

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS/FACULDADE DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
COMPUTACIONAL**

Emmanuel Felix Yarleque Medina

**Métodos de Elementos Finitos Híbridos Estabilizados para a equação de
Cahn-Hilliard e suas Aplicações**

Juiz de Fora

2021

Emmanuel Felix Yarleque Medina

**Métodos de Elementos Finitos Híbridos Estabilizados para a equação de
Cahn-Hilliard e suas Aplicações**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha

Juiz de Fora

2021

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Medina, Emmanuel Felix Yarleque.

Métodos de Elementos Finitos Híbridos Estabilizados para a equação de Cahn-Hilliard e suas Aplicações / Emmanuel Felix Yarleque Medina. -- 2021.

91 f.

Orientador: Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Bernardo Martins Rocha

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2021.

1. Campo de Fase. 2. Teoria das Misturas. 3. Crescimento Tumoral. 4. Cahn-Hilliard. 5. Método dos Elementos Finitos. I. Toledo, Elson Magalhães, orient. II. Rocha, Bernardo Martins, coorient. III. Título.

Emmanuel Felix Yarleque Medina

Metodos de Elementos Finitos Hibridos Estabilizados para a equacao de Cahn-Hilliard e suas Aplicacoes

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Doutor(a) em Modelagem Computacional. Área de concentração: Modelagem Computacional

Aprovada em 22 de dezembro de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof(a)Dr(a). Elson Magalhães Toledo - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof(a)Dr(a). Bernardo Martins Rocha - Coorientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof(a)Dr(a). Iury Higor Aguiar da Igreja

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof(a)Dr(a). Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Universidade Federal de Ouro Preto

Prof(a)Dr(a). Abimael Fernando Dourado Loula

Prof(a)Dr(a). Regina Celia Cerqueira de Almeida

Laboratório Nacional de Computação Científica

Juiz de Fora, 07/12/2021.



Documento assinado eletronicamente por **Bernardo Martins Rocha, Professor(a)**, em 22/12/2021, às 18:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Iury Higor Aguiar da Igreja, Professor(a)**, em 22/12/2021, às 18:38, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Regina Célia Cerqueira de Almeida, Usuário Externo**, em 22/12/2021, às 18:46, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Abimael Fernando Dourado Loula, Usuário Externo**, em 23/12/2021, às 04:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rafael Alves Bonfim de Queiroz, Usuário Externo**, em 23/12/2021, às 15:15, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Elson Magalhaes Toledo, Professor(a)**, em 24/12/2021, às 05:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **0607053** e o código CRC **FF101063**.

Dedico este trabalho a toda minha família, especialmente
ao meu avô Felix Medina Solier.

AGRADECIMENTOS

Desejo agradecer primeiramente a Deus por permitir estar aqui e me abençoar cada dia.

Agradeço aos meus pais Isabel e Manuel pelo amor incondicional, conselhos e educação que me brindaram para me tornar o homem que sou agora.

Aos meus irmãos, sobrinhos e demais membros da minha família pelo carinho e suporte nesta viagem, participando e torcendo por cada passo meu.

A meus professores orientadores Elson Magalhães Toledo e Bernardo Martins Rocha pela oportunidade, confiança e disponibilidade para me ajudar na realização deste trabalho.

Aos demais professores e amigos do programa da Pós-Graduação em Modelagem Computacional (PPGMC) por tornarem a convivência mais agradável.

À todas as pessoas que de alguma forma contribuíram na realização deste trabalho, de forma direta ou indireta.

Ao PPGMC, à UFJF, CAPES e CNPq pelo apoio financeiro durante à minha pesquisa do doutorado.

“Deus não nos fez perfeitos e não escolhe os capacitados,
capacita os escolhidos.” (Albert Einstein)

RESUMO

Diversos problemas com interface demandam a solução numérica de equações diferenciais parciais em domínios móveis, onde os movimentos das interfaces são desconhecidos e difíceis de se calcular quando estas passam por mudanças topológicas. A abordagem de campo de fase tem se mostrado como uma poderosa ferramenta para a modelagem de tais problemas, considerando um domínio computacional conhecido e fixo. Nesse contexto, a equação de Cahn-Hilliard, inicialmente usada para modelar a separação de ligas binárias, tem sido muito utilizada em diversas aplicações que vão desde a modelagem do crescimento tumoral até o processamento de imagens. Trata-se de uma equação diferencial parcial parabólica de quarta ordem não linear que apresenta grandes desafios para a sua solução numérica, que em determinadas casos pode apresentar oscilações não físicas e demandar o uso de malhas e passos de tempo extremamente refinados. Este trabalho tem como objetivo contornar tais dificuldades numéricas através de formulações dos elementos finitos híbridos no espaço e formulações de segunda ordem no tempo visando robustez e eficiência. A equação de Cahn-Hilliard clássica assim como outros modelos baseados nesta serão estudados do ponto de vista numérico para verificar a ordem de convergência dos métodos apresentados e avaliar sua eficiência e precisão. Em particular, algumas aplicações da equação de Cahn-Hilliard como a modelagem do crescimento tumoral avascular e o processo de eletromolhabilidade também são considerados neste trabalho.

Palavras-chave: Modelo de Campo de Fase. Modelagem Matemática. Teoria das Misturas. Cahn-Hilliard. Método dos Elementos Finitos. Métodos dos Elementos Finitos Híbridos.

ABSTRACT

Several interface problems demand the numerical solution of partial differential equations in moving domains, where the movements of the interfaces are unknown and difficult to calculate when they undergo topological changes. The phase field approach has been shown to be a powerful tool for modeling such problems, considering a known and fixed computational domain. In this context, the Cahn-Hilliard equation, initially developed to model the separation of binary alloys, has been widely used in several applications ranging from modeling tumor growth to image processing. It consists of a non-linear fourth-order parabolic partial differential equation that presents great challenges in the numerical solution, which in certain cases can present non-physical oscillations and demand the use of extremely refined meshes and time steps. This work aims to overcome such numerical difficulties through hybrid finite element formulations in space and second-order formulations in time aiming at robustness and efficiency. The classical Cahn-Hilliard equation as well as other models based on it are studied from a numerical point of view to verify the order of convergence of the presented methods and evaluate their efficiency and precision. In particular, some applications of the Cahn-Hilliard equation such as in the modeling of tumor growth and the electrowetting process are also considered in this work.

Keywords: Phase Field Model. Mathematical Modeling. Mixture Theory. Cahn-Hilliard. Finite Element Method. Hybrid Finite Element Method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Aplicações da equação Cahn-Hilliard.	16
Figura 2 – Exemplos de aplicação de eletromolhabilidade: (a) evidência experimental e (b) procedimento de detecção de COVID-19.	17
Figura 3 – Evolução da curvatura do fluido realizado nos experimentos em uma geometria de Hele-Shaw proposta em Lu et al. (2007).	18
Figura 4 – Diferença no tratamento de interfaces: método de interface aguda (esquerda) e modelo do campo de fase (direita).	23
Figura 5 – Simulação computacional ilustrativa do processo da decomposição espinodal.	23
Figura 6 – Exemplos de funções potenciais $F(u)$	25
Figura 7 – Esquema de um meio poroso totalmente saturado (lado esquerdo) e representação do crescimento tumoral num meio poroso (lado direito).	28
Figura 8 – Estudo de convergência para variáveis u (esquerda) e w (direita) com uma solução manufaturada usando os métodos CG, HDG e NIPG para diferentes graus polinomiais $p = \{1, 2, 3\}$	49
Figura 9 – Efeitos do parâmetro β_0 no erro numérico para u numa malha de 64 elementos.	51
Figura 10 – Decaimento da energia livre do problema (2.15)-(2.19).	52
Figura 11 – Perfis de concentração (lado esquerdo) e potencial químico (lado direito) para o problema CH (2.15)-(2.19) no tempo $t = 1$	53
Figura 12 – Comparação dos métodos CG, NIPG e HDG para aproximar o problema (2.15)-(2.19) no tempo $t = 1$	53
Figura 13 – Comparação da solução aproximada obtida pelos métodos CG, NIPG, e HDG.	54
Figura 14 – Evolução da superfície do tumor e concentração de nutrientes obtida com o método HDG.	55
Figura 15 – Evolução da concentração tumoral em um caso 3D obtido com o método HDG.	57
Figura 16 – Evolução da curvatura do fluido com diferentes tipos de força $\lambda = 0.75$ e $\lambda = 3.0$, respectivamente.	60
Figura 17 – Separação de uma gota de fluido através de eletromolhabilidade.	61
Figura 18 – Evolução das células tumorais na presença de nutrientes obtida pelo método HDG.	62
Figura 19 – Evolução das células tumorais na presença de nutrientes e submetida a uma pressão obtida pelo método HDG	63

Figura 24 – Comparação da solução u no instante de tempo $t = 1.3 \times 10^{-2}$ utilizando malha fixa com 100×100 , 150×150 , 200×200 , 300×300 e 400×400 nós e uma malha adaptativa para o caso da anisotropia cruzada.	82
Figura 25 – Comparação das soluções em uma linha diagonal no domínio para os diferentes casos de malha fixa e a estratégia de malha adaptativa.	83
Figura 26 – Solução do caso anisotrópico na direção X com 22592 elementos triangulares, para os instantes de tempos $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente.	83
Figura 27 – Solução do caso anisotrópico na direção Y com 20482 elementos triangulares, para os instantes de tempo $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente.	84
Figura 28 – Solução do caso anisotrópico <i>cruzado</i> com 29750 elementos triangulares, para os instantes de tempo $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente.	84
Figura 29 – Número de elementos triangulares para a simulação de malha adaptativa em função do tempo para os casos anisotrópicos nas direções X , Y e cruzada.	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Estudo de convergência para os métodos CG, HDG e NIPG.	49
Tabela 2	– Comparação do número de DOFs do sistema global para aproximar o problema (2.15)-(2.19) usando formulações CG, HDG e NIPG. Para elementos triangulares, são consideradas as aproximações lineares, quadráticas e cúbicas.	50
Tabela 3	– Estudo de convergência e desempenho computacional medido em termos do tempo de execução (em segundos) do método HDG utilizando os esquemas SBDF2 e EI com aproximação linear para a variável u e w , respectivamente.	59
Tabela 4	– Parâmetros usados nas simulações.	81

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CG	Método de Galerkin Contínuo ou Galerkin Clássico
DG	Método de Galerkin Descontínuo
NIPG	Método de Galerkin Não-Simétrico com Penalização Interior
HDG	Método de Galerkin Descontínuo Híbrido
MCF	Método do Campo de Fase (do inglês: <i>Phase-Field method</i>)
CH	Cahn-Hilliard
CHD	Cahn-Hilliard-Darcy
CHG	Cahn-Hilliard-Generalizado
EI	Método de Euler-Implicito
SBDF2	<i>Semi-Implicit Backward Differentiation Formula 2 (Second Order)</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	MOTIVAÇÃO	15
1.2	REVISÃO DA LITERATURA	18
1.3	OBJETIVOS	20
1.3.1	Objetivo geral	20
1.3.2	Objetivos específicos	20
1.4	ORGANIZAÇÃO DO TEXTO	21
2	MODELOS MATEMÁTICOS	22
2.1	MODELO DE CAHN-HILLIARD	22
2.2	MODELO DE CAHN-HILLIARD COM TERMO REATIVO	26
2.3	MODELO DE CRESCIMENTO TUMORAL AVASCULAR	26
2.4	MODELO DE DARCY	27
2.5	MODELO ACOPLADO CAHN-HILLIARD-DARCY	29
2.6	MODELO DE ELETROMOLHABILIDADE	31
3	MÉTODOS NUMÉRICOS	32
3.1	FORMULAÇÃO PARA O MODELO CAHN-HILLIARD	32
3.1.1	Formulação de Galerkin contínuo	32
3.1.2	Formulação de Galerkin descontínuo híbrido	33
3.1.3	Conexão do HDG com o método DG	35
3.1.4	Esquema totalmente discreto e algoritmo de solução	38
3.2	FORMULAÇÃO DE SEGUNDA ORDEM NO TEMPO (SBDF2)	39
3.3	FORMULAÇÃO PARA O MODELO DE DARCY	41
3.3.1	Problema de Darcy	41
3.3.2	Formulação mista dual (<i>MDD</i>)	41
3.3.3	Formulações mistas híbridas	42
3.3.4	Formulação mista estável hibridizada (<i>MHE</i>)	45
3.3.5	Formulação mista estabilizada hibridizada (<i>SDHM</i>)	45
3.3.6	Estratégia de resolução dos métodos híbridos	46
4	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS UTILIZANDO O MÉTODO HÍBRIDO ESTABILIZADO	48
4.1	EXPERIMENTOS COMPUTACIONAIS	48
4.1.1	Estudo de Convergência	48
4.1.2	Estudo dos parâmetros de Estabilização do método HDG	50
4.1.3	Equação de Cahn-Hilliard	51
4.1.4	Equação de Cahn-Hilliard com termo reativo	51
4.1.5	Modelo do crescimento tumoral avascular	53

5	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS UTILIZANDO O MÉTODO HÍBRIDO ESTABILIZADO E O MÉTODO SBDF2	58
5.1	EXPERIMENTOS COMPUTACIONAIS	58
5.1.1	Estudo de Convergência	58
5.1.2	Aplicação do modelo de eletromolhabilidade	59
5.1.3	Modelo acoplado Cahn-Hilliard-Darcy	61
6	CONCLUSÃO	64
6.1	CONTRIBUIÇÕES	65
6.2	TRABALHOS FUTUROS	65
	REFERÊNCIAS	67
	APÊNDICE A – DEFINIÇÕES PRELIMINARES	75
	APÊNDICE B – EQUAÇÃO DE CAHN-HILLIARD GENERALIZADO	76
B.1	INTRODUÇÃO	76
B.2	FORMULAÇÃO PARA O MODELO CHG	77
B.2.1	Formulação variacional mista	78
B.2.2	Discretização no tempo	78
B.2.3	Malha adaptativa	79
B.2.4	Experimentos computacionais	80
B.2.4.1	<i>Experimentos preliminares</i>	<i>80</i>
B.2.4.2	<i>Comparação com malha fixa</i>	<i>81</i>
B.2.5	Efeitos da anisotropia	82
B.2.6	Desempenho computacional	84
	APÊNDICE C – DEDUÇÃO DO MODELO CHD	86

1 INTRODUÇÃO

O objetivo deste capítulo é apresentar os conceitos básicos da modelagem da equação de Cahn-Hilliard (CH) e suas aplicações em diversas áreas da ciência. O capítulo se inicia com uma motivação, discussão de alguns conceitos, apresenta uma breve revisão da literatura e, em seguida, apresenta a proposta da tese e os seus objetivos.

1.1 MOTIVAÇÃO

Uma das teorias iniciais do campo de fase é a equação de Cahn-Hilliard, que surge da derivação da energia livre de Ginzburg-Landau e que foi utilizada inicialmente para modelar a separação de fases de ligas binárias (Cahn, 1961, Cahn e Hilliard, 1958). Esta equação diferencial parcial de quarta ordem e não linear tem sido utilizada em diversas áreas do conhecimento tais como: ciência dos materiais, mecânica computacional, dinâmica dos fluidos, ciências biológicas, processamento de imagens, entre outras.

A principal contribuição deste trabalho é formular métodos híbridos de elementos finitos no espaço e esquemas de discretização no tempo mais robustos e eficientes para a equação de Cahn-Hilliard e modelos similares. Objetiva-se alcançar maior precisão na solução numérica, visando contornar possíveis oscilações não físicas observadas na equação Cahn-Hilliard com mobilidade não constante. Esquemas de discretização temporal semi-implícitos de primeira ordem com o uso da técnica de Eyre e o método de Picard para a solução não-linear do sistema para o caso de mobilidade não constante são apresentados. Um esquema de discretização temporal de segunda ordem baseado no método semi-implícito SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formula*) de segunda ordem será apresentado em combinação com o método híbrido de elementos finitos.

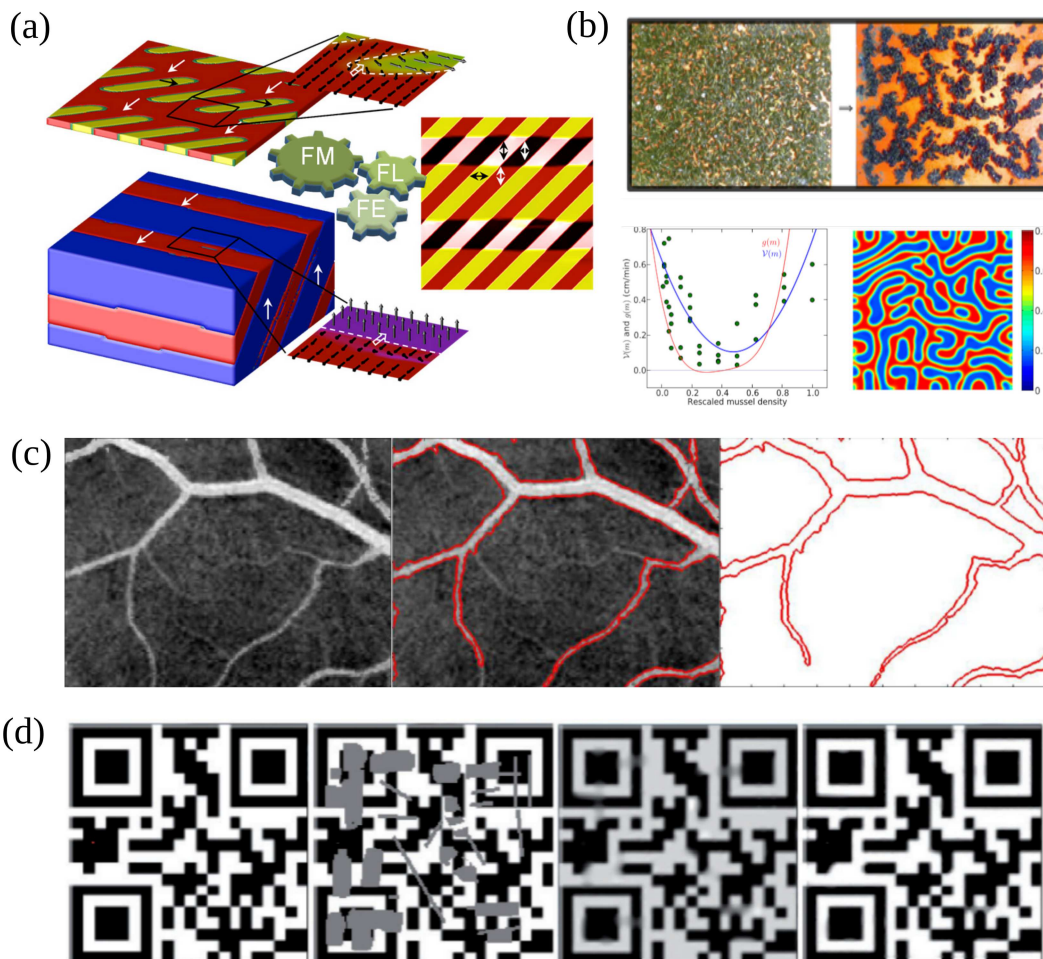
Abordaremos aplicações direcionadas a modelagem do crescimento do tumor na sua fase inicial sólida avascular, e o processo de eletroprocessamento que modela a modificação da curvatura geométrica de uma gota de fluido aplicado a um campo elétrico. A seguir, alguns exemplos de aplicações dessa equação de CH serão apresentados de forma breve.

Nas últimas décadas a equação clássica de Cahn-Hilliard (CH) tem sido utilizada em diversas áreas, tais como na ciência dos materiais, para modelar e prever a evolução morfológica e microestrutural de diversos materiais na mesoescala (Choksi et al., 2009). Na ecologia, a equação tem sido para modelar a separação de fases que acontece essencialmente no movimento da densidade dos organismos. Esta equação também aparece na área de processamento de imagens, onde é utilizada para modelar a restauração de imagens, e na segmentação de imagens.

Na Figura 1 pode-se observar no painel (a) a aplicação do modelo de CH para representar as transformações de fase estrutural em estado sólido na área da ciência dos materiais; no painel (b) a separação de fases num organismo de mexilhões é apresentado; o

painel (c) ilustra uma aplicação na segmentação de imagens médicas tendo neste exemplo a segmentação de um vaso sanguíneo; e, por último, no painel (d) uma aplicação na restauração de uma imagem danificada, sendo que a primeira imagem é de referência, a segunda a imagem danificada, a terceira a imagem sendo processada e a quarta e última imagem a restaurada.

Figura 1 – Aplicações da equação Cahn-Hilliard em diversas áreas da ciência: (a) ciência dos materiais, (b) biologia, (c) e (d) processamento de imagens.



Fonte: Imagens adaptadas de PennState (2021), Liu et al. (2013), Yang et al. (2019) e Theljani et al. (2020).

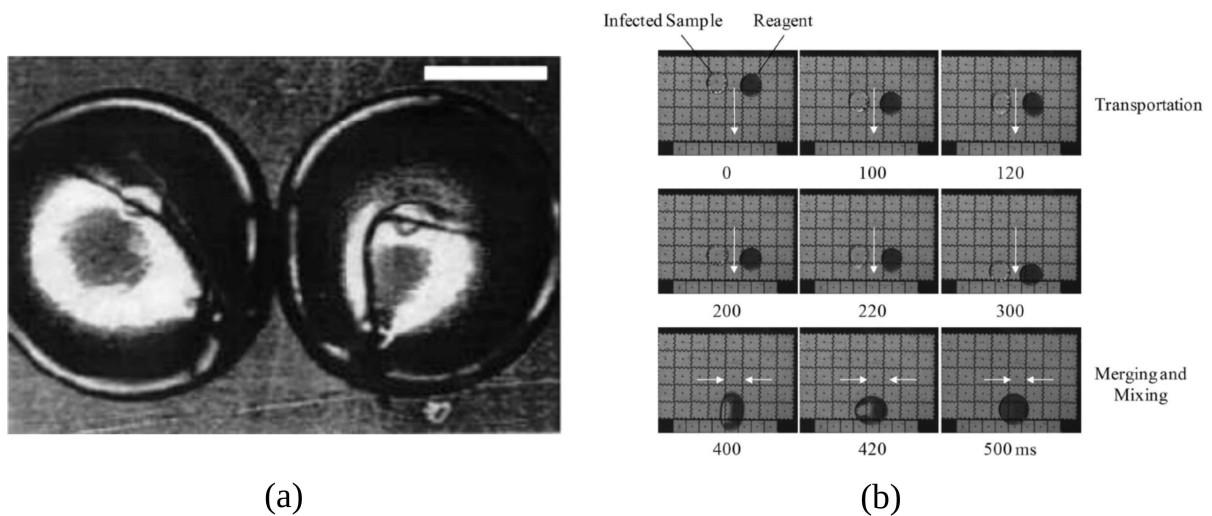
Uma das aplicações da equação de CH na área da biologia que tem sido muito explorada (Adam e Bellomo, 2012, Cristini et al., 2003, Ebenbeck e Garcke, 2019a,b) é a modelagem do crescimento de células tumorais. Além disso, esta abordagem permite estudar diversos tipos de células entre cancerosas e saudáveis, sendo que dentre as células cancerosas os seguintes fenótipos podem ser considerados: células necróticas, células hipóxicas e células proliferativas.

A equação CH também tem sido utilizada na área da dinâmica dos fluidos, especifi-

camente em microfluidica, onde um campo elétrico é aplicado de forma a alterar a tensão superficial de um líquido depositado em uma superfície. Este procedimento é conhecido na literatura como eletromolhabilidade e tem sido estudado computacionalmente através da solução numérica da equação de CH, como apresentado em Keita et al. (2021).

Diversas aplicações têm surgido utilizando esta abordagem de eletromolhabilidade como, por exemplo, na detecção de uma pessoa contagiada pelo COVID-19 Jain e Muralidhar (2020) e em artefatos eletrônicos como *e-paper* ou *Kindle* da Amazon Quilliet e Berge (2001), entre outros. A Figura 2 a seguir ilustra essas aplicações: no painel (a) é mostrado uma evidência experimental da mudança de curvatura pela eletromolhabilidade onde duas gotas experimentam repulsão, enquanto o painel (b) apresenta a aplicação da detecção de COVID-19, a qual utiliza uma matriz de eletrodos controlada por microprocessador para mesclar uma amostra possivelmente infectada transportada por um líquido com uma gota de um reagente para realizar o processo de teste.

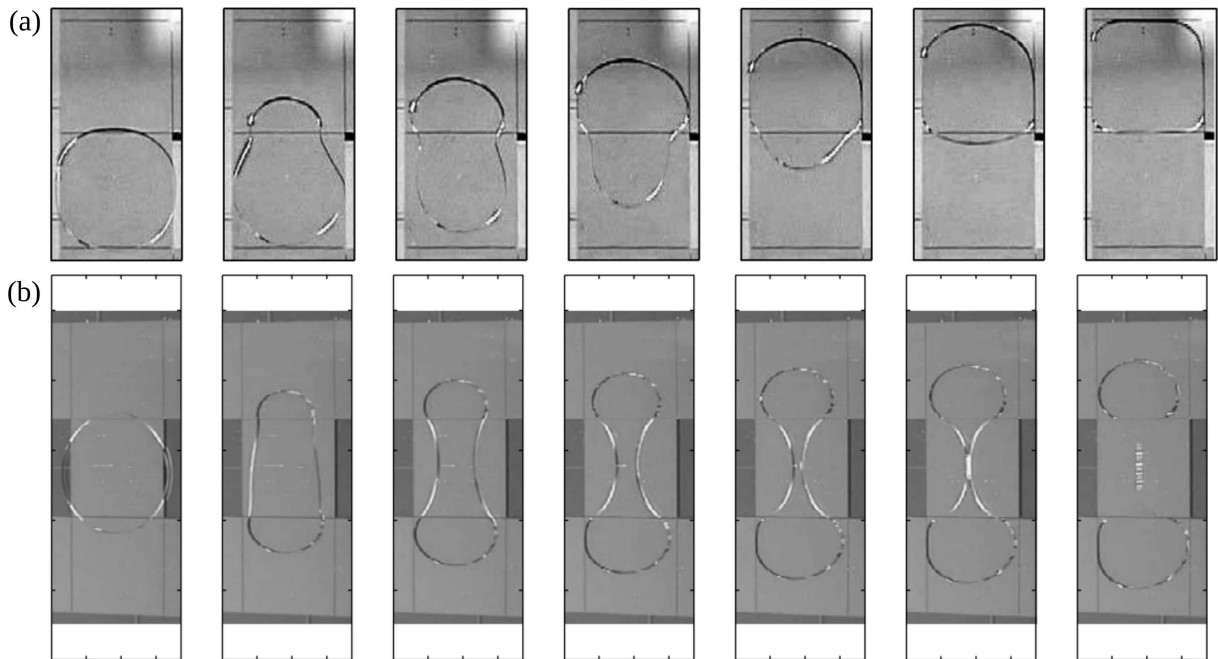
Figura 2 – Exemplos de aplicação de eletromolhabilidade: (a) evidência experimental da repulsão de duas gotas e (b) procedimento de detecção de COVID-19 através de uma matriz de eletrodos que mescla uma amostra, possivelmente infectada, que é transportada por um líquido com uma gota de um reagente.



Fonte: Imagens adaptadas de Quilliet e Berge (2001) e Jain e Muralidhar (2020).

A Figura 3 apresenta um experimento realizado por Lu et al. (2007) no qual um campo elétrico é aplicado na metade superior do domínio e para avaliar a evolução de uma gota de um fluido em uma célula de Hele-Shaw. Dispositivos baseados na técnica de eletromolhabilidade são fabricados com o objetivo de separar, unir e misturar gotas de fluidos Lu et al. (2007), como apresentado no painel (b) da Figura 3, o qual mostra os resultados de um experimento sobre a separação de uma gota de fluido.

Figura 3 – Evolução da curvatura do fluido realizado nos experimentos em uma geometria de Hele-Shaw proposta em Lu et al. (2007).



1.2 REVISÃO DA LITERATURA

As equações diferenciais parciais de alta ordem contendo o operador bi-harmônico aparecem em diversos problemas de duas ou mais fases na mecânica dos fluidos ou na mecânica dos sólidos. Em particular pode-se mencionar as equações de filme fino (Lisini et al., 2012, Ronsin et al., 2020), as equações de Cahn-Hilliard (Barros, 2019, Cahn, 1961, Cahn e Hilliard, 1958, Du et al., 2011, Gomez e Hughes, 2011, Goudenège et al., 2012, Guillén-González e Tierra, 2014, Kaesmair e Steinmann, 2016, Zhang e Qiao, 2012), modelos de circulação atmosférica (Pan et al., 2019), modelos de crescimento tumoral (Cristini et al., 2003, 2009, Garcke et al., 2016, 2018a,b, Rocha et al., 2018), propagação de fissuras Abdollahi e Arias (2015), Li e Maurini (2019), Li et al. (2015), modelos de filtração não-estáveis através de meios porosos (Bañas e Mahato, 2017, Ebenbeck e Garcke, 2019a, Gao et al., 2018), entre outros. Discretizações para os operadores espaciais de alta ordem como, por exemplo, de quarta ou sexta ordem, têm sido estudadas, tanto numericamente como computacionalmente (Cherfils et al., 2017, Miranville, 2013). Além disso, não-linearidades podem surgir ao se considerar a mobilidade não constante ou pelo uso de funções de energia livre não lineares (Barrett et al., 1999, 2001, Brenner et al., 2012).

