

Afonso Alborghetti Londero

**DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DE UM  
*FRAMEWORK* PARA SOLUÇÃO DE EDPS  
PARABÓLICAS E ELÍPTICAS COM MALHAS NÃO  
ALINHADAS**

Dissertação submetida ao Programa  
de Pós-Graduação em Engenharia  
Química para a obtenção do Grau de  
Mestre em Engenharia Química.  
Orientador: Prof. Dr. Luismar  
Marques Porto  
Coorientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>a</sup> Gunilla  
Kreiss

Florianópolis

2015

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Londero, Afonso Alborghetti

Desenvolvimento e Implementação de um Framework para Solução de EDPs Parabólicas e Elípticas com Malhas Não Alinhadas / Afonso Alborghetti Londero ; orientador, Luismar Marques Porto ; coorientadora, Gunilla Kreiss. - Florianópolis, SC, 2015.

111 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Inclui referências

1. Engenharia Química. 2. Método de Elementos Finitos. 3. Método de Elementos Cortados. 4. Reação-Difusão. I. Porto, Luismar Marques. II. Kreiss, Gunilla. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós Graduação em Engenharia Química. IV. Título.

## AGRADECIMENTOS

Durante o desenvolvimento desse projeto eu me aventurei em uma nova área para mim que foi e tem sido extremamente interessante e desafiadora. Por isso eu agradeço à minha coorientadora, Professora Gunilla Kreiss, da Divisão de Computação Científica da Universidade de Uppsala (Suécia), que me introduziu ao mundo dos métodos de elementos finitos com malhas não-alinhadas. Com a sua orientação e críticas positivas ao longo desses anos eu aprendi muito mais do que eu podia imaginar. Também da Universidade de Uppsala, eu não posso agradecer o suficiente a Simon Sticko, sem o qual esse projeto não teria ido tão longe. Os seus conhecimentos em análise numérica, computação científica e técnicas de programação foram essenciais para o desenvolvimento desse projeto desde o primeiro dia. Os genuínos interesses de Gunilla e Simon no meu progresso me motivaram a trabalhar tão intensamente quanto eu pude.

Eu gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos ao Professor Andreas Hellander, também da Universidade de Uppsala, pelas suas sugestões e suporte no desenvolvimento de problemas de reação e difusão. Agradeço também ao Professor Per Lötstedt pelo seu papel como revisor desse trabalho. Estendo meus agradecimentos à toda Universidade de Uppsala e seu pessoal pelo suporte e ao povo sueco pelo acolhimento nesse período de intercâmbio.

Do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos da Universidade Federal de Santa Catarina, eu agradeço profundamente ao meu orientador, Professor Luismar Porto, pelos seus conselhos e suporte no desenvolvimento desse trabalho e em todo meu período de intercâmbio. Também da UFSC, agradeço à equipe do Laboratório de Tecnologias Integradas, especialmente à Júlia de Vasconcellos Castro, parceira de pesquisa desde que eu entrei na academia; e ao Alencar Cabral, por toda sua ajuda no início do meu projeto na utilização de ferramentas computacionais.

Eu gostaria de agradecer aos meus pais, Evandro e Sandra, e meu irmão Alexandre, por me suportarem incondicionalmente durante esse período, aguentando a distância de mais um ano de estudos no exterior. Todo o seu apoio emocional e financeiro foram fundamentais para toda minha carreira.

Eu agradeço imensamente à minha namorada Amanda Floriani, minha amiga e parceira eterna, por tolerar comigo todas as tensões da pós-graduação e da distância, por me motivar a ir além no meu trabalho sempre que eu precisei. Eu a agradeço por todas nossas longas

conversas que fizeram meu dias muito melhores, por me visitar e fazer minha experiência na Europa ser realmente inesquecível.

Finalmente, agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro no meu período de mestrado na UFSC e ao programa de intercâmbio Erasmus por me proporcionar a oportunidade do programa de intercâmbio na Suécia, com o suporte financeiro que foi essencial para meus estudos.

[...] the awesome splendor of the universe is much easier to deal with if you think of it as a series of small chunks.

(Terry Pratchett, *Mort*)



## RESUMO

A modelagem de problemas onde a fronteira se modifica constantemente com o tempo pode se tornar desafiadora à medida que a malha tenha a necessidade de se adaptar constantemente. Nesse contexto, métodos computacionais onde a malha não se conforma com a fronteira são de grande interesse. Este trabalho propõe uma abordagem com o Método de Elementos Cortados para resolver equações diferenciais parciais utilizando malhas não alinhadas com o Método de Elementos Finitos. Como resultado da implementação proposta, foi desenvolvido o programa *fem-cut-cell-3D*, baseado na implementação em elementos finitos pela biblioteca deal.ii. A fim de avaliar matematicamente a implementação, quatro experimentos numéricos foram propostos: o problema clássico de Poisson, em duas e três dimensões; o problema de difusão de Laplace-Beltrami, em duas dimensões; e um caso transiente em duas dimensões de reação-difusão. Efeitos de estabilização da matriz de rigidez foram estudados para o problema de Poisson e Laplace-Beltrami em 2D, e a dependência teórica do número condicional com o tamanho dos elementos foi confirmada. Além disso, um parâmetro ótimo de estabilização foi definido. Taxas de convergência foram calculadas para os três primeiros casos e a estimativa teórica foi confirmada.

**Palavras-chave:** Método de Elementos Finitos. Método de Elementos Cortados. Reação-Difusão.





## ABSTRACT

The modeling of problems where the boundary changes significantly over time may become challenging as the mesh needs to be adapted constantly. In this context, computational methods where the mesh does not conform to the boundary are of great interest. This paper proposes a stabilized cut-cell approach to solve partial differential equations using unfitted meshes using the Finite Element Method. As a result of the implementation of the method, the software *fem-cut-cell-3D* was developed, based on the implementation of the finite element method by the open source library deal.ii. In order to mathematically evaluate the method, four problems were proposed: the classical Poisson problem, in two and three dimensions; a pure diffusion Laplace-Beltrami problem, in two dimensions; and a reaction diffusion case in two dimensions. Stabilization effects on the stiffness matrix were studied for the Poisson and Laplace-Beltrami problems in 2D, and the theoretical dependence of the condition number with mesh size was confirmed. In addition, an optimal stabilization parameter was defined. Optimal convergence rates were obtained for the first three test cases.

**Keywords:** Finite Element, Cut-cell Method, Reaction-Diffusion



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Malha com elementos $K \in G_h$ realçados. . . . .	29
Figura 2	Faces $F \in \mathcal{F}_G$ são realçadas em linhas vermelhas grossas. Faces de $\mathcal{F}_S \subset \mathcal{F}_G$ possuem três pequenas linhas cruzadas. . . . .	30
Figura 3	Sequência de etapas utilizadas para reduzir a integração volumétrica em um elemento cortado para a integração sobre as linhas do elemento. O primeiro elemento representa um elemento qualquer no espaço atravessado pela fronteira em vermelho. As coordenadas do elemento são projetadas para o elemento de referência e o Teorema da Divergência é aplicado sucessivamente, reduzindo a integração volumétrica para integração sobre área de todas as faces (somente uma é representada) e para integração sobre as linhas. . . . .	37
Figura 4	Representação dos domínios descritos. $U(\Gamma)$ é a região em verde onde um ponto único mais perto $p(\mathbf{x}) \in \Gamma$ é definido para cada $\mathbf{x} \in U(\Gamma)$ . Adaptado de (BURMAN et al., 2014). . . . .	43
Figura 5	Diagrama do <i>setup</i> inicial do problema de reação-difusão . . . . .	60
Figura 6	Exemplo de um elemento cortado pela interface e os valores de <i>level-set</i> resultantes sobre os nós. . . . .	68
Figura 7	Diagrama do domínio $T_h$ cortado pela interface $\Gamma$ representada pela função <i>level-set</i> (3.3), com a classificação resultante de elementos e caracterização dos domínios. No espaço tridimensional, a representação representa um corte transversal no plano $yz$ para $x = 0$ ; no caso 2D, a representação representa o domínio inteiro. . . . .	70
Figura 8	Exemplo de um elemento atravessado pela fronteira e o elemento cortado resultante, com nós reordenados em ordem anti-horária. . . . .	71
Figura 9	A função <i>level-set</i> (3.1) projetada sobre a malha, com os valores iguais a zero representados pelo iso-contorno em branco. . . . .	73
Figura 10	A função <i>level-set</i> 3.2 projetada sobre a malha, com os valores iguais a zero representados pelo iso-contorno em branco. . .	73
Figura 11	Nova malha de fundo, após eliminação dos elementos não relevantes ao domínio, com a malha de elementos cortados inserida. As arestas estão destacadas em azul, e metade da malha	

é demonstrada transparente para visualização da estrutura interna.	74
Figura 12 Representações da geometria esférica pelas malhas de elementos cortados, sucessivamente refinadas. São mostradas aqui somente as superfícies para clareza. Os elementos das malhas de fundo tem diâmetro igual a: a) 1,73; b) 0,87; c) 0,43 e d) 0,22 . . . .	75
Figura 13 Comparação entre o volume da esfera obtida pela função padrão de criação de malhas de deal.ii e pelo método de elementos cortados através da função <i>level-set</i> . . . . .	76
Figura 14 Na figura de cima, a malha de elementos cortados simulando a geometria de uma bactéria <i>E. coli</i> . A figura de baixo representa a geometria que inspirou a função <i>level-set</i> (3.5) e foi retirada do trabalho de Pavin, Paljetak e Krstic (2006). . . . .	77
Figura 15 Na figura da esquerda, a malha de elementos cortados gerada pela geometria de bloco de queijo suíço. À direita, a malha gerada por Burman et al. (2014). . . . .	77
Figura 16 Solução para o problema de Poisson com condições de contorno impostas fracamente com o método de Nitsche. . . . .	78
Figura 17 Erro absoluto computado nos nós da malha. . . . .	79
Figura 18 Análise de convergência nas normas $H^1$ (laranja) e $L_2$ (azul). As linhas cheias representam o ajuste linear das normas pelo método de elementos cortado e as linhas tracejadas são relativas ao método FEM padrão. Os coeficientes lineares das retas obtidas estão na legenda ao lado da análise correspondente. . . . .	79
Figura 19 Número de condicionamento como função do inverso do diâmetro do elemento. A linha tracejada é proporcional a $h^{-2}$ . . . . .	80
Figura 20 Número de condicionamento como função de $\gamma_1$ . . . . .	81
Figura 21 Erro $L_2$ em função do parâmetro de estabilidade $\gamma_1$ . . . . .	82
Figura 22 Solução do problema de Poisson em uma esfera. . . . .	82
Figura 23 Solução do Problema de Poisson em uma esfera. Solução representada em um corte do plano $yz$ para $x = 0$ . . . . .	83
Figura 24 Detalhe da solução para o canto superior esquerdo. A esfera em segundo plano representa o iso-volume de valores <i>level-set</i> iguais a zero. . . . .	83
Figura 25 Análise de convergência nas normas $H^1$ (laranja) e $L_2$ (azul). As linhas cheias correspondem ao método de elementos cortados e as linhas tracejadas, ao FEM padrão. As equações das retas obtidas estão explícitas próximas das retas. . . . .	84
Figura 26 Número de condicionamento como função do inverso do diâmetro do elemento. . . . .	85

Figura 27 Solução sobre a fronteira definida pela função <i>level-set</i> .	86
Figura 28 Análise de convergência nas normas $H^1$ (laranja) e $L_2$ (azul). As linhas tracejadas são proporcionais a $h$ (laranja) e $h^2$ (azul).	87
Figura 29 Dependência do número condicional com o diâmetro do elemento. A linha tracejada é proporcional a $h^{-2}$ .	88
Figura 30 Imagens do domínio com a concentração do componente $A$ . A fronteira é representada pela função <i>level-set</i> em branco.	89
Figura 31 Perfis de concentração do componente $B$ na fronteira $\Gamma_h$ .	89
Figura 32 Conservação de Massa ao longo do intervalo de integração.	90
Figura 33 Máxima variação percentual de massa para malhas com diferentes números de graus de liberdade. Os números próximos dos pontos referem-se ao diâmetro do elemento, $h$ .	91
Figura 34 Máxima variação percentual de massa em função do passo no tempo, $\Delta t$ .	91
Figura 35 Solução analítica da equação de Poisson em 2D. A linha branca representa a fronteira.	111
Figura 36 Solução analítica da equação de Poisson em 3D.	111
Figura 37 Solução analítica da equação de difusão de Laplace-Beltrami em 2D.	111



## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EDPs	Equações Diferenciais Parciais .....
MEC	Método de Elementos Cortados .....
MEF	Método de Elementos Finitos .....





## LISTA DE SÍMBOLOS

$\dim$	dimensão .....
$\Omega$	Domínio fechado .....
$\Gamma$	Fronteira .....
$\mathbf{n}$	Vetor normal .....
$h$	Diâmetro do elemento .....
$K$	Elemento hipercubo .....
$L_p$	Espaços de funções $p$ -integráveis .....
$H^k$	Espaço de Sobolev .....
$C^n$	Espaços de funções $n$ -deriváveis .....
$g_D$	Condição de contorno de Dirichlet .....
$g_N$	Condição de contorno de Neumann .....
$\gamma_D$	Parâmetro penalizador de condição de contorno de Dirichlet
$\gamma_N$	Parâmetro penalizador de condição de contorno de Neumann
$\gamma_{1,S,M}$	Parâmetros penalizadores de estabilidade .....
$\mu$	Autovalor .....
$\max$	Máximo .....
$\min$	Mínimo .....
$J$	Jacobiano .....
$\Delta_\Gamma$	Operador de Laplace-Beltrami .....
$\kappa$	Número de condicionamento .....
$r$	Velocidade de reação $[\text{mol } L^{-\dim} T^{-1}]$ .....
$k$	Constante de velocidade de reação $[T^{-1}]$ .....
$D$	Coeficiente de difusão molecular $[L^{\dim-1} T^{-1}]$ .....
$\theta$	Parâmetro de discretização temporal .....
$\circ$	Composição de funções .....



## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	21
1.1	OBJETIVOS .....	22
1.1.1	<b>Objetivo Geral</b> .....	22
1.1.2	<b>Objetivos Específicos</b> .....	22
1.2	CONTEXTO .....	22
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	23
2.1	MÉTODO DE NITSCHKE PARA PROBLEMAS DE VALOR DE CONTOURNO DE DIRICHLET E NEUMANN	23
2.1.1	<b>Problema Teste: Poisson</b> .....	24
2.1.2	<b>Discretização por Elementos Finitos</b> .....	27
2.2	CARACTERÍSTICAS DA MALHA .....	28
2.3	FORMULAÇÃO EM ELEMENTOS FINITOS .....	31
2.4	DERIVAÇÃO DO SISTEMA LINEAR DE EQUAÇÕES .	32
2.5	MAPEAMENTO PARAMÉTRICO E INTEGRAÇÃO NUMÉRICA .....	32
2.5.1	<b>Avaliação Numérica de Integrais</b> .....	34
2.6	AVALIAÇÃO DAS INTEGRAIS EM ELEMENTOS CORTADOS .....	35
2.7	REPRESENTAÇÃO IMPLÍCITA DA FRONTEIRA .....	42
2.8	PROBLEMAS DE LAPLACE-BELTRAMI .....	44
2.8.1	<b>O Operador Laplace-Beltrami</b> .....	45
2.9	ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA .....	46
2.9.1	<b>Problema de Poisson</b> .....	46
2.9.2	<b>Problema de Laplace-Beltrami</b> .....	47
2.10	PROBLEMAS DE REAÇÃO-DIFUSÃO .....	48
2.11	A BIBLIOTECA DE ELEMENTOS FINITOS DEAL.II..	49
<b>3</b>	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA</b> .....	51
3.1	REPRESENTAÇÃO IMPLÍCITA DA FRONTEIRA .....	51
3.2	ESTUDOS DE CASOS .....	52
3.2.1	<b>Problema de Poisson</b> .....	53
3.2.2	<b>Problema de Laplace-Beltrami</b> .....	53
3.2.2.1	O Problema de Difusão de Laplace-Beltrami .....	53
3.2.2.2	Formulação do Problema .....	54
3.2.2.3	Formulação em Elementos Finitos .....	55
3.2.3	<b>Problema de Reação-Difusão</b> .....	56

3.2.3.1	O problema de Reação-Difusão . . . . .	56
3.2.3.2	Formulação em Elementos Finitos . . . . .	57
3.2.3.3	Formulação do Problema . . . . .	59
3.2.3.4	Conservação de Massa . . . . .	61
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO . . . . .</b>	<b>63</b>
4.1	O PROGRAMA <i>FEM-CUT-CELL-3D</i> . . . . .	63
4.1.1	Utilização . . . . .	63
4.1.2	Principais arquivos . . . . .	64
4.1.3	Limitações . . . . .	66
4.1.4	Detecção de Intersecção . . . . .	67
4.1.4.1	Representação implícita pela função <i>level-set</i> . . . . .	72
4.1.4.2	Geração da malha de elementos cortados . . . . .	74
4.1.4.3	Geometrias alternativas . . . . .	76
4.2	ESTUDOS DE CASO . . . . .	77
4.2.1	Problema de Poisson (2D) . . . . .	77
4.2.1.1	Solução . . . . .	77
4.2.1.2	Análise de Convergência . . . . .	79
4.2.1.3	Análise do número de condicionamento . . . . .	80
4.2.2	Problema de Poisson (3D) . . . . .	82
4.2.2.1	Solução . . . . .	82
4.2.2.2	Análise de Convergência . . . . .	84
4.2.3	Análise do Número de Condicionamento da Matriz . . . . .	85
4.2.4	Problema de Laplace-Beltrami . . . . .	86
4.2.4.1	Solução . . . . .	86
4.2.4.2	Análise de Convergência . . . . .	87
4.2.4.3	Análise do Número de Condicionamento da Matriz . . . . .	87
4.2.5	Problema de Reação-Difusão . . . . .	88
4.2.5.1	Solução . . . . .	88
4.2.5.2	Conservação de Massa . . . . .	89
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES . . . . .</b>	<b>93</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>97</b>
	<b>APÊNDICE A – Algoritmos . . . . .</b>	<b>108</b>
	<b>APÊNDICE B – Soluções Analíticas . . . . .</b>	<b>111</b>

# 1 INTRODUÇÃO

Atualmente, há um crescente interesse em estudar problemas que envolvem fenômenos que ocorrem em interfaces e em domínios volumétricos fechados (*bulk*) e representá-los com precisão matemática. Alguns exemplos incluem a modelagem de tensoativos em processos de recuperação de petróleo, a simulação de processos celulares, incluindo a difusão de metabólitos sobre a superfície e a sua variação através de reações. A solução no domínio volumétrico pode se acoplar com a interface através da difusão ou adsorção a partir do interior para a superfície e no sentido inverso, a partir da superfície para o interior.

A evolução da fronteira também pode depender da distribuição da concentração sobre a superfície devido à modificação das forças interfaciais.

Como estes processos são intrinsecamente dependentes da forma e do comportamento da superfície, a interface deve ser representada com precisão. O Método dos Elementos Finitos (MEF) tem sido utilizado com sucesso para representar tais fenômenos e se beneficia de computações eficientes sobre geometrias e malhas complexas.

Resolver um sistema de equações acoplado entre um volume fechado e a superfície em um domínio em evolução pode ser bastante desafiador do ponto de vista numérico. O domínio superficial pode mudar drasticamente, por exemplo, se alongando, quebrando ou coalescendo com outros domínios.

No MEF padrão, a malha é gerada de modo que os domínios estejam alinhados e a fronteira é representada pelas faces da malha. Para levar em conta uma mudança geométrica constante, uma contínua geração de malha é necessária. Este é um processo custoso e pode ser responsável por grande parte do esforço de cálculo e tempo computacional.

O uso de malhas que não se alinham à superfície tem sido estudado como uma alternativa para levar em conta a representação da fronteira em problemas de superfície. Nesse caso, uma malha possui uma interface que pode ser localizada arbitrariamente em relação aos elementos.

O presente trabalho propõe a implementação de uma técnica de *elementos cortados*, utilizando malhas não-alinhadas à fronteira, com base na implementação em elementos finitos da biblioteca deal.ii (BANGERTH et al., 2015). A formulação matemática é inspirada pelo trabalho de Hansbo e Hansbo (2002), onde a imposição de condições

de contorno de forma fraca é proposta para métodos com malha não-alinhadas através do método de Nitsche. Diversos experimentos numéricos foram realizados para verificar a exatidão do método e como resultado da implementação foi desenvolvido o programa *fem-cut-cell-3D*, que tem como objetivo ser um programa de código aberto inovador, construído em cima da biblioteca deal.ii, para simular problemas utilizando o método de elementos cortados.

## 1.1 OBJETIVOS

### 1.1.1 Objetivo Geral

Estabelecer um procedimento para solução de problemas descritos por Equações Diferenciais Parciais através do Método de Elementos Cortados, sob a abordagem do Método dos Elementos Finitos.

### 1.1.2 Objetivos Específicos

- Implementar um programa de computador de código aberto para resolver problemas de Equações Diferenciais Parciais com o Método de Elementos Cortados, utilizando o Método dos Elementos Finitos implementado na biblioteca deal.ii.
- Desenvolver um método de geração de uma malha não alinhada à fronteira e integração numérica sobre elementos cortados.

## 1.2 CONTEXTO

O presente trabalho foi desenvolvido pelo autor em colaboração promovida pelo projeto de intercâmbio Erasmus Mundus entre a Universidade Federal de Santa Catarina e a Uppsala University (Suécia), com período de um ano em cada. Na UFSC, o autor faz parte do Laboratório de Tecnologias Integradas ([www.intelab.ufsc.br](http://www.intelab.ufsc.br)), do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, e na Uppsala University o autor esteve envolvido com o grupo de pesquisa Multiphase Flow Simulation Research Group (<http://www.it.uu.se/research/project/multiphase>), do Departamento de Computação Científica.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O Método dos Elementos Finitos (MEF, ou *FEM* na sigla em inglês), também conhecido como Análise de Elementos Finitos (AEF, ou *FEA*) é um método numérico que tem sido utilizado com sucesso para resolver muitos tipos de problemas descritos por Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Inicialmente usado para resolver problemas de elasticidade e análise estrutural em engenharia civil e aeronáutica (ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2013), o MEF expandiu rapidamente a sua gama de aplicações, sendo generalizado para modelar uma infinidade de problemas de engenharia, como por exemplo, dinâmica de fluidos, eletromagnetismo, calor e transferência de massa.

Nessa seção apresenta-se o procedimento para a resolução de problemas com o MEF usando o método de Nitsche para impor condições de contorno. O problema de Poisson clássico é utilizado para introduzir o método e também serve como um primeiro estudo de caso para a aplicação da técnica de elemento cortados. O leitor interessado é remetido a Brenner e Scott (2008), Larson e Bengzon (2013), Zienkiewicz, Taylor e Zhu (2013) para uma introdução abrangente à teoria dos Elementos Finitos.

### 2.1 MÉTODO DE NITSCHKE PARA PROBLEMAS DE VALOR DE CONTOURNO DE DIRICHLET E NEUMANN

Em seu artigo clássico, Nitsche (1971) introduziu um novo método para incorporar as condições de contorno de Dirichlet fracamente, ou seja, sem especificar valores nodais na fronteira. A ideia ganhou força na comunidade de Elementos Finitos como uma alternativa para os métodos de penalidade e de multiplicador de Lagrange. O método apresenta a vantagem da generalidade no tratamento de problemas de interface, em que aproximações polinomiais de grau arbitrário, diferentes malhas geométricas e modelos físicos podem ser utilizados em lados arbitrários de uma dada interface (HANSBO, 2005).

