma(\mathcal{A}) \subset I^- \cup I^+ \quad (3.37)$$

onde

$$I^- = \left[ \frac{1}{2} \left( \mu_n - \sqrt{\mu_n^2 + 4\xi^2} \right), \frac{1}{2} \left( \mu_1 - \sqrt{\mu_1^2 + 4\xi^2} \right) \right] \quad (3.38)$$

e

$$I^+ = \left[ \mu_n, \frac{1}{2} \left( \mu_1 + \sqrt{\mu_1^2 + 4\xi^2} \right) \right] \quad (3.39)$$

com  $\mu_1, \mu_n$  e  $\xi$  dados como segue

$$\mu_1 = \max\{\alpha^{1D} C_2^{1D} h_1 (1 + C_3^{1D} h_1^{-2}), \alpha^{3D} C_2^{3D} h_3 (1 + C_3^{3D} h_3^{-2})\} \quad (3.40)$$

$$\mu_n = \min\{\beta^{1D} C_1^{1D} h_1, \beta^{3D} C_1^{3D} h_3\} \quad (3.41)$$

$$\xi = 1 + \sum_{i=1}^{M3} y_i^2 \quad (3.42)$$

sendo  $\alpha^{1D}, \alpha^{3D}$  e  $\beta^{1D}, \beta^{3D}$  as constantes de continuidade e coercividade dos modelos 1D e 3D, respectivamente, e sendo que  $y_i$  é dada por  $y_i = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} \phi_i d\Gamma$ . Lembre que  $M3$  é o número de nós do modelo 3D sobre a fronteira de acoplamento  $\Gamma$ . Observe que os valores de  $\mu_1, \mu_n$  derivam de resultados clássicos da teoria de elementos finitos. O leitor interessado pode encontrar mais sobre isto em (Quarteroni e Valli, 1994)

### 3.3.4 Precondicionadores para problemas de ponto de sela

Em muitas ocasiões, a fase de condicionamento resulta mandatória por se tratar de um sistema algébrico cuja matriz é muito mal condicionada. No nosso caso do problema algébrico dado pela (3.20), a questão aparece ao quisermos resolver de maneira monolítica este sistema de equações usando um método iterativo. Em geral, este não será nosso problema, posto que a partir do Capítulo 4 abordaremos o particionamento do problema (3.20). Entretanto, para efeitos de completude, a seguir discutimos alguns aspectos e dificuldades no condicionamento de problemas como os derivados da formulação matemática dos modelos dimensionalmente heterogêneos.

O condicionamento pode ser utilizado na solução iterativa de sistemas de redução decorrentes da redução do complemento de Schur. De um modo geral, existem duas abordagens para a construção de condicionadores. Uma é baseada em técnicas puramente algébricas, como fatorações incompletas, inversas aproximadas e métodos algébricos multinível. Entretanto, quando aplicado a sistemas de ponto de sela, estes tipos de condicionadores geralmente funcionam mal. O fato de resultarem condicionadores instáveis em muitas situações é decorrente da indefinição da matriz do sistema e da falta de dominância diagonal.

A segunda abordagem requer o conhecimento da origem do problema, incluindo detalhes sobre a discretização utilizada, a geometria subjacente, as propriedades dos coeficientes, e assim por diante, de modo que os condicionadores são desenvolvidos adaptados a aplicação particular baseados na física do problema. Naturalmente, quanto mais informações se pode usar, melhor será a qualidade do condicionador. A desvantagem desta abordagem é que a quantidade de problemas que podem ser tratadas com um condicionador particular será necessariamente estreita.

Para problemas do ponto de sela, a construção de condicionadores de alta qualidade necessita explorar a estrutura em blocos do problema, assim como também o conhecimento detalhado sobre a origem e a estrutura dos diferentes

blocos. Não se fala em “melhor” preconditionador para os problemas de ponto de sela, já que a escolha de um preconditionador é fortemente dependente do problema. De fato, a estrutura dos diferentes blocos varia muito de aplicação para aplicação.

Com o intuito de solucionar a equação (3.20), apresentamos a seguir duas alternativas de preconditionamento. Para maiores detalhes a referência (Benzi et al., 2005) deve ser consultada.

### 3.3.4.1 Precondicionadores diagonais por blocos

O preconditionador diagonal por blocos básico é representado matricialmente por

$$P_d = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & -S \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

onde  $S = -BA^{-1}B^T$  é o complemento de Schur. Precondicionando  $\mathcal{A}$  pela esquerda resulta na matriz

$$\mathcal{M} = P_d^{-1}\mathcal{A} = \begin{pmatrix} I & A^{-1}B^T \\ -S^{-1}B & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

A matriz  $\mathcal{M}$  é não singular por hipótese e satisfaz

$$(\mathcal{M} - I) \left( \mathcal{M} - \frac{1}{2}(1 + 2\sqrt{5})I \right) \left( \mathcal{M} - \frac{1}{2}(1 - 2\sqrt{5})I \right) = 0. \quad (3.45)$$

A matriz  $\mathcal{M}$  é diagonalizável e tem apenas três autovalores distintos,  $1$ ,  $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$  e  $\frac{1-\sqrt{5}}{2}$ . Isso implica que o polinômio mínimo tem grau 3, o que implica que para cada resíduo inicial  $r_0$ ,  $\dim K_{n+m}(\mathcal{M}, r_0) \leq 3$ , que garante a convergência dos métodos baseados em espaço de Krylov ( $\mathcal{K}_{n+m}$  é o espaço de Krylov associado a  $\mathcal{M}$  gerado a partir de  $r_0$ ) em no máximo 3 iterações (para matrizes não singulares), em aritmética exata. O mesmo pode ser mostrado para o preconditionamento a direita, ou qualquer outro preconditionamento centrado da forma  $P_1^{-1}\mathcal{A}P_2^{-1}$  com

$$P_1 P_2 = P_d.$$

À primeira vista este tipo de condicionamento parece promissor. No entanto, temos que utilizando a decomposição (3.34), a matriz inversa de  $\mathcal{A}$  é dada por

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1} B^T S^{-1} B A^{-1} & -A^{-1} B^T S^{-1} \\ -S^{-1} B A^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

de modo que

$$\mathcal{A}^{-1} = \left( \mathcal{M} + \begin{pmatrix} A^{-1} B^T S^{-1} B & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \right) P_d^{-1}. \quad (3.47)$$

Vemos portanto que a construção do condicionador  $\mathcal{P}_d$  dado por (3.43) é, essencialmente, tão caro quanto o cálculo da inversa de  $A$  e de  $S$ . Na prática, o condicionador exato (3.43) precisa ser substituído por uma aproximação,

$$\hat{P}_d = \begin{pmatrix} \hat{A} & 0 \\ 0 & -\hat{S} \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

onde  $\hat{A}$  e  $\hat{S}$  são aproximações de  $A$  e  $S$ , respectivamente.

Várias aproximações diferentes foram considerados na literatura. Em (Benzi et al., 2005) é considerado uma **decomposição** de  $A$  em

$$A = D - E \quad (3.49)$$

onde  $D$  é inversível. Então, uma escolha consiste em tomar  $\hat{A} = D$  e  $S = -BD^{-1}B^T$ . Com isto, os autovalores da matriz condicionada resultam

$$\hat{\mathcal{M}} = P_d^{-1} \mathcal{A} = \begin{pmatrix} I - D^{-1}E & D^{-1}B^T \\ -\hat{S}^{-1}B & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & D^{-1}B^T \\ -\hat{S}^{-1}B & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} D^{-1}E & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

pondo em evidência que a distância entre os três autovalores distintos de  $\hat{\mathcal{M}}$  de-

pende de vários fatores, incluindo a norma da matriz  $D^{-1}E$ . No caso em que  $A$  é diagonalmente dominante, e  $D = \text{diag}(A)$ , é esperado que os autovalores de  $\hat{\mathcal{M}}$  estejam em torno de 1,  $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$  e  $\frac{1-\sqrt{5}}{2}$ . No entanto, existe a desvantagem de que a matriz  $\hat{\mathcal{M}}$  preconditionada tem autovalores que podem ser de ambos os lados do eixo imaginário. Neste caso, vamos analisar como se comporta um outro tipo de preconditionador.

### 3.3.5 Precondicionadores triangulares por blocos

O emprego de preconditionadores triangulares por blocos constitui uma estratégia mais eficaz que a anterior. Estes preconditionadores são expressados matricialmente por

$$P_t = \begin{pmatrix} A & B^T \\ 0 & S \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

A aplicação de preconditionadores desta classe gera dois sistemas lineares que devem ser resolvidos para o resíduo como lado direito, para cada iteração do método iterativo empregado. Note que a linha do primeiro bloco da matriz  $P_t$  é equivalente a linha do primeiro bloco da matriz  $\mathcal{A}$ , então, para a estimativa inicial  $u_0 = 0$ , a solução da equação inicial de condicionamento  $P_t z_0 = r_0 = b$  deve satisfazer a primeira das duas equações do sistema (3.31). A matriz preconditionada tem um polinômio mínimo de grau 2, de modo que um método como o GMRES iria convergir no máximo em duas iterações. Na prática, evidentemente, devem ser utilizadas aproximações para  $\hat{A}$  e  $\hat{S}$  em vez de  $A$  e  $S$ . O cálculo do  $z_k = P_t^{-1} r_k$  em cada iteração de um método de subespaço Krylov pode ser implementado com base na fatorização

$$P_t^{-1} = \begin{pmatrix} \hat{A}^{-1} & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & B^T \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -\hat{S}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Podemos notar que o custo em aplicar este tipo de preconditionador é ainda um pouco maior que no caso do bloco diagonal, pois além de resolver com  $\hat{A}$  e  $\hat{S}$ , ainda

há uma multiplicação adicional por  $B^T$ , além disso, outra desvantagem evidente no caso simétrico é que o condicionamento bloco triangular destrói a simetria.

### 3.3.5.1 Discussão sobre o uso de condicionadores

Nas seções anteriores, buscamos uma solução algorítmica para o sistema de equações (3.20) através do uso de condicionadores baseados no complemento da matriz. Entretanto, com o discutido nas seções anteriores está claro que o melhor condicionador para o problema tratado não está bem determinado (nem é o objetivo deste trabalho), dado que a aplicação desses tipos de condicionadores estão sendo tão custosas quanto inverter a matriz  $\mathcal{A}$ . Além disso, como dito, resolver o problema (3.20) de forma monolítica empregando por sua vez condicionadores como os vistos aqui (ou outras alternativas) implicaria introduzir modificações significativas no código de elementos finitos, na fase de resolução do sistema algébrico. Ao longo de todo este trabalho foi enfatizado que era de nossa preferência não ter que acessar completamente o código de elementos finitos, e sim utilizar um código já pronto e lidar com ele apenas como usuário, para o qual a metodologia de decomposição de domínios precisa ser utilizada (veja Capítulo 4 a seguir).

## 3.4 Comentários finais

As ideias desenvolvidas no Capítulo 2, permitem lidar com acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos, entretanto, em geral não é possível resolver esses problemas de forma analítica. Desta maneira, se faz necessário buscar a solução numericamente, de acordo ao apresentado no presente Capítulo. Como discutido anteriormente, a implementação de uma restrição do tipo (2.10) não é trivial, e isso implicaria em importantes mudanças dentro de um código de elementos finitos, devido a que construir um espaço de funções de interpolação de elementos finitos para o espaço  $U$  dado por (2.12) requer que as funções de interpolação satisfaçam (2.10). Portanto, o uso de uma outra estratégia relacionada com a técnica de multiplicadores de Lagrange para relaxar a restrição foi apresen-

tada seguindo a teoria dos multiplicadores de Lagrange. Apesar desta alternativa resolver o problema da construção do espaço  $U$ , a mesma apresenta, do ponto de vista algébrico, e computacional, alguns inconvenientes, já que obtemos blocos matriciais extradiagonais (blocos  $B$  no sistema (3.20)), produzem o acoplamento entre muitos graus de liberdade (todas as incógnitas correspondentes à interface de acoplamento do modelo 3D com uma incógnita do modelo do modelo 1D). Diante da dificuldade de lidar com um sistema algébrico pior condicionado devido à abordagem de multiplicadores de Lagrange foi considerado o condicionamento do problema algébrico. Entretanto, vimos que a construção de um condicionador pode ser muito custoso, além de precisar introduzir alterações significativas no código de elementos finitos. Como salientado, isto é algo que se deseja evitar. Isso nos leva a dar uma outra interpretação às condições de acoplamento, separando, via alguma estratégia, ambos os problemas e, analisando as condições de acoplamento que neste contexto seriam condições de contorno sobre cada um deles. Este procedimento implica em resolver o problema original através da resolução de subproblemas dimensionalmente homogêneos de forma desacoplada, e para isso vamos ver que é possível dividir a resolução do problema acoplado em dois subproblemas que de forma iterativa vão se aproximando do problema original heterogêneo. Para tal propósito, no capítulo seguinte desenvolveremos uma estratégia para empregar métodos iterativos na resolução do problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Esta ideia está apoiada no conceito de decomposição de domínios. Entretanto, diferentemente da teoria clássica de métodos de decomposição de domínios colocaremos o problema em forma estendida, como será explicado na próxima seção.

# Capítulo 4

## Método de decomposição de domínio para modelos heterogêneos

O objetivo deste capítulo é desenvolver uma estratégia para resolver de forma iterativa problemas de acoplamento como aqueles tratados no Capítulo 2. Para introduzir as ideias subjacentes faremos uso de um problema unidimensional simples, o qual será reformulado a partir de decompô-lo em dois subproblemas escritos em subdomínios complementares (não superpostos). Assim, o problema de acoplamento será reescrito em termos de incógnitas definidas sobre a interface de acoplamento entre os dois subproblemas, e sobre este problema será aplicado algum método iterativo em sua resolução, como será visto no Capítulo 5. Este capítulo está organizado em três seções. Na primeira seção tratamos de um problema 1D e aplicamos o método de decomposição de domínio com o objetivo de apresentar o método para um caso simples. Também apresentamos diversas alternativas que surgem ao formular o problema de acoplamento como um problema de interface. A seguir analisamos as características das alternativas propostas as quais são comparadas por meio do estudo do número de condicionamento dos problemas obtidos em cada caso. Finalmente, discutimos sobre a aplicação do método de decomposição proposto em modelos acoplados dimensionalmente heterogêneos e estendemos sua aplicação a esta classe de problemas.

#### 4.1 Acoplamento em um problema homogêneo 1D

Considere o seguinte problema de difusão definido sobre um domínio 1D de comprimento  $L$ ,

$$\left\{ \begin{array}{ll} -k_1 \frac{d^2 U}{dx^2} = f & \text{em } (0, c), \\ -k_2 \frac{d^2 U}{dx^2} = f & \text{em } (c, L), \\ U(0) = 0, \\ U(L) = 0, \\ U(c^-) = U(c^+), \\ -k_1 \frac{dU}{dx}(c^-) = -k_2 \frac{dU}{dx}(c^+). \end{array} \right. \quad (4.1)$$

O problema é modelado de forma que em uma parte do domínio, ou seja, de  $(0, c)$  o parâmetro de difusão é denotado por  $k_1$ , e a outra metade, isto é, de  $(c, L)$  o parâmetro de difusão é representado por  $k_2$ , como mostra a Figura 4.1.

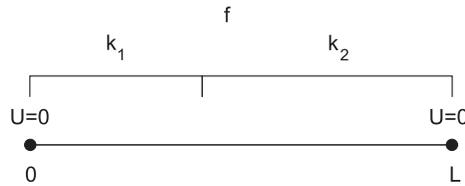


Figura 4.1: Problema de difusão em um domínio 1D.

Para este caso levamos em conta que existe continuidade no ponto  $x = c$  da solução  $U$  e do fluxo correspondente. Vamos considerar que  $k_1$ ,  $k_2$  e  $f$  são constantes.

Vamos dividir o domínio  $\Omega = (0, L)$  em dois subdomínios, escolhendo um ponto arbitrário de forma a obter duas regiões não sobrepostas. Para simplificar a exposição, tomemos o ponto  $x = c$ , de modo que obtemos  $\Omega_1 = (0, c)$  e  $\Omega_2 = (c, L)$ , como mostram as figuras em 4.2.

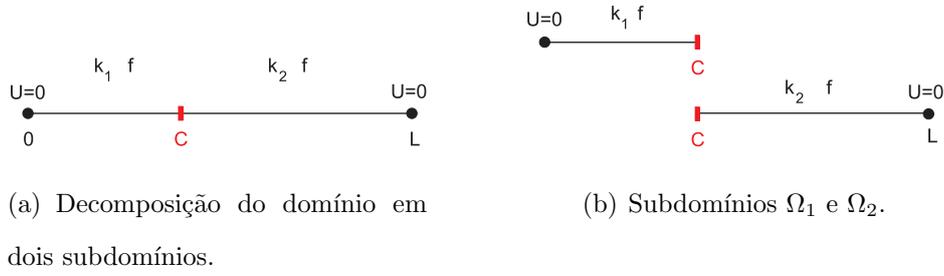


Figura 4.2: Decomposição de domínios em problema 1D

Nosso objetivo, assim como em todos os métodos de decomposição de domínio, é resolver o problema (4.1.1) resolvendo separadamente o problema em cada um dos subdomínios  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$  e trocando informações através do ponto de acoplamento. Entretanto para isto temos que especificar condições de contorno para cada um dos problemas no ponto  $x = c$ , já que este é agora uma fronteira para cada um dos subdomínios. Assim, aqui teremos dois sistemas de equações adicionais, um para  $U_1$  e outro para  $U_2$ , como seguem.

$$\left\{ \begin{array}{l} -k_1 \frac{d^2 U_1}{dx^2} = f \quad \text{em } (0, c) \\ U_1(0) = 0 \\ \text{e uma condição de contorno em } x = c \end{array} \right. \quad (4.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -k_2 \frac{d^2 U_2}{dx^2} = f \quad \text{em } (c, L) \\ U_2(L) = 0 \\ \text{e uma condição de contorno em } x = c \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Para que a solução particionada, denotada por  $(U_1, U_2)$  onde  $U_1 = U|_{\Omega_1}$  e  $U_2 = U|_{\Omega_2}$ , coincida com a solução exata, é necessário e suficiente que as condições de contorno a serem definidas nos problemas (4.2) e (4.3) sejam compatíveis com as seguintes condições de continuidade

$$U_1(c) = U_2(c) = u_c, \quad (4.4)$$

$$-k_1 \frac{dU_1}{dx}(c) = -k_2 \frac{dU_2}{dx}(c) = q_c. \quad (4.5)$$

Vamos representar a solução e o fluxo na interface de acoplamento pelas incógnitas

$u_c$  e  $q_c$ , respectivamente, que serão usadas na escrita do problema de acoplamento como se explica a seguir.

O que faremos a seguir então é resolver de forma separada os problemas (4.2) e (4.3). Note que as condições de contorno do problema original estão sobre as fronteiras  $x = 0$  e  $x = L$ , dessa forma as condições de fronteira no ponto  $x = c$  em ambos subdomínios faltam ser definidas. Esta escolha pode ser feita arbitrariamente, ou seja, para este caso temos quatro combinações diferentes alternando entre condições de Dirichlet e Neumann em  $x = c$  para cada subdomínio. A seguir iremos expor cada caso.