Naturalmente, diversos procedimentos para aproximar estas equações têm sido empregados na literatura. Pode-se mencionar estudos numéricos para resolver estas equações parabólicas envolvendo operadores bi-harmônicos através de métodos de diferenças

finitas (Bertozzi et al., 2011, Shin et al., 2011, Zhornitskaya e Bertozzi, 1999), métodos dos volumes finitos (Dargaville e Farrell, 2015, Grün e Rumpf, 2000), métodos dos elementos finitos (Barrett et al., 2001, Brenner et al., 2012, Jokisaari et al., 2017), entre outros. Em particular, diversos estudos utilizando os métodos dos elementos finitos na forma mista, onde as equações governantes são divididas em sistemas de equações de ordem inferior, têm sido amplamente utilizados para resolver as equações de Cahn-Hilliard e podem ser encontradas nas referências (Barrett et al., 1999, Du et al., 2011, Goudenège et al., 2012, Kaessmair e Steinmann, 2016, Kästner et al., 2016, Zhang et al., 2013). Diversas abordagens têm sido utilizadas, como as discretizações de Galerkin descontínuo e suas diversas variantes, como o SIPG (Symmetric Interior Penalty Galerkin) (Liu e Yin, 2021, Sariaydin-Filibelioglu et al., 2017), NIPG (Nonsymmetric Interior Penalty Galerkin Method) (Liu et al., 2019) e LDG (Local Discontinuous Galerkin) (Guo e Xu, 2014, Shi e Li, 2019, Song e Shu, 2017, Xia et al., 2007). Nesse contexto, vale ressaltar que ainda não foram encontrados trabalhos empregando os métodos híbridos de Galerkin descontínuo (HDG) (Arruda et al., 2012, 2013, Igreja, 2015, Quinelato, 2017, Roca et al., 2013) para este tipo de equações.

Por outro lado, diversos esquemas de discretização temporal eficientes têm surgido na literatura (Gomez e Hughes, 2011, Guillén-González e Tierra, 2014, He et al., 2007, Keita et al., 2021, Vignal et al., 2017, Yan et al., 2018). Em particular, métodos implícitos (Cristini et al., 2009), esquemas adaptativos (Barros, 2019, Zhang e Qiao, 2012), e esquemas de alta ordem (Keita et al., 2021) têm sido utilizados para resolver problemas envolvendo as equações de CH.

Os métodos de adaptatividade temporal são usualmente baseados em variações do funcional de energia livre, como nos esquemas propostos por Guillén-González e Tierra (2014), Zhang e Qiao (2012). O trabalho de Barros (2019) utilizou um esquema adaptativo para integração no tempo com base na teoria de controle.

Dentre os trabalhos que abordam a equação de Cahn-hilliard com discretização de segunda ordem no tempo, destaca-se o recente trabalho de Keita et al. (2021) apresenta novas técnicas utilizando a fórmula de diferenciação retroativa de segunda ordem no tempo, conhecida como SBDF-2, além de uma abordagem especial para o tratamento de termos não lineares. Esta técnica torna o esquema numérico eficiente em termos de custo computacional, dado que o método proposto trata apenas de um sistema linear a cada passo de tempo e não é mais necessário a resolução iterativa, como pode ser feita pelo uso do método de Newton ou de Picard. Outras abordagens deste tipo foram exploradas utilizando um esquema BDF de segunda ordem no tempo, dadas nas referências He et al. (2007), Yan et al. (2018), e para outros tipos de abordagens no tempo pode ser revisada as referências Gomez e Hughes (2011) e Vignal et al. (2017).

Os métodos híbridos de elementos finitos se destacam na resolução de diversos

problemas devido à sua robustez, baixo custo computacional para aproximações de alta ordem e menor complexidade de implementação em comparação com métodos de Galerkin descontínuo. Destaca-se ainda a sua flexibilidade para incorporar técnicas de computação paralela no nível do elemento e esquemas de adaptatividade espacial e polinomial. Portanto, espera-se que a sua aplicação à equação de Cahn-Hilliard e em modelos derivados possa se beneficiar dessas vantagens e resultar em aproximações mais precisas e com reduzido custo computacional, sobretudo quando aliadas a esquemas de alta ordem.

Em particular destaca-se que na literatura ainda não foram empregados esquemas de elementos finitos híbridos no espaço para este tipo de equações. Assim, no presente trabalho serão apresentadas formulações de elementos finitos híbridos e combinadas com esquemas de discretização temporal semi-implícitos de primeira e segunda ordem (SBDF-2), para os quais sua eficiência e a robustez será estudada.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo geral

O objetivo geral deste trabalho é a solução numérica da equação de Cahn-Hilliard e outros modelos baseados nesta equação através de formulações de elementos finitos híbridos. Em particular, além da equação de CH serão considerados modelos matemáticos para descrever a fase inicial de um tumor sólido avascular e o processo de eletromolhabilidade. Pretende-se resolver numericamente um modelo que descreve os principais aspectos da dinâmica da proliferação tumoral através de modelos do tipo Cahn-Hilliard. Serão considerados também modelos que descrevem a curvatura média de uma gota do fluido mediante a aplicação de um campo elétrico, aplicação esta que é conhecida por eletromolhabilidade. Também se explorou o modelo de Cahn-Hilliard generalizado para casos anisotrópicos e a sua aplicabilidade para o crescimento tumoral. Dentro desse contexto, ressalta-se que este trabalho terá foco especial na aplicação de diferentes métodos numéricos para solução eficiente e robusta desses modelos visando a obtenção de resultados precisos. Além disso, algumas aplicações da equação de CH serão exploradas ao longo do trabalho.

1.3.2 Objetivos específicos

A seguir, os objetivos específicos deste trabalho são detalhados:

- Estudar a convergência dos métodos numéricos CG, DG e HDG para o modelo de Cahn-Hilliard em problemas com solução exata manufaturada.
- Estudar e implementar métodos eficientes e de alta ordem para discretização no tempo como o método de segunda ordem SBDF2.

- Estudo de convergência do método numérico que combina o método HDG com o método SBDF2 para as equações de Cahn-Hilliard e suas aplicações.
- Estudar e implementar modelos baseados na equação de Cahn-Hilliard. Em particular, serão considerados casos do modelo de Cahn-Hilliard acoplado à equação de Darcy. A solução numérica irá considerar o uso de formulações híbridas tanto para o tratamento das equações do tipo Cahn-Hilliard quanto para a equação de Darcy.
- Estudar e resolver numericamente problemas voltados à aplicações da equação de CH tais como o problema do crescimento tumoral avascular e o processo de eletromolhabilidade.

1.4 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

O restante deste texto está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 são apresentados os modelos matemáticos abordados neste trabalho, com foco no modelo de Cahn-Hilliard e suas extensões. No capítulo 3 as formulações de elementos finitos e os métodos numéricos para integração no tempo para simulação dos modelos são apresentados. Os resultados numéricos de diversos experimentos computacionais são apresentados nos capítulos 4 e 5, os quais apresentam em detalhes a utilização da formulação de elementos finitos híbrida e do método SBDF2, respectivamente. Por fim, no capítulo 6 são apresentadas discussões e conclusões a respeito do presente trabalho.

2 MODELOS MATEMÁTICOS

Este capítulo apresenta os modelos matemáticos que serão utilizados neste trabalho para estudar diversas aplicações. Em particular, são apresentados o modelo de Cahn-Hilliard clássico, o modelo de crescimento tumoral avascular, o acoplamento de Cahn-Hilliard com o modelo de Darcy e, por último, o modelo de eletromolhabilidade.

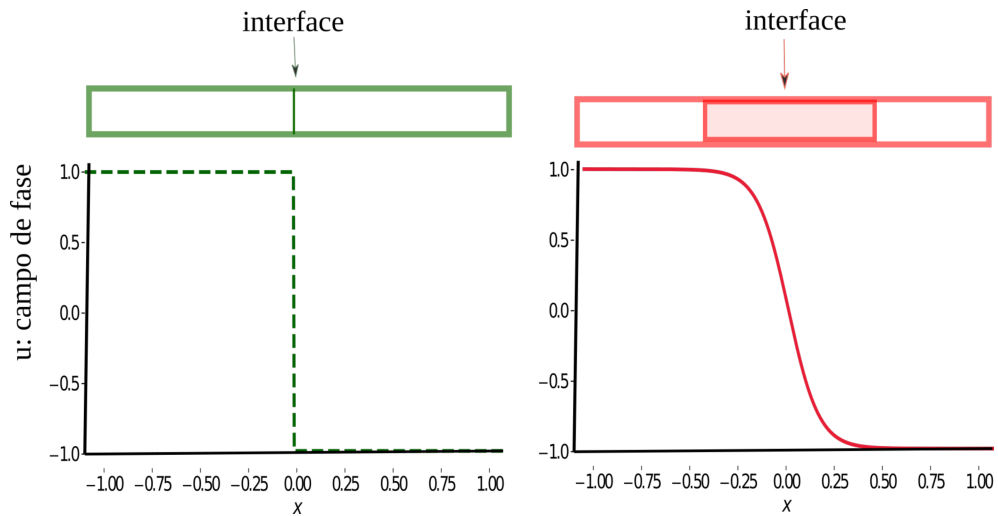
2.1 MODELO DE CAHN-HILLIARD

O problema de interface entre dois meios tem sido estudado desde o século XIX, quando foi inicialmente estudado pelo físico esloveno Josef Stefan, que introduziu soluções para esta classe de problemas na década de 1890 (Biner, 2017). Trata-se de um problema particular de valor de contorno para um sistema de equações diferenciais parciais na qual a interface entre duas fases pode se mover com o tempo. Este tipo de solução é conhecido como abordagem de interface aguda/afiada e foram utilizadas para modelar a cinética das transformações de fase difusiva. Nesta abordagem as condições de contorno para um conjunto de equações diferenciais parciais são explicitamente definidas para cada fase. No entanto, soluções para estes problemas através desta abordagem podem ser extremamente difíceis de serem encontradas em consequência das interações de interface com vários processos complexos que podem ocorrer durante as transformações de cada fase, tais como, fusão, dissolução e desagregação.

Assim, no contexto dos problemas de interface difusiva pode-se mencionar o modelo do campo de fase (MCF) (Chen, 2002). A Figura 4 ilustra de forma esquemática duas formas de tratamento de problemas de interfaces entre dois meios. Na ilustração à esquerda a interface é representada por um parâmetro de ordem ou campo de fase u que varia de forma abrupta (descontínua) através da interface utilizada na abordagem de interface aguda, que envolve o acompanhamento explícito da interface. Na ilustração à direita, o campo de fase varia ao longo da interface no denominado modelo do campo de fase (MCF), que contorna a necessidade de acompanhar explicitamente as interfaces ao substituir as condições de contorno na interface por uma EDP que descreve a evolução do campo de fase.

As equações do modelo de campo de fase têm suas origens nos trabalhos de Cahn e Hilliard para modelar a separação (ou decomposição espinodal) dos componentes de uma mistura bifásica de componentes metálicos (Cahn, 1961, Cahn e Hilliard, 1958). A Figura 5 apresenta um exemplo da decomposição espinodal de dois componentes puros. O gráfico no painel (a) mostra a mistura inicial das duas componentes (gerada de forma aleatória); o painel (b) mostra o início da separação de fases que ocorre de forma rápida; já no painel (c) o surgimento das fases puras em pequenas formações pode ser observado com uma dinâmica mais lenta; e finalmente o painel (d) mostra que as formações vão se

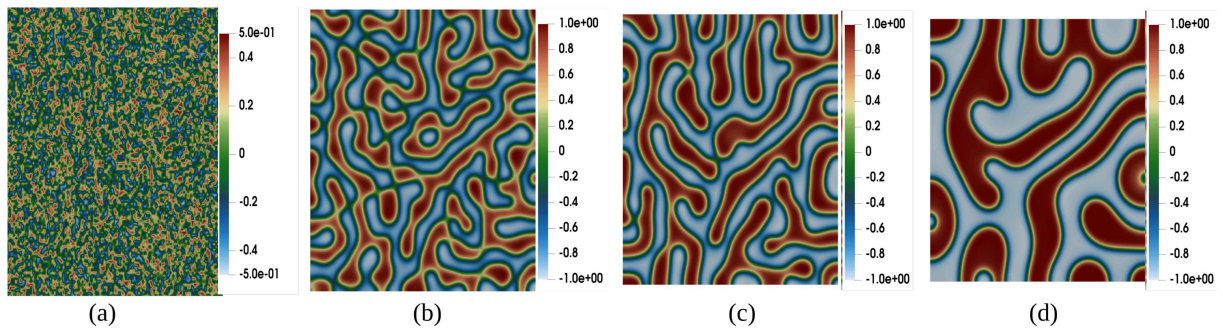
Figura 4 – Diferença no tratamento de interfaces: método de interface aguda (esquerda) e modelo do campo de fase (direita).



Fonte: Figura adaptada de Abdollahi e Arias (2015).

tornando maiores com o decorrer do tempo.

Figura 5 – Simulação computacional ilustrativa do processo da decomposição espinodal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para apresentar as equações de Cahn-Hilliard, considere uma liga binária composta de duas espécies em um domínio espacial $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, com $d \in \{1, 2, 3\}$. As duas fases puras são representadas por A e B . Deseja-se descrever a evolução dessas duas componentes no período de tempo $(0, T]$ com tempo final fixo $T > 0$. O campo de fase $u = u(\mathbf{x}, t)$ descreve a concentração local da mistura de ambas componentes de tal forma que se $u \approx 1$, então apenas a fase A está presente, enquanto que $u \approx -1$ significa que só a fase B existe no ponto \mathbf{x} no instante de tempo t . A região de interface, com as fases misturadas, é caracterizada pelos valores de u entre -1 e 1 .

A teoria de Cahn e Hilliard é baseada no funcional de energia livre de Ginzburg-

Landau (Lee et al., 2014), o qual é dado por:

$$E(u) = \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + F(u) \right] dx, \quad (2.1)$$

onde Ω é a região ocupada pelo sistema, $\frac{1}{2} |\nabla u|^2$ é o termo que representa a energia interfacial, ϵ é uma constante associada à espessura da interface de transição entre as fases e $F(u)$ é a densidade de energia livre.

O potencial químico, denotado aqui por w , representa a taxa de variação da energia livre com respeito à quantidade de espécies e pode ser obtido a partir da derivada funcional do funcional de energia E em u na direção de ψ , isto é:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dE}{d\eta}(u + \eta\psi) \right|_{\eta=0} &= \left\{ \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{E(u + \eta\psi) - E(u)}{\eta} \right\} \Big|_{\eta=0} \\ &= \left. \frac{d}{d\eta} \left\{ \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon^2}{2} |\nabla(u + \eta\psi)|^2 + \frac{1}{4} ((u + \eta\psi)^2 - 1)^2 - \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla u|^2 - \frac{1}{4} (u^2 - 1)^2 \right] dx \right\} \right|_{\eta=0} \\ &= \int_{\Omega} \left[\epsilon^2 |\nabla u| |\nabla \psi| + (u^2 - 1)u\psi \right] dx = \int_{\Omega} \left((u^3 - u) - \epsilon^2 \Delta u \right) \psi dx \\ &= \int_{\Omega} \left(F'(u) - \epsilon^2 \Delta u \right) \psi dx = \int_{\Omega} w \psi dx \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde foi considerado que $F'(u) = u^3 - u$ e foi utilizada a primeira identidade de Green Johnson (2012) e a condição de contorno natural homogênea $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$, sobre $\partial\Omega$, onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário. Finalmente, para se obter a conservação de massa, considera-se a condição de contorno $\mathcal{M}(u) \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0$ sobre $\partial\Omega$.

O equilíbrio da mistura é obtido a partir da minimização do funcional de energia (2.1) sujeito à conservação de massa, a qual é representada por

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u dx = 0. \quad (2.3)$$

A equação de Cahn-Hilliard pode ser deduzida da seguinte forma pelo princípio de conservação de massa, que em um sistema isotérmico é dada por

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u dx = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} ds, \quad (2.4)$$

onde \mathbf{J} denota o fluxo de massa Ω o domínio. Pelo teorema da divergência tem-se que a equação (2.4) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u dx = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{J} dx. \quad (2.5)$$

Dado que Ω é fixo e arbitrário e que o fluxo de massa é definido como $\mathbf{J} = -\mathcal{M}(u) \nabla w$, temos que

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla w), \quad (2.6)$$

onde $\mathcal{M}(u) > 0$ é a função de mobilidade; e w é o potencial químico.

A função potencial $F(u)$ representa a densidade de energia e possui dois mínimos diferentes, sendo um para cada fase A e B , respectivamente. Nesse contexto, diversos tipos de funções potenciais podem ser utilizadas como a função potencial logarítmica, a função potencial polinomial e a função potencial de obstáculo. Essas funções potenciais logarítmica, polinomial e de obstáculo são definidas, respectivamente, da seguinte forma:

$$F_l(u) = \frac{\theta}{2} \left[(1+u) \ln\left(\frac{1+u}{2}\right) + (1-u) \ln\left(\frac{1-u}{2}\right) \right] + \frac{\theta_c}{2} (1-u^2),$$

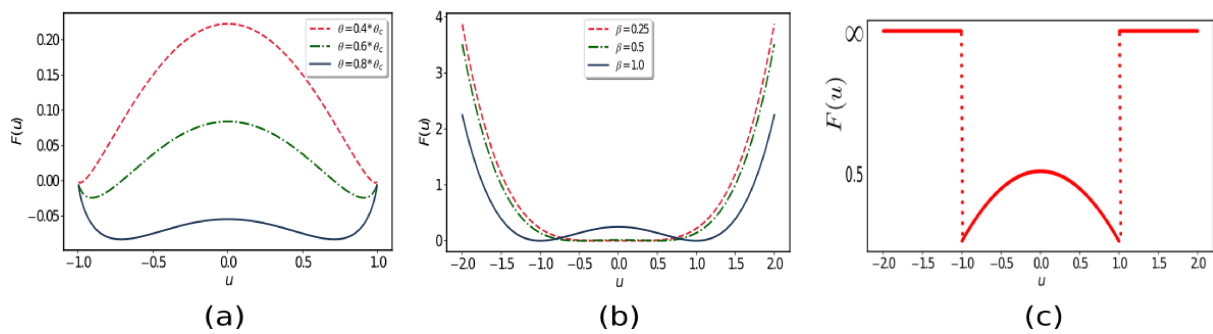
$$F_p(u) = \frac{1}{4} (\beta^2 - u^2)^2,$$

$$F_o(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} (1-u^2), & \text{se } |u| \leq 1, \\ \infty, & \text{se } |u| > 1 \end{cases}$$

onde β , θ e θ_c são constantes.

A Figura 6 apresenta exemplos da função potencial logarítmica, da função potencial polinomial e da função potencial de obstáculo, respectivamente. As duas primeiras funções potenciais são muito utilizadas em casos de funções regulares, enquanto o caso de potencial de obstáculo em funções não regulares é muito utilizado em aplicações de processamento de imagens (Garcke et al., 2018b).

Figura 6 – Exemplos de funções potenciais $F(u)$: (a) potencial logarítmico para o valor de $\theta_c = 1$; (b) potencial polinomial com os valores de $\beta = \{0.25, 0.5, 1.0\}$; e (c) potencial obstáculo.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Em particular, neste trabalho será considerada uma função potencial do tipo polinomial conhecida como função de poço-duplo (*double-well*, do inglês), definida para F_p com $\beta = 1$, a qual é dada por

$$F(u) = \frac{1}{4} (1 - u^2)^2. \quad (2.7)$$

Assim obtém-se o modelo de Cahn-Hilliard, o qual é dado por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w), \quad \text{em } \Omega, \quad (2.8)$$

$$w = F'(u) - \epsilon^2 \Delta u, \quad \text{em } \Omega, \quad (2.9)$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (2.10)$$

$$\mathcal{M}(u)\nabla w \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (2.11)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0, \quad \text{em } \Omega. \quad (2.12)$$

É importante observar que o modelo de CH definido nas equações (2.8)-(2.9) apresenta uma equação parabólica não-linear de quarta ordem. Duas propriedades importantes do modelo CH são a conservação de massa e o decaimento da energia. Esta segunda propriedade pode ser observada derivando a energia E em relação ao tempo, de onde obtém-se que

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \int_{\Omega} (\epsilon \nabla u \cdot \nabla \partial_t u + F'(u) \partial_t u) dx = \int_{\Omega} w \partial_t u dx = \int_{\Omega} w \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w) dx \\ &= \int_{\partial\Omega} w \mathcal{M}(u)\nabla w \cdot \mathbf{n} ds - \int_{\Omega} \mathcal{M}(u)\nabla w \cdot \nabla w dx \\ &= - \int_{\Omega} \mathcal{M}(u) |\nabla w|^2 dx \leq 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

que significa que a energia total decresce com o tempo.

Por outro lado, derivando a massa total com relação ao tempo, conclui-se que a massa total é conservada:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u dx = \int_{\Omega} \partial_t u dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla v) dx = \int_{\partial\Omega} \mathcal{M}(u)\nabla v \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (2.14)$$

2.2 MODELO DE CAHN-HILLIARD COM TERMO REATIVO

O modelo de CH com termo reativo é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w) + \mathcal{P}u, \quad \text{em } \Omega \times (0, T] \quad (2.15)$$

$$w = F'(u) - \epsilon^2 \Delta u, \quad \text{em } \Omega \times (0, T] \quad (2.16)$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2.17)$$

$$\mathcal{M}(u)\nabla w \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2.18)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(\cdot), \quad \text{em } \Omega \quad (2.19)$$

onde \mathcal{P} é uma constante. A função de poço-duplo utilizada neste caso é dada por $F(u) = \frac{0.18}{4}u^2(1-u)^2$, enquanto a mobilidade é dada por $\mathcal{M}(u) = \frac{1}{\epsilon}u^2$.

2.3 MODELO DE CRESCIMENTO TUMORAL AVASCULAR

Esta seção apresenta um modelo de crescimento tumoral sólido avascular proposto por Cristini et al. (2009) que considera os efeitos do consumo de nutrientes vitais (por

exemplo, oxigênio ou glicose), da quimiotaxia das células tumorais até os gradientes de nutrientes, e da adesão de célula a célula. Termos de reação biologicamente consistentes são considerados na equação que descreve a evolução das células tumorais, representando a mitose celular proporcional à concentração de nutrientes e a morte celular (apoptose). Uma equação quase estável de reação-difusão é utilizada para descrever a concentração de nutrientes σ , uma vez que a sua difusão ocorre de forma muito lenta (Cristini et al., 2009).

O modelo de crescimento tumoral avascular (Cristini et al., 2009) em sua forma adimensional, onde u representa as células tumorais, w o potencial químico e σ a concentração de nutrientes é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathcal{M}(u) \nabla w \right) + \mathcal{P} \sigma u - \mathcal{A} u, \quad \text{in } \Omega \times (0, T] \quad (2.20)$$

$$w = \mathcal{G}^{-1} \left(F'(u) - \epsilon^2 \Delta u \right) - \epsilon \chi_\sigma \sigma, \quad \text{in } \Omega \times (0, T] \quad (2.21)$$

$$0 = \nabla \cdot \left(\mathcal{D}(u) \nabla \sigma \right) - \sigma u, \quad \text{in } \Omega \times (0, T], \quad (2.22)$$

onde $\mathcal{M}(u) = \frac{1}{\epsilon} u^2$ é a mobilidade, \mathcal{P} é o coeficiente de proliferação, \mathcal{A} é a taxa de apoptose, \mathcal{G} representa as interações célula-célula (adesão) que surge no modelo devido à sua adimensionalização, χ_σ é o coeficiente de quimiotaxia, e $\mathcal{D}(u)$ é o coeficiente de difusão definido por:

$$\mathcal{D}(u) = u + D(1 - u). \quad (2.23)$$

O modelo também é complementado pelas seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2.24)$$

$$\mathcal{M}(u) \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2.25)$$

$$\sigma = 1, \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2.26)$$

$$\nabla \sigma \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega / \partial\Omega_\sigma \times (0, T] \quad (2.27)$$

$$u(\cdot, 0) = u_0, \quad \text{em } \Omega. \quad (2.28)$$

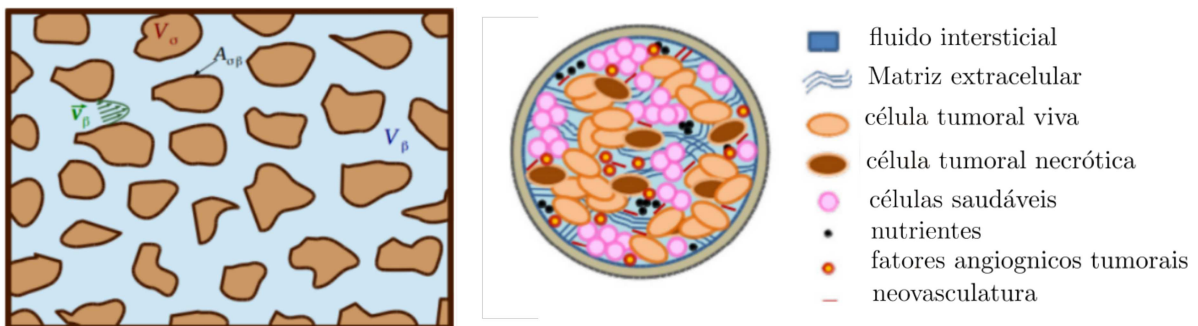
2.4 MODELO DE DARCY

Nesta seção a equação de Darcy, a partir de seu caráter experimental e de leis de balanço, é apresentada para que esta seja utilizada posteriormente em um modelo de Cahn-Hilliard.

Pode-se considerar um modelo bifásico (fase fluida e fase sólida) para o crescimento de tumores baseado na mecânica de meios porosos saturados de fluido. Um meio poroso é um material que contém espaços vazios (preenchido pela fase líquida) e uma matriz sólida (as células normais, as células tumorais e a matriz extracelular) (Bear, 2013). A modelagem do crescimento tumoral considerando um meio poroso é apresentada em detalhes por Lima

et al. (2016), Rocha et al. (2018), Garcke et al. (2016, 2018a), Han e Wang (2016) e Mascheroni et al. (2018). A Figura 7 ilustra um meio poroso no contexto do crescimento tumoral. A região ocupada pelo fluido é denotada por V_β , enquanto a região ocupada pelo sólido por V_σ , enquanto a região de interface entre as duas fases é denotada por $A_{\beta\sigma}$. Para caracterizar o fluxo em todas as partes do volume V , também define-se uma velocidade do fluido \mathbf{v}_β e uma pressão do fluido p_β .

Figura 7 – Esquema de um meio poroso totalmente saturado (lado esquerdo) e representação do crescimento tumoral num meio poroso (lado direito).



Fonte: Figura adaptada de Kremheller et al. (2018).

Se forem consideradas as hipóteses de fluido newtoniano incompressível sob um escoamento lento e laminar, as equações que governam o deslocamento do fluido são as equações de Stokes, as quais são dadas por:

$$-\mu_\beta \Delta \mathbf{v}_\beta + \nabla p_\beta = \rho_\beta \mathbf{g}, \quad \text{em } V_\beta, \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{em } V_\beta, \quad (2.30)$$

onde \mathbf{v}_β é o campo de velocidades, ρ_β representa a densidade do fluido, μ_β a viscosidade do fluido e \mathbf{g} a aceleração da gravidade. A equação (2.29) representa o princípio de balanço do momento linear, enquanto a equação (2.30) representa o princípio de conservação da massa.

Para que o problema seja bem posto, condições de contorno devem ser atribuídas no contorno do sólido, isto é, em $A_{\beta\sigma}$. A resolução direta dessas equações em um meio poroso possui a limitação considerável de necessitar descrever com precisão a geometria complexa da interface entre o esqueleto sólido e o volume vazio.

É possível introduzir outra representação do fluido em um meio poroso. Ao definir volumes de controle em todo o domínio, calcula-se a média das quantidades de interesse dentro desses volumes. Assim, não é mais necessário representar a geometria do corpo explicitamente, mas cada ponto do domínio contém tanto fluido quanto sólido de forma média. Esta abordagem é chamada de modelo de Darcy e as novas quantidades desconhecidas passam a ser \mathbf{v} (velocidade média) e p (pressão média).

As equações do problema de Darcy são dadas por:

$$\mathbf{v} + \mathbb{K}\nabla p = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (2.31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = s, \quad \text{em } \Omega, \quad (2.32)$$

onde \mathbf{v} é velocidade de Darcy, p é a pressão de Darcy, \mathbb{K} é o tensor de condutividade hidráulica, s é um termo fonte (que representa o fluxo de entrada ou saída do domínio) e Ω o domínio do problema.

2.5 MODELO ACOPLADO CAHN-HILLIARD-DARCY

Modelos do tipo Cahn-Hilliard-Darcy (CHD) acoplam o modelo de CH com o modelo de Darcy e têm sido utilizados para modelar fluidos incompressíveis de duas fases (Han e Wang, 2016), e também na modelagem do crescimento tumoral na fase avascular (Garcke et al., 2016, 2018a). A seguir discute-se o modelo CHD apresentado por Garcke et al. (2016) que será utilizado neste trabalho e que considera o crescimento do tumor incluindo difusão de nutrientes, quimiotaxia, transporte ativo, adesão, apoptose e proliferação.

As seguintes hipóteses são consideradas para este modelo:

- As células tumorais somente morrem por apoptose, assim, não é considerada a possibilidade de necrose tumoral;
- O tecido ao redor do tumor não reage às células do tumor de qualquer forma ativa; além disso, desconsidera-se qualquer resposta do sistema imunológico ao tecido tumoral;
- Criação de vasos sanguíneos não é considerada, isto é, o processo de induzir angiogênese é negligenciado no modelo;
- Considera-se uma única espécie química atuando como nutriente para as células tumorais, e que não é consumido pelas células saudáveis;
- Também consideram-se termos de quimiotaxia para representar o movimento ativo da colônia de células tumorais em direção às fontes de nutrientes. Naturalmente, o processo oposto do movimento dos nutrientes em direção às células tumorais próximas, também é considerado.

Logo, o modelo de CHD é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{v} = \alpha \Gamma, \\ \mathbf{v} = -\mathbb{K}(\nabla p - w \nabla u + N_{,u} \nabla u), \\ \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} u) = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla \mu) + \bar{\rho}_s \Gamma, \\ w = \frac{\beta}{\epsilon} \psi'(u) - \beta \epsilon \Delta u - \mathcal{X}_u \sigma, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v}) = \nabla \cdot (n(u) (N_{,\sigma}) - S), \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0 \\ \sigma = \sigma_\beta, \end{array} \right. \quad (2.33)$$

onde α é uma constante que depende das densidades de massa de cada componente e Γ é um termo fonte (ambos descritos no Apêndice C), u o campo de fase e w o potencial químico. Além disso, é preciso considerar condições de contorno de Dirichlet para os nutrientes σ , assim como condições iniciais apropriadas.