O método de Nitsche pode ser interpretado como uma melhoria do método de penalidade, no sentido de que ele também impõe condições de contorno através de penalização, mas introduz novas

condições que mantêm consistência e coercividade da forma bilinear. A matriz de rigidez resultante evita o mal-condicionamento e falta de consistência que o método de penalidade expõe. Em contraste com os métodos referidos, o método de Nitsche carece de uma generalização simples para a sua implementação. A formulação fraca e escolha dos parâmetros de penalização dependem fortemente do conjunto de equações diferenciais parciais e condições de contorno associadas. Para uma comparação minuciosa dos métodos de multiplicador de Lagrange, penalidade e de Nitsche, veja Fernández-Méndez e Huerta (2004).

O método de Nitsche tem sido estendido para simular vários tipos de fronteira, tais como problemas de interface (ARNOLD, 1982; FRITZ; HÜBER; WOHLMUTH, 2004; HANSBO; HANSBO, 2004) e condições de contorno de Robin e Neumann (JUNTUNEN; STENBERG, 2009). Além disso, o método é uma boa alternativa para impor condições de contorno em métodos de elementos finitos de malha não alinhada, onde a imposição de valores de Dirichlet em nós prescrita pode ser inconveniente. Neste contexto, a abordagem de Nitsche tem sido utilizada com sucesso para resolver problemas de malhas compósitas (BECKER; HANSBO; STENBERG, 2003; HANSBO; HANSBO; LARSON, 2003; MASSING; LARSON; LOGG, 2013), no MEF estendido (COON; SHAW; SPIEGELMAN, 2011; REUSKEN; NGUYEN, 2009) e no método de elementos cortados (BURMAN et al., 2014; BURMAN; HANSBO, 2012; BURMAN et al., 2014; HANSBO; HANSBO, 2002; WADBRO et al., 2013).

### 2.1.1 Problema Teste: Poisson

O problema de Poisson clássico será utilizado como um estudo de caso para a aplicação do método de elemento cortado usando a abordagem de Nitsche. Além disso, esse problema será utilizado para introduzir o método geral para a resolução de EDPs utilizando o método dos elementos finitos.

Seja  $\Omega$  um domínio limitado em  $\mathbb{R}^{\text{dim}}$  com uma interface suave  $\Gamma$  denotando a fronteira do domínio. A interface pode conter Dirichlet ( $\Gamma_D$ ) e Neumann ( $\Gamma_N$ ) partes, de tal forma que  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ , com vetor normal unitário  $\mathbf{n}_\Gamma$  apontando para o exterior. O problema modelo é definido como se segue:

$$-\Delta u = f \text{ em } \Omega \tag{2.1}$$

$$u = g_D \text{ sobre } \Gamma_D \tag{2.2}$$



$$\mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla u = g_N \text{ sobre } \Gamma_N. \quad (2.3)$$

Primeiramente, introduz-se os seguintes espaços funcionais, que serão utilizados ao longo do texto extensivamente. Define-se o espaço de funções quadrado integráveis em  $\Omega$  como  $L_2(\Omega)$ :

$$L_2(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} |f|^2 d\mathbf{x} < \infty \right\}. \quad (2.4)$$

O espaço de funções Sobolev  $H^1(\Omega)$  é definido como:

$$H^1(\Omega) = \{ f \in L_2(\Omega) \mid D^1 f \in L_2(\Omega) \}. \quad (2.5)$$

Seja  $X \subset \mathbb{R}^{\dim}$  a malha ou um subconjunto da mesma, e  $Y \subset \mathbb{R}^{\dim-1}$  um subconjunto da fronteira de modo que  $Y \subset \Gamma$ . O produto interno  $L_2$  em  $X$  de duas funções  $u$  e  $v$ , com norma associada  $\|u\|_X = (u, u)_X^{\frac{1}{2}}$ , é

$$(u, v)_X = \int_X u v d\mathbf{x}, \quad (2.6)$$

e o produto interno  $L_2$  sobre  $Y$  com norma associada  $\|u\|_Y = \langle u, u \rangle_Y^{\frac{1}{2}}$  é

$$\langle u, v \rangle_Y = \int_Y u v ds. \quad (2.7)$$

A derivação do Método dos Elementos Finitos é iniciada reescrevendo-se o conjunto de EDPs que descrevem o problema em uma forma computável, a chamada forma fraca. Multiplica-se a equação (2.1) por uma função teste  $v \in V$ :

$$V = \{ v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma_D} = 0 \}, \quad (2.8)$$

e integra-se utilizando o Teorema de Green. A formulação fraca do método de elementos finitos tradicional é:

$$a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V, \quad (2.9)$$

onde o termo  $a(u, v)$  é uma forma simétrica bilinear em  $u$  e  $v$ , conhecido como termo bilinear, e é dado por

$$a(u, v) = (\nabla u, \nabla v) \quad (2.10)$$

e  $L(v)$  é um termo linear de  $v$ , dado por

$$L(v) = (f, v)_\Omega + \langle g_N, v \rangle_{\Gamma_N}.$$

As condições de contorno de Dirichlet são chamadas "essenciais" e são impostas fortemente (através de interpolação nos nós da malha), ao contrário das condições de Neumann, que são condições de contorno "naturais" e sua imposição é feita fracamente (seu termo aparece explicitamente na formulação).

O método de Nitsche, alternativamente, impõe condições de contorno de Dirichlet e Neumann fracamente na formulação em elementos finitos. Novos termos são adicionados para assegurar que a matriz de rigidez seja simétrica e definida positiva, além de termos penalizadores contendo parâmetros  $\gamma_D$  e  $\gamma_N$  que são utilizados para impor condições de contorno. A forma bilinear torna-se:

$$\begin{aligned}
 a(u, v) = & \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega - \overbrace{\int_{\Gamma_D} v \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla u \, d\Gamma}^{\text{consistência}} - \overbrace{\int_{\Gamma_D} u \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v \, d\Gamma}^{\text{simetrização}} \\
 & \underbrace{\int_{\Gamma_D} \gamma_D h^{-1} u v \, d\Gamma + \int_{\Gamma_N} \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla u \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v \, d\Gamma}_{\text{penalização}}
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

onde  $h$  é o diâmetro<sup>1</sup> máximo dos elementos. O segundo termo surge naturalmente a partir da integração por partes e garante a consistência do método. O terceiro termo permite que o problema seja simétrico e os últimos termos vêm da penalização necessária para garantir a estabilidade (ARNOLD et al., 2001). O lado direito torna-se:

$$\begin{aligned}
 L(v) = & \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} g_N v \, d\Gamma + \overbrace{\int_{\Gamma_D} g_D \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v \, d\Gamma}^{\text{simetrização}} \\
 & \underbrace{\int_{\Gamma_D} g_D \gamma_D h^{-1} v \, d\Gamma + \int_{\Gamma_N} g_N \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v \, d\Gamma}_{\text{penalização}}
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

---

<sup>1</sup>Aqui, o diâmetro refere-se ao diâmetro da maior bola que circunda o elemento.

com propriedades similares<sup>2</sup>. Para uma análise profunda da dedução da formulação fraca e as propriedades de cada termo, veja (JUNTUNEN; STENBERG, 2009). O problema escrito na formulação fraca torna-se: encontre  $u \in V$  tal que

$$a(u, v) = L(v), \forall v \in V. \quad (2.13)$$

### 2.1.2 Discretização por Elementos Finitos

O processo para a resolução de problemas com o MEF envolve transcrever o problema de uma forma contínua para uma forma discreta. Isto pode ser feito através da construção de subespaços finitos  $V_h$  de espaços  $V$  que podem aproximar a solução  $u$  e tornar o problema computável. A discretização da formulação fraca (2.13) consiste em encontrar aproximações  $u_h \in V_h$ .

A próxima etapa é escolher uma discretização para a função desconhecida  $u_h \in U_h \subset V$  e para a função teste  $v_h \in V_h \subset V$ . Seja  $T_h$  a triangulação ou malha de  $\Omega$  e seja  $V_h$  o espaço de elementos bilineares em  $T_h$ . Neste trabalho utiliza-se elementos finitos de Lagrange, que são representados por  $K$ . A triangulação ou malha é dada por  $T_h = \{K\}$ . O espaço de polinômios trilineares  $\phi$  pode ser representado por  $Q_1(K)$  e é definido por:

$$Q_1(K) = \{ \phi : \phi = c_0 + c_1 x + c_2 y + c_3 z + c_4 xy + c_5 xz + c_6 yz + c_7 xyz, (\mathbf{x}) \in K, c_i \in \mathbb{R} \}, \quad (2.14)$$

para elementos tridimensionais e analogamente para elementos bidimensionais. Os coeficientes  $c_i$  são definidos exclusivamente pelos valores nodais dos graus de liberdade. Ao exigir que a função  $v$  pertença a  $Q_1$  e seja contínua ao longo dos elementos, obtém-se o espaço dos polinômios bilineares contínuos  $V_h$ :

$$V_h = \{ v : v \in C^0(\Omega), v|_K \in Q_1(K), \forall K \in T_h \}. \quad (2.15)$$

A abordagem de Galerkin é utilizada neste trabalho, onde o mesmo espaço discreto é escolhido para os espaços desconhecidos e de teste,  $U_h = V_h$  (LARSON; BENGZON, 2013). Finalmente,  $u_h$  pode ser

---

<sup>2</sup>Note que eliminando-se os termos de consistência, simetrização e penalização, forçando  $v|_{\Gamma_D} = 0$  e impondo condições de Dirichlet fortemente, o problema torna-se a formulação de MEF padrão.

escrito como a combinação linear:

$$u_h = \sum_{j=0}^{N-1} U_j \phi_j, \quad (2.16)$$

onde  $N$  é o número de nós da malha e  $\mathbf{U} = [U_0, \dots, U_{N-1}]$  representa o vetor de valores desconhecidos a ser determinado.

## 2.2 CARACTERÍSTICAS DA MALHA

Nesta seção são apresentadas as características específicas da malha e da notação que serão utilizadas ao longo do trabalho.

Considere uma malha  $T_h$  tal que  $T_h = \{\bar{K}\}$ , onde  $\bar{K}$  indica um *dim* hipercubo-dimensional. A intersecção de dois elementos é sempre o conjunto vazio, um vértice, uma face (em 2D, o que corresponde a uma aresta) ou uma aresta. Para uma representação da notação descrita a seguir, veja a Figura 1.

Assume-se que o domínio  $\Omega$  encontra-se totalmente dentro da malha  $T_h$  ( $\Omega \subset T_h$ ), mas não que as faces da malha  $T_h$  estão alinhadas com a fronteira de  $\Omega$ .

Para todos os elementos  $K \in T_h$ , tem-se  $K \cap \Omega \neq \emptyset$ , o que significa que  $K$  é parcialmente ou completamente contido em  $\Omega$ . O seu conjunto é então definido por  $\Omega_T$ , tal que:

$$\Omega_T = \bigcup K. \quad (2.17)$$

Define-se o conjunto de elementos inteiramente contidos em  $\Omega$  como  $\Omega_0$ , tal que:

$$\Omega_0 = \{K \in T_h : K \cap \Omega = K\}. \quad (2.18)$$

Define-se  $\Omega_2$  como o subconjunto de elementos inteiramente fora de  $\Omega$  (que são posteriormente excluídos da computação):

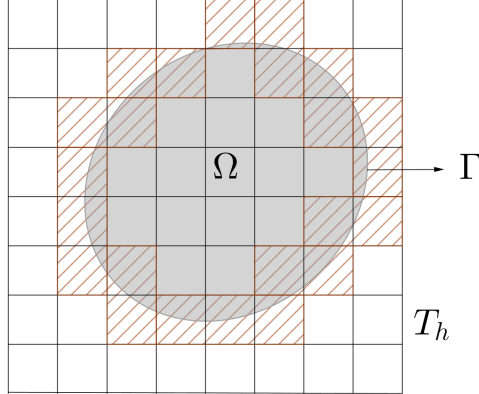
$$\Omega_2 = \{\bar{K} \in T_h : \bar{K} \cap \Omega = \emptyset\}. \quad (2.19)$$

A fração de um elemento  $K$  contida inteiramente em  $\Omega$  é representada por  $K_\Omega$ . O conjunto de elementos interceptados pela interface é indicado por:

$$G_h = \{K \in T_h : K \cap \Gamma \neq \emptyset\}. \quad (2.20)$$

Seja  $\Gamma_K = \Gamma \cap K$  a parte de  $\Gamma$  em um elemento  $K \in G_h$ . O diâmetro de  $K$  é dado por  $h_K$  e  $h = \max_{K \in \Omega_T} h_K$ .

Figura 1 – Malha com elementos  $K \in G_h$  realçados.



As seguintes premissas são feitas em relação à malha e à interface:

1. A malha é formada por quadrados (em 2D) ou cubos (em 3D) de tamanho uniforme, de modo que  $h = h_K, \forall K \in T_h$  e, consequentemente, a triangulação é não-degenerada.
2. A malha é fina o suficiente de forma que  $\Gamma$  intercepta cada fronteira  $\partial K$  do elemento  $K$  exatamente duas vezes, e cada face no máximo uma vez.

As hipóteses não são muito restritivas, no sentido de que elas asseguram que a curvatura da fronteira  $\Gamma$  seja bem resolvida pela malha.

### Estabilização

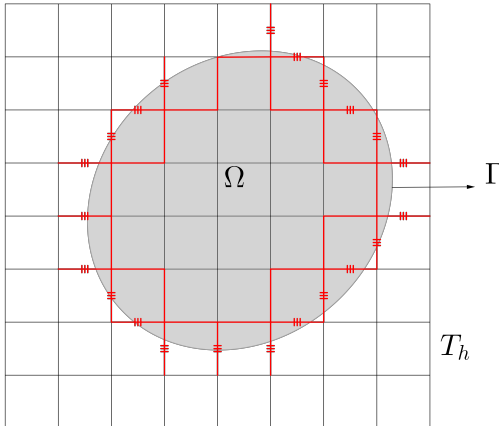
Como a fronteira atravessa elementos arbitrariamente, ela pode se aproximar das fronteiras do elemento e é comum observar a fração do elemento cortado  $K \in G_h$  dentro do domínio  $\Omega$  ser muito pequena. Em situações como esta, a matriz de rigidez torna-se mal-condicionada e pode causar falha em *solvers* lineares iterativos (WADBRO et al., 2013). Alternativas para resolver este problema incluem o uso de uma matriz escalonada, como descrito por Olshanskii e Reusken (2010), ou a utilização de técnicas de pré-condicionamento (ZUNINO; CATTANEO; COLCIAGO, 2011). Neste trabalho utiliza-se o método introduzido

por Burman e Hansbo (2012), onde o método clássico de Nitsche para a imposição de condições de contorno Dirichlet não-homogêneas é estabilizado com termos penalizadores para saltos da derivada normal entre pares de elementos em que pelo menos um é interceptado pela interface. Os termos penalizadores, também chamados de "termos fantasma" (*ghost penalty terms*), atuam nos gradientes da solução nas partes dos elementos que estão fora do domínio de interesse, estendendo a coercitividade para  $\Omega_T$ . Os termos de estabilização são representados por  $j(u, v)$  e são adicionados à matriz de rigidez (2.11).

Antes de demonstrar os termos de estabilização, é conveniente definir os termos de salto e os seguintes conjuntos relevantes: o conjunto  $\mathcal{F}_G$  de faces dos elementos contém todas as faces que pertencem a um elemento  $K \in G_h$  e um vizinho imediato  $K'$ , tal que  $K$  e  $K'$  têm uma face  $F$  em comum entre si:  $F = K \cap K'$ . Em outros termos, o conjunto  $\mathcal{F}_G$  contém todas as faces dos elementos  $K \in G_h$  exceto aquelas que têm ambos os nós em  $\Omega$ .

O conjunto  $\mathcal{F}_S$  é um subconjunto de  $\mathcal{F}_G$  contendo todas as faces de um elemento  $K \in G_h$  os quais são compartilhadas com um vizinho  $K'' \in G_h$ , tal que  $F = K \cap K''$ . Em outros termos, o conjunto  $\mathcal{F}_S$  contém todas as faces atravessadas pela fronteira. Na Figura 2 os conjuntos descritos estão demonstrados.

Figura 2 – Faces  $F \in \mathcal{F}_G$  são realçadas em linhas vermelhas grossas. Faces de  $\mathcal{F}_S \subset \mathcal{F}_G$  possuem três pequenas linhas cruzadas.



O salto do gradiente de  $v_h \in V_h$  é definido por:

$$[\nabla v_h] = \mathbf{n}_F \cdot \nabla v_h|_K - \mathbf{n}_F \cdot \nabla v_h|_{K'}, \quad (2.21)$$

onde  $\mathbf{n}_F$  é o vetor normal da face  $F$  com orientação fixa e arbitrária. O termo de estabilização para o problema de Poisson, onde  $u_h \in V_h$ , é definido como:

$$j(u_h, v_h) = \sum_{F \in \mathcal{F}_G} \langle [\nabla u_h], [\nabla v_h] \rangle_F. \quad (2.22)$$

### 2.3 FORMULAÇÃO EM ELEMENTOS FINITOS

O problema com a discretização estabilizada do problema de Poisson utilizando o método de Nitsche, como descrito por Burman e Hansbo (2012), torna-se: encontre  $u_h \in V_h$ , tal que:

$$A_h(u_h, v_h) = L(v_h), \forall v_h \in V_h, \quad (2.23)$$

onde

$$\begin{aligned} L(v_h) &= (f, v_h)_\Omega + \langle g_D, \gamma_D h^{-1} v_h - \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v_h \rangle_{\Gamma_D} \\ &\quad + \langle \Gamma_N, v_h + \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v_h \rangle_{\Gamma_N}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

e

$$A_h(u_h, v_h) = a_h(u_h, v_h) + \gamma_1 h j(u_h, v_h), \quad (2.25)$$

com

$$\begin{aligned} a_h(u_h, v_h) &= a(u_h, v_h) - \langle \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla u_h, v_h \rangle_{\Gamma_D} - \langle \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v_h, u_h \rangle_{\Gamma_D} + \\ &\quad \langle \gamma_D h^{-1} u_h, v_h \rangle_{\Gamma_D} + \langle \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla u_h, \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla v_h \rangle_{\Gamma_N}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

e o termo de estabilização (2.22):

$$j(u_h, v_h) = \sum_{F \in \mathcal{F}_G} \langle [\nabla u_h], [\nabla v_h] \rangle_F.$$

## 2.4 DERIVAÇÃO DO SISTEMA LINEAR DE EQUAÇÕES

Aplicando a eq. 2.16 a 2.23 - 2.26, obtém-se um sistema linear algébrico com  $N$  equações para os valores desconhecidos  $U_j$ 's:

$$A_{ij} = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_\Omega - \langle \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_j, \phi_i \rangle_{\Gamma_D} - \langle \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_i, \phi_j \rangle_{\Gamma_D} + \langle \gamma_D h^{-1} \phi_j, \phi_i \rangle_{\Gamma_D} + \langle \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_j, \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_i \rangle_{\Gamma_N} + \gamma_1 h j(\phi_i, \phi_j) \quad (2.27)$$

e

$$L_i = (f, \phi_i)_\Omega + \langle g_D, \gamma_D h^{-1} \phi_i - \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_i \rangle_{\Gamma_D} + \langle g_N, \phi_i + \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla\phi_i \rangle_{\Gamma_N}. \quad (2.28)$$

O sistema linear torna-se:

$$AU = L, \quad (2.29)$$

onde  $A$  é conhecida como a **matriz de rigidez**,  $L$  é o **vetor de carga** e  $U$  é o **vetor solução**.

## 2.5 MAPEAMENTO PARAMÉTRICO E INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

No método dos elementos finitos, as funções base são geralmente definidas localmente em um elemento de referência  $\hat{K}$ . O elemento de referência está ligado ao elemento real da malha  $K$  através de um mapeamento  $\Phi$ . Este procedimento facilita muito a implementação do código de integração numérica sobre elementos volumétricos e de fronteira. O mapeamento  $\Phi$  pode ser definido como uma transformação  $\mathbf{x} = \Phi(\hat{\mathbf{x}})$  que mapeia o elemento de referência para o espaço físico. As coordenadas do elemento de referência são representadas por  $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}_0, \dots, \hat{x}_{\dim-1}) \in \mathbb{R}^{\dim}$ , enquanto o espaço natural é representado pelas coordenadas cartesianas  $\mathbf{x} = (x_0, \dots, x_{\dim-1}) \in \mathbb{R}^{\dim}$ . A transformação é então definida como:

$$\Phi : \hat{K} \rightarrow K \quad (2.30)$$

$$\mathbf{x} = \Phi(\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.31)$$



É conveniente introduzir a notação para o Jacobiano  $J_K(\hat{\mathbf{x}}) = \nabla\Phi(\hat{\mathbf{x}})$ , a fim de descrever a utilização do mapeamento em situações diferentes. Para o caso tridimensional ( $dim = 3$ ),  $\mathbf{x} = (x, y, z)$ , tem-se

$$J_K(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \hat{x}} & \frac{\partial x}{\partial \hat{y}} & \frac{\partial x}{\partial \hat{z}} \\ \frac{\partial y}{\partial \hat{x}} & \frac{\partial y}{\partial \hat{y}} & \frac{\partial y}{\partial \hat{z}} \\ \frac{\partial z}{\partial \hat{x}} & \frac{\partial z}{\partial \hat{y}} & \frac{\partial z}{\partial \hat{z}} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Para garantir que o Jacobiano seja invertível, o mapeamento deve ser suave e invertível. Em termos de funções de forma, o mapeamento é definido como:

$$\mathbf{x} = \Phi(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=0}^{n-1} \hat{\phi}_i(\hat{\mathbf{x}}) \mathbf{x}_i, \quad (2.33)$$

onde  $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$  são as coordenadas do nó  $i$  no espaço físico,  $\hat{\phi}_i$  são as funções *chapéu* no elemento de referência e  $n$  é o número de nós do elemento. Neste trabalho o elemento de referência é dado por  $[0, 1]^{\dim}$ .

Além do mapeamento descrito a partir do elemento real ao de referência, é conveniente definir um mapeamento para integrar funções sobre elementos de fronteira, tais como aqueles figurando nas equações (2.23)-(2.26). Em duas dimensões, elementos de superfície são linhas, tais como as arestas de uma célula; em três dimensões, elementos de superfície são faces. Seja  $\Gamma \subset \mathbb{R}^{\dim}$  um hiper-espaço contendo o espaço físico representando as faces de um elemento  $K$ . Um mapeamento  $\Sigma$  transforma um ponto em  $\Gamma$  para o espaço de referência  $\hat{\Gamma} \subset \mathbb{R}^{\dim-1}$ . O mapeamento pode ser descrito como

$$\Sigma: \hat{\Gamma} \rightarrow \Gamma \quad (2.34)$$

$$\mathbf{t} \in \hat{\Gamma} \rightarrow \mathbf{x} = \Sigma(\mathbf{t}) \in \Gamma. \quad (2.35)$$

O espaço paramétrico é definido pelos parâmetros independentes

$$\mathbf{t} = (t_0, \dots, t_{\dim-1}) \in \mathbb{R}^{\dim-1}, \quad (2.36)$$

e para o espaço natural, coordenadas Cartesianas são utilizadas.

### 2.5.1 Avaliação Numérica de Integrais

Para montar as matrizes de elementos finitos é preciso realizar a integração numérica de termos que aparecem nas equações (2.27)-(2.28). É conveniente realizar um mapeamento como descrito anteriormente e avaliar essas integrais sobre o elemento de referência. Integrais sobre o elemento cortado ( $K$ ) são do tipo

$$A'_{ij} = \int_K \rho(\mathbf{x}) \, dK, \quad (2.37)$$

onde  $\rho(\mathbf{x})$  é qualquer função a ser integrada sobre o domínio, *e.g.*,  $\rho(\mathbf{x}) = \nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i$ . A formulação mapeada é:

$$A'_{ij} = \int_{\hat{K}} \hat{\rho}(\hat{\mathbf{x}}) |J_K(\hat{\mathbf{x}})| \, d\hat{K}, \quad (2.38)$$

onde  $|J_K(\hat{\mathbf{x}})|$  é o determinante do Jacobiano. Por exemplo, para o termo bilinear,

$$a_{ij} = \int_K \nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i \, dK = \int_{\hat{K}} J_K^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\nabla}\hat{\phi}_i(\hat{\mathbf{x}}) \cdot J_K^{-1}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{\nabla}\hat{\phi}_j(\hat{\mathbf{x}}) |J_K(\hat{\mathbf{x}})| \, d\hat{K}. \quad (2.39)$$

Integrais sobre elementos de fronteira são generalizadas como:

$$b_i = \int_{\Gamma} \sigma(\mathbf{x}) \, d\Gamma, \quad (2.40)$$

onde  $\sigma(\mathbf{x})$  pode ser qualquer função a ser integrada sobre a fronteira, *e.g.*,  $\sigma(\mathbf{x}) = g_N \phi_i$ .

