



## CARACTERIZAÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS EM MODELOS DE ARTÉRIAS USANDO UM ALGORITMO DE PONTO INTERIOR

Jorge Martín Pérez Zerpa

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadores: José Herskovits Norman  
Alfredo Canelas Botta

Rio de Janeiro  
Junho de 2012

CARACTERIZAÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS EM MODELOS DE  
ARTÉRIAS USANDO UM ALGORITMO DE PONTO INTERIOR

Jorge Martín Pérez Zerpa

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
MECÂNICA.

Examinada por:

---

Prof. José Herskovits Norman, D.Ing.

---

Prof. Alfredo Canelas Botta, D.Sc.

---

Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc.

---

Prof. Fernando Pereira Duda, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
JUNHO DE 2012

Pérez Zerpa, Jorge Martín

Caracterização de propriedades mecânicas em modelos de artérias usando um algoritmo de ponto interior/Jorge Martín Pérez Zerpa. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2012.

XIII, 108 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José Herskovits Norman

Alfredo Canelas Botta

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2012.

Referências Bibliográficas: p. 94 – 97.

1. Otimização não linear. 2. Caracterização de propriedades mecânicas. 3. Problemas inversos em medicina. I. Norman, José Herskovits *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

# Agradecimentos

Ao Professor Herskovits pelo apoio e pela orientação. Ao Professor Alfredo Canelas pela orientação e pela motivação constante por melhorar. Aos Professores Raul Feijóo e Pablo Blanco do HemoLab-LNCC, pelos valiosos aportes realizados durante o desenvolvimento deste trabalho.

A meu avô Aquilino, a quem dedico todas as conquistas atingidas em sua ausência, por ter sido a pessoa que ele foi e por ter deixado tantas boas lembranças na minha memória.

A meu irmão Diego e minha mãe Selva pelo carinho e união incondicional, a Cecília por estar a meu lado em todo momento, a meu pai Jorge, minha avó Nelly, meu tio Mario pelo apoio, e a toda minha família e à de Cecília.

Às excelentes pessoas que conheci no Brasil, especialmente a Gabriel, Mario e família, Joan e Alexander. Aos colegas do laboratório: Elmer, Arminda, Henry, Pavel, Elena e Miguel. Aos colegas do LNCC: Rafael e Hector.

Aos meus amigos e colegas do trabalho no Uruguai pela motivação, em particular aos colegas de estudo na graduação por ter formado uma ótima equipe.

Ao Instituto de Matemáticas e Estatística, ao Instituto de Estruturas e Transporte da Faculdade de Engenharia da *Universidad de la República* pelo apoio. Aos Professores: Robledo, Sensale, Bia, Ures, Usera e Bazzano, por ter me animado a iniciar e continuar este caminho.

Ao pessoal da COPPE/PEM, especialmente a Vera e aos Professores Lavínia e Duda. Ao Conselho Nacional de Pesquisa do Brasil (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio.

*A mi abuelo,  
Aquilino Pérez Ferreiro  
[1926-2009]*

*“Sei que meu trabalho é uma  
gota no oceano, mas o oceano  
seria menor sem ela.”  
Madre Teresa de Calcutá*

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

## CARACTERIZAÇÃO DE PROPRIEDADES MECÂNICAS EM MODELOS DE ARTÉRIAS USANDO UM ALGORITMO DE PONTO INTERIOR

Jorge Martín Pérez Zerpa

Junho/2012

Orientadores: José Herskovits Norman

Alfredo Canelas Botta

Programa: Engenharia Mecânica

Apresenta-se nesta dissertação um método numérico para resolver o problema de caracterização de propriedades mecânicas em modelos de paredes arteriais. O método é baseado na utilização do Método dos Elementos Finitos para a modelagem do comportamento mecânico do material e um algoritmo de ponto interior para a resolução do problema inverso da caracterização. O objetivo do trabalho é colaborar no desenvolvimento de novas ferramentas para o apoio na diagnose de doenças cardiovasculares como a Aterosclerose.

São introduzidas algumas noções da medicina, da mecânica dos sólidos e da análise numérica, necessárias para a correta compreensão do problema. São apresentadas hipóteses constitutivas apropriadas para o material a modelar. Posteriormente é formulado um problema inverso associado ao problema de caracterização de propriedades mecânicas, o qual mostramos que pode ser formulado como um problema de otimização não linear. Para a resolução deste problema é utilizado o algoritmo de ponto interior FDIPA.

Também é apresentado um processo para realizar a validação do método de caracterização, através da resolução de problemas com solução conhecida. É realizada uma análise numérica da sensibilidade dos resultados respeito à quantidade de elementos da discretização, o módulo de *Poisson* entre outros parâmetros. Finalmente uma análise de sensibilidade teórica é realizada, obtendo conclusões sobre a necessidade de aplicar técnicas de regularização.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

ARTERIAL MECHANICAL PROPERTIES CHARACTERIZATION IN  
MODELS OF ARTERIES USING AN INTERIOR POINT ALGORITHM

Jorge Martín Pérez Zerpa

June/2012

Advisors: José Herskovits Norman

Alfredo Canelas Botta

Department: Mechanical Engineering

In this work, we present a numerical method for solving the mechanical properties characterization problem of models of arterial wall tissues. The method is based on the use of the Finite Element Method and an interior point algorithm for the characterization problem. The goal of this work is to contribute to the development of new tools for the diagnosis of cardiovascular diseases such as Atherosclerosis.

In the preliminary chapters, medicine concepts are introduced, in particular, those related to the cardiovascular system physiology, and the Atherosclerosis disease. After that, we formulate an inverse problem associated to the characterization of mechanical properties. After formulating the inverse problem as an optimization problem, the interior point algorithm FDIPA is used for its resolution.

A validation process for the characterization method is introduced, where problems with known solution are solved. A numerical sensitivity analysis of the results is done, respect to the number of elements in the mesh, the *Poisson* ratio, and other parameters. Finally, a sensitivity analysis is done, obtaining conclusions about the necessity of the use of regularization techniques.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiii</b>
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Preliminares</b>	<b>5</b>
1.1 Aspectos médicos . . . . .	5
1.1.1 Fisiologia do sistema cardiovascular . . . . .	5
1.1.2 Patologias cardiovasculares e Aterosclerose . . . . .	7
1.1.3 Técnicas de obtenção de dados . . . . .	10
1.2 Mecânica dos sólidos . . . . .	14
1.2.1 O problema de elasticidade linear . . . . .	15
1.2.2 Simplificações consideradas . . . . .	16
1.2.3 Problema simplificado . . . . .	19
1.2.4 Método dos Elementos Finitos . . . . .	20
1.3 Problemas Inversos . . . . .	22
1.3.1 Teoremas da teoria de problemas inversos . . . . .	23
1.3.2 Regularização de problemas inversos não lineares . . . . .	24
1.4 O algoritmo FDIPA . . . . .	26
1.4.1 Noções de otimização não linear . . . . .	26
1.4.2 O algoritmo FDIPA . . . . .	31
<b>2 O método de caracterização</b>	<b>35</b>
2.1 Da diagnose ao problema inverso . . . . .	35
2.2 Um exemplo . . . . .	36
2.2.1 Problema contínuo . . . . .	37
2.2.2 Problema discreto . . . . .	38
2.2.3 Formulação de otimização . . . . .	39
2.2.4 Análise de sensibilidade . . . . .	42
2.2.5 Análise das condições de contorno . . . . .	47
2.3 O método de caracterização de propriedades . . . . .	49

2.3.1	O problema inverso . . . . .	49
2.3.2	O método . . . . .	52
2.3.3	Análise das condições de contorno . . . . .	53
2.3.4	O funcional . . . . .	54
2.3.5	O problema de otimização com restrições . . . . .	59
2.3.6	Análise de sensibilidade . . . . .	61
<b>3</b>	<b>Validação do método de caracterização</b>	<b>65</b>
3.1	Descrição do processo de validação . . . . .	65
3.2	Validação do método usando dados sem erro . . . . .	71
3.2.1	Exemplo 1 . . . . .	71
3.2.2	Exemplo 2 . . . . .	75
3.2.3	Exemplo 3 . . . . .	78
3.3	Validação com dados com erro de discretização . . . . .	84
3.3.1	Exemplo 4 . . . . .	84
3.3.2	Exemplo 5 . . . . .	85
3.3.3	Exemplo 6 . . . . .	86
3.4	Análise de sensibilidade . . . . .	88
	<b>Conclusões</b>	<b>90</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>94</b>
	<b>A Validação do programa de elementos finitos</b>	<b>98</b>
	<b>B Mapeamentos de Erros</b>	<b>105</b>

# Lista de Figuras

1.1	Esquema da circulação do sangue no sistema cardiovascular . . . . .	6
1.2	Estrutura da parede arterial . . . . .	7
1.3	Etapas da Aterosclerose . . . . .	8
1.4	Tipos de IVUS . . . . .	11
1.5	Esquema do processo de utilização do IVUS. . . . .	12
1.6	Imagens do IVUS para dois cortes transversais de artérias. . . . .	13
1.7	Imagens de uma mesma seção arterial obtidas com IVUS. . . . .	14
1.8	Campo de deslocamentos obtido aplicando o Fluxo Ótico. . . . .	14
1.9	Esquema de condições de contorno artéria . . . . .	18
1.10	Fluxograma da busca linear de <i>Armijo</i> . . . . .	28
1.11	Fluxograma da busca linear de <i>Wolfe</i> . . . . .	29
1.12	Fluxograma da busca linear de <i>Wolfe</i> modificada . . . . .	30
1.13	Esquema do cálculo de direção viável do FDIPA . . . . .	32
1.14	Fluxograma do algoritmo FDIPA . . . . .	34
2.1	Exemplo unidimensional contínuo . . . . .	37
2.2	Exemplo unidimensional simplificado . . . . .	38
2.3	Exemplo unidimensional . . . . .	47
2.4	Diferentes condições de contorno para exemplo de barra . . . . .	47
2.5	Método de resolução do problema inverso . . . . .	52
2.6	Geometria aproximada artéria com condições de contorno . . . . .	53
3.1	Fluxograma do processo de validação . . . . .	66
3.2	Aproximação de geometria de artéria . . . . .	69
3.3	Esquema exemplo 1 . . . . .	72
3.4	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\alpha$ exemplo 1 . . . . .	73
3.5	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\beta$ exemplo 1 . . . . .	73
3.6	Resultados evolução formulação 2 - exemplo 1 . . . . .	74
3.7	Mapeamentos propriedades mecânicas - Exemplo 1 . . . . .	76
3.8	Esquema geometria exemplo 2 . . . . .	77
3.9	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\alpha$ exemplo 2 . . . . .	77

3.10	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\beta$ exemplo 2 . . . . .	78
3.11	Mapeamentos propriedades mecânicas exemplo 2 . . . . .	79
3.12	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\alpha$ exemplo 3 . . . . .	80
3.13	Resultados evolução funcional $\mathcal{F}_\beta$ exemplo 3 . . . . .	80
3.14	Mapeamento de propriedades mecânicas - exemplo 3 . . . . .	82
3.15	Mapeamento de erros relativos - exemplo 3 . . . . .	83
3.16	Resultados exemplo 4 . . . . .	85
3.17	Resultados exemplo 5 . . . . .	86
3.18	Esquema refinamento . . . . .	87
3.19	Resultados exemplo 6 . . . . .	87
3.20	Análise de sensibilidade cota do erro . . . . .	89
A.1	Esquema do Problema A.1 . . . . .	99
A.2	Malha deformada por tensão $q = 10$ kPa. . . . .	100
A.3	Malha deformada por tensão $q = 50$ . . . . .	100
A.4	Esquema do Problema A.2 . . . . .	101
A.5	Diagrama de $\sigma_x$ do Problema A.2. . . . .	102
A.6	Deformada de viga do Problema A.2. . . . .	102
A.7	Erro de energia de deformação Problema A.2. . . . .	103
A.8	Deslocamentos do Problema A.3. . . . .	103
A.9	Diagrama $\sigma_x$ Problema A.3. . . . .	104
B.1	Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 1 . . . . .	106
B.2	Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 2 . . . . .	107
B.3	Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 3 . . . . .	108

# Lista de Tabelas

3.1	Parâmetros do exemplo 1 . . . . .	72
3.2	Parâmetros do exemplo 2 . . . . .	77
3.3	Resultados numéricos exemplo 3 . . . . .	81

# Introdução

O estado da arte das disciplinas da modelagem computacional permite resolver computacionalmente fenômenos e problemas de alta complexidade numérica ou física. A tendência na comunidade científica é aplicar essas novas ferramentas à resolução de problemas de outras áreas, com o objetivo de melhorar os resultados obtidos. Esse é o enfoque utilizado neste trabalho que segue a filosofia adotada pelo Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia do Brasil no projeto *Medicina Assistida por Computação Científica*, INCT-MACC<sup>a</sup>. O laboratório OptimizE da Universidade Federal de Rio de Janeiro faz parte deste projeto.

O problema considerado utiliza noções de quatro grandes disciplinas: a medicina, onde se apresenta o problema, a engenharia, presente na modelagem, a matemática e computação, que fornecem as ferramentas utilizadas na resolução do modelo e a imagenologia<sup>b</sup> ou processamento de imagens, presente na hora da obtenção dos dados.

Para motivar e introduzir ao leitor no tema é necessário expor algumas noções básicas da medicina, para isso, começaremos pela descrição da problemática, seguindo pela motivação, destacando a importância do estudo do problema, continuando pela descrição dos métodos utilizados, e finalizando pela contribuição que representa este trabalho.

## Problemática

O infarto, ou trombose coronária, é considerado causa de morte desde o início do século XIX. O estudo do problema iniciou-se utilizando resultados de experimentação com animais e observações em humanos. No século XX, teorias sobre a fatalidade do trombo começaram a ser desenvolvidas, e métodos estatísticos foram usados pela primeira vez em seres humanos [1].

O risco de ter um infarto está ligado diretamente à patologia chamada Aterosclerose. Esta doença é caracterizada pela acumulação de colesterol e outros

---

<sup>a</sup>O INCT-MACC é o programa de desenvolvimento de pesquisa e formação de recursos humanos e tecnologias na aplicação de computação científica à medicina durante o período 2009-2013 (web: [macc.lncc.br](http://macc.lncc.br)).

<sup>b</sup>especialidade médica que se ocupa do uso das tecnologias de imagem para o diagnóstico

compostos na parede interna das artérias, limitando ou modificando o fluxo normal do sangue. Estes processos serão explicados no Capítulo 1.

A Aterosclerose representa a primeira causa de morte tanto em países desenvolvidos como em desenvolvimento. Apesar de sua importância, ainda não foram compreendidas algumas das suas características básicas e, portanto, segue sendo uma área de pesquisa em constante desenvolvimento.

Geralmente os primeiros sintomas aparecem nas artérias carótidas, nas artérias do cérebro e coronárias, mas qualquer artéria pode ser afetada. Dentro das artérias, um local escolhido para a acumulação dos compostos é a zona da parede imediatamente após uma bifurcação da artéria no sentido do fluxo do sangue [2]. Na Aterosclerose coronária, placas ateroscleróticas são formadas nas artérias que transportam oxigênio aos músculos do coração obstruindo sua correta função, provocando assim uma incapacidade da realização do movimento de bombeio do sangue. Ainda sem provocar infarto, a falta de oxigênio pode provocar um esforço maior do músculo cardíaco, e portanto uma dor crônica (angina de peito).

Existem variados fatores de risco que facilitam o desenvolvimento da doença, alguns deles são: hipertensão, alto colesterol no sangue e consumo de tabaco. No Capítulo 1 são apresentados em maior profundidade.

A visualização é fundamental no processo do diagnóstico médico e existem diferentes metodologias para distintas regiões a estudar do corpo humano. No Capítulo 1 enumeramos algumas técnicas utilizadas no diagnóstico de patologias coronárias e introduziremos uma técnica chamada Ultra-Som Intra Vascular (Intra Vascular Ultra Sound - IVUS). A partir desta técnica é possível estudar a placa de ateroma e as suas características.

O fenômeno que provoca o infarto é o desprendimento de placa e oclusão da artéria. Para poder prever este processo é necessário conhecer os materiais que compõem a parede arterial, e uma das formas de obter esta informação é através das propriedades mecânicas dos materiais.

## **Motivação**

Do ponto de vista da mecânica, o efeito da Aterosclerose sobre a parede arterial é a modificação das propriedades mecânicas da mesma e uma consequente alteração das condições do fluxo do sangue em todo o sistema cardiovascular. Nosso objetivo é desenvolver novas técnicas computacionais para a identificação de regiões com propriedades mecânicas alteradas, e assim obter informações complementares que ajudem aos técnicos e médicos no processo de diagnóstico. Alguns métodos propostos para este tipo de problemas são descritos em [3].

A formulação selecionada para esta dissertação foi utilizada com êxito na resolução de problemas similares no diagnóstico de câncer de mama [4, 5], que é mundialmente a forma mais comum de câncer em mulheres. Este resultado motiva a aplicar estas técnicas ao problema da Aterosclerose.

## Métodos

Para obter nossa meta consideramos um problema inverso, que pode ser resolvido através da minimização de um funcional relacionado com o erro entre o campo de deslocamentos solução de um modelo matemático apropriado, e o campo de deslocamentos dado, obtido aplicando técnicas de processamento de imagens médicas.

O processo iterativo para minimizar o funcional inicia-se considerando valores numéricos para o módulo de elasticidade similares aos apresentados na bibliografia [6]. O algoritmo a utilizar para resolver o problema de otimização será o FDIPA (*Feasible Directions Interior Point Algorithm*, ver [7] para mais detalhes). O FDIPA tem demonstrado ser um bom otimizador para problemas não lineares assim como para problemas de grande porte e outras aplicações [8]. Na Seção 1.4 é apresentado em maior profundidade.

A contribuição mais importante deste trabalho é a apresentação de um novo método numérico para a resolução do problema de caracterização. Uma validação preliminar do método é apresentada no Capítulo 3. O método apresentado pode ser também aplicado à resolução de outros problemas similares dentro da medicina como, por exemplo, o diagnóstico de câncer uterino [9].

## Estrutura da dissertação

No Capítulo 1 apresentamos os conceitos preliminares necessários para entender a problemática médica e compreender o funcionamento de algumas das técnicas de diagnóstico utilizadas atualmente. Também são introduzidas noções da mecânica dos sólidos utilizadas na modelagem do tecido arterial, assim como algumas ferramentas da teoria dos problemas inversos.

No Capítulo 2 introduzimos a formulação matemática do problema de caracterização de propriedades mecânicas em sólidos e as aproximações feitas para simplificar o problema dentro dos limites adequados para modelar um comportamento similar aos tecidos em estudo. Também é formulado o problema inverso de caracterização como um problema de otimização não linear, de forma de poder aplicar um algoritmo de otimização apropriado para sua resolução. Na Seção 1.4 descrevemos algumas noções básicas da otimização não linear e

apresentamos o algoritmo FDIPA, Algoritmo de Pontos Interiores de Direções Viáveis.

No Capítulo 3 apresentamos um procedimento numérico através do qual validaremos o método de caracterização. Neste capítulo são resolvidos problemas de elasticidade com solução conhecida. Também é analisada a sensibilidade da solução com respeito à malha de elementos finitos e outros parâmetros do modelo. Finalmente, é realizada uma análise de sensibilidade teórica, procurando obter uma estimativa da variação da solução ao introduzir erros nos dados.

Finalizamos o trabalho formulando as conclusões e descrevendo as futuras linhas de trabalho que ficam abertas para continuar avançando no estudo do problema de caracterização.

# Capítulo 1

## Preliminares

O objetivo deste capítulo é preparar ao leitor para entender o posterior desenvolvimento da dissertação, apresentando conceitos da engenharia e medicina importantes na modelagem computacional do problema da caracterização e sua relação com o diagnóstico da doença Aterosclerose.

Começamos introduzindo noções básicas da medicina do problema, desde à anatomia às técnicas de processamento de imagens aplicadas atualmente em dispositivos médicos. Posteriormente apresentamos o problema de elasticidade linear, lembrando conceitos básicos do Método dos Elementos Finitos. Finalmente introduzimos as noções da matemática apresentando teoremas da teoria de problemas inversos e o algoritmo de otimização FDIPA.

### 1.1 Aspectos médicos

Nesta seção descreveremos o sistema cardiovascular e seu normal funcionamento, posteriormente introduziremos a doença Aterosclerose e suas patologias associadas, e finalmente apresentaremos algumas das técnicas de imagens médicas utilizadas na diagnose desta doença.

#### 1.1.1 Fisiologia do sistema cardiovascular

O sistema cardiovascular está composto pelo coração, os pulmões, o sangue e os vasos vasculares. Os vasos vasculares são os condutos que transportam o sangue entre os pulmões, o coração e os tecidos e órgãos do corpo. O coração funciona como a bomba que fornece a pressão necessária para a circulação do sangue, e os pulmões administram o oxigênio que os órgãos requerem para seu normal funcionamento. Na Figura 1.1 podemos ver um esquema simplificado do sistema circulatório, em vermelho os vasos que transportam sangue com maior quantidade de oxigênio desde os pulmões aos tecidos, e em azul os vasos por onde flui o sangue com baixo nível de

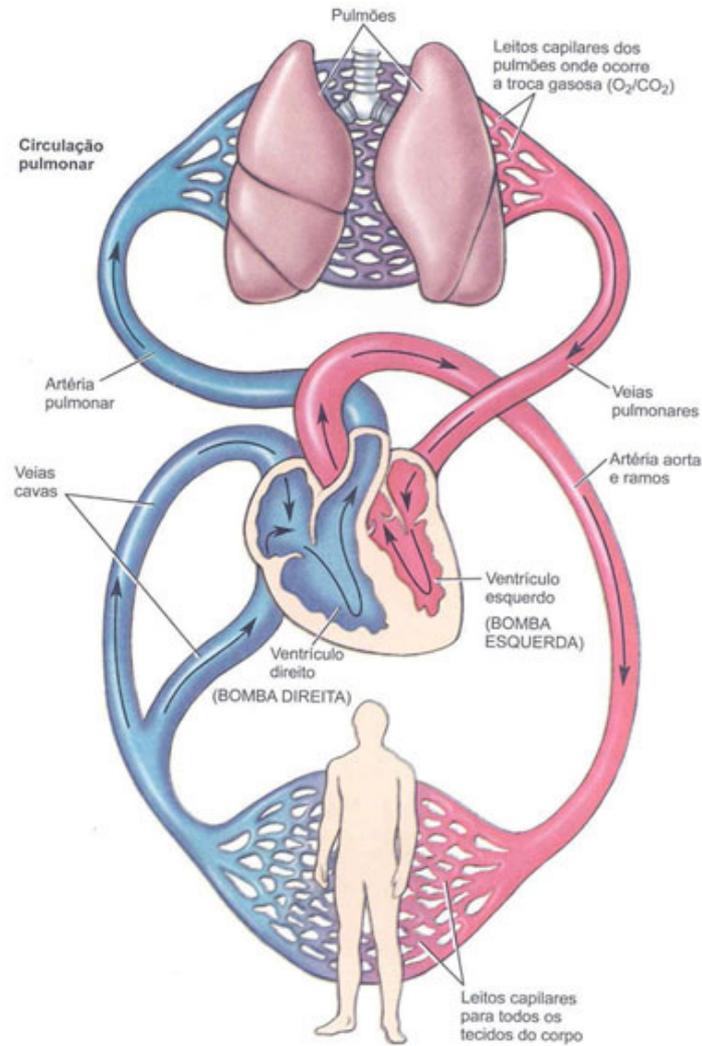


Figura 1.1: Esquema da circulação do sangue no sistema cardiovascular

oxigênio. A função do sistema é prover às células dos tecidos do corpo de oxigênio necessário para seu normal funcionamento (por mais detalhes ver [10]).