Adicionalmente as seguintes definições são dadas:

- $\Gamma = (\mathcal{P}_f \sigma - \mathcal{A})h(u)$ é uma função que descreve a fonte ou sumidouro de massa (células tumorais). A função $h(u)$ é dada por $h(u) = \frac{1}{2}(1+u)$. Desta forma, a função h assume o valor 0 na região do tecido saudável e o valor 1 na região do tumor. O termo \mathcal{P}_f define o coeficiente de proliferação, enquanto \mathcal{A} define a taxa de apoptose das células tumorais, que é definida como a morte natural programada das células.
- $N(u, \sigma) = \frac{\chi_\sigma}{2} \sigma^2 + \mathcal{X}_u \sigma (1-u)$: este termo define a energia fornecida pela interação das células do tumor e os nutrientes. Especificamente, a derivada de $N(u, \sigma)$ em relação a u , isto é, $N_{,u} = -\mathcal{X}_u \sigma$ controla o efeito de quimiotaxia, que é o movimento dos nutrientes em direção às células tumorais. Esta escolha da função $N(u, \sigma)$ representa o fato de que na região do tumor (onde $u = 1$) acontece apenas difusão, enquanto na região das células saudáveis também ocorre a quimiotaxia dos nutrientes.
- $S = \mathcal{C} \sigma h(u)$: esta função representa o termo de sumidouros para os nutrientes, a qual é igual a 0 no conjunto $\{x \in \Omega : u = -1\}$ e é igual a $\mathcal{C} \sigma$ no conjunto $\{x \in \Omega : u = 1\}$, representando uma absorção dos nutrientes pelas células tumorais.
- $\mathcal{M}(u) = \frac{1}{2}(1+u)^2$ e $n(u) = \lambda \mathcal{X}_u^{-1} \mathcal{D}(u)$ representam as mobilidades das células saudáveis do tumor e dos nutrientes, respectivamente, onde $\lambda = \frac{\chi_u}{\chi_\sigma}$ e $\mathcal{D}(u) = \frac{1+u}{2} + D\left(\frac{1-u}{2}\right)$.

Mais detalhes do modelo (2.33) são apresentados no Apêndice C.

2.6 MODELO DE ELETROMOLHABILIDADE

Por fim, um modelo baseado na equação de CH que pode ser usada em aplicações de eletromolhabilidade é apresentado. A eletromolhabilidade é uma das técnicas mais utilizadas para a manipulação de pequenas quantidades de líquidos em superfícies. Este procedimento consiste na modificação de propriedades de umedecimento de uma superfície através da aplicação de um campo elétrico (Quilliet e Berge, 2001).

Modelos de interface difusiva do tipo Cahn-Hilliard têm sido utilizados para modelar o movimento de uma gota de fluido devido à aplicação de um campo elétrico em uma geometria de Hele-Shaw, como apresentado por Lu et al. (2007).

Neste caso, o modelo de eletromolhabilidade a ser estudado é dado por:

$$\begin{cases} \epsilon \frac{du}{dt} - \nabla \cdot (u \nabla w) = 0 \\ w = \epsilon^2 \Delta u + \psi'(u) - \epsilon \rho(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (2.34)$$

onde o parâmetro ϵ é o comprimento da interface difusiva, $\psi(u)$ é a função de poço-duplo dada por $\psi(u) = (u - \epsilon)^2(u - 1)^2$, e $\rho(\mathbf{x}) = \lambda \chi(\mathbf{x})$ é a energia local (campo elétrico) com função característica $\chi(\mathbf{x})$ e força λ .

O termo da energia local é responsável por introduzir o efeito do campo elétrico no modelo de interface difusiva. Para mais detalhes sobre este modelo é recomendada a leitura de Lu et al. (2007), que apresenta tanto experimentos de laboratórios quanto experimentos computacionais para este fenômeno.

3 MÉTODOS NUMÉRICOS

Este capítulo apresenta os métodos numéricos utilizados para solução das equações estudadas no capítulo anterior. Em particular, apresenta-se aqui a formulação de elementos finitos, a discretização temporal para os modelos Cahn-Hilliard, Cahn-Hilliard-Darcy e eletromolhabilidade.

3.1 FORMULAÇÃO PARA O MODELO CAHN-HILLIARD

Aqui, são descritos os métodos numéricos usados para a solução dos problemas apresentados anteriormente. O método de Galerkin contínuo (CG) clássico é apresentado e um método Galerkin descontínuo híbrido (HDG) é proposto. A partir do método HDG apresentado é possível deduzir um método de Galerkin descontínuo (DG) correspondente que, baseado em escolhas específicas dos coeficientes de estabilização, recupera o método de Galerkin Não Simétrico de Penalidade Interior (NIPG) originalmente proposto por Rivière et al. (1999).

Os métodos numéricos são apresentados para a solução do problema do CH (2.15)-(2.19), enquanto as formulações para o modelo de crescimento do tumor avascular são omitidas, uma vez que podem ser obtidas a partir da formulação da equação do modelo CH, assim como para o caso do modelo de eletromolhabilidade.

3.1.1 Formulação de Galerkin contínuo

Inicialmente um método misto de Galerkin contínuo é descrito para resolver o problema CH dado nas equações (2.15)-(2.19). Para isto, primeiro são introduzidas algumas notações e definições. Seja $H^m(\Omega)$ o habitual espaço Sobolev equipado com norma $\|\cdot\|_{m,\Omega} = \|\cdot\|_m$ e semi-norma $|\cdot|_{m,\Omega} = |\cdot|_m$, com $m \geq 0$. Para $m = 0$, temos $L^2(\Omega) = H^0(\Omega)$ como o espaço das funções quadrado integráveis. O Apêndice A apresenta conceitos e definições preliminares que serão utilizadas ao longo deste capítulo.

Seja $\mathcal{T}_h = \{K\}$ uma família de malhas regulares do domínio Ω , onde h é o diâmetro máximo do elemento, U_h^p denota o espaço das funções polinomiais contínuas por partes de grau p , definido por:

$$U_h^p = \left\{ v \in H^1(\Omega) : v|_K \in \mathbb{P}_p(K) \text{ para cada elemento } K \in \mathcal{T}_h \right\} \quad (3.1)$$

onde $\mathbb{P}_p(K)$ é o espaço das funções polinomiais de grau maior ou igual a p . Em seguida, a formulação semi-discreta de elementos finitos conforme para o problema CH é dada por:

Achar o par $(u_h, w_h) \in U_h^p \times U_h^p$, tais que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u_h}{\partial t} v_1 d\mathbf{x} + A_{CG}([w_h, u_h]; [v_1, v_2]) = F_{CG}([v_1, v_2]), \quad \forall [v_1, v_2] \in U_h^p \times U_h^p, \quad (3.2)$$

com

$$A_{CG}([w_h, u_h]; [v_1, v_2]) = A^\Omega([w_h, u_h], v_1) + B^\Omega([w_h, u_h], v_2),$$

onde

$$A^\Omega([w_h, u_h], v_1) = \int_\Omega \mathcal{M}(u_h) \nabla w_h \cdot \nabla v_1 d\mathbf{x} - \mathcal{P} \int_\Omega u_h v_1 d\mathbf{x}, \quad (3.3)$$

$$B^\Omega([w_h, u_h], v_2) = \int_\Omega \epsilon^2 \nabla u_h \cdot \nabla v_2 d\mathbf{x} + \int_\Omega F'(u_h) v_2 d\mathbf{x} - \int_\Omega w_h v_2 d\mathbf{x}, \quad (3.4)$$

e $F_{CG}([v_1, v_2]) = 0$. É importante notar que este tipo de formulação mista de CG tem sido amplamente utilizada para resolver a equação CH, como relatado em diversos trabalhos (Elliott et al., 1989, Keita et al., 2021, Wells et al., 2006).

3.1.2 Formulação de Galerkin descontínuo híbrido

Para introduzir as próximas formulações, considere as definições comumente adotadas para construir formulações variacionais em espaços funcionais quebrados associados aos métodos de Galerkin descontínuos e híbridos. Assim, introduz-se os seguintes espaços funcionais quebrados na partição de \mathcal{T}_h :

$$V_h^p = \left\{ v \in L^2(\Omega) : v|_K \in \mathbb{P}_p(K) \text{ para cada elemento } K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (3.5)$$

onde $\mathbb{P}_p(K)$ denota o conjunto de polinômios de grau $p \geq 1$ no elemento K .

Adicionalmente, variáveis definidas como multiplicadores de Lagrange podem ser aproximadas por funções descontínuas nas arestas/faces $e \in \mathcal{E}_h$:

$$\hat{V}_h^p = \left\{ \hat{v} \in L^2(\mathcal{E}_h) : \hat{v}|_e \in \mathbb{S}_p(e) \text{ para cada aresta/face } e \in \mathcal{E}_h \right\}, \quad (3.6)$$

onde $\mathbb{S}_p(e)$ denota o espaço polinomial com grau p em cada aresta e .

A formulação de Galerkin descontínuo hibridizável (HDG) pode ser obtida conforme descrito a seguir. O problema (2.15)-(2.19) definido em cada elemento K da malha \mathcal{T}_h é considerado e escolhe-se os multiplicadores $\hat{w} = w|_e$ e $\hat{u} = u|_e$ como os traços das variáveis w e u nas arestas/faces $e \in \mathcal{E}_h$ pertencentes ao espaço \hat{V}_h^p . O método de Nitsche (Arruda et al., 2013) é utilizado e são introduzidos termos de estabilização consistentes governados pelos parâmetros de estabilização nas arestas β_1 e β_2 . Assim, obtemos a seguinte formulação Galerkin descontínuo hibridizável (HDG):

Encontrar $\mathbf{X}_h \in \mathbf{V}_h^p$, tais que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{\partial u_h}{\partial t} v_1 d\mathbf{x} + A_{HDG}(\mathbf{X}_h, \mathbf{Y}) = F_{HDG}(\mathbf{Y}_h), \quad \forall \mathbf{Y}_h \in \mathbf{V}_h^p, \quad (3.7)$$

com $\mathbf{X}_h = [w, \hat{w}, u, \hat{u}]$ e $\mathbf{Y}_h = [v_1, \hat{v}_1, v_2, \hat{v}_2]$ pertencentes ao espaço do produto $\mathbf{V}_h^p = V_h^p \times \hat{V}_h^p \times V_h^p \times \hat{V}_h^p$ e

$$A_{HDG}(\mathbf{X}_h, \mathbf{Y}_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[A^K([w_h, u_h], v_1) + A^{\partial K}([w_h, \hat{w}_h, u_h], [v_1, \hat{v}_1]) \right. \\ \left. + B^K([w_h, u_h], v_2) + B^{\partial K}([u_h, \hat{u}_h], [v_2, \hat{v}_2]) \right]$$

onde

$$A^K([w_h, u_h], v_1) = \int_K \mathcal{M}(u_h) \nabla w_h \cdot \nabla v_1 d\mathbf{x} - \mathcal{P} \int_K u_h v_1 d\mathbf{x}, \quad (3.8)$$

$$A^{\partial K}([w_h, \hat{w}_h, u_h], [v_1, \hat{v}_1]) = - \int_{\partial K} \mathcal{M}(u_h) \nabla w_h \cdot \mathbf{n}_K (v_1 - \hat{v}_1) ds - \int_{\partial K} \mathcal{M}(u_h) \nabla v_1 \cdot \mathbf{n}_K (w_h - \hat{w}_h) ds \\ + \beta_1 \int_{\partial K} (w_h - \hat{w}_h) (v_1 - \hat{v}_1) ds, \quad (3.9)$$

$$B^K([w_h, u_h], v_2) = \int_K \epsilon^2 \nabla u_h \cdot \nabla v_2 d\mathbf{x} + \int_K F'(u_h) v_2 d\mathbf{x} - \int_K w_h v_2 dK, \quad (3.10)$$

$$B^{\partial K}([u_h, \hat{u}_h], [v_2, \hat{v}_2]) = - \int_{\partial K} \epsilon^2 \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K (v_2 - \hat{v}_2) ds - \int_{\partial K} \epsilon^2 \nabla v_2 \cdot \mathbf{n}_K (u_h - \hat{u}_h) ds \\ + \beta_2 \int_{\partial K} (u_h - \hat{u}_h) (v_2 - \hat{v}_2) ds, \quad (3.11)$$

e ainda $F_{HDG}(\mathbf{Y}_h) = 0$, e \mathbf{n}_K é um vetor normal unitário exterior a ∂K . Os parâmetros de estabilização são definidos como

$$\beta_1 = \frac{\beta_{01}}{\epsilon h}, \quad \text{e} \quad \beta_2 = \frac{\beta_{02} \epsilon^2}{h}, \quad (3.12)$$

com $\beta_{01} > 0$ e $\beta_{02} > 0$.

O método HDG pode ser apresentado como um conjunto de problemas locais acoplado a um problema global definido pelos multiplicadores de Lagrange, como se segue:

Problema Local: para qualquer $K \in \mathcal{T}_h$, achar $w_h|_K$ e $u_h|_K$ pertencentes a V_h^p tais que, para todo $(v_1, v_2) \in V_h^p \times V_h^p$

$$A^K([w_h, u_h], v_1) + A^{\partial K}([w_h, \hat{w}_h, u_h], [v_1, 0]) = 0, \quad (3.13)$$

$$B^K([w_h, u_h], v_2) + B^{\partial K}([u_h, \hat{u}_h], [v_2, 0]) = 0. \quad (3.14)$$

Problema Global: achar o par $(\hat{w}_h, \hat{u}_h) \in \hat{V}_h^p \times \hat{V}_h^p$ satisfazendo, para todo $(\hat{v}_1, \hat{v}_2) \in \hat{V}_h^p \times \hat{V}_h^p$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} A^{\partial K}([w_h, \hat{w}_h, u_h], [0, \hat{v}_1]) = 0, \quad (3.15)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} B^{\partial K}([u_h, \hat{u}_h], [0, \hat{v}_2]) = 0. \quad (3.16)$$

As equações (3.13) e (3.14) correspondem aos problemas locais definidos em cada $K \in \mathcal{T}_h$, enquanto as equações (3.15) e (3.16) correspondem ao problema global colocado em $e \in \mathcal{E}_h$. Os problemas globais são consistentes e impõem a continuidade das variáveis primais w_h e u_h e os fluxos contínuos na interface $e \in \mathcal{E}_h^0$ entre dois elementos adjacentes.

Observação 1. *A discretização espacial do método semi-discreto apresentada anteriormente, assumindo \mathcal{M} , ϵ , \mathcal{P} e F' como constantes positivas, pode ser relacionada aos métodos híbridos propostos e analisados nos trabalhos de Arruda et al. (2012, 2013) para problemas de difusão e reação-difusão, nos quais taxas de convergência ótimas são provadas na norma da energia e $L^2(\Omega)$. Neste contexto, para $v_h \in V_h^p$ e $\hat{v}_h \in \hat{V}_h^q$, a estimativa de erro a priori em uma norma da energia é dada por*

$$\| \| [v - v_h, \hat{v} - \hat{v}_h] \| \|_{GC} \leq C (h^p |v|_{p+1, \Omega} + h^q |v|_{q+1, \Omega}), \quad (3.17)$$

e adotando $p = q$, a estimativa de erro na norma $L^2(\Omega)$ é dada por

$$\|v - v_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^{p+1} |v|_{p+1, \Omega}, \quad (3.18)$$

para soluções exatas regulares $v \in H^{p+1}$, onde a seguinte norma da energia dependente da malha foi considerada

$$\begin{aligned} \| \| [v, \hat{v}] \| \|_{GC}^2 := & \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K |\nabla v|^2 dx + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K |v|^2 dx + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h^2 \int_K |\Delta v|^2 dx \\ & + \sum_{e \in \mathcal{E}_h} h^{-1} \int_e \| [v] \|^2 ds + \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} h^{-1} \int_e |\hat{v} - \{v\}|^2 ds \quad \forall [v, \hat{v}] \in V_h^p \times \hat{V}_h^q, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde $\| \cdot \|$ e $\{ \cdot \}$ denotam os operadores de salto e média, respectivamente.

3.1.3 Conexão do HDG com o método DG

Para estabelecer uma conexão apropriada entre o método híbrido (3.7) e um método DG associado, primeiro introduz-se algumas notações usuais das formulações do DG. Para isso, sejam $K_1, K_2 \in \mathcal{T}_h$ dois elementos compartilhando uma aresta/face e , onde definem-se os vetores normais unitários \mathbf{n}_{K_1} e \mathbf{n}_{K_2} apontando para fora de K_1 e K_2 , respectivamente. Assim, para um campo escalar, φ , com $\varphi_1 := \varphi|_{\partial K_1}$ e $\varphi_2 := \varphi|_{\partial K_2}$, define-se o salto como

$$\| \varphi \| = \varphi_1 \mathbf{n}_{K_1} + \varphi_2 \mathbf{n}_{K_2}, \quad \text{em } e \in \mathcal{E}_h^0, \quad (3.20)$$

enquanto que para um campo vetorial $\boldsymbol{\tau}$ o operador salto é um escalar definido como

$$\| \boldsymbol{\tau} \| = \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \mathbf{n}_{K_1} + \boldsymbol{\tau}_2 \cdot \mathbf{n}_{K_2}, \quad \text{em } e \in \mathcal{E}_h^0. \quad (3.21)$$

os operadores média de campos escalares e vetoriais, em $e \in \mathcal{E}_h^0$, podem ser definidos como

$$\{ \varphi \} = \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2) \quad \text{e} \quad \{ \boldsymbol{\tau} \} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2). \quad (3.22)$$

Nas arestas/faces de contorno $e \in \mathcal{E}_h^\partial$, estes operadores são usualmente definidos como

$$[[\varphi]] = \varphi \mathbf{n}, \quad [[\boldsymbol{\tau}]] = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}, \quad \text{e} \quad \{\varphi\} = \varphi, \quad \{\boldsymbol{\tau}\} = \boldsymbol{\tau}, \quad (3.23)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário exterior ao contorno $\partial\Omega$. Além disso, as seguintes identidades (Rivière, 2008) são introduzidas:

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \varphi(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}_K) ds = \sum_{e \in \mathcal{E}_h} \int_e \{\varphi\} [[\boldsymbol{\tau}]] ds + \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \int_e [[\varphi]] \cdot \{\boldsymbol{\tau}\} ds, \quad (3.24)$$

e considerando $\hat{\varphi}$ e $\hat{\phi}$ determinados de forma única nas arestas/faces $e \in \mathcal{E}_h$ Arruda et al. (2013):

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} (\varphi - \hat{\varphi})(\phi - \hat{\phi}) ds = \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} 2 \int_e (\{\varphi\} - \hat{\varphi}) (\{\phi\} - \hat{\phi}) ds + \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \frac{1}{2} \int_e [[\varphi]] [[\phi]] ds.$$

A partir destas definições, a forma bilinear $A_{HDG}(\mathbf{X}_h, \mathbf{Y}_h)$ é escrita utilizando os operadores de salto e média como:

$$\begin{aligned} A_{HDG}(\mathbf{X}_h, \mathbf{Y}_h) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} A^K([w_h, u_h], v_1) + \sum_{e \in \mathcal{E}_h} A^e([w_h, \hat{w}_h, u_h], [v_1, \hat{v}_1]) \\ &\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} B^K([w_h, u_h], v_2) + \sum_{e \in \mathcal{E}_h} B^e([u_h, \hat{u}_h], [v_2, \hat{v}_2]), \end{aligned}$$

com $A^K([w_h, u_h], v_1)$ e $B^K([w_h, u_h], v_2)$ definidos nas equações (3.8) e (3.10), respectivamente, e

$$\begin{aligned} A^e([w_h, \hat{w}_h, u_h], [v_1, \hat{v}_1]) &= - \int_e \mathcal{M}(u_h) (\{\nabla w_h\} \cdot [[v_1]] + \{\nabla v_1\} \cdot [[w_h]]) ds \\ &\quad - \int_e \mathcal{M}(u_h) [[\nabla v_1]] (\{w_h\} - \hat{w}_h) ds \\ &\quad - \int_e \mathcal{M}(u_h) [[\nabla w_h]] (\{v_1\} - \hat{v}_1) ds + 2\beta_1 \int_e (\{w_h\} - \hat{w}_h) (\{v_1\} - \hat{v}_1) ds \\ &\quad + \frac{\beta_1}{2} \int_e [[w_h]] \cdot [[v_1]] ds, \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} B^e([u_h, \hat{u}_h], [v_2, \hat{v}_2]) &= - \int_e \epsilon^2 (\{\nabla u_h\} \cdot [[v_2]] + \{\nabla v_2\} \cdot [[u_h]]) ds - \int_e \epsilon^2 [[\nabla v_2]] (\{u_h\} - \hat{u}_h) ds \\ &\quad - \int_e \epsilon^2 [[\nabla u_h]] (\{v_2\} - \hat{v}_2) ds + 2\beta_2 \int_e (\{u_h\} - \hat{u}_h) (\{v_2\} - \hat{v}_2) ds \\ &\quad + \frac{\beta_2}{2} \int_e [[u_h]] \cdot [[v_2]] ds. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Para obter o método DG nas variáveis primais u_h e w_h relacionadas à formulação do HDG, pode-se resolver exatamente as equações do problema global (3.15) e (3.16), usando as definições (3.25) e (3.26), produzindo:

$$\hat{w}_h = \{w_h\} - \frac{\mathcal{M}(u_h)}{2\beta_1} [[\nabla w_h]] \quad \text{em } e \in \mathcal{E}_h^0, \quad (3.27)$$

$$\hat{u}_h = \{u_h\} - \frac{\epsilon^2}{2\beta_2} [[\nabla u_h]] \quad \text{em } e \in \mathcal{E}_h^0. \quad (3.28)$$

Substituindo as soluções do multiplicador (3.27) em (3.25) e (3.28) em (3.26) com $\hat{v}_1 = \hat{v}_2 = 0$, a seguinte formulação do Galerkin descontínuo é obtida: Encontrar o par $(w_h, u_h) \in V_h^p \times V_h^p$, tais que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{\partial u_h}{\partial t} v_1 d\mathbf{x} + A_{DG}([w_h, u_h], [v_1, v_2]) = F_{DG}([v_1, v_2]), \quad \forall [v_1, v_2] \in V_h^p \times V_h^p. \quad (3.29)$$

com

$$\begin{aligned} A_{DG}([w_h, u_h], [v_1, v_2]) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} A^K([w_h, u_h], v_1) + \sum_{e \in \mathcal{E}_h} A_{DG}^e([w_h, u_h], v_1) \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} B^K([w_h, u_h], v_2) + \sum_{e \in \mathcal{E}_h} B_{DG}^e(u_h, v_2), \end{aligned}$$

com $A^K([w_h, u_h], v_1)$ e $B^K([w_h, u_h], v_2)$ definidos em (3.8) e (3.10), respectivamente, e

$$\begin{aligned} A_{DG}^e([w_h, u_h], v_1) &= \int_e \mathcal{M}(u_h)(\alpha \{\nabla w_h\} \cdot \llbracket v_1 \rrbracket - \{\nabla v_1\} \cdot \llbracket w_h \rrbracket) ds - \int_e \gamma_1^w \llbracket \nabla w_h \rrbracket \llbracket \nabla v_1 \rrbracket ds \\ &+ \int_e \gamma_2^w \llbracket w_h \rrbracket \cdot \llbracket v_1 \rrbracket ds, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} B_{DG}^e(u_h, v_2) &= \int_e \epsilon^2 (\alpha \{\nabla u_h\} \cdot \llbracket v_2 \rrbracket - \{\nabla v_2\} \cdot \llbracket u_h \rrbracket) ds - \int_e \gamma_1^u \llbracket \nabla u_h \rrbracket \llbracket \nabla v_2 \rrbracket ds \\ &+ \int_e \gamma_2^u \llbracket u_h \rrbracket \cdot \llbracket v_2 \rrbracket ds, \end{aligned} \quad (3.31)$$

e $F_{DG}([v_1, v_2]) = 0$. Neste caso, $\alpha = -1$, $\gamma_1^w = \frac{\mathcal{M}(u)^2}{2\beta_1}$, $\gamma_2^w = \frac{\beta_1}{2}$, $\gamma_1^u = \frac{\epsilon^4}{2\beta_2}$ e $\gamma_2^u = \frac{\beta_2}{2}$. O método de DG derivado é consistente devido às condições de transmissão $\llbracket w_h \rrbracket = \mathbf{0}$, $\llbracket \nabla w_h \rrbracket = 0$, $\llbracket u_h \rrbracket = \mathbf{0}$ e $\llbracket \nabla u_h \rrbracket = 0$.

Observação 2. *O método de Galerkin descontínuo de penalidades internas (NIPG) pode ser recuperado da seguinte forma. Adotando $\alpha = 1$, $\gamma_1^w = \gamma_1^u = 0$ e $\gamma_2^w = \gamma_2^u = \gamma/h$ na equação (3.29) e adotando a mesma abordagem de discretização no tempo usada para o método HDG, isto é, um esquema de primeira ordem para a derivada no tempo combinado com a abordagem de Eyre, o método NIPG proposto e analisado por Liu et al. (2019) pode ser recuperado. O método NIPG é dado por:*

dados w_h^n e u_h^n , encontrar o par $(w_h^{n+1}, u_h^{n+1}) \in V_h^p \times V_h^p$, tal que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\Delta t} v_1 d\mathbf{x} + A_{NIPG}([w_h^{n+1}, u_h^{n+1}], [v_1, v_2]) = F_{NIPG}([v_1, v_2]), \quad \forall (v_1, v_2) \in V_h^p \times V_h^p. \quad (3.32)$$

A existência e unicidade da solução numérica, e estimativas ótimas de erro no tempo e espaço, que são válidas para as versões simétrica e não-simétrica dessa formulação DG, foram apresentada em Liu et al. (2019). A formulação NIPG está relacionada com o método HDG proposto, como apresentado na Seção 3.1.3. Portanto, as propriedades de consistência, continuidade, estabilidade e taxas de convergência são herdadas pelo método HDG. O método NIPG será usado em alguns experimentos para comparações com as formulações CG e HDG.

3.1.4 Esquema totalmente discreto e algoritmo de solução

O próximo passo é apresentar o esquema numérico utilizado para a solução. Em termos da discretização temporal, o método de Euler-implícito foi utilizado para aproximar a derivada temporal da equação de u . Devido à natureza do problema, essa escolha resulta em equações não lineares devido ao termo da mobilidade e também da derivada do potencial $F(u)$. Uma abordagem comumente utilizada neste contexto é empregar um esquema de discretização gradiente estável proposto por Eyre (1998) que permite o uso de grandes passos de tempo. O esquema divide a função potencial $F(u)$ da seguinte forma

$$F(u) = F_+(u) + F_-(u), \quad (3.33)$$

onde $F_+(u)$ é parte convexa e $F_-(u)$ é a parte côncava, respectivamente. É importante notar que este tipo de decomposição não é única.

Com este esquema, a parte convexa pode ser tratada de forma implícita no tempo, enquanto a parte côncava pode ser tratada de forma explícita. Além disso, o esquema é incondicionalmente gradiente estável para a equação de CH, conforme mostrado por Eyre (1998) e possui solução para todos os passos de tempo.

Para aplicar a decomposição de Eyre nas formulações CG e HDG altera-se $F'(u)$ para $F'_+(u)$ nas formas bilineares (3.4) e (3.10), e introduz-se o termo $F'_-(u)$ nos termos fonte $F_{CG}(\cdot)$ e $F_{HDG}(\cdot)$, onde a abordagem da separação convexa de Eyre (3.33) é introduzida para tratar a parte convexa implicitamente e a parte côncava explicitamente.

Em seguida, o esquema totalmente discreto empregando o método de Euler implícito na discretização temporal e a decomposição de Eyre para CG e HDG é apresentado. A formulação do NIPG não será apresentada aqui, mas pode ser consultada em Liu et al. (2019). Tal abordagem, baseada no uso de um método implícito para a derivada de u e o uso do esquema de Eyre para o função potencial, resulta em um esquema numérico semi-implícito de primeira ordem no tempo.

Para os instantes de tempo $n = 0, 1, 2, \dots, N$, o método de semi-implícito aplicado ao método CG (3.2) é dado por: dados w_h^n e u_h^n , encontrar o par $(w_h^{n+1}, u_h^{n+1}) \in U_h^p \times U_h^p$ tais que

$$\int_{\Omega} \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\Delta t} v_1 d\mathbf{x} + A_{CG}([w_h^{n+1}, u_h^{n+1}]; [v_1, v_2]) = F_{CG}([v_1, v_2]), \quad \forall (v_1, v_2) \in U_h^p \times U_h^p. \quad (3.34)$$

O esquema totalmente discreto para a formulação HDG (3.7) pode ser apresentado para cada instante de tempo $n = 0, 1, 2, \dots, N$ como: dados w_h^n e u_h^n , encontrar $\mathbf{X}_h^{n+1} \in \mathbf{V}_h^p$ tais que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\Delta t} v_1 d\mathbf{x} + A_{HDG}(\mathbf{X}_h^{n+1}, \mathbf{Y}_h) = F_{HDG}(\mathbf{Y}_h), \quad \forall \mathbf{Y}_h \in \mathbf{V}_h^p. \quad (3.35)$$

O esquema de separação de Eyre utilizado lineariza a parte convexa, evitando ter que lidar com um sistema de equações não-lineares. Entretanto, deve-se observar que a mobilidade $\mathcal{M}(u)$ pode ser não linear, e neste caso, um método para resolver sistemas de equações não lineares deve ser utilizado para a solução numérica do problema discretizado. Neste trabalho, para lidar com casos não lineares o método de Picard foi utilizado. Neste método considera-se que u_k^{n+1} é uma aproximação para u^{n+1} na k -ésima iteração e assim para encontrar a próxima aproximação u_{k+1}^{n+1} utiliza-se a mobilidade como $\mathcal{M}(u_k^{n+1})$. Este procedimento se repete até que uma precisão de convergência `tol` seja alcançada para a variável u . Em todas as simulações a tolerância foi fixada em `tol` $< 10^{-8}$.