Em 2D, a equação mapeada é:

$$b_i = \int_0^1 \hat{\sigma}(t) |J_{\Gamma}(t)| \, d\hat{\Gamma}, \quad (2.41)$$

onde  $|J_{\Gamma}(t)|$  representa o comprimento da arestas.

A integração é então avaliada numericamente utilizando quadratura de Gauss, com  $n_{K,q} = 2^{\dim}$  pontos de integração sobre o elemento e  $n_{\Gamma,q} = 2^{\dim-1}$  pontos sobre a fronteira. A integração

sobre elementos torna-se:

$$A'_{ij} = \sum_{q=0}^{n_{K,q}-1} \hat{\rho}(\hat{\mathbf{x}}_q) |J_K(\hat{\mathbf{x}}_q)| w_q. \quad (2.42)$$

Por exemplo, a integração do termo bilinear é avaliado como:

$$a_{ij} = \sum_{q=0}^{n_{K,q}-1} J_K^{-1}(\hat{\mathbf{x}}_q) \hat{\nabla} \hat{\phi}_i(\hat{\mathbf{x}}_q) \cdot J_K^{-1}(\hat{\mathbf{x}}_q) \hat{\nabla} \hat{\phi}_j(\hat{\mathbf{x}}_q) |J_K(\hat{\mathbf{x}}_q)| w_q. \quad (2.43)$$

Já os termos de fronteira, em 2D, são avaliados como:

$$b_i = \sum_{q=0}^{n_{\Gamma,q}-1} \hat{\sigma}(t_q) |J_{\Gamma}(t_q)| w_q. \quad (2.44)$$

O subscrito  $q$  indica o ponto de quadratura onde a função é avaliada. Os pesos  $w_q$  e pontos de integração  $\hat{\mathbf{x}}_q$  e  $t_q$  são computados como descrito em (PRESS et al., 2007).

## 2.6 AVALIAÇÃO DAS INTEGRAIS EM ELEMENTOS CORTADOS

O próximo passo é avaliar integrais definidas no domínio  $\Omega_0$  e no limite  $\Gamma$ . Por exemplo, para o problema de Poisson, estas integrais são:

$$\int_{K_{\Omega}} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \, d\mathbf{x} \text{ e } \int_{K_{\Omega}} f \phi_j \, d\mathbf{x}, \quad (2.45)$$

da equação (2.27) na área (2D) ou volume (3D) do elemento cortado  $K_{\Omega}$  e como

$$\int_{\Gamma_N} g_N \phi_j \, d\Gamma \quad (2.46)$$

(ou similar) da equação (2.28) na fronteira  $\Gamma$ , como explicado na seção 2.5.1.

O processo de integração numérica fornecida pela biblioteca deal.ii avalia integrais sobre elementos padrão formados por quadriláteros (2D) ou hexahedros (3D) e faces apenas. Ao atravessar arbitrariamente um elemento, pode-se ter como resultado elementos

com número de faces arbitrário. As integrais devem ser avaliadas apenas sobre a parte do elemento cortado dentro do domínio  $\Omega$ , representado por  $K_{\Omega}$ . Uma alternativa possível seria dividir esse elemento e criar novos elementos alinhados à fronteira, uma técnica frequentemente utilizada no MEF estendido (BELYTSCHKO et al., 2001; YAZID; ABDELKADER; ABDELMADJID, 2009). Estes novos elementos seriam parte de uma nova "sub-triangulação" e poder-se-ia tirar proveito da integração nativa sobre hipercubos fornecidos por deal.ii. No entanto, este processo exige a geração de uma nova estrutura de triangulação que necessita de vértices adicionais, tornando-se custoso computacionalmente e contrariando a finalidade de se evitar a constante reinicialização de malha. Uma abordagem alternativa é a utilização de mapeamentos conformes Schwarz-Christoffel, tal como descrito por Natarajan, et al. (NATARAJAN; BORDAS; MAHAPATRA, 2009; NATARAJAN; MAHAPATRA; BORDAS, 2010) no âmbito do MEF estendido. Este método mostrou-se eficaz para problemas em 2D, mas não é facilmente estendido para o espaço tridimensional.

A abordagem utilizada neste trabalho é baseada na redução de integrais volumétricas (em 3D; de superfície, em 2D) a integrais de contorno através do Teorema de Divergência de Gauss. Este método foi descrito por Mirtich (1996) e foi eficientemente aplicado para calcular propriedades mecânicas de sólidos, tais como momentos e produtos de inércia sobre corpos poliédricos. O método foi estendido para o MEF por Massing, Larson e Logg (2013) e utilizado com sucesso para avaliar integrais como (2.45) em polígonos e poliedros complexos. Um resumo dos passos utilizados sucessivamente é demonstrado na Figura 3.

Primeiramente, o conceito de índice múltiplo e sua notação são introduzidos, os quais são utilizados ao longo do texto para construir a base de integração.

Um índice múltiplo  $\alpha = (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{\dim-1}) \in \mathbb{N}_0^{\dim}$  é definido como uma  $\dim$ -tupla de inteiros não negativos  $\alpha_i$ . Sua ordem  $|\alpha|$  é dada por:

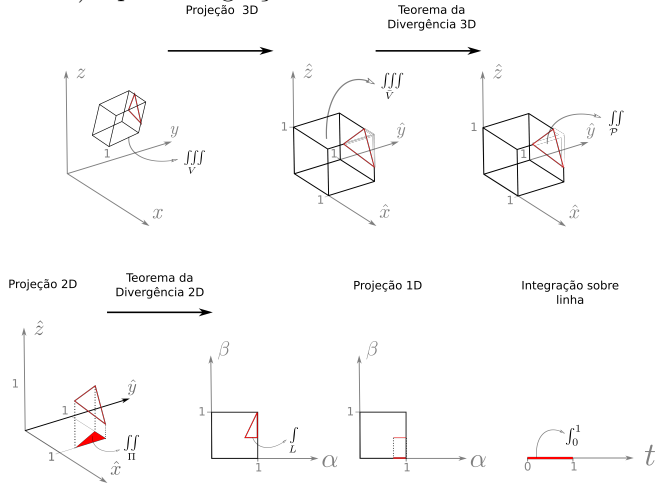
$$|\alpha| = \sum_{i=0}^{\dim-1} \alpha_i. \quad (2.47)$$

Baseada nessa definição, a derivada parcial clássica pode ser escrita como:

$$D^{\alpha}u = \prod_0^{\dim-1} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^{\alpha_i} u. \quad (2.48)$$

O método para avaliar integrais sobre elementos cortados no

Figura 3 – Sequência de etapas utilizadas para reduzir a integração volumétrica em um elemento cortado para a integração sobre as linhas do elemento. O primeiro elemento representa um elemento qualquer no espaço atravessado pela fronteira em vermelho. As coordenadas do elemento são projetadas para o elemento de referência e o Teorema da Divergência é aplicado sucessivamente, reduzindo a integração volumétrica para integração sobre área de todas as faces (somente uma é representada) e para integração sobre as linhas.



espaço tridimensional é descrito pelo procedimento a seguir. Para elementos no espaço dimensional, os passos 2 e 3 são omitidos.

### 1. *Reescrever integrandos em uma base monomial.*

Os termos a serem integrados em elementos cortados como (2.45) podem ser interpolados em uma base monomial. Seja  $\mathbf{x} = [x_0, \dots, x_{\dim-1}] \in \mathbb{R}^{\dim}$  o espaço natural para coordenadas cartesianas. Um polinômio  $f(x_0, x_1, \dots)$  pode ser representado como

$$f(\mathbf{x}) = c_0(\mathbf{x})^{\alpha_0} + \dots + c_n(\mathbf{x})^{\alpha_n} = \sum_{i=0}^n c_i(\mathbf{x})^{\alpha_i}, \quad (2.49)$$

onde  $\alpha$  é um índice múltiplo  $\dim$ -tupla e

$$\mathbf{x}^\alpha = x_0^{\alpha_0} \cdot x_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot x_{\dim-1}^{\alpha_{\dim-1}} = \prod_{j=0}^{\dim-1} x_j^{\alpha_j}. \quad (2.50)$$

2. *Redução de integrais sobre volumes (dim = 3) para integrais sobre superfícies (dim = 2).*

O problema inicia com a necessidade de integrar uma função, tipicamente polinomial (mas não necessariamente), sobre um volume ou área de um elemento cortado. Generalizando para 3 dimensões, a integral pode ser escrita como

$$\iiint_V f(x, y, z) \, dx \, dy \, dz. \quad (2.51)$$

Partindo-se de um elemento no espaço tridimensional, pode-se reduzir a integração sobre o volume para integração sobre superfícies com o Teorema da Divergência de Gauss. O Teorema de Divergência de Gauss afirma que (ADAMS, 2009): Seja  $D$  um domínio tridimensional cuja fronteira curva  $S$  é uma superfície orientada e fechada com campo vetorial normal  $\hat{\mathbf{n}}$  apontando para o exterior de  $D$ . Se  $\vec{F}$  é um campo vetorial suave continuamente diferenciável em  $D$ ,

$$\iiint_D \nabla \cdot \vec{F} \, dV = \oiint_S \vec{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS, \quad (2.52)$$

onde  $\vec{F}$  é obtido a partir do integrando de interesse na equação (2.51), tal que  $f(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \vec{F}$ .

A integral dupla sobre a superfície pode ser aproximada pela soma de integrais de área das faces do elemento, que junto formam um poliedro convexo:

$$\iiint_D \nabla \cdot \vec{F} \, dV = \oiint_S \vec{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dS = \sum_{k=0}^{n_{\text{faces}}-1} \iint_{F_k \in K} \vec{F} \cdot \hat{\mathbf{n}}_k \, dA. \quad (2.53)$$

O problema agora foi reduzido à integração sobre superfícies em duas dimensões inseridas no espaço tridimensional.

3. *Projeção das superfícies no plano.*

A integração dupla do termo do lado direito da equação (2.53) pode ser realizada novamente através da aplicação do Teorema de Gauss. Entretanto, a face precisa estar repousando sobre um plano bidimensional, o que ser feito através da projeção das faces planares do poliedro sobre um dos planos do sistema de coordenadas. Seja  $\mathcal{P}$  uma

região poligonal no espaço  $\alpha\beta\gamma$ , repousando no plano

$$\hat{n}_\alpha\alpha + \hat{n}_\beta\beta + \hat{n}_\gamma\gamma + w = 0, \quad (2.54)$$

onde  $\hat{\mathbf{n}} = (\hat{n}_\alpha, \hat{n}_\beta, \hat{n}_\gamma)$  é o vetor normal ao plano. O espaço  $\alpha\beta\gamma$  é sempre escolhido como uma permutação do plano cartesiano  $xyz$ . Seja  $\Pi$  a projeção de  $\mathcal{P}$  no plano  $\alpha\beta$ . A integral sobre uma face no espaço tridimensional pode então ser reduzida a

$$\iint_{\mathcal{P}} g(\alpha, \beta, \gamma) \, dA = \frac{1}{|\hat{n}_\gamma|} \iint_{\Pi} g(\alpha, \beta, h(\alpha, \beta)) \, d\alpha \, d\beta, \quad (2.55)$$

onde

$$h(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\hat{n}_\gamma} (\hat{n}_\alpha\alpha + \hat{n}_\beta\beta + w) \quad (2.56)$$

e  $w$  pode ser obtido da equação do plano (2.54) escolhendo-se qualquer ponto da face  $\mathcal{P}$ .

A fim de maximizar  $\hat{n}_\gamma$  e evitar que erros de ponto flutuante propaguem-se quando esse valor se aproxima de zero, as diversas opções de projeção são calculadas e aquela com maior valor de  $|\hat{n}_\gamma|$  é escolhida.

A integração de superfície sobre uma face 2D no plano 3D foi reduzida à integração dupla sobre uma superfície no plano 2D. O problema agora pode ser simplificado para a avaliação da integral

$$\iint_{\Pi} g(\alpha, \beta) \, d\alpha \, d\beta. \quad (2.57)$$

#### 4. Redução das integrais de superfície a integrais de linha.

Caso o problema seja inicialmente definido em 2D, inicia-se o método a partir dessa etapa para avaliar integrais sobre polígonos complexos.

O Teorema de Divergência de Gauss, que pode ser generalizado para  $n$ -dimensões, é aplicado novamente. Para o caso bidimensional, o teorema equivale ao Teorema de Green. O teorema afirma: seja  $\Pi$  um domínio no plano  $\alpha\beta$ , com fronteira curva, fechada e suave  $\mathcal{C}$ . Se  $\vec{G}$  é um campo vetorial suave continuamente diferenciável em  $\Pi$ ,

$$\iint_{\Pi} \nabla \cdot \vec{G} \, dA = \oint_{\mathcal{C}} \vec{G} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds, \quad (2.58)$$

onde  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor normal apontando para o exterior de  $\mathcal{C}$ , e  $\vec{G}$  é obtido a

partir do integrando de interesse, tal que  $g(\alpha, \beta) = \nabla \cdot \vec{G}$ . Ao integrar sobre um polígono convexo, pode-se aproximar o lado direito da integral (2.58) pela soma das integrais das arestas (lados) do polígono  $\mathcal{P}$ :

$$\oint_C \vec{G} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds = \sum_{k=0}^{n_{arestas}-1} \int_{L_k \in \mathcal{P}} \vec{G} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{L_k} \, ds. \quad (2.59)$$

5. *Mapear as arestas e avaliar integrais de linha.*

O termo do lado direito da equação (2.59) agora se refere à integral sobre um segmento de reta (aresta do poliedro) repousando em um espaço bidimensional. O problema agora consiste em integrar numericamente a integral

$$\int_L \vec{G} \cdot \hat{\mathbf{n}}_L \, ds. \quad (2.60)$$

A fim de utilizar uma regra de quadratura como a de Gauss, é vantajoso parametrizar a aresta  $L_k$  sobre um sistema de coordenadas unidimensional unitário representado por  $t = [0, 1]$ . As coordenadas de um ponto na aresta  $L_k$  são representadas como funções de parâmetros independentes através de mapeamentos geométricos. O segmento de reta  $s$  é então parametrizado pela função vetorial  $\vec{r}(t)$ , com  $t \in [0, 1]$ , tal que

$$\vec{r}(t) = (\alpha(t), \beta(t)) \quad (2.61)$$

onde  $\vec{r}(t)$  é uma transformação afim das coordenadas  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}^2$  para o espaço paramétrico  $t \in \mathbb{R}$ . A transformação é obtida através de

$$\alpha(t) = \alpha_0 + (\alpha_1 - \alpha_0)t \quad (2.62)$$

e

$$\beta(t) = \beta_0 + (\beta_1 - \beta_0)t, \quad (2.63)$$

onde os índices 0 e 1 referem-se ao ponto inicial e final da aresta, orientados em sentido anti-horário. O diferencial torna-se:

$$ds = |\vec{r}'(t)| \, dt, \quad (2.64)$$

onde  $|\vec{r}'(t)|$  consiste no comprimento da aresta,  $L_e$ .



A integral (2.60) pode finalmente ser escrita como

$$\int_L \vec{G}(\alpha, \beta) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, ds = \int_0^1 \vec{G}(\alpha(t), \beta(t)) \cdot \hat{\mathbf{n}} \, L_e \, dt, \quad (2.65)$$

a qual pode ser prontamente integrada utilizando o método da quadratura de Gauss como descrito na seção 2.5.1. Alternativamente, Mirtich (1996) utilizou polinômios de Bernstein, que não requerem a avaliação de pontos de quadratura previamente.

### 6. Cálculo do campo vetorial para utilização do Teorema da Divergência.

Partindo-se de um problema tridimensional, o Teorema da Divergência de Gauss é aplicado duas vezes: a primeira, para reduzir o problema de 3 para 2 dimensões, cf. (2.53); e em seguida, para reduzir o problema de 2 para 1 dimensão, cf. (2.58). Para empregar o teorema, os integrandos polinomiais,  $f(\mathbf{x})$  em (2.51) e  $g(\alpha, \beta)$  em (2.57) devem ser reescritos como divergentes de campos vetoriais. Na próxima seção é demonstrado o procedimento para a obtenção de  $\vec{F}$  a partir de  $f(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \vec{F}$ . Assumindo que depois da manipulação matemática descrita a característica polinomial do integrando se mantém, o cálculo para obtenção de  $\vec{G}$  é análogo e será omitido.

Primeiramente calculam-se as anti-derivadas dos monômios compondo  $f(\mathbf{x})$  da seguinte maneira:

$$\mathbf{x}^\alpha = \nabla \cdot \sum_{j=0}^{\dim-1} \frac{\mathbf{x}^{\alpha+\mathbf{e}_j}}{\dim(\alpha_j + 1)}, \quad (2.66)$$

onde  $\mathbf{e}_j$  é o vetor unitário de ordem  $j$ . É fácil perceber que para o caso tridimensional a relação torna-se

$$(x, y, z)^\alpha = \nabla \cdot \left( \frac{x^{\alpha_0+1} \cdot y^{\alpha_1} \cdot z^{\alpha_2}}{3(\alpha_0 + 1)}, \frac{x^{\alpha_0} \cdot y^{\alpha_1+1} \cdot z^{\alpha_2}}{3(\alpha_1 + 1)}, \frac{x^{\alpha_0} \cdot y^{\alpha_1} \cdot z^{\alpha_2+1}}{3(\alpha_2 + 1)} \right). \quad (2.67)$$

Agora o polinômio  $f(\mathbf{x})$  pode ser reescrito como

$$f(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \vec{F} \quad (2.68)$$

onde

$$\vec{F} = \sum_{i=0}^n c_i \sum_{j=0}^{\dim-1} \frac{\mathbf{x}^{\alpha_i + \mathbf{e}_j}}{\dim(\alpha_{ij} + 1)}. \quad (2.69)$$

## 2.7 REPRESENTAÇÃO IMPLÍCITA DA FRONTEIRA

Um dos passos essenciais da discretização do problema no MEF com elementos cortados é representar com precisão a geometria do contorno em uma malha de fundo. A representação implícita de curvas e superfícies tem-se mostrado eficiente em diversas aplicações computacionais e sua caracterização por meio de uma descrição geométrica é uma forma versátil e simples de construir a discretização. Além disso, é vantajoso escolher um método que pode ser estendido para casos mais complexos, por exemplo, problemas com fronteiras móveis ou mutáveis.

Neste trabalho, a superfície ou a fronteira do problema é representado pelo método *level-set* padrão (SETHIAN, 1999). A localização da fronteira é descrita pelo conjunto contendo os valores iguais a zero calculados por uma função de distância com sinal (*signed distance function*). A representação implícita de uma superfície  $\dim$ -dimensional é:

$$\Gamma = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\dim} \mid \phi(\mathbf{x}) = 0 \}, \quad (2.70)$$

onde  $\mathbf{x}$  é um ponto na superfície definida pela função  $\phi : \mathbb{R}^{\dim} \rightarrow \mathbb{R}$ .

A representação pode decompor uma dada triangulação  $T_h$  da seguinte maneira, tal que  $\forall \mathbf{x} \in T_h$ :

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}) > 0 & \iff \mathbf{x} \in T_h \setminus \Omega \\ \phi(\mathbf{x}) = 0 & \iff \mathbf{x} \in \Gamma = \partial\Omega \\ \phi(\mathbf{x}) < 0 & \iff \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma. \end{cases} \quad (2.71)$$

### Aproximação do Domínio

Seja  $p(\mathbf{x})$  o mapeamento do ponto mais próximo sobre  $\Gamma$  para um ponto  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\dim}$  e  $d(\mathbf{x})$  uma função de distância com sinal dada por

$$d(\mathbf{x}) = |p(\mathbf{x}) - \mathbf{x}| \text{ em } \mathbb{R}^{\dim} \setminus \Omega \quad (2.72)$$

$$d(\mathbf{x}) = -|p(\mathbf{x}) - \mathbf{x}| \text{ em } \Omega. \quad (2.73)$$

A vizinhança tubular aberta à fronteira  $\Gamma$  é definida como:

$$U(\Gamma) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\dim} : |d(\mathbf{x})| < \delta\}, \quad (2.74)$$

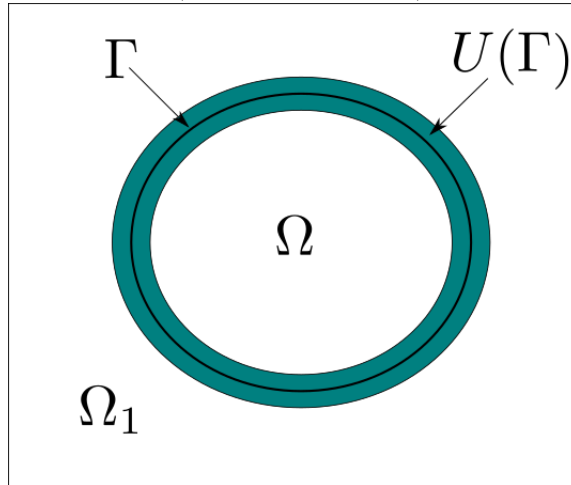
onde  $\delta$  é pequeno o suficiente tal que para cada  $\mathbf{x} \in U(\Gamma)$  exista um ponto  $p(\mathbf{x}) \in \Gamma$  unicamente determinado. A Figura 4 descreve os domínios de interesse. Seja  $\phi : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  qualquer função definida na hipersuperfície  $\Gamma$ . A extensão suave de  $\phi$  à vizinhança  $U$  é definida como:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \phi \circ p(\mathbf{x}). \quad (2.75)$$

Note que  $\tilde{\phi}|_{\Gamma} = \phi$ .

Uma aproximação contínua linear definida em trechos  $\Gamma_h$  de  $\Gamma$  é considerada tal que  $\Gamma_h \subset U(\Gamma)$  e  $\Gamma_h \cap K$  é um subconjunto de uma hipersuperfície em  $\mathbb{R}^{\dim}$ .

Figura 4 – Representação dos domínios descritos.  $U(\Gamma)$  é a região em verde onde um ponto único mais perto  $p(\mathbf{x}) \in \Gamma$  é definido para cada  $\mathbf{x} \in U(\Gamma)$ . Adaptado de (BURMAN et al., 2014).



## 2.8 PROBLEMAS DE LAPLACE-BELTRAMI

Modelos matemáticos envolvendo fenômenos de transporte entre uma interface e um domínio volumétrico fechado aparecem naturalmente em diversas situações, tais como dinâmica de fluidos, aplicações biológicas, fenômenos de superfície e coloidais. Exemplos incluem a modelagem de fluxo multifásico onde surfactantes desempenham um papel importante, como a recuperação avançada de petróleo, emulsificação industrial, extração líquido-líquido e várias outras aplicações (JAMES; LOWENGRUB, 2004; OLSHANSKII; REUSKEN, 2010). Agentes tensoativos podem induzir a tensão de superfície tangencial, causando o efeito de Marangoni (MURADOGLU; TRYGGVASON, 2008). Em tais situações, os surfactantes solúveis são dissolvidos no volume fluido, mas também são absorvidos na interface. Modelos matemáticos, portanto, acoplam equações de superfície com equações em um domínio que inclui a superfície. Em geral, se o problema inclui um domínio que pode ser considerado suficientemente fino, pode-se simplificar o modelo, escrevendo uma formulação de EDP em uma geometria dimensional inferior, por exemplo numa curva ou numa superfície.