## Artérias

Os vasos vasculares podem ser classificados de forma simples em dois tipos: artérias e veias. As artérias transportam o sangue que flui desde o coração para os pulmões e demais órgãos e tecidos do corpo, enquanto que as veias transportam o sangue que entra para o coração. As consequências da Aterosclerose são importantes em numerosos locais do sistema cardiovascular, em particular nas artérias que levam o sangue oxigenado do coração aos tecidos, incluindo o tecido cardíaco (miocárdio). Centraremos nosso estudo neste tipo de vasos vasculares.

Na Figura 1.2 vemos uma seção transversal da parede arterial, onde vemos que está dividida em três camadas: íntima, média e adventícia. Na parte superior vemos

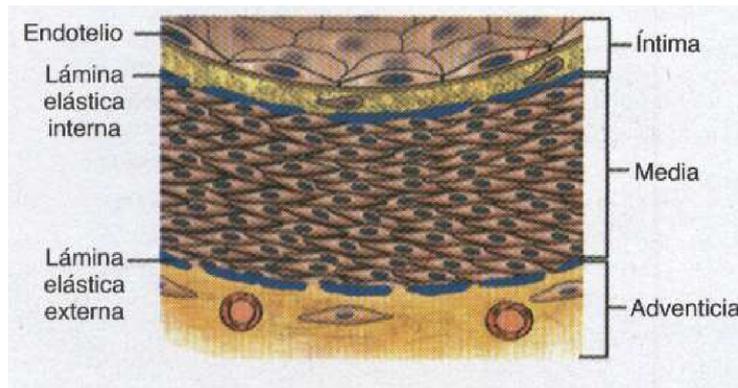


Figura 1.2: Estrutura da parede arterial

o lúmen (o espaço por onde flui o sangue) o qual está delimitado pelo endotélio. A camada íntima inicia no endotélio e finaliza na membrana elástica interna, onde começa a camada média, que finaliza na membrana elástica externa e finalmente temos a camada adventícia. Um ponto importante a destacar é que o diâmetro das artérias sempre diminui na direção do fluxo do sangue que sai do coração.

O sangue circula pelas artérias com valores de pressão maiores do que o sangue nas veias, e ainda a parede arterial está formada por materiais que sofrem deformações, dando carácter complacente ao sistema cardiovascular.

## Hemodinâmica

O sangue é bombeado aos pulmões para ser oxigenado e voltar novamente ao coração que bombeia o novo sangue já oxigenado para todos os tecidos do corpo através das artérias. Posteriormente, o sangue passa pelos tecidos e volta sem oxigênio ao coração, fechando assim o processo de circulação do sangue. A energia necessária para o fluxo do sangue é proporcionada a través do movimento do coração, chamado ciclo cardíaco. Este ciclo é dividido em duas etapas principais: sístole e diástole, na primeira o coração se contrai ejetando o sangue em direção aos órgãos através das artérias, enquanto que na diástole, o coração se expande e recebe o sangue através das veias. Na sístole, o sangue é ejetado com valores de pressão altos para poder atingir todos os pontos do corpo, e também as artérias são deformadas aumentando o lúmen para permitir a circulação do sangue. Na diástole a pressão é baixa e as artérias voltam a sua configuração sem deformação.

### 1.1.2 Patologias cardiovasculares e Aterosclerose

Nesta seção começaremos realizando uma introdução da doença Aterosclerose, apresentando de forma resumida a epidemiologia, sintomas, fatores de risco e

consequências. Finalmente apresentaremos, brevemente e de forma simplificada, o processo de diagnóstico que os médicos utilizam hoje em dia.

## A Aterosclerose

Como foi dito na introdução, o risco de ter um infarto está ligado diretamente à patologia chamada Aterosclerose, doença das artérias caracterizada pela acumulação de lipídios, colesterol, cálcio e outros compostos na parede arterial, alterando o fluxo do sangue e reduzindo a resistência mecânica dos tecidos da parede.

**Epidemiologia e importância** A Aterosclerose representa uma das doenças de maior impacto no mundo devido a que é a primeira causa de morte tanto em países desenvolvidos como os Estados Unidos, como em países em desenvolvimento como por exemplo, Brasil ou Uruguai, [11–14].

**Etapas** Na Figura 1.3 podemos ver as diferentes etapas do processo de formação da Aterosclerose, explicadas a continuação. O processo é iniciado com os fatores de risco

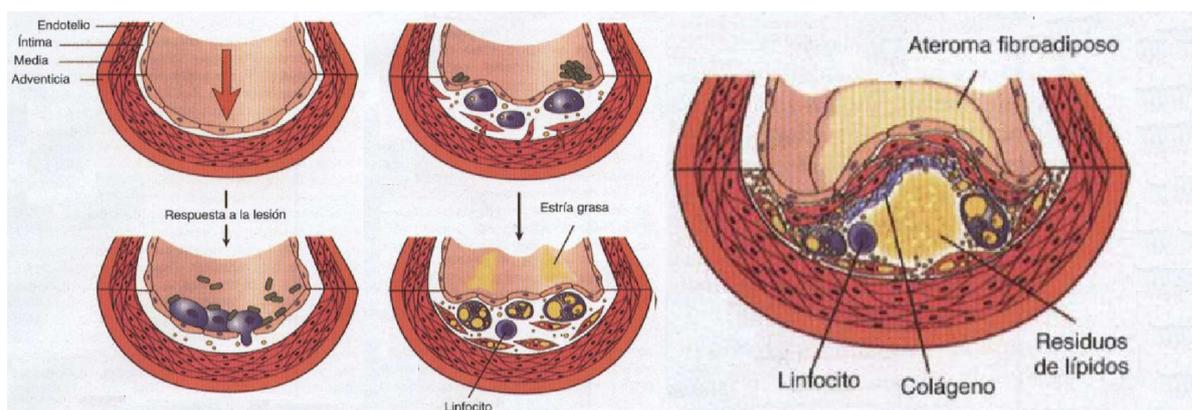


Figura 1.3: Etapas da Aterosclerose

mais importantes: tabaquismo e sedentarismo, provocando a presença de toxinas e compostos gordurosos no sangue. Estes compostos depositam-se no endotélio, frequente na zona da parede imediatamente após uma bifurcação da artéria no sentido do fluxo do sangue [2]. Na etapa seguinte, e por causa de um aumento da permeabilidade dessa membrana, os compostos passam ao interior da camada íntima, aumentando o tamanho da mesma e começando a engrossá-la para logo formar a “estria grassa” ou placa de ateroma. Com o tempo estes depósitos vão se engrossando e provocando uma diminuição da capacidade resistente da parede, afetando o normal funcionamento do sistema cardiovascular.

**Fatores de risco** Existem variados fatores gerais que aumentam o risco facilitando o desenvolvimento da doença, alguns deles são: hipertensão, alto colesterol no sangue, consumo de tabaco, inatividade física ou sedentarismo e adiposidade (por mais detalhes ver [2, 11, 15]). A idade também é determinante na doença já que as características mecânicas das artérias são modificadas naturalmente durante o envelhecimento, perdendo a capacidade de deformação.

**Efeitos** Os primeiros sintomas aparecem geralmente nas artérias carótidas, artérias do cérebro e coronárias, mas qualquer artéria pode ser afetada. Como foi dito, uma das características da doença é a diminuição da resistência dos tecidos da parede arterial, podendo provocar a rotura e possível desprendimento de material, provocando assim uma trombose ou coágulo. Este coágulo viaja com o sangue e, já que o diâmetro das artérias diminui na direção do fluxo, eventualmente obstruirá alguma artéria de menor diâmetro ou modificará seu correto funcionamento, provocando infartos ou outros inconvenientes. O local do infarto dependerá do tamanho do trombo e do caminho que tome antes de ser detido por uma artéria pequena. Os infartos podem ser de diferente tipo como, por exemplo, o provocado por um aumento da carga sobre ventrículo esquerdo na função cardíaca, o qual provoca efeitos crônicos como uma dor no peito chamada “angina do peito”, ou efeitos agudos como a não chegada de oxigênio aos músculos do coração (miocárdio), obstruindo sua correta função e provocando assim uma incapacidade da realização do movimento de bombeio do sangue (infarto de miocárdio). Outros efeitos são infartos cerebrais, trombose profunda em membros inferiores (obstrução do fluxo sanguíneo às pernas), aneurismas de aorta (deformações grandes que afetam o fluxo sanguíneo). Para ver mais efeitos o leitor pode consultar o Capítulo 12 no artigo [2].

**Diagnóstico** Os médicos monitoram a presença desta doença em pacientes com os fatores de risco enumerados previamente. No caso de doentes com historial de infartos cardíacos, é de vital importância fazer um diagnóstico claro, que permita saber o nível de avanço da doença, para assim poder decidir se utilizar ou não as técnicas cirúrgicas correspondentes. Para saber o avanço da doença é necessário saber a composição da parede arterial, para isso os técnicos que trabalham junto com médicos aplicam técnicas de obtenção e processamento de imagens médicas, para estimar a composição da parede arterial. Numa eventual aplicação de algum método de caracterização de propriedades mecânicas os técnicos poderiam identificar de forma precisa os materiais que compõem a parede em qualquer instante em qualquer ponto do tecido, podendo assim realizar análises e simulações, e tomar decisões com maior certeza.

A seguir, apresentaremos algumas das técnicas de imagens utilizadas atualmente para a visualização dos compostos da parede arterial.

### 1.1.3 Técnicas de obtenção de dados

Os médicos utilizam imagens médicas no dia a dia para apoiar-se na realização de diagnósticos. Existem distintas formas de visualização das regiões do corpo dependendo do local a estudar, entre as mais utilizadas estão o raio-x e o ultra-som. Neste trabalho consideraremos informações do tipo obtido utilizando a técnica Ultra-Som Intra Vascular ou IVUS.

#### Ultra-Som e aplicações

O ultra-som é uma onda acústica de alta frequência (não audível para os humanos) utilizada em medicina em variados processos de visualização, como por exemplo, a visualização 3D de ecografias [16]. Em geral, para visualizar um tecido é utilizada uma sonda que emite uma onda de ultra-som, ou raio unidirecional, que atinge o tecido produzindo uma onda de reflexão que é recebida novamente pela sonda. As características da onda de resposta são processadas produzindo um mapa da intensidade em cada ponto. Uma das propriedades relacionadas com intensidade da resposta é a densidade do material. Embora, não é possível medir propriedades mecânicas utilizando o ultra-som.

**Elastografia** Em [17] é apresentada a Elastografia, uma técnica que utiliza imagens obtidas com ultra-som para obter campos de deformações do material. Esta técnica não permite obter valores das propriedades mecânicas do material necessárias para simulações numéricas. Posteriormente, técnicas similares começaram a ser aplicadas em pesquisa em outras aplicações. Por exemplo, em [4] é formulado um método para detectar cistos de mama com maior precisão da obtida aplicando métodos anteriores. Também se aplicam na detecção do câncer de útero [9, 18], assim como técnicas similares podem ser aplicadas á detecção de câncer de próstata. Em [19] podemos ver uma compilação de alguns resultados interessantes sobre elastografia e técnicas similares até 2001. A seguir, apresentaremos um dos dispositivos médicos mais recentes utilizados para obter imagens de artérias de maneira intra-vascular.

#### Ultra-Som Intra Vascular (IVUS)

No diagnóstico de patologias coronárias a angiografia coronária convencional é o método padrão, mais outras tecnologias começaram a ser utilizadas. Hoje em dia existe um dispositivo chamado Ultra-som Intra Vascular ou IVUS por seu nome

em inglês *Intra Vascular Ultra-Sound*. A partir da sua utilização é possível estudar a placa de ateroma e as suas características, além de possibilitar a quantificação das dimensões e até estimar a composição da mesma, especialmente quando esta é calcificada. Este tipo de dispositivos está sendo adquirido por hospitais de todo o mundo, portanto é importante poder utilizá-los de forma ótima, extraindo a maior quantidade possível de informação.

**Estrutura do IVUS** O IVUS está composto por um cateter especializado (cateter de ultra-som), que inclui um transdutor que emite as ondas de Ultra-som e recebe as respostas. Existem dois tipos de cateter de IVUS: o mecânico e o eletrônico. Na Figura 1.4 podemos ver esquemas dos diferentes tipo de IVUS. Como vemos na

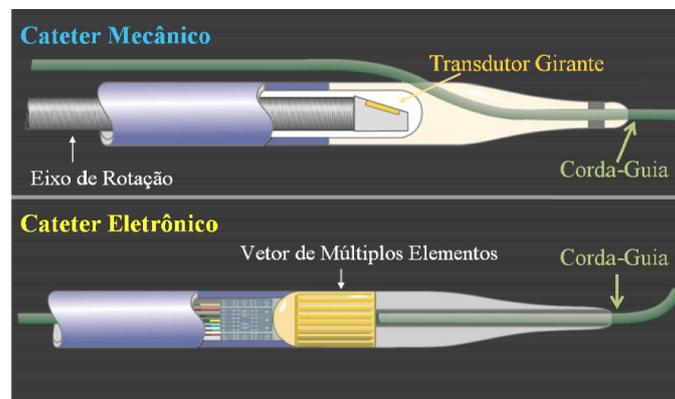


Figura 1.4: Tipos de IVUS: mecânico (superior) e eletrônico (inferior).

imagem superior da figura, no cateter mecânico o transdutor rota respeito ao eixo longitudinal do cateter. No cateter eletrônico o transdutor é capaz de emitir ondas de ultra-som em varias direções sem necessidade de rotar, ver imagem inferior da figura.

**Processo de obtenção de imagens** Primeiro o cateter do IVUS é introduzido na artéria a estudar através de algum local do corpo acessível para os médicos. O IVUS é conduzido pela artéria auxiliado por um cateter de guia e, após do correto posicionamento do dispositivo na região a estudar, inicia-se a aquisição das imagens. O transdutor emite pulsos ultra-sônicos de alta frequência os quais chocam com as diversas estruturas da parede arterial, gerando múltiplas reflexões e difrações. O sinal de retorno obtido nos transdutores é transformado em impulsos elétricos, os quais são processados e transformados em imagens de IVUS. O cateter e recolhido por um motor a uma velocidade constante possibilitando obter imagens de IVUS de varias seções consecutivas da artéria, para posteriormente reconstruir a informação de um tramo da mesma. Na Figura 1.5 vemos um esquema tridimensional do

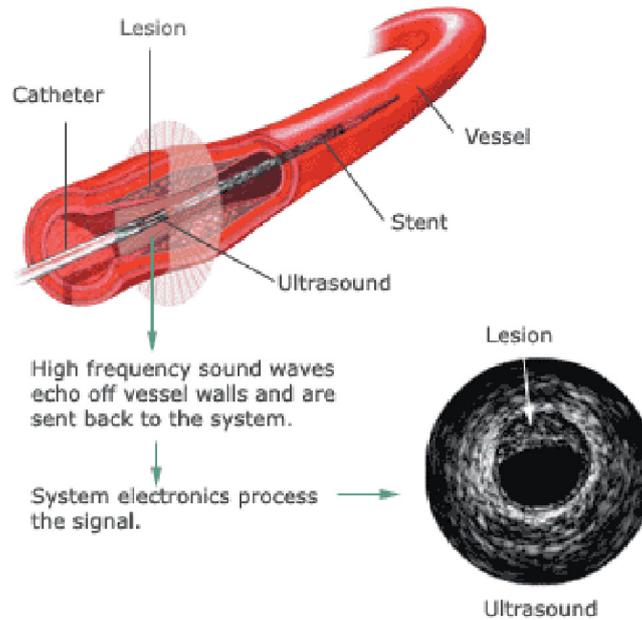


Figura 1.5: Esquema do processo de utilização do IVUS.

processo, onde vemos como o IVUS é posicionado na lesão de uma artéria e como as sinais obtidas são processadas para obter as imagens. É importante destacar que este procedimento é altamente invasivo pelo qual é recomendável somente para pacientes com um avanço importante na doença e não deve ser utilizado como ferramenta preventiva.

**Imagens e diagnose** Como resultado do processo são obtidas imagens como a imagem superior da Figura 1.6, tomada de [20], onde vemos na esquerda uma seção transversal de uma artéria com os diferentes tipos de materiais identificados e na direita a imagem correspondente obtida pelo IVUS. Estas imagens correspondem a mapeamentos de densidades dos materiais, sobre os quais os médicos determinam, baseados na experiência e na estatística, qual é o estado da artéria e, portanto, qual deve ser o tratamento a realizar. As conclusões obtidas com este tipo de análise podem ter uma incerteza maior do que se fosse adicionada uma análise de tipo numérica, isto dependerá do nível de incerteza nos dados, como veremos na etapa final da validação do método apresentado. Técnicas de processamento estão sendo desenvolvidas para obter as propriedades mecânicas da artéria diretamente desde a imagem de IVUS (ver por exemplo [21, 22]).

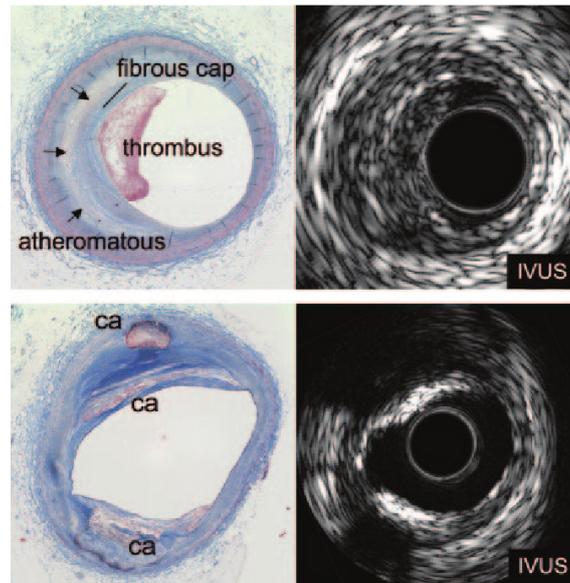


Figura 1.6: Imagens do IVUS para dois cortes transversais de artérias.

### Obtenção do campo de deslocamentos: Fluxo Ótico

Uma informação necessária para aplicar o processo de caracterização proposto é a deformação da artéria produzida ao aplicar uma pressão conhecida no seu interior. Nesta seção veremos um processo que pode ser utilizado para obter esta deformação.

À medida que o cateter do IVUS é recolhido, o ciclo cardíaco continua ocorrendo e a artéria é deformada. Visto que o movimento do cateter é consideravelmente mais lento que o movimento do ciclo cardíaco, podemos considerar que duas imagens obtidas em instantes de tempo similares estão associadas à mesma seção da artéria. Para duas imagens em escala de cinzas procuramos obter o campo de deslocamentos que melhor se ajuste ao movimento ocorrido entre uma e outra imagem. Um dos métodos utilizados para resolver este problema é o método do Fluxo Ótico introduzido em [23]. A ideia portanto, é utilizar duas imagens obtidas aplicando o IVUS em instantes de tempo similares como para poder ser considerados da mesma seção de uma artéria, e obter o campo de deslocamentos que relacionam as imagens.

Na Figura 1.7 podemos ver duas imagens de uma mesma seção obtidas utilizando IVUS em distintos instantes de tempo. Utilizando o método do Fluxo Ótico com essas imagens, obtém-se um campo de deslocamentos como o mostrado na Figura 1.8, onde vemos os deslocamentos em vermelho.

Uma pequena variação na intensidade de um pixel pode modificar o campo de deslocamentos obtido pelo método, portanto, se a alguma das imagens utilizadas têm erros nas intensidades dos pixels, o método obterá um campo de deslocamentos diferente ao real. Não é simples detectar este tipo de erros nos dados ou estimar o nível de erro nos deslocamentos obtidos.

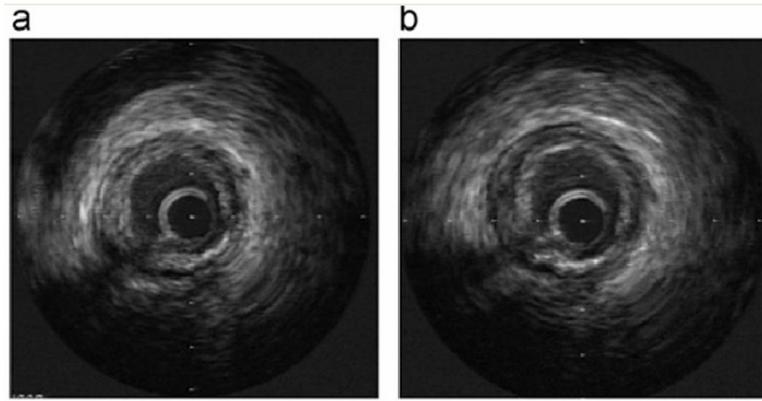


Figura 1.7: Imagens de uma mesma seção arterial obtidas com IVUS.

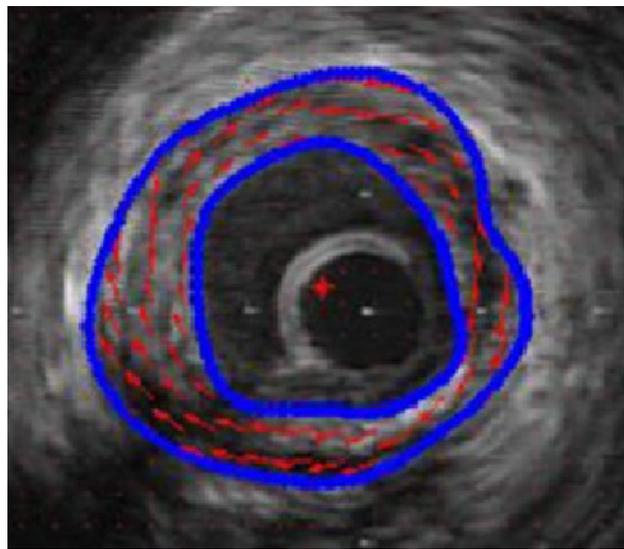


Figura 1.8: Campo de deslocamentos obtido aplicando o Fluxo Ótico.

## 1.2 Mecânica dos sólidos

Visto que uma das causas do infarto é a presença de certos compostos dentro da parede arterial e no endotélio, será necessário identificar as propriedades mecânicas de cada material que compõe a parede para poder simular a sua deformação e dizer se existe risco de fratura ou desprendimento do material, e em qual região da artéria é possível que isto ocorra. A seguir, apresentaremos os conceitos da mecânica sólidos que utilizaremos durante a dissertação.