Em particular, para o método HDG (3.35), a cada passo de Picard, é empregada a técnica de condensação estática e os problemas no nível de elemento (3.13)-(3.14) são condensados em termos dos multiplicadores de Lagrange, gerando um sistema global com graus de liberdade associados apenas aos multiplicadores. Em seguida, o sistema global é resolvido levando à solução aproximada dos multiplicadores, que é conectada aos problemas locais para recuperar a aproximação descontínua das variáveis primais u e w .

3.2 FORMULAÇÃO DE SEGUNDA ORDEM NO TEMPO (SBDF2)

Nessa seção será apresentada a formulação espacial do método HDG em conjunto com uma formulação de segunda ordem no tempo pelo método SBDF2 (Ascher et al., 1995, Keita et al., 2021).

Assim, o esquema totalmente discreto para a formulação HDG descrita para o problema nas equações (3.7)-(3.12) é apresentada para cada nível de tempo $n = 0, 1, 2, \dots, N$ como:

dados w_h^n e u_h^n , achar $\mathbf{X}_h^{n+1} \in \mathbf{V}_h^p$ tais que

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{3u_h^{n+1} - 4u_h^n + u_h^{n-1}}{2\Delta t} v_1 d\mathbf{x} + A_{HDG}(\mathbf{X}_h^{n+1}, \mathbf{Y}_h) = F_{HDG}(\mathbf{Y}_h), \forall \mathbf{Y}_h \in \mathbf{V}_h^p, \quad (3.36)$$

onde a mobilidade $\mathcal{M}(u^{n+1})$, presente nas formas A^K e $A^{\partial K}$ definidas nas equações (3.8) e (3.9), e a derivada do potencial de poço-duplo, presente na forma B^K definida na equação (3.11), são aproximados por

$$\mathcal{M}(u^{n+1}) = 2\mathcal{M}(u^n) - \mathcal{M}(u^{n-1}) \quad (3.37)$$

$$F'(u^{n+1}) = F'(u^n) + F''(u^n)(u^{n+1} - u^n). \quad (3.38)$$

Tais aproximações foram obtidas a partir de um esquema de extrapolação de Richardson para a mobilidade, enquanto a aproximação para a derivada do potencial de poço-duplo é feita por expansão em série de Taylor, conforme detalhado a seguir.

Note que este tipo de discretização está totalmente linearizada em comparação ao esquema descrito anteriormente onde foi utilizada a estratégia de Eyre com o método

semi-implícito, na qual era preciso aplicar um método de resolução do sistema não-linear, tais como o método de Picard ou o método de Newton. Assim, uma das vantagens deste tipo de discretização, além do fato de ser de segunda ordem, é que já não é mais necessário resolver um problema não-linear a cada passo de tempo, resultando em maior desempenho computacional.

Observe ainda que, nessa formulação é preciso determinar uma aproximação para u_h^{n-1} , em particular para o valor u^{-1} quando $n = 0$, para dar partida no método SBDF2. Então, uma aproximação para u^{-1} é dada pela projeção da condição inicial u^0 , isto é, $u^{-1} = \Pi u_0$, de onde encontra-se o valor de u^0 mediante o uso do método semi-implícito de Euler, o qual é dado por:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{u^0 - u^{-1}}{\Delta t} \right) v_1 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (\mathcal{M}(u^{-1})) \nabla w^0 \cdot \nabla v_1 d\mathbf{x} - \mathcal{P} \int_{\Omega} u^0 v_1 d\mathbf{x} &= 0 \\ \int_{\Omega} \epsilon^2 \nabla u^0 \cdot \nabla v_2 d\mathbf{x} + \int_{\Omega} F'(u^{-1}) v_2 d\mathbf{x} - \int_{\Omega} w^0 v_2 d\mathbf{x} &= 0 \end{aligned}$$

para o primeiro passo de tempo.

O tratamento numérico do termo $F'(u^{n+1})$ usa uma expansão em série de Taylor. Considere que $u(t_{n+1}) = u^{n+1}$. Fazendo uso da expansão da série de Taylor de $F'(u(t_{n+1}))$ em torno de $u = u(t_n)$, tem-se que:

$$F'(u(t_{n+1})) = F'(u(t_n)) + (u(t_{n+1}) - u(t_n)) F''(u(t_n)) + \frac{1}{2} (u(t_{n+1}) - u(t_n))^2 F'''(\xi)$$

onde $\xi \in (u(t_n), u(t_{n+1}))$. Logo, considerando o erro de truncamento dado pela expressão:

$$E(q) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} (u(t_{n+1}) - u(t_n))^2 F'''(\xi) q d\mathbf{x}$$

pode-se utilizar novamente a expansão em série de Taylor em torno de $u(t_n)$ para obter a seguinte relação:

$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + \Delta t \partial_t u(\eta(\mathbf{x}))$$

com $\Delta t = u(t_{n+1}) - u(t_n)$ e $\eta(\mathbf{x}) \in (t_n, t_{n+1}), \forall \mathbf{x} \in \Omega$. Assim, pode-se substituir esta aproximação na equação do erro de truncamento e obter a seguinte expressão:

$$E(q) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\Delta t \partial_t u(\eta(\mathbf{x})))^2 F'''(\xi) q d\mathbf{x} = \frac{\Delta t^2}{2} \int_{\Omega} (\partial_t u(\eta(\mathbf{x})))^2 F'''(\xi) q d\mathbf{x},$$

que mostra que a aproximação de $F'(u^{n+1})$ é de segunda ordem de precisão.

Para verificar que a aproximação da mobilidade dada por $\mathcal{M}(u^{n+1}) = 2\mathcal{M}(u^n) - \mathcal{M}(u^{n-1})$ também é de segunda ordem, considere a seguinte expansão:

$$I = \mathcal{M}(\bar{u}) + c_1 \bar{u} + c_2 \bar{u}^2 + c_3 \bar{u}^3 + \dots \quad (3.39)$$

Fazendo uso da extrapolação de Richardson para obter uma aproximação de mais alta ordem da expressão anterior, e considerando que $\bar{u} = \bar{u}/2$, tem-se que:

$$I = \mathcal{M}(\bar{u}/2) + c_1 \bar{u}/2 + c_2 \bar{u}^2/4 + c_3 \bar{u}^3/8 + \dots \quad (3.40)$$

Assim, para se obter uma ordem de aproximação quadrática, o termo \bar{u} é eliminado nas equações (3.39) e (3.40), e assim, multiplicando a equação (3.40) por 2 e subtraindo a equação (3.39), obtém-se que:

$$\begin{aligned} I &= 2\mathcal{M}(\bar{u}) - \mathcal{M}(\bar{u}) - \frac{c_2}{2}\bar{u}^2 \\ &= \mathcal{M}(\bar{u}) - \mathcal{M}(\bar{u}) + \mathcal{O}(\bar{u}^2), \end{aligned}$$

de onde pode-se afirmar que a aproximação $\mathcal{M}(u^{n+1}) = 2\mathcal{M}(u^n) - \mathcal{M}(u^{n-1})$ é de segunda ordem no tempo.

3.3 FORMULAÇÃO PARA O MODELO DE DARCY

Nesta seção será feita uma breve revisão da literatura e discussão sobre formulações mistas estabilizadas e formulações baseadas em métodos híbridos para o problema de Darcy.

3.3.1 Problema de Darcy

Seja o tensor $\mathbb{K} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ simétrico e positivo definido, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ um termo fonte, e $g : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ função definida no contorno. O problema de Darcy é dado por: encontrar o potencial hidráulico $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ e a velocidade de Darcy $\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ tais que

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{u}) = f & \text{em } \Omega, \\ \mathbf{u} = -\mathbb{K}\nabla p & \text{em } \Omega, \\ p = g & \text{sobre } \Gamma, \end{cases} \quad (3.41)$$

onde g é uma função que descreve as condições de contorno de Dirichlet.

3.3.2 Formulação mista dual (\mathcal{MDD})

A seguir a formulação mista dual definida nos espaços $H(\operatorname{div}) \times L_0^2$ para o problema de Darcy (3.41) é apresentada. Para obter essa formulação, multiplica-se a equação (3.41)₍₂₎ por uma função peso $\mathbf{v} \in H(\operatorname{div})$, seguido da integração por partes do termo relacionado à pressão. Assim, integrando em Ω a equação de Darcy (3.41)₍₂₎, tem-se que

$$\int_{\Omega} \mathbb{A}\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{v} dx = 0, \quad (3.42)$$

integrando por partes o segundo termo da equação (3.42), obtém-se

$$\int_{\Omega} \mathbb{A}\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} dx - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\mathbf{v}) dx + \int_{\partial\Omega} p(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) ds = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in H(\operatorname{div}), \quad (3.43)$$

onde $\mathbb{A} = \mathbb{K}^{-1}$. O próximo passo consiste em multiplicar a equação do balanço de massa (3.41)₍₁₎ por uma função $q \in L_0^2(\Omega)$ e integrar em Ω , resultando na seguinte expressão

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u})q dx = \int_{\Omega} f q dx, \quad (3.44)$$

Finalmente, substituindo a condição de contorno da equação de Darcy (3.41)₍₃₎ na equação (3.43) e multiplicando por -1 a equação (3.44) para se ter um sistema simétrico, pode-se escrever o seguinte problema misto dual:

Encontrar o par $[\mathbf{u}, p] \in H(\text{div}) \times L_0^2(\Omega)$ tal que $\forall [\mathbf{v}, q] \in H(\text{div}) \times L_0^2(\Omega)$, tem-se:

$$\begin{cases} \mathcal{A}_{MDD}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \mathcal{B}_{MDD}(\mathbf{v}, p) = \mathcal{C}_{MDD}(\mathbf{v}), \\ \mathcal{B}_{MDD}(\mathbf{u}, q) = f(q), \end{cases} \quad (3.45)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{MDD}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \int_{\Omega} \mathbb{A} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} dx, \\ \mathcal{B}_{MDD}(\mathbf{v}, p) &= - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\mathbf{v}) dx, \\ \mathcal{C}_{MDD}(\mathbf{v}) &= - \int_{\partial\Omega} g(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) ds, \\ f(q) &= - \int_{\Omega} f q dx. \end{aligned}$$

Por se tratar de uma formulação mista o sistema de equações definido em (3.45) exige que certas condições de compatibilidade entre os espaços de aproximação para velocidade e pressão (Boffi et al., 2013, Brezzi, 1974) sejam satisfeitas. Espaços de aproximações de Raviart e Thomas (1977) e Brezzi et al. (1985) para a formulação MDD serão apresentados assim como formulações estabilizadas que incluem termos de mínimos quadrados como introduzido por Correa e Loula (2008) e Nunez et al. (2012).

3.3.3 Formulações mistas híbridas

As formulações híbridas consistem na resolução de um problema global em Ω construído a partir de problemas locais descontínuos definidos em cada elemento $K \in \mathcal{T}_h$. A correspondência entre o problema global e os problemas locais é feita através de multiplicadores de Lagrange, que são definidos nas arestas e dos elementos K , de forma a impor fracamente as condições de continuidade na interface dos elementos.

Diferentes formas de introduzir os multiplicadores podem ser utilizadas. Raviart e Thomas (1977) propuseram um multiplicador definido pelo fluxo normal. O multiplicador também pode ser identificado como o traço da variável de interesse, isto é, o valor da variável nas interfaces entre os elementos da malha. Através da técnica de *condensação estática* um sistema de equações global que envolve somente os graus de liberdade dos multiplicadores de Lagrange pode ser formado pela eliminação das variáveis de interesse a nível de elemento.

Quando comparados com os métodos Galerkin descontínuos, uma das vantagens dos métodos híbridos é a redução do custo computacional para obtenção da solução numérica, devido à redução do tamanho do problema global a ser resolvido (Igreja, 2015). Essa redução acontece devido à escolha dos multiplicadores e o emprego da condensação estática,

que reduz o número de graus de liberdade e, conseqüentemente, o custo computacional associado à solução do sistema linear. Entretanto, essa abordagem demanda a solução de problemas locais como uma de suas etapas e, em geral, o custo de resolução desses problemas é baixo e pode ser compensado pelo ganho na resolução do problema global.

Além disso, devido às características descontínuas desta metodologia, os problemas locais permitem o uso de técnicas de paralelização que podem aumentar a eficiência computacional, principalmente em problemas que utilizam aproximações de alta ordem Fabien et al. (2019).

Para apresentar uma aproximação para o problema misto dual (3.45), que é definido em cada elemento $K \in \mathcal{T}_h$, com $[\mathbf{u}_h, p_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l$ onde

$$\int_K \mathbb{A} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h dx - \int_K p_h \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) dx + \int_{\partial K} p_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds = 0, \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathcal{U}_h \quad (3.46)$$

$$- \int_K \operatorname{div}(\mathbf{u}_h) q_h dx = - \int_K f q_h dx, \quad \forall q_h \in \mathcal{P}_h, \quad (3.47)$$

note que $[\mathbf{u}_h, p_h]$ e $[\mathbf{v}_h, q_h]$ estão restritos ao elemento K e \mathbf{n}_K é o vetor normal ao contorno ∂K do elemento K .

Os espaços \mathcal{U}_h^k e \mathcal{P}_h^l devem ser escolhidos de forma a satisfazer à condição de compatibilidade para os método mistos. A pressão que é definida nas arestas do contorno ∂K satisfaz as condições de contorno (3.41)₍₃₎, isto é, $p_h|_e = g$, $\forall e \in \partial K \cap \mathcal{E}_h^\partial$, e ainda, a pressão calculada nas arestas interiores ($p_h|_e$, $\forall e \in \partial K \cap \mathcal{E}_h^0$) é uma incógnita a ser determinada.

Neste contexto, inserindo uma nova variável ao sistema (3.47), o multiplicador de Lagrange $\lambda = p|_e$, $\forall e \in \mathcal{E}_h$, definido no espaço

$$\mathcal{L}_h^m = \left\{ \mu_h \in L^2(\mathcal{E}_h), \mu_h|_e = p_m(e), \forall e \in \mathcal{E}_h^0, \mu_h|_e = g, \forall e \in \mathcal{E}_h^\partial \right\}, \quad (3.48)$$

onde $p_m(e)$ representa os polinômios de grau menor ou igual a m sobre cada aresta e . Seja o espaço $\tilde{\mathcal{L}}_h^m$ definido como

$$\tilde{\mathcal{L}}_h^m = \left\{ \mu_h \in L^2(\mathcal{E}_h), \mu_h|_e = p_m(e), \forall e \in \mathcal{E}_h^0, \mu_h|_e = 0, \forall e \in \mathcal{E}_h^\partial \right\}, \quad (3.49)$$

e considere ainda os seguintes espaços

$$\mathcal{U}_h^k = \left\{ \mathbf{u}_h \in [L^2(K)]^2 : \mathbf{u}_h|_K \in [\mathbb{S}_k(K)]^2, \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (3.50)$$

$$\mathcal{P}_h^l = \left\{ p_h \in L^2(K) : p_h|_K \in \mathbb{S}_l(K), \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (3.51)$$

onde \mathbb{S} representa elementos quadrilaterais ou triangulares.

Desta forma, o seguinte problema, que é obtido através da soma sobre todos os elementos K que formam a malha \mathcal{T}_h , é apresentado: encontrar o par $[\mathbf{u}_h, p_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l$ e

o multiplicador de Lagrange $\lambda_h \in \mathcal{L}_h^m$, tal que $\forall[\mathbf{v}_h, q_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l$ e $\forall\mu_h \in \tilde{\mathcal{L}}_h^m$, tem-se:

$$\begin{cases} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[\int_K \mathbb{A} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h d\mathbf{x} - \int_K p_h \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) d\mathbf{x} + \int_{\partial K} \lambda_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds \right] = 0, \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[- \int_K \operatorname{div}(\mathbf{u}_h) q_h d\mathbf{x} + \int_K f q_h \right] = 0, \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[\int_{\partial K} \mu_h (\mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds \right] = 0 \end{cases} \quad (3.52)$$

No sistema acima o papel da terceira equação definida em (3.52) é impor fracamente a conservação local de massa entre os elementos forçando a continuidade da componente normal da velocidade.

É importante ressaltar que, assim como o método misto dual (3.45), o método híbrido (3.52) necessita cumprir as condições de compatibilidade entre os espaços de aproximação. Uma alternativa para superar esta condição foi proposta e analisada por Cockburn et al. (2009) adotando com $k = l = m$, onde um termo de estabilização relacionado ao multiplicador de Lagrange definido nas arestas dos elementos é incluído ao sistema (3.52) originando o seguinte problema: Encontrar o par $[\mathbf{u}_h, p_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l$ e o multiplicador de Lagrange $\lambda_h \in \mathcal{L}_h^m$, tal que $\forall[\mathbf{v}_h, q_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l$ e $\forall\mu_h \in \tilde{\mathcal{L}}_h^m$, tem-se:

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[\int_K \mathbb{A} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h d\mathbf{x} - \int_K p_h \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) d\mathbf{x} + \int_{\partial K} \lambda_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds \right] = 0, \quad (3.53)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[- \int_K \operatorname{div}(\mathbf{u}_h) q_h d\mathbf{x} - \int_{\partial K} (\lambda_h - p_h) q_h ds + \int_K f q_h \right] = 0, \quad (3.54)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[\int_{\partial K} \mu_h (\mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds + \int_{\partial K} (\lambda_h - p_h) \mu_h ds \right] = 0, \quad (3.55)$$

Contudo vale ressaltar que esta abordagem afeta a conservação local do método devido ao termo de estabilização adicionado à equação (3.55). Assim, nesse contexto pode-se considerar duas formulações híbridas para o problema de Darcy (3.41) em termos de métodos híbridos mistos que sejam localmente conservativos.

Uma delas, adota espaços de Raviart-Thomas como funções base da formulação híbrida mista dual (3.52), que tem como vantagem a imposição fraca da continuidade da componente normal da velocidade pela introdução do multiplicador para cumprir a propriedade de conservação local e relaxar as restrições dos espaços de Raviart-Thomas (Quinelato, 2017, Zhang et al., 2017). A outra formulação, adota um esquema de estabilizações de mínimos quadrados, como proposto por Correa e Loula (2008), para gerar um método misto híbrido dual introduzido por Nunez et al. (2012), que é localmente conservativo e estável para diversos espaços de aproximações.

3.3.4 Formulação mista estável hibridizada (\mathcal{MHE})

Nesta seção uma forma estável para a formulação mista híbrida dual (3.52) utilizando os espaços de Raviart e Thomas (1977) (\mathcal{RT}) e/ou Brezzi et al. (1985) (\mathcal{BDM}) é apresentada (Paula, 2018). Porém a restrição de $\mathbf{u}_h \in H(\text{div})$ é relaxada e imposta fracamente através da última equação da formulação mista híbrida dual (3.52).

A formulação variacional mista híbrida para o problema de Darcy (\mathcal{MHE}) consiste em: encontrar $(u_h, p_h, \lambda_h) \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l \times \mathcal{L}_h^m$ tal que

$$\begin{cases} a_K^{MHE}([\mathbf{u}_h, p_h]; [\mathbf{v}_h, q_h]) + b_K^{MHE}(\lambda_h, \mathbf{v}_h) = f_K^{MHE}(q_h), & \forall [\mathbf{v}_h, q_h] \in \mathcal{U}_h^k \times \mathcal{P}_h^l, \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} b_K^{MHE}(\mu_h, \mathbf{u}_h) = 0, & \forall \mu_h \in \tilde{\mathcal{L}}_h^m, \end{cases} \quad (3.56)$$

com

$$a_K^{MHE}([\mathbf{u}_h, p_h]; [\mathbf{v}_h, q_h]) = \int_K \mathbb{A} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h d\mathbf{x} - \int_K p_h \text{div}(\mathbf{v}_h) d\mathbf{x} - \int_K q_h \text{div}(\mathbf{u}_h) d\mathbf{x} \quad (3.57)$$

$$b_K^{MHE}(\lambda_h, \mathbf{v}_h) = \int_{\partial K} \lambda_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}_K) ds \quad (3.58)$$

$$f_K^{MHE}(q_h) = - \int_K f q_h d\mathbf{x} \quad (3.59)$$

onde \mathcal{L}_h e $\tilde{\mathcal{L}}_h$ são os espaços de elementos definidos nas equações (3.48) e (3.49), respectivamente. E ainda, \mathcal{U}_h e \mathcal{P}_h são espaços de elementos finitos definidos como:

$$\mathcal{U}_h = \left\{ \mathbf{u}_h \in [L^2(K)]^2 : \mathbf{u}_h|_K \in \mathbb{S}_{k,k-1}(\hat{K}) \times \mathbb{S}_{k-1,k}(\hat{K}), \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (3.60)$$

$$\mathcal{P}_h = L^2(\Omega), \quad (3.61)$$

onde $\mathbb{S}_{i,j}(K)$ denota o espaço das funções polinomiais de grau menor ou igual à i para primeira componente da variável e menor ou igual à j para segunda componente da variável e \hat{K} é o elemento de referência.

O problema misto definido pela formulação \mathcal{MHE} composto por (3.56)₍₁₎ (problemas locais) e (3.56)₍₂₎ (problema global), possibilita a utilização da técnica de condensação estática uma vez que o uso de funções de interpolação de Raviart-Thomas e/ou \mathcal{BDM} garante a estabilidade. Essa estratégia é vantajosa pois reduz de forma significativa o custo da resolução do problema já que a variável global é um escalar associado ao campo de pressão nas areastas dos elementos e também evita as dificuldades numéricas de se resolver um sistema com matriz indefinida (Benzi et al., 2005), a qual seria originada pela formulação clássica (3.45).

3.3.5 Formulação mista estabilizada hibridizada (\mathcal{SDHM})

A aproximação obtida pela formulação \mathcal{MHE} para para (u_h, p_h) está definida em $H(\text{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$ e para obter aproximações em espaços menos restritivos pode-se adotar esquemas de estabilização como o método de elementos finitos mistos híbridos \mathcal{SDHM}

(Stabilized Dual Hybrid Method) proposto por Nunez et al. (2012). Este método mantém a propriedade de conservação local, porém com uma flexibilidade na escolha de espaços de aproximação e, além disso, ainda possibilita o tratamento de descontinuidades na solução que podem surgir em problemas com meios heterogêneos, uma vez que os métodos híbridos herdam propriedades dos métodos de Galerkin descontínuo. No método $SDHM$ os termos de estabilização utilizados são os mesmos das estabilizações baseadas em resíduos de mínimos quadrados da formulação $CGLS$ (Correa e Loula, 2008).

Assim, escolhendo os espaços de elementos finitos $\tilde{\mathcal{U}}_h^k$ e $\tilde{\mathcal{P}}_h^l$ definidos como

$$\tilde{\mathcal{U}}_h^k \subset \tilde{\mathcal{U}} = \{u \in [L^2(\Omega)]^2 : u|_K \in H(\text{div}, K) \cap H(\text{rot}, K), \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \quad (3.62)$$

$$\tilde{\mathcal{P}}_h^l \subset \tilde{\mathcal{P}} = \{p \in L^2(\Omega) : p|_K \in H^1(K), \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}. \quad (3.63)$$

obtem-se a formulação $SDHM$ dada por: encontrar o par $[\mathbf{u}_h, p_h] \in \tilde{\mathcal{U}}_h^k \times \tilde{\mathcal{P}}_h^l$ e o multiplicador $\lambda_h \in \tilde{\mathcal{L}}_h^m$, tais que $\forall [\mathbf{v}_h, q_h] \in \tilde{\mathcal{U}}_h^k \times \tilde{\mathcal{P}}_h^l$ e $\forall \mu_h \in \tilde{\mathcal{L}}_h^m$, se tem

$$\begin{cases} a_K^{SDHM}([\mathbf{u}_h, p_h]; [\mathbf{v}_h, q_h]) + b_K^{SDHM}(\lambda_h, \mathbf{v}_h) = f_K^{SDHM}(q_h), \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} b_K^{SDHM}(\mu_h, \mathbf{u}_h) = 0, \end{cases} \quad (3.64)$$

com

$$a_K^{SDHM}([\mathbf{u}_h, p_h]; [\mathbf{v}_h, q_h]) = a_K^{MHE}([\mathbf{u}_h, p_h]; [\mathbf{v}_h, q_h]) \quad (3.65)$$

$$+ \delta_1 \int_K \mathbb{K}(\mathbb{A}\mathbf{u}_h + \nabla p_h) \cdot (\mathbb{A}\mathbf{v}_h + \nabla q_h) dx \quad (3.66)$$

$$+ \delta_2 \int_K \alpha \text{div}(\mathbf{u}_h) \text{div}(\mathbf{v}_h) dx \quad (3.67)$$

$$+ \delta_3 \int_K \alpha^{-1} \text{rot}(\mathbb{A}\mathbf{u}_h) \text{rot}(\mathbb{A}\mathbf{v}_h) dx \quad (3.68)$$

$$b_K^{SDHM}(\lambda_h, \mathbf{v}_h) = b_K^{MHE}(\lambda_h, \mathbf{v}_h) \quad (3.69)$$

$$f_K^{SDHM}(q_h) = f_K^{MHE}(q_h) + \delta_2 \int_K \alpha f \text{div}(\mathbf{v}_h) dx \quad (3.70)$$

onde $\alpha = \|\mathbb{K}\|_\infty$ e $\mathbb{A} = \mathbb{K}^{-1}$. Vale ressaltar que o problema $SDHM$ (3.64) é diferente do MHE (3.56) devido à inclusão dos termos de resíduos de mínimos quadrados associados às equações de Darcy e seu rotacional, assim como da equação da conservação da massa. A inclusão destes resíduos garante estabilidade no nível de elemento, possibilitando o uso da técnica de condensação estática para a resolução do problema.

3.3.6 Estratégia de resolução dos métodos híbridos

Nesta subseção apresenta-se brevemente a aplicação da técnica de condensação estática para as formulações mistas híbridas MHE e $SDHM$. Considere a matriz \mathbf{A}_K gerada pelas formas a_K^{SDHM} ou a_K^{MHE} , respectivamente. Análogamente, considera-se a matriz \mathbf{b}_K geradas por b_K^{SDHM} ou b_K^{MHE} , respectivamente e o vetor \mathbf{F}_K gerados pelos vetores f_K^{SDHM} ou f_K^{MHE} , respectivamente.

Assim, pode-se reescrever os problemas locais e globais para as formulações \mathcal{SDHM} e \mathcal{MHE} matricialmente como

$$\begin{cases} \mathbf{A}_K \mathbf{U} + \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{F}_K, & \forall K \in \mathcal{T}_h, \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{U} = 0. \end{cases} \quad (3.71)$$

Dado que \mathbf{A}_K é positiva definida, isto é, inversível, pode-se isolar o vetor \mathbf{U} , formado pelas variáveis (\mathbf{u}_h, p_h) , na equação (3.71)₍₁₎, obtendo-se:

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}_K^{-1}(\mathbf{F}_K - \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda}), \quad \forall K \in \mathcal{T}_h. \quad (3.72)$$

Substituindo a relação (3.72) em (3.71)₍₂₎, o sistema global em função do multiplicador é obtido como:

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{A}_K^{-1} \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{A}_K^{-1} \mathbf{F}_K. \quad (3.73)$$

Com a resolução do sistema global (3.73), o vetor \mathbf{U} é obtido para cada elemento K a partir da equação (3.72).

4 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS UTILIZANDO O MÉTODO HÍBRIDO ESTABILIZADO

Nesta seção, experimentos numéricos que foram realizados com o método híbrido estabilizado proposto (HDG) são apresentados. Também foram realizadas simulações com as formulações CG e DG para comparar a precisão e o desempenho dos métodos. Todos os cálculos e resultados apresentados abaixo são apresentados em Medina et al. (2021) e foram realizados com software escrito na biblioteca de elementos finitos `FreeFem++` (Hecht, 2012).