Uma abordagem bem conhecida para resolver equações em superfícies é descrita por Dziuk (1988), onde é proposta uma aproximação por polígonos em trechos para a superfície utilizando um espaço de elementos finitos em uma discretização nessa superfície. Para uma revisão abrangente sobre métodos com elementos finitos para resolver PDEs em superfícies, veja (DZIUK; ELLIOTT, 2013) e as referências citadas nesse trabalho.

Em problemas transientes a interface pode experimentar mudanças geométricas constantes. A utilização de um método padrão de elementos finitos requer a computação de uma nova triangulação a cada iteração temporal, o que pode se tornar computacionalmente custoso. Neste contexto, é vantajoso utilizar um método computacional que permite que a interface atravesse arbitrariamente através de uma malha em segundo plano. Um método com malhas não alinhadas para um problema envolvendo o operador de Laplace-Beltrami foi abordado em (OLSHANSKII; REUSKEN; GRANDE, 2009) e mais recentemente por Burman et al. (2014), onde os autores discutem um modelo geral para resolver EDPs em superfícies utilizando o MEF em malhas cortadas sob a abordagem do método chamado *CutFEM*. Métodos com malhas não alinhadas podem resultar em mal-condicionamento da matriz de rigidez devido à natureza arbitrária do corte da fronteira sobre a malha

em segundo plano. Este problema tem sido estudado para sistemas com o operador de Laplace-Beltrami também, cf. (BURMAN; HANSBO; LARSON, 2015; OLSHANSKII; REUSKEN, 2010). Neste trabalho, é proposto um experimento numérico de um problema de difusão pura em uma superfície, que pode ser generalizado pela equação

$$-\Delta_{\Gamma}u = f \quad (2.76)$$

avaliada em uma superfície unidimensional embutida no espaço bidimensional. O experimento numérico proposto propõe um método de elementos cortados para resolver EDPs em superfícies baseado na formulação reportada em (BURMAN et al., 2014).

### 2.8.1 O Operador Laplace-Beltrami

O operador Laplace-Beltrami é uma generalização do operador de Laplace que opera em funções definidas sobre as superfícies no espaço Euclidiano. Da mesma forma que o Laplaciano, o operador de Laplace-Beltrami pode ser definido como o divergente de um gradiente. Nesta seção apenas uma breve descrição do operador é introduzida, para mais detalhes o leitor é remetido a um bom livro sobre geometria diferencial (PRESSLEY, 2013; KREYSZIG, 2013).

Para cada  $\mathbf{x} \in U(\Gamma)$ , a projeção de  $\mathbb{R}^{\dim}$  sobre o plano tangente de  $\Gamma$  é definido como

$$P_{\Gamma} = I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (2.77)$$

onde  $I$  é a matriz identidade e  $\mathbf{n}$ , o vetor normal. O gradiente tangencial de uma função  $\phi \in C^1(U(\Gamma))$  em  $\mathbf{x} \in \Gamma$  é dado por:

$$\nabla_{\Gamma}\phi(\mathbf{x}) = P_{\Gamma}\nabla\phi(\mathbf{x}), \quad (2.78)$$

onde  $\nabla$  é o operador gradiente usual em  $\mathbb{R}^{\dim}$ . Finalmente, o operador Laplace-Beltrami para uma função  $\phi \in C^2(U(\Gamma))$  é definido como

$$\Delta_{\Gamma}\phi(\mathbf{x}) = \nabla_{\Gamma} \cdot \nabla_{\Gamma}\phi(\mathbf{x}). \quad (2.79)$$

## 2.9 ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA

### 2.9.1 Problema de Poisson

#### Número de condicionamento da matriz de rigidez

A formulação descrita pelo método dos elementos cortados produz um número de condicionamento da matriz de rigidez com limite superior semelhante aquele que é encontrado com o método padrão de elementos finitos. Mais detalhes sobre a análise podem ser encontrados em (ERN; GUERMOND, 2006).

Seja  $\mathbf{U}$  qualquer vetor tal que  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^N$ , onde  $N = \dim V_h$ , e seja sua função correspondente em elementos finitos em  $V_h$  representada por  $u_h$ . A norma Euclidiana padrão é definida por  $\|\mathbf{U}\|_N$ . Seja a matriz de massa  $\mathcal{M}$ , a qual é definida pela forma bilinear  $(u_h, v_h)$ , e a matriz de rigidez  $A$ , a qual é definida pela forma bilinear  $A_h(u_h, v_h)$ . A triangulação  $T_h$  conforma-se com o domínio  $\Omega_T$ . Portanto a seguinte estimativa é verdadeira:

$$\mu_{\min}^{1/2} \|\mathbf{U}\|_N \leq \|u_h\|_{0, \Omega_T} \leq \mu_{\max}^{1/2} \|\mathbf{U}\|_N, \quad (2.80)$$

onde  $\mu_{\min}$  e  $\mu_{\max}$  referem-se ao menor e maior autovalores da matriz de massa  $\mathcal{M}$ . O número de condicionamento da matriz de rigidez  $A$  é representado por  $\kappa(A)$  e sua definição é dada por

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|, \quad (2.81)$$

onde

$$\|A\| = \sup_{\mathbf{U} \in \mathbb{R}^N} \frac{\|A\mathbf{U}\|_N}{\|\mathbf{U}\|_N}. \quad (2.82)$$

O número de condicionamento da matriz de rigidez resultante da formulação de elementos finitos utilizando o método de Nitsche satisfaz o limite superior:

$$\kappa(A) \leq C h^{-2}, \quad (2.83)$$

onde  $C$  é uma constante independente de como a fronteira atravessa a malha. A prova e definição de  $C$  são dados em (BURMAN; HANSBO, 2012).

#### Limites de erro ótimos

A diferença entre a solução numérica  $u$  e a solução exata  $u_h$  é computada através de erros definidos nas normas  $L_2$  e  $H^1$ , que são

definidas, respectivamente, por:

$$\|u - u_h\|_{L_2(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} |u - u_h|^2 \, d\mathbf{x} \right)^{1/2} \quad (2.84)$$

e

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} = \left( \|u - u_h\|_{L_2(\Omega)}^2 + |u - u_h|_{H^1(\Omega)}^2 \right)^{1/2}, \quad (2.85)$$

onde  $|u - u_h|_{H^1(\Omega)}$  se refere à seminorma  $H^1$ ,

$$|u - u_h|_{H^1(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} |\nabla(u - u_h)|^2 \, d\mathbf{x} \right)^{1/2}. \quad (2.86)$$

A solução numérica por elementos finitos  $u_h$  satisfaz as seguintes estimativas de erro em  $H^1$  e  $L_2$ , respectivamente (BURMAN; HANSBO, 2012):

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq C h \|u\|_{H^1(\Omega)}, \quad (2.87)$$

$$\|u - u_h\|_{L_2(\Omega)} \leq C h^2 \|u\|_{L_2(\Omega)}. \quad (2.88)$$

## 2.9.2 Problema de Laplace-Beltrami

### Número de condicionamento da matriz de rigidez

Da mesma forma que na modelagem do modelo padrão de Poisson, o número de condicionamento da matriz de rigidez  $\kappa(A)$  é proporcional a  $h^{-2}$  e a seguinte estimativa é válida independentemente da intersecção com a fronteira (OLSHANSKII; REUSKEN, 2010):

$$\kappa(A) \leq C h^{-2}. \quad (2.89)$$

### Limites de erro ótimos

As estimativas de erro nas normas  $H^1$  e  $L_2$  são, respectivamente:

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Gamma)} \leq C h \|u\|_{H^1(\Gamma)}, \quad (2.90)$$

$$\|u - u_h\|_{L_2(\Gamma)} \leq C h^2 \|u\|_{L_2(\Gamma)}. \quad (2.91)$$

Para uma descrição das provas, veja (BURMAN et al., 2014; OLSHANSKII; REUSKEN; GRANDE, 2009).

## 2.10 PROBLEMAS DE REAÇÃO-DIFUSÃO

Problemas envolvendo equações de reação e difusão aparecem com frequência em muitas situações em vários campos científicos, especialmente em aplicações bioquímicas e de engenharia. Tipicamente, uma reação química surge a partir do encontro aleatório de moléculas e resulta na formação de novas espécies químicas e/ou de energia. Na maioria dos casos, a variação local de um elemento químico cria um gradiente de concentração que é a principal força motriz do processo de difusão. O fenômeno de difusão é encontrado em diversas aplicações científicas e é fundamental para compreender os processos metabólicos subjacentes que ocorrem nos organismos vivos.

Esse trabalho foca no processo de reação-difusão que ocorre em células biológicas, onde várias reações ocorrem tanto no citoplasma e na membrana e os componentes difundem-se pelo corpo celular. Um sistema típico que ocorre no microrganismo *Escherichia coli* é a regulação do local de divisão celular, que pode ser determinado pela dinâmica complexa de proteínas Min. O mecanismo de oscilação Min tem sido extensivamente estudado e modelado com abordagens determinísticas (HOWARD; RUTENBERG; VET, 2001; HUANG; MEIR; WINGREEN, 2003) ou estocásticas (PAVIN; PALJETAK; KRSTIC, 2006).

Primeiramente um modelo transiente da reação e difusão de uma célula em duas dimensões com um sistema acoplado volume-superfície é apresentado. Em tais sistemas, há componentes que situam-se no citoplasma da célula, representada como um domínio volumétrico ( $\Omega$ ), e espécies que são restritas à membrana, representada pelo sub-domínio  $\Gamma = \partial\Omega$ . O modelo para os sistemas acoplados de volume-superfície de reação-difusão pode ser generalizado como (NOVAK et al., 2007):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\nabla \cdot D_i \nabla u_i + r_i, \quad u_i \in H^1(\Omega), \quad (2.92)$$

para espécies  $i$  no domínio volumétrico ( $\Omega$ ) e

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} = -\nabla_\Gamma \cdot D_j \nabla_\Gamma u_j + r_j, \quad u_j \in H^1(\Gamma), \quad (2.93)$$

para componentes  $j$  limitados ao domínio da membrana ( $\Gamma$ ).  $D_k$  são os coeficientes de difusão,  $u_k$  são as concentrações,  $r_k$  são as velocidades



de reação e  $\nabla_{\Gamma}$  é o operador Laplace-Beltrami.

## 2.11 A BIBLIOTECA DE ELEMENTOS FINITOS DEAL.II

deal.ii<sup>3</sup> (*Differential Equations Analysis Library*) é uma biblioteca de código aberto escrita em linguagem C++ para resolver problemas descritos por equações diferenciais parciais utilizando o Método de Elementos Finitos. Ela foi introduzida em 1999 por Bangerth e Kanschat (1999) e sua versão atual, 8.3, foi lançada em agosto de 2015 (BANGERTH et al., 2015).

Para resolver problemas através do MEF, deal.ii exige uma descrição em baixo nível do problema a ser resolvido, *i.e.*, ele requer que o usuário especifique a EDP na forma fraca e a montagem dos sistemas lineares. A descrição do problema a um baixo nível facilita a manipulação direta do processo de montar e resolver o problema de elementos finitos. Isso é especialmente vantajoso no método de elementos cortados, uma vez que permite acesso direto às entidades da malha, como elementos, faces e arestas, e permite uma manipulação fácil das entradas das matrizes. Uma sequência básica de passos para montar problemas com o MEF usando deal.ii é dado no algoritmo 2.1.

Além das características favoráveis que deal.ii oferece para o desenvolvimento de métodos de malha não-alinhada, o *software* foi escolhido por possuir extensa documentação, incluindo uma série de vídeo-aulas disponíveis gratuitamente<sup>4</sup>, suporte para uso de outras bibliotecas de computação científica (PETSc, Trilinos, BOOST, etc.) e uma comunidade de usuários ativa<sup>5</sup>.

---

<sup>3</sup><http://www.dealii.org/>

<sup>4</sup><http://www.math.tamu.edu/~bangerth/videos.html>

<sup>5</sup><https://groups.google.com/forum/\#!forum/dealii>

---

**Algoritmo 2.1** Montando um problema com o MEF na plataforma deal.i

---

Geração da triangulação

Input da geometria e geração da malha

Organização e associação de graus de liberdade

Montagem das matrizes

Definição do tipo de elementos finitos

Definição da regra de quadratura

Input de dados sobre o modelo

Iteração sobre elementos

Iteração sobre graus de liberdade

Computar  $A_{ij}, L_i$

Montar  $A, L$

Solução

Resolver  $U = A^{-1}L$

Publicação de resultados

---

### 3 MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA

#### 3.1 REPRESENTAÇÃO IMPLÍCITA DA FRONTEIRA

A representação da fronteira segue o método de função *level-set* como descrito a seção 2.7. Nesse trabalho as fronteiras que definem as geometrias utilizadas nos estudos de casos são sempre definidas por bolas, *i.e.*, círculos em 2D e esferas em 3D. A geometria do círculo unitário com centro na origem pode ser representada pela função de distância com sinal:

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{x^2 + y^2} - 1, \quad (3.1)$$

enquanto a esfera equivalente pode ser descrita pela função

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - 1. \quad (3.2)$$

A generalização da representação implícita de bolas em  $dim$ -dimensões pode ser expressada por:

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\sum_{i=0}^{\dim-1} (x_i - c_i)^2} - r, \quad (3.3)$$

onde  $c = (c_0, \dots, c_{\dim-1})$  é o ponto do centro da bola e  $r$  é o raio da bola.

Como uma medida da exatidão da aproximação gerada pelo método *level-set*, as malhas de elementos cortados resultantes foram comparadas com as malhas geradas pela função padrão de criação de malhas fornecida por deal.ii. Os volumes totais de ambas as malhas foram comparadas, utilizando como base o número de elementos. Para a malha gerada pelos elementos cortados, o volume total pode ser calculado pela soma dos volumes da fração de cada elemento em  $\Omega$ :

$$V_{esfera} = \sum_i \int_{K_\Omega} dV. \quad (3.4)$$

A integração foi realizada utilizando o método descrito na seção 2.6. O volume da malha gerada por deal.ii foi calculada pela função nativa `GridTools::volume`.

#### Geometrias Alternativas

Com o intuito de verificar se o método proposto para detecção da fronteira não está limitado a geometrias simples como as geometrias propostas para resolver os estudos de caso, duas novas geometrias foram estudadas. Entretanto, nenhuma equação foi resolvida nesses domínios; o único objetivo é analisar a geração da malha.

**Bactéria.** Um exemplo de interesse é a construção da geometria de uma bactéria. Pavin, Paljetak e Krstic (2006) simularam a geometria tridimensional de uma bactéria *E. coli* como um cilindro de comprimento  $H$ , raio  $R$  e com dois hemisférios esféricos de raio  $R$  em cada extremidade. Com base nessa descrição, propõe-se, no presente trabalho, que a fronteira pode ser representada pela função *level-set*

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sqrt{y^2 + z^2} - R & \text{se } x < H/2 \\ \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - R & \text{se } x \geq H/2 \end{cases}, \quad (3.5)$$

para uma bactéria alinhada ao eixo  $x$ .

**Bloco de Queijo Suíço.** Burman et al. (2014), ao descrever um método de elementos finitos em malhas não-alinhadas, propõe malhas não-triviais como donuts, pipoca e queijo suíço. A geometria de um bloco de queijo suíço é gerada nesse trabalho, a partir da função *level-set* proposta no trabalho citado:

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) = & (x^2 + y^2 - 4)^2 + (z^2 - 1) + (y^2 + z^2 - 4)^2 \\ & + (x^2 - 1)^2 + (z^2 + x^2 - 4)^2 + (y^2 - 1)^2 - 15. \end{aligned} \quad (3.6)$$

### 3.2 ESTUDOS DE CASOS

As seções a seguir introduzem os experimentos numéricos utilizando o MEF com elementos cortados. Primeiramente, será resolvida a equação clássica de Poisson em geometrias bi e tridimensionais, como descrito na seção 2.1.1, onde a formulação matemática e método de solução foram apresentadas e portanto serão omitidas nessa seção. Em seguida, o problema de Laplace-Beltrami é proposto e, finalmente, um caso de reação e difusão é introduzido.

### 3.2.1 Problema de Poisson

O modelo descrito pela equação de Poisson com condições de contorno de Dirichlet impostas fracamente pelo método de Nitsche foi resolvido utilizando-se o método de elementos cortados em uma esfera (3D) e em um disco (2D), ambos com raio  $r = 1$ . A fronteira é representada pela função *level-set* (3.3)

$$\phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\sum_{i=0}^{\dim-1} (x_i - c_i)^2} - r,$$

onde  $c = (c_0, \dots, c_{\dim-1})$  é o ponto do centro da bola. Relembrando a equação de Poisson (2.1) e estabelecendo  $g_D = 0$ , o problema a ser resolvido é:

$$-\Delta u = 1 \text{ em } \Omega \quad (3.7)$$

$$u = 0 \text{ sobre } \Gamma = \partial\Omega, \quad (3.8)$$

que tem solução analítica:

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1 - |\mathbf{x}|^2}{2 \dim}. \quad (3.9)$$

Os valores de  $\gamma_D$  e  $\gamma_1$  das equações (2.24) e (2.22) foram estabelecidos em 5,0 e 0,1, respectivamente. O domínio  $\Omega$  foi inserido em um hipercubo  $(-1, 5; 1, 5) \subset \mathbb{R}^{\dim}$  particionado em cubos (3D) ou quadrados (2D) de tamanho igual. Para detalhes sobre a formulação em elementos finitos, veja a seção 2.3.

### 3.2.2 Problema de Laplace-Beltrami

#### 3.2.2.1 O Problema de Difusão de Laplace-Beltrami

O problema de difusão pura em uma superfície fechada  $\Gamma$  de co-dimensão  $\dim - 1$  é proposto como um estudo de caso para a implementação do método de elementos cortados:

$$-\Delta_{\Gamma} u = f \text{ sobre } \Gamma, \quad (3.10)$$

onde  $\Delta_\Gamma$  representa o operador de Laplace-Beltrami, definido na seção 2.8.1. Uma vez que qualquer função constante é uma solução para esse problema, é necessário impor uma restrição adicional para obter uma solução única. Neste problema o valor médio de  $u$  é escolhido para desaparecer na fronteira, tal que

$$\int_{\Gamma} u \, ds = 0. \quad (3.11)$$

O primeiro passo para obter uma forma computável da equação (3.10) é definir um espaço funcional apropriado. O espaço dos polinômios bilineares de Lagrange contínuos é usado. O espaço  $V_S$  é então introduzido, com a aplicação da restrição utilizando o método multiplicador de Lagrange (OLSHANSKII; REUSKEN; GRANDE, 2009):

$$V_S = \left\{ v \in H^1(\Gamma) \mid \int_{\Gamma} v \, ds = 0 \right\}. \quad (3.12)$$

Para obter a forma variacional, o mesmo procedimento descrito na seção 2.1.1 é aplicado, assim como a notação sobre as características da malha. Primeiramente, multiplica-se a forma forte (3.10) por uma função teste  $v \in V_S$  e integra-se utilizando a fórmula de Green. O problema na formulação fraca então torna-se: encontre  $u \in V_S$  tal que

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in V_S, \quad (3.13)$$

onde  $a(u, v)$  se refere à forma simétrica bilinear sobre  $\Gamma$  e  $f(v)$ , à forma linear funcional:

$$a(u, v) = (\nabla_\Gamma u, \nabla_\Gamma v)_\Gamma, \quad (3.14)$$

$$f(v) = (f, v)_\Gamma. \quad (3.15)$$

### 3.2.2.2 Formulação do Problema

O problema de difusão puro de Laplace-Beltrami foi solucionado utilizando o método de elementos cortados em um domínio bidimensional circular com raio  $r = 1$ . O lado direito da função  $f$  foi escolhido para ser igual a:

$$f(x, y) = 9 \sin(3 \arctan(x/y)), \quad (3.16)$$

a fim de impor um gradiente oscilatório como proposto em (KAMILIS, 2013), tal que a solução analítica é:

$$u(x, y) = \sin(3 \arctan(x/y)). \quad (3.17)$$

O domínio da fronteira  $\Gamma$  é definido por um círculo de raio  $r = 1$  e é obtido através da função *level-set* (3.1)

$$\phi(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - r.$$

O domínio está embutido em uma triangulação regular

$$T_h = [-1, 5; 1, 5] \times [-1, 5; 1, 5]$$

composta de quadrados de tamanho igual. A triangulação é dividida em sub-domínios  $\Omega_0$ ,  $G_h$  e  $\Omega_2$  como descrito na seção 2.7. Células dos domínios  $\Omega_0$  e  $\Omega_2$  foram excluídas da computação, tal que o conjunto de elementos discretos é igual a  $G_h$ . O parâmetro de estabilização  $\gamma_S$  foi estabelecido em 0.01 baseado em (BURMAN et al., 2014; KAMILIS, 2013).

### 3.2.2.3 Formulação em Elementos Finitos

A fim de discretizar a formulação, o conjunto de elementos  $K$  associado com o limite  $\Gamma$  é definido da seguinte forma, da mesma maneira que na seção 2.2:

$$G_h = \{K \in T_h : K \cap \Gamma_h \neq \emptyset\}. \quad (3.18)$$

Seja  $V^{h,1}$  o espaço de funções contínuas definidas em trechos na triangulação  $T_h$ . O espaço funcional  $V^h$  é definido como um espaço de funções contínuas lineares definida em trechos em  $G_h$  com média nula ao longo da fronteira:

$$V^h = \left\{ v_h \in H^1 : V^{h,1}|_{\Omega_T} : \int_{\Gamma} v_h \, d\Gamma = 0 \right\}. \quad (3.19)$$

O problema, com a discretização padrão de Galerkin da equação (3.13), torna-se: encontre  $u_h \in V^h$  tal que:

$$A_h(u_h, v_h) = L(v_h), \forall v_h \in V^h, \quad (3.20)$$

cuja forma bilinear é dada por:

$$A_h(u_h, v_h) = (u_h, v_h)_{\Gamma_h} + \gamma_S h j_h(u_h, v_h) \quad (3.21)$$

e

$$L(v_h) = (f, v_h)_{\Gamma_h}. \quad (3.22)$$

O termo de estabilização  $j_h(u_h, v_h)$  é definido por:

$$j_h(u_h, v_h) = \sum_{F \in \mathcal{F}_S} ([\nabla u_h], [\nabla v_h]_F)_\Gamma. \quad (3.23)$$

onde  $[\nabla u]$  denota o salto do gradiente de  $u$  sobre a face  $F$ . Para definições dos termos salto e o conjunto  $\mathcal{F}_S$ , veja a seção 2.2.

