

Formulações de Elementos Finitos H^1 -Conformes para Problemas de Poisson em Grafos

Breno Ceconello¹

Programa de Doutorado em Matemática Aplicada - IMECC/Unicamp, Campinas, SP

Maicon R. Correa², Sônia M. Gomes³

Departamento de Matemática Aplicada - IMECC/Unicamp, Campinas, SP

Resumo. Este artigo apresenta formulações de elementos finitos H^1 -conformes para resolver o problema de Poisson em grafos em \mathbb{R}^2 representados por vértices e arestas parametrizadas, com operadores diferenciais e espaços funcionais adequados. Espaços de elementos finitos são construídos localmente em cada aresta, com funções lineares por partes e acoplamento nodal nos vértices, preservando a continuidade global no domínio. Experimentos numéricos mostram convergência ótima, com ordem 2 na norma de L^2 e ordem 1 na norma de H^1 no grafo.

Palavras-chave. Elementos Finitos, Grafos, Análise Numérica, Problema de Poisson

1 Introdução

A modelagem matemática em grafos é uma ferramenta essencial para simular sistemas complexos em ciência e engenharia. Grafos, compostos por vértices e arestas [6], permitem representar redes de forma simplificada, facilitando a análise de fenômenos interconectados. Entre as aplicações destacam-se a simulação de sistemas biológicos [3, 5, 8, 9] e o estudo de fluxos em fraturas geológicas [11]. Tais problemas frequentemente envolvem a solução de equações diferenciais parciais (EDPs) em grafos, exigindo adaptações de métodos numéricos tradicionais para essas estruturas.

Neste texto, focamos no desenvolvimento de uma estrutura de elementos finitos para a solução do problema de Poisson em grafos, uma EDP fundamental que surge em contextos físicos variados, e a solução dessa equação em grafos requer adaptação de métodos numéricos para domínios unidimensionais, com uma complexidade a mais imposta pela estrutura de rede.

2 O Problema de Poisson em Grafos

Conforme descrito em [6], consideramos um grafo $G = (V, E)$ composto por m vértices e n arestas, conforme representação geométrica espacial $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^2$ ilustrada na Figura 1. A cada vértice v_j se associa um ponto no espaço $v_j = (x_j, y_j)$, e a cada aresta e_i se associa um segmento de reta Λ_i parametrizado por comprimento de arco. Ou seja, $\mathcal{G} = \mathcal{E} \cup \mathcal{V} = (\bigcup_{i=1}^n \Lambda_i) \cup \left(\bigcup_{j=1}^m v_j \right)$. Adotamos também a notação $\partial\mathcal{V}$ para os vértices externos do grafo e por \mathcal{I} os vértices internos. Para estruturar o problema de Poisson, necessitamos de conceitos de cálculo diferencial e integral em grafos, extraídos das referências [2, 4, 6, 7, 10]. Inicialmente, seja $\tilde{\Lambda}_i = (0, L_i)$ um domínio de parametrização da aresta Λ_i , em que L_i é o comprimento de Λ_i . A aresta é, portanto, parametrizada

¹b194859@dac.unicamp.br

²maicon@ime.unicamp.br

³soniag@unicamp.br

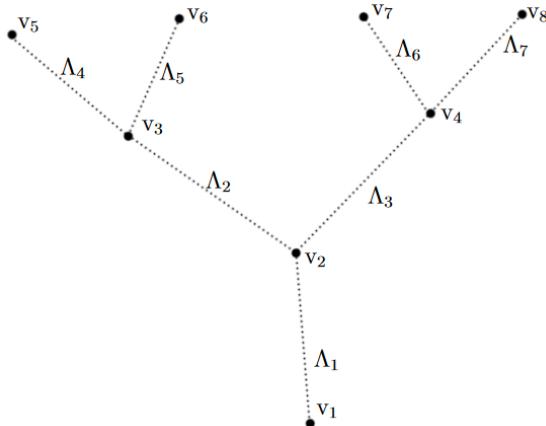


Figura 1: Ilustração de um grafo de 8 vértices. Fonte: [4]

por um mapeamento afim $F_{\Lambda_i} : \tilde{\Lambda}_i \rightarrow \Lambda_i$, cuja matriz jacobiana \mathbf{J}_{F_i} , no caso da parametrização adotada, trata-se de um vetor coluna unitário constante.