4.1 EXPERIMENTOS COMPUTACIONAIS

4.1.1 Estudo de Convergência

Inicialmente, um caso particular da equação de Cahn-Hilliard com uma solução manufaturada conhecida foi resolvido para se avaliar as taxas de convergência dos métodos considerados neste trabalho. O problema estudado é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta w + g, \quad w = F'(u) - \epsilon^2 \Delta u, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (4.1)$$

onde $\epsilon = 0.01$ e $\Omega = [-2, 0; 6, 0]$. A solução exata manufaturada é dada por:

$$\begin{aligned} u(x, t) &= 0,5 - 0,5 \tanh(\xi), \\ w(x, t) &= \left(a^2 \epsilon^2 \tanh^2(\xi) - a^2 \epsilon^2 - 0,0225 \tanh^2(\xi) + 0,0225 \right) \tanh(\xi), \end{aligned}$$

com o seguinte termo fonte:

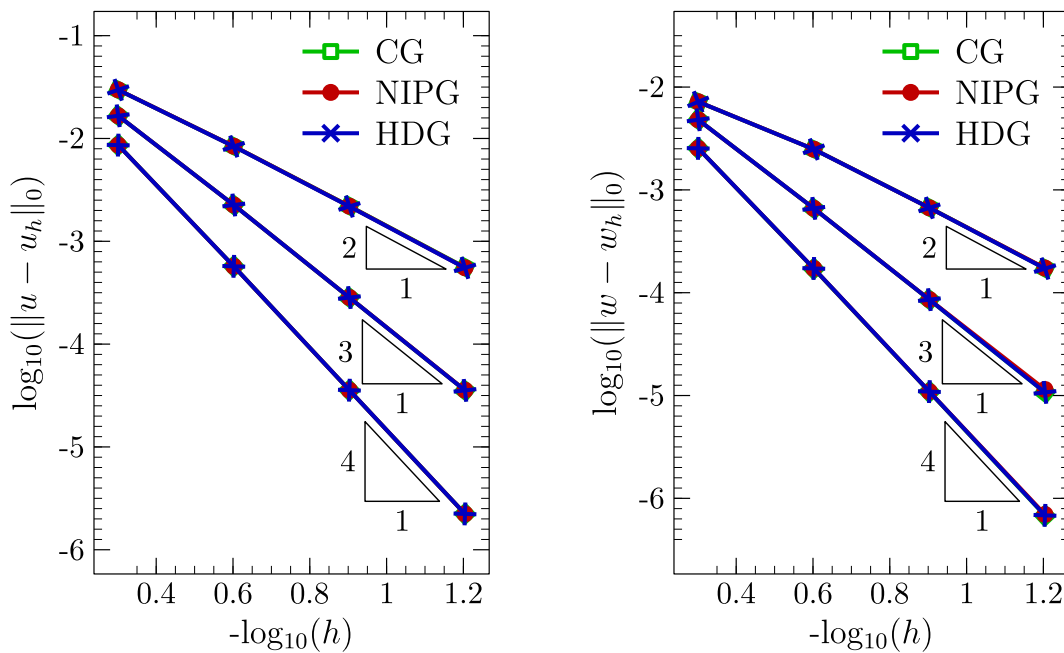
$$\begin{aligned} g &= -12a^4 \epsilon^2 \tanh(\xi)^5 + 20a^4 \epsilon^2 \tanh(\xi)^3 - 8a^4 \epsilon^2 \tanh(\xi) + 0,27a^2 \tanh(\xi)^5 \\ &\quad - 0,45a^2 \tanh(\xi)^3 + 0,18a^2 \tanh(\xi) - 0,5b \tanh(\xi)^2 + 0,5b. \end{aligned}$$

O potencial de poço-duplo foi definido como $F(u) = Eu^2(1-u)^2$, onde $E = 0,045$. A solução exata foi usada como condição inicial, e as condições de contorno de fluxo nulo, isto é, de Neumann homogênea foram impostas para u e w . O modelo foi resolvido para o tempo de simulação $T = 0,25$. O estudo de convergência foi realizado empregando diferentes ordens polinomiais $p = \{1, 2, 3\}$ com a seguinte sequência de tamanhos de elementos $h = \{1/16, 1/32, 1/64, 1/128\}$. Para qualquer grau polinomial, o tamanho de passo de tempo foi adotado por $\Delta t = h^{p+1}$. Para o método HDG, os seguintes parâmetros de estabilização foram utilizadas $\beta_{01} = \beta_{02} = 10$, enquanto que para o método NIPG os seguintes parâmetros $\gamma = \{10, 100, 1000\}$ foram usados.

A Tabela 1 e a Figura 8 apresentam os erros e as taxas de convergência estimadas para os métodos CG, HDG e NIPG usando diferentes ordens polinomiais para o problema com uma solução exata manufaturada. Pode-se observar que as taxas de convergência esperadas são obtidas pelos métodos explorados neste estudo.

Tabela 1 – Estudo de convergência para os métodos CG, HDG e NIPG.

método	p	n_{elem}	CG				HDG				NIPG			
			$\ u_e - u\ _{L^2}$	taxa	$\ w_e - w\ _{L^2}$	taxa	$\ u_e - u\ _{L^2}$	taxa	$\ w_e - w\ _{L^2}$	taxa	$\ u_e - u\ _{L^2}$	taxa	$\ w_e - w\ _{L^2}$	taxa
1	16		2.9691e-02	-	7.1860e-03	-	2.9694e-02	-	7.1845e-03	-	2.9748e-02	-	7.1935e-03	-
	32		8.4011e-03	1.82	2.4859e-03	1.53	8.3671e-03	1.83	2.4820e-03	1.53	8.4057e-03	1.82	2.4870e-03	1.53
	64		2.2016e-03	1.93	6.7130e-04	1.89	2.1810e-03	1.94	6.6880e-04	1.89	2.1948e-03	1.94	6.6907e-04	1.89
	128		5.5823e-04	1.98	1.7253e-04	1.96	5.5106e-04	1.98	1.7155e-04	1.96	5.5303e-04	1.99	1.7372e-04	1.95
2	16		1.6621e-02	-	4.8164e-03	-	1.6619e-02	-	4.8092e-03	-	1.6632e-02	-	4.8096e-03	-
	32		2.2548e-03	2.88	6.6044e-04	2.87	2.2540e-03	2.88	6.6117e-04	2.86	2.2561e-03	2.88	6.6138e-04	2.86
	64		2.8371e-04	2.99	8.5581e-05	2.95	2.8362e-04	2.99	8.5602e-05	2.95	2.8409e-04	2.99	8.5873e-05	2.95
	128		3.5474e-05	3.00	1.0725e-05	3.00	3.5474e-05	3.00	1.0726e-05	3.00	3.5646e-05	2.99	1.1450e-05	2.91
3	16		8.6334e-03	-	2.5390e-03	-	8.6213e-03	-	2.5349e-03	-	8.6214e-03	-	2.5349e-03	-
	32		5.7127e-04	3.92	1.7098e-04	3.89	5.7082e-04	3.92	1.7211e-04	3.88	5.7080e-04	3.92	1.7212e-04	3.88
	64		3.5649e-05	4.00	1.0864e-05	3.98	3.5647e-05	4.00	1.0917e-05	3.98	3.5648e-05	4.00	1.0919e-05	3.98
	128		2.2309e-06	4.00	6.7942e-07	4.00	2.2312e-06	4.00	6.8322e-07	4.00	2.2313e-06	4.00	6.9720e-07	3.97

Figura 8 – Estudo de convergência para variáveis u (esquerda) e w (direita) com uma solução manufaturada usando os métodos CG, HDG e NIPG para diferentes graus polinomiais $p = \{1, 2, 3\}$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Em seguida, as demandas computacionais de cada método (CG, HDG e NIPG) em termos do número de graus de liberdades foram avaliadas. Para este fim, analisamos o problema (2.15)-(2.19) em um domínio bidimensional representado por um quadrado unitário, discretizado com elementos triangulares. A comparação foi realizada em termos dos graus totais de liberdade (DOFs, do inglês *degrees of freedom*). Para o método HDG, a contagem de DOFs foi realizada considerando o procedimento de condensação estática. A Tabela 2 mostra o número de elementos e o número de DOFs de cada sistema global (CG, HDG e NIPG) correspondente a quatro refinamentos de malha com diferentes ordens polinomiais. A tabela mostra que o número de DOFs para o método CG é menor do que

os métodos descontínuos como NIPG e HDG em todos os casos. Entretanto, ao comparar as técnicas descontínuas, notamos que o HDG resulta em um menor número de DOFs do que o método NIPG para polinômios de ordem mais alta. Também é importante enfatizar que o método NIPG gera um sistema não simétrico de equações que inviabiliza o uso de métodos iterativos eficientes para sua solução.

Tabela 2 – Comparação do número de DOFs do sistema global para aproximar o problema (2.15)-(2.19) usando formulações CG, HDG e NIPG. Para elementos triangulares, são consideradas as aproximações lineares, quadráticas e cúbicas.

ordem malha	linear			quadrático			cúbico		
	CG	NIPG	HDG	CG	NIPG	HDG	CG	NIPG	HDG
16×16	578	3072	3200	2178	6144	4800	4802	10240	6400
32×32	2178	12288	12544	8450	24576	18816	18818	40960	25088
64×64	8450	49152	49664	33282	98304	74496	74498	163840	99328
128×128	33282	196608	197632	132098	393216	296448	296450	655360	395264

Nas próximas seções, será mostrado que o método HDG, comparado com os métodos CG e NIPG, alcança melhores resultados em termos de precisão da solução numérica evitando oscilações espúrias usando os mesmos níveis de refinamento no espaço e tempo.

4.1.2 Estudo dos parâmetros de Estabilização do método HDG

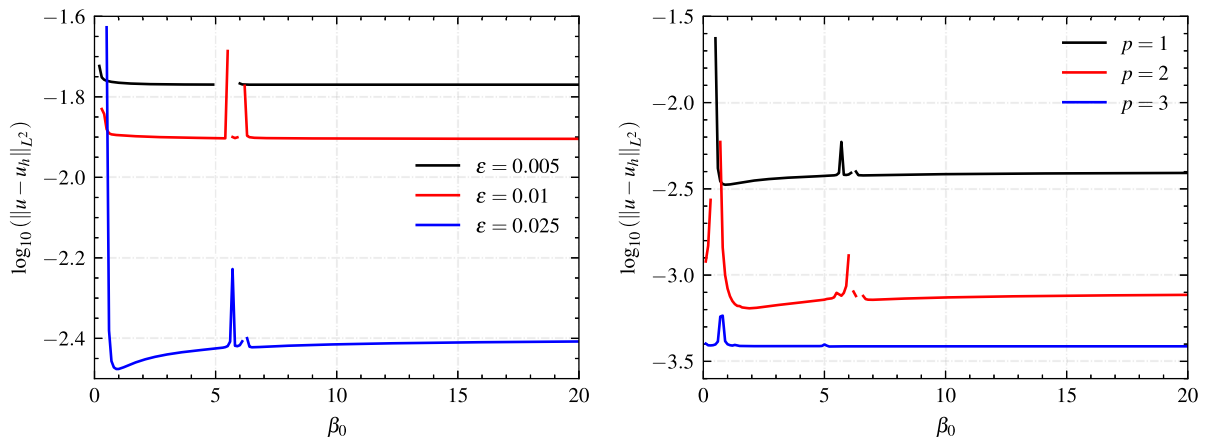
A escolha dos parâmetros de estabilização β_{01} e β_{02} do método HDG proposto em relação à estabilidade e precisão da solução foi analisada. Para tanto, o problema CH anterior com uma solução manufaturada dada pela equação (4.1) foi considerado para as simulações.

Para simplificar a escolha dos parâmetros propõe-se utilizar um único valor β_0 para ambos os parâmetros, ou seja, define-se $\beta_{01} = \beta_{02} = \beta_0$. Dessa forma a etapa de escolha dos parâmetros é simplificada e, além disso, tal escolha é motivada pela forma como a espessura da interface difusa ϵ afeta β_1 e β_2 definidos em (3.12). O valor de β_{02} afeta de forma menos significativa o segundo parâmetro de estabilização do que o termo ϵ^2 . É importante ressaltar que o estudo de convergência anterior foi realizado com esta escolha e obteve taxas de convergência ótimas.

Seguindo esse raciocínio, foi realizado um experimento computacional variando o valor de β_0 e avaliando sua influência nos erros numéricos para o problema com a solução manufaturada descrito pela equação (4.1). A Figura 9 apresenta os erros para diferentes valores do parâmetro de estabilização $\beta_0 > 0$, com uma malha de 64 elementos e um passo de tempo $\Delta t = h^{p+1}$, considerando três casos para as espessuras de interface ϵ (painel esquerdo) e para diferentes ordens polinomiais (painel direito). Pode-se notar que valores menores de β_0 próximos de zero resultam em erros maiores. Para valores suficientemente grandes, como $\beta_0 \geq 10$, a precisão é mantida para todas as ordens polinomiais. Os resultados são mostrados apenas para a variável u , mas tendências semelhantes foram

observadas para o potencial químico w . Com base neste estudo que explorou os efeitos do parâmetro de estabilização β_0 na precisão e estabilidade, em todos os estudos posteriores apresentados neste trabalho escolhas que satisfazem a $\beta_0 \geq 1$ foram consideradas.

Figura 9 – Efeitos do parâmetro β_0 no erro numérico para u numa malha de 64 elementos. A esquerda: erros numéricos para diferentes valores de ϵ e ordem de aproximação polinomial fixado $p = 1$. A direita: erros numéricos para diferentes ordens polinomiais e $\epsilon = 0,025$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.3 Equação de Cahn-Hilliard

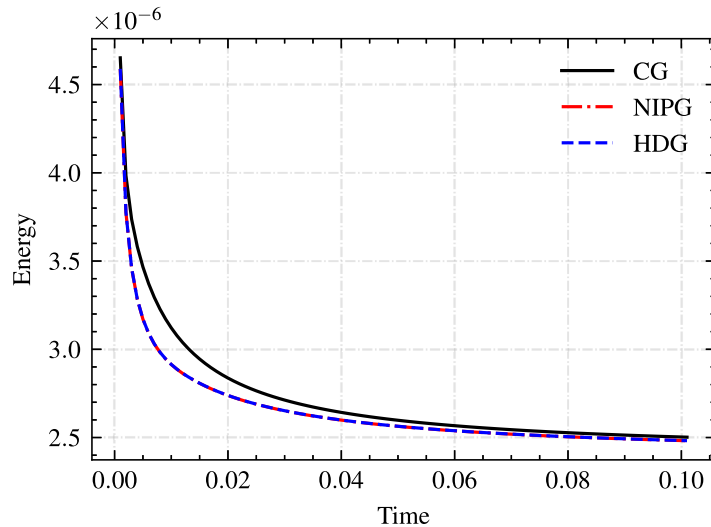
A equação clássica CH (2.15)-(2.19), com $\mathcal{P} = 0$, foi resolvida num domínio unidimensional $\Omega = (0, 2)$, considerando $\epsilon = 0,025$. Estas simulações foram realizadas para observar o conhecido decaimento da energia livre da equação CH até $T = 0,1$ utilizando um passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$ e 1024 elementos. Os seguintes parâmetros de estabilização foram usados: $\beta_{01} = \beta_{02} = 1,0$ para o método HDG, e $\gamma_2^w = \gamma_2^u = 10$ para o método NIPG.

A Figura 10 apresenta o decaimento da energia livre obtida quando a solução numérica foi realizada utilizando o CG, o NIPG ou o método HDG. Os resultados mostram que todos os métodos, que se basearam na separação de Eyre da densidade de energia livre para a integração do tempo, capturaram adequadamente o decaimento da energia livre. Pode-se notar também que os métodos HDG e NIPG têm uma dinâmica ligeiramente acelerada quando comparados com a formulação do CG.

4.1.4 Equação de Cahn-Hilliard com termo reativo

Em seguida, a equação CH (2.15)- (2.19) com a inclusão de um termo de reação descrito por $\mathcal{P} = 1$ foi resolvida numericamente. Para este caso, um domínio unidimensional $\Omega = (0, 2)$ com uma interface difusa caracterizado por $\epsilon = \{0,025; 0,005\}$ foi considerado. As simulações foram realizadas até $T = 1,0$ usando um passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$. Para

Figura 10 – Decaimento da energia livre do problema (2.15)-(2.19) com $\mathcal{P} = 0$ para os métodos CG, NIPG e HDG.



Fonte: Elaborado pelo autor.

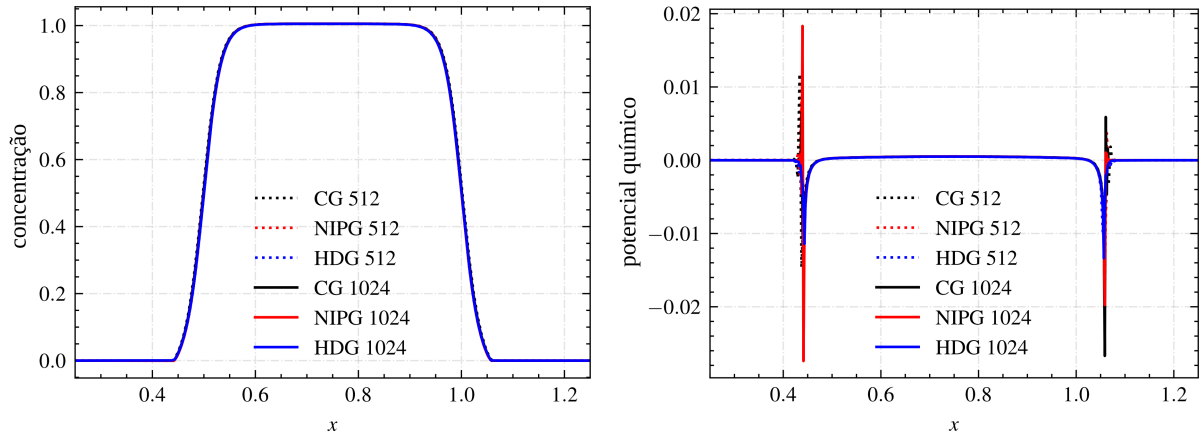
a solução numérica usando o método NIPG, os seguintes parâmetros de estabilização $\gamma_2^w = \gamma_2^u = 10$ foram usados, enquanto para HDG a escolha $\beta_{01} = \beta_{02} = 1, 0$ foi adotada.

Para estes casos foi considerado que $F(u) = Eu^2(1-u)^2$ e a seguinte decomposição $F(u) = F_+(u) - F_-(u)$, onde $F_+(u) = \frac{3}{2}Eu^2$ e $F_-(u) = -E(u^4 - 2u^3 - 0,5u^2)$, com $E = \frac{0,18}{4}$. A condição inicial é dada por:

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } 0,5 \leq x \leq 1,0 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

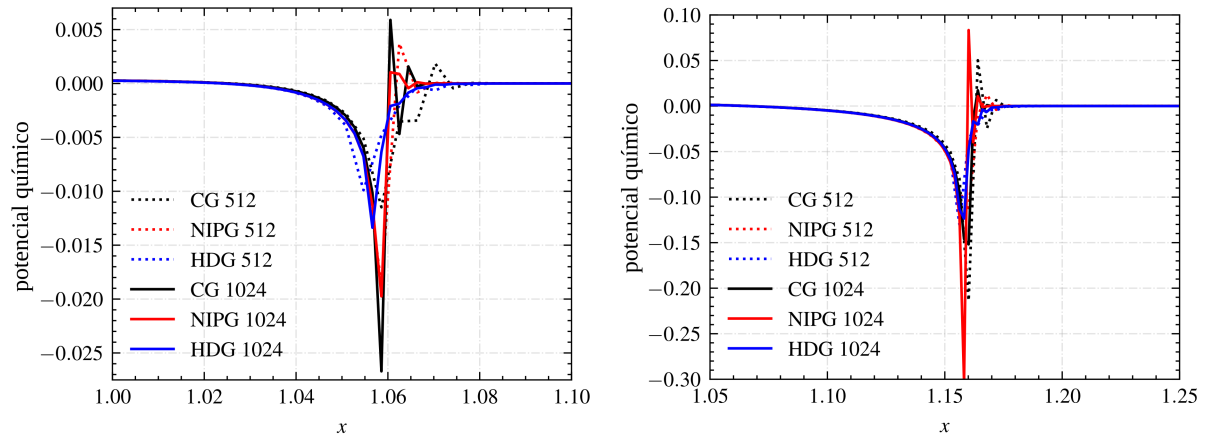
Na Figura 11 os resultados dos métodos em termos de concentração u e potencial químico w são apresentados. Nota-se uma boa concordância em geral na solução para u e w entre a resposta obtida pelos diferentes métodos. Porém, nota-se um comportamento oscilatório no potencial químico para a solução obtida com os métodos CG e NIPG, que é atenuado à medida que a malha é refinada. Uma inspeção detalhada do potencial químico para os métodos CG, NIPG e HDG considerando a solução obtida com 512 e 1024 elementos é apresentada na Figura 12 para $\epsilon = 0,005$ (esquerda) e $\epsilon = 0,025$ (direita). Pode-se observar que, em ambos os casos, os métodos CG e NIPG apresentaram oscilações, enquanto a solução do HDG é suave mesmo com uma discretização mais grosseira.

Figura 11 – Perfis de concentração (lado esquerdo) e potencial químico (lado direito) para o problema CH (2.15)-(2.19) no tempo $t = 1$. As soluções foram obtidas usando os métodos CG, NIPG e HDG com 512 e 1024 elementos e tamanho de passo de tempo $\Delta t = 0,001$, e considerando uma espessura de interface $\epsilon = 0,005$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 12 – Comparação dos métodos CG, NIPG e HDG para aproximar o problema (2.15)-(2.19) no tempo $t = 1$. Os seguintes valores da interface foram utilizadas: (lado esquerdo) $\epsilon = 0,005$ e (lado direito) $\epsilon = 0,025$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

4.1.5 Modelo do crescimento tumoral avascular

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos para as simulações do modelo de crescimento tumoral avascular dado pelas equações (2.20)-(2.28). A discretização utilizou um total de 1024 e 2048 elementos lineares e os seguintes parâmetros de estabilização para o método HDG foram utilizados: $\beta_{01} = \beta_{02} = 1,0$; enquanto que para o método NIPG os seguintes valores para os parâmetros foram adotados: $\gamma_2^w = \gamma_2^u = 10$. A seguinte

configuração foi usada para as simulações numéricas:

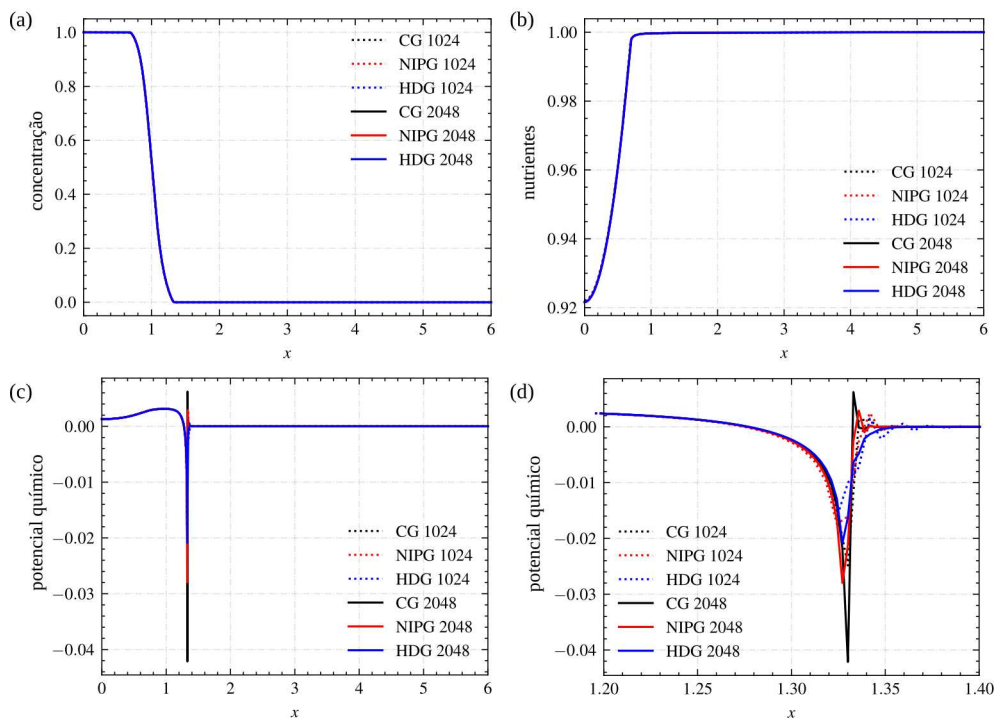
$$R = 6, D = 1000, \chi_\sigma = 0, \Delta t = 1e - 2, T = 1,$$

onde R representa o tamanho do domínio, e com a seguinte condição inicial:

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A Figura 13 apresenta os resultados da solução numérica do modelo de crescimento tumoral utilizando $\epsilon = 0,025$ para a espessura da interface difusiva. As soluções numéricas foram obtidas com os métodos CG, HDG, e NIPG com 1024 e 2048 elementos para fins de comparação. Os perfis da concentração tumoral u , potencial químico w e concentração de nutrientes σ no instante de tempo $t = 1.0$ são apresentados nos painéis (a), (b) e (c), respectivamente. Uma visão detalhada do perfil do potencial químico é mostrada no painel (d), onde fica evidente que a solução numérica obtida pelo HDG com elementos 2048 superou os demais métodos e discretizações que apresentaram oscilações.

Figura 13 – Comparação da solução aproximada obtida pelos métodos CG, NIPG, e HDG. A simulação foi realizada até o momento $T = 1.0$ para o caso $\epsilon = 0.025$. (a) interface do tumor; (b) perfil de concentração de nutrientes; (c) potencial químico, e (d) zoom sobre o potencial químico mostrado no painel (c).



Fonte: Elaborado pelo autor.

A seguir, é apresentada a aplicabilidade do método HDG para simulações mais complexas de crescimento tumoral. A próxima simulação ilustra o comportamento das

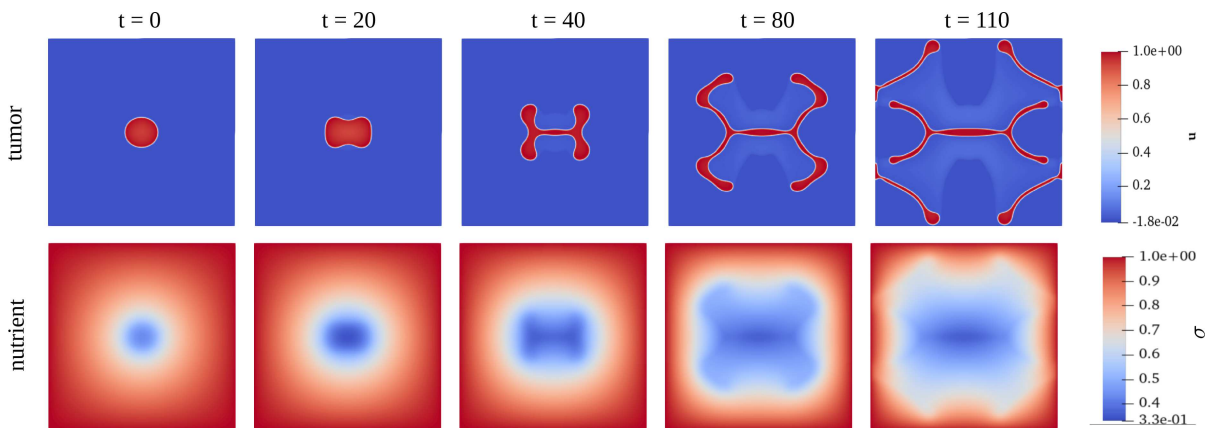
células tumorais em relação ao gradiente de nutriente, que é responsável por conduzir a formação das instabilidades caracterizada por um padrão complexo com a formação de dedos (*fingering*). Este comportamento também tem sido observado em experimentos como relatado por Pennacchietti et al. (2003) e Ridley et al. (2003).

O método HDG foi utilizado para resolver o problema do crescimento tumoral em um domínio bidimensional rico em nutrientes através do modelo de Cristini et al. (2009) dado pelas equações (2.20)-(2.28). As simulações foram realizadas usando uma malha de 200×200 elementos com aproximação polinomial de primeira ordem e tamanho do passo de tempo $\Delta t = 0,001$. Os seguintes parâmetros de estabilização foram considerados: $\beta_{01} = \beta_{02} = 1,0$. A configuração deste experimento segue a proposta apresentada em Cristini et al. (2009), onde um domínio computacional $\Omega = [0; 25,6] \times [0; 25,6]$ foi adotado e uma superfície tumoral inicial dada por

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } \left(\frac{x-12,8}{2,1}\right)^2 + \left(\frac{y-12,8}{1,9}\right)^2 \leq 1,0, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

foi utilizada. Os seguintes parâmetros foram considerados para este caso: taxa proliferativa $\mathcal{P} = 0,5$, taxa de apoptose $\mathcal{A} = 0$, coeficiente de quimiotaxia $\chi_\sigma = 10,0$, coeficiente de difusão $\mathcal{D} = 1,0$ e valor da interface difusiva $\epsilon = 0,005$. Note que, neste cenário, um valor grande para o coeficiente de quimiotaxia χ_σ resulta em instabilidades com padrões de *fingering* devido à quimiotaxia na evolução das células tumorais.

Figura 14 – Evolução da superfície do tumor e concentração de nutrientes obtida com o método HDG. Evolução da superfície tumoral (superior) e evolução da concentração de nutrientes (inferior) em vezes $t = 0, 20, 40, 80$, e 110 , respectivamente.



Fonte: Elaborado pelo autor.

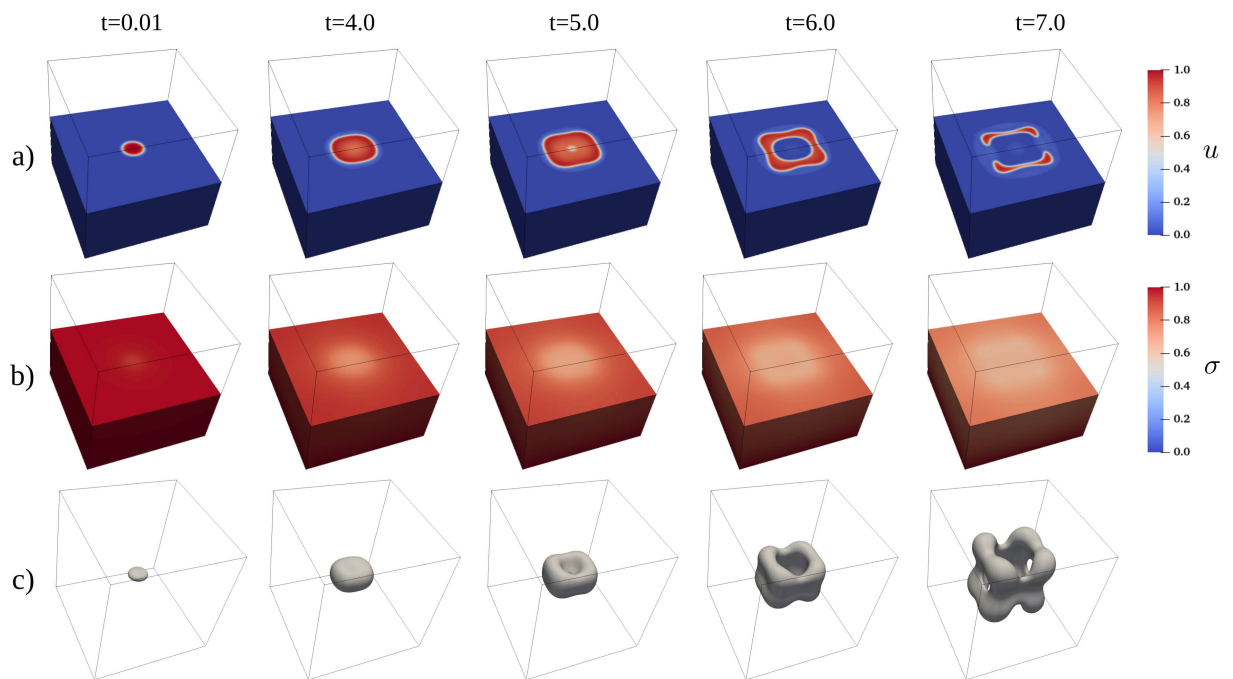
A evolução do tumor e do consumo de nutrientes são mostrados na Figura 14. No início da simulação, a formação inicial do tumor é modificada e se transforma em uma forma semelhante a uma elipse. À medida que o tumor continua a se desenvolver, surge

uma instabilidade (*fingering*) e a formação de alguns pescoços, como mostrado no instante de tempo $t = 40$ (meio). Mais tarde, no tempo $t = 80$, a forma do tumor começa a se dobrar para dentro e se desenvolve em um intrincado padrão espacial com uma estrutura ramificada, como pode ser visto no tempo $t = 110$. Os resultados desta simulação estão em boa concordância com as simulações apresentadas em Cristini et al. (2009) e destacam o fato de que o método HDG foi capaz de capturar corretamente esta dinâmica complexa.