### 3.2.3 Problema de Reação-Difusão

#### 3.2.3.1 O problema de Reação-Difusão

O sistema proposto é composto de um domínio circular onde uma espécie química  $A$  difunde em um domínio  $\Omega$  e reage em uma seção da membrana  $\Gamma = \partial\Omega$ , identificado por  $\Gamma_1 \subset \Gamma$ . A reação produz um componente  $B$  e o mecanismo de reação é dado por uma reação simples de primeira ordem com constante de velocidade de reação  $k$ :



O componente  $B$  é limitado à membrana e difunde livremente nela. O componente  $A$  pode estar presente em ambos os domínios. As velocidades de reação são dadas por:

$$r_A = -r_B = -k u_A. \quad (3.25)$$

A reação ocorre somente em parte da fronteira, portanto o termo de reação é multiplicado por uma função delta de Kronecker  $\delta(\mathbf{x})$ . Condições de contorno de Neumann com fluxo igual a zero são escolhidas na fronteira, significando que esse é um domínio fechado sem contato com o exterior. O sistema final acoplado é:

$$\frac{\partial u_A}{\partial t} - \nabla \cdot D_A \nabla u_A + \delta(\mathbf{x}) k u_A = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla u_A = 0 \quad \text{sobre } \Gamma, \quad (3.27)$$



$$\frac{\partial u_B}{\partial t} - \nabla_\Gamma \cdot D_B \nabla_\Gamma u_B - \delta(\mathbf{x}) k u_A = 0 \quad \text{sobre } \Gamma. \quad (3.28)$$

A formulação fraca é obtida pelo mesmo procedimento previamente introduzido. Para a equação no domínio volumétrico: multiplica-se a equação (3.26) por uma função teste  $v_A \in H^1(\Omega)$  e integra-se utilizando o Teorema de Green:

$$\left( \frac{\partial u_A}{\partial t}, v_A \right) + a(u_A, v_A) + \langle \delta(\mathbf{x}) k u_A, v_A \rangle - L(v_A) = 0, \quad (3.29)$$

onde  $L(v_A) = \langle v_A, g_N \rangle$ . Para a equação na superfície, multiplica-se a equação (3.27) por uma função teste  $v_B \in H^1(\Gamma)$  e integra-se aplicando o Teorema de Green:

$$\left\langle \frac{\partial u_B}{\partial t}, v_B \right\rangle + a(u_B, v_B) - \langle \delta(\mathbf{x}) k u_A, v_B \rangle = 0. \quad (3.30)$$

### 3.2.3.2 Formulação em Elementos Finitos

A discretização espacial do sistema de EDPs é baseada na formulação em elementos finitos dos estudos de caso anteriores. O espaço de elementos Lagrange bilineares (2.15) é utilizado:

$$V_A^h = \{v : v \in C^0(\Omega), v|_K \in Q_1(K), \forall K \in T_h\},$$

e da equação (3.12) (exceto que a restrição na fronteira não é imposta):

$$V_B^h \subset V = H^1(\Gamma).$$

A discretização então torna-se:

$$\left( \frac{\partial u_A^h}{\partial t}, v_A^h \right) + A_h(u_A^h, v_A^h) + (\delta(\mathbf{x}) k u_A^h, v_A^h) - L(v_A^h) = 0 \quad (3.31)$$

$$\left\langle \frac{\partial u_B^h}{\partial t}, v_B^h \right\rangle + A_h \langle u_B^h, v_B^h \rangle - \langle \delta(\Gamma) k u_A^h, v_B^h \rangle = 0. \quad (3.32)$$

A discretização temporal foi realizada utilizando o método de Crank-Nicolson (CRANK; NICOLSON, 1996), que é estável para o sistema proposto. A solução  $u$ , onde  $u$  pode ser  $u_A$  ou  $u_B$ , é substituída pela seguinte aproximação:

$$u(\mathbf{x}, t) = (1 - \theta) u^{n-1} + \theta u^n, \quad (3.33)$$

onde  $n$  é o passo no tempo e  $\theta$  é um parâmetro que ajusta a aproximação. Por exemplo, se  $\theta = 0$ , a formulação se reduz ao método de Euler explícito. Se  $\theta = 1$ , ela se reduz ao método de Euler implícito puro. No método de Crank-Nicolson, foi escolhido  $\theta = 0,5$  e a iteração temporal é implícita e estável. A derivada temporal é aproximada por:

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{u^n - u^{n-1}}{\Delta t}. \quad (3.34)$$

A fim de obter o sistema linear final, as equações (3.21)-(3.34) são substituídas em (3.31). Em seguida, a solução  $u^h$  é substituída por  $u^h = \sum_j U_j \phi_j$  e a função teste por  $v^h = \phi_i$ , como feito anteriormente.

O método de Nitsche estabilizado é utilizado para impor condições de contorno de Neumann na equação (3.31), utilizando a formulação (2.25) para o termo bilinear  $A_h(v_A^h, u_A^h)$  e a formulação (2.24) para o termo  $L(v_A^h)$ .

A equação final a ser resolvida é:

$$\begin{aligned} & [M_\Omega + \theta \Delta t (A_\Omega + k M_\Gamma^R)] U_A^n \\ & = [M_\Omega - (1 - \theta) \Delta t (k M_\Gamma^R + A_\Omega)] U_A^{n-1}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde a matriz de rigidez  $A_\Omega$  é dada por

$$\begin{aligned} (A_\Omega)_{ij} &= (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j)_\Omega + \langle \gamma_N h \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla \phi_i, \mathbf{n}_\Gamma \cdot \nabla \phi_j \rangle_\Gamma \\ & \quad + \gamma_1 h j_h (\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{F}_G}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

A matriz de massa  $M_\Omega$  também é estabilizada adicionando-se termos de estabilização que são multiplicados por  $h^2$  como em (HANSBO; LARSON; ZAHEDI, 2015):

$$(M_\Omega)_{ij} = (\phi_i, \phi_j)_\Omega + \gamma_M h^2 j_h (\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{F}_G}. \quad (3.37)$$

A matriz  $M_\Gamma^R$  é a matriz de massa que surge do termo de reação, que ocorre somente em uma parte do domínio, definido pela função  $\delta(\mathbf{x})$ . A matriz também é estabilizada:

$$(M_\Gamma^R)_{ij} = (\delta(\mathbf{x}) \phi_i, \phi_j)_\Omega + \gamma_M h^2 j_h (\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{F}_S}. \quad (3.38)$$

O sistema linear para solucionar a equação (3.32) é obtido

seguindo-se os mesmos passos. A equação final é:

$$\begin{aligned} & [M_\Gamma + \theta \Delta t A_\Gamma] U_B^n \\ &= [M_\Gamma - (1 - \theta) \Delta t A_\Gamma] U_B^{n-1} + k C_\Gamma \Delta t. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Aqui, a forma estabilizada do termo bilinear (3.21) foi utilizada para definir  $A_h \langle u_B^h, v_B^h \rangle$ , tal que a matriz de rigidez  $A_\Gamma$  é:

$$(A_\Gamma)_{ij} = \langle \nabla_\Gamma \phi_i, \nabla_\Gamma \phi_j \rangle + \gamma_S h j_h(\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{F}_S}. \quad (3.40)$$

A matriz de massa  $M_\Gamma$  também é estabilizada e torna-se:

$$(M_\Gamma)_{ij} = \langle \phi_i, \phi_j \rangle_\Gamma + \gamma_M h^2 j_h(\phi_i, \phi_j)_{\mathcal{F}_S}. \quad (3.41)$$

O vetor  $C_\Gamma^n$  é obtido pela integração do termo de reação e depende da concentração de  $u_A^n$ . O vetor é dado por:

$$(C_\Gamma^n)_{ij} = \langle \delta(\Gamma) u_A, \phi_i \rangle_\Gamma, \quad (3.42)$$

onde  $u_A$  é obtido pela eq. (3.33) dos já computados  $u_A^n$  e  $u_A^{n-1}$ . O sistema linear resultante para ser resolvido a cada iteração temporal é formado pelas equações (3.35) e (3.39).

### 3.2.3.3 Formulação do Problema

O conjunto de EDPs foi solucionado com o método de elementos cortados em um domínio circular em duas dimensões com raio  $r = 1$ , tal que a fronteira  $\Gamma$  é representada pela função *level-set*

$$\phi(x, y) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - r.$$

A fronteira  $\Gamma$  foi separada em dois subdomínios:  $\Gamma_1$ , representado pelo terceiro quadrante do círculo, dado por

$$\Gamma_1 = \{(x, y) \in \Gamma : x < 0, y < 0\} \quad (3.43)$$

e  $\Gamma_2$ , representado pelos quadrantes restantes:

$$\Gamma_2 = \{(x, y) \in \Gamma \setminus \Gamma_1\}. \quad (3.44)$$

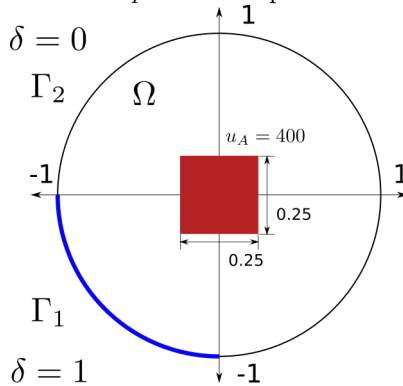
A função delta  $\delta(\mathbf{x})$  é então definida como:

$$\delta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{se } \Gamma = \Gamma_1 \\ 0 & \text{se } \Gamma = \Gamma_2 \end{cases} \quad (3.45)$$

A constante de reação foi estabelecida em  $k = 100 [s^{-1}]$ . Os coeficientes de difusão são homogêneos sobre o domínio e foram ambos estabelecidos em  $D_A = D_B = 0,1 [m s^{-1}]$ . Como condição inicial, a concentração de  $A$  foi estabelecida em um quadrado  $[-0,25; 0,25] \times [-0,25; 0,25] [m^2]$ , com valor  $u_A = 400 [mol m^{-2}]$  e igual a zero no restante do domínio. A geometria com cantos agudos foi proposta a fim de avaliar a suavização da solução. Um diagrama com a geometria e condições iniciais é mostrado na Figura 5. A concentração inicial de  $B$  foi estabelecida como zero em todos os domínios.

A solução foi calculada para um tempo total de  $t_f = 20,0 [s]$ , com um passo no tempo igual a  $\Delta t = 0,004 [s]$ . Os parâmetros foram selecionados da seguinte maneira:  $\gamma_1 = 0,1$ ;  $\gamma_S = 0,01$ ;  $\gamma_M = 0,1$ ;  $\gamma_D = 5$  e  $\gamma_N = 1$ .

Figura 5 – Diagrama do *setup* inicial do problema de reação-difusão



### 3.2.3.4 Conservação de Massa

Uma vez que não há termos de geração nem fluxo através da fronteira, a variação total de massa no domínio deve aproximar-se de zero. Para garantir que a massa é conservada ao longo do intervalo de tempo, computa-se a massa total  $M_{t_i}$  no domínio a cada passo no tempo  $t_i$  utilizando a seguinte equação:

$$M_{t_i} = \sum_{K_i \in \Omega_{K_i}}^{n_K} \int u_A^{t_i} d\Omega + \sum_{\Gamma_{K_i} \in G_h \Gamma_{K_i}}^{n_{G_h}} \int u_B^{t_i} d\Gamma \quad (3.46)$$

e avalia-se a variação de  $M_{t_i}$  relativa à massa inicial presente no domínio com:

$$\Delta M_{t_i} = \left| \frac{M_{t_i} - M_{t_0}}{M_{t_0}} \right| \times 100\%. \quad (3.47)$$



## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 O PROGRAMA *FEM-CUT-CELL-3D*

Como resultado do projeto de pesquisa realizado para implementar a resolução de problemas de reação-difusão com o Método de Elementos Cortados, o autor desenvolveu o *software fem-cut-cell-3D*, que está em fase inicial e tem como objetivo ser uma ferramenta para resolver problemas de elementos finitos com o método proposto. O programa é escrito em linguagem de programação C++ e é implementado a partir da biblioteca deal.ii. Embora possa ser utilizado para problemas em 2 e 3 dimensões, a implementação não é independente da dimensão do problema, significando que códigos diferentes foram escritos para cada caso. A dificuldade de unir a implementação de ambos os casos surge principalmente da formulação matemática necessária para integrar funções sobre partes de elementos, como mostrado na seção 2.6. Não obstante, pretende-se adaptar o *software* para ser independente da dimensão do problema, utilizando uma implementação baseada em *templates* aos moldes de deal.ii.

Devido ao alto número de linhas de implementação (cerca de 13.000 para o caso 3D, sem comentários) o programa segue em disco anexo e somente alguns algoritmos importantes serão explorados no trabalho, em pseudocódigo.

#### 4.1.1 Utilização

No momento, o programa está disponível no repositório <https://github.com/afonsoal/fem-cut-cell-3D> sob licença MIT<sup>1</sup>. O repositório tem como exemplo implementado somente o problema de Poisson tridimensional, que será utilizado nessa seção como base para demonstrar o programa e a metodologia empregada. A implementação dos experimentos bidimensionais segue no disco em anexo.

A instrução para utilização do programa é feita com base em *Makefiles* e está descrita com detalhes no arquivo *README*. O programa é construído com base na biblioteca deal.ii, portanto, espera-se que as suas dependências e restrições estejam satisfeitas. deal.ii foi criado para ambientes Unix e é suportado em sistemas

---

<sup>1</sup><https://opensource.org/licenses/MIT>

operacionais Linux e Mac OS X.

O *output* de resultados das soluções numéricas é realizado em arquivos *.vtk*<sup>2</sup>, que podem ser visualizados por softwares como Visit ou Paraview.

## Disco em anexo

Anexo a esse trabalho encontra-se um disco com a implementação dos estudos de caso propostos com o Método dos Elementos Finitos. Nesse disco, estão implementados o problema de Poisson em 3D, da mesma maneira que no repositório mencionado anteriormente, e a implementação dos estudos de caso em 2D - problema de Poisson no disco, problema de difusão de Laplace-Beltrami e o problema transiente de reação-difusão. O arquivo `Dissertacao-leiame.txt` contém os detalhes de cada pasta e as instruções para compilar e rodar o programa.

Os resultados dos experimentos propostos estão todos disponíveis na pasta `resultados_dissertacao`. Os resultados estão no formato *.vtk*, com exceção do problema transiente de reação-difusão, que está disponível em formato de vídeo *.avi*. O leitor é encorajado a visualizar os arquivos mencionados a fim de ter uma perspectiva própria da solução.

### 4.1.2 Principais arquivos

As classes, arquivos de cabeçalho (*header*) e outros arquivos auxiliares à solução do problema encontram-se disponíveis em <https://github.com/afonsoal/fem-cut-cell-3D/tree/master/> include. A seguir uma breve descrição dos principais arquivos é introduzida. A descrição dos membros e funções internas pode ser encontrada na implementação dos códigos.

- `NewCell_3D (.cpp, .h)`

Classe e arquivo *header* contendo informações e métodos relevantes para a construção de uma nova estrutura baseada na fração do elemento atravessado  $K \in G_h$  contida em  $\Omega$ , *i.e.*, elementos  $K_\Omega$  como mostrado na seção 2.7. Armazena informações sobre faces através de um vetor

---

<sup>2</sup>Arquivos com formato *.vtk* são utilizados para visualização de soluções numéricas em malhas computacionais. Veja <http://www.vtk.org/> para mais informações.



STL<sup>3</sup> de objetos `NewFace_3D` (`std::vector<NewFace_3D>`) para fácil manipulação e extração de dados.

- `NewFace_3D (.cpp, .h)`

Contém dados e funções necessários para a implementação de faces pertencentes a um elemento cortado. Informações sobre as linhas (ou arestas) compondo a face são armazenadas em um `struct NewLine`, que são reunidos em um vetor de objetos (`std::vector<NewLine>`).

- `NewMesh_3D (.cpp, .h)`

Responsável por organizar e criar um objeto do tipo `dealii::Triangulation<3>`, que estrutura a malha, organizando graus de liberdade, mapeamento de elementos ao elemento de referência, entre outros. A nova triangulação é criada contendo somente elementos inteiramente ou parcialmente no domínio principal, *i.e.*, elementos  $\tilde{K} \in \Omega_T$ .

- `Write_VTK (.cpp, .h)`

Responsável pela criação de arquivos do tipo `.vtk` baseados na malha de elementos cortados que é gerada no programa principal. Gera uma estrutura baseada em linhas unidimensionais, apresentando versatilidade quanto ao formato polédrico do elemento cortado que resulta da intersecção da fronteira com a malha de fundo.

- `polymul.h`

Programa utilizado para multiplicar polinômios multivariáveis, implementado originalmente em Ekström (2009). O programa foi alterado pelo autor deste trabalho para incluir algumas funções pertinentes à manipulação de polinômios necessárias para integração em poliedros arbitrários. A característica essencial é a criação de polinômios com dimensão e ordem constantes no momento de compilação. A multiplicação polinomial é realizada de forma ineficiente, de forma que a multiplicação de dois polinômios univariados de grau  $n$  é de complexidade  $\mathcal{O}(n^2)$ .

- `Polynomials3D.h`

Código contendo a classe `Polynomials3D`, que expande a funcionalidade polinomial de `polymul.h`, bem como o `namespace NPPolynomials`. `NPPolynomials` contém funções utilizadas para

---

<sup>3</sup>C++ Standard Template Library

manipular polinômios, tais como aplicação dos operadores divergente e gradiente, cômputo dos campos vetoriais (equação (2.66)), projeção de planos (eq. (2.55)), multiplicações de campos vetoriais por matrizes, entre outros.

- `CutCell_Integration_3D (.cpp, .h)`

Parte central do programa, implementa as principais funções para integração numérica dos termos provenientes da formulação de elementos finitos com imposição de condições de contorno fracamente pelo Método de Nitsche (seção 2.3). Também implementa os polinômios de Lagrange utilizados para aproximação da solução e função de teste. No momento, a implementação de funções de integração com o operador Laplace-Beltrami está em teste e não está disponível.

- `poisson_problem.cc`

Arquivo principal do programa, que estabelece a sequência lógica de montagem de um problema com o MEF baseado no algoritmo 2.1. Uma versão simplificada da função `run`, utilizada para chamar as funções necessárias, é apresentada no algoritmo 4.1.

### 4.1.3 Limitações

O principal gargalo do programa consiste atualmente na etapa de integração sobre elementos cortados. A projeção de funções em superfícies do espaço  $xyz$  para o plano  $\alpha\beta$ , como descrito pela equação (2.55), envolve uma substituição de variáveis que é custosa computacionalmente, caso realizada com o atual método de multiplicação polinomial. Dessa maneira, o problema de Poisson, resolvido na esfera unitária, está limitado a um número máximo de 2.728 elementos aproximando o domínio, com diâmetro de elemento igual a 0,22.

Esse problema acontece principalmente pois as funções resultantes da multiplicação de polinômios de Lagrange que definem o espaço de elementos finitos não são definidas previamente, como é geralmente feito em códigos para solução de elementos finitos. A multiplicação polinomial e a manipulação das variáveis é feita durante a execução do programa, o que causa alto custo computacional. Não obstante, a implementação pode ser otimizada através da definição prévia das funções a serem integradas, a fim de competir com o método tradicional de elementos finitos.

---

**Algoritmo 4.1** Principais métodos chamados para resolver o problema, implementado em `poisson_problem.cc`

---

```

1: procedure RUN
   # Input de geometria, inicialização da malha  $T_h$ 
2:   make_grid
   # Projetar level-set sobre malha
3:   initialize_levelset
   # Publicar malha com valores levelset
4:   output_results_levelset
   # Eliminar elementos  $K \in \Omega_2$ , criar nova malha  $\Omega_h$ 
5:   get_new_triangulation
   # Setup de graus de liberdade e matrizes
6:   setup_system
   # Projetar level-set sobre nova malha
7:   initialize_levelset_new
   # Criar nova malha com elementos cortados  $K_\Omega$ 
8:   create_new_cut_cell_mesh
   # Montar matrizes  $A, L$ 
9:   assemble_system
10:  Input:
11:    Ordem polinomial
12:    Regra de quadratura
13:    Parâmetros do modelo ( $g_D, \gamma_D, \gamma_1, f$ , etc.)
   # Resolver sistema linear  $U = A^{-1}L$ 
14:  solve
   # Publicar solução
15:  output_results
   # Calcular erros comparando com sol. exata
16:  process_solution
   # Publicar resultados na malha com elementos cortados
17:  output_results_interpolated
18: end procedure

```

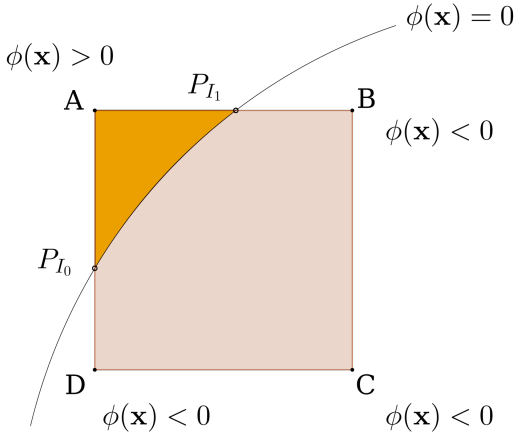
---

#### 4.1.4 Detecção de Intersecção

A detecção da intersecção da malha de fundo com a fronteira é realizada com o método de função *level-set* como explicado na seção 2.7. A notação matemática segue o padrão das características de malha descritas na seção 2.2.

A função *level-set* é projetada sobre a malha tal que cada nó é marcado com um *valor level-set*. Um exemplo de representação implícita na superfície é mostrada na Figura 6.

Figura 6 – Exemplo de um elemento cortado pela interface e os valores de *level-set* resultantes sobre os nós.



### Representação da Fronteira

O primeiro passo para a aproximação de interface é projetar a função *level-set* sobre a malha e identificar os elementos que estão inteiramente contidos em  $\Omega_0$ , inteiramente contidos em  $\Omega_2$  ou aqueles que são atravessados pela interface  $\Gamma$ ,  $K \in G_h$  (2.20). Para identificar esses elementos, é preciso analisar os valores projetados da função *level-set* sobre os nós do elemento. A fim de facilitar a identificação de elementos, a seguinte classificação é proposta:

#### Nós:

- Nós tipo 0: Nó  $P_0 = (\mathbf{x})$ ,  $\phi(\mathbf{x}) < 0$
- Nós tipo 1: Nó  $P_1 = (\mathbf{x})$ ,  $\phi(\mathbf{x}) = 0$
- Nós tipo 2: Nó  $P_2 = (\mathbf{x})$ ,  $\phi(\mathbf{x}) > 0$ .

#### Elementos:

É conveniente calcular o número de nós de cada tipo dentro de um elemento, tais como:  $N_{P_0}$ ,  $N_{P_1}$  and  $N_{P_2}$  para nós de tipo 0, 1 e 2, respectivamente. Um diagrama dos elementos de caracterização é mostrado na Figura 7.

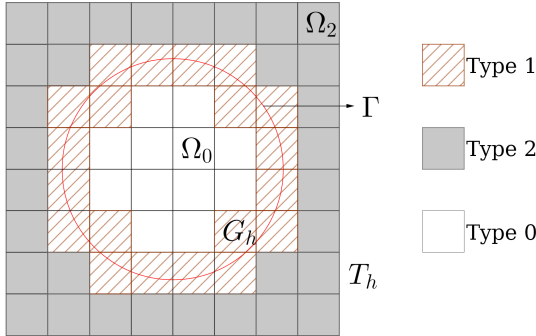
- Elemento tipo 0: uma célula é considerada "dentro" e está completamente dentro do subdomínio  $\Omega_0$  caso possua todos os nós do tipo 0 ou tipo 1.
  - 2D:  $K \in \Omega_0$  se  $N_{P_2} = 0$  e  $N_{P_0} + N_{P_1} = 4$ .
  - 3D:  $K \in \Omega_0$  se  $N_{P_2} = 0$  e  $N_{P_0} + N_{P_1} = 8$ .
- Elemento tipo 1: um elemento é classificado como um elemento de "interface" caso tenha pelo menos um nó do tipo 0 e um nó do tipo 2.
  - 2D:  $K \in G_h$  se  $N_{P_1} \geq 0$  e  $4 > N_{P_0} > 0$  e  $4 > N_{P_2} > 0$ .
  - 3D:  $K \in G_h$  se  $N_{P_1} \geq 0$  e  $8 > N_{P_0} > 0$  e  $8 > N_{P_2} > 0$ .
- Elemento tipo 2: um elemento é classificado como um elemento "exterior" se todos os nós são do tipo 1 ou 2.
  - 2D e 3D:  $K \in \Omega_2$  se  $N_{P_0} = 0$ .