#### 4.1.1 Caso 1: Dirichlet-Dirichlet

Focamos primeiro em  $\Omega_1 = (0, c)$ , e vamos resolver a equação original com condição de contorno para  $x = 0$  dada por (4.1.1)<sub>3</sub>, e falta-nos a condição para  $x = c$ . Vamos decidir neste primeiro caso que em  $\Omega_1$  para  $x = c$  haverá uma condição de contorno de Dirichlet. Desta forma, seja  $\sigma_\varphi$  a solução do problema, vamos impor que no ponto  $x = c$ ,  $\sigma_\varphi$  tem o valor  $\varphi$ . Portanto a solução  $\sigma_\varphi$  de

$$\begin{cases} -k_1 \frac{d^2 \sigma_\varphi}{dx^2} = f & \text{em } (0, c) \\ \sigma_\varphi(0) = 0 \\ \sigma_\varphi(c) = \varphi \end{cases} \quad (4.6)$$

depende de  $\varphi$ , como implica o subscrito. Vamos denotar por  $\mathcal{Q}_c^1$  o fluxo em  $x = c$  correspondente à solução  $\sigma_\varphi$ , isto é,

$$\mathcal{Q}_c^1(\varphi) = -k_1 \frac{d\sigma_\varphi}{dx}(c) \quad (4.7)$$

ou seja, o operador aplicado no valor em que corresponde ao dado no ponto  $x = c$  nos fornece o fluxo nesse ponto. Em particular, se esse valor  $\phi$  é a solução do problema original no ponto  $c$ , então o fluxo encontrado deverá ser o que corresponde

ao problema original, e para que  $(q_c, u_c)$  satisfaça (4.5), deve satisfazer a equação

$$-q_c + \mathcal{Q}_c^1(u_c) = 0. \quad (4.8)$$

Vamos agora focar em  $\Omega_2 = (c, L)$ , e iremos resolver a equação original com condição de contorno em  $x = L$  dada por (4.1.1)<sub>4</sub>, e vamos decidir que para  $x = c$  em  $\Omega_2$  também há uma condição de contorno de Dirichlet. E procedendo analogamente ao feito anteriormente, vamos impor que a solução  $\psi_\mu$  para o problema

$$\begin{cases} -k_2 \frac{d^2 \psi_\mu}{dx^2} = f & \text{em } (c, L) \\ \psi_\mu(c) = \mu \\ \psi_\mu(L) = 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

tem o valor  $\mu$  no ponto  $x = c$ . Então, o fluxo em  $x = c$  correspondente à solução  $\psi_\mu$ , é dado por,

$$\mathcal{Q}_c^2(\mu) = -k_2 \frac{d\psi_\mu}{dx}(c) \quad (4.10)$$

Com esta notação, claramente as variáveis de interface  $(q_c, u_c)$  que são solução do problema (4.1.1), satisfazem

$$-q_c + \mathcal{Q}_c^2(u_c) = 0. \quad (4.11)$$

Para este caso simples  $\mathcal{Q}_c^1$  e  $\mathcal{Q}_c^2$  podem ser calculados explicitamente, basta resolver as equações diferenciais (4.6) e (4.9) analiticamente. Assim, podemos caracterizar os operadores (4.7) e (4.10) como segue pelas funções

$$\mathcal{Q}_c^1(\varphi) = -\frac{k_1}{c}\varphi + \frac{cf}{2}, \quad (4.12)$$

$$\mathcal{Q}_c^2(\mu) = \frac{k_2}{L-c}\mu - \frac{f(L-c)}{2}. \quad (4.13)$$

De (4.8) e (4.11), chegamos a um sistema de duas equações lineares nas incógnitas  $q_c$  e  $u_c$

$$\begin{aligned} r_1(q_c, u_c) &:= -q_c + \mathcal{Q}_c^1(u_c) = 0, \\ r_2(q_c, u_c) &:= -q_c + \mathcal{Q}_c^2(u_c) = 0. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Substituindo (4.12) e (4.13) em (4.14) temos um sistema de equações algébrico dado por

$$\begin{pmatrix} -1 & -\frac{k_1}{c} \\ -1 & \frac{k_2}{(L-c)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_c \\ u_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{cf}{2} \\ \frac{f(L-c)}{2} \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

Este sistema denota-se brevemente por  $A_{DD}x = b_{DD}$ .

#### 4.1.2 Caso 2: Dirichlet-Neumann

Vamos agora continuar aplicando para  $\Omega_1$  em  $x = c$  uma condição de contorno de Dirichlet. Como já vimos anteriormente, seja  $\sigma_\varphi$  solução para

$$\begin{cases} -k_1 \frac{d^2 \sigma_\varphi}{dx^2} = f & \text{em } (0, c) \\ \sigma_\varphi(0) = 0 \\ \sigma_\varphi(c) = \varphi \end{cases} \tag{4.16}$$

o fluxo em  $x = c$  denotado por  $Q_c^1$  é dado por

$$\mathcal{Q}_c^1(\varphi) = -k_1 \frac{d\sigma_\varphi}{dx}(c) \tag{4.17}$$

Claramente  $(q_c, u_c)$  satisfaz a equação

$$-q_c + \mathcal{Q}_c^1(u_c) = 0 \tag{4.18}$$

Agora, para  $\Omega_2$  vamos impor uma condição de Neumann, então seja a solução  $\psi_\mu$  para

$$\begin{cases} -k_2 \frac{d^2 \psi_\mu}{dx^2} = f & \text{em } (c, L) \\ -k_2 \frac{d\psi_\mu}{dx}(c) = \mu \\ \psi_\mu(L) = 0 \end{cases} \tag{4.19}$$

denotamos por  $\mathcal{U}_c^2$  o valor de  $\psi_\mu$  em  $x = c$ , ou seja,

$$\mathcal{U}_c^2(\mu) = \psi_\mu(c) \quad (4.20)$$

onde  $\mu$  representa o valor do fluxo no ponto  $x = c$ . Portanto, sendo este valor correspondente ao valor do fluxo no problema original, esse operador retorna a solução do problema original, então temos a equação

$$-\mathcal{U}_c^2(q_c) + u_c = 0 \quad (4.21)$$

Como já citado anteriormente, para este caso simples  $\mathcal{Q}_c^1$  e  $\mathcal{U}_c^2$  podem ser calculados explicitamente, e são dados respectivamente pelas funções

$$\mathcal{Q}_c^1(\varphi) = -\frac{k_1}{c}\varphi + \frac{cf}{2}, \quad (4.22)$$

$$\mathcal{U}_c^2(\mu) = \frac{(L-c)}{k_2}\mu + \frac{f(L-c)^2}{2k_2}. \quad (4.23)$$

De (4.18) e (4.21), chegamos ao sistema de duas equações lineares nas incógnitas  $q_c$  e  $u_c$

$$\begin{aligned} r_1(q_c, u_c) &:= -q_c + \mathcal{Q}_c^1(u_c) = 0, \\ r_2(q_c, u_c) &:= -\mathcal{U}_c^2(q_c) + u_c = 0. \end{aligned} \quad (4.24)$$

ou ainda, em formato matricial

$$\begin{pmatrix} -1 & -\frac{k_1}{c} \\ -\frac{(L-c)}{k_2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_c \\ u_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{cf}{2} \\ \frac{f(L-c)^2}{2k_2} \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

Este sistema denota-se brevemente por  $A_{DN}x = b_{DN}$ .

### 4.1.3 Caso 3: Neumann-Neumann

Para este terceiro caso, vamos impor para  $\Omega_1$  uma condição de Neumann no ponto  $x = c$ . Seja então a solução  $\sigma_\varphi$  do seguinte problema

$$\begin{cases} -k_1 \frac{d^2 \sigma_\varphi}{dx^2} = f & \text{em } (0, c) \\ \sigma_\varphi(0) = 0 \\ -k_1 \frac{d\sigma_\varphi}{dx}(c) = \varphi \end{cases} \quad (4.26)$$

denotamos por  $\mathcal{U}_c^1$  o valor de  $\sigma_\varphi$  em  $x = c$ , ou seja,

$$\mathcal{U}_c^1(\varphi) = \sigma_\varphi(c) \quad (4.27)$$

e claramente a solução do problema (4.1.1) em termos das variáveis  $(q_c, u_c)$  satisfaz a equação

$$-\mathcal{U}_c^1(q_c) + u_c = 0. \quad (4.28)$$

Para  $\Omega_2$  aplicaremos também uma condição de Neumann. Seja  $\psi_\mu$  solução para

$$\begin{cases} -k_2 \frac{d^2 \psi_\mu}{dx^2} = f & \text{em } (c, L) \\ -k_2 \frac{d\psi_\mu}{dx}(c) = \mu \\ \psi_\mu(L) = 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

denotamos por  $\mathcal{U}_c^2$  o valor de  $\psi_\mu$  em  $x = c$ , ou seja,

$$\mathcal{U}_c^2(\mu) = \psi_\mu(c) \quad (4.30)$$

então,  $(u_c, q_c)$  satisfaz a equação

$$-\mathcal{U}_c^2(q_c) + u_c = 0, \quad (4.31)$$

onde os operadores  $\mathcal{U}_c^1(\varphi)$  e  $\mathcal{U}_c^2(\mu)$  são dados respectivamente por

$$\mathcal{U}_c^1(\varphi) = -\frac{c}{k_1}\varphi + \frac{fc^2}{2k_1}, \quad (4.32)$$

$$\mathcal{U}_c^2(\mu) = \frac{(L-c)}{k_2}\mu + \frac{f(L-c)^2}{2k_2}. \quad (4.33)$$

De (4.28) e (4.31), chegamos ao sistema de duas equações lineares nas incógnitas  $q_c$  e  $u_c$

$$\begin{aligned} r_1(q_c, u_c) &:= -\mathcal{U}_c^1(q_c) + u_c = 0, \\ r_2(q_c, u_c) &:= -\mathcal{U}_c^2(q_c) + u_c = 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

então obtemos o sistema

$$\begin{pmatrix} \frac{c}{k_1} & 1 \\ -\frac{(L-c)}{k_2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_c \\ u_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{fc^2}{2k_1} \\ \frac{f(L-c)^2}{2k_2} \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

Este sistema denota-se brevemente por  $A_{NN}x = b_{NN}$ .

#### 4.1.4 Caso 4: Neumann-Dirichlet

Finalmente, neste último caso, vamos aplicar para  $\Omega_1$  uma condição de contorno de Neumann.

$$\begin{cases} -k_1 \frac{d^2\sigma_\varphi}{dx^2} = f & \text{em } (0, c) \\ \sigma_\varphi(0) = 0 \\ -k_1 \frac{d\sigma_\varphi}{dx}(c) = \varphi \end{cases} \quad (4.36)$$

onde,  $\mathcal{U}_c^1$  é o valor de  $\sigma_\varphi$  em  $x = c$ , ou seja,

$$\mathcal{U}_c^1(\varphi) = \sigma_\varphi(c) \quad (4.37)$$

de modo que  $(q_c, u_c)$  satisfaz a equação

$$\mathcal{U}_c^1(q_c) - u_c = 0 \quad (4.38)$$

E para  $\Omega_2$  uma condição de Dirichlet.

$$\begin{cases} -k_2 \frac{d^2 \psi_\mu}{dx^2} = f & \text{em } (c, L) \\ \psi_\mu(c) = \mu \\ \psi_\mu(L) = 0 \end{cases} \quad (4.39)$$

onde  $\mathcal{Q}_c^2$  é o fluxo em  $x = c$

$$\mathcal{Q}_c^2(\mu) = -k_2 \frac{d\psi_\mu}{dx}(c) \quad (4.40)$$

e  $(q_c, u_c)$  obviamente satisfaz

$$-q_c + \mathcal{Q}_c^2(u_c) = 0 \quad (4.41)$$

Temos portanto  $\mathcal{U}_c^1$  e  $\mathcal{Q}_c^2$  dados respectivamente pelas funções

$$\mathcal{U}_c^1(\varphi) = -\frac{c}{k_1}\varphi + \frac{f c^2}{2k_1}, \quad (4.42)$$

$$\mathcal{Q}_c^2(\mu) = \frac{k_2}{L-c}\mu - \frac{f(L-c)}{2}. \quad (4.43)$$

De (4.38) e (4.41), chegamos ao sistema de duas equações nas incógnitas  $q_c$  e  $u_c$

$$\begin{aligned} r_1(q_c, u_c) &:= -\mathcal{U}_c^1(q_c) + u_c = 0, \\ r_2(q_c, u_c) &:= -q_c + \mathcal{Q}_c^2(u_c) = 0 \end{aligned} \quad (4.44)$$

logo o sistema é dado por

$$\begin{pmatrix} \frac{c}{k_1} & 1 \\ -1 & \frac{k_2}{(L-c)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_c \\ u_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{f c^2}{2k_1} \\ \frac{f(L-c)}{2} \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

Este sistema denota-se brevemente por  $A_{ND}x = b_{ND}$ .

#### 4.1.5 Discussão sobre a escolha das condições de contorno

Nosso objetivo neste capítulo tem sido mostrar, com este exemplo simples unidimensional, a aplicação do método de decomposição de domínio. Assim, até aqui temos reescrito o problema original (4.1.1) em dois subproblemas (4.2) e (4.3). Ao reescrevermos isto tivemos que definir como o ponto  $x = c$  se comporta para cada um dos subdomínios em termos do tipo de condição de contorno que ele vai fornecer, Dirichlet ou Neumann para  $(0, c)$  e para  $(c, L)$ . Com isto, e empregando as incógnitas  $(u_c, q_c)$  chegamos a quatro formas alternativas, porém completamente equivalentes, de formular o problema de acoplamento.

Em particular, neste problema simples a solução analítica pôde ser calculada e com isto foi possível especificar a forma dos operadores envolvidos e com isto a forma da matriz  $A_{XY}$  e do vetor  $b_{XY}$ ,  $X, Y = D, N$  que definem o problema de acoplamento em termos de incógnitas de interface. Finalmente, para resolver o problema resta obtermos  $(u_c, q_c)$  seja por um método direto ou iterativo. No entanto, em problemas mais complexos onde a solução analítica não está disponível não é possível caracterizar analiticamente os operadores envolvidos como feito acima, e portanto não podemos aplicar métodos diretos dado que não conhecemos as entradas da matriz  $A_{XY}$  nem do vetor  $b_{XY}$ ,  $X, Y = D, N$ . Aqui é onde introduzimos a necessidade de resolver qualquer um destes sistemas empregando métodos iterativos cuja convergência é conduzida por meio da avaliação do resíduo, algo que sempre pode ser feito. Isto será discutido com mais detalhe na Seção 4.3.

Por último, veja que temos obtido quatro formas alternativas de resolver o mesmo problema. Para discernir qual a melhor opção devemos recorrer a eventuais aspectos numéricos associados aos mesmos. Dado que o intuito é empregar métodos iterativos no processo de resolução, o desempenho de cada caso, isto é a convergência, depende do número de condição da matriz do sistema. Portanto, estudaremos o número de condição de cada uma das matrizes  $A_{XY}$ ,  $X, Y = D, N$  em função dos parâmetros físicos envolvidos no problema.

## 4.2 Número de condição do problema de interface

Ao resolver um sistema

$$AX = b \quad (4.46)$$

usando métodos iterativos podemos ter problemas de convergência, e isto está relacionado com o número de condição da matriz  $A$  como definido a seguir.

Seja  $A$  uma matriz quadrada não singular. O número de condição de  $A$  relativo à norma natural  $\|\cdot\|$  é dado por

$$K(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (4.47)$$

A matriz  $A$  é dita bem condicionada se  $K(A)$  é pequeno, e será mal condicionada se  $K(A)$  é grande, no segundo caso isto implica que pequenas perturbações relativas ao vetor  $b$  produzirão grandes perturbações no vetor solução  $x$ . Podemos dizer ainda, que este comportamento do  $K(A)$  nos dirá a respeito da convergência de um método iterativo na resolução do sistema de equações. Para os casos apresentados na seção anterior, onde conhecemos as entradas da matriz  $A$ , o cálculo do número de condição em cada caso resulta no seguinte

**Caso 1** : Dirichlet-Dirichlet (ver subseção (4.1.1))

$$K(A_{DD}) = \sqrt{2 + \left(\frac{k_1}{c}\right)^2 + \left(\frac{k_2}{L-c}\right)^2} \cdot \sqrt{\left(\frac{k_2c}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2 + 2 \left(\frac{(L-c)c}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2 + \left(\frac{k_1(L-c)}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2} \quad (4.48)$$

**Caso 2** : Dirichlet-Neumann (ver subseção (4.1.2))

$$K(A_{DN}) = \sqrt{2 + \left(\frac{c-L}{k_2}\right)^2 + \left(\frac{k_1}{c}\right)^2} \cdot \sqrt{2 \left(\frac{k_2c}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2 + \left(\frac{(L-c)c}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2 + \left(\frac{k_1k_2}{k_2c + k_1L - k_1c}\right)^2} \quad (4.49)$$

**Caso 3** : Neumann-Neumann (ver subseção (4.1.3))

$$K(A_{NN}) = \sqrt{2 + \left(\frac{c}{k_1}\right)^2 + \left(\frac{c-L}{k_2}\right)^2}.$$

$$\sqrt{2 \left(\frac{k_1 k_2}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2 + \left(\frac{k_1(L-c)}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2 + \left(\frac{k_2 c}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2} \quad (4.50)$$

**Caso 4** : Neumann-Dirichlet (ver subseção (4.1.4))

$$K(A_{ND}) = \sqrt{2 + \left(\frac{c}{k_1}\right)^2 + \left(\frac{k_2}{L-c}\right)^2}.$$

$$\sqrt{\left(\frac{k_1 k_2}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2 + 2 \left(\frac{k_1(L-c)}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2 + \left(\frac{(L-c)c}{k_2 c + k_1 L - k_1 c}\right)^2} \quad (4.51)$$

A partir dos números de condição, graficamos em cada caso, a relação entre o número de condição em função dos parâmetros não dimensionais  $\frac{L-c}{c}$  e  $\frac{k_1}{k_2}$ . Note que  $L$  é o tamanho do intervalo e é um parâmetro fixo, entretanto  $c$  é um ponto arbitrário que é escolhido para particionar o domínio (este parâmetro pode estar fixo dependendo se particionarmos exatamente onde o valor de  $k$  muda, como neste caso), e ainda  $k_1$  e  $k_2$  os parâmetros de difusão são valores que dependem do problema em questão. Logo, estes parâmetros não dimensionais servem para estudar o comportamento dos diferentes sistemas de equações, através do número de condição, frente às diferentes combinações possíveis dos mesmos.

Na Figura 4.3 expomos os gráficos com comportamento do número de condição em cada subproblema em função de  $\frac{L-c}{c}$ . Para cada caso temos a situação em que  $\frac{L-c}{c}$  tende a zero, ou seja, para  $\text{med}(\Omega_1) \gg \text{med}(\Omega_2)$  e em que tende a infinito, ou seja,  $\text{med}(\Omega_1) \ll \text{med}(\Omega_2)$ .

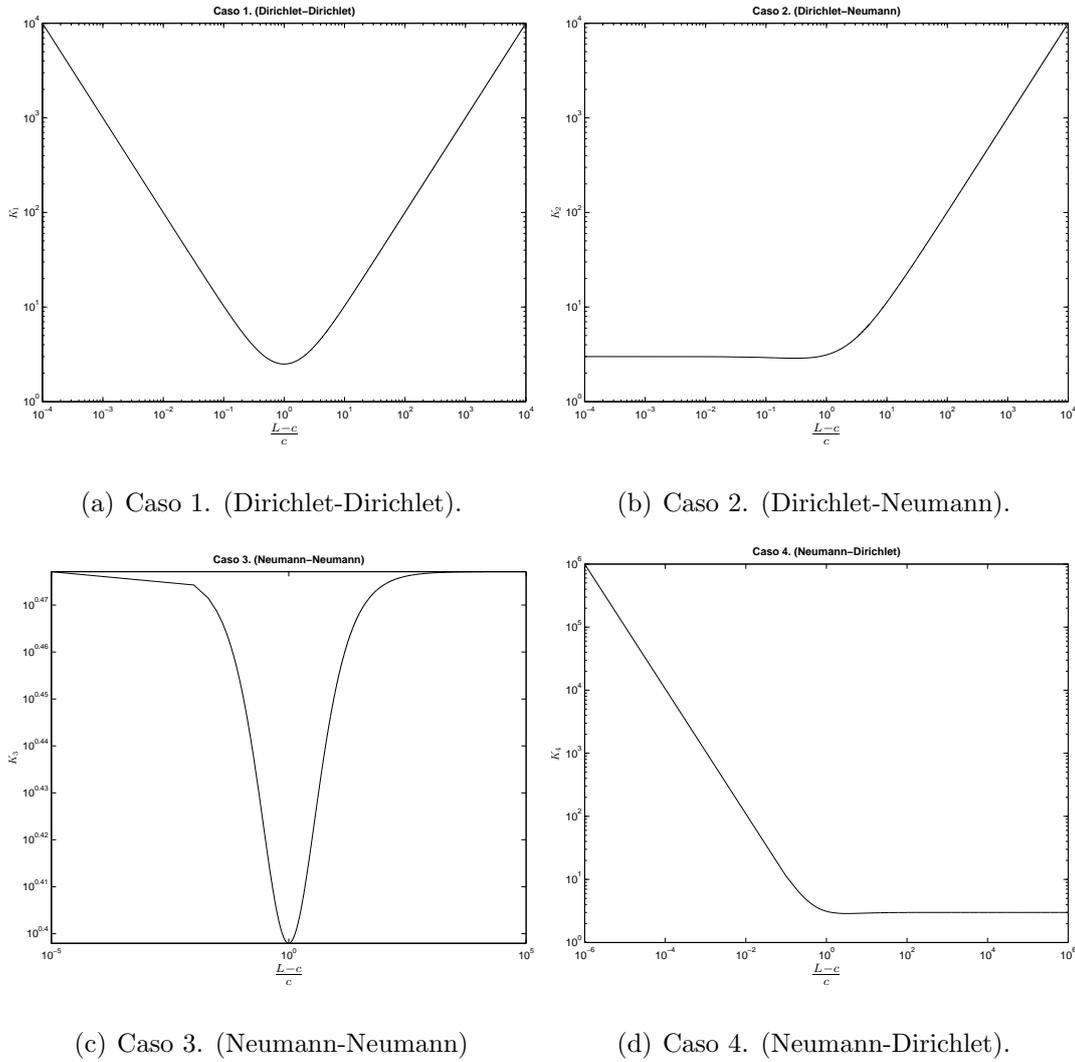


Figura 4.3: Número de condição em função da relação  $\frac{L-c}{c}$  para cada caso.