A próxima simulação explora o problema de crescimento do tumor em um domínio 3D rico em nutrientes. Para reduzir a sobrecarga de computação, assumiu-se condições de simetria e um domínio com $1/8$ de todo o domínio $\Omega = [12, 5; 15, 5]^3$ foi considerado. As simulações foram realizadas usando uma malha de $64 \times 64 \times 64$ elementos polinomiais de primeira ordem, com um passo de tempo de $\Delta t = 0,01$, e tempo final $t = 10$. Os seguintes parâmetros de estabilização foram considerados: $\beta_{01} = \beta_{02} = 10$ para o método HDG. A configuração deste experimento foi ligeiramente alterada em relação ao anterior para ter uma dinâmica diferente de modo que uma malha mais grossa em 3D pudesse capturar a resposta física adequada. Os seguintes parâmetros foram alterados em relação ao caso anterior: taxa proliferativa $\mathcal{P} = 0,8$, taxa de apoptose $\mathcal{A} = 0,05$ e coeficiente de quimiotaxia $\chi_\sigma = 15,0$.

A Figura 15 mostra a evolução do tumor e as concentrações de nutrientes na metade do domínio, bem como uma representação da superfície da região do tumor para facilitar a interpretação dos resultados. A dinâmica geral é muito semelhante ao caso anterior, onde um grande coeficiente de quimiotaxia χ_σ é responsável por desencadear o início de instabilidades para as formações dos padrões de dedos (*fingering*).

Figura 15 – Evolução da concentração tumoral em um caso 3D obtido com o método HDG: (a) concentração tumoral; (b) concentração de nutrientes; (c) a superfície tumoral. Solução numérica apresentada nos instantes de tempo $t = 0.01, 4.0, 5.0, 6.0, 7.0$, respectivamente.



Fonte: Elaborado pelo autor.

5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS UTILIZANDO O MÉTODO HÍBRIDO ESTABILIZADO E O MÉTODO SBDF2

Neste capítulo são apresentados os resultados de experimentos numéricos que foram realizados com o método híbrido estabilizado proposto (HDG) em conjunto com o método SBDF2. Além disso, são apresentados ainda experimentos numéricos da aplicação da eletromolhabilidade.

5.1 EXPERIMENTOS COMPUTACIONAIS

5.1.1 Estudo de Convergência

A seguir será mostrada um teste de convergência para o caso de aproximação linear no espaço e com o método SBDF2, o qual espera-se uma taxa ótima de ordem dois utilizando esta estratégia.

Um caso particular da equação de Cahn-Hilliard com mobilidade não constante com uma solução exata conhecida foi resolvido para avaliar as taxas de convergência do método considerado neste trabalho. O problema é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w) - g, \quad w = F'(u) - \epsilon\Delta u, \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T],$$

onde foi considerado o potencial de poço-duplo $F(u) = \frac{1}{4}(1 - u^2)^2$, mobilidade $\mathcal{M}(u) = 1 - u^2$, interface difusiva $\epsilon = 0.1$ num domínio $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ com condições de contorno periódicas. As soluções exatas manufaturadas são dadas por

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= e^{-2t} \sin(x) \sin(y) \\ w(x, y, t) &= 2e^{-2t} \sin(x) \sin(y)\epsilon - e^{-2t} \sin(x) \sin(y) + e^{-6t} \sin(x)^3 \sin(y)^3 \end{aligned}$$

o que resulta no seguinte termo fonte:

$$\begin{aligned} g &= (1 - e^{-4t} \sin(x)^2 \sin(y)^2)[-2e^{-2t} \sin(x) \sin(y)\epsilon \\ &\quad + e^{-2t} \sin(x) \sin(y) - 3e^{-6t} \sin(x)^3 \sin(y)^3 \\ &\quad + 6e^{-6t} \sin(x) \sin(y)^3 \cos(x)^2] \\ &\quad + (1 - e^{-4t} \sin(x)^2 \sin(y)^2)[-2e^{-2t} \sin(x) \sin(y)\epsilon \\ &\quad + e^{-2t} \sin(x) \sin(y) - 3e^{-6t} \sin(x)^3 \sin(y)^3 \\ &\quad + 6e^{-6t} \sin(x)^3 \sin(y) \cos(y)^2] \\ &\quad - 2[2e^{-2t} \sin(x) \cos(y)\epsilon - e^{-2t} \sin(x) \cos(y) \\ &\quad + 3e^{-6t} \sin(x)^3 \sin(y)^2 \cos(y)]e^{-4t} \sin(x)^2 \sin(y) \cos(y) \\ &\quad - 2[2e^{-2t} \sin(y) \cos(x)\epsilon - e^{-2t} \sin(y) \cos(x) \\ &\quad + 3e^{-6t} \sin(x)^2 \sin(y)^3 \cos(x)]e^{-4t} \sin(x) \sin(y)^2 \cos(x) \\ &\quad + 2e^{-2t} \sin(x) \sin(y) \end{aligned}$$

O estudo de convergência foi realizado para o caso da aproximação linear e considerando as discretizações no tempo com o método semi-implícito de primeira ordem, baseado no Euler implícito (EI), e o método SBDF2, respectivamente. O tamanho do passo de tempo foi escolhido como $\Delta t = h^{(p+1)/\theta}$, onde p representa a ordem de aproximação espacial e θ representa a ordem de aproximação do esquema temporal. Logo, para o caso EI este toma o valor de $\theta = 1$, enquanto para o caso SBDF2 o valor de $\theta = 2$. Cabe mencionar que para obter ordem de convergência ótima no caso SBDF2 foi necessário empregar um passo de tempo igual a $\Delta t = h^{(p+1)/\theta}/10$. O número de elementos triangulares empregados foram no estudo de convergência foi: $\{8 \times 8 \times 2, 16 \times 16 \times 2, 32 \times 32 \times 2, 64 \times 64 \times 2\}$. Para o método HDG os seguintes parâmetros de estabilização foram utilizados: $\beta_{01} = \beta_{02} = 100$.

Tabela 3 – Estudo de convergência e desempenho computacional medido em termos do tempo de execução (em segundos) do método HDG utilizando os esquemas SBDF2 e EI com aproximação linear para a variável u e w , respectivamente.

malha	HDG-SBDF2					HDG-EI				
	$\ u_e - u\ _{L^2}$	ordem	$\ w_e - w\ _{L^2}$	ordem	tempo (s)	$\ u_e - u\ _{L^2}$	ordem	$\ w_e - w\ _{L^2}$	ordem	tempo (s)
8×8	0.36052	-	0.28524	-	5	0.15877	-	0.08291	-	14
16×16	0.06617	2.45	0.05348	2.41	57	0.03029	2.39	0.01540	2.43	280
32×32	0.01618	2.03	0.01304	2.04	534	0.00804	1.91	0.00391	1.98	10383
64×64	0.00418	1.95	0.00336	1.96	6381	0.00207	1.96	0.00097	2.00	69142

A Tabela 3 apresenta os erros e as taxas de convergência obtidas para o método HDG utilizando aproximação linear e com o método SBDF2. Os resultados obtidos mostram que a taxa de convergência esperada para ordem 2 compatível com a formulação do método foi obtida tanto para o método de EI quanto para o SBDF2. Além disso, a tabela também apresenta os tempos de execução, medido em segundos, para cada estudo de convergência, os quais deixam em evidência o melhor desempenho computacional obtido pelo método SBDF2. Em particular, nota-se que nos testes realizados, em média, o método SBDF2 foi aproximadamente $9 \times$ mais eficiente que o de método semi-implícito de primeira ordem (EI) em termos do tempo de execução do problema.

5.1.2 Aplicação do modelo de eletromolhabilidade

Nesta seção serão apresentados os resultados numéricos para o modelo de eletromolhabilidade dado pelas equações (2.34). As simulações computacionais utilizaram uma discretização com 8836 ($47 \times 94 \times 2$) elementos triangulares em um domínio $\Omega = [-0.5, 0.5] \times [-1, 1]$. Os seguintes parâmetros foram usados: interface difusiva $\epsilon = 0,0427$, tamanho do passo de tempo $\Delta t = 0,001$ e tempo de simulação final $t = 0,5$. Para este problema, a seguinte condição inicial (Keita et al., 2021) foi adotada:

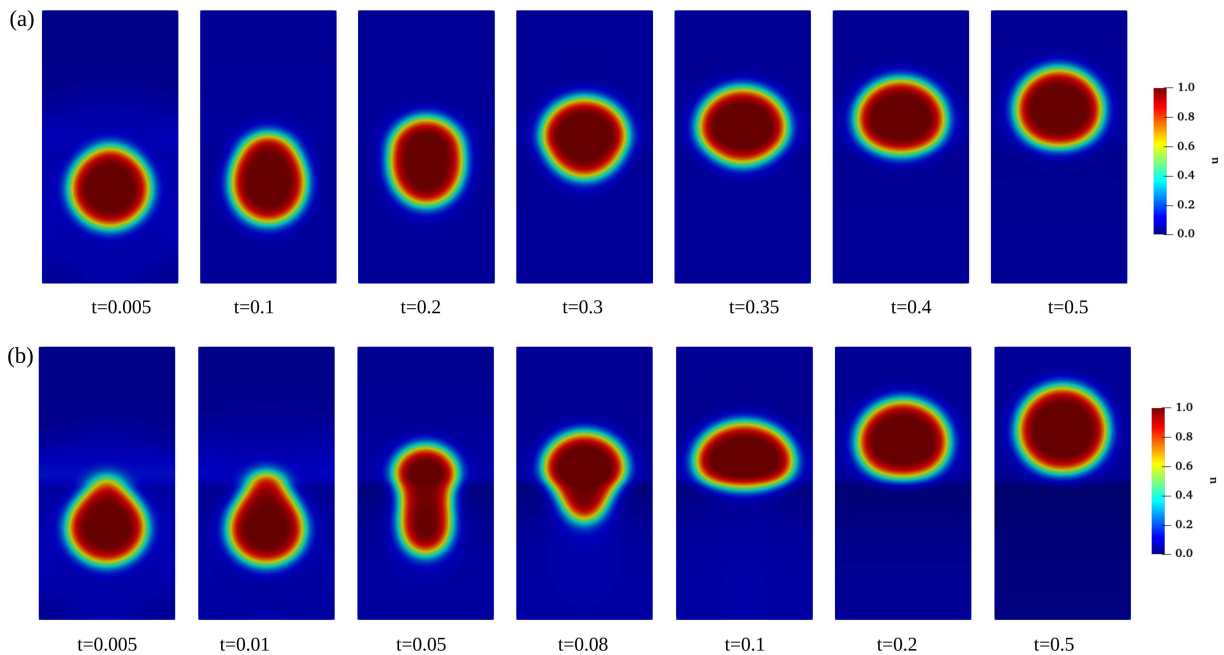
$$u_0 = \delta + e^{-10|\mathbf{x}-\mathbf{a}|^2},$$

que descreve uma gota do fluido centrada no ponto $\mathbf{a} = (0, -0.3)$, onde $\delta = \epsilon$. O experimento considera a aplicação de um campo elétrico $\rho(\mathbf{x}) = \lambda\chi(\mathbf{x})$ na região do

domínio definida por $y > 0$. Para isso, a função $\chi(\mathbf{x})$ é definida no domínio espacial de tal forma que para $y > 0$ vale 1 e 0 caso contrário. Dois experimentos computacionais com diferentes valores para a intensidade do campo elétrico λ foram realizados.

A Figura 16 apresenta a evolução da gota do fluido e a sua deformação durante o seu movimento em direção à região do campo elétrico aplicado, que neste caso corresponde à metade superior do domínio ($y > 0$). Os painéis (a) e (b) da Figura 16 apresentam os resultados para os casos $\lambda = 0.75$ e $\lambda = 3.0$, respectivamente. Pode-se notar que a forma da gota do fluido se altera de forma significativa em função do valor da intensidade λ do campo elétrico aplicado. Esse comportamento foi observado nos experimentos computacionais e de laboratório relatados em Lu et al. (2007).

Figura 16 – Evolução da curvatura do fluido com diferentes tipos de força $\lambda = 0.75$ e $\lambda = 3.0$, respectivamente. No painel (a) é mostrada a evolução da curvatura com $\lambda = 0.75$, enquanto no painel (b) é mostrada a evolução da curvatura do fluido com $\lambda = 3.0$



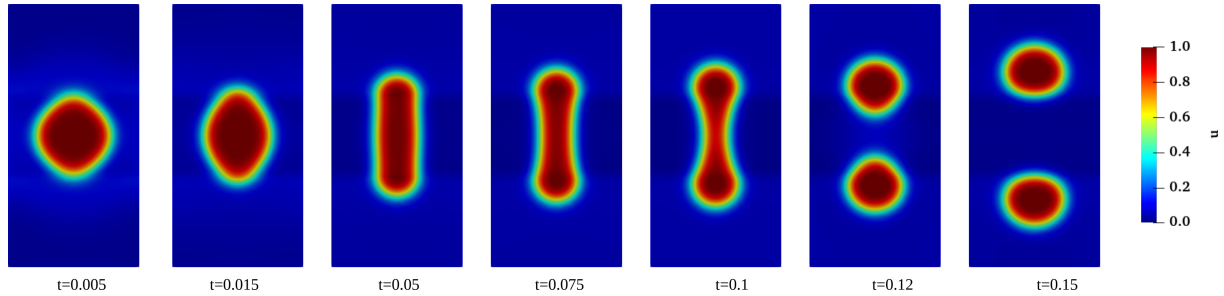
Fonte: Elaborado pelo autor.

Pode-se observar que o experimento numérico apresentado na Figura 17 com uma força de $\lambda = 3.0$ no campo elétrico apresentou uma boa aproximação qualitativa quanto à curvatura da gota do fluido com o experimento realizado na referência Lu et al. (2007).

A seguir os resultados de outro experimento computacional que ilustra a divisão de uma gota de fluido são apresentados. O experimento computacional considera o mesmo domínio do exemplo anterior com uma gota do fluido centrada no ponto $\mathbf{a} = (0, 0)$. Um campo elétrico $\rho(\mathbf{x})$ com força de $\lambda = 2.0$ é aplicado nas regiões definidas por $y < -0.3$ e $y > 0.3$. A Figura 17 mostra a evolução do movimento da gota do fluido até o tempo

$t = 0.15$, quando ocorre a sua divisão.

Figura 17 – Separação de uma gota de fluido através de eletromolhabilidade. Evolução no tempo da superfície da gota de fluido quando um campo elétrico de força $\lambda = 2.0$ é considerado.



Fonte: Elaborado pelo autor.

5.1.3 Modelo acoplado Cahn-Hilliard-Darcy

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos para o modelo acoplado de Cahn-Hilliard com Darcy (CHD) aplicado ao crescimento tumoral avascular dado pelas equações (2.33). A simulação ilustra a evolução e o comportamento das células tumorais com consumo de nutrientes e efeitos de quimiotaxia e a influência da pressão em casos onde ocorrem instabilidades do tipo *fingerling*. A configuração deste experimento foi adotada com base na referência Garcke et al. (2016), onde um domínio computacional $\Omega = [-12.5, 12.5] \times [-12.5, 12.5]$ foi empregado. A seguinte condição inicial para as células tumorais foi utilizada:

$$u_0 = \begin{cases} 1, & r \leq -\frac{1}{2}\pi\epsilon \\ -\sin\left(\frac{r(\mathbf{x})}{\epsilon}\right), & |r| < \frac{1}{2}\pi\epsilon \\ -1, & r \geq \frac{1}{2}\pi\epsilon \end{cases}$$

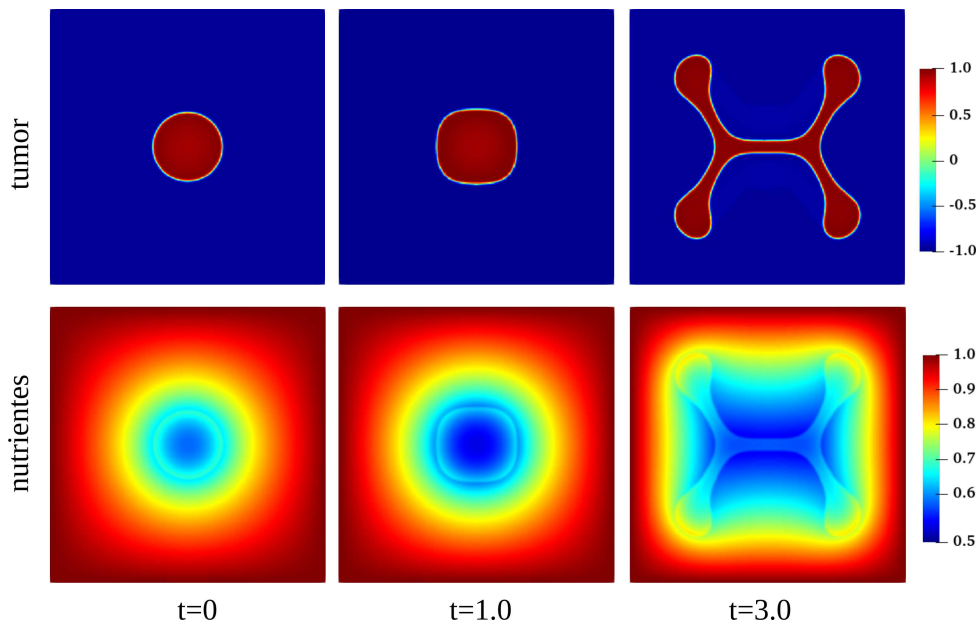
onde $\mathbf{x} = (x, y)$, $r(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}| - (2 + 0.1 \cos(\theta))$. Os seguintes parâmetros foram considerados nas simulações: taxa de proliferação das células tumorais $\mathcal{P}_f = 0, 1$, taxa da apoptose $\mathcal{A} = 0$, coeficiente de quimiotaxia $\chi_u = 10$, coeficiente de difusão $D = 1$, valor da interface difusiva $\epsilon = 0, 01$, $\lambda = 0, 03$, $\rho_s = 2$, $\mathcal{C} = 2$ e $\beta = 0, 1$.

As equações do tipo Cahn-Hilliard foram resolvidas pelo método HDG em conjunto com o SBDF2 em uma malha de $200 \times 200 \times 2$ elementos triangulares com polinômios de aproximação linear, passo de tempo $\Delta t = 0.001$. Para a discretização da equação de Darcy foi utilizada a formulação *SDHM* com os seguintes parâmetros de estabilização para a pressão $\delta_1 = -0.5$ e $\delta_2 = \delta_3 = 0.5$.

Inicialmente o modelo será estudado sem o campo de velocidades, isto é, com $\mathbf{v} = 0$. Os resultados dessa simulação até o tempo de simulação final $t = 3$ podem ser observados

na Figura 18, a qual apresenta a evolução das células tumorais e do consumo dos nutrientes. No início da simulação a formação inicial do tumor é modificada e se transforma em uma forma semelhante a uma estrela. À medida que o tumor continua a se desenvolver, surge uma instabilidade dando origem ao padrão de *fingering*, como mostrado no instante de tempo $t = 3$.

Figura 18 – Evolução das células tumorais na presença de nutrientes obtida pelo método HDG. É mostrada a evolução do tumor (superior) e evolução dos nutrientes (inferior) nos instantes de tempo $t = 0$, $t = 1,5$ e $t = 3$.

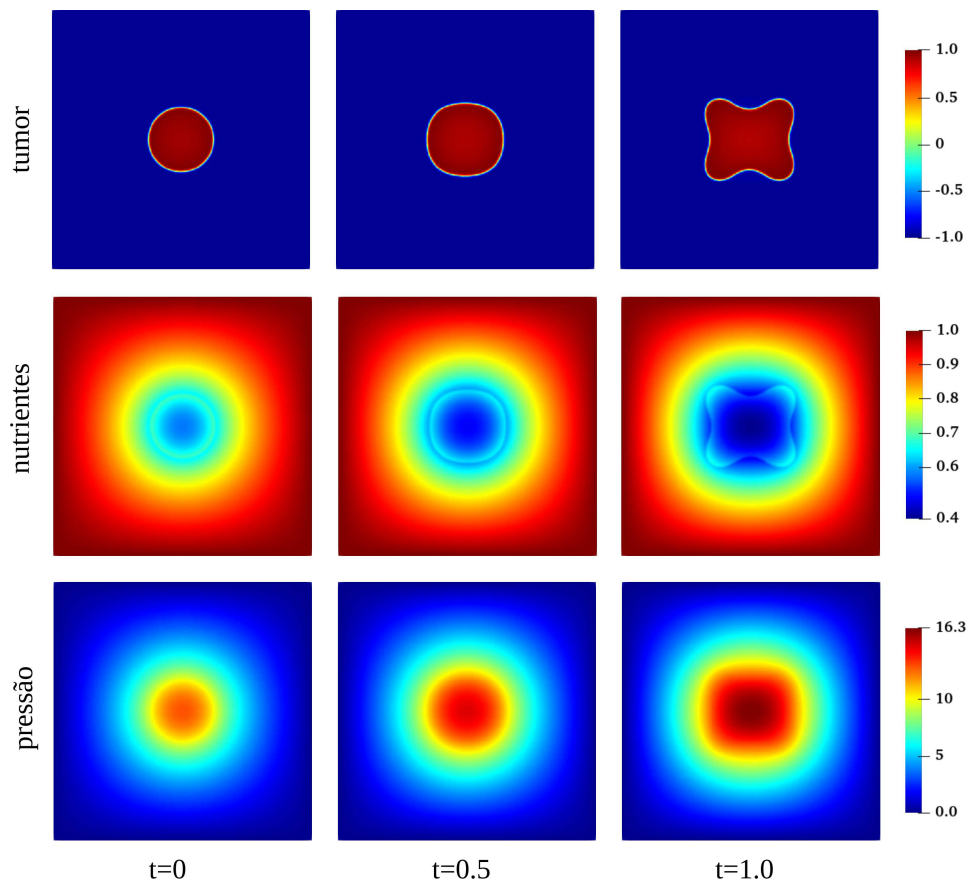


Fonte: Elaborado pelo autor.

O próximo experimento considera o campo de velocidades $\mathbf{v} \neq 0$. Neste caso, os mesmos parâmetros utilizados anteriormente são adotados, exceto os valores de $\alpha = \frac{2}{3}$ e o tempo final de simulação $t = 1.0$. A Figura 19 apresenta a evolução das células tumorais e a concentração dos nutrientes envolvidos pela pressão que afeta a morfologia do tumor. Destaca-se neste caso que aplicando a modelagem do crescimento tumoral como um meio poroso esta obteve os fenômenos de mudança morfológica do tumor quando comparado ao caso sem a influência do modelo de tipo Darcy apresentada anteriormente.

Vale destacar que os resultados destas simulações estão em concordância de forma qualitativa com os apresentados por Garcke et al. (2016). Destaca-se o fato de que o método do HDG com discretização temporal pelo método SBDF2 foi capaz de capturar corretamente as dinâmicas complexas do crescimento tumoral na fase avascular, sem a necessidade de malhas muito refinadas, como aquelas utilizadas em Garcke et al. (2016). Entretanto, estudos e comparações mais detalhados do método HDG e outras formulações para este problema ainda precisam ser realizados.

Figura 19 – Evolução das células tumorais na presença de nutrientes e submetida a uma pressão obtida pelo método HDG. É mostrada a evolução do tumor (superior), a evolução dos nutrientes (centro), e o campo da pressão (inferior) nos tempos de simulação $t = 0$, $t = 0,5$ e $t = 1$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

6 CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou uma formulação mista do método dos elementos finitos híbridos e estabilizados para a solução numérica da equação de Cahn-Hilliard. Outras variantes da equação de CH para aplicações como na modelagem do crescimento tumoral e um modelo matemático da técnica de eletromolhabilidade também foram estudados.

As formulações híbridas propostas para estes problemas são baseadas em problemas locais definidos em cada elemento com as condições de interface impostas fracamente através dos multiplicadores de Lagrange introduzidos nas arestas/face dos elementos. Em particular, foram consideradas aproximações descontínuas para os multiplicadores de Lagrange onde os graus de liberdade das variáveis de interesse podem ser eliminados localmente (no nível de elemento) através de uma abordagem de condensação estática, produzindo um sistema global de equações nos graus de liberdade dos multiplicadores definidos apenas nas arestas/faces entre os elementos.

Por outro lado, foi discutido que o processo de eliminação dos multiplicadores de Lagrange permitiu gerar um método de DG que, a partir das escolhas de coeficientes específicos, pode ser associado a uma formulação de DG da literatura para a qual a análise numérica prova taxas ótimas de convergência. Taxas ótimas de convergência em problemas com solução exata foram observadas nos experimentos numéricos realizados neste trabalho. Além disso, características interessantes da solução numérica utilizando o método HDG para o modelo de CH com mobilidade não constante foram observadas. Em particular, notou-se uma melhor precisão quando comparado ao método de Galerkin contínuo ou ao método de Galerkin descontínuo associado.

Também foi mostrada a capacidade do método HDG resolver o modelo CH e os modelos de crescimento tumoral corretamente e com maior precisão, reduzindo as oscilações espúrias que poderiam ocorrer em alguns casos com outras formulações. Finalmente, o método foi utilizado para simular um caso mais complexo de crescimento tumoral na presença de nutrientes, o que resulta em um padrão em forma de dedos devido à instabilidade provocada pela quimiotaxia. Por fim, o problema de eletromolhabilidade que é baseado no modelo de CH foi explorado utilizando o método HDG para se obter as soluções numéricas.

Ainda foi explorada uma formulação de segunda ordem através da discretização temporal pelo método SBDF2. Além de um aumento na ordem de convergência do método quando comparado com a abordagem semi-implícita com aproximação de primeira ordem e decomposição de Eyre, tal formulação evita as dificuldades e o custo de se resolver um sistema de equações não lineares em problemas de CH com a função de mobilidade não constante. Dessa forma, obtém-se um método mais eficiente para a aproximação da solução e uma redução significativa do tempo computacional para as simulações, como

mostrado nos experimentos numéricos e comparações com o método semi-implícito de primeira ordem.

Em resumo, a formulação dos elementos finitos HDG mostra um grande potencial para a solução eficiente e precisa para problemas matemáticos formulados com base na equação de CH. Portanto, este estudo abre caminho para melhorar ainda mais a solução numérica dos modelos baseados em CH através do método HDG em combinação com outras técnicas tais como algoritmos adaptativos e computação paralela. A adaptatividade polinomial ou no espaço poderia ser explorada facilmente pelo método HDG e poderia encontrar grande sucesso em aplicações baseadas no modelo de CH como aquelas apresentada neste estudo que possuem a formação de dedos e demandam alta precisão em determinadas regiões do espaço. Além disso, devido à natureza descontínua do método HDG, técnicas de computação paralela poderiam explorar todo o poder computacional disponível em ambientes de computação de alto desempenho como nos processadores modernos, agregados de computadores e placas gráficas dedicadas a processamento científico.

6.1 CONTRIBUIÇÕES

Os desenvolvimentos deste trabalho foram elaborados como artigos e foram submetidos para revistas e eventos especializados. Em particular, menciona-se os seguintes trabalhos (Medina et al., 2019, 2021):

- *A stabilized hybrid discontinuous Galerkin method for the Cahn-Hilliard equation*, submetido para Journal of Computational and Applied Mathematics, 2021.
- *Adaptive Schemes for FEM Approximation of the Higher-Order generalized Cahn-Hilliard equations*. Mecánica Computacional, v. XXXVII, p. 1635-1647, 2019.

6.2 TRABALHOS FUTUROS

O presente trabalho possui limitações que poderiam ser exploradas para avançar esta linha de pesquisa. Alguns possíveis tópicos de trabalhos futuros incluem:

- Explorar a família de métodos SBDF em combinação com o método HDG para a construção de esquemas com ordens maiores do que 2, a qual foi estudada neste trabalho.
- Estudar esquemas de adaptatividade do tipo h e p para o método HDG na solução de modelos de tipo Cahn-Hilliard.
- Realizar implementações utilizando técnicas de computação paralela e de alto desempenho visando explorar o método HDG nesse contexto para o problema de CH.

- Estudar modelos acoplados mais complexos para descrever o crescimento tumoral tais como os modelos de Cahn-Hilliard-Stokes-Darcy e Cahn-Hilliard-Navier-Stokes-Darcy.
- Apesar de não ter sido discutido no presente trabalho, sugere-se estudar o problema de Cahn-Hilliard Elástico em meios homogêneos e heterogêneos, assim como também, explorar casos de elasticidade anisotrópica.