***Faces:***

É relevante caracterizar apenas faces pertencentes a elementos do tipo 1, ou seja,  $K \in G_h$ . Faces são caracterizados como:

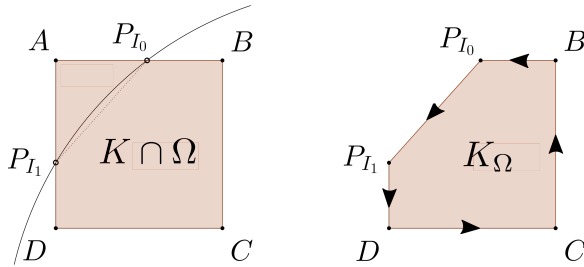
- Faces tipo 0: faces  $F \in \mathcal{F}_G \setminus \mathcal{F}_S$ , *i.e.*,  $F = K \cap K'$ , onde  $K \in G_h$  e  $K' \in \Omega_0$ .
  - Se pelo menos um nó é do tipo  $P_0$  e o(s) outro(s) é(são) do tipo  $P_0$  ou  $P_1$ .
- Faces tipo 1: faces atravessadas por  $\Gamma$ , *i.e.*,  $F \in \mathcal{F}_S$ .
  - Se pelo menos um nó é do tipo  $P_0$  e o(s) outro(s) é(são) do tipo  $P_2$ .
- Faces tipo 2: faces  $F \notin \mathcal{F}_G$ .
  - Se pelo menos um nó é do tipo  $P_2$  e o(s) outro(s) é(são) do tipo  $P_1$  ou  $P_2$ .

Figura 7 – Diagrama do domínio  $T_h$  cortado pela interface  $\Gamma$  representada pela função *level-set* (3.3), com a classificação resultante de elementos e caracterização dos domínios. No espaço tridimensional, a representação representa um corte transversal no plano  $yz$  para  $x = 0$ ; no caso 2D, a representação representa o domínio inteiro.



O passo mais importante da caracterização da fronteira é encontrar os pontos de intersecção da fronteira ( $\Gamma$ ) com as faces das células atravessadas pela fronteira ( $K \in G_h$ ). Uma face intersectada é caracterizada por ter os valores diferentes da projeção *level-set* sobre os nós com sinais diferentes (face do tipo 1). Uma vez identificada a face intersectada, pode-se calcular as coordenadas dos pontos de intersecção através de uma interpolação linear entre valores de *level-set* projetados nos seus nós. Em problemas de fronteira, onde o domínio de interesse é somente o domínio interior ( $\Omega$ ), uma "nova" estrutura de elementos cortados é criada contendo somente a parte de elementos  $K$  contida em  $\Omega$ . Para elementos  $K \in \Omega_0$ , as informações dos elementos são recuperados do quadro de informações nativos da biblioteca deal.ii para os dados da célula. Elementos  $K \in \Omega_2$  são excluídos da computação. Na Figura 8 um exemplo de um elemento em 2D atravessado pela fronteira é demonstrado. Note que na célula original existem 4 arestas (faces):  $\overline{AB}$ ,  $\overline{AD}$ ,  $\overline{DC}$  e  $\overline{CB}$ . No segundo caso, o elemento cortado tem 3 novas arestas:  $\overline{P_{I_0}B}$ ,  $\overline{P_{I_0}P_{I_1}}$  e  $\overline{P_{I_1}D}$  e mais 2 arestas originais:  $\overline{DC}$  e  $\overline{CB}$ . A nova face cortada representando a fronteira local do elemento,  $\overline{P_{I_0}P_{I_1}}$ , é marcada como uma aresta de fronteira, ao passo que outras arestas são arestas internas. O algoritmo e a estrutura de dados do elemento descrito não perde generalidade para o caso em que o novo elemento cortado tem mais ou menos arestas.

Figura 8 – Exemplo de um elemento atravessado pela fronteira e o elemento cortado resultante, com nós reordenados em ordem anti-horária.



A função `create_new_cut_cell_mesh` é responsável por detectar os pontos de intersecção e computar as novas informações relevantes sobre o elemento cortado em uma geometria 3D. As novas estruturas criadas são armazenadas em objetos do tipo `class NewCell_3D`, `class NewFace_3D` e `struct NewLine`, como mencionado na seção 4.1.2, a fim de facilitar a recuperação de dados em computações futuras. As informações relevantes contidas nesses objetos estão representadas no algoritmo 4.2, com as ordens de dependência artificialmente recuadas.

A fim de visualizar a solução somente em elementos pertencentes à geometria do problema, uma nova malha é gerada pela função `create_new_cut_cell_mesh` contendo somente as frações dos elementos  $K \in G_h$  contidas inteiramente no domínio  $\Omega$ , *i.e.*,  $\bigcup K_\Omega$ .

Um algoritmo simplificado da implementação de `create_new_cut_cell_mesh` encontra-se no Apêndice A.1. O caso bidimensional é análogo e será omitido. O processo começa com uma iteração sobre todas os elementos de  $G_h$ . Em seguida identifica-se as faces atravessadas pela interface e que estão completamente dentro de  $\Omega_0$  ou  $\Omega_2$ . Faces novas são criadas como descrito anteriormente e os nós são reordenados em sentido anti-horário, para facilitar a representação paramétrica e integração numérica posterior.

Algumas propriedades do novo elemento cortado podem ser herdadas da célula original das quais elas derivam. Por exemplo, os vetores normais de faces que não são interceptadas pela fronteira permanecem iguais aos da célula original. Nestes casos, a informação é simplesmente copiada a partir da estrutura de célula nativa fornecida por deal.ii. Quando novos dados precisam ser computados, funções

---

**Algoritmo 4.2**


---

```

1: class NewCell_3D {
2:     Índice do elemento
3:     Centro geométrico
4:     Número de faces
5:     Vetor de faces (objetos NewFace_3D)
6: }
7: class NewFace_3D {
8:     Vetor normal
9:     Centro geométrico
10:    Área
11:    Índice
12:    Identificação da face #face_de_frenteira/face_interna
13:    Variáveis de projeção #mapeamento xyz → αβ, cf. seção 2.6
14:    Vetor de arestas (objetos NewLine)
15: }
16: struct NewLine {
17:     Coordenadas dos nós
18:     Vetor normal
19:     Comprimento
20:     Variáveis de projeção # mapeamento αβ → t, cf. seção 2.6
21:     Identificação da aresta #aresta_de_frenteira/aresta_interna
22: }

```

---

dentro da classe computam e definem esses novos parâmetros. Esta abordagem também é vantajosa porque fornece uma maneira fácil e eficiente para recuperar as informações sobre elementos e faces através de índices, facilitando a integração numérica dos termos sobre a fronteira.

#### 4.1.4.1 Representação implícita pela função *level-set*

Na geometria bidimensional, a representação discreta da fronteira descrita pela 3.1 com  $r = 1$  embutida em uma malha de fundo  $T_h = [-1, 5; 1, 5] \times [-1, 5; 1, 5]$  formada por quadrados uniformes com  $h = 0,35$  é demonstrada na Figura 9. O iso-contorno de valores zero, representando  $\phi(\mathbf{x}) = 0$ , é obtido por interpolação e é mostrado como uma linha branca. No caso tridimensional, a função *level-set* de uma esfera embutida em um domínio  $(-2; 2) \subset \mathbb{R}^3$ , formado por cubos com  $h = 0,43$ , é demonstrada na Figura 10.



Figura 9 – A função *level-set* (3.1) projetada sobre a malha, com os valores iguais a zero representados pelo iso-contorno em branco.

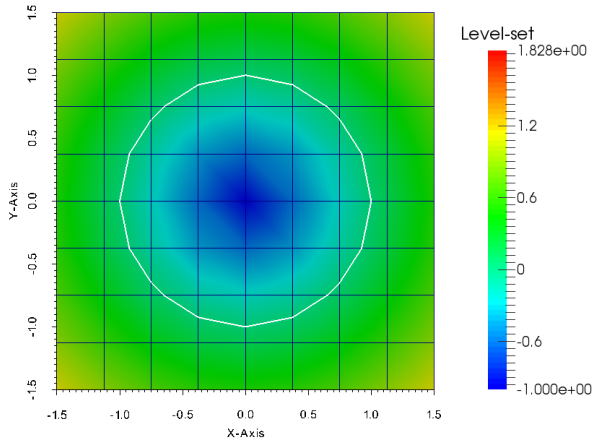
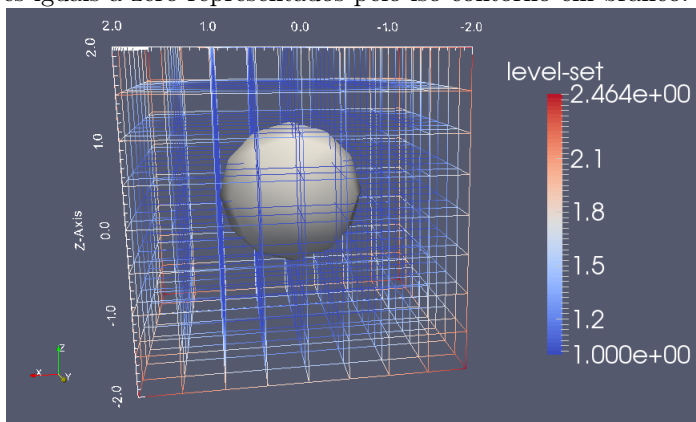


Figura 10 – A função *level-set* 3.2 projetada sobre a malha, com os valores iguais a zero representados pelo iso-contorno em branco.

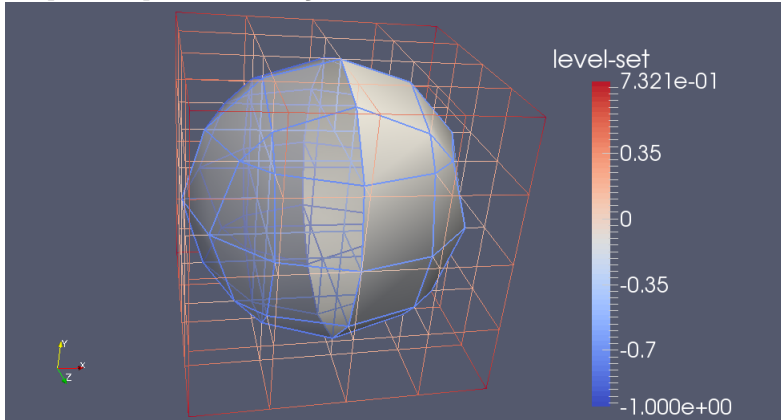


A representação da fronteira mostrou-se fiel às geometrias propostas, tal que as bolas resultantes respeitaram os limites da fronteira e mostraram-se simétricas em relação aos eixos de coordenadas.

#### 4.1.4.2 Geração da malha de elementos cortados

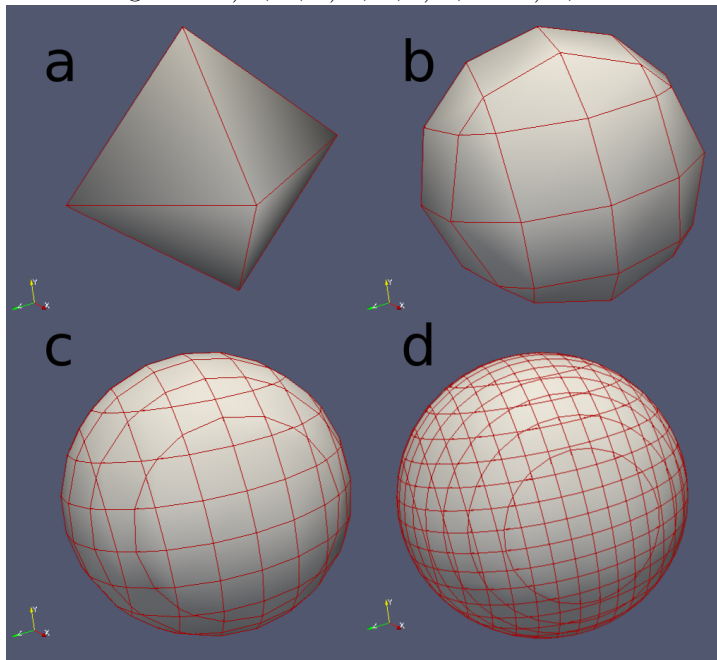
Após gerar a malha de fundo e projetar a função level-set, elementos que estão inteiramente fora do domínio de interesse do problema ( $\Omega$ ), *i.e.*, elementos "tipo 2", pertencentes ao domínio  $\Omega_2$  são excluídos. A malha resultante obtida a partir da intersecção representada na Figura 10, contendo somente elementos parciais (parte  $K_\Omega$  de  $K$ ), é representada com a função *level-set* projetada na Figura 11. A construção da triangulação com elementos cortados, necessária para realizar a integração sobre parte dos elementos, é demonstrada na mesma figura em branco. As arestas da nova malha de elementos cortados estão realçadas em azul. O hemisfério esquerdo foi transparente a fim de visualizar o interior da estrutura.

Figura 11 – Nova malha de fundo, após eliminação dos elementos não relevantes ao domínio, com a malha de elementos cortados inserida. As arestas estão destacadas em azul, e metade da malha é demonstrada transparente para visualização da estrutura interna.



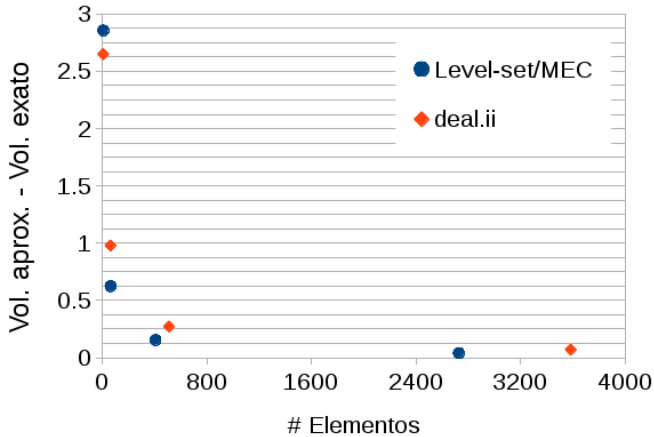
Na Figura 12 são demonstrados as aproximações das geometrias esféricas obtidas por sucessivos refinamentos da malha. A cada refinamento, o tamanho do elemento da malha de fundo é dividido por 2.

Figura 12 – Representações da geometria esférica pelas malhas de elementos cortados, sucessivamente refinadas. São mostradas aqui somente as superfícies para clareza. Os elementos das malhas de fundo tem diâmetro igual a: a) 1,73; b) 0,87; c) 0,43 e d) 0,22



O volume total calculado pelas malhas geradas com o método proposto foi comparado com o volume de malhas esféricas semelhantes, geradas pela função padrão de criação de malhas de deal.ii. Os volumes foram subtraídos do volume exato de uma esfera de raio unitário e os resultados estão demonstrados na Figura 13. Percebe-se que após o primeiro refinamento, o volume calculado pelo método de elementos cortados é mais próximo do volume exato para quantidades similares ou maiores de elementos da malha. Os elementos de fronteira gerados pelo método de elementos cortados possuem um número arbitrário de faces, não estando restrito a nenhuma forma específica. A aproximação pode ser, então, mais exata que aquela gerada por elementos de forma geométrica constante que precisam se conformar à fronteira - como é o caso de deal.ii, que trabalha somente com hexaedros.

Figura 13 – Comparação entre o volume da esfera obtida pela função padrão de criação de malhas de deal.ii e pelo método de elementos cortados através da função *level-set*.



#### 4.1.4.3 Geometrias alternativas

A geometria proposta em (PAVIN; PALJETAK; KRSTIC, 2006) foi gerada pela função *level-set* (3.5), e o resultado é demonstrado na Figura 14, com a representação da geometria proposta no trabalho citado. A representação implícita da fronteira limitando o domínio da bactéria foi realizada com sucesso, com as características geométricas obedecendo o proposto no trabalho citado.

A geometria de bloco de queijo suíço, criada a partir da função *level-set* (3.6), foi gerada e a malha de elementos cortados é demonstrada na Figura 15 (esquerda). No lado direito é demonstrada a malha original como publicada em (BURMAN et al., 2014). As malhas resultantes são muito similares, constatando que o método aqui proposto pode ser utilizado para representar geometrias mais complexas.

Figura 14 – Na figura de cima, a malha de elementos cortados simulando a geometria de uma bactéria *E. coli*. A figura de baixo representa a geometria que inspirou a função *level-set* (3.5) e foi retirada do trabalho de Pavin, Paljetak e Krstic (2006).

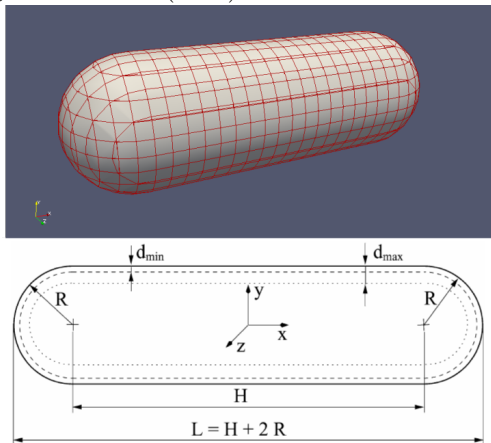
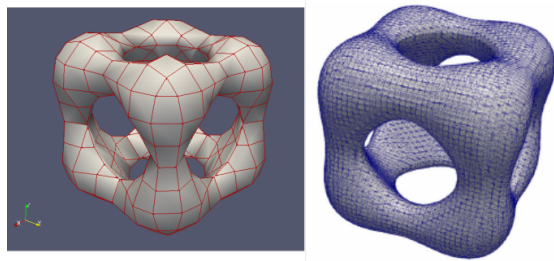


Figura 15 – Na figura da esquerda, a malha de elementos cortados gerada pela geometria de bloco de queijo suíço. À direita, a malha gerada por Burman et al. (2014).



## 4.2 ESTUDOS DE CASO

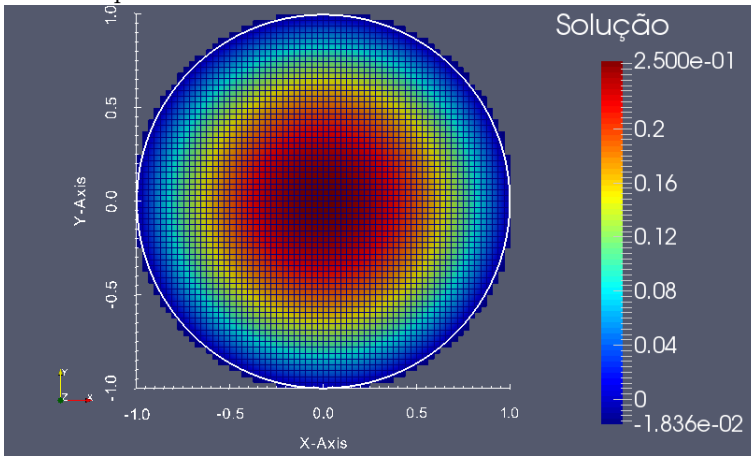
### 4.2.1 Problema de Poisson (2D)

#### 4.2.1.1 Solução

A solução para o problema bidimensional é demonstrada na Figura 16 e está disponível no disco em anexo na pasta

resultados\_dissertacao/2D/poisson\_problem\_results. A fronteira é representada por uma linha branca espessa. Após remover os elementos completamente fora de  $\Omega$ , a malha contém 13.104 elementos, cada um com diâmetro 0,022. A solução segue claramente o padrão esperado para a equação de Poisson no disco com condições de contorno Dirichlet, cf. (BANGERTH, 2015; BOYD; YU, 2011). A solução analítica é visualmente muito parecida e é, portanto, omitida nessa seção e apresentada no Apêndice B, Figura 35.

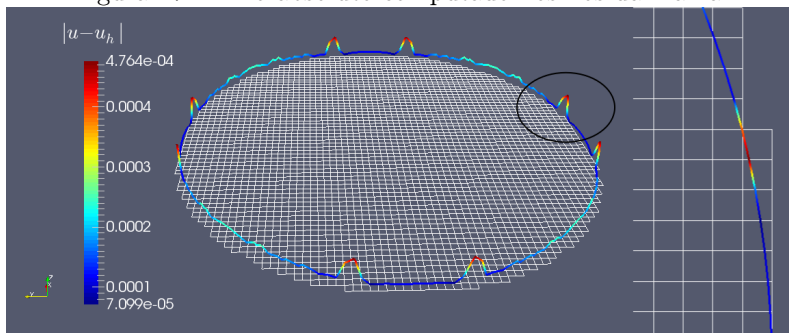
Figura 16 – Solução para o problema de Poisson com condições de contorno impostas fracamente com o método de Nitsche.



É importante notar como a solução final contém nós que estão de fato fora do domínio do problema. Esses nós são do "tipo 2" como representado pelo nó "A" na Figura 6. Esses nós são mantidos na representação da solução a fim de ilustrar como eles desempenham um papel no processo de solução, mas não representam a solução final do problema. A solução segue claramente o padrão esperado pela equação de Poisson no disco.

O erro  $|u - u_h|$ , onde  $u$  é a solução analítica e  $u_h$  a solução numérica, foi interpolado na fronteira e é plotado com elevação na Figura 17. Percebe-se claramente que o erro é maior onde a fração do elemento cortado ( $K_\Omega$ ) é pequena em comparação com o elemento inteiro ( $K$ ). Não obstante, a solução numérica na fronteira diverge pouco da solução analítica, com erro máximo de cerca de  $5 \times 10^{-4}$ .

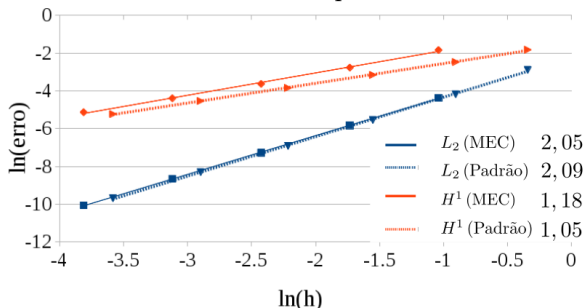
Figura 17 – Erro absoluto computado nos nós da malha.



#### 4.2.1.2 Análise de Convergência

A solução numérica foi comparada com a solução exata e o logaritmo natural das normas  $L_2(\Omega)$  e  $H^1(\Omega)$  foram comparados com o logaritmo natural do diâmetro do elemento, como mostrado na Figura 18. Além disso, foram computados os erros nas normas mencionadas para a solução numérica utilizando o método de elementos finitos padrão. As retas traçadas correspondem ao ajuste linear dos dados, que tiveram o valor de  $R^2$  entre 0,99 e 1,00 para todos os casos.

Figura 18 – Análise de convergência nas normas  $H^1$  (laranja) e  $L_2$  (azul). As linhas cheias representam o ajuste linear das normas pelo método de elementos cortado e as linhas tracejadas são relativas ao método FEM padrão. Os coeficientes lineares das retas obtidas estão na legenda ao lado da análise correspondente.



O erro  $H^1$  converge proporcionalmente a  $h^{1,18}$ , com ordem um pouco acima do obtido com o método padrão ( $\mathcal{O}(h^{1,05})$ ), que apresenta erros menores para todos os casos observados. O erro na norma  $L^2$  apresenta convergência com ordem  $\mathcal{O}(h^{2,05})$ , um pouco abaixo daquela observada com o método padrão ( $\mathcal{O}(h^{2,09})$ ). Percebe-se também que os erros nessa norma são muito próximos para os dois casos, com as retas obtidas pelo ajuste linear praticamente coincidindo. As ordens de convergência do método de elementos cortados confirmaram as estimativas (2.87)-(2.88).

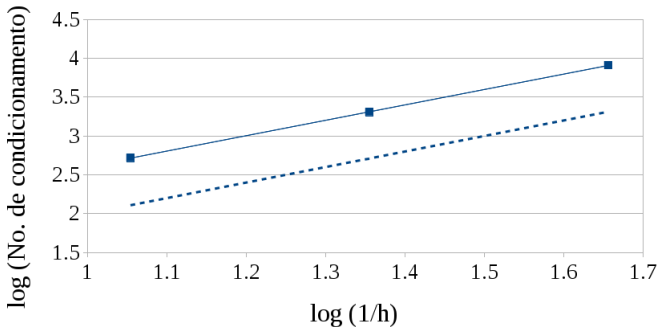
A análise de convergência mostra convergência ótima de segunda ordem em  $L_2$  e primeira ordem em  $H^1$  como esperado da formulação em elementos finitos.

#### 4.2.1.3 Análise do número de condicionamento

Essa seção trata dos efeitos do número de condicionamento da matriz de rigidez com respeito ao tamanho de malha e ao parâmetro de estabilização.