A estrutura de funções escalares $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ tem duas componentes, $\phi|_{\Lambda_i} = \phi_i$ sobre as arestas e ϕ_{v_j} sobre os vértices. As componentes sobre as arestas $\phi_i : \Lambda_i \rightarrow \mathbb{R}$ são definidas por $\phi_i(\mathbf{x}) = \check{\phi}_i(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x}))$, em que $\check{\phi}_i : \tilde{\Lambda}_i \rightarrow \mathbb{R}$. Dizemos que uma função $\phi : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R}$ é contínua ($\phi \in C^0(\mathcal{G})$) se ϕ_i é contínua em cada aresta Λ_i e se, para cada vértice v_j conectado a essa aresta, temos que $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow v_j} \phi_i(\mathbf{x}) = \phi_{v_j}(x_j, v_j)$. No caso em que as funções $\check{\phi}_i$ são diferenciáveis, podemos definir o gradiente $\nabla_{\mathcal{G}}\phi$ por partes nas arestas da seguinte forma $\nabla_{\mathcal{G}}\phi|_{\Lambda_i} = \mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}}\check{\phi}'_i(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x}))$.

Tomando $\check{\theta} : \tilde{\Lambda}_i \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável, definimos, em Λ_i , uma função vetorial associada através do mapeamento de Piola $\boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}) = \check{\theta}(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x}))\mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}}$ cujo divergente é dado pela seguinte relação:

$$\operatorname{div}_{\mathcal{G}} \boldsymbol{\theta} = \begin{cases} \check{\theta}'_i(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x})), & \text{em } \Lambda_i \subset \mathcal{E} \\ \llbracket \boldsymbol{\theta} \rrbracket_j, & \text{em } v_j \in \mathcal{V} \end{cases}, \quad (1)$$

sendo $\llbracket \boldsymbol{\theta} \rrbracket_j$ o salto generalizado de $\boldsymbol{\theta}$ no vértice v_j conforme definido em [4]. Por fim, o problema de Poisson em grafos pode ser enunciado como:

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

$$-\operatorname{div}_{\mathcal{G}}(\kappa \nabla_{\mathcal{G}}\phi) = f, \quad \text{em } \mathcal{G}, \quad (2a)$$

$$\phi = 0, \quad \text{sobre } \Pi_D, \quad (2b)$$

$$\kappa \nabla_{\mathcal{G}}\phi \cdot \mathbf{n} = \theta_N, \quad \text{sobre } \Pi_N, \quad (2c)$$

em que Π_D e Π_N formam uma partição disjunta do conjunto $\partial\mathcal{V}$, onde são impostas as condições de fronteira de Dirichlet (homogênea) e Neumann (não homogênea, dada pela função θ_N). A função κ é limitada e estritamente positiva, e é utilizada para introduzir características físicas do meio. A função f é um termo de fonte, e deve satisfazer $f(v_j) = 0 \forall v_j \in \mathcal{I}$ para fins de conservação. O vetor \mathbf{n} , definido em cada vértice externo do grafo, corresponde à extensão do campo vetorial tangente à aresta neste vértice, apontando para fora.

3 Espaços Funcionais e Problema Variacional

Para definir os espaços funcionais, seguindo as referências [4, 7], definimos a integral de uma função $\phi_i = \check{\phi}_i(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x}))$ definida sobre uma aresta qualquer Λ_i da seguinte maneira:

$$\int_{\Lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\check{\Lambda}} \check{\phi}(\xi) \mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}}^T \mathbf{J}_{F_{\Lambda_i}} \, d\xi = \int_0^{L_i} \check{\phi}(\xi) \, d\xi \quad (3)$$