Nesta seção apresentaremos o problema de elasticidade linear para um sólido ocupando uma região do espaço e submetido a forças e restrições de algum tipo em seu deslocamento. Posteriormente, introduziremos certas hipóteses que serão utilizadas para simplificar o problema e discutiremos a aplicabilidade de cada uma de elas ao problema em estudo.

### 1.2.1 O problema de elasticidade linear

Seja um sólido ocupando a região  $\Omega$  incluída no espaço euclidiano  $\mathbb{R}^2$ , submetido a carregamentos, os deslocamentos e deformações resultantes serão definidas pelo campo vetorial de deslocamentos  $\mathbf{u}$  e o campo tensorial de deformações  $\boldsymbol{\varepsilon}$  dado pela seguinte expressão válida sobre a hipótese de pequenas deformações:

$$\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad \mathbf{u} = (u_x, u_y), \quad \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}}{2},$$

sendo  $\nabla^t \mathbf{u}$  o operador conjugado de  $\nabla \mathbf{u}$ .

Dizemos que o sólido é elástico linear se o tensor de tensões  $\boldsymbol{\sigma}$  verifica uma relação linear com o tensor deformações:

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad \forall \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{com } \mathcal{G} \text{ transformação linear.}$$

A seguir, apresentaremos o problema de elasticidade linear para uma estrutura submetida a carregamentos estáticos, apresentado como solução do princípio das potências virtuais.

**Problema 1.1** (Elasticidade linear). Seja um sólido elástico linear ocupando a região  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  de contorno  $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$  com  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ . Sejam conhecidos os campos de forças de contato  $\mathbf{t} : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R}^2$  e o campo de forças de volume  $\mathbf{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$ . O problema consiste em achar o campo vetorial de deslocamentos  $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$  tal que:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}})) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}} \, d\Gamma \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \in \mathcal{V}$$

sendo:

- $\mathcal{U}$  o conjunto dos campos de deslocamentos candidatos a solução que verificam  $\mathbf{u}|_{\Gamma_D} = \tilde{\mathbf{u}}$
- $\mathcal{V}$  o conjunto dos campos de deslocamentos virtuais que verificam  $\hat{\mathbf{u}}|_{\Gamma_D} = 0$
- $\mathbf{f}, \mathbf{t}$  campos de carregamentos de volume e de contato respectivamente.

Se existiram tensões antes da aplicação do carregamento, e portanto antes de provocar deformações  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , diremos que existem tensões residuais no sólido. Neste trabalho consideraremos que não existem tensões residuais. O Problema 1.1 tem solução única se as condições de contorno são apropriadas, falaremos disso em seções posteriores.

## 1.2.2 Simplificações consideradas

Nesta seção apresentaremos as hipóteses consideradas no desenvolvimento do modelo mecânico do comportamento do tecido arterial utilizado neste trabalho.

Algumas das simplificações enumeradas a continuação estão baseadas na bibliografia médica [5, 19], entanto que outras são simplificações consideradas para reduzir a complexidade do modelo a desenvolver. Estas são:

- material elástico linear,
- pequenos deslocamentos e deformações,
- modelo quase-estático e inercia desprezível,
- isotropia,
- quase incompressibilidade,
- estado plano de deformações,
- pressões uniformes nos contornos,
- tensões residuais desprezíveis.

A seguir, passaremos a descrever cada uma destas considerações.

**Linearidade** Em [24] são comparadas deformações de artérias de ovinos com resultados de modelos constitutivos de viscoelasticidade e de elasticidade linear. Os resultados mostram que o modelo viscoelástico é o mais apropriado para este tipo de tecidos, embora a hipótese de elasticidade linear é utilizada na modelagem de vários tecidos biológicos [5, 6, 25] e neste trabalho será considerada. Esta hipótese limita o modelo, e deverá ser levantada no desenvolvimento futuro do mesmo. Em [26] é dito que para artérias do tipo elásticas (as artérias de maiores dimensões) é possível utilizar modelos perfeitamente elásticos lineares, enquanto não é possível para artérias musculares, na periferia do corpo.

**Pequenos deslocamentos e deformações** A pressão do sangue pode produzir grandes deformações na parede arterial, não sendo sempre possível aplicar modelos de pequenos deslocamentos e deformações. Embora, a hipótese de pequenos deslocamentos é utilizada neste trabalho para reduzir a complexidade do modelo a desenvolver. Este modelo é apropriado somente para certo tipo de artérias e certos níveis de pressões que produzam deformações pequenas.

**Modelo quase-estático** Consideraremos que a aceleração dos pontos da parede arterial e a sua inercia é insignificante no processo de deformação da parede arterial submetida à pressão do sangue. Poderiam ser considerados modelos mais apropriados onde seja considerada a dinâmica do fenômeno.

**Isotropia** O material das artérias é anisótropo. Na Figura 1.2 podemos ver que as células do tecido estão distribuídas com uma direção preferencial, gerando um comportamento mecânico diferente nesta direção (ver [26] por mais detalhes). Embora, consideraremos que o material é isotrópico para simplificar o modelo.

**Quase incompressibilidade** Baseados na bibliografia médica [26–28], podemos concluir que os tecidos humanos são quase incompressíveis, portanto, consideraremos valores do coeficiente de *Poisson*  $\nu$  próximos a 0.5, em particular, para resolver os exemplos numéricos utilizaremos o valor 0.49. Veremos que considerar valores próximos a 0.5 pode trazer problemas numéricos e para evitá-los devem ser utilizadas formulações apropriadas.

**Estado plano de deformações** Esta hipótese consiste em considerar que as deformações longitudinais são insignificantes. Existe uma limitação importante para que esta hipótese seja razoável que ocorre quando existe um ateroma que engrossa a parede arterial em um local da artéria, provocando uma variação na geometria no eixo longitudinal. Embora, utilizaremos a hipótese sabendo que deverá ser levantada ao considerar um modelo tridimensional.

**Pressões uniformes nos contornos** Na escolha das condições de contorno a utilizar procuraremos emular o tipo de restrições que existem entre a artéria e os outros elementos com os quais entra em contato. A pergunta de quais são as condições reais de contorno da artéria continua sem ter resposta e representa um dos pontos mais importantes na correta modelagem do comportamento do tecido. Visto que trabalharemos sob hipótese de estado plano de deformações, consideraremos a seção transversal da artéria como uma geometria anular, portanto podemos separar o contorno em dois: o contorno interior e o exterior. As condições de contorno da parede interior podem ser impostas utilizando os valores de pressão do sangue nos pontos de contato com a parede. Estes valores de pressão podem ser obtidos através de análise numérica do fluxo ou também podem ser estimados através da medição em alguns pontos acessíveis para os métodos tradicionais, assumindo hipóteses sobre sua variação no percurso da artéria [29]. O valor de pressão é variável no ciclo cardíaco, atingindo o máximo valor em sístole e o mínimo em diástole. Nestes exemplos consideraremos a variação de pressão entre

estes dois estados, portanto consideraremos um carregamento de pressão interna uniforme com um valor constante e igual à diferença de pressões de sístole e de diástole (valores representativos são introduzidos no Capítulo 3). As condições de contorno da parede externa, por enquanto, não estão claras e trabalhos recentes propõem novos tipos de restrições que procuram modelar o complexo vínculo com os tecidos circundantes. Em [30] foram utilizados apoios viscoelásticos como vemos representados na Figura 1.9, estes vínculos tem o objetivo de emular o real comportamento do sustento da artéria. Neste trabalho não será considerada a

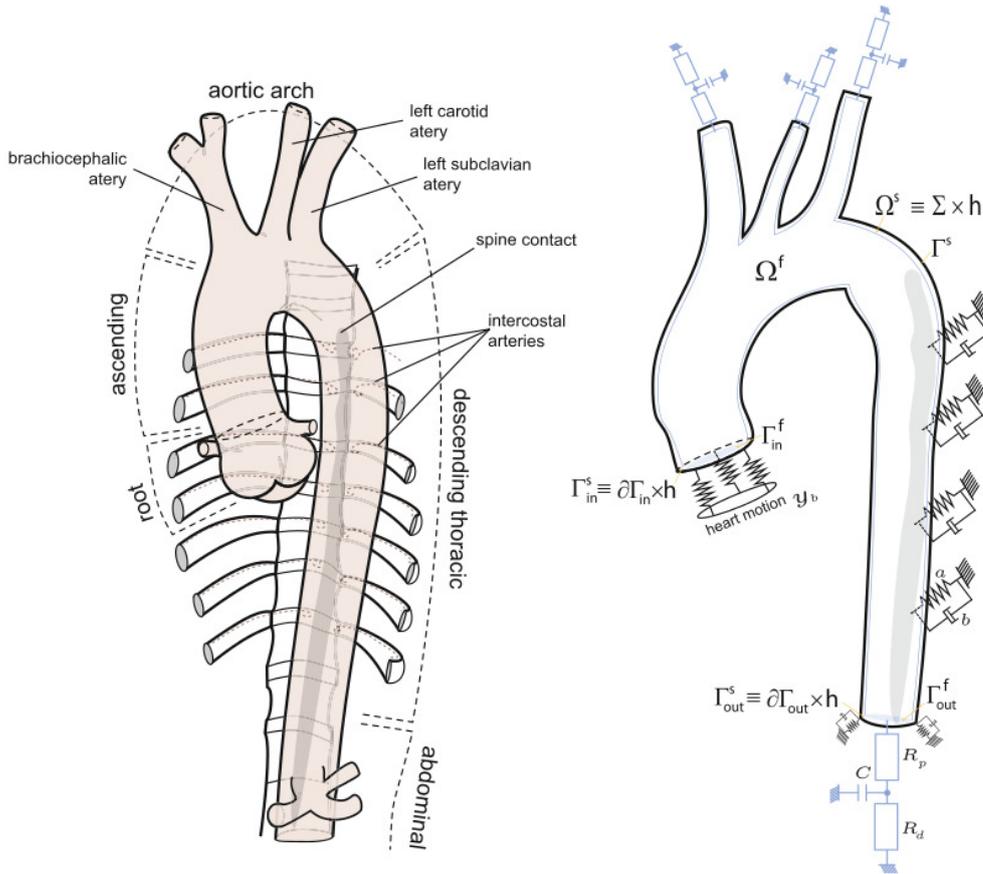


Figura 1.9: Esquema de condições de contorno de artéria apresentado em [30].

pressão de este tipo de apoios externos.

**Tensões residuais** Um ponto importante a considerar na modelagem das condições do problema de elasticidade linear é a existência de tensões residuais. As tensões residuais são as tensões internas que existem no material quando ainda não há carregamentos externos aplicados. Em alguns trabalhos da bibliografia se realizam experimentos onde artérias são cortadas longitudinalmente, observando que estas adquirem uma forma natural com um ângulo, provocando certa abertura no anel, e demonstrando que as artérias na configuração fechada têm tensões residuais

[26]. Nesta dissertação não consideraremos tensões residuais na configuração inicial, este fenômeno deverá ser incluído em futuras formulações.

### 1.2.3 Problema simplificado

Aplicando as simplificações definidas para a formulação do problema de elasticidade linear (Problema 1.1) obtemos a equação constitutiva simplificada dada pela expressão:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}) = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} + \lambda\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{I},$$

sendo  $\mathbf{I}$  a matriz identidade, e  $\mu$  e  $\lambda$  os parâmetros de *Lamé* do material. Já definida a equação constitutiva impomos a condição termodinâmica de energia de deformação positiva, dada pela seguinte expressão:

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon} > 0 \quad \forall \boldsymbol{\varepsilon} \in \text{Sym} \text{ e } \boldsymbol{\varepsilon} \neq 0,$$

onde " $\cdot$ "denota o produto escalar entre tensores. Esta relação é equivalente à seguinte relação entre os parâmetros de *Lamé* (ver [31]):

$$\mu > 0, \quad 2\mu + 3\lambda > 0.$$

Podemos reescrever a equação constitutiva e a condição termodinâmica utilizando o módulo de elasticidade longitudinal ou módulo de *Young*  $E$ , e o coeficiente de *Poisson*  $\nu$ , os quais verificam as seguintes relações:

$$E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \lambda}, \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}.$$

A equação constitutiva obtida utilizando estes novos parâmetros é a seguinte:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{E}[(1 + \nu)\boldsymbol{\sigma} - \nu\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{I}],$$

enquanto que as condições termodinâmicas são simplesmente

$$E > 0, \quad \text{e} \quad -1 < \nu < \frac{1}{2}.$$

Visto que trabalhamos sobre a hipótese de estado plano de deformações, os tensores de deformações e tensões terão três termos importantes e portanto serão representados da seguinte forma vetorial:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix}.$$

Aplicando esta notação vetorial podemos reescrever a equação constitutiva de forma matricial:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} \boldsymbol{\varepsilon} \quad \mathbb{C} = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} 1 - \nu & \nu & 0 \\ \nu & 1 - \nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

onde a matriz  $\mathbb{C}$  é chamada matriz constitutiva.

Aplicando esta nova notação e as hipóteses introduzidas na seção anterior, obtemos o problema de elasticidade linear simplificado apresentado a continuação.

**Problema 1.2** (Elasticidade linear simplificado). Seja um sólido elástico linear quase incompressível isotrópico ocupando a região  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  com contorno  $\partial\Omega = \Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$  com  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ . Seja conhecido o campo de forças de contato  $\mathbf{t} : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R}^2$ . O problema consiste em achar o campo vetorial de deslocamentos  $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$  tal que:

$$\int_{\Omega} \mathbb{C} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\hat{\mathbf{u}}) d\Omega = \int_{\Gamma_F} \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma,$$

sendo:

- $\mathcal{U}$  o conjunto dos campos de deslocamentos candidatos a solução que verificam  $\mathbf{u}|_{\Gamma_D} = \tilde{\mathbf{u}}$
- $\mathcal{V}$  o conjunto dos campos de deslocamentos virtuais que verificam  $\mathbf{u}|_{\Gamma_D} = 0$

## 1.2.4 Método dos Elementos Finitos

O Problema 1.2 consiste da resolução de uma equação variacional cuja resolução analítica resulta impraticável. Para poder obter uma solução para qualquer domínio e condições de contorno variáveis é necessário realizar aproximações para resolver o problema de forma numérica. Um método numérico de resolução aproximada é o Método dos Elementos Finitos (MEF). A seguir, apresentaremos brevemente este método.

Ao aplicar o MEF o domínio  $\Omega$  é dividido em  $n_{elem}$  regiões, as quais são chamadas “elementos”. No domínio de cada elemento são definidos certos pontos particulares chamados “nós”, e a partir dos deslocamentos produzidos nestes nós, chamados deslocamentos nodais, é obtida uma função para o deslocamento de todos os pontos do elemento correspondente. Esta função é obtida aplicando interpolação com funções de forma  $\{N_i\}$  escritas de forma matricial obtendo finalmente

$$\mathbf{u}^e = \begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \end{Bmatrix} = \mathbf{N}\mathbf{U}^e,$$

onde  $\mathbf{N}$  é uma matriz com as funções de forma de cada nó, e  $\mathbf{U}^e$  é o vetor de deslocamentos nodais do elemento  $e$ , assumindo que somente existem graus de liberdade nas direções  $x$  e  $y$ . Utilizaremos elementos triangulares com interpolação linear, portanto teremos 3 funções de forma lineares, obtendo a seguinte expressão para os deslocamentos dentro do elemento  $e$

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{U}^e = \left[ U_{x1}^e \quad U_{y1}^e \quad \dots \quad U_{x3}^e \quad U_{y3}^e \right]^t.$$

sendo  $U_{xj}^e$  o deslocamento na direção  $x$  do nó  $j$ . É importante levar em conta que este deslocamento  $u^e$  é uma função linear portanto não poderá representar problemas com deslocamentos de maior ordem, para isso devem ser utilizadas outras funções de forma  $N$ .

Esta função aproximada do deslocamento  $\mathbf{u}^e$  é substituída nas definições e equações formuladas, obtendo expressões discretizadas das mesmas, onde a variável passa a ser o vetor de deslocamentos nodais em lugar da função  $\mathbf{u}$ . Lembrando a definição de  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , podemos obter as deformações no elemento  $e$  da forma:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} = \mathbf{B}\mathbf{U}^e,$$

sendo  $\mathbf{B}$  uma matriz de derivadas das funções de forma, dada por:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \end{bmatrix} \quad \text{onde} \quad B_i = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix}$$

Também podemos calcular as tensões no elemento  $\boldsymbol{\sigma}^e$ , aplicando a equação (1.1), obtendo:

$$\boldsymbol{\sigma}^e = \mathbb{C}\mathbf{B}\mathbf{U}^e.$$

Todas estas expressões, válidas para cada elemento, podem ser levadas a expressões globais para todos os elementos da discretização, por exemplo, através de um processo de concatenação é obtido o vetor de deslocamentos nodais de todos os nós  $\mathbf{U} = \mathbb{A}_e^{n_{elem}} \mathbf{U}^e$ , onde o vetor  $\mathbf{U}$  terá  $2n_{\text{nós}}$  componentes (duas coordenadas por cada nó).

Finalmente, podemos reformular o Problema 1.2, substituindo os tensores e os deslocamentos pelas respectivas aproximações de elementos finitos, obtendo o problema que consiste em achar o vetor de deslocamentos nodais  $\mathbf{U} \in \mathcal{U}^h$  (sendo  $\mathcal{U}^h$

a contrapartida discreta de  $\mathcal{U}$ ), que verifica a seguinte equação:

$$\left( \int_{\Omega} \mathbf{B}^t \mathbb{C} \mathbf{B} d\Omega \right) \mathbf{U} = \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}^t \mathbf{t} d\Gamma$$

O fator que multiplica ao vetor  $\mathbf{U}$  é uma matriz, chamada matriz de rigidez, e o termo à direita da igualdade é o vetor de forças nodais, portanto podemos reescrever a equação de forma matricial:

$$\mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{F}. \quad (1.2)$$

Aplicamos as condições de contorno cinemáticas, eliminando (se  $\tilde{\mathbf{u}} = 0$ ) as filas e colunas correspondentes, e obtemos um sistema linear de equações compatível determinado.

Nas hipóteses constitutivas realizadas neste trabalho, a matriz  $\mathbf{K}$  verifica:

$$\mathbf{K}(\mathbf{E}) = \sum_{i=1}^{n_{elem}} E_i \bar{K}_i$$

onde  $\bar{K}_i$  é ua matriz de rigidez do elemento  $i$  (e do mesmo tamanho que  $\mathbf{K}$ ), e  $E_i$  é o módulo de *Young* do elemento  $i$ .

Temos apresentado nesta seção o Método dos Elementos Finitos, método que resolve o problema de elasticidade linear de forma aproximada, considerando que os deslocamentos são interpolados a partir dos deslocamentos nodais, utilizando funções de interpolação chamadas funções de forma.

### 1.3 Problemas Inversos

Frequentemente cientistas e engenheiros desejam estimar parâmetros ou propriedades, a partir de medições de magnitudes observáveis que estão indiretamente relacionadas com os parâmetros a estimar. Este tipo de problemas aparecem em diversas aplicações da ciência por exemplo: engenharia biomédica, modelagem de escoamentos, geofísica, etc. Na modelagem de escoamentos pode ser necessário estimar parâmetros do fluido a partir de medições de pressões em diferentes pontos. Desafortunadamente um pequeno erro nos dados pode gerar erros enormes no parâmetro estimado, este fenômeno é chamado de instabilidade na solução.

A seguir, introduziremos ferramentas matemáticas necessárias para definir e estudar este tipo de problemas e apresentaremos brevemente, algumas técnicas utilizadas para reduzir o efeito da introdução de erros nos dados.

### 1.3.1 Teoremas da teoria de problemas inversos

Seja uma região  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , e dois espaços vetoriais normados completos de funções definidas em  $\Omega$ , denotados por  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Consideraremos que existe um operador (possivelmente não linear)  $K$  que relaciona elementos  $f \in \mathcal{H}_1$  com elementos  $g \in \mathcal{H}_2$ , da forma  $K(f) = g$ . Este operador pode ser definido por uma equação diferencial ordinária, uma equação em derivadas parciais ou um sistema de equações (por exemplo a equação  $K(f) = f''$ ). Já definido o operador  $K$  podemos introduzir os conceitos de problema bom e mal posto.

**Definição 1.1** (Problema bem-posto). Seja um operador  $K : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ . O problema dado pela equação:

$$K(f) = g \tag{1.3}$$

é bem-posto, se se verificam:

- (i) para cada  $g \in \mathcal{H}_2$  existe um  $f \in \mathcal{H}_1$ , chamado solução, para o qual se verifica (1.3);
- (ii) a solução  $f$  é única; e
- (iii) a solução é estável com respeito a perturbações em  $g$ . Isto quer dizer que se  $K(f_*) = g_*$ , e  $K(f) = g$ , então  $f \rightarrow f_*$  sempre que  $g \rightarrow g_*$ .

**Definição 1.2** (Problema mal-posto). Um problema que não verifica alguma das condições da Definição 1.1 é chamado de mal-posto.

**Definição 1.3** (Operador compacto). Um operador linear contínuo  $K : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  é compacto se e somente se o fecho da imagem de qualquer conjunto limitado de  $\mathcal{H}_1$  é um conjunto compacto de  $\mathcal{H}_2$ .

**Problema 1.3** (Problema Inverso). Dado um operador  $K$  e dada uma equação  $K(f) = g$ . Definimos o problema inverso associado ao operador  $K$  como o problema de achar  $f$  conhecendo  $g$ .

**Teorema 1.1.** *Seja  $K : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  um operador linear compacto, e sejam  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  espaços de dimensão infinita. Se o posto de  $K$ , dado por  $\dim(K(\mathcal{H}_1))$ , é infinito, então o problema inverso dado pela equação  $K(f) = g$  é mal-posto visto que as condições (i) e (iii) da Definição 1.1 são violadas. Se o posto de  $K$  é finito, então a condição (ii) é violada.*

A demonstração deste teorema e seu enunciado completo podem ser vistos em [32]. Finalmente, podemos concluir o seguinte corolário:

**Corolário 1.1.** *Seja  $K : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  um operador linear compacto, e sejam  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  espaços de dimensão infinita. Então o problema inverso dado pela equação  $K(f) = g$  é mal-posto.*

No seguinte exemplo apresentamos um operador integral definido em espaços vetoriais de funções reais e analisaremos suas propriedades.

**Exemplo 1.1.** Sejam  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  o espaço das funções quadrado integráveis no intervalo  $(0, L)$ , denotado como  $L_2(0, L)$ , com o produto interno definido por  $\langle f, g \rangle = \int_0^L f(x) g(x) dx$ . Consideramos o operador  $K : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  dado por:

$$K(f)(x) = \int_0^L \frac{F}{A} H(x-y) f(y) dy \quad H(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases}$$

onde  $H$  é conhecida como função de *Heaviside*,  $F \in \mathbb{R}$  e  $A \in \mathbb{R}^+$ .