REFERÊNCIAS

- Amir Abdollahi e Irene Arias. Phase-field modeling of fracture in ferroelectric materials. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 22(2):153–181, 2015.
- John A Adam e Nicola Bellomo. *A survey of models for tumor-immune system dynamics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- Andreas C Aristotelous, Ohannes A Karakashian, e Steven M Wise. Adaptive, second-order in time, primitive-variable discontinuous Galerkin schemes for a Cahn–Hilliard equation with a mass source. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 35(3):1167–1198, 2015.
- Natalia C. B. Arruda, Abimael Fernando Dourado Loula, e Regina Célia Cerqueira Almeida. Numerical analysis of a locally projected discontinuous Galerkin method for elliptic problems. *Blucher Mechanical Engineering Proceedings*, 1(1):2674–2689, 2012.
- Natalia C. B. Arruda, Abimael F. D. Loula, e Regina C. C. Almeida. Locally discontinuous but globally continuous Galerkin methods for elliptic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255:104–120, 2013.
- Uri M Ascher, Steven J Ruuth, e Brian TR Wetton. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(3):797–823, 1995.
- L’ubomír Bañas e Hari Shankar Mahato. Homogenization of evolutionary Stokes–Cahn–Hilliard equations for two-phase porous media flow. *Asymptotic Analysis*, 105(1-2):77–95, 2017.
- John W Barrett, James F Blowey, e Harald Garcke. Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(1):286–318, 1999.
- John W Barrett, James F Blowey, e Harald Garcke. On fully practical finite element approximations of degenerate Cahn–Hilliard systems. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 35(4):713–748, 2001.
- Gabriel F. Barros. *A Space-Time Adaptive Scheme for the Cahn–Hilliard Equation*. PhD thesis, Mestrado em engenharia Civil - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2019.
- Jacob Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Courier Corporation, 2013.
- Michele Benzi, Gene H Golub, e Jörg Liesen. Numerical solution of saddle point problems. *Acta numerica*, 14:1–137, 2005.

- Andrea L Bertozzi, Ning Ju, e Hsiang-Wei Lu. A biharmonic-modified forward time stepping method for fourth order nonlinear diffusion equations. *Discrete & Continuous Dynamical Systems*, 29(4):1367, 2011.
- S Bulent Biner. *Programming phase-field modeling*. Springer, 2017.
- Daniele Boffi, Franco Brezzi, Michel Fortin, et al. *Mixed finite element methods and applications*, volume 44. Springer, 2013.
- Susanne C. Brenner, Shiyuan Gu, Thirupathi Gudi, e Li-yeng Sung. A quadratic C^0 interior penalty method for linear fourth order boundary value problems with boundary conditions of the Cahn–Hilliard type. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(4):2088–2110, 2012.
- Franco Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *Publications mathématiques et informatique de Rennes*, (S4):1–26, 1974.
- Franco Brezzi, Jim Douglas, e L Donatella Marini. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. *Numerische Mathematik*, 47(2):217–235, 1985.
- John W Cahn. On spinodal decomposition. *Acta metallurgica*, 9(9):795–801, 1961.
- John W Cahn e John E Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy. *The Journal of chemical physics*, 28(2):258–267, 1958.
- Long-Qing Chen. Phase-field models for microstructure evolution. *Annual review of materials research*, 32(1):113–140, 2002.
- Laurence Cherfils, Alain Miranville, Shuiran Peng, e Wen Zhang. Higher-order generalized Cahn–Hilliard equations. *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations*, 2017(9):1–22, 2017.
- Rustum Choksi, Mark A Peletier, e JF Williams. On the phase diagram for microphase separation of diblock copolymers: an approach via a nonlocal cahn–hilliard functional. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 69(6):1712–1738, 2009.
- Bernardo Cockburn, Jayadeep Gopalakrishnan, e Raytcho Lazarov. Unified hybridization of discontinuous Galerkin, mixed, and continuous Galerkin methods for second order elliptic problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(2):1319–1365, 2009.
- Maicon R. Correa e Abimale F. D. Loula. Unconditionally stable mixed finite element methods for Darcy flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(17-18):1525–1540, 2008.

- Vittorio Cristini, John Lowengrub, e Qing Nie. Nonlinear simulation of tumor growth. *Journal of Mathematical Biology*, 46(3):191–224, 2003.
- Vittorio Cristini, Xiangrong Li, John S Lowengrub, e Steven M Wise. Nonlinear simulations of solid tumor growth using a mixture model: invasion and branching. *Journal of mathematical biology*, 58(4):723–763, 2009.
- Steven Dargaville e Troy W Farrell. A least squares based finite volume method for the Cahn–Hilliard and Cahn–Hilliard–reaction equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 273:225–244, 2015.
- Qiang Du, Lili Ju, e Li Tian. Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation on surfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(29-32): 2458–2470, 2011.
- Matthias Ebenbeck e Harald Garcke. Analysis of a Cahn–Hilliard–Brinkman model for tumour growth with chemotaxis. *Journal of Differential Equations*, 266(9):5998–6036, 2019a.
- Matthias Ebenbeck e Harald Garcke. On a Cahn–Hilliard–Brinkman model for tumor growth and its singular limits. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 51(3):1868–1912, 2019b.
- Charles M Elliott, Donald A French, e FA Milner. A second order splitting method for the Cahn–Hilliard equation. *Numerische Mathematik*, 54(5):575–590, 1989.
- David J Eyre. Unconditionally gradient stable time marching the Cahn–Hilliard equation. *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, 529, 1998.
- Maurice S Fabien, Matthew G Knepley, Richard T Mills, e Béatrice M Rivière. Manycore parallel computing for a hybridizable discontinuous Galerkin nested multigrid method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 41(2):C73–C96, 2019.
- Yali Gao, Xiaoming He, Liquan Mei, e Xiaofeng Yang. Decoupled, linear, and energy stable finite element method for the Cahn–Hilliard–Navier–Stokes–Darcy phase field model. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 40(1):B110–B137, 2018.
- Harald Garcke, Kei Fong Lam, Emanuel Sitka, e Vanessa Styles. A Cahn–Hilliard–Darcy model for tumour growth with chemotaxis and active transport. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 26(06):1095–1148, 2016.
- Harald Garcke, Kei Fong Lam, Robert Nürnberg, e Emanuel Sitka. A multiphase Cahn–Hilliard–Darcy model for tumour growth with necrosis. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 28(03):525–577, 2018a.

- Harald Garcke, Kei Fong Lam, e Vanessa Styles. Cahn–Hilliard inpainting with the double obstacle potential. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 11(3):2064–2089, 2018b.
- Hector Gomez e Thomas J. R. Hughes. Provably unconditionally stable, second-order time-accurate, mixed variational methods for phase-field models. *Journal of Computational Physics*, 230(13):5310–5327, 2011.
- Ludovic Goudenège, Daniel Martin, e Grégory Vial. High order finite element calculations for the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Scientific Computing*, 52(2):294–321, 2012.
- Günther Grün e Martin Rumpf. Nonnegativity preserving convergent schemes for the thin film equation. *Numerische Mathematik*, 87(1):113–152, 2000.
- Francisco Guillén-González e Giordano Tierra. Second order schemes and time-step adaptivity for Allen–Cahn and Cahn–Hilliard models. *Computers & Mathematics with Applications*, 68(8):821–846, 2014.
- Ruihan Guo e Yan Xu. Efficient solvers of discontinuous Galerkin discretization for the Cahn–Hilliard equations. *Journal of Scientific Computing*, 58(2):380–408, 2014.
- Morton E Gurtin, Eliot Fried, e Lallit Anand. *The mechanics and thermodynamics of continua*. Cambridge University Press, 2010.
- Daozhi Han e Xiaoming Wang. Decoupled energy-law preserving numerical schemes for the Cahn–Hilliard–Darcy system. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 32(3):936–954, 2016.
- Yinnian He, Yunxian Liu, e Tao Tang. On large time-stepping methods for the Cahn–Hilliard equation. *Applied Numerical Mathematics*, 57(5-7):616–628, 2007.
- Frédéric Hecht. New development in FreeFem++. *Journal of numerical mathematics*, 20(3-4):251–266, 2012.
- Iury Higor Aguiar da Igreja. Métodos de elementos finitos híbridos estabilizados para escoamentos de Stokes, Darcy e Stokes-Darcy acoplados. 2015.
- Vandana Jain e K Muralidhar. Electrowetting-on-dielectric system for COVID-19 testing. *Transactions of the Indian National Academy of Engineering*, 5:251–254, 2020.
- Claes Johnson. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Courier Corporation, 2012.
- Andrea M Jokisaari, PW Voorhees, Jonathan E Guyer, J Warren, e OG Heinonen. Benchmark problems for numerical implementations of phase field models. *Computational Materials Science*, 126:139–151, 2017.

- S. Kaesmair e Paul Steinmann. Comparative computational analysis of the Cahn–Hilliard equation with emphasis on C1-continuous methods. *Journal of Computational Physics*, 322:783–803, 2016.
- Markus Kästner, Philipp Metsch, e Rene De Borst. Isogeometric analysis of the Cahn–Hilliard equation—a convergence study. *Journal of Computational Physics*, 305:360–371, 2016.
- Sana Keita, Abdelaziz Beljadid, e Yves Bourgault. Efficient second-order semi-implicit finite element method for fourth-order nonlinear diffusion equations. *Computer Physics Communications*, 258:107588, 2021.
- Johannes Krehmeller, Anh-Tu Vuong, Lena Yoshihara, Wolfgang A Wall, e Bernhard A Schrefler. A monolithic multiphase porous medium framework for avascular tumor growth. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 340:657–683, 2018.
- Dongsun Lee, Joo-Youl Huh, Darae Jeong, Jaemin Shin, Ana Yun, e Junseok Kim. Physical, mathematical, and numerical derivations of the cahn–hilliard equation. *Computational Materials Science*, 81:216–225, 2014.
- Bin Li e Corrado Maurini. Crack kinking in a variational phase-field model of brittle fracture with strongly anisotropic surface energy. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 125:502–522, 2019.
- Bin Li, Christian Peco, Daniel Millán, Irene Arias, e Marino Arroyo. Phase-field modeling and simulation of fracture in brittle materials with strongly anisotropic surface energy. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 102(3-4):711–727, 2015.
- EABF Lima, JT Oden, DA Hormuth, TE Yankeelov, e RC Almeida. Selection, calibration, and validation of models of tumor growth. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 26(12):2341–2368, 2016.
- Stefano Lisini, Daniel Matthes, e Giuseppe Savaré. Cahn–Hilliard and thin film equations with nonlinear mobility as gradient flows in weighted-wasserstein metrics. *Journal of Differential Equations*, 253(2):814–850, 2012.
- Chen Liu, Florian Frank, e Béatrice M Rivière. Numerical error analysis for nonsymmetric interior penalty discontinuous Galerkin method of Cahn–Hilliard equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 35(4):1509–1537, 2019.
- Hailiang Liu e Peimeng Yin. Unconditionally energy stable discontinuous Galerkin schemes for the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 390:113375, 2021.

- Quan-Xing Liu, Arjen Doelman, Vivi Rottschäfer, Monique de Jager, Peter MJ Herman, Max Rietkerk, e Johan van de Koppel. Phase separation explains a new class of self-organized spatial patterns in ecological systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(29):11905–11910, 2013.
- H. W. Lu, K. Glasner, A. L. Bertozzi, e C. J. Kim. A diffuse-interface model for electrowetting drops in a Hele-Shaw cell. *Journal of Fluid Mechanics*, 590:411–435, 2007.
- Pietro Mascheroni, M Carfagna, Alfio Grillo, DP Boso, e Bernhard A Schrefler. An avascular tumor growth model based on porous media mechanics and evolving natural states. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 23(4):686–712, 2018.
- E. Y. Medina, B. M. Rocha, e E. M. Toledo. Adaptive schemes for FEM approximation of the higher-order generalized Cahn–Hilliard equations. *Mecánica Computacional*, XXXVII:1635–1647, 2019.
- E. Y. Medina, B. M. Rocha, I. Igreja, e E. M. Toledo. A stabilized hybrid discontinuous Galerkin method for the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, (em revisão), 2021.
- Alain Miranville. Asymptotic behaviour of a generalized Cahn–Hilliard equation with a proliferation term. *Applicable Analysis*, 92(6):1308–1321, 2013.
- Yoissell R. Nunez, Cristiane O. Faria, Abimael F. D. Loula, e Sandra M. C. Malta. A mixed-hybrid finite element method applied to tracer injection processes. *International Journal of Modeling and Simulation for the Petroleum Industry*, 6(1):51–59, 2012.
- Jiao-jiao Pan, Qian Jiang, Ting-wei Ruan, e Hong Luo. Regularity of global attractor for atmospheric circulation equations with humidity effect. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, 35(4):820–829, 2019.
- Filipe Fernandes de Paula. *Métodos Numéricos Conservativos para Escoamentos Bifásicos em Meios Porosos Heterogêneos*. PhD thesis, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2018.
- Selma Pennacchietti, Paolo Michieli, Maria Galluzzo, Massimiliano Mazzone, Silvia Giordano, e Paolo M Comoglio. Hypoxia promotes invasive growth by transcriptional activation of the met protooncogene. *Cancer cell*, 3(4):347–361, 2003.
- PennState. Materials Research Institute, 2021. URL <https://www.mri.psu.edu/materials-computation-center/methods/phase-field-method>.

- Catherine Quilliet e Bruno Berge. Electrowetting: a recent outbreak. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 6(1):34–39, 2001.
- Thiago Oliveira Quinelato. *Mixed hybrid finite element methods in elasticity and poroelasticity*. PhD thesis, Ph. D. thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2017.
- Pierre-Arnaud Raviart e Jean-Marie Thomas. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. In *Mathematical aspects of finite element methods*, pages 292–315. Springer, 1977.
- Anne J Ridley, Martin A Schwartz, Keith Burridge, Richard A Firtel, Mark H Ginsberg, Gary Borisy, J Thomas Parsons, e Alan Rick Horwitz. Cell migration: integrating signals from front to back. *Science*, 302(5651):1704–1709, 2003.
- Béatrice Rivière. *Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation*. SIAM, 2008.
- Béatrice Rivière, Mary F Wheeler, e Vivette Girault. Improved energy estimates for interior penalty, constrained and discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. Part I. *Computational Geosciences*, 3(3):337–360, 1999.
- Xevi Roca, Cuong Nguyen, e Jaime Peraire. Scalable parallelization of the hybridized discontinuous Galerkin method for compressible flow. In *21st AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, page 2939, 2013.
- H. L. Rocha, Regina C. Almeida, Ernesto A. B. F. Lima, A. C. M. Resende, J. T. Oden, e T. E. Yankeelov. A hybrid three-scale model of tumor growth. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 28(01):61–93, 2018.
- Olivier JJ Ronsin, DongJu Jang, Hans-Joachim Egelhaaf, Christoph J Brabec, e Jens Harting. A phase-field model for the evaporation of thin film mixtures. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(12):6638–6652, 2020.
- Ayşe Sarıaydın-Filibelioglu, Bülent Karasözen, e Murat Uzunca. Energy stable interior penalty discontinuous Galerkin finite element method for Cahn–Hilliard equation. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 18(5):303–314, 2017.
- Hui Shi e Ying Li. Local discontinuous Galerkin methods with implicit-explicit multistep time-marching for solving the nonlinear Cahn-Hilliard equation. *Journal of Computational Physics*, 394:719–731, 2019.

- Jaemin Shin, Darae Jeong, e Junseok Kim. A conservative numerical method for the Cahn–Hilliard equation in complex domains. *Journal of Computational Physics*, 230(19):7441–7455, 2011.
- Huailing Song e Chi-Wang Shu. Unconditional energy stability analysis of a second order implicit–explicit local discontinuous Galerkin method for the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Scientific Computing*, 73(2):1178–1203, 2017.
- Anis Theljani, Hamdi Houichet, e Anis Mohamed. An adaptive Cahn–Hilliard equation for enhanced edges in binary image inpainting. *Journal of Algorithms & Computational Technology*, 14:1748302620941430, 2020.
- Philippe Vignal, N Collier, Lisandro Dalcin, DL Brown, e VM Calo. An energy-stable time-integrator for phase-field models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 316:1179–1214, 2017.
- Garth N Wells, Ellen Kuhl, e Krishna Garikipati. A discontinuous Galerkin method for the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Computational Physics*, 218(2):860–877, 2006.
- Steven M Wise, John S Lowengrub, Hermann B Frieboes, e Vittorio Cristini. Three-dimensional multispecies nonlinear tumor growth-I: model and numerical method. *Journal of Theoretical Biology*, 253(3):524–543, 2008.
- Yinhua Xia, Yan Xu, e Chi-Wang Shu. Local discontinuous Galerkin methods for the Cahn–Hilliard type equations. *Journal of Computational Physics*, 227(1):472–491, 2007.
- Yue Yan, Wenbin Chen, Cheng Wang, e Steven M Wise. A second-order energy stable BDF numerical scheme for the Cahn–Hilliard equation. *Communications in Computational Physics*, 23(2):572–602, 2018.
- Wenli Yang, Zhongyi Huang, e Wei Zhu. Image segmentation using the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Scientific Computing*, 79(2):1057–1077, 2019.
- Jiansong Zhang, Jiang Zhu, Rongpei Zhang, Danping Yang, e Abimael FD Loula. A combined discontinuous Galerkin finite element method for miscible displacement problem. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 309:44–55, 2017.
- Liangzhe Zhang, Michael R Tonks, Derek Gaston, John W Peterson, David Andrs, Paul C Millett, e Bulent S Biner. A quantitative comparison between c_0 and c_1 elements for solving the Cahn–Hilliard equation. *Journal of Computational Physics*, 236:74–80, 2013.
- Zhengru Zhang e Zhonghua Qiao. An adaptive time-stepping strategy for the Cahn–Hilliard equation. *Communications in Computational Physics*, 11(4):1261–1278, 2012.
- Liya Zhornitskaya e Andrea L. Bertozzi. Positivity-preserving numerical schemes for lubrication-type equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(2):523–555, 1999.

APÊNDICE A – DEFINIÇÕES PRELIMINARES

Considere um domínio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$ com fronteira $\Gamma = \partial\Omega$, assim os espaços que serão utilizados nesta seção serão definidos. Seja o espaço das funções quadrado integráveis definido por

$$L^2(\Omega) = \left\{ z : \int_{\Omega} |z|^2 d\mathbf{x} < \infty \right\}. \quad (\text{A.1})$$

e o espaço das funções quadrado integráveis com média nula definido por

$$L_0^2(\Omega) = \left\{ z \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} z d\mathbf{x} = 0 \right\}. \quad (\text{A.2})$$

O produto interno em $L^2(\Omega)$ entre w e z será denotado por

$$(w, z) = \int_{\Omega} wz d\Omega, \quad (\text{A.3})$$

além disso, este espaço definido em (A.1) induz uma norma definida por

$$\|z\|_0 = \|z\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |z|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2} \quad (\text{A.4})$$

Agora, dados $u \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^d$, e denotando os operadores gradiente por ∇u , divergente por $\text{div } \mathbf{v}$ e rotacional por $\text{rot } \mathbf{v}$, o espaço de Sobolev $H^1(\Omega)$ é definido como

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) : \nabla u \in [L^2(\Omega)]^d \right\}, \quad (\text{A.5})$$

com norma e seminorma definidas, respectivamente, por

$$\|u\|_1^2 = \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 = \|u\|_0^2 + \|\nabla u\|_0^2, \quad (\text{A.6})$$

$$|u|_1^2 = |u|_{H^1(\Omega)}^2 = \|\nabla u\|_0^2. \quad (\text{A.7})$$

Os espaços $H(\text{div})$ e $H(\text{rot})$ também são definidos como:

$$H(\text{div}, \Omega) = H(\text{div}) = \left\{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^d : \text{div}(\mathbf{v}) \in L^2(\Omega) \right\}, \quad (\text{A.8})$$

$$H(\text{rot}, \Omega) = H(\text{rot}) = \left\{ \mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^d : \text{rot}(\mathbf{v}) \in L^2(\Omega) \right\}. \quad (\text{A.9})$$

Seja $\mathcal{T}_h = \{K\}$ uma malha regular de elementos finitos em $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ formada por elementos K . Considerando elementos vizinhos K_1 e K_2 que compartilham uma mesma aresta e , o conjunto de todas as arestas e dos elementos $K \in \mathcal{T}_h$ é dado por

$$\mathcal{E}_h = \{e : e \text{ é uma aresta de } K, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \quad (\text{A.10})$$

enquanto o conjunto de arestas interiores é dado por

$$\mathcal{E}_h^0 = \{e \in \mathcal{E}_h : e = K_1 \cap K_2, \quad \forall K_1, K_2 \in \mathcal{T}_h\}, \quad (\text{A.11})$$

e o conjunto de arestas do contorno é dado por

$$\mathcal{E}_h^\partial = \{e \in \mathcal{E}_h : e \subseteq \partial\Omega\}. \quad (\text{A.12})$$

APÊNDICE B – EQUAÇÃO DE CAHN-HILLIARD GENERALIZADO

Apresentamos aqui o uso de um algoritmo de malha adaptativa para a solução numérica eficiente e adequada da equação anisotrópica de Cahn-Hilliard de ordem superior com um termo de proliferação. A solução numérica foi obtida utilizando um método misto de elementos finitos para a discretização espacial. Para a integração temporal foi empregado o Euler implícito combinado com o esquema de Eyre, para o tratamento do termo não-linear. Os resultados deste trabalho mostraram que o esquema de malha adaptativa foi capaz de reproduzir a dinâmica do crescimento tumoral quando comparado a uma malha muito refinada espacialmente. Além disso, os experimentos numéricos mostraram que o número total de elementos para o caso adaptativo é menor do que na solução de referência refinada na maior parte do tempo durante a simulação, resultando em um ganho considerável em economia computacional. Por exemplo, observamos que para a malha fixa pelo menos 180000 triângulos tiveram que ser utilizados na discretização espacial. Para a malha adaptativa, não usamos mais do que 45000 triângulos para reproduzir a mesma dinâmica de crescimento do tumor impulsionado pela difusão. Os resultados deste estudo foram publicados em Medina et al. (2019).

B.1 INTRODUÇÃO

No presente anexo apresentaremos brevemente a equação generalizada de Cahn-Hilliard (CHG), a qual é uma equação de sexta ordem não linear parabólica, que descreve o crescimento do tumor na fase avascular. Em particular sua mudança morfológica, isto é, a influência do termo fonte $g(u)$ e da anisotropia fazem com que a massa se alongue anisotropicamente em várias direções como, por exemplo, na direção X ou Y , ou de forma combinada em ambas direções. Esse fenômeno decorre da existência de uma fonte ou sumidouro de massa na fronteira do tumor, sendo que uma fonte de massa representa a divisão e crescimento celular, enquanto um sumidouro estaria relacionado com a morte celular devido a hipóxia (falta de oxigênio) e necrose Cristini et al. (2009), Wise et al. (2008), dada pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta \mathcal{A}u + \Delta \mathcal{B}u - \Delta \frac{1}{\epsilon} f(u) + \frac{1}{\epsilon} g(\mathbf{x}, u) = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (\text{B.1})$$

sujeita às condições iniciais $u(\mathbf{x}, 0) = u_0$ e condições de contorno apropriadas. Aqui, \mathcal{A} e \mathcal{B} são operadores definidos por:

$$\mathcal{A} = a_{20}\epsilon \frac{\partial^4(\bullet)}{\partial x^4} + a_{02}\epsilon \frac{\partial^4(\bullet)}{\partial y^4} + a_{11}\epsilon \frac{\partial^4(\bullet)}{\partial x^2 \partial y^2}, \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{B} = a_{10}\epsilon \frac{\partial^2(\bullet)}{\partial x^2} + a_{01}\epsilon \frac{\partial^2(\bullet)}{\partial y^2}, \quad (\text{B.3})$$

onde a_{20} , a_{02} , a_{11} , a_{10} e a_{01} são parâmetros do modelo podendo-se notar que no caso de $a_{20} = a_{02} = a_{11} = 0$ a equação (B.1) se reduz à equação clássica de CH (2.8). Uma análise

detalhada da solução para a equação (B.1) foi apresentada por Cherfils et al. (2017) e Miranville (2013).

Na equação (B.1) o termo fonte $g(\mathbf{x}, u)$ atua como um termo de proliferação. No presente trabalho, a seguinte função $g(\mathbf{x}, u)$ proposta por Aristotelous et al. (2015) para descrever o crescimento do tumor será usada:

$$g(\mathbf{x}, u) = m_d u(u + 1) - m_g(1 - u)^2(1 + u)^2,$$

onde m_d e m_g são coeficientes que representam morte e crescimento tumoral, respectivamente.

Será estudado o caso anisotrópico com derivadas parciais de sexta ordem que influenciam o padrão de crescimento do tumor. Por exemplo, quando $a_{20} > a_{02}$ e $a_{20} > a_{11}$ há um comportamento anisotrópico, onde um crescimento diferenciado na direção X é obtido. No caso em que $a_{02} > a_{20}$ e $a_{02} > a_{11}$ o crescimento tumoral será predominante na direção Y , e no caso em que $a_{11} > a_{20}$ e $a_{11} > a_{02}$ um padrão complexo, chamado de anisotropia cruzada, que atua em ambas as direções X e Y é observado.

B.2 FORMULAÇÃO PARA O MODELO CHG

Para discretizar a equação de alta ordem de CHG foi utilizado o método dos elementos finitos mistos no espaço e o método de Euler implícito no tempo.

Antes de introduzir a formulação variacional mista para o modelo CHG, a equação (B.1) é reescrita considerando a introdução de uma nova variável v definida como $v = -\mathcal{A}u - \mathcal{B}u - \frac{1}{\epsilon}f(u)$, onde \mathcal{A} e \mathcal{B} são os operadores definidos em (B.2)-(B.3).

Desta forma o modelo CHG pode ser escrito de forma mista como segue:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Delta v + g(\mathbf{x}, u) = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$v + a_{20}\epsilon \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + a_{02}\epsilon \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} + a_{11}\epsilon \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} - a_{10}\epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a_{01}\epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1}{\epsilon}f(u) = 0. \quad (\text{B.5})$$

Adicionalmente, as seguintes variáveis são introduzidas:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = p, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = q, \quad (\text{B.6})$$

tal que

$$\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}. \quad (\text{B.7})$$

B.2.1 Formulação variacional mista

Assim, a seguinte formulação variacional é apresentada: encontrar $(u, v, p, q) \in H_{per}^1(\Omega)^4$ tal que

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, v_1\right) - (\nabla v, \nabla v_1) + \frac{1}{\epsilon}(g(\mathbf{x}, u), v_1) = 0, \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned} (v, v_2) - a_{20}\epsilon \left(\frac{\partial p}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) - a_{02}\epsilon \left(\frac{\partial q}{\partial y}, \frac{\partial v_2}{\partial y}\right) - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial q}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) \\ - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial p}{\partial y}, \frac{\partial v_2}{\partial y}\right) - a_{10}\epsilon(p, v_2) - a_{01}\epsilon(q, v_2) + \frac{1}{\epsilon}(f(u), v_2) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$(p, v_3) + \left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v_3}{\partial x}\right) = 0, \quad (\text{B.10})$$

$$(q, v_4) + \left(\frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial v_4}{\partial y}\right) = 0, \quad (\text{B.11})$$

para todo v_1, v_2, v_3, v_4 em V^h , sendo o espaço de elemento finito $V^h \in H_{per}^1$ dado por

$$V^h = \{z \in C^0(\bar{\Omega}) : z|_{\tau} \in \mathbb{P}_k(\tau), \tau \in \mathcal{T}^h, z|_{\partial\Omega} \text{ periódico}\}, \quad (\text{B.12})$$

onde \mathcal{T}^h é uma familia de elementos triangulares do domínio Ω e \mathbb{P}_k denota o conjunto de polinômios de grau menor ou igual a k . Neste trabalho é considerado aproximações lineares, isto é, $k = 1$ pra obter aproximações discretas u_h de u .

B.2.2 Discretização no tempo

Para a discretização temporal, o domínio do tempo será dividido em n passos de tempo, $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$, o qual será denotado por $\Delta t_n = \Delta t$ por simplicidade. Assim, é introduzida a discretização temporal empregando o método do Euler implícito pra a equação (B.11). O resultado do problema totalmente discretizado pelo esquema de Euler implícito é dado por:

$$\left(\frac{u^{n+1}-u^n}{\Delta t}, v_1\right) - (\nabla v^{n+1}, \nabla v_1) + \frac{1}{\epsilon}(g(\mathbf{x}, u^{n+1}), v_1) = 0, \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} (v^{n+1}, v_2) - a_{20}\epsilon \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) - a_{02}\epsilon \left(\frac{\partial q^{n+1}}{\partial y}, \frac{\partial v_2}{\partial y}\right) - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial q^{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) \\ - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y}, \frac{\partial v_2}{\partial y}\right) - a_{10}\epsilon(p^{n+1}, v_2) - a_{01}\epsilon(q^{n+1}, v_2) + \frac{1}{\epsilon}(f(u^{n+1}), v_2) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$(p^{n+1}, v_3) + \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial v_3}{\partial x}\right) = 0, \quad (\text{B.15})$$

$$(q^{n+1}, v_4) + \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y}, \frac{\partial v_4}{\partial y}\right) = 0, \quad (\text{B.16})$$

para todo v_1, v_2, v_3, v_4 em V^h .

Note que a presença do termo não linear $f(u^{n+1})$ do esquema anterior requer a solução de um sistema de equações não lineares. Neste trabalho adotamos um esquema proposto por Eyre Eyre (1998) para resolver a equação de alta ordem de Cahn-Hilliard. Este esquema é incondicionalmente estável pelo uso da separação convexa-concava do termo $f(u)$ na seguinte forma

$$f(u) = f_c(u) + f_\epsilon(u), \quad (\text{B.17})$$

onde a parte convexa $f_c(u)$ é tratada implicitamente, enquanto a parte concava $f_e(u)$ é tratada explicitamente no tempo. Cabe mencionar que esta escolha não é única, e que neste trabalho a seguinte escolha será utilizada: $f_c(u) = 2u$ e $f_e(u) = u^3 - 3u$.