A partir disso, podemos definir alguns espaços funcionais de Hilbert no domínio:

$$L^2(\mathcal{E}) = \left\{ \phi \text{ tal que } \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R} : \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \int_{\Lambda_i} \phi \, d\mathbf{x} < \infty \right\} \quad (4a)$$

$$L^2(\mathcal{G}) = \left\{ \phi \text{ tal que } \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{R} : \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \int_{\Lambda_i} \phi \, d\mathbf{x} + \sum_{v_j \in \mathcal{V}} \phi(v_j) < \infty \right\} \quad (4b)$$

$$H^1(\mathcal{E}) = \{ \phi \in L^2(\mathcal{E}) \text{ tal que } \nabla_{\mathcal{G}} \phi \in [L^2(\mathcal{E})]^2 \} \quad (4c)$$

$$H^1(\mathcal{G}) = H^1(\mathcal{E}) \cap C^0(\mathcal{G}) \quad (4d)$$

Esperando encontrar uma solução do problema de Poisson (2) no espaço

$$H_{0,\Pi_D}^1(\mathcal{G}) = \{ \psi \in H^1(\mathcal{G}) \text{ tal que } \psi|_{\Pi_D} = 0 \},$$

multiplicamos ambos os lados da equação (2a) por funções testes arbitrárias $\psi \in H_{0,\Pi_D}^1(\mathcal{G})$ e integramos por partes, obtendo o problema variacional associado:

Encontrar $\phi \in \mathcal{U} = H_{0,\Pi_D}^1(\mathcal{G})$ tal que

$$\mathcal{A}(\phi, \psi) = \mathcal{L}(\psi) \quad \forall \psi \in \mathcal{U} \quad (5)$$

em que

$$\mathcal{A}(\phi, \psi) = \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \int_{\Lambda_i} \kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi \cdot \nabla_{\mathcal{G}} \psi \, d\mathbf{x}, \text{ e } \mathcal{L}(\psi) = \sum_{\Lambda_i \in \mathcal{E}} \int_{\Lambda_i} \psi f \, d\mathbf{x} + \sum_{v_j \in \Pi_N} \theta_N(v_j) \psi(v_j).$$

4 Elementos Finitos em Grafos

A construção de espaços de elementos finitos H^1 -conformes em grafos \mathcal{G} segue a abordagem proposta em [1, 7], estruturada em três etapas fundamentais. Sobre cada aresta Λ_i , definimos uma partição \mathcal{T}_i mapeada a partir de uma partição uniforme $\check{\mathcal{T}}_i = \{\check{K}\}$ do intervalo de parametrização. Desta forma, definem-se os espaços de elementos finitos

$$\mathcal{U}_{1,\check{\Lambda}_i} = \{ \check{\phi}_i \in H^1(\check{\Lambda}_i) : \check{\phi}_i|_K \in P_1(K), \forall K \in \check{\mathcal{T}}_i \}. \quad (6)$$

Subsequentemente, transportamos estes espaços para as arestas Λ_i do grafo:

$$\mathcal{U}_{h,1,\Lambda_i} = \{ \phi_i(\mathbf{x}) = \check{\phi}_i(F_{\Lambda_i}^{-1}(\mathbf{x})) : \check{\phi}_i \in \mathcal{U}_{1,\check{\Lambda}_i} \}. \quad (7)$$

O parâmetro h representa o diâmetro máximo dos elementos das malhas \mathcal{T}_i . O espaço de elementos finitos em todo o grafo \mathcal{G} surge do acoplamento consistente dos espaços locais:

$$\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}} = \{ \psi \in H_{0,\Pi_D}^1(\mathcal{G}) : \psi|_{\Lambda_i} \in \mathcal{U}_{h,1,\Lambda_i}, \forall \Lambda_i \in \mathcal{G} \}. \quad (8)$$

Uma base global $\mathcal{B}_{h,1,\mathcal{G}} = \{ \Psi_j \}$ para o espaço $\mathcal{U}_{h,1,\mathcal{G}}$ é construída através do acoplamento de bases locais em cada aresta, gerando funções do tipo “chapéu”, como ilustrado na Figura 2.

Sendo assim, utilizando a representação da solução aproximada nesta base $u_h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_h} c_j \Psi_j(\mathbf{x})$ e utilizando funções testes $\psi = \Psi_i$ obtemos o sistema linear $\mathbf{A}_{\mathcal{G}} \mathbf{c} = \mathbf{L}_{\mathcal{G}}$ através do processo padrão de montagem em elementos finitos.