Assim sendo, há situações em que dependendo do quanto um intervalo é maior que o outro, o número de condição tende ao infinito, o que do ponto de vista computacional não é interessante já que significaria que teríamos problemas na resolução do problema empregando um método iterativo, ou seja, teríamos uma convergência lenta nos casos de alto número de condição. A Tabela 4.1 resume o que ocorre com o número de condição nos casos limites em cada situação.

Note que no caso 3 (Neumann-Neumann), o número de condição é menos sensível em relação ao tamanho dos subdomínios  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ , ou seja, se mantém limitado para toda a faixa de valores de  $\frac{L-c}{c}$ . Por outro lado, há situações nas quais o número de condição tende ao infinito dependendo do tamanho de  $\Omega_1$  ou

Alternativa	$K(A)$ para $\frac{L-c}{c} \rightarrow 0$	$K(A)$ para $\frac{L-c}{c} \rightarrow \infty$
Caso 1: $A_{DD}$	$\infty$	$\infty$
Caso 2: $A_{DN}$	Limitado	$\infty$
Caso 3: $A_{NN}$	Limitado	Limitado
Caso 4: $A_{ND}$	$\infty$	Limitado

Tabela 4.1: Comportamento do número de condição em casos extremos de  $\frac{L-c}{c}$ .

$\Omega_2$ .

Por sua vez, a situação da Figura 4.4 se refere a quando  $\frac{k_1}{k_2}$  tende a zero, ou seja, quando se tem  $k_1 \ll k_2$  e ainda quando  $\frac{k_1}{k_2}$  tende à infinito, ou seja, quando se tem  $k_1 \gg k_2$ .

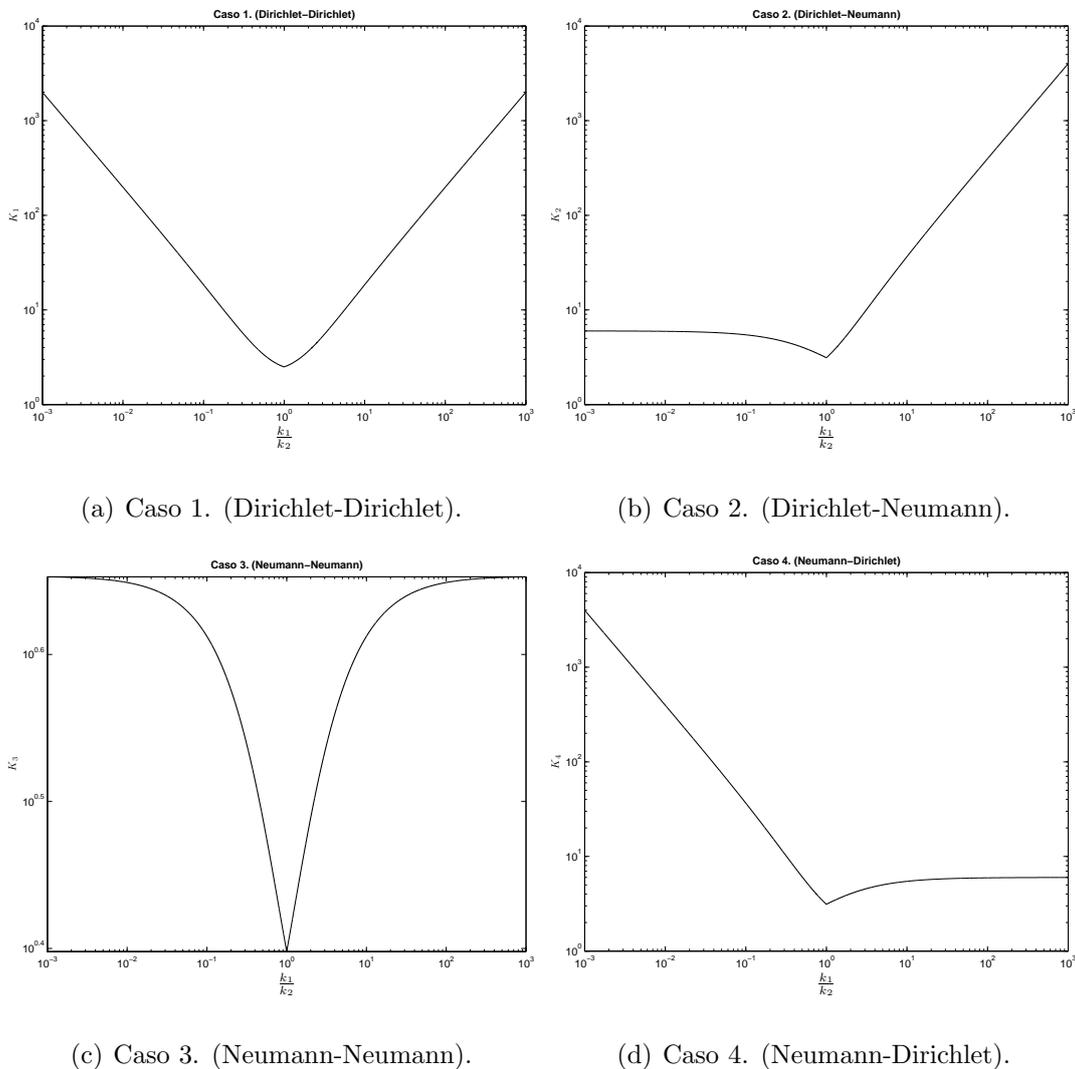


Figura 4.4: Número de condição em função da relação  $\frac{k_1}{k_2}$  para cada caso.

Assim como nos gráficos apresentados anteriormente, aqui também existem

situações em que o número de condição se mantém limitado e situações nas quais tende a infinito. Os resultados estão resumidos na tabela 4.2

<i>Alternativa</i>	$K(A)$ para $\frac{k_1}{k_2} \rightarrow 0$	$K(A)$ para $\frac{k_1}{k_2} \rightarrow \infty$
Caso 1: $A_{DD}$	$\infty$	$\infty$
Caso 2: $A_{DN}$	Limitado	$\infty$
Caso 3: $A_{NN}$	Limitado	Limitado
Caso 4: $A_{ND}$	$\infty$	Limitado

Tabela 4.2: Interpretações sobre os gráficos em função de  $\frac{k_1}{k_2}$ .

Aqui também, no caso 3 (Neumann-Neumann), o número de condição se mantém limitado para toda a faixa de valores de  $\frac{k_1}{k_2}$ . Vê-se então que para este problema, onde se é possível escolher quais condições de contorno usar, a opção em que o comprimento do intervalo e os valores dos parâmetros de difusão não afetam o número de condição é dada pelo caso 3, e seria a mais interessante de forma a termos uma formulação numérica mais robusta.

### 4.3 Acoplamento em um problema heterogêneo 1D-3D

Nesta seção aplicaremos as idéias introduzidas nas seções anteriores ao problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Para tal, considere o esquema da Figura 4.1. Vamos assumir que por alguma razão referente à modelagem do problema, os fenômenos em  $\Omega_1 = (0, c)$  devem ser descritos no espaço tridimensional, para o qual recorreremos a um modelo 3D, como mostra a Figura 2.1. Note que a estratégia de decomposição de domínios apresentada na Seção 4.1, pode ser facilmente aplicada a um modelo dimensionalmente heterogêneo, de fato, assim como na Seção 4.1 o domínio 1D foi dividido em dois subdomínios, agora o domínio dimensionalmente heterogêneo é visto como dois subdomínios 1D e 3D, como se vê na Figura 4.5.

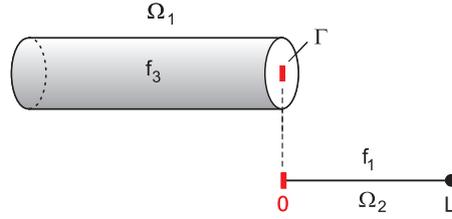


Figura 4.5: Partição em subdomínios 1D e 3D

Vimos nos Capítulo 2 que no problema acoplado as condições de acoplamento são naturalmente obtidas através da formulação variacional do problema, e estas não são vistas como condições de contorno. Neste capítulo, vimos que podemos separar, em algum sentido, ambos os problemas, de maneira a dar uma outra interpretação às condições de acoplamento que passam agora a ser condições de contorno sobre cada um dos problemas.

Resulta mais que evidente que os modelos acoplados podem ser tratados como dois problemas separados, dentro do contexto da metodologia apresentada de decomposição de domínio, já que a partição do domínio original é feita naturalmente no ponto onde os modelos heterogêneos estão acoplados. Portanto, vamos fazer uso dessa metodologia pra resolver o problema (2.35), de onde obtemos as seguintes equações

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{d^2 u_1}{dx^2} + u_1 = f_1 & \text{em } (0, L), \\ \frac{du_1}{dx}(L) = 0 & \text{em } x = L, \\ -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma \\ \lambda = \frac{du_1}{dx}(0) & \text{em } x = 0 \\ u_1(0) = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma, & \text{em } x = 0 \\ -\frac{du_1}{dx}(0) = -\nabla u_3 \cdot \mathbf{n} & \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right.$$

Para aplicar a estratégia proposta, o procedimento é equivalente ao utilizado no problema 1D-1D, da Seção 4.1. Note que a metodologia apresentada pode ser

resumida em quatro passos. Começamos definindo  $q_c$  e  $u_c$  o fluxo e a solução, respectivamente, na interface de acoplamento como as variáveis para as quais se estabelece alguma equação de continuidade (Passo 1). Escolhemos condições de contorno sobre  $\Gamma$  para cada subdomínio (Passo 2). Configuramos o sistema de equações para  $u_c$  e  $q_c$  definindo os operadores correspondentes a cada subdomínio (Passo 3). E por último, resolvemos iterativamente o sistema correspondente para encontrar as variáveis de interface (Passo 4).

Então, analogamente ao feito anteriormente vamos dividir o problema em dois subdomínios  $\Omega_1 = \Omega$  e  $\Omega_2 = (0, L)$ . De modo que para  $\Omega_1$  correspondem as seguintes equações

$$\begin{cases} -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma \\ \text{e uma condição de contorno sobre } \Gamma. \end{cases} \quad (4.52)$$

Se escolhermos aplicar uma condição de contorno de Neumann sobre  $\Gamma$  denotada por  $\gamma$ , isto é, seja  $u_3$  solução para (4.52), temos

$$\begin{cases} -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = \gamma & \text{sobre } \Gamma \end{cases} \quad (4.53)$$

então, para qualquer  $\gamma \in \mathbb{R}$  o operador associado ao modelo 3D é dado por

$$\mathcal{U}^3(\gamma) = \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma, \quad (4.54)$$

de modo que deve satisfazer a equação de interface

$$-\mathcal{U}^3(q_c) + u_c = 0. \quad (4.55)$$

Por outro lado, aplicando uma condição de contorno de “Dirichlet” dada por  $\mu$ , temos que

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\Delta u_3 + u_3 = f_3 & \text{em } \Omega, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \setminus \Gamma, \\ \frac{1}{A} \int_{\Gamma} u_3 d\Gamma = \mu & \text{sobre } \Gamma, \\ \nabla u_3 \cdot \mathbf{n} = \theta & \text{sobre } \Gamma \end{array} \right. \quad (4.56)$$

onde

$$\mathcal{Q}^3(\mu) = \theta \quad (4.57)$$

é o operador para o fluxo correspondente a solução e claramente deve satisfazer a equação de interface

$$-q_c + \mathcal{Q}^3(u_c) = 0. \quad (4.58)$$

Observe que antes da (4.56) se tem colocado “Dirichlet” embora o problema (4.56) não seja um problema de Dirichlet em relação à informação de contorno imposta sobre  $\Gamma$ . Neste caso, a informação é de Dirichlet no sentido dado pelo modelo 1D, isto é, no sentido de impor um valor real  $\mu$  sobre  $\Gamma$  que corresponda ao valor médio da solução nessa interface.

Para  $\Omega_2$ , as equações são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{d^2 u_1}{dx^2} + u_1 = f_1 & \text{em } (0, L), \\ \frac{du_1}{dx}(L) = 0 & \text{em } x = L, \\ \text{e uma condição de contorno em } x = 0. \end{array} \right. \quad (4.59)$$

Os operadores para o  $\Omega_2$  são dados como anteriormente (veja Seção 4.1), isto é, se impusermos o valor  $\varphi$  como condição de Dirichlet em  $x = 0$ , o fluxo que corresponde à solução  $u_1$  do problema (4.59) é dado como segue

$$\mathcal{Q}^1(\varphi) = -\frac{du_1}{dx}(0) \quad (4.60)$$

ou, por outro lado, impondo uma condição de contorno em  $x = 0$  de tipo Neumann dada por  $\mu$ , denotamos por  $\mathcal{U}^1$  o valor de  $u_1$  em  $x = 0$ , ou seja,

$$\mathcal{U}^1(\mu) = u_1(0). \quad (4.61)$$

Com a condição de contorno escolhida, fazemos uso dos operadores para definir o sistema de equações correspondente ao Passo 3, de acordo com a metodologia proposta. Obviamente, com dois subdomínios obtemos um sistema com duas equações, como na Seção 4.1. A única diferença com o feito na Seção 4.1, onde obtemos os sistemas de equações (4.15), (4.25), (4.35) e (4.45), é que o operador para  $\Omega_1$  envolve a solução de um problema em 3D, e encontrar a forma analítica dos operadores  $\mathcal{Q}^3$  ou  $\mathcal{U}^3$  não é possível no caso geral. Como encontrar a forma deste operador envolve a resolução de um problema variacional, vamos fazer uso do método de elementos finitos para aproximar a solução e como dito anteriormente, aqui nota-se a necessidade do uso de um método iterativo para resolver o sistema de equações, já que do fato de não ter a forma explícita do operador não podemos calcular a priori a matriz  $A$  e nem o vetor  $b$ .

No Capítulo 5, vamos apresentar alguns métodos iterativos que podem ser usados para resolver o sistema obtido após escolher uma condição de contorno para cada subproblema e montar o sistema de equações correspondente, o que será feito no capítulo seguinte.

# Capítulo 5

## Estratégias de resolução iterativa para o problema de interface

Neste capítulo vamos apresentar alguns métodos iterativos com o intuito de resolver o sistema linear resultante após escolha de condições de contorno para o problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos, conforme discutido no Capítulo 4.

### 5.1 Montagem explícita do sistema de equações

No capítulo anterior dissemos que do fato de não termos a forma explícita do operador associado ao modelo 3D não podemos calcular a priori a matriz  $A$  e nem o vetor  $b$  de forma numérica. Entretanto, existe uma possibilidade de se construir a matriz  $A$  e o vetor  $b$  de forma numérica. Para tal, considere o caso 1 da subseção 4.1.1, no qual obtivemos o sistema de equações (4.15), isto é

$$\begin{pmatrix} -1 & A_1 \\ -1 & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_c \\ u_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

onde  $A_1 u_c + b_1 = \mathcal{Q}_c^1$ , dada a equação

$$q_c - \mathcal{Q}_c^1(u_c) = 0 \quad (5.2)$$

e  $A_2 u_c + b_2 = \mathcal{Q}_c^2$ , de

$$q_c - \mathcal{Q}_c^2(u_c) = 0. \quad (5.3)$$

Se impusermos  $u_c = 0$ , obtemos

$$\mathcal{Q}_c^1(0) = b_1 \quad (5.4)$$

de fato, neste caso específico em que já conhecemos a forma explícita do operador, note que

$$\mathcal{Q}_c^1(u_c) = -\frac{k_1}{c}u_c + \frac{cf}{2}, \quad (5.5)$$

$$\mathcal{Q}_c^1(0) = \frac{cf}{2}, \quad (5.6)$$

que é exatamente o fator que corresponde a  $b_1$  no sistema. Procedendo de forma análoga, encontramos o valor de  $b_2$ , fazendo  $u_c = 0$  e substituindo no operador  $\mathcal{Q}_c^2$  dado como segue

$$\mathcal{Q}_c^2(u_c) = \frac{k_2}{L-c}u_c - \frac{f(L-c)}{2}, \quad (5.7)$$

$$\mathcal{Q}_c^2(0) = -\frac{f(L-c)}{2}. \quad (5.8)$$

Assim, construímos o vetor  $b$  correspondente ao sistema. Agora, fazendo  $f = 0$  e  $u_c = 1$ , temos

$$\mathcal{Q}_c^1(1) = -\frac{k_1}{c} \quad (5.9)$$

analogamente

$$\mathcal{Q}_c^2(1) = \frac{k_2}{L-c}, \quad (5.10)$$

obtendo assim  $A_1$  e  $A_2$  correspondentes ao sistema (5.1). Desta forma temos explicitado os coeficientes da matriz  $A$  e do vetor  $b$  e portanto podemos aplicar qualquer método de resolução para o sistema correspondente, direto ou iterativo. Isto poderia ser aplicado também para o nosso caso, onde buscamos resolver um sistema linear resultante da aplicação do método de decomposição de domínio para mod-

elos dimensionalmente heterogêneos. Note que no caso geral devemos resolver um problema aproximado para determinar cada coeficiente do sistema de equações. No caso de dois subdomínios (sejam eles dimensionalmente homogêneos ou heterogêneos), isto implica resolvermos de maneira aproximada quatro problemas para montar a matriz  $A$  e o vetor  $b$ . Entretanto, a medida que aumenta a complexidade do problema, o número de equações também aumenta, e com isto aumenta o número de problemas que devemos resolver para montarmos o sistema de equações de forma explícita. Por esse motivo, vamos recorrer aos métodos iterativos livres de matriz que, no balanço, possam oferecer uma solução mais barata.

## 5.2 Métodos iterativos livres de matriz

Em função do visto na seção anterior e do discutido ao longo do Capítulo 4, vamos continuar admitindo que no problema de interface com o qual estamos lidando não conhecemos a matriz  $A$  nem o vetor  $b$ . Deste modo, devemos recorrer a uma estratégia na qual não se faça uso destes elementos explicitamente. Assim sendo, neste capítulo estudaremos métodos numéricos iterativos para resolver sistemas de equações, focando em sistemas cuja forma é do tipo da equação (5.1) (ou equivalentes de acordo com as condições de contorno escolhidas), porém onde não se conhecem  $A$  nem  $b$ . Em particular, colocaremos estes métodos de forma que somente seja preciso avaliar o resíduo nas equações, coisa que sempre é possível de ser feita. De fato, sempre podemos calcular, por exemplo, a seguinte quantidade

$$r_k = r(x_k) = b - Ax_k = q_c^k - \mathcal{Q}_c^1(u_c^k) \quad (5.11)$$

a partir da resolução, no nosso caso de forma aproximada, da equação (5.2), que corresponde à primeira linha da (5.1).

Em outras palavras, esta abordagem consiste em considerar métodos iterativos “livres de matriz” no sentido que não é necessário conhecer a matriz para ser aplicada em um dado vetor, mas em lugar disso precisamos avaliar o resíduo nessa

dada direção. Sendo  $v_k$  uma direção dada, isto consiste em obter  $Av_k$  a partir de

$$Av_k = r(x_0 + v_k) - r(x_0) \quad (5.12)$$

onde  $v_0$  é um vetor fixo.

### 5.2.1 Métodos iterativos clássicos

Determinar a solução de um sistema linear por métodos iterativos, implica em transformar o sistema dado em um outro sistema onde possa ser definido um processo iterativo e mais, que a solução obtida para o sistema transformado seja também solução do sistema original, isto é, os sistemas lineares devem ser equivalentes.

Como já dito anteriormente, tais métodos são menos custosos que os exatos, por exemplo, quando a matriz dos coeficientes é uma matriz esparsa eles ainda são mais econômicos no sentido que utilizam menos memória do computador. Além disso, possuem a vantagem de se auto corrigir se um erro é cometido.