Utilizando propriedades da integral, é simples ver que este operador é linear. Para ver que o operador é compacto é necessário provar que  $\|K\| < \infty$ , o qual é equivalente a provar que a seguinte integral é limitada [32]:

$$\int_0^L \int_0^L \left( \frac{F}{A} H(x-y) \right)^2 dy dx = \frac{F^2 L^2}{A^2 2} < \infty.$$

Utilizando a compacidade e aplicando o Corolário 1.1, concluímos que o problema inverso dado pela equação  $K(f) = g$  é mal-posto. Além disso, gostaríamos de saber quais das condições de operador bem-posto não verifica. Para isso calcularemos o posto do operador, considerando um conjunto de vetores de  $\mathcal{H}_1$  que chamaremos  $B_1$ , dado por

$$B_1 = \{f_i(x)\} = \{x^i\}_{i=0}^{\infty}$$

e calculamos sua imagem  $B_2$  ao aplicar o operador  $K$

$$K(f_i)(x) = \int_0^x y^i dy \quad \Rightarrow \quad B_2 = \left\{ \frac{x^{i+1}}{i+1} \right\}_{i=0}^{\infty}$$

desta forma, encontramos um conjunto incluído em  $\mathcal{H}_2$  que inclui um subespaço de dimensão infinita, portanto o posto de  $K$  é infinito. Utilizando o Teorema 1.1 concluímos que o problema inverso dado por  $K(f) = g$  é mal-posto já que não existe solução, e se existe não é estável.

### 1.3.2 Regularização de problemas inversos não lineares

Consideremos agora que o operador  $K$  representa um modelo matemático de algum fenômeno físico, onde  $\mathbf{f}$  é um vetor de parâmetros e  $\mathbf{g}$  é um vetor de resultado

de aplicar o modelo  $K(\mathbf{f}) = \mathbf{g}$ . Ao trabalhar na resolução de problemas reais, devemos levar sempre em conta que os dados medidos ou processados possuem erro, comumente chamado ruído. As duas formas mais habituais de ruído são a influência de efeitos dos instrumentos de medição e o erro de representação numérica. Consideremos então que realizamos um experimento no qual o valor medido da magnitude a ser modelada não contém nenhum tipo de erro, obtendo o vetor  $\mathbf{g}_{teo}$ . Podemos dizer que se o problema inverso é bem-posto, existirá algum vetor de parâmetros que verifique

$$\mathbf{g}_{teo} = K(\mathbf{f}_{teo}).$$

Agora suponhamos que a medição é realizada introduzindo um erro  $\eta$  aos dados, então ao resolver o problema inverso com novos dados obteremos um novo vetor de parâmetros

$$K(\mathbf{f}) = \mathbf{g} = \mathbf{g}_{teo} + \eta.$$

Usualmente, a solução  $\mathbf{f}$ , obtida para dados com baixo nível de ruído  $\mathbf{g}$ , pode ser muito diferente à solução teórica  $\mathbf{f}_{teo}$ , isto é devido ao fenômeno de instabilidade que ocorre quando a condição (iii) da Definição 1.1 não é verificada. Para minimizar o efeito da instabilidade existem métodos chamados de regularização, que procuram diminuir o erro das soluções numéricas de problemas inversos mal-postos.

Consideraremos agora que o operador  $K$  consiste de um sistema de equações não lineares, e que o vetor de dados  $\mathbf{g}$  contém erros, portanto é possível que não exista  $\mathbf{f}$  que verifique a equação  $K(\mathbf{f}) = \mathbf{g}$ . Para encontrar o  $\mathbf{f}$  que seja ajustado de melhor forma aos dados minimizaremos o resíduo  $r = K(\mathbf{f}) - \mathbf{g}$ , portanto o problema inverso passa a ser equivalente a

$$\min_{\mathbf{f}} \|K(\mathbf{f}) - \mathbf{g}\|^2$$

**Método de Tikhonov** Para obter uma solução do problema para dados com erros aplicamos o método de regularização de *Tikhonov* para problemas não lineares [32, 33]. Este método consiste em introduzir um termo ao funcional a minimizar com o objetivo de “suavizar” as soluções obtidas. Devemos resolver então o seguinte problema regularizado:

$$\min_{\mathbf{f}} \|K(\mathbf{f}) - \tilde{\mathbf{g}}\|^2 + \gamma^2 \|\mathbf{L}\mathbf{f}\|^2$$

onde a matriz  $\mathbf{L}$  definirá o tipo de regularização. Por exemplo no caso que se procure penalizar soluções com derivada primeira elevada se poderá utilizar uma matriz da

forma

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \vdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

ou se simplesmente é desejado obter soluções sem valores elevados é possível utilizar  $\mathbf{L} = \mathbf{I}$ . O coeficiente  $\gamma$  definirá o nível de penalização desejado. Se for utilizado  $\gamma$  pequeno ou zero, obteríamos o problema original.

Em [34] podemos ver outras técnicas de regularização e sua aplicação à resolução de problemas de engenharia.

## 1.4 O algoritmo de otimização FDIPA

Nesta seção apresentaremos um algoritmo de ponto interior para a resolução de problemas de otimização não linear com restrições de desigualdade. Começaremos introduzindo alguns conceitos importantes da otimização não linear e posteriormente, apresentaremos o Algoritmo de Ponto Interior de Direções Viáveis (FDIPA).

### 1.4.1 Noções de otimização não linear

Um problema de otimização ( $P$ ) consiste em encontrar o argumento  $x$  (variável de projeto) que minimize ou maximize a função  $f(x)$  (chamada de função objetivo), estando  $x$  sujeito a verificar certas relações algébricas, chamadas restrições, as quais podem ser de igualdade ou desigualdade. O problema geral de otimização pode ser formulado da seguinte forma:

$$(P) \begin{cases} \text{minimizar} & f(x) \\ \text{sujeito a:} & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(x) = 0 \quad j = 1, \dots, p \\ & x \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

No caso de que alguma das funções  $f$ ,  $g$  ou  $h$  seja não linear, dizemos que ( $P$ ) é um problema de otimização não linear, e no caso contrário será um problema de otimização linear. Existem métodos diferentes para resolver cada uma destas categorias de problemas. O algoritmo que será apresentado é capaz de resolver problemas de ambas categorias, mas foi desenvolvido para obter um ótimo

desempenho em problemas não lineares. É por isso que é um algoritmo apropriado para o problema a resolver.

**Métodos iterativos** Um método iterativo para resolver um problema matemático geral (por exemplo sistemas de equações), consiste de uma série de operações matemáticas ( $\mathbb{A}$ ) que provêm de uma sequência de pontos  $(x_k)$ .

$$\mathbb{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad x_{k+1} = \mathbb{A}(x_k) \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

O algoritmo FDIPA é um método iterativo e gera uma sequência de pontos, que para certas hipóteses sobre as funções  $f$ ,  $g$  e  $h$ , converge a uma solução do problema ( $P$ ).

Consideramos variáveis auxiliares  $\lambda \in \mathbb{R}^m$  e  $\mu \in \mathbb{R}^p$ , chamadas variáveis duais ou multiplicadores de *Lagrange*, entretanto que a variável  $x$  é chamada primal. Os vetores são considerados como colunas, portanto as funções vetoriais das restrições  $g(x) \in \mathbb{R}^m$  e  $h(x) \in \mathbb{R}^p$ , são representados por vetores coluna. Podemos agora definir a função de *Lagrange* associada ao problema da seguinte forma:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^t g(x) + \mu^t h(x).$$

Esta função será utilizada para achar novos pontos que verifiquem as restrições de forma simples.

### Buscas lineares inexatas

Muitos algoritmos iterativos de otimização utilizam direções de movimento  $d^k$  para atualizar o ponto  $x^k$ . Em cada iteração calcula-se uma direção na qual, movimentando-se a partir do ponto  $x^k$ , obtemos o ponto correspondente à seguinte iteração  $x^{k+1} = x^k + t^k d^k$ , onde  $t^k$  será chamado o passo da iteração  $k$ .

No caso do FDIPA as direções são viáveis, e de descida, portanto, cada ponto gerado pelo algoritmo em cada passo  $x^{k+1}$ , verificará as restrições, assim como também a condição de descida:  $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ . Para procurar obter um melhor resultado, necessitamos achar o passo  $t^k$  que minimize o valor de  $f$  na direção  $d^k$ . Isto é obtido através da aplicação de algum método de busca linear. Achar o mínimo exato dos valores da função na direção  $d^k$  é impraticável, por tanto, são introduzidas as buscas inexatas. Neste tipo de buscas, consideramos que o mínimo (aproximado) é atingido quando certo critério é verificado. Existem diferentes regras para fazer este tipo de buscas, a seguir, introduziremos as buscas de *Armijo* e *Wolfe* e finalmente apresentaremos brevemente a versão de *Wolfe* modificado utilizada no algoritmo FDIPA.

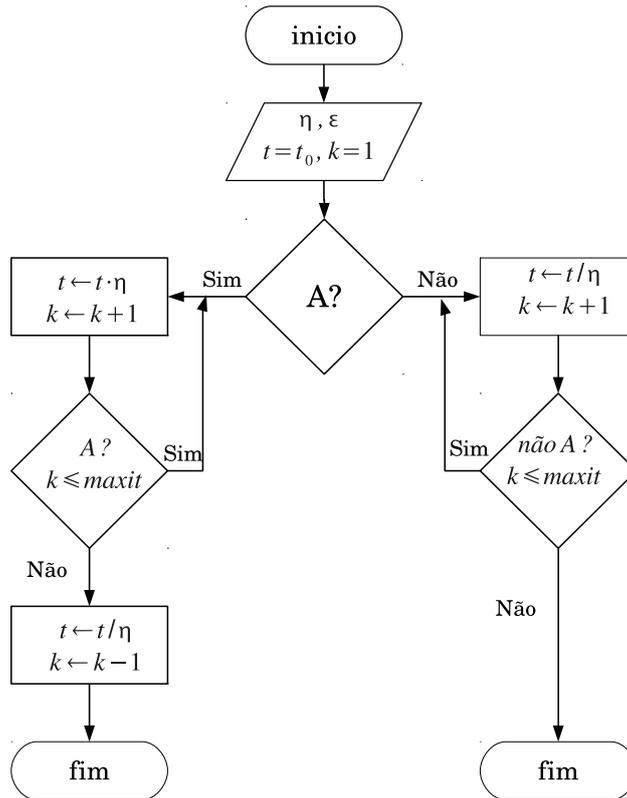


Figura 1.10: Fluxograma da busca linear de *Armijo*

### Regra de *Armijo*

Como vimos, o objetivo das buscas lineares é calcular o comprimento do passo que resulta em decréscimo suficiente da função  $f$  em relação ao valor  $f(x_k)$ . A ideia das buscas inexatas é que isto pode ser bem mais econômico do ponto de vista computacional do que a minimização unidimensional, e mesmo assim, obter resultados suficientes para garantir a convergência do algoritmo [35].

Para apresentar este tipo de métodos é útil definir a função auxiliar  $\phi$ , dada por

$$\phi(t) = f(x + t d)$$

sendo  $t$  o passo de avanço na direção  $d$ .

Seja o parâmetro  $\varepsilon \in (0, 1)$ , definimos a condição  $A$ , que será avaliada em cada iteração, dada pela seguinte desigualdade

$$A : \phi(t) \leq \phi(0) + \varepsilon \phi'(0)t.$$

Seja a constante real  $\eta > 1$ , e a tolerância máxima para a quantidade de iterações  $maxit$ , é iniciado o processo da busca, descrito no fluxograma da Figura 1.10.

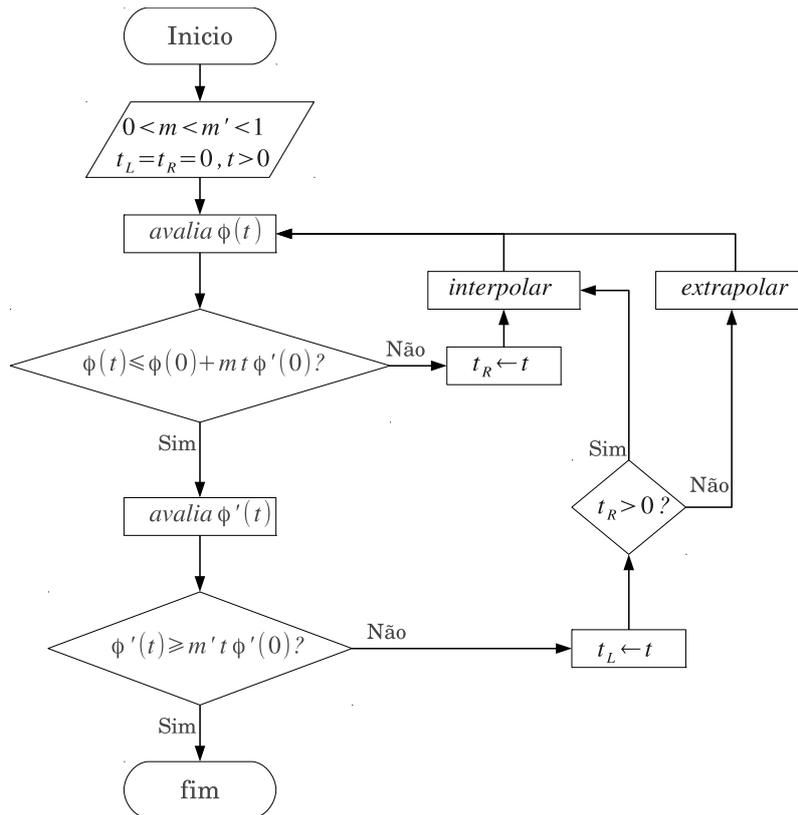


Figura 1.11: Fluxograma da busca linear de *Wolfe*

O processo começa pela definição de um passo inicial  $t = t_0$ , posteriormente é avaliada a condição  $A$ , e em função do resultado é multiplicado ou dividido o  $t$  pela constante  $\eta$  como vemos no fluxograma. O resultado da busca é o maior passo  $t$  da forma  $t_0/\eta^q$  que verifica a condição  $A$ .

### Regra de *Wolfe*

A regra de *Wolfe* adiciona mais uma outra condição à utilizada em *Armijo*. Na Figura 1.11 vemos o fluxograma do processo da busca de *Wolfe*. Neste método é procurado o maior passo que verifica a condição  $A$  anterior, além de adicionar a condição adicional de um valor mínimo dado pela seguinte relação da derivada de  $\phi$ :

$$\phi'(t) \geq m' t \phi'(0),$$

sendo  $m'$  um parâmetro real dado.

**Regra de *Wolfe* modificada** No algoritmo FDIPA é utilizada uma versão modificada da regra de *Wolfe* para a busca linear, adicionando as restrições na avaliação das condições durante o processo. Na Figura 1.12, podemos ver o fluxograma deste método. As condições avaliadas do funcional  $\phi$  e as restrições

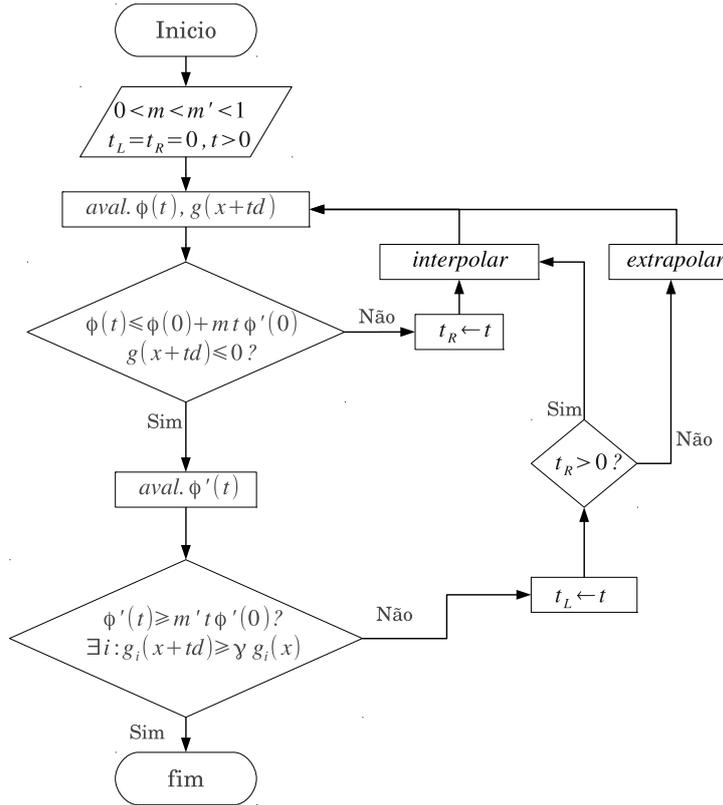


Figura 1.12: Fluxograma da busca linear de *Wolfe* modificada

$g$  podem ser modificadas, e utilizar somente a função de *Lagrange* introduzida anteriormente.

### Atualização Quasi-Newton

Ao aplicar o método de resolução de equações não lineares de *Newton*, necessitaríamos calcular a hessiana da função de *Lagrange*  $L$ . Visto que computacionalmente isto é geralmente custoso, são utilizadas matrizes aproximadas  $B$ , as quais, são atualizadas em cada iteração, de forma tal que todas as  $B^k$  verifiquem condições da hessiana, como simetria (devido à continuidade das derivadas segundas da função  $L$ ) e outras que definem o tipo de atualização utilizada.

Uma das atualizações mais utilizadas são as da chamada família de *Broyden*. Em particular neste algoritmo é utilizada a chamada *BFGS* dada pela equação (ver [36] por mais detalhes):

$$B^{k+1} = B^k + \frac{\gamma^k (\gamma^k)^t}{(\delta^k)^t \gamma^k} - \frac{B^k \delta^k (\delta^k)^t B^k}{(\delta^k)^t B^k \delta^k},$$

sendo  $\delta^k$  e  $\gamma^k$  dados por:

$$\delta^k = x^{k+1} - x^k \quad \text{e} \quad \gamma^k = \nabla L(x^{k+1}) - \nabla L(x^k)$$

O algoritmo FDIPA utiliza esta regra para o cálculo das matrizes  $B^k$  em cada iteração.

## 1.4.2 O algoritmo FDIPA

Nesta seção apresentaremos o algoritmo FDIPA para problemas de otimização não linear com restrições de desigualdade. O FDIPA é um algoritmo iterativo para encontrar uma solução do problema (P). O algoritmo resolve o sistema não linear dado pelas condições de otimalidade de KKT, apresentadas a seguir. Dado um ponto inicial, o algoritmo define uma sequencia de pontos tal que a função objetivo seja monotonamente decrescente. Em cada ponto uma direção de descida é obtida, e, logo fazendo uma busca linear inexata ao longo dessa direção obtemos o seguinte ponto do método [7, 8].

Este algoritmo e suas variações como o FAIPA, o FAIPA-H e outros, tem demonstrado ser apropriado para a resolução de problemas de engenharia de variado tipo, como podemos ver em [37].

Lembramos que o problema de otimização não linear com restrições de desigualdade e sem restrições de igualdade é escrito da seguinte forma

$$\begin{cases} \min & f(x) \\ \text{s.a.} & g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m \\ & x \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

Definimos as matrizes auxiliares  $\Lambda$  e  $G$  dadas pela seguinte expressão

$$G(x) = \text{diag}(g(x)) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda) \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}^m.$$

Apresentamos agora o teorema de Karush-Kuhn-Tucker [2], o qual diz que se  $x^*$  é mínimo local então existe  $\lambda \in \mathbb{R}^m$  tal que se verifica

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) + \nabla g^t(x^*) \lambda = 0 \\ \Lambda g(x^*) = 0 \\ \lambda \geq 0 \\ g(x^*) \leq 0 \end{cases}$$

Definimos a matriz  $H$ , hessiana da função de *Lagrange* do problema:

$$H(x, \lambda) = \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^m \nabla^2 g_i(x) \lambda_i$$

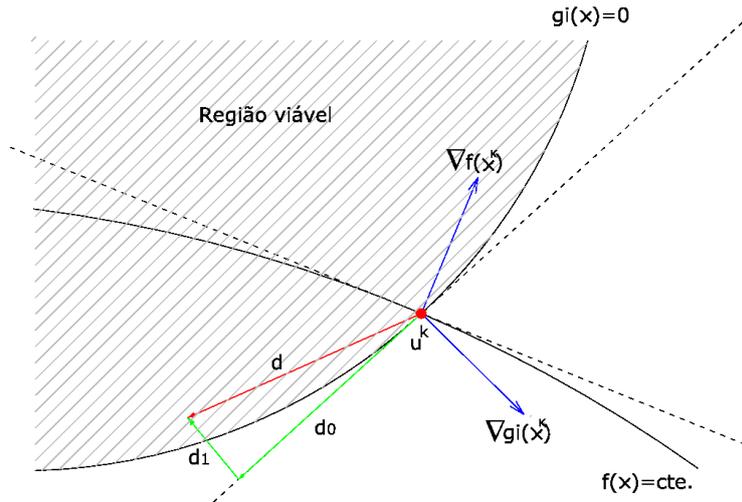


Figura 1.13: Esquema do cálculo de direção viável do FDIPA

portanto podemos escrever o sistema de *Newton* para resolver as duas primeiras equações do sistema KKT, obtendo o seguinte sistema linear

$$\begin{bmatrix} H(x^k, \lambda^k) & \nabla g(x^k)^t \\ \Lambda^k \nabla g(x^k) & G(x^k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^{k+1} - x^k \\ \lambda_0^{k+1} - \lambda^k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(x^k) + \nabla g(x^k)^t \lambda^k \\ G(x^k) \lambda^k \end{bmatrix}.$$

substituímos a matriz hessiana  $H$  por uma matriz definida positiva  $B^k$ , que será definida pela regra BFGS em cada iteração. Operando podemos definir dois sistemas de equações lineares

$$\begin{bmatrix} B^k & \nabla g(x^k)^t \\ \Lambda^k \nabla g(x^k) & G(x^k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_0^k \\ \lambda_0^{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(x^k) \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde  $d_0^k = x^{k+1} - x^k$ . Agora consideramos o sistema perturbado

$$\begin{bmatrix} B^k & \nabla g(x^k) \\ \Lambda^k \nabla g(x^k)^t & G(x^k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1^k \\ \lambda_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\lambda^k \end{bmatrix}$$

onde  $B^k$  é uma matriz definida positiva que aproxima a hessiana, atualizada utilizando a regra BFGS já vista. Fazendo a combinação linear sistema  $d_0$  + sistema  $d_1$   $\rho$  obtemos

$$\begin{bmatrix} B^k & \nabla g(x^k) \\ \Lambda^k \nabla g(x^k)^t & G(x^k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d^k \\ \bar{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f(x^k) \\ -\rho \lambda^k \end{bmatrix}$$

Este cálculo de direção pode ser visto graficamente na Figura 1.13, onde vemos que a direção que o algoritmo escolhe é efetivamente uma combinação das  $d_0$  e  $d_1$ . Para

a escolha do  $\alpha$  considero que desejamos um  $\rho$  tal que  $d^t \nabla f \leq \alpha$  e  $d_0^t \nabla f(x) \leq 0$ , portanto

$$\rho \leq (\alpha - 1) \frac{d_0^t \nabla f(x)}{d_1^t \nabla f(x)}$$

Como vimos, a busca linear utilizada é uma versão modificada da busca de *Wolfe*, e o diagrama de fluxo correspondente foi apresentado na Figura 1.12. A regra da atualização do  $\lambda$  deverá ser tal que sejam definidos novos valores  $\lambda$  positivos.