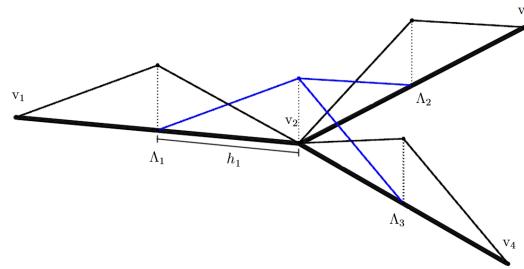


Figura 2: Bases locais do espaço $\mathcal{U}_{h,k,g}$ em um grafo simples de três arestas. Fonte: [4]

5 Experimentos Numéricos

Utilizando os espaços de aproximação da seção anterior, simulamos dois testes numéricos.

Teste 1: Histórico de convergência do método. Para o grafo em formato de “Y” da Figura 2, com quatro vértices $\mathcal{V} = \{v_1 = (0, 0), v_2 = (1, 0), v_3 = (1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}), v_4 = (1 + \frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})\}$ e três arestas $\mathcal{E} = \{\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3\}$, tomamos o problema de Poisson conforme descrito anteriormente, com $\kappa \equiv 1$ e uma solução analítica

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sin\left(\frac{\pi}{2}\xi\right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_1, \\ \sin\left(\frac{\pi}{2}(\xi + 1)\right) \circ \mathbf{F}_\Lambda^{-1}(\mathbf{x}), & \text{se } \mathbf{x} \in \Lambda = \Lambda_2, \Lambda_3 \end{cases} \quad (9)$$

O termo de fonte do problema é $f(\mathbf{x}) = -\operatorname{div}_{\mathcal{G}}(\kappa \nabla_{\mathcal{G}} \phi(\mathbf{x}))$, a condição de contorno de Dirichlet homogênea é imposta em $\Pi_D = v_1$ e a condição de Neumann não homogênea correspondente a $\nabla_{\mathcal{G}} \phi$ é imposta em $\Pi_N = \{v_3, v_4\}$. Em cada teste realizado, alteramos o número $N = 2^i$ ($i = 3, 4, 5, 6, 7$) de elementos por aresta. Os erros obtidos nas normas de $L^2(\mathcal{E})$ e de $H^1(\mathcal{G})$, assim como a ordem de convergência numérica verificada, se encontram na Tabela 1. Vemos que há uma convergência linear na norma do espaço $H^1(\mathcal{G})$, e quadrática na norma do espaço $L^2(\mathcal{E})$. Essa ordem de convergência é análoga à ordem obtida em resultados de elementos finitos para domínios tradicionais.

Tabela 1: Teste 1 - Histórico de convergência da solução aproximada.

N	$\ \phi - \phi_h\ _{L^2(\mathcal{E})}$	Ordem	$\ \phi - \phi_h\ _{H^1(\mathcal{G})}$	Ordem
8	2.4865×10^{-3}	—	3.1556×10^{-2}	—
16	6.2201×10^{-4}	2.00	1.5749×10^{-2}	1.00
32	1.5553×10^{-4}	2.00	7.8709×10^{-3}	1.00
64	3.8884×10^{-5}	2.00	3.9350×10^{-3}	1.00
128	9.7210×10^{-6}	2.00	1.9674×10^{-3}	1.00

Teste 2: Experimento qualitativo de conservação de fluxo. Utilizamos um grafo mais complexo com 16 vértices, representado na Figura 3. Nele, impomos uma condição de Neumann não homogênea no vértice $v_1 = (-0.5, 0.5)$ correspondente a uma entrada de fluxo $\sigma = -\nabla_{\mathcal{G}}\phi = 1$. Nos demais vértices de $\partial\mathcal{V}$, impõe-se condição de contorno de Dirichlet homogênea. Ademais, mantemos $\kappa \equiv 1$ e impomos $f = 0$. O objetivo desse experimento é verificar o comportamento de uma solução ao