Resolver um sistema linear do tipo

$$Ax = b \quad (5.13)$$

por um método iterativo implica em construir uma sequência de aproximantes da solução, cada uma das quais é obtida a partir das anteriores pela repetição do mesmo tipo de processo. Um método iterativo é estacionário se cada aproximante é obtido do anterior sempre pelo mesmo processo, ou seja, a solução do sistema é obtida tomando o limite de uma sequência  $\{x_k\}$  e envolvem geralmente a matriz  $A$  apenas através de multiplicações por vetores dados. Geralmente, qualquer método iterativo é baseado em uma decomposição adequada da matriz  $A$ , como por exemplo

$$A = P - N \quad \text{com } P \text{ não singular.} \quad (5.14)$$

Suponhamos então, que o sistema  $Ax = b$  tenha sido transformado em um sistema

original equivalente da forma

$$Px = Nx + b. \quad (5.15)$$

Seja  $x_0$  uma aproximação inicial para a solução  $\hat{x}$  de (5.15). As aproximações sucessivas  $x_k$  para a solução  $\hat{x}$  podem ser obtidas usando o processo estacionário definido por

$$Px_{k+1} = Nx_k + b, \quad k \geq 0 \quad (5.16)$$

Se a sequência  $x_k$  converge para  $\hat{x}$  então  $\hat{x}$  coincide com a solução  $x$  de  $Ax = b$ .

Com efeito, seja

$$e_k = x_k - x, \quad B = P^{-1}N, \quad (5.17)$$

podemos deduzir a partir de (5.16) na equação de erro

$$e_k = Bx_{k-1} = B^k e_0 \quad (5.18)$$

onde  $e_0$  é o erro inicial. Portanto  $B$  é identificada como a matriz de iteração associada a (5.16).

A iteração  $x_k$  converge para a solução  $x$  de (5.13) para qualquer vetor inicial  $x_0$  se, e somente se, o raio espectral da matriz de iteração  $B$  satisfaz

$$\rho(B) < 1. \quad (5.19)$$

Nas subseções que seguem apresentamos três métodos iterativos, dois considerados clássicos, o método de Jacobi e Gauss-Seidel e a seguir o método de Richardson.

### 5.2.2 Método de Jacobi

O método de Jacobi é talvez o método iterativo mais simples, e pode ser definido para matrizes com elementos não-nulos na diagonal. Vamos considerar

que a matriz  $A$  de (5.13) é representada da seguinte forma

$$A = \begin{pmatrix} & & U_A \\ & D_A & \\ L_A & & \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

onde  $D_A$  é a diagonal de  $A$  e  $L_A$ ,  $U_A$  são matrizes triangular inferior e superior formada pela parte inferior e superior, respectivamente, da matriz  $A$ , isto é,

$$A = L + D + U, \quad (5.21)$$

onde,

$$l_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & i > j; \\ 0, & i \leq j. \end{cases}; \quad d_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases}; \quad u_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & i < j; \\ 0, & i \geq j. \end{cases} \quad (5.22)$$

ou em forma matricial

$$L = \begin{pmatrix} & & 0 \\ & 0 & \\ L_A & & \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} & & 0 \\ & D_A & \\ 0 & & \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} & & U_A \\ & 0 & \\ 0 & & \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Supondo  $\det(D) \neq 0$ , podemos transformar o sistema original em

$$\begin{aligned} (L + D + U)x &= b_1 \\ \Rightarrow Dx &= -(L + U)x + b_1 \\ \Rightarrow x &= -D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b_1. \end{aligned} \quad (5.24)$$

que está na forma (5.16) com  $P = I$ ,  $N = -D^{-1}(L + U)$  e  $b = D^{-1}b_1$ .

O processo iterativo definido por

$$x_{k+1} = -D^{-1}(L + U)x_k + D^{-1}b_1, \quad (5.25)$$

é chamado método de **Jacobi**. A matriz de iteração do método de Jacobi é, portanto,

$$A_J := -D^{-1}(L + U). \quad (5.26)$$

Fazendo,  $[D^{-1}]_{ii} = \frac{1}{a_{ij}}$ , para um elemento  $i$  qualquer temos

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[ b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^k \right]. \quad (5.27)$$

A partir de agora, quando fizermos uso do  $x_i$  como um vetor com índices vamos usar o  $k$  referente a iteração como supra-índice. Já quando falarmos do  $x$  como um vetor único, o  $k$  será escrito como sub-índice. Como já dito anteriormente, aqui nos interessa usar o método iterativo livre de matriz, de forma que definindo o vetor residual como feito em (5.11), então o processo iterativo pelo método de Jacobi pode ser definido como

$$x_{k+1} = \sigma(x_k), \quad (5.28)$$

onde para o caso mostrado no Capítulo 4 este processo será como define a equação (5.29)

$$\begin{cases} q_c^{k+1} = \mathcal{Q}_c^1(u_c^k) \\ u_c^{k+1} = \mathcal{U}_c^1(q_c^k) \end{cases} \quad (5.29)$$

Note que quando se aplica o método de Jacobi, cada componente no novo vetor  $x_{k+1}$  é calculada independentemente das outras, ou seja, no sistema (5.29) por exemplo, ao calcular  $u_c^{k+1}$  ainda é usado o valor atrasado de  $q_c^k$ . Isso sugere que a convergência pode ser acelerada se ao calcular  $x_{k+1}$  forem exploradas as novas componentes  $x_k$ . Esta atualização dá origem ao método de Gauss-Seidel.

O algoritmo deste método é apresentado a seguir

---

**Algoritmo 5.2.1:** Método de Jacobi

---

1 **Entrada:** Definir  $x_0 = x(0)$   
2 **Saída:**  $x_{k+1}$   
3 **enquanto o resultado não convergir faça**  
4     **para**  $k = 1, \dots$  **faça**  
5          $x_{k+1} = \sigma(x_k)$   
6         até que a convergência é alcançada  
7     **fim para**  
8 **fim enqto**

---

### 5.2.3 Método de Gauss-Seidel

Suponhamos que o sistema linear (5.13) seja escrito na forma

$$(L^* + I + U^*)x = b. \quad (5.30)$$

onde, por hipótese dado que  $a_{ii} \neq 0$ , pois  $\det(D) \neq 0$ , podemos então decompor a matriz  $A$  dividindo pelo correspondente elemento da diagonal principal.

Transformamos então esse sistema como segue

$$\begin{aligned} (L^* + I)x &= -U^*x + b_1 \\ \Rightarrow x &= -(L^* + I)^{-1}U^*x + (L^* + I)^{-1}b_1. \end{aligned} \quad (5.31)$$

que está na forma (5.16) com  $P = I$ ,  $N = -(L^* + I)^{-1}U^*$  e  $b = (L^* + I)^{-1}b_1$ .

O processo iterativo definido por

$$x_{k+1} = -(L^* + I)^{-1}U^*x_k + (L^* + I)^{-1}b_1 \quad (5.32)$$

é chamado de método de **Gauss-Seidel** e a matriz de iteração deste método é

$$A_{GS} := -(L^* + I)^{-1}U^*. \quad (5.33)$$

De modo que para um elemento  $i$  qualquer temos

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[ b_i - \sum_{j=1}^i a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij} x_j^k \right]. \quad (5.34)$$

Analogamente ao feito para o método de Jacobi, o processo iterativo como o algoritmo livre de matriz é dado como segue

$$x_{k+1} = \tilde{\sigma}(x_k, x_{k+1}), \quad (5.35)$$

e para o exemplo específico mostrado no Capítulo 4, as equações são dadas como

$$\begin{cases} q_c^{k+1} = \mathcal{Q}_c^1(u_c^k) \\ u_c^{k+1} = \mathcal{U}_c^1(q_c^{k+1}) \end{cases} \quad (5.36)$$

Podemos notar que como dito anteriormente esse método utiliza para o cálculo de uma componente de  $x_{k+1}$  como o valor mais recente para o cálculo das demais componentes. O algoritmo está descrito a seguir.

---

**Algoritmo 5.2.2:** Método de Gauss-Seidel

---

- 1 **Entrada:** Definir  $x_0 = x(0)$
  - 2 **Saída:**  $x_{k+1}$
  - 3 **enquanto o resultado não convergir faça**
  - 4     **para**  $k = 1, \dots$  **faça**
  - 5          $x_{k+1} = \tilde{\sigma}(x_k, x_{k+1})$
  - 6         até que a convergência é alcançada
  - 7     **fim para**
  - 8 **fim enqto**
- 

Nesta seção vimos métodos iterativos cuja característica comum é que não possuem garantia de convergência, e se possuírem a convergência será garantida no limite  $k \rightarrow \infty$ . A seguir exploraremos métodos mais sofisticados visando melhorar as propriedades teóricas de convergência, o que nos permitirá discernir melhor acerca do uso de métodos iterativos para nosso problema.

### 5.3 Métodos iterativos com propriedade de terminação finita

Algumas das técnicas iterativas existentes para resolução de sistemas lineares de grande porte utilizam, de alguma forma, uma projeção. A projeção representa uma forma canônica de se extrair uma aproximação da solução de um sistema a partir de um subespaço (neste caso, será denominado subespaço de Krylov). Nesta seção, serão vistos alguns métodos baseados em subespaços de Krylov e seus respectivos algoritmos.

A característica comum dos métodos apresentados nesta seção é que em aritmética exata todos eles possuem a propriedade de terminação finita, isto é, a solução do sistema de equações é obtida após um número finito de passos. Esta característica é muito desejada, sobretudo ao comparar estas metodologias com os métodos clássicos vistos na Seção 5.2.1, para os quais a convergência é alcançada somente no limite das iterações indo para infinito.

#### 5.3.1 Subespaço de Krylov

Um método geral de projeção para resolver sistemas lineares do tipo (5.13) obtém uma solução aproximada de um subespaço de  $\mathbb{R}^n$ , que denotaremos por  $\mathcal{K}$ . Se a sua dimensão for  $m$ , então precisamos de  $m$  restrições para obter uma única solução nesse subespaço. Uma maneira típica para obter essas restrições é impor  $m$  condições de ortogonalidade. Mais especificamente, impomos que o vetor resíduo  $b - Ax$  seja ortogonal a  $m$  vetores linearmente independentes. Estes vetores definem outro subespaço de dimensão  $m$ , chamado subespaço das restrições.

Assim, este tipo de método obtém uma solução aproximada  $x_m$  do sistema  $Ax = b$ , de um subespaço afim  $x_0 + \mathcal{C}_m$  de dimensão  $k$ , impondo a condição conhecida como condição de Petrov-Galerkin

$$b - Ax_m \perp \mathcal{C}_m, \quad (5.37)$$

onde  $\mathcal{C}_m$  é outro subespaço de dimensão  $m$ ,  $x_0$  é um ponto inicial arbitrário que

aproxima a solução e  $b - Ax_m$  é o resíduo no passo  $m$  que denotaremos por  $r_m$ . Em cada passo atualizam-se  $\mathcal{K}_m$ ,  $\mathcal{C}_m$  e  $x_0$  é o último  $x_m$  achado. Os métodos baseados em subespaço de Krylov estão fundamentados nesse tipo de idéia. O subespaço  $\mathcal{K}_m$  denominado subespaço de Krylov

$$\mathcal{K}_m(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0\}. \quad (5.38)$$

O método geral de projeção gera uma sequência tal que o  $k$ -ésimo termo iterado satisfaz

$$u_k \in u_{k-1} + \mathcal{K}_k \quad (5.39)$$

então,

$$u_k = a_k u_{k-1} + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_{k-1}^i A^i r_0, \quad (5.40)$$

com  $a_k$  e  $\alpha_{k-1}^i$  constantes reais. Por outro lado,

$$u_{k-1} \in u_{k-2} + \mathcal{K}_{k-1} \implies u_{k-1} = a_{k-1} u_{k-2} + \sum_{i=0}^{k-2} \alpha_{k-2}^i A^i r_0. \quad (5.41)$$

Substituindo (5.41) em (5.40), obtemos

$$u_k = a_k a_{k-1} u_{k-2} + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{k-1}^i A^i r_0 \quad (5.42)$$

e continuando com esse processo, em  $k$  passos temos

$$u_k = c u_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \gamma_i A^i r_0, \quad (5.43)$$

sendo  $c$  e  $\gamma_i (\forall i)$  constantes reais. Logo,

$$u_k \in u_0 + \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{k-1}r_0\}. \quad (5.44)$$

Portanto, se  $x_0$  é uma solução aproximada para o sistema  $Ax = b$ , os métodos

iterativos baseados no subespaço de Krylov satisfazem

$$u_k \in u_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0), \quad \text{com } k = 1, 2, \dots \quad (5.45)$$

Note que  $\mathcal{K}_j(A, r_0) \subseteq \mathcal{K}_{j+1}(A, r_0) \quad \forall m \in \mathbb{N}$ . Assim, o subespaço de Krylov contém os subespaços obtidos nas iterações anteriores.

### 5.3.2 Método de Arnoldi

O processo de Arnoldi é um algoritmo para a construção de uma base ortogonal do subespaço  $\mathcal{K}_k(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$ , tal que  $\mathcal{K}_k(A, r_0) = \text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ . Em aritmética exata um variante do algoritmo na forma livre de matriz é dada como segue

---

**Algoritmo 5.3.1:** Método de Arnoldi

---

```

1 Entrada: Escolha um vetor  $v_1$  de norma 1,  $v_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|}$ 
2 Saída:  $x_k$ 
3 para  $j = 1 : k$  faça
4    $h_{ij} = (r(x_0 + v_j) - r(x_0), v_i)$ 
5   para  $i = 1 : j$  faça
6      $w_j = r(x_0 + v_j) - r(x_0) - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$ 
7      $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ 
8     se  $h_{j+1,j} = 0$  então
9       pare
10    fim se
11     $v_{j+1} = \frac{w_j}{h_{j+1,j}}$ 
12  fim para
13 fim para

```

---

No algoritmo anterior aritmética exata foi assumida, ou seja, fez-se uso do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, onde todos os escalares, que são utilizados para multiplicar os elementos da base já existente, são calculados usando o mesmo valor de  $w_j = r(x_0 + v_j) - r(x_0) - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$ . Esse procedimento

é numericamente instável, na prática, muito pode ser ganho com a utilização da modificação de Gram-Schmidt ou o algoritmo de Householder, em vez de o algoritmo de Gram-Schmidt padrão. Com a alternativa de Gram-Schmidt modificado, o algoritmo é dado da seguinte maneira

---

**Algoritmo 5.3.2:** Método de Arnoldi modificado

---

```

1 Entrada: Escolha um vetor  $v_1$  de norma 1,  $v_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|}$ 
2 Saída:  $x_k$ 
3 para  $j = 1 : k$  faça
4      $w_j = r(x_0 + v_j) - r(x_0)$ 
5     para  $i = 1 : k$  faça
6          $h_{i,j} = (w_j, v_i)$ 
7          $w_j = w_j - h_{i,j}v_i$ 
8     fim para
9      $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ 
10    se  $h_{j+1,j} = 0$  então
11        pare
12    fim se
13     $v_{j+1} = \frac{w_j}{h_{j+1,j}}$ 
14 fim para

```

---

### 5.3.3 Método GMRES

O método de resíduo mínimo generalizado (GMRES) é um método de projeção em um subspaço de Krylov  $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ , ou seja,  $(x_k, x_0) \in \mathcal{K}_k(A, r_0)$ , e o espaço de restrições dado por  $\mathcal{L}_k = A\mathcal{K}_k(A, r_0)$  e com  $v_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|_2}$ . Esta técnica consiste em minimizar a norma residual sobre todos os vetores  $x_0 + \mathcal{K}_k$ . Para resolver o sistema (5.13), seja qualquer valor inicial  $x_0$  é calculado o resíduo inicial,  $r_0 = b - Ax_0$  e assim, o resíduo  $r_k$  é ortogonal a  $A\mathcal{K}_k(A, r_0)$ , ou seja,  $r_k \perp A\mathcal{K}_k(A, r_0)$ . Com isso o GMRES assegura que o resíduo, a cada iteração, não aumentará, no pior caso o resíduo das novas iterações será igual aos das anteriores, como a cada passo o espaço de busca está aumentando, mesmo depois de alguma estagnação, o método

deve encontrar uma direção melhor. Qualquer vetor  $x$  em  $x_0 + \mathcal{K}_k$  pode ser escrito como

$$x = x_0 + V_k y \quad (5.46)$$

onde  $y$  é o  $k$ -ésimo vetor. Definindo

$$J(y) = \|b - Ax\|_2 = \|b - A(x_0 + V_k y)\|_2, \quad (5.47)$$

e ainda sendo  $V_{k+1}$  uma matriz cujas colunas formam uma base ortornormal para  $\mathcal{K}_{k+1}$  e  $V_k$  uma matriz cujas colunas formam uma base ortornormal para  $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ , então usando a seguinte relação de Arnoldi,  $AV_k = V_{k+1}H_k$  temos

$$\begin{aligned} b - Ax &= b - A(x_0 + V_k y) \\ &= r_0 - AV_k y \\ &= r_0 - V_{k+1} \bar{H}_k y \\ &= \|r_0\|_2 v_1 - V_{k+1} H_k y \\ &= \|r_0\|_2 V_{k+1} e_1 - V_{k+1} H_k y \\ &= V_{k+1} (\beta e_1 - H_k y) \end{aligned} \quad (5.48)$$

mas  $V_{k+1} = 1$ , uma vez que suas colunas são vetores ortornormais, logo de (5.47), temos

$$J(y) = \|\beta e_1 - H_k y\|_2, \quad (5.49)$$

A aproximação dada por GMRES é o único vetor de  $x_0 + \mathcal{K}_k$  que minimiza (5.47). De (5.46) e (5.49), esta aproximação pode ser obtida simplesmente como  $x_k = x_0 + V_k y_k$  onde  $y_k$  minimiza o funcional (5.49), ou seja, implica em resolver o problema de mínimos quadrados dado por

$$x_k = x_0 + V_k y_k \quad \text{onde} \quad (5.50)$$

$$y_k = \operatorname{argmin}_y \|\beta e_1 - H_k y\|_2. \quad (5.51)$$

Haverá um momento em que  $H(k+1, k) = 0$ , isso significa que o novo vetor calculado pertence ao espaço de Krylov anterior, ou seja,  $w \in \mathcal{K}_k(A, r_0)$ . Neste momento chega-se a solução do sistema linear. O minimizador  $y_k$  é barato para calcular uma vez que requer a solução de um problema de mínimos quadrados  $(k+1) \times k$ , onde  $k$  é normalmente pequeno. Isto dá o seguinte algoritmo.

---

**Algoritmo 5.3.3: GMRES**

---

```

1 Entrada: Dado  $x_0$ 
2 Saída:  $x_k$ 
3 Calcule  $r(X_0)$ , faça  $Z = \|r(X_0)\|_2$ , e  $v_1 = \frac{r(X_0)}{Z}$ 
4 para  $j = 1 : k$  faça
5      $w_j = r(X_0) - r(X_0 + v_j)$ 
6     para  $i = 1 : j$  faça
7          $H_{i,j} = (w_j, v_i)$ 
8          $w_j = w_j - H_{ij}v_i$ 
9     fim para
10     $H_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ 
11    se  $H_{j+1,j} = 0$  então
12        faça  $k = j$  e vá para o passo 11
13    fim se
14     $v_{j+1} = \frac{w_j}{H_{j+1,j}}$ 
15 fim para
16 Defina  $(k+1) \times k$  a matriz de Hessemberg  $H_k = \{H_{i,j}\}_{1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq m}$ 
17 Compute  $y_k$ , o minimizante de  $\|ze_1 - H_k y\|_2$ 
18 Faça  $X_k = X_0 + V_k y_k$ , onde as colunas de  $V_k$  são os vetores  $v_j$  computados
    através das iterações.

```

---

### 5.3.4 Método BICGSTAB

O método do gradiente biconjugado estabilizado (BICGSTAB) constrói um  $r_k$  residuo ortogonal com relação a outras linhas de vetores  $r_0, r_1, \dots, r_{k-1}$ , e vice-versa,  $r_k$  é ortogonal com respeito a  $r_0, r_1, \dots, r_{k-1}$ . Esse método também alcança a

solução do sistema de equações dentro de no máximo  $n$  passos, mas não há nenhuma propriedade de minimização como em GMRES para etapas intermediárias.