Finalmente podemos resumir todo o processo do algoritmo através do diagrama de fluxo apresentado na Figura 1.14.

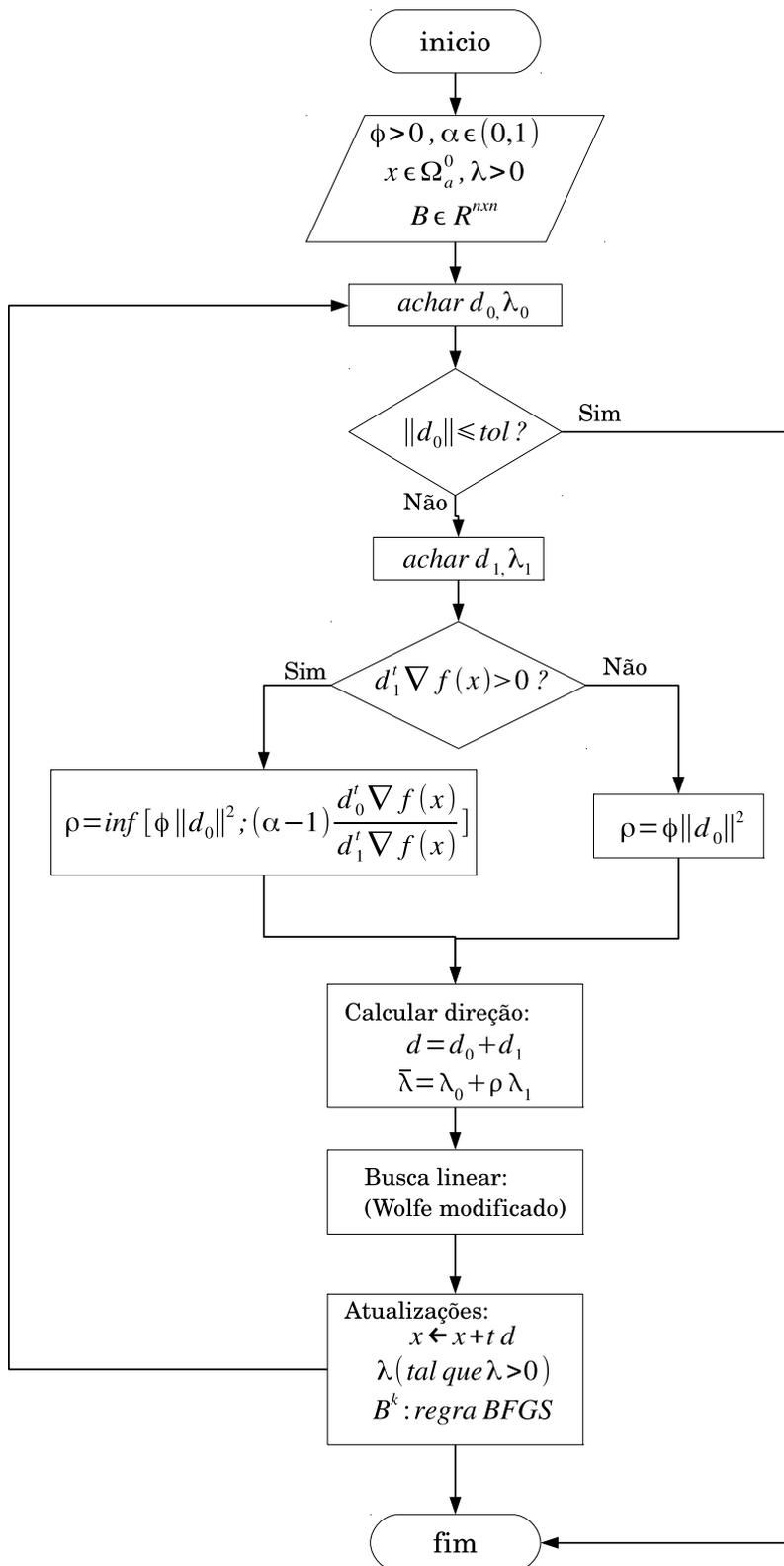


Figura 1.14: Fluxograma do algoritmo FDIPA

## Capítulo 2

# Método de caracterização de propriedades mecânicas

Neste capítulo aplicaremos os conceitos introduzidos no Capítulo 1 para propor uma formulação matemática do problema da caracterização de propriedades mecânicas. Este problema está associado á diagnose da Aterosclerose, e aqui se pretende apresentar a conexão entre o problema médico e o modelo matemático formulado. É necessário que fique claro que o modelo matemático apresentado é uma aproximação do problema real, e outros modelos de maior complexidade podem ser necessários para uma melhor caracterização.

Na primeira seção começaremos apresentando a conexão entre o problema da diagnose da Aterosclerose e o problema geral de caracterização de propriedades de materiais. A seguir, formularemos matematicamente o problema de caracterização de propriedades, portanto, veremos como a problemática médica pode ser atacada através da resolução de um problema matemático equivalente. Na Seção 2.3 proporemos um método numérico para resolver o problema matemático formulado.

### 2.1 Da diagnose médica ao problema inverso

Antes de começar o processo da modelagem matemática é importante deixar claro ao leitor que nenhuma ferramenta informática será capaz de substituir o trabalho dos profissionais e médicos especialistas na disciplina. O objetivo deste tipo de formulações matemáticas é utilizar os conceitos de outras ciências para obter o máximo proveito possível da informação que os médicos já podem obter com ferramentas que utilizam no dia a dia. Nesta seção se pretende que o leitor entenda os passos feitos para passar do problema da diagnose ao modelo matemático, tendo em conta as aproximações que serão feitas e as limitações do modelo.

**Algumas limitações da diagnose atual** Como foi dito na Seção 1.1.2, uma das perguntas mais importantes que o médico deve responder na hora da diagnose é se a parede arterial falhará ou não. Posteriormente, na Seção 1.1.3, vimos que através de técnicas de ultra-som, é possível ver mapeamentos de densidades dos materiais, dos quais os médicos determinam, empiricamente, a constituição da parede arterial. Desta forma, estimam se a parede será capaz de suportar a pressão do sangue ou não. Este processo é difícil de realizar empiricamente, visto que involucra estados tensionais complexos que se desenvolvem dentro do tecido arterial. Estas tensões, podem variar de forma importante para pequenas mudanças nas propriedades mecânicas dos materiais da parede, desta forma as técnicas de diagnose atuais tem um alto grau de incerteza, o qual é comunicado ao paciente previamente ao tratamento.

Podemos dizer que a diagnose ideal é aquela na qual o médico conhece a composição exata da parede arterial no local estudado. Além disso, no caso que fosse introduzida uma análise numérica ao processo, seria possível simular os efeitos que teriam diferentes tratamentos previamente à aplicação, visto que os técnicos poderiam achar os valores das tensões internas do tecido, para qualquer valor de pressão do sangue e assim simular os resultados antes da operação.

**Identificação de propriedades** Como vimos, para que seja possível quantificar se algum local da parede arterial vai falhar ou não (e uma possível saída do trombo ao sangue), deve-se poder calcular as tensões produzidas no tecido para o valor da pressão máxima do sangue. Para poder calcular essas tensões é necessário resolver o problema de elasticidade linear, para o qual devemos conhecer as propriedades mecânicas do material. Desta forma chegamos a que é necessário identificar as propriedades mecânicas de todos os pontos da parede arterial para poder fazer uma análise numérica precisa. É importante entender que valores diferentes de módulo de *Young*, representam tratamentos diferentes, portanto, o erro nos valores obtidos através de qualquer método numérico deve ser o mínimo possível em todas as regiões da artéria. Não é admissível obter um erro de 100% em alguma região e zero erro em todas as outras, já que o tratamento pode ser totalmente diferente devido esse erro local. Este eventual mal diagnóstico pode produzir resultados negativos na evolução do paciente.

## 2.2 Um exemplo

Nesta seção formularemos e resolveremos um problema simples de caracterização de propriedades mecânicas, com o objetivo de apresentar a problemática associada aos problemas direto e inverso, os quais serão formulados posteriormente. Também

serão realizadas análises teórico-numéricas que posteriormente serão repetidas para problemas de maior complexidade.

### 2.2.1 Problema contínuo

Seja uma barra de comprimento  $L$  e seção transversal constante de área  $A$ , formada por um material elástico linear com módulo de *Young* variável  $E : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ , e um carregamento  $F$  como vemos na Figura 2.1. O problema direto consistirá em

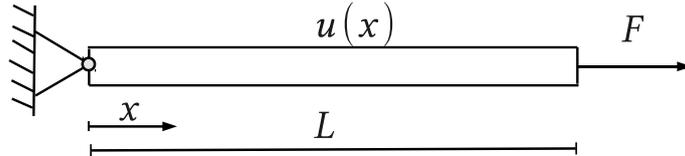


Figura 2.1: Exemplo unidimensional contínuo

calcular a função deslocamento  $u$  em cada ponto  $x$ . A seguir, obteremos um operador  $P_c$  associado a este problema contínuo, onde a cada função  $E(x)$  corresponde uma função  $u(x)$ .

Aplicando a formulação pontual do problema obtemos a seguinte equação diferencial de primeira ordem,

$$\frac{du}{dx}(x) = \frac{F}{AE(x)}$$

a qual podemos resolver integrando, obtendo assim, para cada distribuição de propriedades  $E(x)$ , o campo de deslocamentos solução do problema direto de elasticidade linear  $u(x)$  dado por

$$u(x) = \int_0^x \frac{F}{A} \frac{1}{E(s)} ds.$$

Se introduzimos a mudança de variável  $R(x) = 1/E(x)$  e também a função de *Heaviside*  $H$ , obtemos uma nova expressão para a função deslocamento  $u$  em função de  $R$ , com a qual definimos novamente operador  $P_c : R \rightarrow u$

$$u(x) = (P_c R)(x) = \frac{F}{A} \int_0^L H(x-y) R(y) dy \quad H(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases}$$

utilizando o resultado obtido no Exemplo 1.1 concluímos que a solução  $R$  não sempre existe, e que, quando existe, um erro pequeno em  $u$  pode gerar grandes erros em  $R$ , e portanto também em  $E$ . Aplicando os resultados da Seção 1.3.1, concluímos então que o problema inverso associado ao problema de elasticidade linear contínuo

unidimensional é mal-posto. Este fenômeno também ocorre para problemas de dimensão maior, os resultados analíticos podem ser generalizados para estes casos.

## 2.2.2 Problema discreto

Para procurar achar uma solução ao fato de que o problema contínuo é mal-posto, aplicaremos o Método dos Elementos Finitos e formularemos o problema direto discretizado.

Seja uma barra de comprimento  $L$  e seção constante de área  $A$ , formada por  $n$  segmentos de materiais elástico lineares com módulo de *Young*  $E_i$ , como vemos na Figura 2.2. O problema direto consiste em calcular os deslocamentos nodais  $u_i$  a

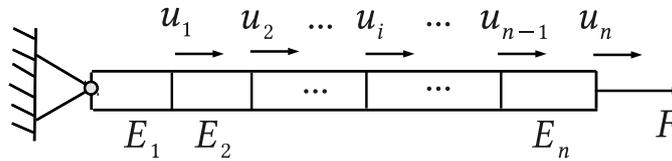


Figura 2.2: Exemplo unidimensional simplificado

partir dos valores dos módulos de *Young*  $E_i$ . A seguir, obteremos o operador  $P_d$  que realiza esta operação.

Para resolver o problema direto aplicamos o MEF, realizando uma discretização em  $n$  elementos finitos, obtendo o seguinte sistema de equações

$$\begin{aligned} u_n &= \frac{F L}{n A} \frac{1}{E_n} + u_{n-1} \\ u_{n-1} &= \frac{F L}{n A} \frac{1}{E_{n-1}} + u_{n-2} \\ &\vdots \\ u_1 &= \frac{F L}{n A} \frac{1}{E_1} + u_0 \end{aligned}$$

Este sistema de  $n$  equações e  $n+1$  incógnitas pode ser resolvido aplicando a condição de contorno  $u_0 = 0$ . Para apresentar a solução da mesma forma que no caso contínuo realizamos a mudança de variável  $R_i = 1/E_i$ , e substituímos de forma recursiva  $u_i$ , obtendo o deslocamento para qualquer nó  $i$  como:

$$u_i = \frac{F L}{n A} \sum_{j=1}^i R_j \quad i = 1, \dots, n$$

Desta forma, podemos definir o operador  $P_d$ , que leva o vetor  $\mathbf{R}$  ao vetor de deslocamentos  $\mathbf{U}$ , da seguinte forma

$$P_d : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{U} \quad \mathbf{U} = P_d \mathbf{R} = \frac{FL}{nA} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{R} = \frac{FL}{nA} T \mathbf{R}.$$

Vemos que o operador  $P_d$  é linear e está dado pela matriz  $P_d = \frac{FL}{nA} T$ , sendo  $T$  uma matriz triangular inferior. O Teorema 1.1 não pode ser aplicado visto que os espaços de partida e chegada são de dimensão finita. Embora, o sistema de equações de  $n \times n$  pode ser resolvido ao utilizar  $\mathbf{U}$  como dados, obtendo o vetor  $\mathbf{R}$  dado por

$$R_i = \frac{nA}{FL} (u_i - u_{i-1}).$$

Fica demonstrado assim que o operador  $P_d$  é invertível, é portanto, o problema inverso é bem-posto e pode ser escrito matricialmente da seguinte forma

$$\mathbf{R} = P_d^{-1} \mathbf{U} = \frac{nA}{FL} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \vdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{U} = \frac{nA}{FL} T^{-1} \mathbf{U}.$$

Em vista de estes resultados concluímos que o problema de elasticidade linear unidimensional discreto é bem-posto, portanto existe solução e é estável. Lamentavelmente esta resolução invertendo o operador é possível neste caso particular, onde o operador é linear e a geometria do problema é simples. Esta inversão pode não ser possível para casos de maior complexidade ao considerar modelos viscoelásticos, ou grandes deslocamentos, pelo que é útil realizar outras formulações, obtendo um método de maior aplicabilidade.

### 2.2.3 Formulação de otimização

Como foi dito, já que não sempre será possível encontrar uma expressão explícita do inverso do operador de um problema, é necessário utilizar outros métodos. A seguir, formularemos o problema inverso anterior como um problema de otimização e posteriormente veremos que para este caso simples a solução obtida é igual à obtida invertendo o operador.

**Problema 2.1.** Seja uma barra de comprimento  $L$ , seção constante de área  $A$ , formada por  $n$  segmentos de materiais elástico lineares, submetida a uma força  $F$  em um extremo e apoiada no outro. Sejam conhecidos os deslocamentos nodais da barra, dados pelo vetor  $\bar{\mathbf{U}}$ . O problema consiste em achar o vetor dos valores dos inversos dos módulos de *Young*  $\mathbf{R}^*$  que verificam:

$$\mathbf{R}^* = \arg \min_{\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n+}} \left\| \mathbf{U}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{U}} \right\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2 \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{U}(\mathbf{R})$  é o campo de deslocamentos obtidos da resolução do problema de elasticidade linear, o qual é obtido utilizando o operador  $P_d$ ,  $\mathbf{U} = P_d \mathbf{R}$ . A norma  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}$  será uma norma induzida por algum produto interno do espaço das funções deslocamento.

Para definir o produto interno  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}$  discretizaremos o produto interno do espaço das funções, dado por  $\langle f, g \rangle = \int_0^L f(s) g(s) ds$ , substituindo o deslocamento dado pela expressão de elementos finitos  $u = \mathbf{N} \mathbf{U}$ .

$$\begin{aligned} \int_0^L (u(s) - \bar{u})^2 ds &= \int_0^L (\mathbf{N}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}))^2 ds \\ \dots &= \int_0^L (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \mathbf{N}^t \mathbf{N} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) d\Omega \\ \dots &= (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \int_0^L \mathbf{N}^t \mathbf{N} d\Omega (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \\ \dots &= (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \\ \dots &= \|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2 \end{aligned}$$

onde  $\mathbf{M}_{\mathbf{u}}$  pode ser calculada a partir das matrizes elementares:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{u}}^e = \int_0^l \mathbf{N}^{e t} \mathbf{N}^e dx = \int_0^l \begin{bmatrix} \frac{l-x}{l} \\ \frac{x}{l} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{l-x}{l} & \frac{x}{l} \end{bmatrix} dx = \frac{L}{6n} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Concatenando estas matrizes obtemos a matriz  $\mathbf{M}_{\mathbf{u}}$ , a qual é simétrica e tri-diagonal:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{u}} = \frac{L}{6n} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 4 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Antes de ser utilizada para a norma devem ser aplicadas as condições de contorno do problema, eliminando filas e colunas correspondentes.

Também devemos definir uma norma no espaço da função  $R$ , para isto, lembramos que o valor de  $E$  é constante em cada elemento, portanto o valor de  $R$  também, então se verifica  $R(x)|_{x \in \Omega^i} = \mathbf{R}_i$  para todo elemento  $i$ . Realizando o raciocínio análogo à norma  $\mathbf{U}$ , obtemos que para a norma  $\mathbf{M}_u$  pode ser utilizada a função constante 1, obtendo a seguinte matriz elementar

$$\mathbf{N}^e = 1, \quad \mathbf{M}_R^e = \int_0^l 1^t 1 ds = \frac{L}{n}$$

e concatenando obtemos a matriz  $\mathbf{M}_R$  que define a norma do espaço das funções  $R$

$$\mathbf{M}_R = \frac{L}{n} \mathbf{I},$$

onde também devem ser aplicadas condições de contorno do problema de elasticidade linear.

As matrizes  $\mathbf{M}_u$  e  $\mathbf{M}_R$  são simétricas e pode ser demonstrado que têm valores próprios positivos, portanto as normas definidas são efetivamente normas. A seguir, resolveremos analiticamente o problema de otimização formulado.

No caso geral o problema de otimização é resolvido impondo as condições de otimalidade: gradiente zero e Hessiana definida positiva. Neste caso simples, a Hessiana é constante, portanto somente impomos a condição do gradiente e posteriormente verificaremos que a Hessiana seja definida positiva. A condição do gradiente é equivalente ao seguinte sistema de equações lineares,

$$P_d^t \mathbf{M}_u (P_d \mathbf{R}^* - \bar{\mathbf{U}}) = 0$$

portanto o candidato a solução do problema é  $\mathbf{R}^*$  dado por

$$\mathbf{R}^* = \left( P_d^t \mathbf{M}_u P_d \right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u \bar{\mathbf{U}}.$$

Para provar a existência desta solução demonstraremos que  $P_d^t \mathbf{M}_u P_d$  é invertível ao provar que o ponto é um mínimo a continuação. Para verificar que este ponto crítico é um mínimo, devemos ver se a hessiana é definida positiva, portanto, devemos provar que a matriz  $P_d^t \mathbf{M}_u P_d$  é definida positiva. Seja  $v$  um vetor de  $\mathbb{R}^n$  vemos que

$$v^t P_d^t \mathbf{M}_u P_d v = \|P_d v\|_{\mathbf{M}_u}^2 \geq 0$$

e também vemos já que a matriz  $P_d$  é não singular, podemos afirmar que

$$\|P_d v\|_{\mathbf{M}_u} = 0 \iff P_d v = 0 \iff v = 0$$

portanto a matriz  $P_d^t \mathbf{M}_u P_d$  é definida positiva, e portanto, o ponto  $\mathbf{R}^*$  é o único mínimo do funcional.

**Verificação da solução** Finalmente devemos verificar que a solução obtida utilizando esta formulação é igual à que foi obtida diretamente invertendo o operador  $P_d$ . Vemos que se verifica a seguinte identidade

$$\left( (P_d^t \mathbf{M}_u P_d)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u \right) P_d = \text{Id} \quad \Rightarrow \quad P_d^{-1} = \left( (P_d^t \mathbf{M}_u P_d)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u \right)$$

portanto a solução obtida através da minimização do funcional é idêntica à obtida invertendo o operador  $P_d$ .

Ao resolver o problema de elasticidade linear em situações mais gerais, não é possível obter um operador  $P_d$  linear através da mudança de variável  $R = 1/E$ , portanto durante esta dissertação utilizaremos como variável de projeto a definir, o valor de  $E$  e portanto, outros funcionais a minimizar serão utilizados na equação (2.1)

$$\mathbf{E}^* = \arg \min_{\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n+}} \left\| \mathbf{U}(\mathbf{E}) - \bar{\mathbf{U}} \right\|^2$$

onde  $\mathbf{U}(\mathbf{E})$  é a função que relaciona cada vetor de módulos de *Young* com a respectiva solução do problema de elasticidade correspondente.

## 2.2.4 Análise de sensibilidade

Como vimos, os valores dos deslocamentos medidos estão dados pelo vetor  $\bar{\mathbf{U}}$ , e nas aplicações reais, os deslocamentos conterão um certo erro  $\delta \mathbf{U} = \bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}$ . Ao resolver o problema de otimização utilizando os dados com erro, obteremos um vetor de módulos  $\tilde{\mathbf{R}}$  com um certo erro  $\delta \mathbf{R} = \bar{\mathbf{R}} - \tilde{\mathbf{R}}$ . A seguir, procuraremos estimar uma cota para este erro para o exemplo da barra com domínio discretizado.

Consideremos as condições de otimalidade para os resultados utilizando dados sem ruído e com ruído:

$$\begin{aligned} P_d^t \mathbf{M}_u (P_d \bar{\mathbf{R}} - \bar{\mathbf{U}}) &= 0, \\ P_d^t \mathbf{M}_u (P_d \tilde{\mathbf{R}} - \tilde{\mathbf{U}}) &= 0, \end{aligned}$$

subtraindo as equações e utilizando a definição de  $\delta \mathbf{R}$  e  $\delta \mathbf{U}$ , obtemos a equação (2.2) que define o erro no inverso dos módulos, para cada erro nos deslocamentos,

$$\delta \mathbf{R} = \left( P_d^t \mathbf{M}_u P_d \right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u \delta \mathbf{U}. \quad (2.2)$$

**Mudança de base** Os vetores  $\delta\mathbf{R}$  e  $\delta\mathbf{U}$  pertencem a espaços  $\mathbb{R}^n$  com produtos internos respectivos de cada espaço definidos pelas matrizes  $\mathbf{M}_u$  e  $\mathbf{M}_R$ . Em cada um destes espaços escolhemos uma base ortonormal de vetores segundo o correspondente produto interno. Os vetores da base do espaço dos inversos dos módulos serão colocados como colunas de uma matriz  $B^{M_R}$  e os vetores da base do espaço dos deslocamentos como colunas de uma matriz  $B^{M_u}$ . Já que as colunas de estas matrizes são vetores ortonormais, se deve verificar

$$\left(B^{M_R}\right)^t \mathbf{M}_R B^{M_R} = \mathbf{I} \quad \left(B^{M_u}\right)^t \mathbf{M}_u B^{M_u} = \mathbf{I}$$

portanto, podemos escolher as seguintes matrizes

$$B^{M_R} = \mathbf{M}_R^{-\frac{1}{2}} \quad B^{M_u} = \mathbf{M}_u^{-\frac{1}{2}}.$$

Já definida a base, podemos escrever os vetores  $\delta\mathbf{R}$  e  $\delta\mathbf{U}$  como combinação linear dos elementos de cada base obtendo a seguinte expressão

$$\delta\mathbf{R} = B^{M_R} \delta r \quad \text{e} \quad \delta\mathbf{U} = B^{M_u} \delta u$$

passando assim ao espaço  $\mathbb{R}^n$  das coordenadas dos vetores com o produto interno Euclidiano. Podemos aplicar esta mudança de base na expressão  $\delta\mathbf{U} = P_d \delta\mathbf{R}$ , obtendo

$$B^{M_u} \delta u = P_d B^{M_R} \delta r \quad \Rightarrow \quad \delta u = \left(B^{M_u}\right)^{-1} P_d B^{M_R} \delta r$$

assim concluímos que o operador  $\left(B^{M_u}\right)^{-1} P_d B^{M_R}$  é o que leva elementos de  $r$  em  $u$  no espaço das coordenadas com produto interno Euclidiano.