No entanto, o termo fonte $g(u)$ poderia ser não linear, como é o caso deste trabalho. Assim, o seguinte passo é fazer uso do método iterativo de Picard para o tratamento do termo não linear $g(u)$. Neste contexto denota-se por u_k^{n+1} a aproximação da solução encontrada no instante de tempo t^{n+1} do passo k do método de Picard. Assim, o seguinte conjunto de equações a ser resolvido por iteração é:

$$\left(\frac{u_{k+1}^{n+1} - u^n}{\Delta t}, v_1 \right) - (\nabla v_{k+1}^{n+1}, \nabla v_1) + (g(u_k^{n+1}), v_1) = 0, \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned} (v_{k+1}^{n+1}, v_2) - a_{20}\epsilon \left(\frac{\partial p_{k+1}^{n+1}}{\partial x}, v_2 \right) - a_{02}\epsilon \left(\frac{\partial q_{k+1}^{n+1}}{\partial y}, v_2 \right) \\ - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial q_{k+1}^{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial v_2}{\partial x} \right) - \frac{a_{11}\epsilon}{2} \left(\frac{\partial p_{k+1}^{n+1}}{\partial y}, \frac{\partial v_2}{\partial y} \right) \\ - a_{10}\epsilon (p_{k+1}^{n+1}, v_2) - a_{01}\epsilon (q_{k+1}^{n+1}, v_2) \\ + \frac{1}{\epsilon} (f_c(u_{k+1}^{n+1}) + f_e(u^n, v_2)) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$$(p_{k+1}^{n+1}, v_3) + \left(\frac{\partial u_{k+1}^{n+1}}{\partial x}, \frac{\partial v_3}{\partial x} \right) = 0, \quad (\text{B.20})$$

$$(q_{k+1}^{n+1}, v_4) + \left(\frac{\partial u_{k+1}^{n+1}}{\partial y}, \frac{\partial v_4}{\partial y} \right) = 0. \quad (\text{B.21})$$

O algoritmo para obter soluções aproximadas das equações de alta ordem de CHG é descrito no Algoritmo 1.

Algorithm 1: Solução da equação de alta ordem de Cahn-Hilliard.

Input: $u^0, \Delta t, T, k_{\max}, \text{tol}$;

Output: $u^{n+1}, v^{n+1}, p^{n+1}, q^{n+1}$;

$n \leftarrow 0$;

while $n\Delta t \leq T$ **do**

$u_0^{n+1} \leftarrow u^n$;

$k \leftarrow 0$;

while $k < k_{\max}$ **do**

Find: $u_{k+1}^{n+1}, v_{k+1}^{n+1}, p_{k+1}^{n+1}, q_{k+1}^{n+1}$, in eqs. (B.18 – B.21) given u^n, u_k^{n+1} ;

if $\max |u_{k+1}^{n+1} - u_k^{n+1}| < \text{tol}$ **then** *break* ;

$k \leftarrow k + 1$;

end

$u^{n+1} \leftarrow u_{k+1}^{n+1}$;

$n \leftarrow n + 1$;

end

B.2.3 Malha adaptativa

Nesta seção é apresentado o algoritmo de malha adaptativa para a equação CHG do FreeFem++ Hecht (2012). A ideia principal é redefinir o produto escalar usado em um

gerador de malhas automático para avaliar a distância e volume, para construir elementos equiláteros de acordo com uma métrica adequada.

A adaptatividade da malha é baseada no algoritmo Delaunay-Voronoi considerando uma função distância específica para dois pontos. Assim, para uma matriz distância (ou métrica) \mathcal{M} a distância associada $d(x, y)$ é dada por

$$d(x, y) = \|x - y\|, \quad \text{onde} \quad \|x\|^2 = x^T M x. \quad (\text{B.22})$$

Além disso, o comprimento $l_{\mathcal{M}}$ da curva $\gamma \in]0, 1[$ com relação a \mathcal{M} é dado por:

$$l_{\mathcal{M}} = \int_0^1 \sqrt{\gamma'(t) \mathcal{M}(\gamma(t)) \gamma'(t)} dt. \quad (\text{B.23})$$

Existem algumas opções para calcular \mathcal{M} , como discutido em Hecht (2012). Neste trabalho o produto é escalar baseado na avaliação da Hessiana na variável u do problema. Para elementos finitos contínuos P_1 a seguinte métrica foi adotada:

$$l_{\mathcal{M}} = \frac{1}{err} |\partial_h^2 u_h|, \quad (\text{B.24})$$

onde $|\partial_h^2 u_h| = \sqrt{(|\partial_h^2 u_h|)^2}$ e $\partial_h^2 u_h$ é uma aproximação da matriz Hessiana em u_h , a qual é realizada automaticamente pelo **FreeFem++** e pelo algoritmo adaptativo implementado na função **adaptmesh**. Um exemplo de utilização desta função é dado a seguir:

```
Th = adaptmesh(Th, u, hmin=0.0001, hmax=0.05, nbvx=22e5,
periodic=[[1,x],[3,x],[2,y],[4,y]]),
```

onde **Th** é a malha de elementos finitos; **u** é a variável de interesse; **hmin** é o comprimento mínimo da aresta; **hmax** é o comprimento máximo da aresta; **nbvx** é o número máximo de vértices e **periodic** define as condições de contorno periódica que serão usadas no problema.

B.2.4 Experimentos computacionais

Apresenta-se aqui resultados de experimentos numéricos do modelo de Cahn-Hilliard generalizado conforme descrito pela equação (B.1). Inicialmente serão apresentados simulações computacionais conforme os exemplos apresentados por Cherfils et al. (2017). Em seguida, a estratégia de adaptatividade espacial será explorada e analisada em termos de desempenho computacional.

B.2.4.1 Experimentos preliminares

Os experimentos numéricos consideram uma fonte de massa (termo de proliferação) para o crescimento do tumor. A equação (B.1) foi considerada com o seguinte conjunto de

parâmetros:

$$\Omega = (-0.7, 1.7) \times (-1.7, 0.7), \quad \Delta t = 1 \times 10^{-6}, \quad \epsilon = 0.0125, \quad (\text{B.25})$$

$$f(u) = u^3 - u, \quad g(x, u) = 46u(1 + u) + 280(u - 1)^2(u + 1)^2, \quad (\text{B.26})$$

e a seguinte condição inicial

$$u_0(x, y, 0) = -\tanh\left(\frac{1}{\sqrt{2}\epsilon}\left(\sqrt{2(x - 0.5)^2 + 0.25(y + 0.5)^2} - 0.1\right)\right), \quad (\text{B.27})$$

a qual prescreve uma massa inicial de tumor no centro do domínio. A Tabela 4 apresenta um resumo dos valores dos parâmetros utilizados nas simulações que serão apresentadas a seguir.

Tabela 4 – Parâmetros usados nas simulações.

Caso	a_{20}	a_{02}	a_{11}	a_{10}	a_{01}
Cahn-Hilliard	0	0	0	1	1
direção x	1.8×10^{-5}	5.0×10^{-6}	5.0×10^{-6}	1	1
direção y	5.0×10^{-6}	1.8×10^{-5}	5.0×10^{-6}	1	1
cruzado	5.0×10^{-6}	5.0×10^{-6}	1.8×10^{-5}	1	1

B.2.4.2 Comparação com malha fixa

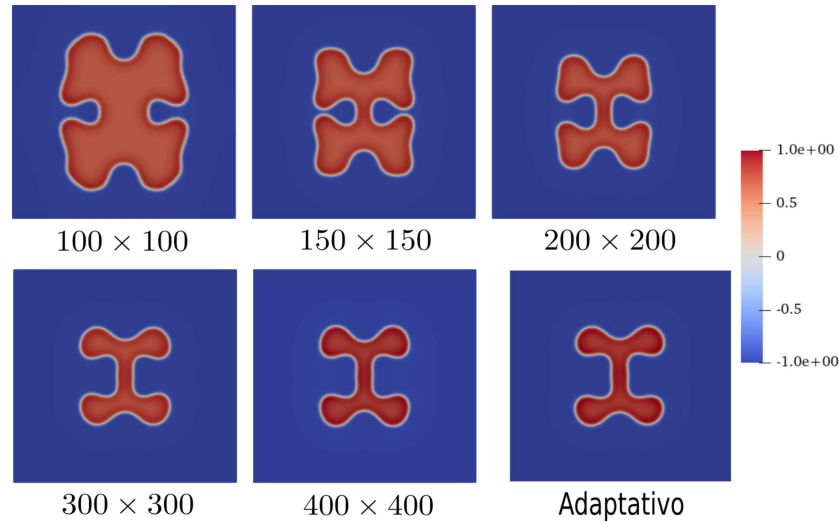
Uma comparação da solução numérica do modelo de Cahn-Hilliard Generalizado entre os casos utilizando malha fixa e adaptividade espacial foi realizada. Os casos analisados foram para anisotropia na direção X , Y e cruzada.

Primeiramente apresentamos os resultados para o caso anisotrópico cruzado, conforme descrito na Tabela 4, comparando a dinâmica da solução entre casos de malha fixa e adaptativa. Malhas triangulares fixas foram criadas subdividindo o domínio quadrado usando $(N_x + 1) \times (N_y + 1)$ nós em cada direção, resultando em uma malha de elementos finitos estruturada composta de um total de $N_x \times N_y \times 2$ elementos. Por exemplo, no caso de $N_x = N_y = 300$, para facilitar a notação, os casos de malha fixa serão simplesmente referidos como 300×300 . As soluções de malhas fixas consideradas nos experimentos foram: 100×100 , 150×150 , 200×200 , 300×300 e 400×400 . Nos dois últimos casos, as discretizações resultaram em um total de 180000 e 320000 elementos triangulares, respectivamente.

A Figura 20 mostra o gráfico de contorno da solução u com malhas uniformes fixas e malha adaptativa. Observamos que a malha adaptativa assume o mesmo padrão da solução correspondente à malha fixa (para os casos 300×300 e 400×400 elementos triangulares).

O perfil das soluções obtidas com diferentes discretizações e malha adaptativa é comparado através de uma linha diagonal no domínio a partir de dos pontos $(-0.7, -1.7)$

Figura 24 – Comparação da solução u no instante de tempo $t = 1.3 \times 10^{-2}$ utilizando malha fixa com 100×100 , 150×150 , 200×200 , 300×300 e 400×400 nós e uma malha adaptativa para o caso da anisotropia cruzada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

a $(1.7, 0.7)$. Os resultados são apresentados na Figura 21 e mostram que discretizações grosseiras, até o caso 250×250 , não capturam corretamente o padrão gerado, enquanto as malhas refinadas a partir de 300×300 parecem convergir para a mesma solução. Portanto, consideramos a malha fixa de 300×300 elementos triangulares como um caso de referência. Nesse cenário, em termos de desempenho computacional seria necessário utilizar, pelo menos, um total de 180000 triângulos para o caso de malha fixa de referência, enquanto que para a malha adaptativa não foi usado mais do que um máximo de 45000 triângulos.

B.2.5 Efeitos da anisotropia

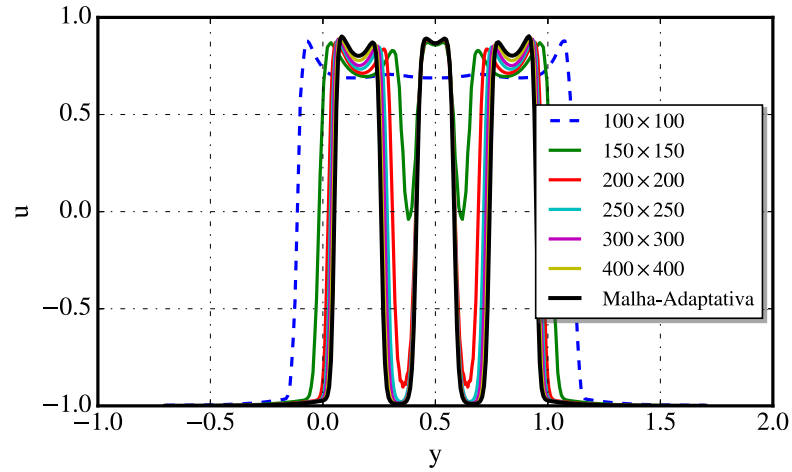
O efeito dos parâmetros da Tabela 4 no padrão obtido pela simulação é apresentado a seguir considerando os casos: X , Y e cruzado.

Com coeficientes muito pequenos para os termos de sexta ordem a_{20} , a_{02} e a_{11} , o crescimento do tumor evolui de forma semelhante, mas com algum diferenciamento no comportamento relativo às direções X e Y , além do caso cruzado. O comportamento de cada um dos casos pode ser observado nas Figuras 22, 23 e 24, respectivamente.

Com relação ao caso anisotrópico com um valor maior para a_{20} (denominado direção- X), podemos notar que a massa tumoral primeiro se alonga na direção X e depois cresce em uma estrutura mais complicada à medida que o tempo evolui, como mostra a Figura 22.

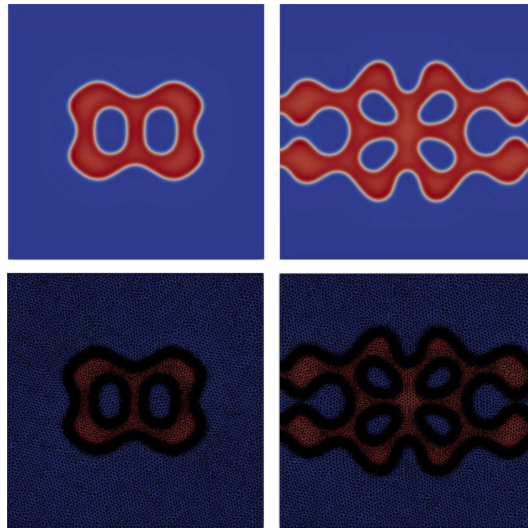
Analogamente para os casos anisotrópicos com comportamento diferenciado na direção Y (e na direção cruzada), a massa tumoral primeiro se alonga na direção Y (e na

Figura 25 – Comparação das soluções em uma linha diagonal no domínio para os diferentes casos de malha fixa e a estratégia de malha adaptativa.



Fonte: Elaborado pelo autor.

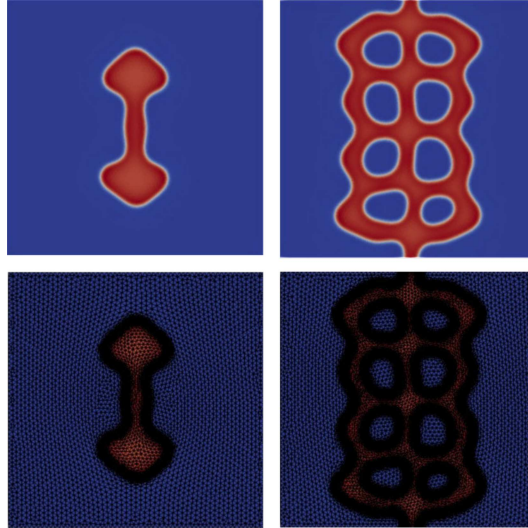
Figura 26 – Solução do caso anisotrópico na direção X com 22592 elementos triangulares, para os instantes de tempos $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente. Os mapas de cores apresentam u variando de -1 (azul) a 1 (vermelho).



Fonte: Elaborado pelo autor.

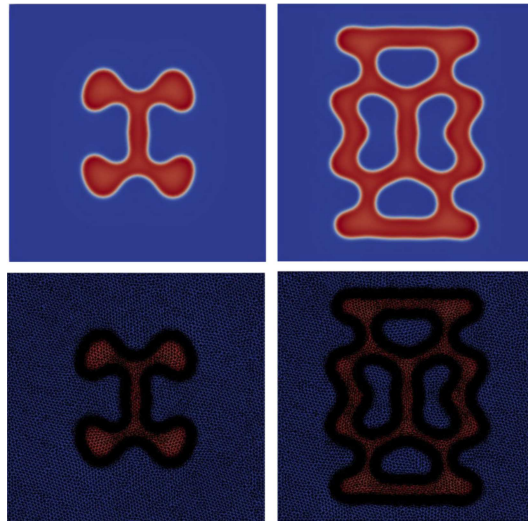
direção cruzado) e, então, cresce em um padrão mais complicado. Os resultados mostram que o comportamento anisotrópico é fortemente influenciado pela escolha dos coeficientes dos termos de ordem superior: a_{20} , a_{02} e a_{11} .

Figura 27 – Solução do caso anisotrópico na direção Y com 20482 elementos triangulares, para os instantes de tempo $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente. Os mapas de cores apresentam u variando de -1 (azul) a 1 (vermelho).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 28 – Solução do caso anisotrópico *cruzado* com 29750 elementos triangulares, para os instantes de tempo $t = 1,5 \times 10^{-2}$ e $t = 2,5 \times 10^{-2}$, respectivamente. Os mapas de cores apresentam u variando de -1 (azul) a 1 (vermelho).



Fonte: Elaborado pelo autor.

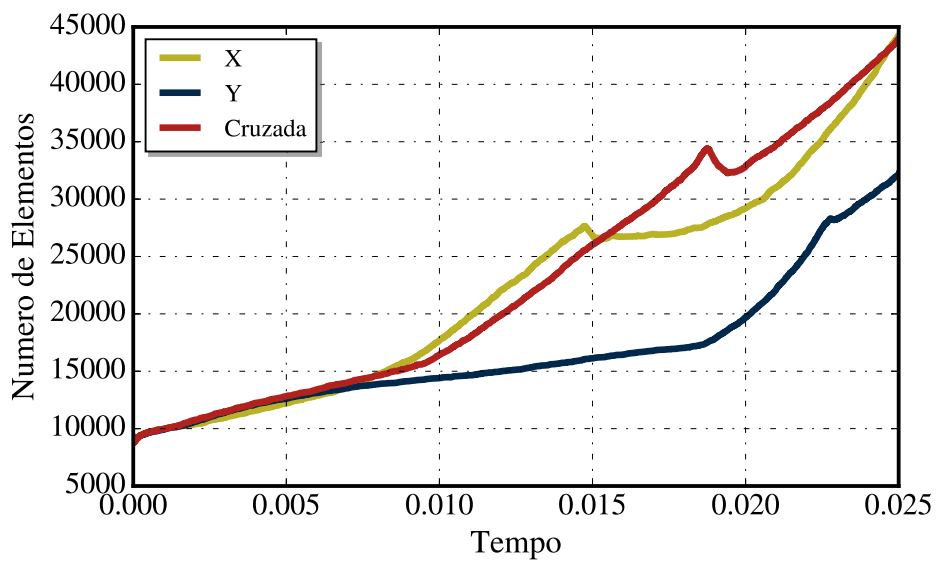
B.2.6 Desempenho computacional

Considerando o esquema de malha adaptativa com $h_{\min} = 0.0001$ e $h_{\max} = 0.05$ e começando com uma malha inicial de $100 \times 100 \times 2$ elementos triangulares, o desempenho computacional durante toda a simulação da dinâmica de crescimento do tumor foi estudado

para o caso anisotrópico até $t = 2,5 \times 10^{-2}$. Como métrica do desempenho computacional considerou-se o número de elementos.

A Figura 25 mostra o número de elementos triangulares usados no algoritmo de malha adaptativa para cada instante de tempo da simulação numérica para os casos anisotrópicos considerados, os quais foram detalhados na Tabela 4.

Figura 29 – Número de elementos triangulares para a simulação de malha adaptativa em função do tempo de simulação para os casos anisotrópicos nas direções X , Y e cruzada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Finalmente, ao comparar o esquema de malha adaptativa com o esquema de malha fixa com elementos triangulares de $300 \times 300 \times 2$, cujo perfil da solução foi exibido na Figura 21, percebe-se claramente que o esquema de malha adaptativa foi mais eficiente em termos de recursos computacionais. Em particular o esquema adaptativo sempre usou menos elementos, não ultrapassando 45000 elementos triangulares, enquanto o esquema de malha fixa utilizou 180000 elementos.

APÊNDICE C – DEDUÇÃO DO MODELO CHD

A seguir o modelo de campo de fase é utilizado para se obter o sistema de equações (2.33), conforme descrito por Garcke et al. (2016). A teoria da mistura será utilizada para obter a descrição da evolução do tumor e das células saudáveis em um sistema isotérmico. Além disso, uma espécie química representando os nutrientes será considerada, a qual é consumida apenas por células tumorais, permitindo o seu crescimento.

O efeito de quimiotaxia, que representa um crescimento ativo do tumor em direção a maior quantidade de concentração de nutrientes será considerado. Assim, um modelo de campo de fase envolve a energia potencial do sistema, descrita pela massa relativa das misturas e sua primeira derivada.

Considere uma mistura de componentes que consiste de células saudáveis e células tumorais, as quais serão identificadas, respectivamente, por $i = 1$ e $i = 2$. Seja ρ_i a densidade de massa da componente i por volume da mistura, e seja $\bar{\rho}_i$ a densidade de massa para cada componente i da mistura. Assim a fração de volume do componente i é definida por:

$$u_i = \frac{\rho_i}{\bar{\rho}_i}, \quad i = 1, 2. \quad (\text{C.1})$$

Estas funções representam a densidade de volume relativa de cada componente no domínio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ e, portanto, $u_i \in [0, 1]$, o que implica que $\rho_i \in [0, \bar{\rho}_i]$, para $i = 1, 2$.

Outras hipóteses devem ser consideradas como, por exemplo, a de que o sistema é isolado, isto é, todo o volume é dado pela soma dos volumes das componentes da mistura, implicando em $u_1 + u_2 = 1$. Além disso, a transferência de massa entre os componentes é levada em consideração neste modelo, células saudáveis são transformadas em células tumorais, e as células tumorais são substituídas em células saudáveis quando as células tumorais morrem por apoptose. Assim, a massa total dos componentes é definida como:

$$\rho = \rho_1 + \rho_2. \quad (\text{C.2})$$

Os nutrientes são descritos como espécies químicas e sua concentração relativa no domínio Ω é representada por $\sigma : \Omega \rightarrow [0, 1]$. A velocidade adimensional de cada componente i é dada por \mathbf{v}_i , e assim a velocidade média do volume da mistura é:

$$\mathbf{v} = u_1 \mathbf{v}_1 + u_2 \mathbf{v}_2. \quad (\text{C.3})$$

A partir da teoria da mistura, a equação de equilíbrio é igual à taxa de variação de massa de um componente e a transferência de massa de outros componentes para este. Isto é

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) = \Gamma_i, \quad i = 1, 2, \quad (\text{C.4})$$

onde Γ_i , para $i = 1, 2$ é um termo fonte para cada componente descrevendo a troca de massa do componente $(3 - i)$ para o componente i . A equação da lei do balanço para os nutrientes é dada por

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_\sigma = -S, \quad (\text{C.5})$$

onde \mathbf{J}_σ é definido pelo fluxo dos nutrientes e permite descrever a difusão dos nutrientes e o efeito da quimiotaxia, que define a atração das células tumorais pelos nutrientes e vice-versa; o termo S representa uma fonte para os nutrientes. Logo, da equação (C.4) para ρ_i constante, e da equação (C.1), tem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\Gamma_1}{\bar{\rho}_1} + \frac{\Gamma_2}{\bar{\rho}_2} = \Gamma_{\mathbf{v}}. \quad (\text{C.6})$$

Para as células tumorais e saudáveis define-se uma função u como a diferença de fração volumétrica de ambos componentes, isto é,

$$u = u_2 - u_1, \quad (\text{C.7})$$

tal que $u \in [-1, 1]$, note que $u = 1$ representa uma região do tumor, enquanto $u = -1$ representa uma região de células saudáveis. Aplicando a definição de u e a equação (C.2) à equação (C.4), obtém-se a equação de equilíbrio para a diferença na fração volumétrica de ambas fases:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\Gamma_2}{\bar{\rho}_2} - \frac{\Gamma_1}{\bar{\rho}_1} = \Gamma_u \quad (\text{C.8})$$

onde $\mathbf{J} = -u_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}) + u_2(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v})$ é definido como o fluxo da função u . Em um modelo de campo de fase, o sistema visa minimizar a energia emergente da interação entre as fases e da interface, juntamente com as leis de equilíbrio para a massa do tumor e células saudáveis.

A densidade de energia do sistema proposta por Garcke et al. (2016) tem a seguinte forma:

$$e(u, \nabla u, \sigma) = f(u, \nabla u) + N(u, \sigma) \quad (\text{C.9})$$

onde a função f determina a energia interfacial e N descreve a energia emergente das interações entre o tecido tumoral e os nutrientes. A função f controla a interface definindo a separação entre os componentes e é definida como

$$f(u, \nabla \phi) = \beta \left(\frac{1}{\epsilon} \psi(u) + \frac{\epsilon}{2} |\nabla u|^2 \right), \quad (\text{C.10})$$

onde $\beta > 0$, e $\epsilon > 0$ é um termo muito pequeno diretamente proporcional à largura da interface. A função $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ define o potencial do sistema com mínimos iguais a $\psi(\pm 1) = 0$, idealmente forçando a mistura a se separar em fases, ou seja $|u(x)| = 1$ para

$\mathbf{x} \in \Omega$, exceto no subdomínio da interface. Assim como para o modelo CH, neste trabalho será considerado aqui o potencial de poço-duplo dado por:

$$\psi(u) = \frac{1}{4}(1 - u^2)^2 \quad (\text{C.11})$$

Por outro lado, a função $N(u, \sigma)$ na equação (C.9) representa a energia emergente das interações entre os tecidos tumorais e os nutrientes. Além disso, este termo controla o comportamento de quimiotaxia das células. Será utilizada a notação $N_{,\sigma}$ e $N_{,u}$ para denotar as derivadas parciais de N com relação a σ e u , respectivamente.

Para deduzir o modelo de interface difusa, a segunda lei da termodinâmica em situações isotérmicas será utilizada. Esta lei estipula que a entropia do sistema aumenta até atingir um limite superior. Esta lei é aplicada ao modelo em termos de densidade de energia do sistema, afirmando que a taxa de energia mais o trabalho útil em qualquer parte do sistema deve ser menor ou igual a zero Gurtin et al. (2010). Logo, para qualquer volume da mistura $V(t) \subseteq \Omega$ movendo-se pela velocidade do fluido, tem-se a seguinte desigualdade:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} e dx \leq - \int_{\partial V(t)} \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{n} dS + \int_{V(t)} (c_u \Gamma_u + c_v \Gamma_v - c_s S) dx \quad (\text{C.12})$$

onde o termo \mathbf{J}_e é um fluxo de energia, S é o termo fonte para os nutrientes, c_u , c_v e c_s são constantes e ainda Γ_v e Γ_u são definidos pelas equações (C.6) e (C.8), respectivamente. Utilizando o teorema da divergência e o teorema do transporte de Reynolds, a equação (C.12) toma a seguinte forma local:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_e - c_\phi \Gamma_u - c_v \Gamma_v + c_s S \leq 0. \quad (\text{C.13})$$

Neste ponto, no desenvolvimento do modelo, aplica-se o método do multiplicador de Lagrange para resolver a equação (C.13) sob as restrições dadas pelas equações (C.5), (C.6), e (C.8). Dadas as funções multiplicadores de Lagrange λ_v , λ_σ e λ_ϕ a seguinte inequação é obtida

$$\left\{ \begin{array}{l} -\mathcal{D} = \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_e - c_\phi \Gamma_u - c_v \Gamma_v + c_s S \\ -\lambda_v (\nabla \cdot \mathbf{v} - \Gamma_v) \\ -\lambda_\sigma \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_\sigma + S \right) \\ -\lambda_u \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u\mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{J} - \Gamma_u \right) \leq 0 \end{array} \right. \quad (\text{C.14})$$

Em seguida é preciso considerar hipóteses constitutivas sobre os parâmetros do modelo, a fim de respeitar a desigualdade Lagrangeana da equação (C.14), ou seja, postulam-se definições explícitas dos fluxos \mathbf{J} , \mathbf{J}_σ e \mathbf{J}_e , das constantes de energia c_u , c_v e c_s e dos multiplicadores de Lagrange λ_v , λ_σ e λ_u .

O modelo de crescimento tumoral proposto por Garcke et al. (2016), oriundo destas últimas hipóteses, considerando condições de contorno de Neumann homogênea para a função u e a função do potencial químico w , é o seguinte:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \Gamma_{\mathbf{v}}, \quad (\text{C.15})$$

$$\mathbf{v} = -\mathbb{K}(\nabla p + (N_{,u} - w)\nabla u), \quad (\text{C.16})$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}u) = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w) + \Gamma_u, \quad (\text{C.17})$$

$$w = \frac{\beta}{\epsilon}\psi'(u) - \beta\epsilon\Delta u + N_{,u}, \quad (\text{C.18})$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma\mathbf{v}) = \nabla \cdot (n(u)\nabla N_{,\sigma}) - S, \quad (\text{C.19})$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (\text{C.20})$$

Diferentes condições de contorno podem ser aplicadas para os nutrientes. Este modelo assumiu nenhum excesso de massa total, o que significa que a quantidade ρ é constante ao longo do tempo, em particular, isso significa que os termos de origem Γ_i , $i = 1, 2$ se cancelam na equação (C.4). Logo, obtém-se que $\Gamma_2 = -\Gamma_1 = \Gamma$. Assim, pode-se redefinir

$$\Gamma_{\mathbf{v}} = \alpha\Gamma, \quad \Gamma_{\phi} = \bar{\rho}_s\Gamma, \quad (\text{C.21})$$

com $\alpha = \frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1}$ e $\bar{\rho}_s = \frac{1}{\rho_2} + \frac{1}{\rho_1}$. A partir dessas especificações, obtém-se o seguinte sistema de equações do crescimento tumoral dado por Garcke et al. (2016):

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{v} = \alpha\Gamma, \\ \mathbf{v} = -\mathbb{K}(\nabla p - w\nabla u - \mathcal{X}_u\sigma\nabla u), \\ \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}u) = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u)\nabla w) + \bar{\rho}_s\Gamma, \\ w = \frac{\beta}{\epsilon}\psi'(u) - \beta\epsilon\Delta u - \mathcal{X}_u\sigma, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma\mathbf{v}) = \nabla \cdot (n(u)(\mathcal{X}_{\sigma}\nabla\sigma - \mathcal{X}_u\nabla u)) - \mathcal{C}\sigma h(u), \\ \Gamma = (\mathcal{P}_f\sigma - \mathcal{A})h(u), \\ \nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0 \\ \sigma = \sigma_{\beta}, \end{array} \right. \quad (\text{C.22})$$