Com isso, para o algoritmo do BICGSTAB não é preciso calcular  $A^T$ , como acontece no caso de gradientes conjugados quadrados, ou seja, assim como o GMRES este é um método que não precisa da matriz transposta  $A^T$ . Vejamos o método do Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado, que é relacionado ao algoritmo da Bi-Ortogonalização de Lanczos. A descrição do algoritmo em formato livre de matriz é a seguinte.

---

**Algoritmo 5.3.4: BICGSTAB**

---

1 **Entrada:** Dado  $x_0$   
2 **Saída:**  $x_k$   
3 Compute  $r_0 = b - Ax_0$ ;  $r_0^*$  arbitrário  
4  $p_0 = r_0$   
5 **para**  $j = 0, 1, \dots$  **faça**  
6     até a convergência  
7      $a_j = \frac{(r_j, r_0^*)}{(r(x_0 + p_j) - r(x_0), r_0^*)}$   
8      $s_j = r_j - \alpha_j(r(x_0 + p_j) - r(x_0))$   
9      $w_j = \frac{(r(x_0 + s_j) - r(x_0), s_j)}{(r(x_0 + s_j) - r(x_0), r(x_0 + s_j) - r(x_0))}$   
10     $x_{j+1} = x_j + \alpha_j p_j + w_j s_j$   
11     $r_{j+1} = s_j - w_j(r(x_0 + s_j) - r(x_0))$   
12     $\beta_j = \frac{(r_{j+1}, r_0^*)}{(r_j, r_0^*)} \frac{\alpha_j}{w_j}$   
13     $p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_j(p_j - w_j(r(x_0 + p_j) - r(x_0)))$   
14 **fim para**

---

## 5.4 Discussão sobre as metodologias propostas

Neste capítulo revisamos cinco métodos que poderiam ser usados para resolver o sistema linear que surge, ao utilizar a metodologia de decomposição de domínio proposta no capítulo anterior no caso de formulações matemáticas envolvendo modelos dimensionalmente heterogêneos. No caso de sistemas algébricos

com poucas equações de interface (duas no caso trivial do exemplo visto na Seção 4.3), poderíamos fazer uso de qualquer um dos métodos citados nas seções anteriores. Entretanto, quando aumenta a complexidade do problema, a quantidade de equações de interface também aumenta. Nestas situações, dos métodos vistos o GMRES é o método mais barato, dado que sua convergência é garantida em no máximo  $n$  iterações, com  $n$  o número de dimensão do problema (número de equações de interface). Além disso, quando comparado com o BICGSTAB, o GMRES implica resolver cada domínio (cada componente) uma única vez por iteração, enquanto que o BICGSTAB requer resolver cada domínio duas vezes por iteração. Sendo assim, faremos uso do GMRES para resolver o sistema obtido para o problema deste trabalho.

# Capítulo 6

## Resultados Numéricos

Neste capítulo apresentamos a solução numérica do problema de acoplamento proposto neste trabalho aplicado a diversas situações a fim de mostrar o desempenho da metodologia estudada, antes porém, apresentamos a solução calculada passo a passo para um exemplo com solução analítica. Na Seção 6.1 fazemos algumas considerações sobre qual condição de contorno vamos usar ao decompor os domínios e nas seções que seguem discutimos os resultados numéricos para o problema em questão e demais exemplos.

### 6.1 Considerações preliminares

No Capítulo 4 apresentamos o método de decomposição de domínio, a princípio para um problema 1D-1D e, para este caso simples, estamos livres para escolher as condições de contorno como visto nas Seções 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4. No caso do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos (1D-3D) ao escolhermos aplicar uma condição de contorno do tipo Neumann (4.53) implica em satisfazer a equação de interface dada por (4.55) onde o fluxo é dado como em (4.53)<sub>3</sub>. Já a escolha de uma condição de contorno do tipo Dirichlet (4.56), que implica em satisfazer uma equação do tipo (4.58), implica em impor a solução média em  $\Gamma$  (4.56)<sub>3</sub> e fazer isto não é algo simples. Note que a equação resultante de impor uma condição de contorno deste tipo é algo idêntico ao que já nos deparamos anteriormente no Capítulo 3 ao quisermos acoplar modelos heterogêneos, com a única

diferença de não ter o acoplamento do modelo 1D. Entretanto a matriz resultante será igualmente uma com blocos extra-diagonais e um acoplamento com um grande número de graus de liberdade. Dado que os códigos de elementos finitos de uso mais comum, e em particular o código do qual nós dispomos, não oferecem a opção de impor este tipo de condição de contorno, e modificar o código é algo, como já foi mencionado, que não se pretende neste trabalho, iremos aplicar, para todos os exemplos nas seções que seguem neste capítulo, a condição de contorno do tipo Neumann para todos os acoplamentos. Contudo, vale ressaltar que apesar de não fazermos isto neste trabalho, a imposição do valor médio da solução é algo que tem sido feito na literatura (Veneziani e Vergara, 2007; Formaggia et al., 2008, 2010).

Uma outra motivação para fazer esta escolha vem do fato que o comportamento do número de condição em função da relação do tamanho dos subdomínios (avaliados a partir de parâmetros não dimensionais) se mostra estável nos limites desta razão indo para 0 ou para  $\infty$  quando se aplicam as condições de contorno Neumann em todas as interfaces, como mostra a Tabela 4.1.

## 6.2 Componente 1D-1D com solução analítica

Como discutido na Seção 5.4 faremos uso do algoritmo GMRES livre de matriz, pelos motivos já expostos e, também, por ser um dos métodos iterativos mais usados. Sendo assim, com o intuito de clarear as ideias de como é aplicado o algoritmo para o problema de interface, resolveremos aqui o problema proposto na Seção 4.1.3, já que para este caso simples a equação diferencial possui solução analítica, dada por (4.32) e (4.33). Antes porém, considere o sistema (4.45). Tomando  $L = 2$ ;  $c = f = k_1 = k_2 = 1$ , a solução exata deste problema é  $(q_c, u_c) = (0, \frac{1}{2})$ . Agora, vamos aplicar o método de GMRES livre de matriz descrito na Subseção 5.3.3. Em particular, escolhendo  $X_0 = (q_c^0, u_c^0) = (0, 0)$ , obtemos

$$\begin{aligned} r_1(0, 0) &= -\frac{1}{2} \\ r_2(0, 0) &= -\frac{1}{2}. \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad r(X_0) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad ; \quad v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

Precisamos agora calcular  $r(X_0 + v_1)$ , onde  $(X_0 + v_1) = (-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ , daí

$$\begin{aligned} r_1(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{2}) &= -\frac{2}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \\ r_2(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{2}) &= -\frac{1}{2}, \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad w_1 = r(X_0) - r(X_0 + v_1) = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$H_{11} = (w_1, v_1) = -1, \quad w_1 = w_1 - H_{11}v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$H_{21} = \|w_1\|_2 = 1, \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

Vamos agora calcular  $r(X_0 + v_2)$  novamente impondo condição de Neumann para ambos subdomínios. Assim,  $(X_0 + v_2) = (\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ , então

$$\begin{aligned} r_1(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{2}) &= \frac{1}{2} \\ r_2(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{2}) &= -\frac{2}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad w_2 = r(X_0) - r(X_0 + v_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$

$$H_{12} = (w_2, v_1) = -1, \quad w_2 = w_2 - H_{22}v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$H_{22} = -1, \quad w_2 = w_2 - H_{22}v_2 = 0$$

$$H_{32} = \|w_2\|_2 = 0$$

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow y = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

levando a

$$X_2 = X_0 + y_1 v_1 + y_2 v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

que é a solução exata correspondente, como visto anteriormente.

Assim, com a ideia de como se calcula os resíduos para o método de GMRES, passamos aos exemplos numéricos.

### 6.3 Sistema 1D-3D com conexão em série

Nesta seção apresentamos os resultados numéricos para o problema de acoplamento entre dois modelos dimensionalmente heterogêneos 1D e 3D, proposto neste trabalho, ou seja, o problema consiste em um problema de transferência de calor com fenômenos de difusão-reação. Por razões de brevidade não vamos repetir o enunciado matemático do problema. A Figura 6.1 representa o problema já exposto anteriormente, e está numerada superiormente pela quantidade de componentes e inferiormente pela quantidade de interfaces de acoplamento.

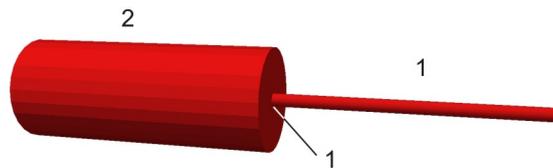


Figura 6.1: Acoplamento de modelos 1D e 3D.

Aqui a condição de contorno de Dirichlet  $u = 10$  foi aplicada à direita do modelo 1D e uma condição de Dirichlet homogênea a esquerda do modelo 3D. Além disso, nós consideramos uma fonte por unidade de volume constante  $f = 10$  atuando em todo o domínio, em ambos os modelos. O comprimento de cada tubo

é indicado por  $L = 1$ . O diâmetro da seção transversal do modelo 3D é  $d = 0.4$  de modo que a área da mesma é  $A = 0.12566$ .

Assim, modelo acoplado 3D-1D consiste em 1 interface de acoplamento. Como descrito na Seção 4.3 a estratégia proposta pode ser resumida em 4 passos. De forma que o primeiro passo é definir as duas incógnitas da única interface (média de temperatura e fluxo de calor são as incógnitas da interface). Como já discutido anteriormente, a escolha de condições de contorno do tipo Neumann para cada subdomínio na interface de acoplamento, completa o passo 2. As equações resultantes da aplicação do método de decomposição de domínio utilizando as escolhas dos passos 1 e 2 são dadas como segue

$$\begin{cases} u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1) = 0, \\ u_1 - \mathcal{U}_2^1(q_1) = 0. \end{cases} \quad (6.1)$$

A montagem do sistema (6.1) corresponde ao passo 3. A numeração das equações respeita, no índice inferior do operador a numeração dos componentes e no superior a interface local do componente (neste caso só tem 1 interface, no caso em que tenha 2, a equação vai ser montada para a interface 1 e 2, e assim sucessivamente). Já as variáveis  $u$  e  $q$ , têm o índice inferior representando a numeração da interface de acoplamento. Para o passo 4, como já referido anteriormente, faremos uso do algoritmo GMRES livre de matriz. O problema variacional (que corresponde aos operadores, neste caso  $\mathcal{U}$ ) foi resolvido pelo Método dos Elementos Finitos, como já comentado no Capítulo 3, e foi empregando elementos lineares: segmentos para o modelo 1D e tetraedros para o modelo 3D, sendo 10 a quantidade de elementos 1D (portanto 11 nós) e 1.781 elementos somando o total de 8.940 nós em todo componente 3D. O resultado final é apresentado na Figura 6.2 e na Tabela 6.1. Note que a solução constante na interface do modelo 1D é uma boa aproximação quando comparado com a solução da região 3D na interface. Além disso, o histórico de convergência do processo iterativo é mostrado na Figura 6.11, precisando de 2 iterações para alcançar a solução do sistema.

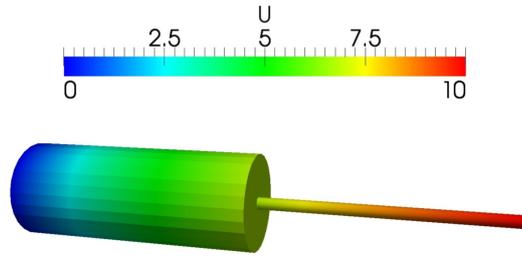


Figura 6.2: Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 6.760187$	$q_1 = -4.254782e + 00$

Tabela 6.1: Resultados para o problema de interface (2 componentes).

O que faremos agora será uma sequência de acoplamentos entre modelos 1D e 3D com o intuito de avaliar o resíduo resultante a medida que aumentamos o sistema de equações resultante do acoplamento destes modelos. A Figura 6.3 representa dois sistemas como o da Figura 6.1 em série, ou seja, 4 modelos (ou componentes) com 3 interfaces de acoplamento. Os dados do problema são os mesmos do problema anterior.

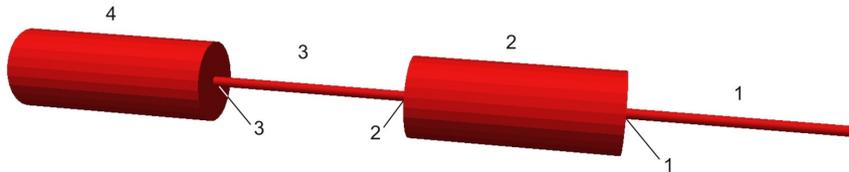


Figura 6.3: Acoplamento em série 1D e 3D (4 componentes).

As equações resultantes deste problema são dadas por,

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1) = 0, \\ u_1 - \mathcal{U}_2^1(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_2^2(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_3^1(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_3^2(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_4^1(q_3) = 0. \end{array} \right. \quad (6.2)$$

A Figura 6.4 representa a solução do sistema 6.2,

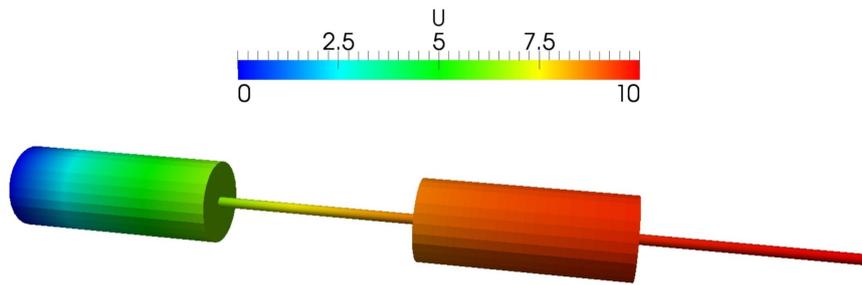


Figura 6.4: Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D.

e na Tabela 6.2 apresentam-se os valores encontrados após resolver o sistema.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 9.569630$	$q_1 = -0.5651969e + 00$
$u_2 = 8.671633$	$q_2 = -1.378055e + 00$
$u_3 = 6.329866$	$q_3 = -3.689730e + 00$

Tabela 6.2: Resultados para o problema de interface (4 componentes).

Analogamente, formulamos o problema que acopla 6 componentes, tendo assim 5 interfaces (ver Figura 6.5)

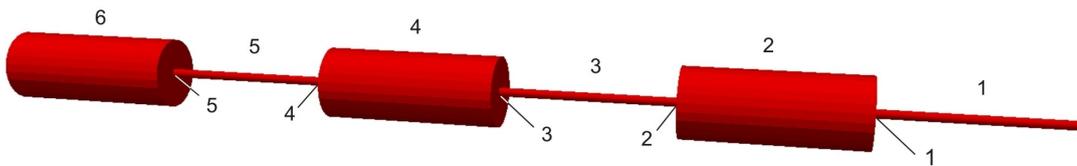


Figura 6.5: Acoplamento em série 1D e 3D (6 componentes).

As equações resultantes para o problema de interface são,

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1) = 0, \\ u_1 - \mathcal{U}_2^1(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_2^2(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_3^1(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_3^2(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_4^1(q_3, q_4) = 0, \\ u_4 - \mathcal{U}_4^2(q_3, q_4) = 0, \\ u_4 - \mathcal{U}_5^1(q_4, q_5) = 0, \\ u_5 - \mathcal{U}_5^2(q_4, q_5) = 0, \\ u_5 - \mathcal{U}_6^1(q_5) = 0. \end{array} \right. \quad (6.3)$$

Na Figura 6.5 a representação dos resultados,

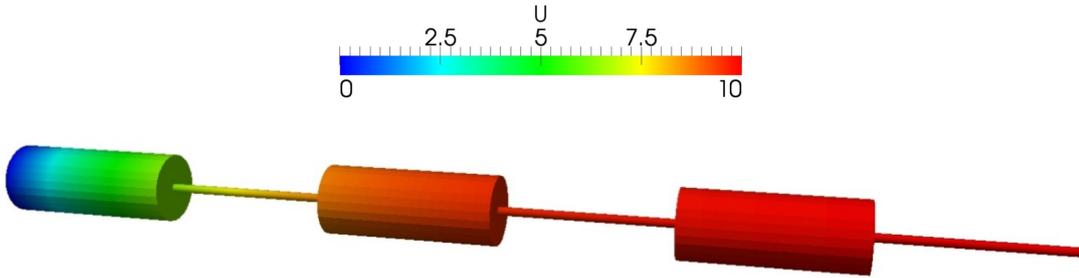


Figura 6.6: Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D.

e na Tabela 6.3 os valores incógnitas definidas nas interfaces

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 9.941797$	$q_1 = -0.7643696e - 01$
$u_2 = 9.820365$	$q_2 = -0.1863390e + 00$
$u_3 = 9.503707$	$q_3 = -0.4989379e + 00$
$u_4 = 8.647771$	$q_4 = -1.353295e + 00$
$u_5 = 6.322136$	$q_5 = -3.679580e + 00$

Tabela 6.3: Resultados para o problema de interface (6 componentes).

Seguindo a mesma ideia, colocamos o acoplamento entre 8 componentes, resultando em 7 interfaces, como mostrado na Figura 6.7

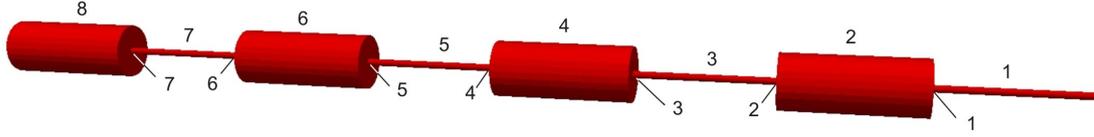


Figura 6.7: Acoplamento em série 1D e 3D (8 componentes).

As equações resultantes do sistema de interface são as seguintes

$$\left\{ \begin{array}{l}
 u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1) = 0, \\
 u_1 - \mathcal{U}_2^1(q_1, q_2) = 0, \\
 u_2 - \mathcal{U}_2^2(q_1, q_2) = 0, \\
 u_2 - \mathcal{U}_3^1(q_2, q_3) = 0, \\
 u_3 - \mathcal{U}_3^2(q_2, q_3) = 0, \\
 u_3 - \mathcal{U}_4^1(q_3, q_4) = 0, \\
 u_4 - \mathcal{U}_4^2(q_3, q_4) = 0, \\
 u_4 - \mathcal{U}_5^1(q_4, q_5) = 0, \\
 u_5 - \mathcal{U}_5^2(q_4, q_5) = 0, \\
 u_5 - \mathcal{U}_6^1(q_5, q_6) = 0, \\
 u_6 - \mathcal{U}_6^2(q_5, q_6) = 0, \\
 u_6 - \mathcal{U}_7^1(q_6, q_7) = 0, \\
 u_7 - \mathcal{U}_7^2(q_6, q_7) = 0, \\
 u_7 - \mathcal{U}_8^1(q_7) = 0.
 \end{array} \right. \quad (6.4)$$

E as soluções nos modelos e em cada interface, são dadas na Figura 6.8 e na Tabela 6.4.

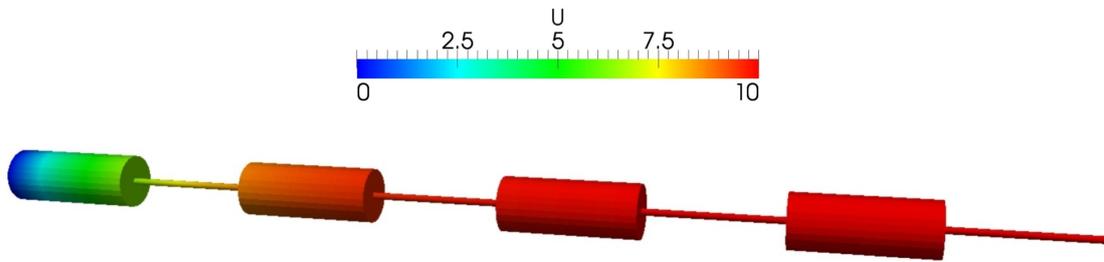


Figura 6.8: Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 9.992119$	$q_1 = -0.1034934e - 01$
$u_2 = 9.975691$	$q_2 = -0.2520125e - 01$
$u_3 = 9.932857$	$q_3 = -0.6749523e - 01$
$u_4 = 9.817078$	$q_4 = -0.1830485e + 00$
$u_5 = 9.502500$	$q_5 = -0.4977255e + 00$
$u_6 = 8.647334$	$q_6 = -1.352841e + 00$
$u_7 = 6.321995$	$q_7 = -3.679395e + 00$

Tabela 6.4: Resultados para o problema de interface (8 componentes).