Agora aplicamos a mudança de base na equação (2.2) obtendo:

$$\delta r = \left(B^{M_R}\right)^{-1} \left(P_d^t \mathbf{M}_u P_d\right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{M_u} \delta u. \quad (2.3)$$

**Definição 2.1** (Norma de operador). Seja um operador  $K : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  dado por  $K(x) = y$  e onde  $\mathbb{R}^n$  e  $\mathbb{R}^m$  são espaços Euclidianos. A norma de  $K$  é definida da seguinte forma:

$$\|K\| = \max_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{\|K(x)\|}{\|x\|}$$

Para analisar a sensibilidade da solução, devemos estimar a norma do vetor  $\delta r$ , portanto tomaremos norma euclidiana a ambos lados da equação obtida do  $\delta r$  e aplicando a Definição 2.1 obtemos

$$\begin{aligned} \|\delta r\| &= \left\| \left(B^{M_R}\right)^{-1} \left(P_d^t \mathbf{M}_u P_d\right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{M_u} \delta u \right\| \\ \dots &\leq \left\| \left(B^{M_R}\right)^{-1} \left(P_d^t \mathbf{M}_u P_d\right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{M_u} \right\| \|\delta u\| \end{aligned}$$

Vemos então que para estimar a norma do erro em  $r$  devemos estimar a norma da matriz  $(B^{\mathbf{M}_R})^{-1} (P_d^t \mathbf{M}_u P_d)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{\mathbf{M}_u}$ . Para isto utilizaremos o teorema da decomposição em valores singulares apresentado em [38] que apresentamos a continuação.

**Teorema 2.1** (Descomposição em valores singulares). *Seja a matriz  $A \in \mathcal{M}_{m \times n}$  de entradas reais com  $m$  filas e  $n$  colunas. Existem três matrizes  $W, S, V$  que verificam*

$$A = W S V^t$$

onde as matrizes  $W \in \mathcal{M}_{m \times m}$  e  $V \in \mathcal{M}_{n \times n}$  são unitárias (portanto verificam  $W^t W = I$  e  $V^t V = I$ ) e a matriz  $S$  é diagonal com os valores singulares de  $A$  ( $\sigma_i$ ) na sua diagonal

$$S = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_{n_x} \end{bmatrix} \quad \sigma_i = \sqrt{\lambda_i(A^t A)}$$

onde  $\lambda_i(A^t A)$  é o valor próprio  $i$ -ésimo da matriz  $A^t A$ .

Aplicando o Teorema 2.1 à matriz  $(B^{\mathbf{M}_u})^{-1} P_d B^{\mathbf{M}_R}$  obtemos:

$$(B^{\mathbf{M}_u})^{-1} P_d B^{\mathbf{M}_R} = W S V^t.$$

A matriz  $S$  é quadrada e diagonal e será chamada  $D$ . Podemos agora, a partir da equação anterior, obter a expressão de  $P_d$

$$P_d = B^{\mathbf{M}_u} W D V^t (B^{\mathbf{M}_R})^{-1}.$$

Lembramos agora a expressão da norma que desejamos calcular

$$\left\| (B^{\mathbf{M}_R})^{-1} (P_d^t \mathbf{M}_u P_d)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{\mathbf{M}_u} \right\|$$

e substituímos a nova expressão da matriz  $P_d$  obtida aplicando o teorema, obtendo

$$(B^{\mathbf{M}_R})^{-1} \left[ \left( (B^{\mathbf{M}_R})^{-1} \right)^t V D W^t \mathbf{M}_u W D V^t B^{\mathbf{M}_u} \right]^{-1} \dots \\ \dots \left( (B^{\mathbf{M}_R})^{-1} \right)^t V D W^t (B^{\mathbf{M}_u})^t \mathbf{M}_u B^{\mathbf{M}_u}$$

simplificando e aplicando que as matrizes  $B$  estão formadas por bases ortonormais, chegamos a que

$$\left\| \left( B^{\mathbf{M}_R} \right)^{-1} \left( P_d^t \mathbf{M}_u P_d \right)^{-1} P_d^t \mathbf{M}_u B^{\mathbf{M}_u} \right\| = \| D^{-1} \|$$

A matriz  $D$  contém os valores singulares da matriz  $\left( B^{\mathbf{M}_u} \right)^{-1} P_d B^{\mathbf{M}_R}$  em sua diagonal, portanto sua inversa contém os inversos destes valores. Utilizando a definição de norma para matrizes, calculamos a norma de  $D^{-1}$

$$\| D^{-1} \| = \max \left\{ \frac{1}{\sigma_i} \right\} = \frac{1}{\min \{ \sigma_i \}} = \frac{1}{\sigma_{min}},$$

e concluímos assim que a norma será igual ao inverso do mínimo valor singular.

Calculemos agora aproximadamente os valores singulares da matriz  $\left( B^{\mathbf{M}_u} \right)^{-1} P_d B^{\mathbf{M}_R}$ . Analisando a expressão  $\mathbf{M}_u^{-1/2}$  vemos que consiste de uma matriz constante multiplicada por um fator  $\frac{1}{n}$ , portanto a matriz  $\left( B^{\mathbf{M}_u} \right)^{-1}$ , será uma matriz constante por um fator  $\sqrt{\frac{1}{n}}$ . Por outra parte, raciocinando da mesma forma, a matriz  $B^{\mathbf{M}_R}$  consiste de uma matriz constante multiplicada por um fator  $\sqrt{n}$ . Finalmente podemos ver na expressão da matriz  $P_d$  que esta tem valores singulares de ordem  $\frac{1}{n}$ , portanto os fatores das matrizes  $B$  se cancelam obtendo a estimação da ordem dos valores singulares seguinte:

$$\| D^{-1} \| = \frac{1}{\sigma_{min}} = \frac{1}{o\left(\frac{1}{n}\right)} = o(n),$$

concluindo que a cota do erro  $\mathbf{R}$  é da forma

$$\| \delta \mathbf{R} \|_{\mathbf{M}_R} \leq o(n) \| \delta \mathbf{U} \|_{\mathbf{M}_u}$$

sendo  $n$  o número de elementos da discretização do exemplo. Por causa do problema contínuo ser mal-posto, ao discretizar e aumentar  $n$  a cota do erro aumenta, obtendo problemas bem-postos mas mal-condicionados. Este problema no condicionamento é equivalente a ter soluções menos estáveis, e por causa do aumento da quantidade de elementos utilizados  $n$ , a solução discretizada converge à solução analítica do problema, portanto, quando  $n$  tende a infinito, o problema inverso discreto tende a ser mal-posto.

## Regularização

Para evitar o problema do mal condicionamento para discretizações de número de elementos elevado, poderiam ser utilizados métodos de regularização como os apresentados na Seção 1.3.2, onde são introduzidas modificações ao problema a

resolver, obtendo uma solução com menor erro à que seria obtida sem aplicar estas técnicas.

Utilizaremos o método de *Tikhonov* procurando penalizar soluções com elevada norma do vetor de deformação unitária  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Começamos por adicionar ao funcional da equação (2.1) a norma da deformação obtendo o seguinte novo funcional

$$\hat{\mathbf{R}} = \arg \min_{\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n+}} \left\| \mathbf{U}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{U}} \right\|^2 + \gamma^2 \|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2$$

sendo  $\gamma$  um coeficiente real. O vetor de deformações pode ser escrito em função do vetor de deslocamentos nodais aplicando novamente o método dos elementos finitos obtendo uma nova identidade entre  $\boldsymbol{\varepsilon}$  e  $\mathbf{R}$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{n}{L} T^{-1} \mathbf{U} = \frac{F}{A} \mathbf{R}$$

substituindo no funcional de *Tikhonov*, obtemos o funcional do problema com regularização que vamos a utilizar na resolução analítica

$$\hat{\mathbf{R}} = \arg \min_{\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n+}} \left\| \mathbf{U}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{U}} \right\|^2 + \omega^2 \|\mathbf{R}\|^2$$

onde  $\omega^2 = \gamma^2 \left(\frac{F}{A}\right)^2$ . Aplicando as condições de otimalidade e realizando as mesmas operações que antes escolhendo alguma norma apropriada podemos obter que a cota do erro  $\mathbf{R}$  verifica

$$\|\delta \hat{\mathbf{R}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{R}}} \leq \max \left\{ \frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \omega^2} \right\} \|\delta \mathbf{U}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}$$

o máximo pode ser calculado de forma aproximada como segue

$$\max \left\{ \frac{\sigma_i}{\sigma_i^2 + \gamma^2} \right\} \leq \max \left\{ \frac{x}{x^2 + \gamma^2} \mid \forall x \in \mathbf{R} \right\} = \frac{1}{2\omega} = \frac{1}{2\gamma} \frac{A}{F}$$

portanto obtemos a nova cota do erro

$$\boxed{\|\delta \hat{\mathbf{R}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{R}}} \leq \frac{1}{2\gamma} \frac{A}{F} \|\delta \mathbf{U}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}}$$

O vetor obtido  $\hat{\mathbf{R}}$  é diferente ao vetor solução  $\bar{\mathbf{R}}$  que obteríamos sem aplicar este método, e o erro obtido é menor. Este resultado é importante, já que nas aplicações reais os dados sempre terão ruído, e será necessário aplicar regularização para diminuir o erro ainda se o número de elementos é elevado.

## 2.2.5 Análise das condições de contorno

Para finalizar a análise do problema inverso, apresentaremos outras formulações onde diferentes condições de contorno são utilizadas. Analisaremos os resultados obtidos ao considerar três diferentes condições de contorno para o problema da barra.

Em um problema inverso de caracterização de propriedades mecânicas de uma barra poderíamos dispor da informação de deslocamentos e forças como é apresentado na Figura 2.3. Sem perder generalidade foi considerado que não existem

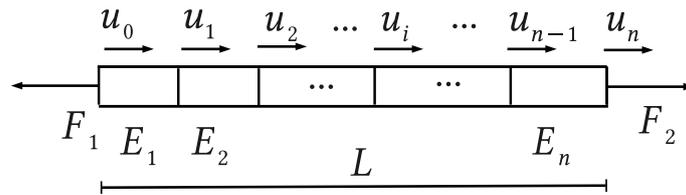


Figura 2.3: Exemplo unidimensional

forças externas aplicadas nos nós interiores da barra e já que a barra deve estar em equilíbrio suporemos que se verifica  $\bar{F}_1 = \bar{F}_2 = \bar{F}$ . Por outro lado, é possível restar o valor do deslocamento  $\bar{u}_0$  a todos os deslocamentos nodais sem introduzir tensões na barra, portanto, consideraremos que o deslocamento do nó 0 será sempre  $\bar{u}_0 = 0$ .

As possíveis condições de contorno para o exemplo estão dadas pela Figura 2.4. A situação *a* da figura, por exemplo, foi a utilizada para resolver o problema

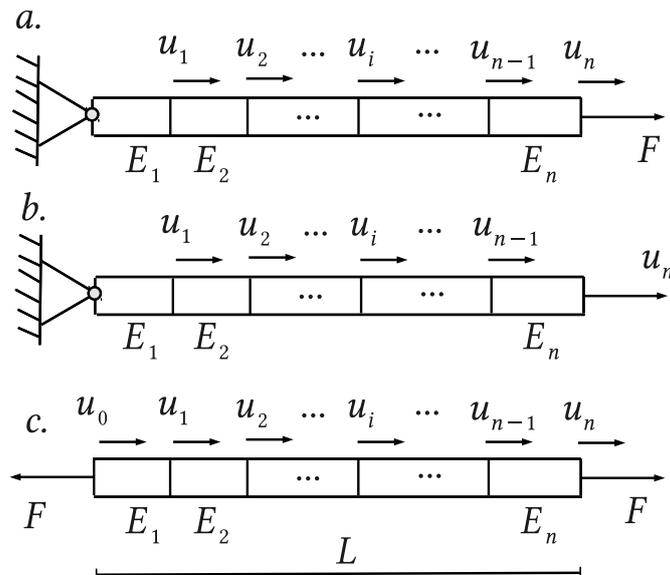


Figura 2.4: Diferentes condições de contorno para exemplo de barra

anteriormente, onde no nó  $n$  o valor da força é utilizado como condição para resolver

o problema de elasticidade linear e posteriormente o valor do  $\bar{u}_n$  é incluído no funcional a otimizar. A seguir, descreveremos cada situação.

**Condições de contorno caso a** Nesta situação impomos a condição de deslocamentos zero (apoio) no extremo esquerdo e o valor da força  $\bar{F}$  no extremo direito. Isto equivale a eliminar o grau de liberdade  $u_0$  no sistema de equações e desta forma resolver o problema direto a partir de um sistema de equações lineares não singular para cada conjunto de valores  $E_i$  em cada iteração da otimização. Estas condições foram aplicadas na resolução deste exemplo nas seções anteriores, obtendo a expressão para a solução do problema inverso

$$E_i = \frac{F L}{n A} \frac{1}{(\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1})}$$

**Condições de contorno caso b** No caso das condições *b* começamos calculando a força  $F$  para a qual o nó  $n$  tem um deslocamento  $\bar{u}_n$ . Para isso calculamos o deslocamento  $u_n$  por uma força  $F$  qualquer. Após colocada esta força podemos resolver o problema da mesma forma que nas condições *a* obtendo a função  $u(x)$  e em particular o valor do deslocamento em  $x = L$ , e a partir daí obtemos o valor de  $F$ .

$$u_n = \frac{F L}{n A} \sum_{i=1}^n \frac{1}{E_i} = \bar{u}_n \quad F = \bar{u}_n \frac{n A}{L} \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{E_i}}$$

substituindo na expressão do deslocamento obtemos a solução dos deslocamentos de qualquer nó  $i$

$$u_i = \bar{u}_n \frac{\sum_{j=1}^i \frac{1}{E_j}}{\sum_{j=1}^n \frac{1}{E_j}} \quad (2.4)$$

desta forma vemos que o problema direto está bem formulado e que os deslocamentos obtidos são proporcionais ao deslocamento  $\bar{u}_n$ . Por enquanto, para resolver o problema inverso consideraremos novamente que os deslocamentos  $\bar{u}_i$  são dados e impondo as condições vemos que os módulos de *Young* são obtidos resolvendo um sistema de equações de  $n$  incógnitas e  $n - 1$  equações dado pela equação (2.4), já que a equação  $\bar{u}_n = \bar{u}_n$  fica trivial, portanto existem infinitas soluções de módulos de *Young* que verificam as condições de contorno e são compatíveis com os valores de deslocamentos dados. Concluimos que estas condições de contorno não são apropriadas para resolver o problema inverso utilizando o funcional definido por diferença de deslocamentos. Embora isto, se dispomos da informação do valor de força  $F$  no extremo direito podemos considerar um funcional da forma

$$\|\mathbf{U}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}^2 + \left| \left( E A \frac{du}{dx} \Big|_{x=L} \right) - F \right|^2.$$

No caso que a solução seja exata e o funcional atinga o valor zero, então é verificada a identidade  $E A \frac{du}{dx} \Big|_{x=L} = F$  a qual é a equação adicional que era necessária.

**Condições de contorno caso  $c$**  Neste caso não está bem definido o problema direto já que para um campo de deslocamentos solução pode ser adicionada uma traslação verificando assim também as condições de contorno. Portanto o problema direto é mal-posto. Ainda assim o problema inverso pode ser bem posto, poderíamos considerar um funcional modificado da seguinte forma

$$\|\mathbf{U}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}^2 + \left| \left( E A \frac{du}{dx} \Big|_{x=0} \right) - F \right|^2 + \left| \left( E A \frac{du}{dx} \Big|_{x=L} \right) - F \right|^2$$

Logo de ter realizada a análise concluímos que para poder formular um problema inverso de forma correta é conveniente prover tanto condições de contorno em deslocamentos como em forças. Embora, os métodos para análise de sensibilidade são baseados no fato de que o problema direto é bem-posto, portanto, esta formulação não é a adequada para este trabalho.

Nas aplicações reais geralmente não é possível fazer a escolha no tipo de condições de contorno já que a informação disponível é limitada.

## 2.3 O método de caracterização de propriedades

Na resolução do problema de identificação de módulos de *Young* da barra foram obtidas conclusões importantes sobre as características teóricas do problema inverso associado. Nesta seção aplicaremos esses resultados para formular o problema inverso geral de caracterização de propriedades mecânicas para situações de maior complexidade. Posteriormente formularemos um método numérico para a resolução do problema.

### 2.3.1 O problema inverso

Começaremos do problema de elasticidade linear apresentado na Seção 1.2.2 e utilizaremos os resultados vistos no exemplo da barra para definir o problema inverso.

**Discretização** Uma das conclusões mais interessantes do exemplo anterior é sobre a estabilidade da solução. Foi visto que o problema contínuo não sempre tem solução, e quando esta existe não sempre é estável. Por outro lado vimos que ao aplicar o Método dos Elementos Finitos, o problema tem solução única e estável, e é possível em alguns casos obter uma cota do erro da solução obtida. Na definição

do problema inverso a resolver nesta dissertação consideraremos uma discretização de  $n_{elem}$  elementos finitos. Como vimos, ao aplicar o MEF, o problema direto passa a ser um problema de resolução do seguinte sistema de equações lineares

$$\mathbf{K}(\mathbf{E}) \mathbf{U} = \mathbf{F} \quad \mathbf{K}(\mathbf{E}) = \sum_{i=1}^{n_{elem}} E_i \bar{K}_i$$

onde  $\bar{K}_i$  é a matriz de rigidez correspondente ao elemento  $i$ .

**Formulação como problema de otimização** Também vimos que o problema inverso pode, em alguns casos simples, ser resolvido invertendo o operador associado ao problema direto. Esta inversão não é possível nos exemplos que serão considerados neste trabalho, portanto, a formulação utilizada nesta dissertação será a do problema inverso através da minimização de um funcional, onde sempre existe solução (em alguns casos aproximada) ao problema.

**Normalização dos módulos de Young** Durante todo o trabalho de dissertação trabalharemos com valores  $x_i$  em lugar de  $E_i$ , definidos pela expressão:

$$x_i = \frac{E_i}{E_{ref}} \quad \forall i = 1, \dots, n_{elem} \quad \text{ou} \quad \mathbf{x} = \mathbf{E} \left( \frac{1}{E_{ref}} \right) \quad \mathbf{x}, \mathbf{E} \in \mathbb{R}^n,$$

onde  $n_{elem}$  é a quantidade de elementos da discretização do domínio utilizada e  $E_{ref} \in \mathbb{R}$  é um valor de módulo de *Young* de referência considerado constante em cada aplicação do método. O valor  $E_{ref}$  dependerá dos valores dos módulos considerados normais para o tipo de tecido que se deseja caracterizar. Através desta mudança passamos a trabalhar com uma variável adimensional e normalizamos os valores a otimizar reduzindo possíveis problemas numéricos devidos a altos valores da variável de projeto.

A seguir, é definido o problema direto associado ao problema de elasticidade linear, para um sólido.

**Problema 2.2** (Direto discreto). Dado um sólido elástico-lineal, homogêneo, isotrópico com coeficiente de *Poisson*  $\nu$  ocupando a região  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  discretizada em  $n_{elem}$  elementos finitos, e submetido a condições de contorno conhecidas de estado plano de deformações. Sejam conhecidos os módulos de *Young* em todos os elementos da malha, dados pelo vetor  $\mathbf{x}$  e o módulo de referência  $E_{ref}$ . O problema direto discreto consiste em achar o vetor dos deslocamentos nodais  $\mathbf{U}$  que verificam:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) \mathbf{U} = \mathbf{F}$$

sendo  $\mathbf{K}$  a matriz de rigidez com as condições de contorno essenciais aplicadas, e  $\mathbf{F}$  o vetor de carregamentos nodais também levando em conta as condições de contorno.

É possível demonstrar que quando as condições de contorno são apropriadas o sistema de equações lineares a resolver tem solução. Desta forma podemos dizer que existe um operador que associa vetores  $\mathbf{x}$  com vetores de deslocamentos  $\mathbf{U}$ .

Já que somente conhecemos os deslocamentos da artéria  $\mathbf{U}$  e um valor de pressão (que é levado a um vetor de forças nodais  $\mathbf{F}$ ), é necessário formular o problema de forma inversa, como faremos a continuação.

**Problema 2.3** (Inverso discreto). Dado um sólido elástico linear, homogêneo, isotrópico com coeficiente de *Poisson*  $\nu$  ocupando a região  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  discretizada em  $n_{elem}$  elementos finitos, e submetido a condições de contorno conhecidas de estado plano de deformações. Sejam conhecidos os deslocamentos dos nós da malha  $\mathbf{U}$ , o problema inverso consiste em achar o vetor  $\mathbf{x}$  de módulos de *Young* normalizados que satisfaz:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) \mathbf{U} = \mathbf{F}$$

sendo  $\mathbf{K}$  a matriz de rigidez com as condições de contorno aplicadas, e  $\mathbf{F}$  o vetor de carregamentos nodais.

Considerando que existe o operador  $P$  definido pelo Problema 2.2, seria interessante saber se existe solução para o Problema 2.3, e se esta solução é única e estável. Já que o operador  $P$  está definido em espaços de dimensão finita não é possível aplicar o Teorema 1.1. Embora, podemos considerar o problema contínuo e supor que ao igual que no exemplo da barra, o problema contínuo é mal-posto e o problema discreto é bem-posto, isto será verificado resolvendo alguns exemplos.

A seguir, formularemos o problema de caracterização como um problema de minimização e posteriormente, proporemos um método para resolvê-lo. Consideremos o seguinte problema de minimização de um funcional.

**Problema 2.4** (Identificação de propriedades mecânicas). Dado um sólido de material elástico linear de módulo de *Poisson*  $\nu$ , ocupando a região  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  discretizada em  $n_{elem}$  elementos, submetido a condições de contorno dadas, sejam conhecidos os deslocamentos nodais dados pelo vetor  $\bar{\mathbf{U}}$  e seja  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^+$  algum funcional convexo com valor zero no ponto nulo. O problema de identificação consiste em achar o vetor de módulos de *Young* normalizados  $\mathbf{x}^*$  que verifica:

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n+}} g(\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}})$$

onde  $\mathbf{U}(\mathbf{x})$  é o campo de deslocamentos obtidos da resolução do Problema 2.2 utilizando o vetor de módulos de *Young*  $\mathbf{x}$ .