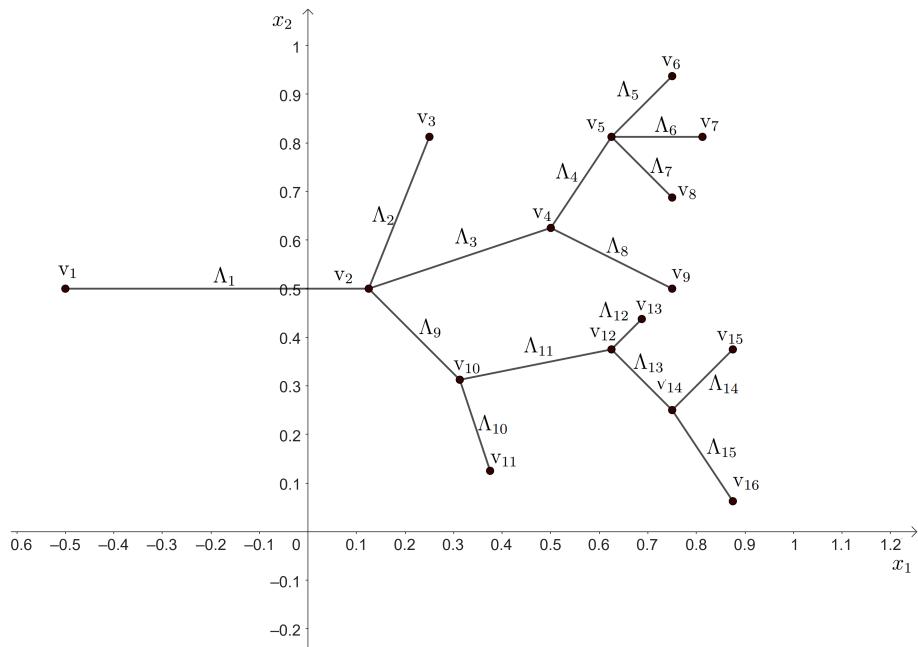


Figura 3: Teste 2 - Representação geométrica do grafo utilizado. Fonte: [4].

impor entrada de massa através de um fluxo unitário. O objetivo é observar se o somatório dos fluxos de saída é o mesmo que o fluxo de entrada, indicando uma noção de conservação no método.

A solução aproximada obtida está representada graficamente na Figura 4. Foi utilizado, para este experimento, uma partição do domínio de 2 elementos por aresta. É possível observar que a solução tem uma natureza linear por aresta. Desta forma, o fluxo será constante por arestas, e foi representada na Tabela 2. Podemos observar claramente, a partir dos resultados, que a noção de conservação é verificada no método, mesmo para uma rede mais complexa com várias ramificações.

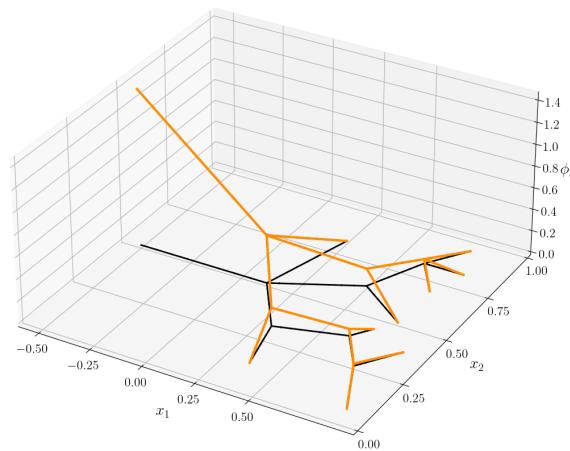


Figura 4: Teste 2 - Solução encontrada pelo método. Fonte: [4]

Tabela 2: Teste 2 - Fluxos numéricos σ_h em cada aresta Λ_i do grafo \mathcal{G} , bem como somatório do fluxo de saída total σ_{out} .