Finalmente, acoplamos 10 componentes, gerando 9 interfaces de acoplamento (ver figura 6.9 )

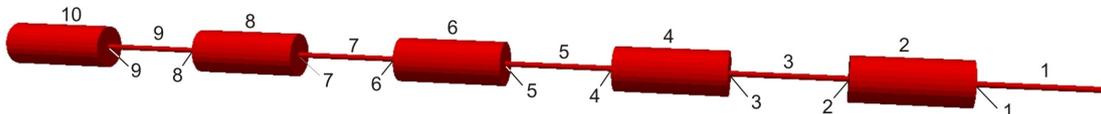


Figura 6.9: Acoplamento em série 1D e 3D (10 componentes).

Assim, as equações de acoplamento são

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1) = 0, \\ u_1 - \mathcal{U}_2^1(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_2^2(q_1, q_2) = 0, \\ u_2 - \mathcal{U}_3^1(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_3^2(q_2, q_3) = 0, \\ u_3 - \mathcal{U}_4^1(q_3, q_4) = 0, \\ u_4 - \mathcal{U}_4^2(q_3, q_4) = 0, \\ u_4 - \mathcal{U}_5^1(q_4, q_5) = 0, \\ u_5 - \mathcal{U}_5^2(q_4, q_5) = 0, \\ u_5 - \mathcal{U}_6^1(q_5, q_6) = 0, \\ u_6 - \mathcal{U}_6^2(q_5, q_6) = 0, \\ u_6 - \mathcal{U}_7^1(q_6, q_7) = 0, \\ u_7 - \mathcal{U}_7^2(q_6, q_7) = 0, \\ u_7 - \mathcal{U}_8^1(q_7, q_8) = 0, \\ u_8 - \mathcal{U}_8^2(q_7, q_8) = 0, \\ u_8 - \mathcal{U}_9^1(q_8, q_9) = 0, \\ u_9 - \mathcal{U}_9^2(q_8, q_9) = 0, \\ u_9 - \mathcal{U}_{10}^1(q_9) = 0. \end{array} \right. \quad (6.5)$$

Na Figura 6.10 e na Tabela 6.5 se apresentam a solução em cada um dos modelos e as soluções das variáveis de interface, respectivamente.

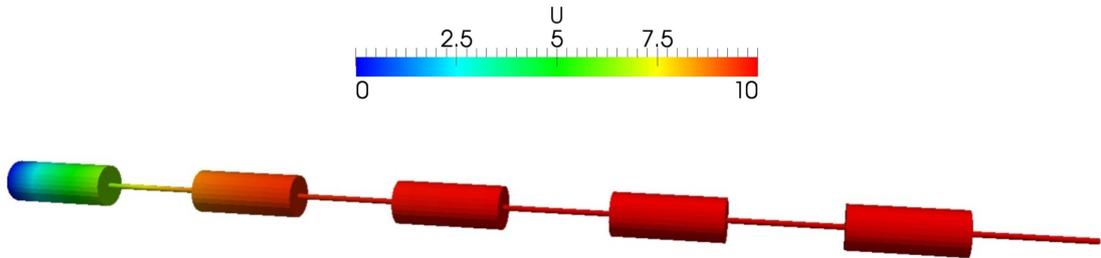


Figura 6.10: Resultado do acoplamento entre modelos 1D e 3D.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 9.998926$	$q_1 = -0.1409980e - 02$
$u_2 = 9.996701$	$q_2 = -0.3404910e - 02$
$u_3 = 9.990906$	$q_3 = -0.9136029e - 02$
$u_4 = 9.975245$	$q_4 = -0.2475488e - 01$
$u_5 = 9.932693$	$q_5 = -0.6733110e - 01$
$u_6 = 9.817018$	$q_6 = -0.1829881e + 00$
$u_7 = 9.502478$	$q_7 = -0.4977032e + 00$
$u_8 = 8.647326$	$q_8 = -1.352833e + 00$
$u_9 = 6.321992$	$q_9 = -3.679391e + 00$

Tabela 6.5: Resultados para o problema de interface (10 componentes).

A Figura 6.11 descreve a convergência do processo iterativo em todos os casos (2, 4, 6, 8 e 10 componentes).

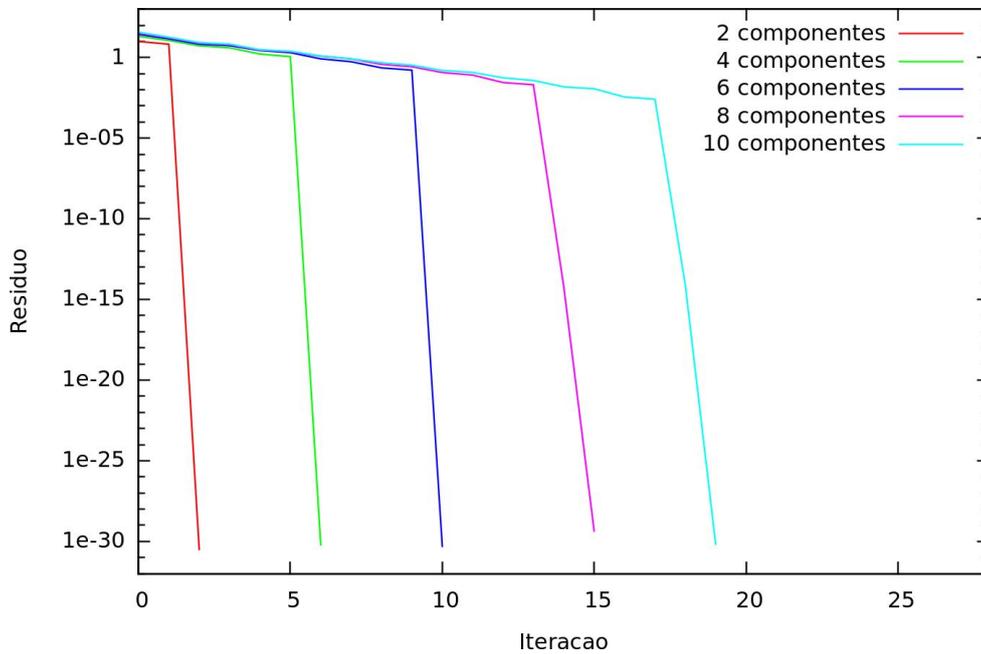


Figura 6.11: Convergência do método GMRES para o problema de conexão em série de componentes 1D e 3D à medida que aumenta o número de elementos do circuito série.

Partindo do princípio que a medida que aumenta a complexidade do problema, a quantidade de equações de interface também aumenta, e dado que a convergência do método é garantida em no máximo  $n$  iterações, com  $n$  o número de dimensão do problema (número de equações de interface), esperava-se uma redução do ponto de vista de iterações à medida em que aumentássemos a quantidade

de componentes. Entretanto nota-se na Figura 6.11 que esta redução não acontece. De fato, é preciso realizar as  $n$  iterações em cada caso para obter a solução do sistema. Porém, ainda sim, devido a sua propriedade de convergência, o GMRES é um método mais robusto e eficiente que qualquer versão do método de Gauss-Seidel que pudéssemos pensar em aplicar (que não teria esta propriedade de terminação finita).

#### **6.4 Sistema 1D-3D com estrutura geométrica semelhante a um trocador de calor**

Neste segundo exemplo nós acoplamos um par de estruturas 3D circulares com vinte e um modelos 1D que representam um conjunto de cilindros que ligam as duas estruturas 3D. Toda a rede de conexão 1D-3D lembra a geometria de um trocador de calor. Na Figura 6.12, o domínio completo é apresentado com a numeração das interfaces de acoplamento (em detalhe a numeração dos componentes 3D). Já a Figura 6.13 descreve a numeração dos componentes 1D com suas respectivas interfaces. A conexão entre os componentes 1D com as estruturas 3D se dá da seguinte forma: o lado direito dos componentes 1D na Figura 6.13 se conecta com o componente da direita na Figura 6.12. Começando pelo componente 1D número 1, este se conecta com a interface número 1 do componente 3D número 22 e com a interface 2 do componente 3D número 23. A medida que avança a numeração dos componentes 1D eles vão se conectando com as sucessivas interfaces do modelo 3D número 22 avançando de esquerda a direita e de cima para baixo. Assim, por exemplo, o componente 1D número 21 se conecta com a interface 41 do modelo 3D número 22 com a interface 42 do modelo 3D número 23.

O problema é o mesmo que o abordado durante todo o trabalho, ou seja, um problema de transferência de calor. Aqui nós consideramos uma fonte de volume constante  $f = 20$  atuando no componente 23 e  $f = 10$  em todos os componentes 1D ( $i = 1, \dots, 21$ ), já para o componente 22 a fonte é nula (ver figura 6.12 e 6.13).

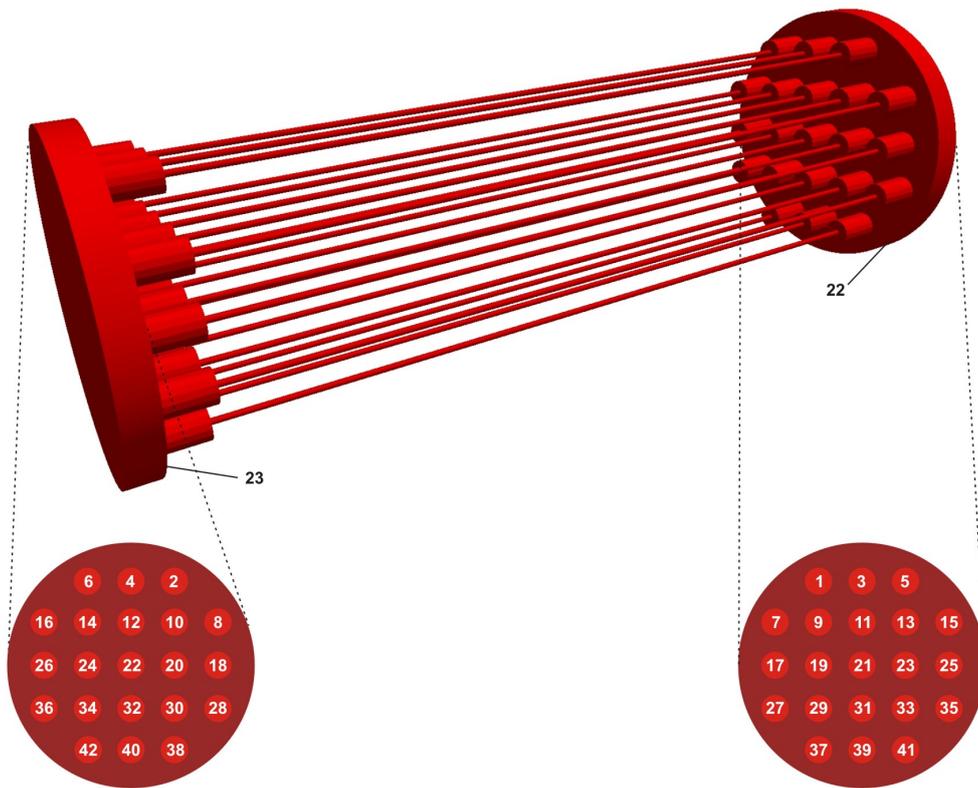


Figura 6.12: Sistema 3D-1D com geometria semelhante a um trocador de calor.

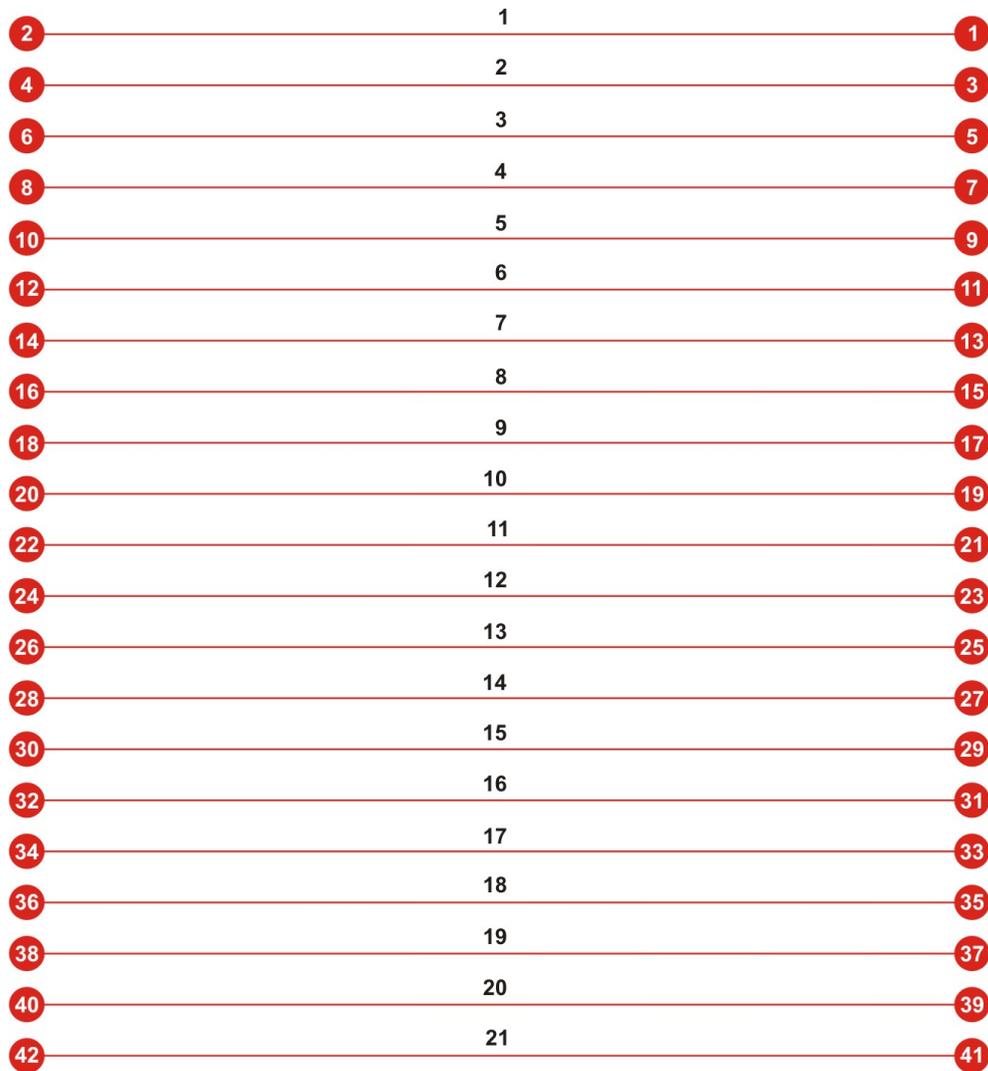


Figura 6.13: Numeração dos componentes 1D e respectivas interfaces.

Assim, o modelo acoplado 3D-1D modelo consiste em 42 interfaces de acoplamento, para as quais duas incógnitas são definidas para cada interface (média da solução e fluxo de calor são as incógnitas da interface), de modo que nosso problema é de dimensão 84. A Figura 6.14 apresenta detalhes da geometria sobre uma parcela do domínio e parte da superfície que corresponde à interface com os submodelos 1D.

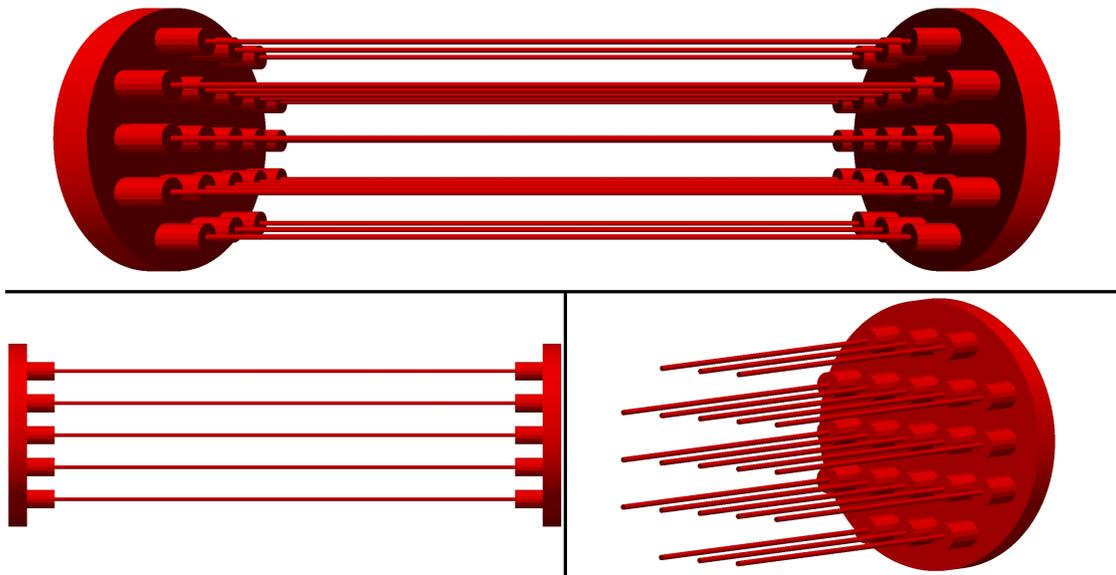


Figura 6.14: Detalhes da estrutura geometrica do trocador de calor.

Como já discutido anteriormente nós consideramos condições de contorno do tipo Neumann para todas as fronteiras e para ambos os modelos. Portanto, as equações de acoplamento são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l}
 u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1, q_2) = 0, \\
 u_2 - \mathcal{U}_1^2(q_1, q_2) = 0, \\
 u_3 - \mathcal{U}_2^1(q_3, q_4) = 0, \\
 u_4 - \mathcal{U}_2^2(q_3, q_4) = 0, \\
 \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 u_{39} - \mathcal{U}_{20}^1(q_{39}, q_{40}) = 0, \\
 u_{40} - \mathcal{U}_{20}^2(q_{39}, q_{40}) = 0, \\
 u_{41} - \mathcal{U}_{21}^1(q_{41}, q_{42}) = 0, \\
 u_{42} - \mathcal{U}_{21}^2(q_{41}, q_{42}) = 0,
 \end{array} \right. \quad (6.6)$$



goritmo após 84 iterações no caso de trabalharmos com aritmética exata, podemos observar que o resíduo é reduzido em 8 ordens de grandeza após realizar aproximadamente 10 iterações, o que é suficiente para garantir bons resultados. Assim, diferentemente do caso da seção anterior, note que o método de GMRES obteve uma boa aproximação da solução com um número muito menor de iterações do que o necessário para construir o correspondente espaço de Krylov, que para este caso seria de dimensão 84, como já referido anteriormente.

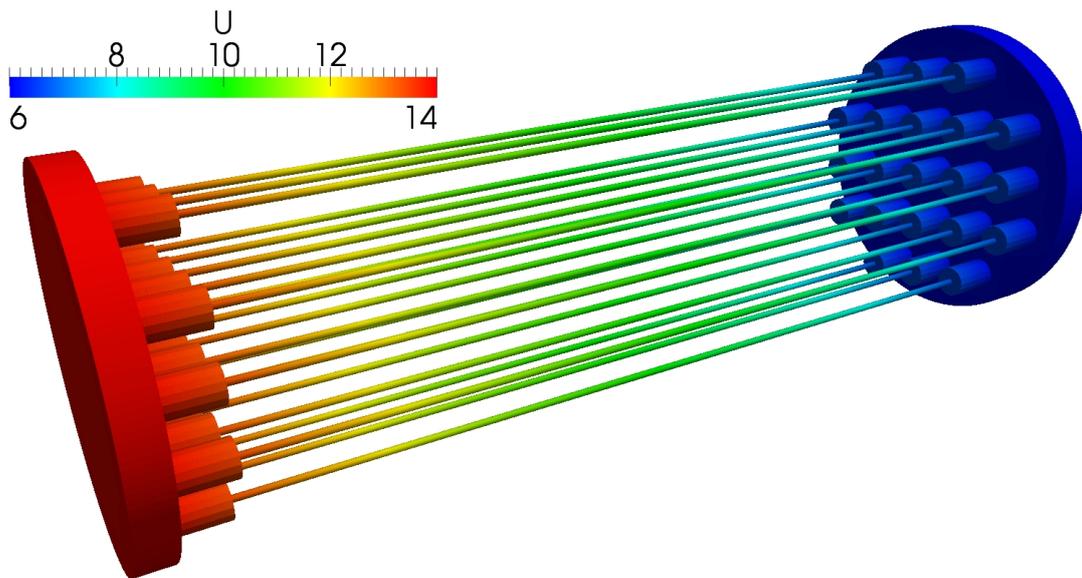


Figura 6.15: Solução do problema de acoplamento no sistema 1D-3D com geometria semelhante a um trocador de calor.