Se  $g(\mathbf{U}(\mathbf{x}^*) - \bar{\mathbf{U}}) = 0$ , então encontramos  $\mathbf{x}$  tal que  $\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{U}(\mathbf{x})$ , portanto, temos resolvido o problema inverso 2.3. De aqui em diante utilizaremos a formulação do Problema 2.4 para falar do problema inverso de identificação de propriedades mecânicas.

### 2.3.2 O método

Como vemos, o Problema 2.4 é um problema de otimização não linear, onde o objetivo é minimizar um funcional  $g$ , para o qual utilizaremos algum método de otimização iterativo, o qual em cada iteração deve avaliar o operador  $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ , resolvendo o Problema 2.2. Na Figura 2.5 podemos ver um esquema geral do método, onde vemos duas grandes etapas definidas: Obtenção dos dados e Caracterização. Na etapa da obtenção dos dados, são utilizadas técnicas de processamento numérico

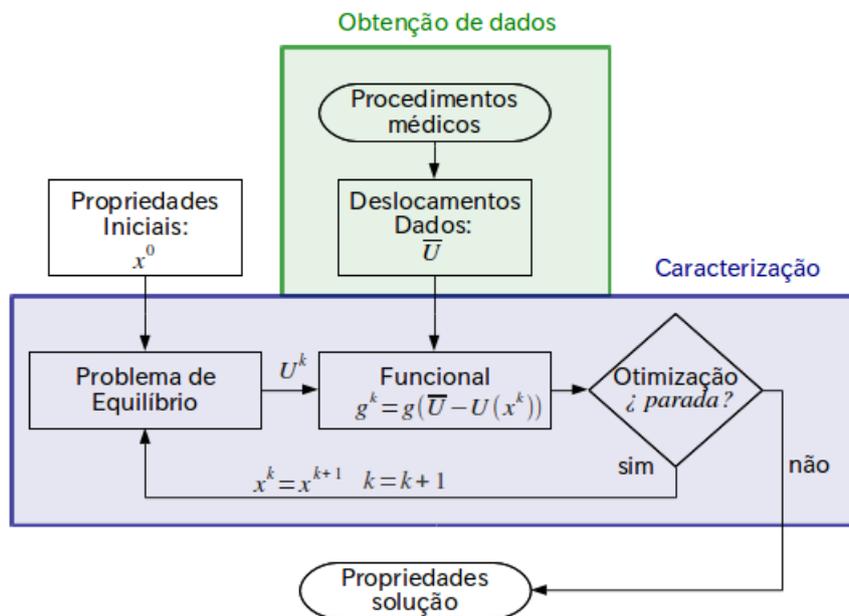


Figura 2.5: Método de resolução do problema inverso

para obter o campo de deslocamentos  $\bar{\mathbf{U}}$ . Posteriormente utilizando um vetor inicial de módulos, junto com os deslocamentos dados, é avaliado o funcional a minimizar, e o algoritmo de otimização inicia o processo de minimização. Na otimização deve ser resolvido um problema não linear com restrições de desigualdade e será utilizado o FDIPA, apresentado na Seção 1.4. Ao verificar o critério de parada, dado por alguma tolerância  $tol$ , o algoritmo obtém o ponto candidato a solução.

A seguir, apresentaremos possíveis funcionais  $g$  a utilizar e finalmente formularemos o problema de otimização, adicionando restrições de desigualdade ao problema para a posterior aplicação do algoritmo de otimização.

### 2.3.3 Análise das condições de contorno

Como vimos, ao resolver o problema inverso de caracterização na barra, as condições de contorno utilizadas no problema de elasticidade linear, determinam se o problema direto e o inverso são bem postos ou não. Concluimos que para resolver o problema inverso através da minimização de um funcional do tipo do Problema 2.4 é necessário aplicar condições de deslocamentos e de forças para que o problema inverso seja bem-posto. A seguir, discutiremos como aplicar estas condições ao problema inverso na geometria de uma artéria, e também assim definir qual será o tipo de funcional a utilizar.

Para escolher as condições de contorno devemos saber qual é a informação que estará disponível na hora de resolver o problema. Assumiremos que serão conhecidos os deslocamentos em todos os nós e as pressões interior e exterior do anel da artéria. Uma das hipóteses realizadas é a de pressão uniforme no contorno, em particular, pressão zero no contorno exterior, e para o contorno interior um valor que deve ser medido ou estimado pelos técnicos antes da aplicação do método. Respeito as

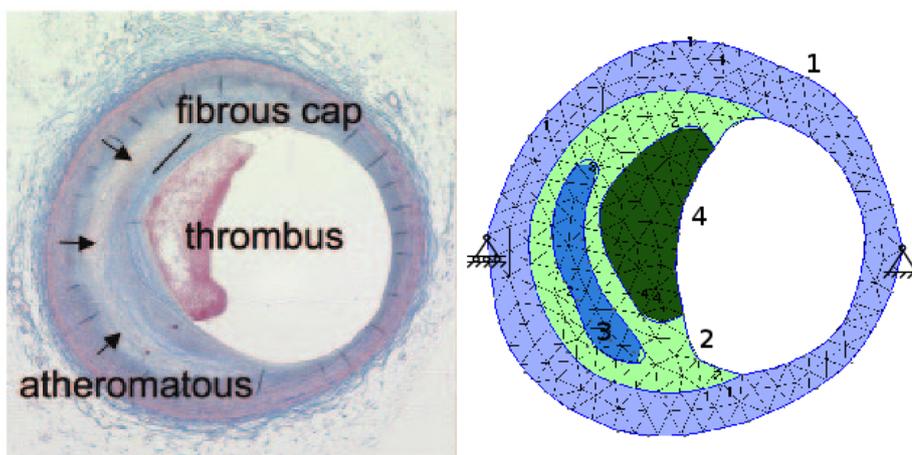


Figura 2.6: esq: imagem artéria real | dir: esquema com condições de contorno cinemáticas

condições em deslocamentos, consideraremos dois apoios como é representado na Figura 3.8. Desta forma são fornecidas informações de forças (o valor de pressão e dado) e também são incluídas informações de deslocamentos, já que no funcional é utilizado o vetor  $\bar{U}$ , por tanto, assim como foi concluído no exemplo da barra podemos dizer que o problema direto é bem posto. É importante destacar que os apoios utilizados não introduzem novas forças exteriores, já que os carregamentos externos tem resultante zero e não produzem reações nos apoios. Os deslocamentos medidos deverão satisfazer as condições de contorno utilizadas, no caso contrario podem ser modificadas as condições de contorno.

**Possíveis modificações no funcional** No caso que se quisesse resolver o problema de elasticidade linear aplicando condições puramente cinemáticas, existem formas de incluir a informação das forças dentro do funcional a otimizar. Por exemplo no caso que exista boa precisão na medição dos deslocamentos e um erro maior na medição das forças, poderia ser conveniente utilizar condições de contorno somente de deslocamentos para ambas paredes da artéria e adicionar algum termo ao funcional como foi visto no exemplo da barra. Neste caso poderíamos modificar o funcional a otimizar adicionando um termo no qual se pretende que o campo de tensões obtido em utilizando o método tenha tensões similares às medidas no contorno.

$$\mathcal{F}'(\mathbf{x}) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \rho \|\mathbb{C}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon} n - p\|^q$$

onde  $p$  é o vetor tensão nas fronteiras consideradas e os parâmetros  $\rho$  e  $q$  devem ser determinados previamente à aplicação do método.

### 2.3.4 O funcional

Uma das chaves do método de caracterização é o funcional  $g$  a utilizar no Problema 2.4. Existem muitos funcionais  $g$  possíveis, neste trabalho consideraremos um grupo particular que deve satisfazer as seguintes condições:

- derivada contínua,
- convexa,
- valor zero no ponto nulo.

No caso teórico onde os valores de deslocamentos medidos  $\bar{\mathbf{U}}$  não têm ruído, e se o modelo constitutivo representa perfeitamente a situação em que foram gerados esses deslocamentos, então a diferença entre os vetores deslocamentos é zero, e portanto, o funcional deveria chegar ao zero. Nesta dissertação consideraremos o funcional  $g$  como alguma norma do espaço ao qual pertence  $\mathbf{U}$ .

Para avaliar a diferença entre os campos de deslocamento (ou seu gradiente) consideraremos três funcionais ou medidas, as quais podemos demonstrar que são normas no espaço das funções quadrado integráveis em  $\Omega$ :

- medida entre deslocamentos:

$$\|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{u}}\|_{L_2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{u}}|^2 d\Omega$$

- medida entre deformações:

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\|_{L_2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}|^2 d\Omega$$

- diferença de tensões:

$$\int_{\Omega} \mathbb{C}(\mathbf{x}) (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Omega.$$

No primeiro funcional consideramos a diferença nos deslocamentos, no segundo nas deformações e no terceiro multiplicamos pela matriz constitutiva um dos fatores da diferença de deformações. Será útil compor os diferentes funcionais somando os valores, e portanto, é importante normalizar eles de forma de evitar diferenças importantes na ordem da magnitude. Assim obtemos as expressões dos três funcionais normalizados,

$$\mathcal{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{u}}\|_{L_2(\Omega)}^2}{\|\bar{\mathbf{u}}\|_{L_2(\Omega)}^2} \quad \mathcal{F}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = \frac{\|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\|_{L_2(\Omega)}^2}{\|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\|_{L_2(\Omega)}^2}.$$

$$\mathcal{F}_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \frac{\int_{\Omega} \mathbb{C}(\mathbf{x}) (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Omega}{\int_{\Omega} \mathbb{C}(\mathbf{x}) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} d\Omega}$$

Para poder analisar a influência de cada um destes termos no desempenho do método consideraremos um funcional como uma combinação linear dos três termos

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = c_{\mathbf{u}} \mathcal{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + c_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathcal{F}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) + c_{\boldsymbol{\sigma}} \mathcal{F}_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

onde  $c_{\mathbf{u}}$ ,  $c_{\boldsymbol{\varepsilon}}$  e  $c_{\boldsymbol{\sigma}}$  são os coeficientes dessa combinação.

## Discretização

Para poder avaliar numericamente o funcional apresentado no Problema 2.4, é necessário discretizar o domínio, e portanto o campos de deslocamentos  $\mathbf{u}$  e deformações  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Utilizaremos uma malha de  $n_{elem}$  elementos lineares triangulares e começaremos o cálculo por  $\mathcal{F}_{\mathbf{u}}$ . Lembramos as expressões dos deslocamentos

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{N}\mathbf{U}(\mathbf{x}) \quad \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{N}\bar{\mathbf{U}}$$

e deformações

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}\mathbf{U}(\mathbf{x}) \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{B}\bar{\mathbf{U}}$$

onde  $\mathbf{U}(\mathbf{x})$  é o vetor de deslocamentos nodais solução o Problema 2.2 utilizando os módulos de *Young* definidos por  $\mathbf{x}$ . Aplicando estas expressões podemos reescrever

os funcionais

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{u}}|^2 d\Omega &= \int_{\Omega} |\mathbf{N}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})|^2 d\Omega \\
&\dots = \int_{\Omega} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{N}^t \mathbf{N} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) d\Omega \\
&\dots = (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \int_{\Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{N} d\Omega (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \\
&\dots = (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \\
&\dots = \|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2
\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{M}_{\mathbf{u}}$  pode ser calculada ensamblando as matrizes elementares  $\mathbf{M}_{\mathbf{u}}^e$ . Estas matrizes elementares estão dadas por

$$\mathbf{M}_{\mathbf{u}}^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{N}^{e t} \mathbf{N}^e d\Omega$$

para calcular as integrais utilizaremos a seguinte fórmula, válida para elementos lineares triangulares com numeração de nós anti-horária:

$$\int_A N_1^k N_2^l N_3^m dA = \frac{2A k! l! m!}{(2 + k + l + m)!}$$

obtendo por exemplo a primeira entrada da matriz:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{u},11}^e = \int_{\Omega^e} N_1^2 d\Omega^e = \frac{2\Omega^e 2! 0! 0!}{4!} = \frac{\Omega^e}{6}$$

analogamente podemos calcular todas as componentes, obtendo a matriz completa:

$$\mathbf{M}_{\mathbf{u}}^e = \frac{\Omega^e}{12} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Finalmente, ensamblando as matrizes obtemos a matriz global  $\mathbf{M}_{\mathbf{u}}$ . Esta matriz é simétrica e podemos demonstrar que tem valores próprios positivos distintos de zero. Assim podemos concluir que a função  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}$  é uma norma. Obtemos, desta forma, a expressão do funcional  $\mathcal{F}_{\mathbf{u}}$  discretizado

$$\mathcal{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}})}{\bar{\mathbf{U}}^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{U}}} = \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2} \quad (2.6)$$

Analogamente obtemos os funcionais para os outros termos do funcional

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} |\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}|^2 d\Omega &= \int_{\Omega} |\mathbf{B}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})|^2 d\Omega \\
\dots &= \int_{\Omega} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \mathbf{B}^t \mathbf{B} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) d\Omega \\
\dots &= \|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}^2.
\end{aligned}$$

A matriz  $\mathbf{M}_\varepsilon$  também é simétrica definida positiva portanto a função  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}$  é uma norma. Finalmente chegamos à expressão do funcional  $\mathcal{F}_\varepsilon$  discretizado

$$\mathcal{F}_\varepsilon(\mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{M}_\varepsilon (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}})}{\bar{\mathbf{U}}^t \mathbf{M}_\varepsilon \bar{\mathbf{U}}} = \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}^2} \quad (2.7)$$

Realizando o mesmo procedimento para o terceiro funcional obtemos:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \mathbb{C}(\mathbf{x}) (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) d\Omega &= \int_{\Omega} \mathbb{C} \mathbf{B}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \cdot (\mathbf{B}(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})) d\Omega \\
\dots &= \int_{\Omega} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \cdot (\mathbf{B}^t \mathbb{C} \mathbf{B} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})) d\Omega \\
\dots &= \langle \mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{K} (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle \\
\dots &= \|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma}^2
\end{aligned}$$

obtendo assim uma nova matriz definida positiva  $\mathbf{M}_\sigma$  que define uma nova norma  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_\sigma}$ , com a qual definimos a expressão discretizada do terceiro funcional:

$$\mathcal{F}_\sigma(\mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})^t \mathbf{M}_\sigma (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}})}{\bar{\mathbf{U}}^t \mathbf{M}_\sigma \bar{\mathbf{U}}} = \frac{\|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma}^2} \quad (2.8)$$

Finalmente, substituindo as equações (2.6), (2.7) e (2.8) na expressão (2.5) obtemos a expressão explícita do funcional discretizado

$$\boxed{\mathcal{F}(\mathbf{x}) = c_{\mathbf{u}} \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}} + c_\varepsilon \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}} + c_\sigma \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma}}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma}} \quad (2.9)}$$

onde os coeficientes  $c_{\mathbf{u}}$ ,  $c_\varepsilon$  e  $c_\sigma$  serão variados ao realizar a análise do desempenho do método de caracterização.

Na hora de decidir qual será o algoritmo a aplicar, teremos que levar em conta uma condição importante: podemos calcular analiticamente o gradiente do funcional  $\mathcal{F}$ , portanto, neste trabalho escolheremos o algoritmo FDIPA o qual utiliza a informação do gradiente do funcional em cada iteração. Por este motivo, a seguir, calcularemos o gradiente para ser utilizado na aplicação do algoritmo de otimização posteriormente.

## Cálculo do gradiente

Para o cálculo analítico do gradiente utilizaremos a expressão discretizada do funcional dada pela equação (2.9) e realizaremos as operações para um dos três termos, considerando o caso geral onde  $\mathbf{M}$  depende de  $\mathbf{x}$ .

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = \frac{\langle \mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{U}} \rangle}$$

a matriz  $\mathbf{M}$  somente depende de  $\mathbf{x}$  quando é  $\mathbf{M}_\sigma$ , os gradientes para as matrizes  $\mathbf{M}_u$ ,  $\mathbf{M}_\varepsilon$  serão derivados como casos particulares da expressão geral.

Calculemos a derivada parcial respeito à variável  $x_i$ , e aplicando a regra da derivada do produto interno, do quociente, e usando que  $\mathbf{M}(\mathbf{x})$  é simétrica obtemos a fórmula geral da derivada parcial de um termo do funcional  $\mathcal{F}$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) &= \frac{2 \langle \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i}(\mathbf{x}), \mathbf{M}(\mathbf{x}) (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}) \rangle + \langle (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}), \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{U}} \rangle^2} \\ &- \frac{\langle \mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) (\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{U}} \rangle} \frac{\langle \bar{\mathbf{U}}, \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_i} \bar{\mathbf{U}} \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{U}} \rangle} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Vemos que é necessário calcular a derivada de  $\mathbf{U}$  respeito a  $\mathbf{x}$ , portanto, lembramos a relação entre  $\mathbf{U}$  e os parâmetros constitutivos  $\mathbf{x}$ , através da matriz  $\mathbf{K}$ . Sabemos que ambos verificam a relação dada pelo sistema linear de equações do problema direto discretizado 2.2:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x})\mathbf{U} = \mathbf{F} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{K}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i E_{ref} \bar{K}_i \quad \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial x_i} = E_{ref} \bar{K}_i \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n,+}$$

onde  $\mathbf{K}(\mathbf{x})$  é a matriz de rigidez, é  $\bar{K}_i$  a sub matriz da região  $i$  e  $x_i$  o fator do módulo de *Young* da região. Portanto podemos obter a seguinte expressão da derivada do vetor  $\mathbf{U}$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) = -\mathbf{K}(\mathbf{x})^{-1} E_{ref} \bar{K}_i \mathbf{U}$$

Substituiremos agora esta fórmula na expressão geral do gradiente dada por 2.10, e consideramos o caso da matriz  $\mathbf{M}$  igual a  $\mathbf{M}_u$ , a qual não depende de  $\mathbf{x}$  portanto a derivada será nula, obtendo assim

$$\frac{\partial \mathcal{F}_u}{\partial x_i} = \frac{-2 \langle \mathbf{K}^{-1} E_{ref} \bar{K}_i \mathbf{U}, \mathbf{M}_u (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}_u \bar{\mathbf{U}} \rangle}$$

Da mesma forma para o caso da matriz  $\mathbf{M}$  igual a  $\mathbf{M}_\varepsilon$ , que tampouco depende de  $\mathbf{x}$ , obtemos a expressão da derivada parcial do funcional  $\mathcal{F}_\varepsilon$

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\varepsilon}{\partial x_i} = \frac{-2 \langle \mathbf{K}^{-1} E_{ref} \bar{K}_i \mathbf{U}, \mathbf{M}_\varepsilon (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}_\varepsilon \bar{\mathbf{U}} \rangle}$$

Quando a matriz  $\mathbf{M}$  seja igual a  $\mathbf{M}_\sigma$  temos a seguinte derivada parcial

$$\frac{\partial \mathbf{M}_\sigma}{\partial x_i}(\mathbf{x}) = E_{ref} \tilde{\mathbf{K}}_i \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n_x}$$

portanto obtemos a seguinte derivada do funcional  $\mathcal{F}_\sigma$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_\sigma}{\partial x_i}(\mathbf{x}) &= \frac{-2 \langle \mathbf{K}^{-1} E_{ref} \bar{K}_i \mathbf{U}, \mathbf{M}_\sigma (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle + \langle (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}), E_{ref} \bar{K}_i (\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}) \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}_\sigma \bar{\mathbf{U}} \rangle} \\ &\quad - \mathcal{F}_\sigma(\mathbf{x}) \frac{\langle \bar{\mathbf{U}}, E_{ref} \bar{K}_i \bar{\mathbf{U}} \rangle}{\langle \bar{\mathbf{U}}, \mathbf{M}_\sigma \bar{\mathbf{U}} \rangle} \end{aligned}$$

A seguir, adicionaremos restrições de desigualdade ao problema de otimização.

### 2.3.5 O problema de otimização com restrições

Na Seção 1.4 foram introduzidos os conceitos matemáticos relacionados com a otimização com restrições, nesta seção modificaremos o problema de minimização adicionando restrições que devem ser verificadas pelas variáveis. Apresentaremos três das possíveis formulações do problema, todas com a mesma solução, embora possivelmente com diferente desempenho numérico ao aplicar o método.

Sabemos que existem faixas de valores admissíveis para os módulos de *Young* de materiais que podem ser encontrados dentro de uma artéria. Esta restrição física será levada em conta considerando uma cota inferior para os módulos de *Young* normalizados  $\mathbf{x}$ . A cota mínima será dada por um vetor  $\mathbf{x}_l$ , portanto obteremos um conjunto restrições lineares de desigualdade nos valores de  $\mathbf{x}$ .

#### Formulação 1

Nesta formulação o funcional a minimizar será  $\mathcal{F}(\mathbf{x})$  dado pela equação (2.9), e adicionamos a restrição inferior nos valores de  $\mathbf{x}$ . Obtendo o Problema 2.5.

**Problema 2.5** (Formulação 1). Dado o Problema 2.3 e o funcional 2.9, achar  $\mathbf{x}^*$  como solução de:

$$(F1) \begin{cases} \min_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(\mathbf{x}) \\ \text{s.a.} \\ 0 < \mathbf{x}_l \leq \mathbf{x} \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{cases}$$

sendo  $\mathbf{x}_l \in \mathbb{R}^n$  dado.

O gradiente do funcional foi calculado, e o gradiente das restrições está dado simplesmente por uma matriz identidade. A cota inferior é colocada utilizando valores suficientemente baixos, portanto o ponto  $\mathbf{x}^*$  obtido não deveria ser igual a  $x_l$  em nenhuma componente portanto, utilizando esta formulação o ótimo não deve ter restrições ativas.

## Formulação 2

Nesta formulação introduziremos uma nova variável auxiliar escalar  $z \in \mathbb{R}$  a qual será diretamente o funcional a minimizar, e estará relacionada indiretamente com a variável  $\mathbf{x}$  através da restrição  $z = \|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\infty} = \max_i \{|U_i(\mathbf{x}) - \bar{U}_i|\}$ . O problema de otimização desta formulação fica dado pelo Problema 2.6.

**Problema 2.6** (Formulação 2). Dado o Problema 2.3 e o funcional 2.9, achar  $\mathbf{x}^*$  como solução de

$$(F2) \begin{cases} \min_{\mathbf{x}, z} z \\ \text{s.a.} \\ z \geq |U_i(\mathbf{x}) - \bar{U}_i| \quad i = 1, \dots, n_{gdl} \\ 0 < x_{li} \leq x_i \quad i = 1, \dots, n \\ (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}. \end{cases}$$

onde  $n_{gdl}$  é o número de graus de liberdade do problema após aplicadas as condições de contorno.

Se o vetor de dados  $\bar{\mathbf{U}}$  não tem erros, a solução teórica desta formulação tem todas as restrições relativas a  $U_i$  verificando a igualdade. Por causa disso, um dos problemas desta formulação é a não diferenciabilidade das restrições no ótimo. Isto pode ser solucionado adicionando alguma restrição que mantenha o signo de  $U_i - \bar{U}_i$  constante desde o início. Isto afeta de forma negativa ao desempenho do método pelo que não foi considerado aqui.