Λ_i	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_4	Λ_5	Λ_6	Λ_7	Λ_8
σ_h	1.0000	0.4434	0.2821	0.1209	0.0403	0.0403	0.0403	0.1612
Λ_i	Λ_9	Λ_{10}	Λ_{11}	Λ_{12}	Λ_{13}	Λ_{14}	Λ_{15}	σ_{out}
σ_h	0.2745	0.1689	0.1056	0.0633	0.0422	0.0211	0.0211	1.0000

6 Considerações Finais

Este trabalho apresentou uma formulação de elementos finitos H^1 -conformes para a resolução do problema de Poisson em grafos geométricos, demonstrando a eficácia do método através de experimentos numéricos que confirmaram a convergência ótima nas normas $L^2(\mathcal{E})$ e $H^1(\mathcal{G})$. A construção dos espaços de elementos finitos, baseada em funções lineares por partes e acoplamento nodal, mostrou-se robusta e adequada para a preservação da continuidade global no grafo. Além disso, a estratégia de acoplamento entre o grafo e um domínio bidimensional evidenciou a versatilidade da abordagem, permitindo a integração de problemas em geometrias complexas e multidimensionais. Os resultados obtidos abrem caminho para aplicações em áreas como fluxo em redes e interação entre estruturas discretas e contínuas, reforçando a relevância do método proposto.

Agradecimentos

Esse trabalho foi realizado com apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) através dos processos 307679/2023-3 (Correa) e 306635/2021-6 (Gomes), da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 (Ceconello) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) via processo 2013/07375-0 (Correa).

Referências

- [1] M. Arioli e M. Benzi. “A finite element method for quantum graphs”. Em: **IMA Journal of Numerical Analysis** 38.3 (2018), pp. 1119–1163. DOI: 10.1093/imanum/drx029.
- [2] D. A. Castro, P. R. B. Devloo, A. M. Farias, S. M. Gomes e O. Durán. “Hierarchical high order finite element bases for $H(\text{div})$ spaces based on curved meshes for two-dimensional regions or manifolds”. Em: **Journal of Computational and Applied Mathematics** 301 (2016), pp. 241–258. DOI: 10.1016/j.cam.2016.01.053.
- [3] L. Cattaneo e P. Zunino. “A computational model of drug delivery through microcirculation to compare different tumor treatments”. Em: **International journal for numerical methods in biomedical engineering** 30.11 (2014), pp. 1347–1371.
- [4] B. Ceconello. “Estudo de Formulações de Elementos Finitos H^1 -Conformes para Problemas de Poisson em Grafos”. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Fevereiro de 2025.
- [5] C. D’Angelo e A. Quarteroni. “On the coupling of 1d and 3d diffusion-reaction equations: application to tissue perfusion problems”. Em: **Mathematical Models and Methods in Applied Sciences** 18.08 (2008), pp. 1481–1504.

- [6] J. Friedman e J.-P. Tillich. “Calculus on Graphs”. Em: (2004). arXiv: [cs/0408028](https://arxiv.org/abs/cs/0408028) [cs.DM]. URL: <https://arxiv.org/abs/cs/0408028>.
- [7] I. G. Gjerde, M. Kuchta, M. E. Rognes e B. Wohlmuth. “Directional flow in perivascular networks: mixed finite elements for reduced-dimensional models on graphs”. Em: **Journal of Mathematical Biology** 89.6 (2024), p. 60. DOI: 10.1007/s00285-024-02154-0.
- [8] T. T. Köppl. “Multi-scale modeling of flow and transport processes in arterial networks and tissue”. Tese de doutorado. Technische Universität München, 2015.
- [9] T. T. Köppl, E. Vidotto e B. Wohlmuth. “A 3D-1D coupled blood flow and oxygen transport model to generate microvascular networks”. Em: **International journal for numerical methods in biomedical engineering** 36.10 (2020), e3386.
- [10] M. E. Rognes, D. A. Ham, C. J. Cotter e A. T. T. McRae. “Automating the solution of PDEs on the sphere and other manifolds in FEniCS 1.2”. Em: **Geoscientific Model Development** 6.6 (2013), pp. 2099–2119. DOI: 10.5194/gmd-6-2099-2013. URL: <https://gmd.copernicus.org/articles/6/2099/2013/>.
- [11] D. J. Sanderson, D. C. P. Peacock, C. W. Nixon e A. Rotevatn. “Graph theory and the analysis of fracture networks”. Em: **Journal of Structural Geology** 125 (2019), pp. 155–165.