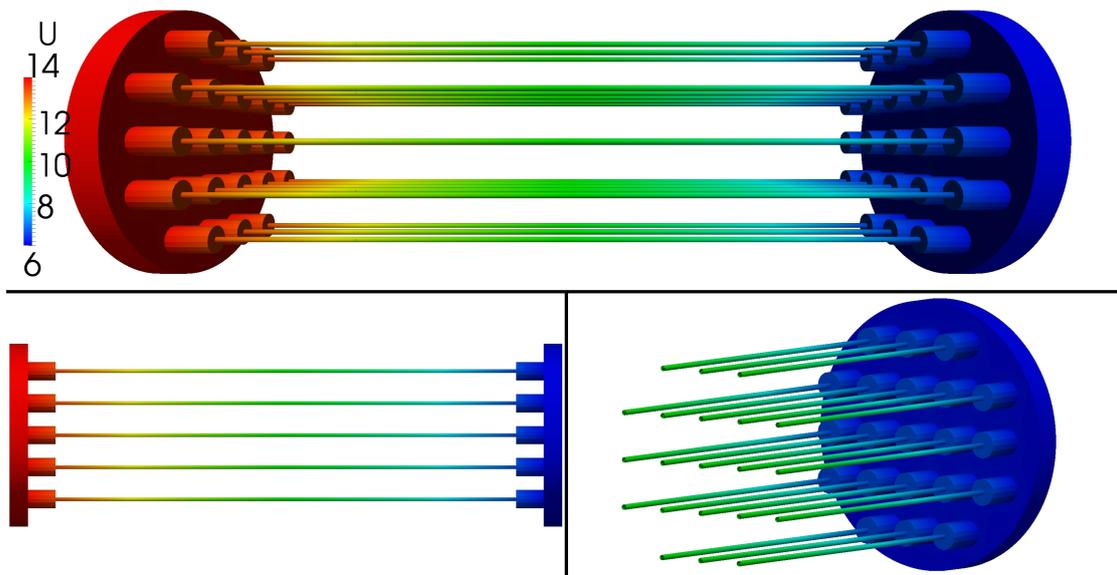


Figura 6.16: Detalhes da solução no sistema 1D-3D semelhante ao trocador de calor.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>	<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 6.653289$	$q_1 = -3.945432$	$u_{22} = 13.310630$	$q_{22} = 3.902718,$
$u_2 = 13.347300$	$q_2 = 3.945932$	$u_{23} = 6.682510$	$q_{23} = -3.910941,$
$u_3 = 6.658788$	$q_3 = -3.938887$	$u_{24} = 13.317820$	$q_{24} = 3.911224,$
$u_4 = 13.341430$	$q_4 = 3.939070$	$u_{25} = 6.659072$	$q_{25} = -3.938443,$
$u_5 = 6.652623$	$q_5 = -3.945997$	$u_{26} = 13.340480$	$q_{26} = 3.938067,$
$u_6 = 13.346630$	$q_6 = 3.945367$	$u_{27} = 6.653380$	$q_{27} = -3.945312,$
$u_7 = 6.652903$	$q_7 = -3.945700$	$u_{28} = 13.347140$	$q_{28} = 3.945751,$
$u_8 = 13.346560$	$q_8 = 3.945245$	$u_{29} = 6.674444$	$q_{29} = -3.920366,$
$u_9 = 6.674602$	$q_9 = -3.920257$	$u_{30} = 13.325380$	$q_{30} = 3.920213,$
$u_{10} = 13.325690$	$q_{10} = 3.920503$	$u_{31} = 6.682297$	$q_{31} = -3.911172,$
$u_{11} = 6.682141$	$q_{11} = -3.911356$	$u_{32} = 13.317920$	$q_{32} = 3.911353,$
$u_{12} = 13.318070$	$q_{12} = 3.911537$	$u_{33} = 6.674545$	$q_{33} = -3.920279,$
$u_{13} = 6.674233$	$q_{13} = -3.920570$	$u_{34} = 13.325480$	$q_{34} = 3.920299,$
$u_{14} = 13.325320$	$q_{14} = 3.920191$	$u_{35} = 6.652787$	$q_{35} = -3.945815,$
$u_{15} = 6.653363$	$q_{15} = -3.945310$	$u_{36} = 13.346540$	$q_{36} = 3.945247,$
$u_{16} = 13.347020$	$q_{16} = 3.945636$	$u_{37} = 6.653737$	$q_{37} = -3.944968,$
$u_{17} = 6.659732$	$q_{17} = -3.937883$	$u_{38} = 13.347250$	$q_{38} = 3.945804,$
$u_{18} = 13.341140$	$q_{18} = 3.938627$	$u_{39} = 6.659339$	$q_{39} = -3.938238,$
$u_{19} = 6.682390$	$q_{19} = -3.911043$	$u_{40} = 13.340880$	$q_{40} = 3.938421,$
$u_{20} = 13.317700$	$q_{20} = 3.911122$	$u_{41} = 6.652676$	$q_{41} = -3.945868,$
$u_{21} = 6.689874$	$q_{21} = -3.902289$	$u_{42} = 13.346190$	$q_{42} = 3.944903 ,$

Tabela 6.6: Resultados para o problema em sistema 1D-3D com geometria semelhante a um trocador de calor.

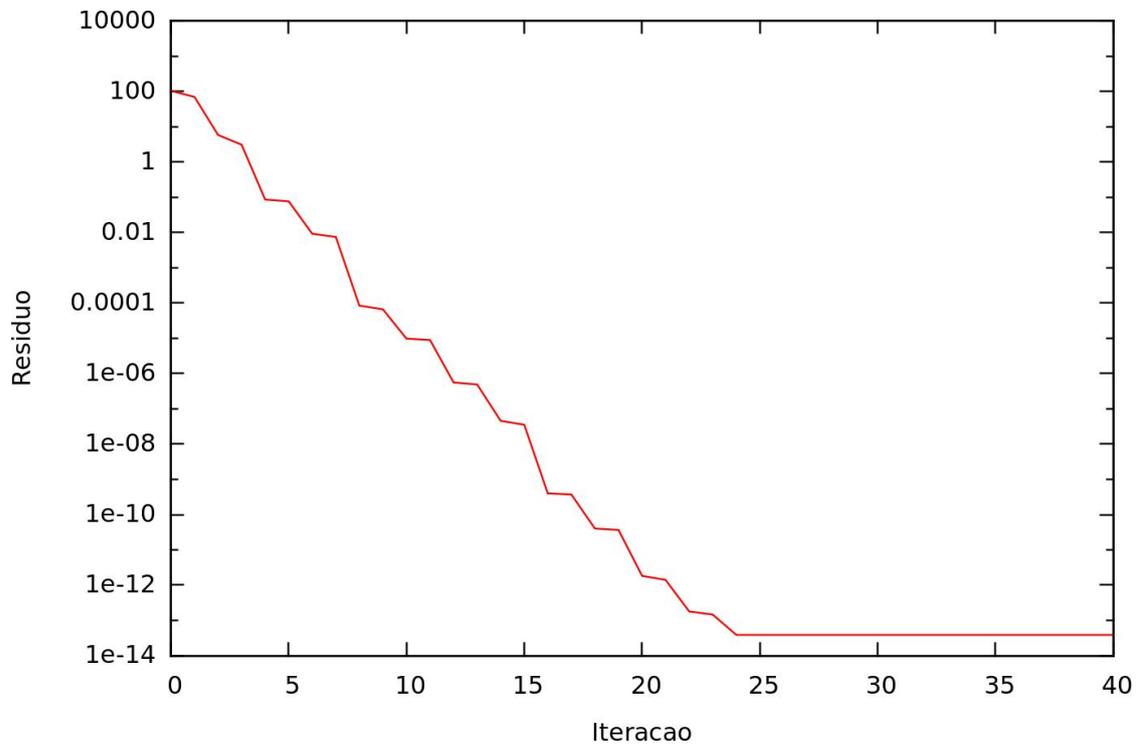


Figura 6.17: Convergência do método GMRES para o sistema 1D-3D semelhante ao trocador de calor.

### 6.5 Sistema 1D-3D com estrutura geométrica semelhante à ponte de Brooklyn

Este terceiro exemplo é uma situação ainda mais complexa em termos da conexão entre as interfaces de acoplamento do problema. Aqui nós utilizamos um padrão geométrico que se assemelha à ponte de Brooklyn (ou a qualquer outra ponte similar) e, vamos resolver um problema de transferência de calor, como feito ao longo do trabalho. Note que não existe relevância do ponto de vista da física do problema, já que estamos resolvendo uma equação de reação-difusão em uma ponte! De modo que nos interessa apenas utilizar a estrutura geométrica de uma ponte através da substituição de algumas partes do modelo por representações 3D e 1D. O domínio empregando modelos heterogêneos é mostrado na Figura 6.18, onde pode ser visto que as “pistas” e os “cabos extensores” da ponte foram substituídos por componentes 1D, enquanto que os “arcos” e a “parte central” são modelados através de modelos 3D.

Para este problema condições de contorno de Dirichlet homogêneas ( $u = 0$ ) são impostas nas três extremidades inferiores dos componentes 3D que modelam os arcos. Já para as extremidades dos componentes 1D (aquelas que não fazem acoplamento com modelos 3D) são aplicadas condições de contorno do tipo Neumann ( $q = 10$ ) (ver Figura 6.18). A fonte de calor é de valor  $f = 50$  nos domínios correspondentes aos componentes 3D e nula para os 1D. Finalmente, na Figura 6.18 está indicada a numeração dos componentes e das interfaces (veja a legenda na mesma figura).

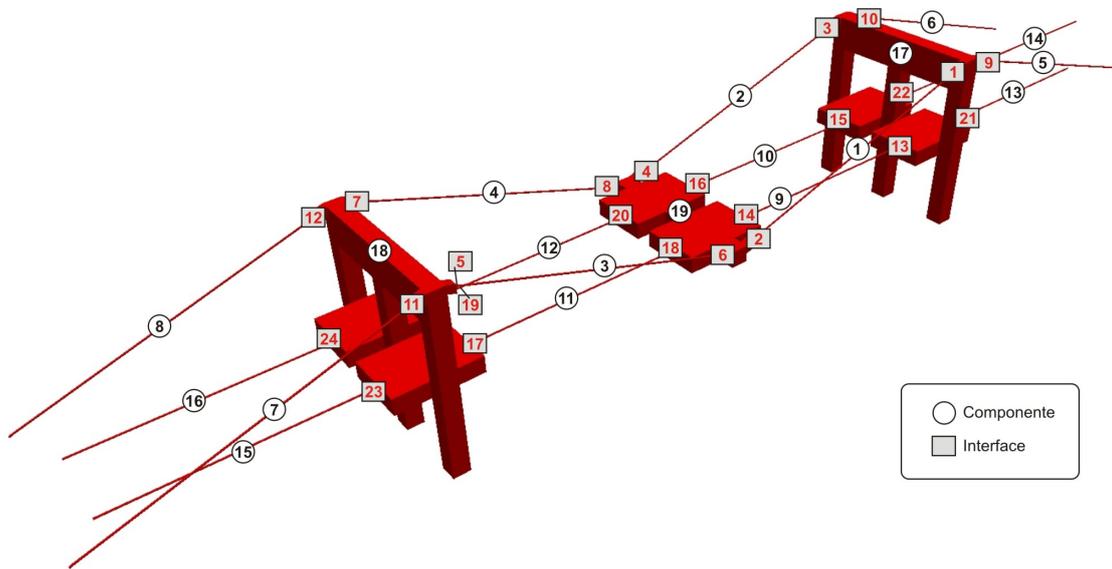


Figura 6.18: Sistema 1D-3D usando a geometria de uma ponte.

Particularmente, a Figura 6.19 apresenta detalhes da parte interna da estrutura, assim pode-se observar as geometrias das interfaces de acoplamento e ver com mais detalhe toda a estrutura utilizada nos cálculos.

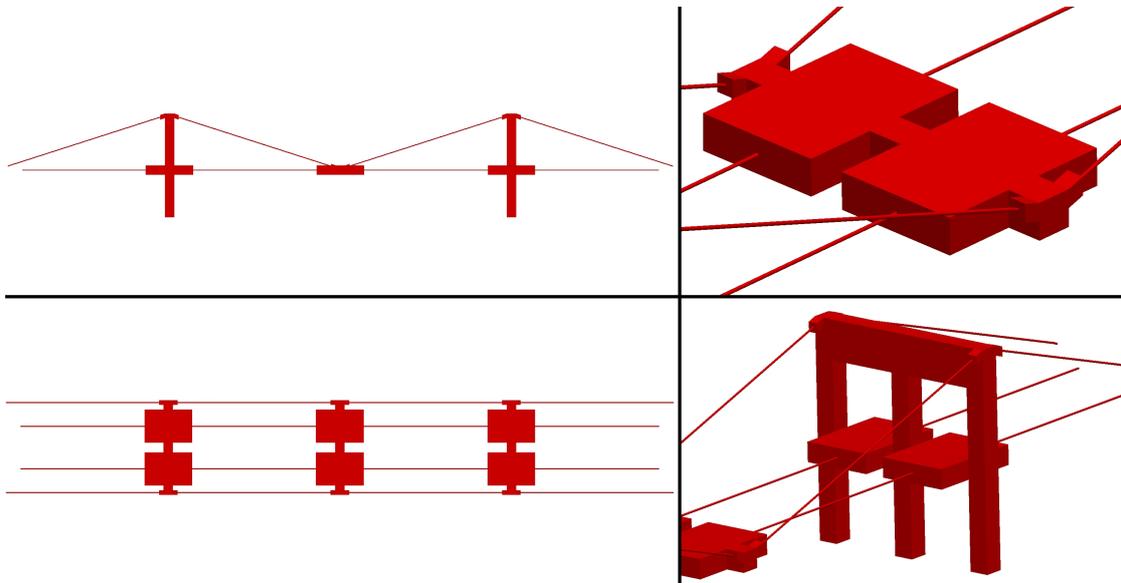


Figura 6.19: Detalhes da estrutura da ponte.

O problema é resolvido assim como os outros considerando-se todas as interfaces com condições de contorno do tipo Neumann. O acoplamento 3D-1D consiste em 24 interfaces de acoplamento, como mostra a Figura 6.18 de modo que tem dimensão 48.

Como no exemplo do Capítulo 4, o passo 1 da estratégia proposta foi realizada definindo duas variáveis (denotada solução e fluxo) em cada interface de acoplamento,  $q_i$ 's e  $u_i$ 's,  $i = 1, \dots, 24$ . No passo 2 escolhemos condições de contorno do tipo Neumann para a interface de acoplamento do subdomínio. O passo seguinte consiste em montar o sistema de equações obtido através das escolhas feitas nos passos 1 e 2. Este sistema de equações é dado como segue.

$$\left\{ \begin{array}{l}
u_1 - \mathcal{U}_1^1(q_1, q_2) = 0, \\
u_2 - \mathcal{U}_1^2(q_1, q_2) = 0, \\
u_3 - \mathcal{U}_2^1(q_3, q_4) = 0, \\
\quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
u_9 - \mathcal{U}_5^1(q_9) = 0, \\
u_{10} - \mathcal{U}_6^1(q_{10}) = 0, \\
u_{11} - \mathcal{U}_7^1(q_{11}) = 0, \\
u_{12} - \mathcal{U}_8^1(q_{12}) = 0, \\
u_{13} - \mathcal{U}_9^1(q_{13}, q_{14}) = 0, \\
u_{14} - \mathcal{U}_9^2(q_{13}, q_{14}) = 0, \\
\quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
u_{19} - \mathcal{U}_{12}^1(q_{19}, q_{20}) = 0, \\
u_{20} - \mathcal{U}_{12}^2(q_{19}, q_{20}) = 0, \\
u_{21} - \mathcal{U}_{13}^1(q_{21}) = 0, \\
u_{22} - \mathcal{U}_{14}^1(q_{22}) = 0, \\
u_{23} - \mathcal{U}_{15}^1(q_{23}) = 0, \\
u_{24} - \mathcal{U}_{16}^1(q_{24}) = 0,
\end{array} \right. \tag{6.8}$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
u_1 - \mathcal{U}_{17}^1(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_3 - \mathcal{U}_{17}^2(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_9 - \mathcal{U}_{17}^3(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_{10} - \mathcal{U}_{17}^4(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_{13} - \mathcal{U}_{17}^5(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_{15} - \mathcal{U}_{17}^6(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_{21} - \mathcal{U}_{17}^7(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_{22} - \mathcal{U}_{17}^8(q_1, q_3, q_9, q_{10}, q_{13}, q_{15}, q_{21}, q_{22}) = 0, \\
u_5 - \mathcal{U}_{18}^1(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_7 - \mathcal{U}_{18}^2(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{11} - \mathcal{U}_{18}^3(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{12} - \mathcal{U}_{18}^4(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{17} - \mathcal{U}_{18}^5(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{19} - \mathcal{U}_{18}^6(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{23} - \mathcal{U}_{18}^7(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_{24} - \mathcal{U}_{18}^8(q_5, q_7, q_{11}, q_{12}, q_{17}, q_{19}, q_{23}, q_{24}) = 0, \\
u_2 - \mathcal{U}_{19}^1(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_4 - \mathcal{U}_{19}^2(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_6 - \mathcal{U}_{19}^3(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_8 - \mathcal{U}_{19}^4(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_{14} - \mathcal{U}_{19}^5(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_{16} - \mathcal{U}_{19}^6(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_{18} - \mathcal{U}_{19}^7(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0, \\
u_{20} - \mathcal{U}_{19}^8(q_2, q_4, q_6, q_8, q_{14}, q_{16}, q_{18}, q_{20}) = 0,
\end{array} \right. \tag{6.9}$$

Aqui, os componentes 1D possuem 84 elementos (85 nós) nos “cabos extensores” e 65 elementos (64 nós) para as “pistas”. Os componentes 3D por sua vez, possuem 82.550 elementos com 17.201 nós, nos componentes que representam os “arcos” e 38.706 elementos com 7.855 para o componente central. Para completar o

processo, no passo 4, como em todos os exemplos neste trabalho, a versão livre de matriz do algoritmo GMRES foi empregada para a resolução do sistema. Portanto, o procedimento garante a convergência para a solução que se poderia obter com uma abordagem monolítica, após 48 iterações.

Os resultados da simulação são representados na Figura 6.20 e os valores das incógnitas nas interfaces de acoplamento são apresentados na Tabela 6.7. Um detalhe da solução também está incluída na Figura 6.21. O histórico de convergência do procedimento iterativo é apresentado na Figura 6.22, em escala logarítmica. Neste caso, o resíduo é reduzido 8 ordens de magnitude ao completar 10 iterações, alcançando resultados satisfatórios, sem a necessidade de realizar todas as 48 iterações. Podemos notar que aqui também o método se comportou muito bem, não precisando construir todo o subespaço de Krylov para ter uma boa aproximação da solução. Para o sistema cuja conexão apresenta uma sequencialidade na disposição dos componentes (como o exemplo um circuito série apresentado na Seção 6.3) o método de GMRES convergiu somente após construir por completo o espaço de Krylov de maior dimensão, já para este exemplo e para o exemplo do trocador de calor apresentado na Seção 6.4 onde o problema possui conectividade mais complexa e geral, as propriedades de convergência são melhores, como pode ser visto.

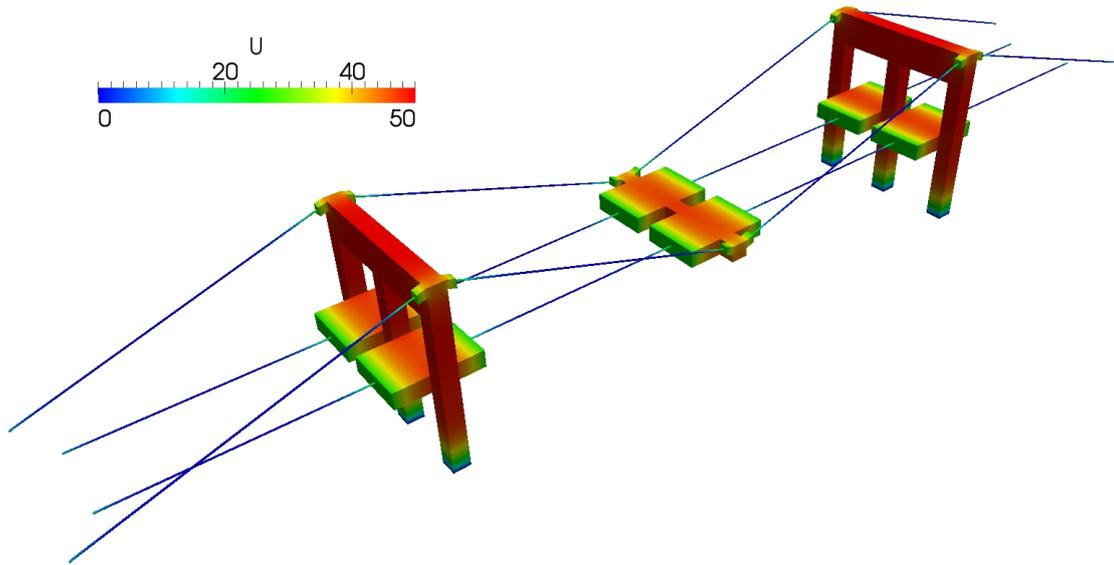


Figura 6.20: Solução do sistema 3D-1D com estrutura de uma ponte.