Primeiramente a relação  $\kappa(A) \leq C h^{-2}$ , detalhada na seção 2.9, foi analisada. Na Figura 19 o logaritmo do número de condicionamento da matriz de rigidez foi plotado em função do logaritmo do inverso do diâmetro do elemento, e a sua proporcionalidade foi calculada em 1,98, com  $R^2 = 0,998$ .

Figura 19 – Número de condicionamento como função do inverso do diâmetro do elemento. A linha tracejada é proporcional a  $h^{-2}$ .

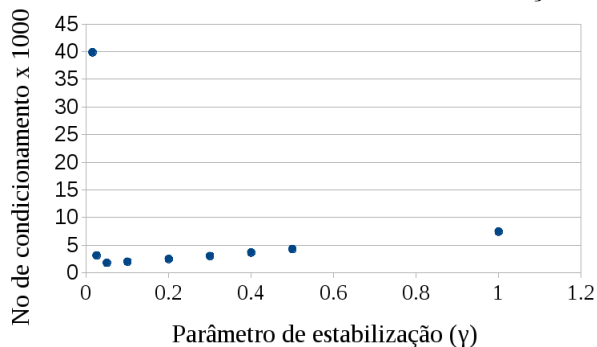


Em seguida, o efeito do parâmetro de estabilidade  $\gamma_1$  foi avaliado para o caso mais refinado apresentado na seção 4.2.1.1.



A integração sobre partes pequenas dos elementos afeta adversamente o número de condicionamento da matriz de rigidez. Isso é superado pela adição de termos de estabilização (2.22) na formulação em elementos finitos, os quais podem ser ajustados pelo parâmetro  $\gamma_1$ . Na Figura 20, o gráfico do número de condicionamento como função do parâmetro de estabilização  $\gamma_1$  é demonstrado. Observa-se que para valores muito pequenos de  $\gamma_1$  a matriz é mal condicionada ( $\gamma_1 = 0,015$ ), enquanto a simulação com  $\gamma_1 = 0,05$  resulta no menor número de condicionamento observado. Para maiores valores, o número de condicionamento cresce constantemente com o aumento de  $\gamma_1$ . Burman e Hansbo (2012) reportaram um padrão parecido para um problema similar, onde eles obtiveram um parâmetro de estabilização ótimo de  $\gamma_1 = 0,1$ .

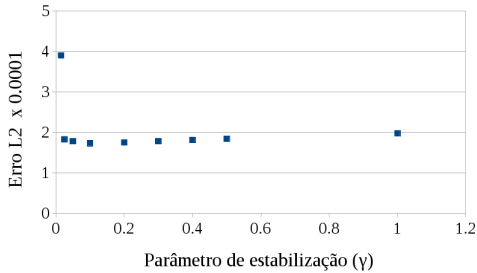
Figura 20 – Número de condicionamento como função de  $\gamma_1$ .



A fim de avaliar a dependência da solução com o parâmetro de estabilização, a norma  $L_2$  foi plotada versus  $\gamma_1$  e os resultados podem ser vistos na Figura 21.

O erro tem um pico para  $\gamma_1 = 0,015$  e o menor valor quando  $\gamma_1 = 0,1$ , e cresce linearmente a partir de  $\gamma_1 = 0,1$  até 1. Essa relação é similar à dependência do número de condicionamento com  $\gamma_1$  (Figura 20). Baseado nesses resultados, sugere-se que para atingir baixos valores de número de condicionamento e erro, deve-se escolher o parâmetro de estabilização entre  $\gamma_1 = 0,05$  e  $0,1$ .

Figura 21 – Erro  $L_2$  em função do parâmetro de estabilidade  $\gamma_1$ .



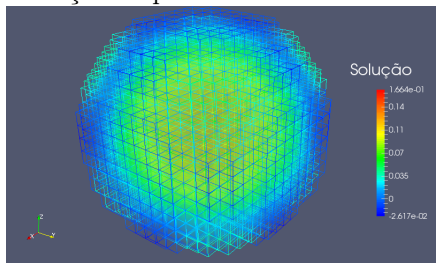
## 4.2.2 Problema de Poisson (3D)

### 4.2.2.1 Solução

A solução para o problema tridimensional é mostrado na Figura 22. Os arquivos *.vtk* estão disponíveis em [https://github.com/afonsoal/fem-cut-cell-3D/tree/master/results/poisson\\_problem](https://github.com/afonsoal/fem-cut-cell-3D/tree/master/results/poisson_problem) e no disco em anexo na pasta *resultados\_dissertacao/3D/poisson\_problem*, sob o nome de *solution\_new-ref-\*.vtk*, onde \* refere-se ao refinamento da malha.

Após remover os elementos completamente fora de  $\Omega$ , a malha contém 2.728 elementos, com 3.449 graus de liberdade. A solução exata é visualmente muito similar e, portanto, encontra-se demonstrada somente no Apêndice B, Figura 36.

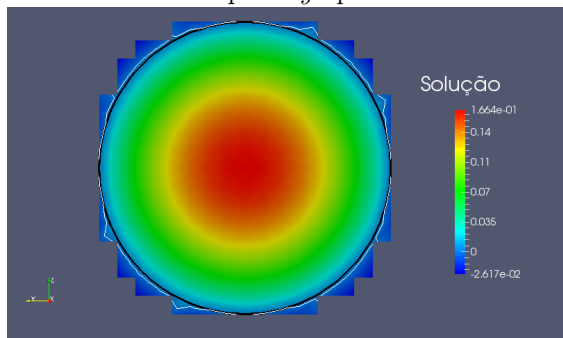
Figura 22 – Solução do problema de Poisson em uma esfera.



A solução foi plotada para um corte no plano  $xy$  situado na origem, *i.e.*, para  $x = 0$  e pode ser vista na Figura 23. O conjunto de valores da função *level-set* iguais a zero estão plotados na linha preta. O

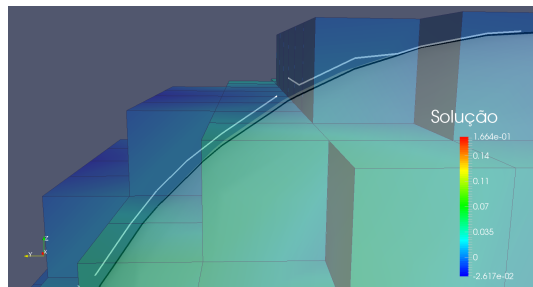
iso-contorno de valores da solução numérica iguais a zero é plotado em branco. Percebe-se que a solução numérica difere mais da solução exata onde a fração dos elementos dentro do domínio é pequena, como nos cantos superiores e inferiores à esquerda e direita do corte transversal demonstrado.

Figura 23 – Solução do Problema de Poisson em uma esfera. Solução representada em um corte do plano  $yz$  para  $x = 0$ .



Um detalhe do canto esquerdo superior do corte da Figura 23 é apresentado na Figura 24. Percebe-se como uma descontinuidade surge onde a fronteira, representada pelo iso-contorno *level-set*, aproxima-se das fronteiras dos elementos. Este problema pode ser remediado através de um refino de elementos próximos à fronteira, a fim de diminuir os gradientes entre elementos.

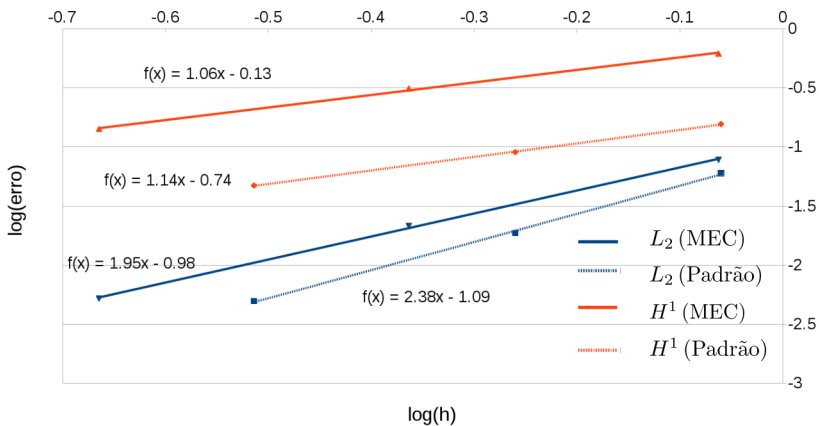
Figura 24 – Detalhe da solução para o canto superior esquerdo. A esfera em segundo plano representa o iso-volume de valores *level-set* iguais a zero.



#### 4.2.2.2 Análise de Convergência

A solução numérica foi comparada com a solução exata e os erros nas normas  $L_2(\Omega)$  e  $H^1(\Omega)$  foram avaliados e comparados com os erros obtidos utilizando o método de elementos finitos padrão. Os logaritmos dos erros como função do logaritmo do tamanho do elemento estão demonstrados na Figura 25, com o correspondente ajuste linear dos dados e suas equações. Os valores de  $R^2$  foram determinados entre 0,99 e 1,00. O erro na norma  $H^1$  mostrou-se proporcional a  $h^{1,06}$ , próximo da taxa linear esperada pela estimativa teórica (2.87), com uma taxa de convergência levemente inferior à calculada com o FEM padrão ( $\mathcal{O}(h^{1,14})$ ). Para o erro  $L_2$ , a taxa de convergência cresce proporcionalmente a  $h^{1,95}$ , também próximo da taxa quadrática esperada pela estimativa teórica (2.88). Percebe-se que o erro calculado pelo método de elementos cortados é superior em relação ao método padrão, especialmente em relação à norma  $H^1$ , que leva em conta as derivadas locais da solução. As estimativas teóricas (2.87)-(2.88) foram confirmadas para o problema proposto.

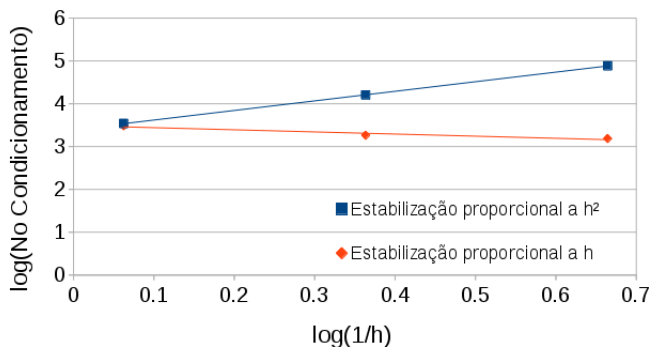
Figura 25 – Análise de convergência nas normas  $H^1$  (laranja) e  $L_2$  (azul). As linhas cheias correspondem ao método de elementos cortados e as linhas tracejadas, ao FEM padrão. As equações das retas obtidas estão explícitas próximas das retas.



### 4.2.3 Análise do Número de Condicionamento da Matriz

O logaritmo do número de condicionamento foi traçado como função do logaritmo do inverso do diâmetro do elemento e o gráfico resultante é mostrado na Figura 26. A estimativa proposta em (2.83) não foi observada para a formulação proposta, onde o termo de estabilização (2.22) é multiplicado por  $h$ . Percebe-se que o número de condicionamento diminuiu com a diminuição do diâmetro do elemento, sendo proporcional a  $-0,49$ , com  $R^2 = 0.926$ . O esperado é um aumento do número de condicionamento, causado principalmente pelo aumento do tamanho da matriz de rigidez. Diferentes simulações foram realizadas, multiplicando-se o termo de estabilização por  $h^2$ , e constatou-se uma ordem de convergência de  $2,23$ , com  $R^2 = 0.999$ . O termo de estabilização  $j(u, v)$  desempenha um papel importante na formulação da estimativa (2.83) (BURMAN et al., 2014), de forma que a escolha dos parâmetros  $\gamma_1$  e  $h$  influencia fortemente a análise de estabilidade do problema. Além disso, a estabilização tem como objetivo controlar as derivadas nos elementos de fronteira, atuando sobre a parte exterior dos elementos atravessados pela fronteira; uma estabilização ineficiente pode ser responsável pelo maior erro na norma  $H^1$  observado na análise de convergência da seção 4.2.2.2. Dessa maneira, torna-se necessário um estudo aprofundado dos parâmetros citados, a fim de avaliar a dependência do número de condicionamento com a malha.

Figura 26 – Número de condicionamento como função do inverso do diâmetro do elemento.

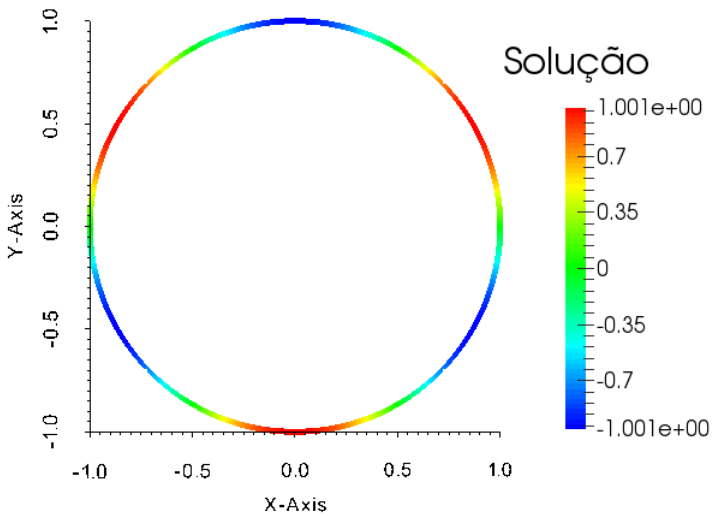


## 4.2.4 Problema de Laplace-Beltrami

### 4.2.4.1 Solução

A equação foi solucionada em células  $K \in G_h$  e a solução é demonstrada em  $\Gamma_h$ , como pode ser visto na Figura 27. A solução pode ser visualizada no disco em anexo na pasta `resultados_dissertacao/2D/laplace_beltrami_results`. O diâmetro de elemento é  $h = 0,022$  e a malha contém 3.332 elementos, com 504 graus de liberdade. A solução segue o padrão esperado pela solução analítica, que é representada no Apêndice B, Figura 37.

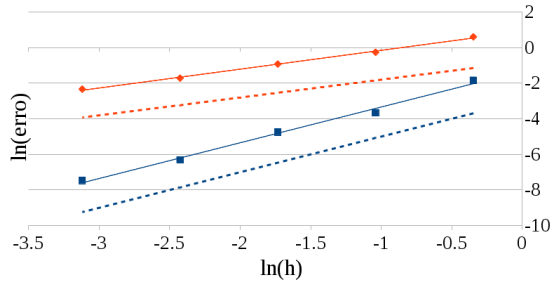
Figura 27 – Solução sobre a fronteira definida pela função *level-set*.



#### 4.2.4.2 Análise de Convergência

Os erros nas normas  $H^1$  e  $L_2$  foram avaliados baseados na solução obtida em  $\Gamma_h$  para diversos tamanhos de malha. O gráfico do logaritmo natural do erro em função do tamanho de malha está demonstrado na Figura 28. O ajuste linear mostra que  $\ln(H^1)$  é proporcional a 1,05, com  $R^2 = 0.997$ , e  $\ln(L_2)$  é proporcional a 2,00, com  $R^2 = 0,993$ . Novamente, ordens de convergência  $\mathcal{O}(h)$  e  $\mathcal{O}(h^2)$  derivadas das estimativas de (2.90) - (2.91) foram confirmadas.

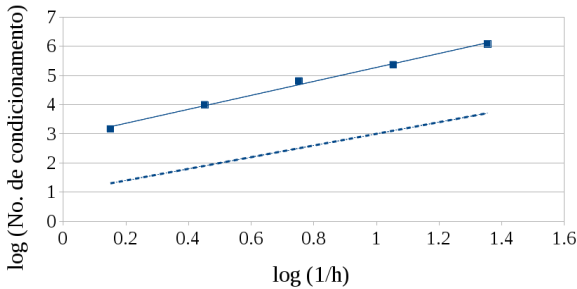
Figura 28 – Análise de convergência nas normas  $H^1$  (laranja) e  $L_2$  (azul). As linhas tracejadas são proporcionais a  $h$  (laranja) e  $h^2$  (azul).



#### 4.2.4.3 Análise do Número de Condicionamento da Matriz

A dependência do número de condicionamento com a malha foi avaliada e os resultados podem ser vistos na Figura 29. Assim como no problema anterior, a matriz de condicionamento torna-se severamente mal condicionada caso não seja estabilizada. O procedimento de estabilização resolve esse problema, sem aumentar o erro relativo. Kamilis (2013) reportou resultados semelhantes, com diminuição drástica do número de condicionamento, entretanto, obtendo valores maiores do erro  $L_2$  para o caso estabilizado. A análise de condicionamento reporta a dependência do logaritmo do número de condicionamento com o logaritmo do tamanho do elemento proporcional a 2,39, com  $R^2 = 0.994$ , valor um pouco acima do esperado pela estimativa (2.89).

Figura 29 – Dependência do número condicional com o diâmetro do elemento. A linha tracejada é proporcional a  $h^{-2}$ .



## 4.2.5 Problema de Reação-Difusão

### 4.2.5.1 Solução

Os perfis de concentração do componente  $A$  estão demonstrados na Figura 30, com o tempo associado correspondente. A malha contém 13.104 elementos, cada um com diâmetro 0,088 [m]. As animações geradas pelas simulações podem ser vistas no disco em anexo na pasta `dissertacao_resultados/2D/reaction_diffusion_results`.

Moléculas de  $A$  iniciam com uma alta concentração no meio como estabelecido pela condição inicial do problema e difundem uniformemente em direção à fronteira até o tempo  $t = 0,6$  [s], quando começam a interagir significativamente com a fronteira em  $\Gamma_1$  e reagir, gerando  $B$ . Quando o componente  $A$  encontra a parte não reativa da fronteira,  $\Gamma_2$ , ele se acumula e o gradiente de concentração se suaviza. Perto de  $t = 3$  [s], a concentração é quase homogênea na região longe da fronteira reativa. A variação da concentração de  $B$  com o tempo é mostrada na Figura 31. Para o gráfico desses resultados, a solução foi definida na fronteira definida pela função *level-set*. Como a constante de reação é muito rápida para esse caso, a concentração de  $B$  cresce rapidamente quando  $A$  chega à fronteira, próximo de  $t = 0,3$  [s]. O processo de difusão segue e as moléculas migram ao longo da fronteira.



Figura 30 – Imagens do domínio com a concentração do componente  $A$ . A fronteira é representada pela função *level-set* em branco.

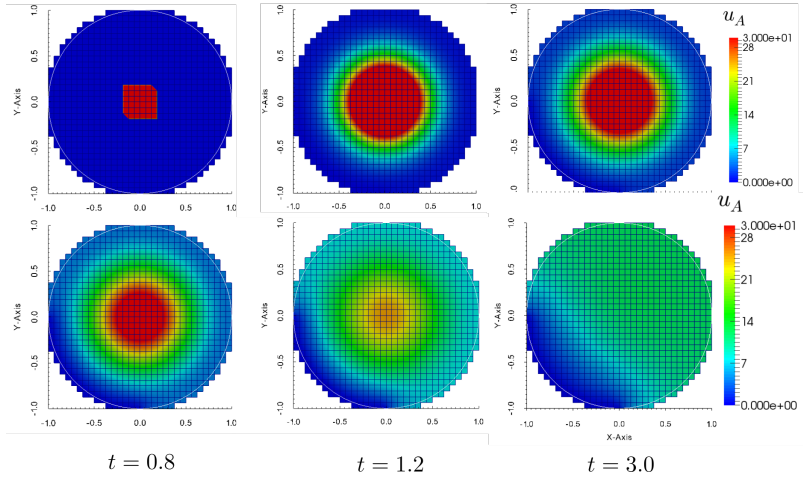
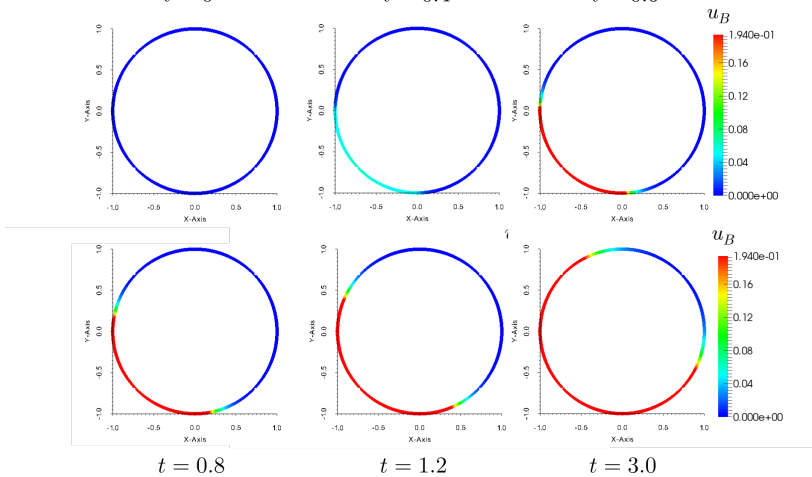


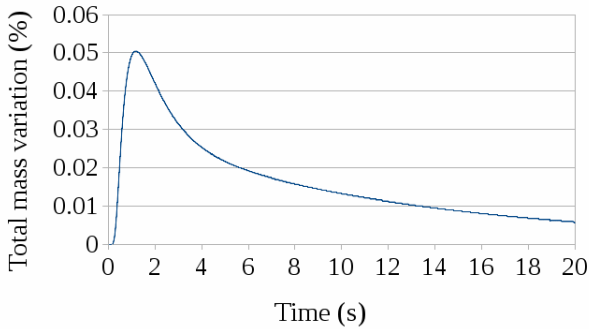
Figura 31 – Perfis de concentração do componente  $B$  na fronteira  $\Gamma_h$ .



#### 4.2.5.2 Conservação de Massa

A conservação de massa foi calculada utilizando (3.46) e os resultados da variação total de massa são mostrados na Figura 32.

Figura 32 – Conservação de Massa ao longo do intervalo de integração.



A massa total dentro do domínio foi computada e comparada à massa inicial como referência. O modelo não inclui um termo de geração e a fronteira é definida como fluxo nulo através da imposição de condições de contorno de Neumann. Os resultados mostram que a variação de massa cresce até 0,05% cerca de  $t = 1,1 \sim 1,3$  [s] e depois declina constantemente com o tempo. A variação de massa total dentro do domínio está em um intervalo aceitável, considerando que há gradientes agudos no início da simulação e uma reação rápida está ocorrendo na fronteira.

A fim de comparar a dependência da variação total de massa com a malha, foram calculados os valores máximos de variação percentual de massa em função do número de graus de liberdade para simulações com refinamentos sucessivos de malha e o resultado pode ser visto na Figura 33. O passo no tempo para essa análise foi definido em  $\Delta t = 0,004$  [s]. A variação de massa diminuiu com o aumento do número de graus de liberdade e com a diminuição do diâmetro do elemento associada como esperado. Para um diâmetro abaixo de  $h = 0,353$  [m], a variação máxima não diminuiu significativamente, ficando dentro do limite de 0,1%.

A dependência da variação percentual máxima de massa com o passo no tempo,  $\Delta t$ , foi calculada para um tamanho de malha  $h = 0,088$  [m]. A variação decresce linearmente com a diminuição do passo no tempo por um fator de 13 vezes, não apresentando um limite superior ou inferior no intervalo calculado. Baseado nas duas análises realizadas, sugere-se que, a fim de ficar abaixo de um limite máximo de variação de massa de 0,1%, a simulação deve ser realizada com  $\Delta t < 0,008$  [s] e  $h \leq 0,088$  [m].

Figura 33 – Máxima variação percentual de massa para malhas com diferentes números de graus de liberdade. Os números próximos dos pontos referem-se ao diâmetro do elemento,  $h$ .