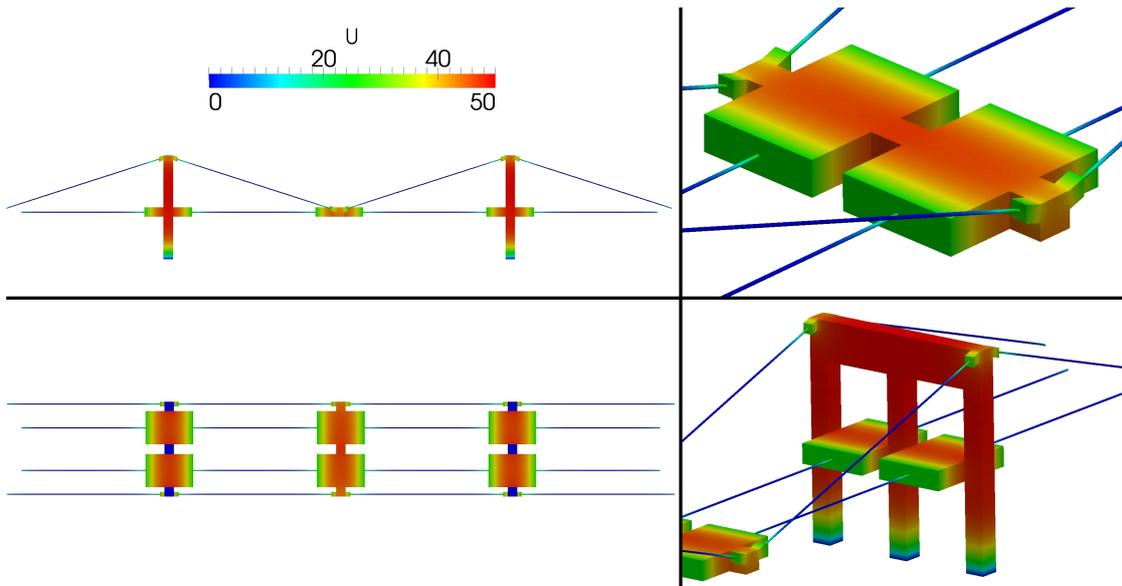


Figura 6.21: Detalhes da solução.

<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>	<i>Valor médio</i>	<i>Fluxo</i>
$u_1 = 28.735400$	$q_1 = 28.783640$	$u_{13} = 24.914060$	$q_{13} = 24.955440$
$u_2 = 27.100480$	$q_2 = 27.145970$	$u_{14} = 24.821900$	$q_{14} = 24.863130$
$u_3 = 28.746780$	$q_3 = 28.795030$	$u_{15} = 24.913630$	$q_{15} = 24.955010$
$u_4 = 27.092520$	$q_4 = 27.137990$	$u_{16} = 24.821640$	$q_{16} = 24.862860$
$u_5 = 28.698670$	$q_5 = 28.746840$	$u_{17} = 24.915530$	$q_{17} = 24.956910$
$u_6 = 27.106820$	$q_6 = 27.152320$	$u_{18} = 24.821050$	$q_{18} = 24.862270$
$u_7 = 28.703530$	$q_7 = 28.751720$	$u_{19} = 24.914530$	$q_{19} = 24.955900$
$u_8 = 27.111210$	$q_8 = 27.156720$	$u_{20} = 24.821280$	$q_{20} = 24.862510$
$u_9 = 28.698660$	$q_9 = 28.746840$	$u_{21} = 24.915490$	$q_{21} = 24.956940$
$u_{10} = 28.703530$	$q_{10} = 28.751720$	$u_{22} = 24.914490$	$q_{22} = 24.955940$
$u_{11} = 28.735400$	$q_{11} = 28.783640$	$u_{23} = 24.914030$	$q_{23} = 24.955470$
$u_{12} = 28.746780$	$q_{12} = 28.795030$	$u_{24} = 24.913600$	$q_{24} = 24.955040$

Tabela 6.7: Resultado para o problema com geometria de ponte.

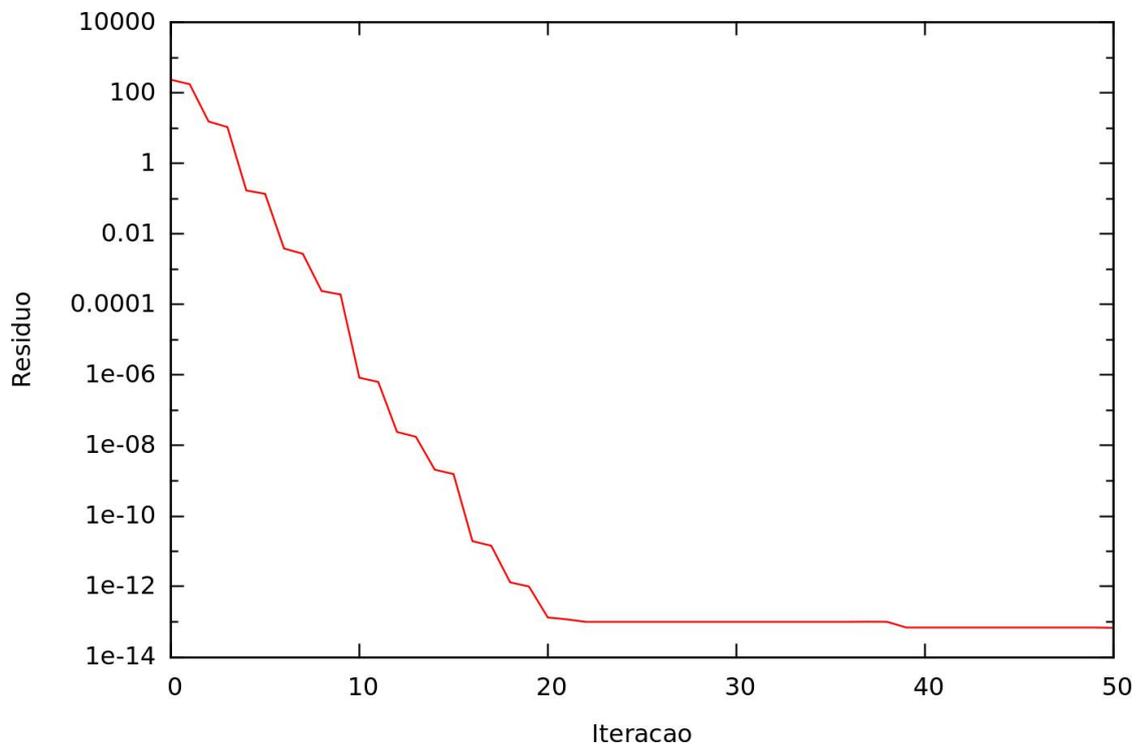


Figura 6.22: Convergência do método GMRES para o problema com geometria de ponte.

## Conclusões

Neste trabalho foram estudados primeiramente os fundamentos teóricos para formular o problema de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Para isto se empregou a formulação variacional do problema para o caso particular de um problema de transferência de calor com fenômenos de difusão e reação. Como uma das conclusões principais, deve ser salientada a apresentação de forma sistemática de conceitos que permitem tratar com relativa facilidade e clareza o acoplamento de modelos desta natureza. A vantagem nesta forma de entender este problema reside em enxergar o acoplamento entre os modelos como um problema no qual há duas, ou mais, cinemáticas presentes que a priori não são compatíveis, as quais devem ser compatibilizadas através de alguma restrição.

Por outro lado, nossa motivação foi a de lidar com códigos numéricos de solução aproximada no sentido de caixas pretas, sem a necessidade de acesso completo aos mesmos, ou seja, utilizá-los adequadamente para resolver uma nova classe de problemas. Ao mesmo tempo, viu-se que as características do problema algébrico resultante do acoplamento entre modelos heterogêneos resultava em alterações significativas no código existente disponível. Isso motivou o estudo de técnicas de decomposição de domínios. O procedimento é baseado na simples ideia de reformular o problema acoplado de tal modo que o método de decomposição de domínio torna-se nada mais do que a aplicação de um algoritmo iterativo. Neste contexto, através de análises simplificadas, foi identificado que o desenvolvimento de técnicas de decomposição empregando informação de Neumann sobre as fronteiras entre os modelos apresenta um comportamento mais estável em função das características geométricas dos modelos.

Assim sendo, através da sucessiva resolução de modelos homogêneos (mais simples de serem resolvidos e para os quais dispomos de códigos numéricos), com um tipo de condições de contorno determinado pelo usuário (Neumann sendo a melhor escolha, como dito acima), e com valores destas condições de contorno escolhidas pelo método iterativo, é possível obter a solução do sistema acoplado. Assim, viu-se que qualquer método iterativo que aceite uma forma livre de matriz é candidato para resolver o problema acoplado. Especial ênfase deve ser colocada nos métodos com a propriedade de terminação finita como BICGSTAB e GMRES. Este último, mais barato e de uso mais estendido entre a comunidade, tem demonstrado um comportamento satisfatório nos exemplos relatados. Em particular, para sistemas cuja conexão apresenta uma sequencialidade na disposição dos componentes (por exemplo um circuito série) o método de GMRES apresenta convergência somente após construir por completo o espaço de Krylov de maior dimensão, enquanto que em problemas cuja conectividade é mais complexa e geral, o método de GMRES apresenta melhores propriedades de convergência, podendo obter uma boa aproximação da solução com um número de iterações muito menor que o necessário para construir o correspondente espaço de Krylov de maior dimensão.

Como já discutido, as situações mais favoráveis para o uso desta classe de modelos são aquelas nas quais identificam-se, dentro de um sistema, características particulares factíveis de serem consideradas mediante diferentes representações matemáticas. Vale a pena ressaltar que isto é algo muito comum de ser encontrado em muitas áreas da engenharia. Com respeito às aplicações, tanto na mecânica dos sólidos como na mecânica dos fluidos, os modelos dimensionalmente heterogêneos são muito promissores e espera-se que adquiram um papel ainda mais relevante. Em particular, em função das aplicações na modelagem do sistema cardiovascular o emprego de modelos acoplados permite atacar novos desafios. Exemplo disto é a constante busca da comunidade científica por melhorar as representações matemáticas existentes, as quais passam a ter cada vez mais, uma maior relevân-

cia dentro da comunidade médica objetivando contribuir para o entendimento dos diferentes fenômenos físicos que acontecem no sistema cardiovascular. Embora tenha havido uma ampla tendência da comunidade de pesquisadores nesta direção, o campo encontra-se ainda em aberto, apresentando constantemente novos desafios, parte dos quais pode ser abordada com sucesso através de técnicas como as aqui apresentadas. Estas últimas linhas constituem a perspectiva de pesquisa futura em termos de aplicação de estratégias como a estudada no presente trabalho.

## Referências Bibliográficas

- M. Aufranc. Numerical study of a junction between a three-dimensional elastic structure and a plate. **Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.**, 74:207–222, 1989.
- A.P. Avolio. Multi-branched model of the human arterial system. **Med. Biol. Eng. Comput.**, 18:709–718, 1980.
- M. Benzi, G.H. Golub, e J. Liesen. **Numerical solution of saddle point problems**. Cambridge University Press, 2005.
- M. Bernadou e A. Cubier. Numerical analysis of junctions between thin shells. part I: Continuous problems. **Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.**, 161:349–363, 1998a.
- M. Bernadou e A. Cubier. Numerical analysis of junctions between thin shells. II: Aproximation by finite element methods. **Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.**, 161:365–387, 1998b.
- M. Bernadou, S. Fayolle, e F. Léné. Numerical analysis of junctions between thin plates. **Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.**, 74:307–326, 1989.
- P.J. Blanco. **Incompatibilidade Cinemática , Imersão de Domínios e Modelagem Constitutiva de Multiescala: Nexo com a Modelagem do Sistema Cardiovascular**. Tese de Doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica / Brasil, 2008.
- P.J. Blanco, R.A Feijoó, e S.A. Urquiza. A variational approach for coupling

- kinematically incompatible structural models. **Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.**, 197:1577–1602, 2008.
- P.J. Blanco, J.S. Leiva, R.A. Feijóo, e G.C. Buscaglia. Black-box decomposition approach for computational hemodynamics: one-dimensional models. **Comput. Methods. Appl. Mech. Engng.**, 200:1389–1405, 2011.
- P.J. Blanco, M.R. Pivello, S.A. Urquiza, e R.A. Feijóo. On the potentialities of 3D-1D coupled models in hemodynamics simulations. **J. Biomech.**, 42:919–930, 2009.
- P.J. Blanco, S.A. Urquiza, e R.A. Feijóo. Assessing the influence of heart rate in local hemodynamics through coupled 3D-1D-0D models. **Int. J. Numer. Meth. Engng.**, 26:890–903, 2010.
- R. Botnar, G. Rappitsch, M.B. Scheidegger, D. Liepsch, K. Perktold, e P. Boesiger. Hemodynamics in the carotid artery bifurcation: a comparison between numerical simulations and in vitro MRI measurements. **J. Biomech.**, 33:137–144, 2000.
- F. Brezzi e M. Fortin. **Mixed and hybrid finite element methods**. Springer-Verlag, 1991.
- H. Brézis. **Análisis funcional teoría y aplicaciones**. Alianza Editorial, 1984.
- J.R. Cebal, M.A. Castro, S. Appanaboyina, C.M. Putman, D. Millan, e A.F. Frangi. Efficient pipeline for image-based patient-specific analysis of cerebral aneurysm hemodynamics: technique and sensitivity. **IEEE Trans. Med. Imaging.**, 24:457–467, 2005.
- P.G. Ciarlet e H. Le Dret. Junctions between three-dimensional and two-dimensional linearly elastic structures. **J. Math. Pures Appl.**, 68:261–295, 1989.

- L. Formaggia, J.F Gerbeau, F. Nobile, e A. Quarteroni. On the coupling of 3d and 1d navier-stokes equations for flow problems in compliant vessels. **Comput. Methods Appl. Mech. Eng.**, 191:561–582, 2001.
- L. Formaggia, J.F Gerbeau, F. Nobile, e A. Quarteroni. Numerical treatment of defective boundary conditions for the navier-stokes equations. **J. Numer. Anal.**, 40:376–401, 2002.
- L. Formaggia, D. Lamponi, M. Tuveri, e A. Veneziani. Numerical modeling of 1D arterial networks coupled with a lumped parameters description of the heart. **Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering**, 9: 273–288, 2006.
- L. Formaggia, F. Nobile, A. Quarteroni, e A. Veneziani. Multiscale modelling of the circulatory system: a preliminary analysis. **Comput. Visual. Sci.**, 2:75–83, 1999.
- L. Formaggia, A. Veneziani, e C. Vergara. A new approach to numerical solution of defective boundary value problems in incompressible fluid dynamics. **SIAM J. Numer. Anal.**, 46:2768–2794, 2008.
- L. Formaggia, A. Veneziani, e C. Vergara. Flow rate boundary problems for a incompressible fluid deformable domains: Formulations and solution methods. **Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.**, 199:677–688, 2010.
- T.J.R. Hughes. **A Study of the one-dimensional theory of arterial pulse propagation**. Tese de Doutorado, University of California/Berkeley, 1974.
- H.J. Kim, I.E. Vignon-Clementel, C.A. Figueroa, J.F. Ladissa, K.E. Jansen, J.A. Feinstein, e C.A. Taylor. On coupling a lumped parameter heart model and a three-dimensional finite element aorta model. **Annals of Biomedical Engineering**, 37:2153–2169, 2009.
- E. Lanzarone, P. Liani, G. Baselli, e M.L. Constantino. Model of arterial tree and

- peripheral control for the study of physiological and assisted circulation. **Med. Eng. Phys.**, 29:542–555, 2007.
- J.S. Leiva. **In preparation.** Tese de Doutorado, Instituto Balseiro/Bariloche, 2010.
- J.S. Leiva, P.J. Blanco, e G.C. Buscaglia. Iterative strong coupling of dimensionally heterogeneous models. **Int. J. Numer. Meth. Engng.**, 81:1558–1580, 2010.
- J.S. Leiva, P.J. Blanco, e G.C. Buscaglia. Partitioned analysis for dimensionally-heterogeneous hydraulic networks. Submetido a Multiscale Modeling and Simulation: A SIAM Interdisciplinary Journal, 2011.
- P. Ma, X. Li, e D.N. Ku. Convective mass transfer at the carotid bifurcation. **J. Biomech.**, 30:565–571, 1997.
- T.P.A. Mathew. **Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations.** Springer, 2008.
- S.A. Nazarov. Junctions of singularly degenerating domains with different limit dimensions I. **J. Math. Sci.**, 80:1989–2034, 1996.
- S.A. Nazarov. Junctions of singularly degenerating domains with different limit dimensions II. **J. Math. Sci.**, 97:4085–4108, 1999.
- M.S. Olufsen. **Modeling the arterial system with reference to an anesthesia simulator.** Tese de Doutorado, Roskilde University, 1998.
- K. Perktold, M. Hofer, G. Rappitsch, M. Loew, B.D. Kuban, e M.H. Friedman. Validated computation of physiologic flow in a realistic coronary artery branch. **J. Biomech.**, 31:217–228, 1997.
- W.F. Pritchard, P.F. Davies, Z. Derafshi, D.C. Polacek, R. Tsao, R.O. Dull, S.A. Jones, e D.P. Giddens. Effects of wall shear stress and fluid recirculation on the localization of circulating of monocytes in a three-dimensional flow model. **J. Biomech.**, 28:1459–1469, 1995.

- A. Quarteroni, R. Sacco, e F. Saleri. **Numerical Mathematics**. Springer, 1991.
- A. Quarteroni e A. Valli. **Numerical Approximation of partial Differential Equations**. Springer, 1994.
- A. Quarteroni e A. Valli. **Domain Decomposition Methods for the Differential Equations**. Oxford University Press, 1999.
- M.P. Spencer e A.B. Deninson. The square-wave electro-magnetic flowmeter. theory of operation and design of magnetic probes for clinical and experimental applications. **I.R.E. Trans, Med. Electron.**, 6:220–228, 1959.
- J.C. Stettler, P. Niederer, e M. Anliker. Theoretical analysis of arterial hemodynamics including the influence of bifurcations, part i. **Ann. Biomed. Eng.**, 9: 145–164, 1981.
- D. Tang, C. Yang, H Walker, S. Kobayashi, e D.N Ku. Simulating cyclic artery compression using a 3D unsteady model with fluid-structure interactions. **Comput. Struct.**, 80:1651–1665, 2002.
- C.A. Taylor, T.J.R Hughes, e C.K. Zarins. Finite element modeling of blood flow in arteries. **Comput. Methods Appl. Mech. Eng.**, 158:155–196, 1998.
- C. Tu, M. Deville, L. Dheur, e L. Vanderschuren. Finite element simulation of pulsatile flow through arterial stenosis. **J. Biomech.**, 25:1141–1152, 1992.
- S.A. Urquiza, P.J. Blanco, M.J. Vénere, e R.A Feijoó. Multidimensional modelling for the carotid artery blood flow. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, 195:4002–4017, 2006.
- A. Veneziani e C. Vergara. Flow rate defective boundary conditions in hemodynamics simulations. **Int. J. Num. Meth. Fluids.**, 47:803–816, 2005.
- A. Veneziani e C. Vergara. An approximate method for solving incompressible navier-stokes problems with flow rate conditions. **Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.**, 196:1685–1700, 2007.

I.E. Vignon-Clementel, C.A. Figueroa, K.E. Jansen, e C.A. Taylor. Outflow boundary conditions for three-dimensional finite element modeling of blood flow and pressure in arteries. **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, 195:3776–3796, 2006.