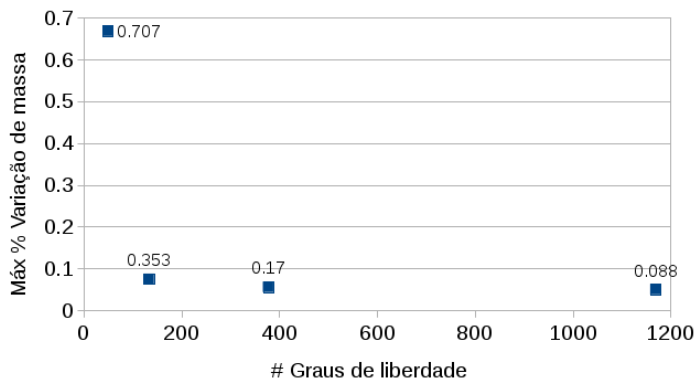
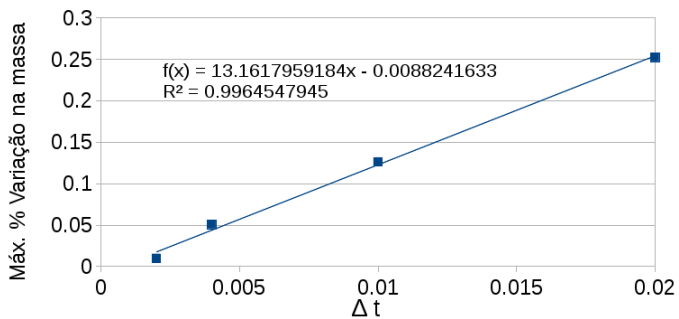


Figura 34 – Máxima variação percentual de massa em função do passo no tempo,  $\Delta t$ .





## 5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O objetivo dessa dissertação foi estabelecer a aplicação de uma técnica de elementos cortados utilizando o Método dos Elementos Finitos para resolver problemas de Equações Diferenciais Parciais. A motivação para o desenvolvimento de métodos onde a fronteira ou interface não respeita a malha foi introduzida, assim como uma revisão de métodos atuais utilizando essa abordagem. O método tradicional de elementos finitos foi revisado, utilizando o método de Nitsche para impor condições de contorno fracamente e como implementá-las computacionalmente. Nesse contexto, o método de elementos cortados foi introduzido utilizando a equação de Poisson como problema modelo.

O programa de computador *fem-cut-cell-3D* foi proposto como uma ferramenta *open-source* inovadora e inédita para implementar o método dos elementos cortados a partir da plataforma deal.ii. O *software* ainda carece de uma documentação abrangente, modularidade e otimização, mas mostrou-se eficaz para resolver problemas de elementos finitos como comprovado pelas análises matemáticas.

Constatou-se que o principal gargalo do programa consiste na multiplicação polinomial que surge da integração sobre poliedros complexos, que não é otimizada e resulta em um custo computacional muito alto; especialmente porque as estruturas computacionais polinomiais são de dimensão constante no momento de compilação.

O procedimento para definir a fronteira através da representação implícita da superfície com o método *level-set* foi introduzido e foi demonstrado que o método proposto é capaz de gerar uma representação sobre uma malha de fundo eficientemente, inclusive com geometrias não triviais. A aproximação da geometria da esfera mostrou-se mais exata do que aquela obtida pela função geradora de malha fornecida por deal.ii.

Três casos teste foram propostos para avaliar o método de elementos cortados: em 3D, o problema de Poisson; em 2D, o problema de Poisson, o problema de difusão pura de Laplace-Beltrami e um problema transiente de reação-difusão. As soluções numéricas dos três primeiros estudos de caso foram comparadas com as soluções analíticas e taxas de convergência ótimas foram observadas para os erros nas normas  $H^1$  e  $L_2$ . Os dois experimentos realizados com o problema de Poisson foram comparados com a solução numérica obtida pelo MEF tradicional. Em 2D, o erro numérico  $L_2$  calculado foi muito próximo daquele calculado com o MEF padrão; o erro em  $H^1$  foi levemente

superior. Para o caso 3D, o erro em ambas as normas foi superior ao observado no MEF padrão, especialmente o erro  $H^1$ . Suspeita-se que a diferença surja devido a uma estabilização ineficiente, uma vez que a análise de convergência do número de condicionamento nesse caso não correspondeu à estimativa teórica.

A análise do número de condicionamento foi feita também para os problemas de de Poisson e de Laplace-Beltrami em 2D e taxas de convergência ótimas em relação ao diâmetro da malha foram obtidas. O parâmetro de estabilização  $\gamma_1$  foi analisado em relação ao número de condicionamento e ao erro na norma  $L_2$  para o problema de Poisson e um valor ótimo foi estabelecido entre 0,05 e 0,1.

O problema de reação-difusão foi proposto como um problema transiente, com variação no domínio volumétrico acoplado à variação na superfície. A variação de massa sobre o domínio foi avaliada a fim de verificar o método e mostrou-se conservar abaixo de um limite baixo ( $< 0,05\%$ ). O tamanho de malha ótimo foi definido e mostrou-se que o erro relativo varia pouco após o terceiro refinamento ( $h = 0,17$ ).

## Sugestões e trabalho futuro

A implementação bem sucedida do método de elementos cortados para os problemas propostos abre o caminho para a modelagem de diversos problemas interessantes onde a fronteira e seu relacionamento com o domínio volumétrico desempenham um papel importante. Sugestões para melhorias incluem:

- Avaliar o refino de elementos ao longo da fronteira a fim de aumentar a precisão em problemas transientes custosos computacionalmente;
- Analisar o efeito de métodos adaptativos, *e.g.*, refinar elementos cortados onde a fração do elemento no domínio se torna muito pequena;
- Avaliar a eficiência computacional em problemas transientes onde a fronteira se modifica;
- Implementar um mecanismo de multiplicação polinomial mais eficiente, a fim de reduzir o alto custo computacional da multiplicação termo a termo atualmente implementada. Técnicas como *Fast Fourier Transform* (FFT) (HOEVEN; LECERF, 2012) podem reduzir a atual complexidade de multiplicação de polinômios univariados de grau  $n$  de  $\mathcal{O}(n^2)$  para  $\mathcal{O}(n \log n)$ ;

- Organizar, documentar e publicar o *software fem-cut-cell-3D*.

O autor pretende continuar trabalhando no tema do trabalho a fim de modelar problemas mais realísticos de reação-difusão em geometrias tridimensionais. Como sugestão de problemas de interesse de Engenharia Química que podem ser simulados com o método proposto, pode-se citar:

- Modelagem da difusão e reação de proteínas Min em bactérias, envolvidas na regulação do sítio de divisão celular (HU; QIAO; TANG, 2012; HUANG; MEIR; WINGREEN, 2003; NOVAK et al., 2007);
- Modelagem de reatores industriais para produção de óxido de ferro, onde as partículas sofrem modificações estruturais importantes (SCHIEMANN et al., 2013; BECK et al., 2007).





## REFERÊNCIAS

ADAMS, C. E. R. **Calculus: A Complete Course, Seventh Edition**. [S.l.]: Pearson Education Canada, 2009.

ARNOLD, D. N. An interior penalty finite element method with discontinuous elements. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 19, n. 4, p. 742–760, 1982. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/0719052>>.

ARNOLD, D. N. et al. Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems. **SIAM J. Numer. Anal.**, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, v. 39, n. 5, p. 1749–1779, maio 2001. ISSN 0036-1429. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/S0036142901384162>>.

BANGERTH, W. The step-3 tutorial program. 2015. Disponível em: <[https://dealii.org/8.3.0/doxygen/deal.II/step\\_3.html](https://dealii.org/8.3.0/doxygen/deal.II/step_3.html)>.

BANGERTH, W. et al. The deal.ii library, version 8.3. August 2015. Disponível em: <<https://www.dealii.org/deal83-preprint.pdf>>.

BANGERTH, W.; KANSCHAT, G. **Concepts for Object-Oriented Finite Element Software – the deal.II library**. [S.l.], out. 1999.

BECK, M. et al. Numerical calculations of spray roasting reactors of the steel industry with special emphasis on fe<sub>2</sub>o<sub>3</sub>-particle formation. **Chemical Engineering & Technology**, WILEY-VCH Verlag, v. 30, n. 10, p. 1347–1354, 2007. ISSN 1521-4125. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/ceat.200700231>>.

BECKER, R.; HANSBO, P.; STENBERG, R. A finite element method for domain decomposition with non-matching grids. **ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis**, v. 37, p. 209–225, 3 2003. ISSN 1290-3841. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1051/m2an:2003023>>.

BELYTSCHKO, T. et al. Arbitrary discontinuities in finite elements. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 50, n. 4, p. 993–1013, 2001. ISSN 1097-0207.

BOYD, J. P.; YU, F. Comparing seven spectral methods for interpolation and for solving the poisson equation in a disk: Zernike polynomials, logan-shepp ridge polynomials, chebyshev-fourier series, cylindrical robert functions, bessel-fourier expansions, square-to-disk conformal mapping and radial basis functions. **Journal of Computational Physics**, v. 230, n. 4, p. 1408 – 1438, 2011. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110006133>>.

BRENNER, S.; SCOTT, R. **The Mathematical Theory of Finite Element Methods**. Springer, 2008. (Texts in Applied Mathematics). ISBN 9780387759333. Disponível em: <[http://books.google.se/books?id=ci4c\\_R0WKYYC](http://books.google.se/books?id=ci4c_R0WKYYC)>.

BURMAN, E. et al. CutFEM: Discretizing geometry and partial differential equations. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, p. n/a–n/a, 2014. ISSN 1097-0207. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/nme.4823>>.

BURMAN, E.; HANSBO, P. Fictitious domain finite element methods using cut elements: II. A stabilized Nitsche method. **Applied Numerical Mathematics**, v. 62, n. 4, p. 328 – 341, 2012. ISSN 0168-9274. Third Chilean Workshop on Numerical Analysis of Partial Differential Equations (WONAPDE 2010). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927411000298>>.

BURMAN, E.; HANSBO, P.; LARSON, M. G. A stabilized cut finite element method for partial differential equations on surfaces: The Laplace-Beltrami operator. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 285, n. 0, p. 188 – 207, 2015. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782514004149>>.

BURMAN, E. et al. Cut Finite Element Methods for Coupled Bulk-Surface Problems. **arXiv preprint arXiv:1403.6580**, 2014.

COON, E. T.; SHAW, B. E.; SPIEGELMAN, M. A Nitsche- extended finite element method for earthquake rupture on complex fault systems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, maio 2011. ISSN 00457825.

CRANK, J.; NICOLSON, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. **Advances in Computational**

**Mathematics**, Baltzer Science Publishers, Baarn/Kluwer Academic Publishers, v. 6, n. 1, p. 207–226, 1996. ISSN 1019-7168. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF02127704>>.

DZIUK, G. Finite Elements for the Beltrami operator on arbitrary surfaces. In: HILDEBRANDT, S.; LEIS, R. (Ed.). **Partial Differential Equations and Calculus of Variations**. Springer Berlin Heidelberg, 1988, (Lecture Notes in Mathematics, v. 1357). p. 142–155. ISBN 978-3-540-50508-2. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BFb0082865>>.

DZIUK, G.; ELLIOTT, C. M. Finite element methods for surface PDEs. **Acta Numerica**, v. 22, p. 289–396, 5 2013. ISSN 1474-0508.

EKSTRÖM, U. Polymul library. 2009. Disponível em: <<https://code.google.com/p/polymul/>>.

ERN, A.; GUERMOND, J.-L. Evaluation of the condition number in linear systems arising in finite element approximations. **ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis**, v. 40, p. 29–48, 1 2006. ISSN 1290-3841.

FERNÁNDEZ-MÉNDEZ, S.; HUERTA, A. Imposing essential boundary conditions in mesh free methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 12 - 14, p. 1257 – 1275, 2004. ISSN 0045-7825. Meshfree Methods: Recent Advances and New Applications. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782504000222>>.

FRITZ, A.; HÜEBER, S.; WOHLMUTH, B. A comparison of mortar and Nitsche techniques for linear elasticity. **CALCOLO**, Springer-Verlag, v. 41, n. 3, p. 115–137, 2004. ISSN 0008-0624. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10092-004-0087-4>>.

HANSBO, A.; HANSBO, P. An unfitted finite element method, based on Nitsche’s method, for elliptic interface problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 191, n. 47 - 48, p. 5537 – 5552, 2002. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782502005248>>.

HANSBO, A.; HANSBO, P. A finite element method for the simulation of strong and weak discontinuities in solid mechanics. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 193, n. 33 - 35, p. 3523 – 3540, 2004. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782504000507>>.

HANSBO, A.; HANSBO, P.; LARSON, M. G. A finite element method on composite grids based on nitsche's method. **ESAIM: M2AN**, v. 37, n. 3, p. 495–514, 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1051/m2an:2003039>>.

HANSBO, P. Nitsche's method for interface problems in computational mechanics. **GAMM-Mitteilungen**, WILEY-VCH Verlag, v. 28, n. 2, p. 183–206, 2005. ISSN 1522-2608. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/gamm.201490018>>.

HANSBO, P.; LARSON, M. G.; ZAHEDI, S. Characteristic cut finite element methods for convection-diffusion problems on time dependent surfaces. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 293, p. 431 – 461, 2015. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782515001838>>.

HOEVEN, J. V. D.; LECERF, G. On the complexity of multivariate blockwise polynomial multiplication. jan. 2012. Disponível em: <<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660454>>.

HOWARD, M.; RUTENBERG, A. D.; VET, S. de. Dynamic compartmentalization of bacteria: Accurate division in *E. Coli*. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 87, p. 278102, Dec 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.278102>>.

HU, G.; QIAO, Z.; TANG, T. Moving finite element simulations for reaction-diffusion systems. **Advances in Applied Mathematics and Mechanics**, v. 4, p. 365–381, 6 2012. ISSN 2075-1354. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/S207007330000120X>>.

HUANG, K. C.; MEIR, Y.; WINGREEN, N. S. Dynamic structures in *Escherichia coli*: Spontaneous formation of mine rings and mind polar zones. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 100, n. 22, p. 12724–12728, 2003. Disponível em: <<http://www.pnas.org/content/100/22/12724.abstract>>.

JAMES, A. J.; LOWENGRUB, J. A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant. **J. Comput. Phys.**, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 201, n. 2, p. 685–722, dez. 2004. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2004.06.013>>.

JUNTUNEN, M.; STENBERG, R. Nitsche's method for general boundary conditions. **Math. Comput.**, v. 78, n. 267, p. 1353–1374, 2009. Disponível em:  
<<http://dblp.uni-trier.de/db/journals/moc/moc78.html>>.

KAMILIS, D. **Numerical Methods for the PDES on Curves and Surfaces**. Dissertação (Mestrado) — Umeå University, 2013.

KREYSZIG, E. **Differential Geometry**. Dover Publications, 2013. (Dover Books on Mathematics). ISBN 9780486318622. Disponível em:  
<<http://books.google.se/books?id=Vw3CAgAAQBAJ>>.

LARSON, M.; BENGZON, F. **The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Applications**. [S.l.]: Springer, 2013. ISBN 978-3-642-33286-9.

MASSING, A.; LARSON, M.; LOGG, A. Efficient implementation of finite element methods on nonmatching and overlapping meshes in three dimensions. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 35, n. 1, p. C23–C47, 2013. Disponível em:  
<<http://dx.doi.org/10.1137/11085949X>>.

MIRTICH, B. Fast and accurate computation of polyhedral mass properties. **J. Graph. Tools**, A. K. Peters, Ltd., Natick, MA, USA, v. 1, n. 2, p. 31–50, fev. 1996. ISSN 1086-7651. Disponível em:  
<<http://dx.doi.org/10.1080/10867651.1996.10487458>>.

MURADOGLU, M.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactants. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 4, p. 2238 – 2262, 2008. ISSN 0021-9991. Disponível em:  
<<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910700438X>>.

NATARAJAN, S.; BORDAS, S.; MAHAPATRA, D. R. Numerical integration over arbitrary polygonal domains based on schwarz - christoffel conformal mapping. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 80, n. 1, p. 103–134, 2009. ISSN 1097-0207. Disponível em:  
<<http://dx.doi.org/10.1002/nme.2589>>.

NATARAJAN, S.; MAHAPATRA, D. R.; BORDAS, S. P. A. Integrating strong and weak discontinuities without integration subcells and example applications in an xfem-gfem framework. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**,

John Wiley & Sons, Ltd., v. 83, n. 3, p. 269–294, 2010. ISSN 1097-0207. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/nme.2798>>.

NITSCHKE, J. Über ein variationsprinzip zur lösung von dirichlet-problemen bei verwendung von teilräumen, die keinen randbedingungen unterworfen sind. **Abhandlungen aus dem Mathematischen Seminar der Universität Hamburg**, Springer-Verlag, v. 36, n. 1, p. 9–15, 1971. ISSN 0025-5858. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF02995904>>.

NOVAK, I. L. et al. Diffusion on a curved surface coupled to diffusion in the volume: Application to cell biology. **Journal of Computational Physics**, v. 226, n. 2, p. 1271 – 1290, 2007. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107002331>>.

OLSHANSKII, M.; REUSKEN, A. A finite element method for surface pdes: matrix properties. **Numerische Mathematik**, Springer-Verlag, v. 114, n. 3, p. 491–520, 2010. ISSN 0029-599X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00211-009-0260-4>>.

OLSHANSKII, M. A.; REUSKEN, A.; GRANDE, J. A Finite Element Method for Elliptic Equations on Surfaces. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 47, n. 5, p. 3339–3358, 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/080717602>>.

PAVIN, N.; PALJETAK, H. C.; KRSTIC, V. Min-protein oscillations in *Escherichia coli* with spontaneous formation of two-stranded filaments in a three-dimensional stochastic reaction-diffusion model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 73, p. 021904, Feb 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.021904>>.

PRESS, W. H. et al. **Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing**. 3. ed. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2007. ISBN 0521880688, 9780521880688.

PRESSLEY, A. **Elementary Differential Geometry**. Springer London, 2013. (Springer Undergraduate Mathematics Series). ISBN 9781447136965. Disponível em: <<http://books.google.se/books?id=agXpBwAAQBAJ>>.

REUSKEN, A.; NGUYEN, T. Nitsche's method for a transport problem in two-phase incompressible flows. **Journal of Fourier**

**Analysis and Applications**, SP Birkhauser Verlag Boston, v. 15, n. 5, p. 663–683, 2009. ISSN 1069-5869. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00041-009-9092-y>>.

SCHIEMANN, M. et al. Spray roasting of iron chloride  $FeCl_2$ : Numerical modelling of industrial scale reactors. **Powder Technology**, v. 245, p. 70 – 79, 2013. ISSN 0032-5910. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591013003148>>.

SETHIAN, J. **Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science**. Cambridge University Press, 1999. (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics). ISBN 9780521645577. Disponível em: <<http://books.google.se/books?id=ErpOoynE4dIC>>.

WADBRO, E. et al. A uniformly well-conditioned, unfitted Nitsche method for interface problems. **BIT Numerical Mathematics**, Springer Netherlands, v. 53, n. 3, p. 791–820, 2013. ISSN 0006-3835. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10543-012-0417-x>>.

YAZID, A.; ABDELKADER, N.; ABDELMADJID, H. A state-of-the-art review of the X-FEM for computational fracture mechanics. **Applied Mathematical Modelling**, v. 33, n. 12, p. 4269 – 4282, 2009. ISSN 0307-904X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0307904X09000560>>.

ZIENKIEWICZ, O.; TAYLOR, R.; ZHU, J. **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**. Elsevier Science, 2013. ISBN 9780080951355. Disponível em: <<http://books.google.se/books?id=7UL5Ls9hOF8C>>.

ZUNINO, P.; CATTANEO, L.; COLCIAGO, C. M. An unfitted interface penalty method for the numerical approximation of contrast problems. **Applied Numerical Mathematics**, v. 61, n. 10, p. 1059 – 1076, 2011. ISSN 0168-9274. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927411000997>>.





## APÊNDICE A – Algoritmos



---

**Algoritmo A.1** Detecção de Intersecção: método `create_new_cut_cell_mesh`, chamado em `poisson_problem.cc`


---

```

1: procedure CREATE_NEW_CUT_CELL_MESH
2:   para cada  $K \in G_h$  faça
3:     para cada  $F \in K$  faça
4:       para cada  $L \in F$  faça
5:         se  $\phi(X_0) * \phi(X_1) \leq 0$  ou
           ( $\phi(X_0) = 0$  e  $\phi(X_1) \leq 0$ ) ou
           ( $\phi(X_1) = 0$  e  $\phi(X_0) \leq 0$ ) faça
6:           marque  $F$  como intersectada
7:         fim se
8:       fim para cada
9:     fim para cada
10:  fim para cada

11: para cada  $K \in G_h$  faça
12:   NewCell_3D NovoElementoCortado # Crie obj. NewCell_3D
13:   para cada  $F \in K$  faça
14:     se  $F$  é intersectada então
15:       NewFace3D NovaFace # Crie obj. tipo NewFace_3D
16:       para cada  $L \in F$  faça
17:         se  $\phi(X_0) * \phi(X_1) \leq 0$  então
18:           Compute ponto de intersecção  $P_{I_i}$ 
19:            $i \leftarrow i + 1$ 
20:           se  $\phi(X_0) < 0$  então
21:             NewLine  $\overline{X_0 P_{I_i}}$  # Crie obj. NewLine
22:              $\overline{X_0 P_{I_i}}$ .tipo_aresta  $\leftarrow$  interna
23:             Armazene  $\overline{X_0 P_{I_i}}$  em NovaFace
24:           se não
25:             NewLine  $\overline{X_1 P_{I_i}}$ 
26:              $\overline{X_1 P_{I_i}}$ .tipo_aresta  $\leftarrow$  interna
27:             Armazene  $\overline{X_1 P_{I_i}}$  em NovaFace
28:           fim se
29:         se não se  $\phi(X_0) < 0$  e  $\phi(X_1) < 0$  então
           # Aresta está inteiramente dentro do domínio
30:            $\overline{X_0 X_1}$ .tipo_aresta  $\leftarrow$  interna
31:           Armazene aresta  $\overline{X_0 X_1}$  em NovaFace
32:         fim se
33:       fim para cada
           # Criar aresta de fronteira tipo struct NewLine com os pontos de
           intersecção
34:       NewLine  $\overline{P_0 P_1}$ 
35:        $\overline{P_0 P_1}$ .tipo_aresta  $\leftarrow$  de_frenteira
36:       Armazene aresta  $\overline{P_0 P_1}$  em NovaFace
37:     fim se
38:   Armazene NovaFace em NovoElementoCortado
39:   fim para cada
40:   NewFace_3D NovaFaceFronteira # Crie obj. NewFace_3D
           # Computar nova face de fronteira
41:   para cada NovaFace em NovoElementoCortado faça
42:     para cada aresta em NovaFace faça
43:       se tipo_aresta = de_frenteira então
44:         Armazene aresta em NovaFaceFronteira
45:       fim se
46:     fim para cada
47:   fim para cada
48: fim para cada
49: fim procedure

```

---



## **APÊNDICE B – Soluções Analíticas**



Figura 35 – Solução analítica da equação de Poisson em 2D. A linha branca representa a fronteira.

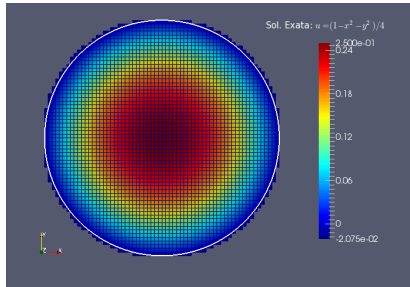


Figura 36 – Solução analítica da equação de Poisson em 3D.

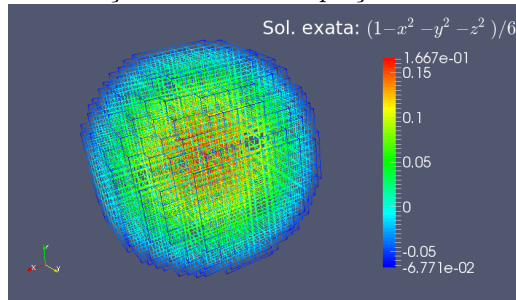


Figura 37 – Solução analítica da equação de difusão de Laplace-Beltrami em 2D.