### Formulação 3

Nesta formulação, (inspirada em técnicas chamadas *SAND*), os deslocamentos  $\mathbf{U}$  serão considerados variáveis de projeto a otimizar ao igual que  $\mathbf{x}$ , portanto o funcional  $\mathcal{F}$  estará definido no espaço  $\mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_{gdl}}$  sendo escrito sempre com  $\mathbf{U}$  como variável explícita, como segue

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{U}) = c_u \frac{\|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}^2} + c_\varepsilon \frac{\|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\varepsilon}^2} + c_\sigma \frac{\|\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma(\mathbf{x})}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_\sigma(\mathbf{x})}^2}$$

podemos ver que a dependência em  $\mathbf{x}$  neste funcional aparece unicamente na matriz  $\mathbf{M}_\sigma$ . Para impor a relação entre  $\mathbf{U}$  e  $\mathbf{x}$  será adicionada uma restrição de igualdade  $h$  como vemos a continuação.

**Problema 2.7** (Formulação 3). Dado o Problema 2.3 e o funcional 2.9, achar  $\mathbf{x}^*$  a solução de

$$(F3) \begin{cases} \min_{\mathbf{x}, \mathbf{U}} \mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{U}) \\ \text{s.a.} \\ h(\mathbf{x}, \mathbf{U}) = \mathbf{K}(\mathbf{x}) \mathbf{U} - \mathbf{F} = 0 \\ 0 < x_{li} \leq x_i \quad i = 1, \dots, n \\ (\mathbf{x}, \mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_{gdl}}. \end{cases}$$

A função  $h : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_{gdl}} \rightarrow \mathbb{R}^{n_{gdl}}$  é chamada equação de estado e determina neste caso um conjunto de  $n_{gdl}$  equações não lineares, equivalentes a resolver o Problema 2.2 em cada iteração. Uma das vantagens desta formulação é que o Problema 2.2 é resolvido de forma indireta ao impor a restrição de igualdade. Entretanto, isso pode trazer outros problemas numéricos devido ao aumento de equações dos sistemas a resolver.

Pode ser necessário utilizar o gradiente da função  $h$ , o qual é simples de calcular utilizando os cálculos realizados para o  $\nabla \mathcal{F}$ .

$$\nabla h = \left[ \nabla h_{\mathbf{x}} \mid \nabla h_{\mathbf{U}} \right] = \left[ \begin{array}{cccc|c} E_0 \bar{K}_1 \mathbf{U} & E_0 \bar{K}_2 \mathbf{U} & \dots & E_0 \bar{K}_{gdl} \mathbf{U} & \mathbf{K} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array} \right]$$

É simples ver que todas as formulações são equivalentes já que no ótimo obtemos  $\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{U}$ , que na formulação 2 corresponde a  $z = 0$  e nas formulações 1 e 3 provêm  $\mathcal{F} = 0$ .

### 2.3.6 Análise de sensibilidade

Ao aplicar o método de caracterização e obter um vetor de módulos de *Young* candidato  $\mathbf{x}^*$ , podemos desejar ter alguma estimativa do erro acometido, portanto

será necessário ter uma estimativa de  $\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{sol}$ . Como foi visto, é possível obter esta estimativa para o problema da barra discretizada, e a continuação realizaremos um desenvolvimento similar para o problema geral. Já que nos exemplos considerados os pontos obtidos pelo método não têm restrições ativas, podemos realizar as seguintes operações com a condição de otimalidade de gradiente zero. No caso que algum ponto ótimo tenha restrições ativas, as operações realizadas podem ser modificadas, adicionando o multiplicador de Lagrange e a restrição ativa correspondente (ver Seção 1.4), e obtendo um resultado similar. Neste trabalho, esta análise será realizada somente para a formulação 1, apresentada no Problema 2.5, mas pode ser estendida para as outras formulações.

Ao igual que no exemplo da barra, devemos considerar uma norma para medir a distancia entre diferentes campos de módulos de *Young* no espaço das funções  $E$  ou  $x$ . Consideramos a norma  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_E}$ ,

$$\begin{aligned} \|E\|_E &= \int_{\Omega} E(s)^2 ds \\ \dots &= \int_{\Omega} \langle \mathbf{N} \mathbf{E}, \mathbf{N} \mathbf{E} \rangle d\Omega \\ \dots &= \mathbf{E}^t \int_{\Omega} \mathbf{N}^t \mathbf{N} d\Omega \mathbf{E} \\ \dots &= \mathbf{E}^t \mathbf{M}_E \mathbf{E} \\ \dots &= \|\mathbf{E}\|_{\mathbf{M}_E}^2 \end{aligned}$$

onde a matriz  $\mathbf{M}_E$  está definida integrando as funções de forma em cada elemento  $e$ .

$$(\mathbf{M}_E)_{(e,e)} = \int_{\Omega^e} 1^2 d\Omega = A^e \quad A^e = \text{area do elemento } e$$

A matriz  $\mathbf{M}_E$  também é simétrica e obviamente tem valores próprios positivos distintos de zero, portanto a norma  $\|\cdot\|_{\mathbf{M}_E}$  é uma norma bem definida. Além de ter realizado as operações para uma função  $E$  esta norma é aplicável de igual forma para as funções  $x = E/E_{ref}$ .

**Linearização** Para procurar estimar o erro em  $\mathbf{x}$  tentaremos linearizar o operador de deslocamentos  $\mathbf{U} = \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{E}^*)$  através de um desenvolvimento de *Taylor* de primeira ordem

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}} - \mathbf{U} &= \nabla \hat{\mathbf{U}}[\mathbf{x}] (\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) + o(\|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\|^2) \\ \dots &\approx \nabla \hat{\mathbf{U}}[\mathbf{x}] (\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \end{aligned}$$

a matriz  $\nabla \hat{\mathbf{U}}$  não pode ser calculada no ponto  $\bar{\mathbf{x}}$  já que numa aplicação real não é dado, portanto calculamos  $\nabla \hat{\mathbf{U}}[\mathbf{x}]$  à qual chamaremos  $A$  nas seguintes operações. Considerando que a diferença nos deslocamentos seja uma variação pequena  $\delta \mathbf{U}$  e

portanto, sob a hipótese de que a diferença em  $\mathbf{x}$  seja pequena, podemos aproximar esta expressão por

$$\delta \mathbf{U} = A \delta \mathbf{x}.$$

Já que o número de graus de liberdade é geralmente diferente à quantidade de módulos incógnita (geralmente maior), a matriz  $A$  não é quadrada, portanto não é invertível diretamente, e portanto não será possível obter uma aproximação de  $\delta \mathbf{x}$  desta forma.

Podemos aplicar a mudança de base obtendo os vetores respetivos das coordenadas

$$\delta c_{\mathbf{u}} = \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right)^{-1} A B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}} \delta c_{\mathbf{x}}$$

Para procurar obter outra aproximação consideraremos os critérios de otimalidade nos pontos obtidos pelo algoritmo utilizando o vetor de deslocamentos sem erro  $\bar{\mathbf{U}}$  e outro  $\tilde{\mathbf{U}}$  tal que a diferença seja  $\delta \mathbf{U}$ .

$$\begin{aligned} A^t [\bar{\mathbf{x}}] \mathbf{M}_{\mathbf{u}} \left(\mathbf{U}(\bar{\mathbf{x}}) - \bar{\mathbf{U}}\right) &= \vec{0} \\ A^t [\tilde{\mathbf{x}}] \mathbf{M}_{\mathbf{u}} \left(\mathbf{U}(\tilde{\mathbf{x}}) - \tilde{\mathbf{U}}\right) &= \vec{0} \end{aligned}$$

Considerando que  $\delta \mathbf{x}$  é pequeno, podemos dizer que  $\nabla \hat{\mathbf{U}}[\bar{\mathbf{x}}] = \nabla \hat{\mathbf{U}}[\tilde{\mathbf{x}}] = A$ .

$$\delta c_{\mathbf{x}} = \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} \left(A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} A\right)^{-1} A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}} \delta c_{\mathbf{u}}$$

portanto, podemos estimar a cota superior do erro  $x$  como

$$\|\delta c_{\mathbf{x}}\| \leq \left\| \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} \left(A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} A\right)^{-1} A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right\| \|\delta c_{\mathbf{u}}\|$$

portanto devemos estimar a norma  $\left\| \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} \left(A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} A\right)^{-1} A^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right\|$ , a qual pode ser calculada como o máximo valor singular, portanto, procuraremos aplicar o teorema da decomposição em valores singulares.

Aplicamos o teorema de decomposição em valores singulares à matriz  $\left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right)^{-1} A B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}$  obtendo

$$\left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right)^{-1} A B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}} = W S V^t$$

substituindo e aplicando que  $\left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}\right)^t \mathbf{M}_{\mathbf{u}} B^{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}} = \mathbf{I}$  obtemos

$$\delta c_x = \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} \left(\left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} V S^t S V^t \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1}\right)^{-1} \left(B^{\mathbf{M}_{\mathbf{E}}}\right)^{-1} V S^t W^t \delta c_u$$

aplicamos que  $S^t S = \Sigma^2$ , e invertendo obtemos

$$\delta c_x = (B^{\mathbf{M}_E})^{-1} \left( (B^{\mathbf{M}_E}) V \Sigma^{-2} V^t (B^{\mathbf{M}_E}) \right) (B^{\mathbf{M}_E})^{-1} V S^t W^t \delta c_u$$

portanto obtemos

$$\delta c_x = V \hat{S}^t W^t \delta c_u \quad \hat{S} = \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

portanto,

$$\left\| (B^{\mathbf{M}_E})^{-1} (A^t \mathbf{M}_u A)^{-1} A^t \mathbf{M}_u B^{\mathbf{M}_u} \right\| = \max \left\{ \frac{1}{\sigma_i} \mid \sigma_i = \text{val. sing.} \left( (B^{\mathbf{M}_u})^{-1} A B^{\mathbf{M}_E} \right) \right\}$$

reescrevemos as matrizes de mudança de base como

$$B^{\mathbf{M}_u} = \mathbf{M}_u^{-\frac{1}{2}} \quad B^{\mathbf{M}_E} = \mathbf{M}_E^{-\frac{1}{2}}$$

e finalmente obtemos a cota do erro em  $\mathbf{x}$

$$\|\delta c_x\| \leq \frac{1}{\sigma_{min}} \|\delta c_u\|$$

sendo  $\sigma_{min} = \min\{\sigma_i\}$  e  $\sigma_i$  os valores singulares da matriz  $\left( \mathbf{M}_u^{\frac{1}{2}} A \mathbf{M}_E^{-\frac{1}{2}} \right)$ . Utilizando esta expressão poderemos estimar a variação dos resultados ao incluir erros nos dados, estimação que será realizada no seguinte capítulo.

## Capítulo 3

# Validação numérica do método de caracterização

No Capítulo 1 foi apresentado o problema de elasticidade linear para materiais sob certas hipóteses procurando reproduzir propriedades do tecido arterial. Posteriormente, no Capítulo 2, foi formulado um método numérico para a resolução de problemas inversos associados à caracterização de propriedades mecânicas de sólidos. Neste capítulo apresentaremos e aplicaremos um procedimento para avaliar a eficácia do método proposto, através da análise de resultados numéricos obtidos para diferentes exemplos com solução conhecida. Na seção final é realizada uma análise de sensibilidade do problema procurando obter uma estimativa da variação dos resultados ao introduzir erros de nível conhecido aos dados. Esta estimativa servirá finalmente como ferramenta para decidir se utilizar técnicas de regularização ou não.

### 3.1 Descrição do processo de validação

Em todo resultado de um modelo matemático numérico ou analítico, existem diferenças entre este e a realidade física modelada. Estas diferenças ou erros nos resultados, são devidos a aproximações e hipóteses consideradas no processo de modelagem, e eventuais erros introduzidos na resolução do modelo. No caso que o modelo forme parte de uma diagnose médica, estes erros, poderiam modificar o resultado da diagnose de forma crítica. Por isso, é de suma importância a validação de todo método numérico, previamente a sua aplicação em problemas de maior contato com a realidade, onde os riscos começam a ser importantes, sobretudo quando falamos de vidas humanas.

Para lembrar o método de caracterização proposto, vejamos o fluxograma da Figura 2.5 do Capítulo 2, no qual são apresentadas as duas etapas que ocorreriam

na aplicação do método: a obtenção dos dados (verde) e a caracterização de propriedades (azul). Visto que para este trabalho não utilizaremos dados médicos experimentais, deveremos substituir a etapa da obtenção dos dados, por uma etapa de geração dos mesmos. Durante esta nova etapa é resolvido o problema direto discreto 2.2 associado ao problema de elasticidade linear utilizando como dados os módulos de *Young* solução, e resolvendo pelo Método dos Elementos Finitos. Esta etapa é chamada de Geração de dados e corresponde à cor verde na Figura 3.1. A etapa de caracterização fica sem modificações importantes respeito à apresentada anteriormente, e finalmente, logo da caracterização, os resultados são comparados com a solução conhecida, decidindo se o algoritmo foi capaz ou não de caracterizar o material.

O processo de validação, esquematizado na Figura 3.1, começa pela definição da geometria, condições de contorno e propriedades mecânicas a utilizar. Estas últimas

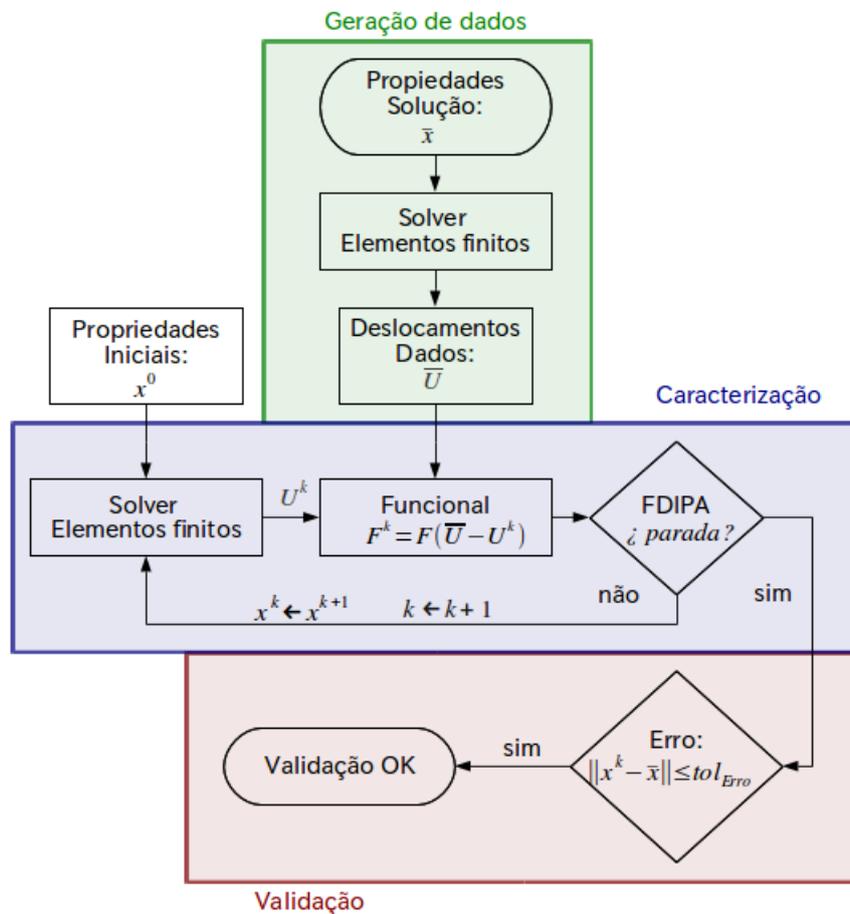


Figura 3.1: Fluxograma do processo de validação do método de caracterização.

serão os módulos de *Young* de todos os elementos da malha, representados pelo vetor  $\bar{x}$  definido anteriormente. Posteriormente é resolvido o problema de elementos finitos com os módulos  $\bar{x} E_{ref}$ , e obtemos os deslocamentos da malha, dados pelo

vetor  $\bar{\mathbf{U}}$ . Este vetor de deslocamentos é ingressado ao método de caracterização apresentado anteriormente e, quando o critério de parada do algoritmo de otimização for satisfeito, obteremos os módulos de *Young* finais  $\mathbf{x}^*$ . Finalmente esses módulos de *Young* serão comparados com os valores solução, segundo alguma norma a definir, aceitando o método no caso que o erro seja inferior a uma tolerância previamente definida  $tol_{Erro}$ . Para medir este erro, será apresentado um critério particular para o problema.

É importante levar em conta que esta validação é possível somente quando é conhecida a solução, para poder avaliar o erro exato dos valores obtidos pelo método numérico.

Previamente à resolução dos exemplos poderíamos pensar que o desempenho do método pode variar ao modificar os parâmetros do problema como: geometria, malha, valor do módulo de *Poisson*, diferentes condições de contorno. Nos exemplos a ser resolvidos serão consideradas geometrias simples assim como também geometrias irregulares, inspiradas em formas de artérias reais, e também será variado o valor do módulo de *Poisson* assim como a quantidade de elementos das malhas. Desta forma poderemos concluir se a eficácia do método depende destas características ou não para o tipo de problema estudado. Ainda superando as validações que serão feitas aqui, no caso que este método seja aplicado a problemas reais com humanos, se deverá fazer validações prévias com dados reais, aplicando o método em animais ou artérias *in-vitro* (de acordo com a regulamentação adequada) para assim obter resultados com tecidos com comportamento similar ao das artérias humanas *in-vivo*.

**Programa de elementos finitos** Como vimos é necessária a utilização de um programa de elementos finitos tanto dentro do método de caracterização, como no processo de geração de dados na validação. Foi desenvolvido um software que utiliza elementos finitos triangulares lineares para resolver problemas de estado plano de tensões (E.P.T.) e deformações (E.P.D.) para materiais elástico lineares, para pequenos deslocamentos e deformações. Foram utilizadas noções teóricas de [39], e o código foi desenvolvido na linguagem de programação GNU-Octave v.3.2.3 [40]. O programa de elementos finitos foi validado numericamente e os resultados obtidos são apresentados no Apêndice A.

**Deslocamentos dados** Em uma primeira etapa resolveremos exemplos onde os deslocamentos solução serão gerados com o mesmo programa de elementos finitos e os mesmos parâmetros da malha que foram usados para calcular os deslocamentos do modelo em cada iteração. Desta forma saberemos que o funcional pode atingir o valor zero, e portanto, poderemos centrar nossa análise no algoritmo de otimização.

Além disso, como foi descrito na Seção 1.1.3, os processos de obtenção de dados dos deslocamentos e sua adaptação para ser utilizados pelo método, introduzem erros nos valores medidos, portanto, é importante analisar a sensibilidade da solução obtida na aparição de erros nos dados. Um dos efeitos que analisaremos é o erro introduzido ao modificar o quantidade de dados, esta é uma situação que pode aparecer com alta frequência já que a resolução dos dispositivos de obtenção de dados pode ser superior ou inferior à máxima resolução possível definida pela malha com máxima quantidade de elementos. Em particular na Seção 3.3 geraremos dados com malhas com elevado número de elementos e posteriormente interpolaremos estes valores a malhas de menor quantidade de elementos a ser utilizados na caracterização. Finalmente na Seção 3.4 analisaremos o erro obtida na solução ao adicionar um erro nos dados. Este erro nos dados pode ser simulado como aleatório com média zero, já que existem várias etapas do processo onde podem ser introduzidos.

No caso de realizar uma validação previa à aplicação com deslocamentos obtidos com imagens médicas, será necessário conhecer o tipo de erros introduzidos pelos dispositivos médicos e procedimentos para poder estimar, aplicando à análise de sensibilidade, qual será o erro na solução.

**Geometria** Nos exemplos considerados utilizaremos duas geometrias, uma primeira aproximação simples anular, e outra de maior complexidade procurando representar uma geometria similar a uma seção transversal de uma artéria real, com um importante avanço de Aterosclerose. Na imagem a) da Figura 3.2 vemos uma seção transversal de uma artéria real obtida utilizando ultra-som (ver [20]), onde podemos diferenciar quatro distintos tipos de tecidos: tecido são, camada fibrosa, ateroma e trombo. Na imagem b) da Figura 3.2 vemos uma malha de elementos finitos para uma geometria aproximada à geometria da artéria real, onde definimos as mesmas regiões de tecidos: uma parede exterior (tecido são), uma região de ateroma, uma camada de tecido entre a camada exterior e o lúmen, e o material que formará o trombo (em cor preta). Existem também métodos de processamento de imagens que são capazes de identificar o tamanho das membranas que separam as diferentes camadas da parede arterial [41], portanto em uma aplicação real é possível utilizar uma geometria com dimensões definidas. Ao ter esta informação de dimensões precisa poderemos incluir as interfaces entre regiões de possíveis diferentes materiais, utilizando uma maior quantidade de elementos.

**Parâmetros numéricos** Para a resolução numérica destes problemas deveremos definir valores para os parâmetros do nosso modelo. Estas são as hipóteses consideradas na resolução dos exemplos:

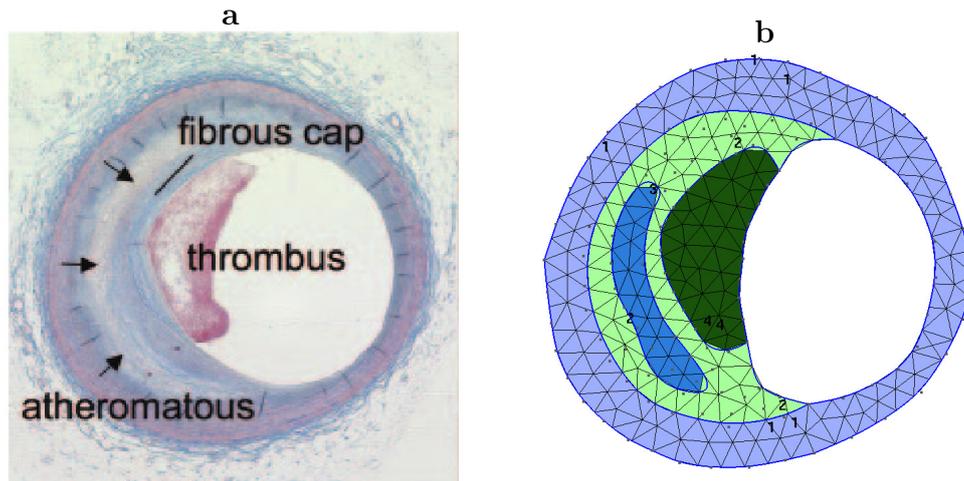


Figura 3.2: a) Seção transversal de artéria com Aterosclerose | b) malha de elementos finitos de geometria aproximada.

- **Pressão interna:** Como foi apresentado na Seção 1.1.3 é possível obter os deslocamentos entre dois instantes de tempo a partir das correspondentes imagens obtidas utilizando o IVUS. Para poder formular o Problema 2.3 de forma completa devemos conhecer as condições de contorno, portanto é necessário conhecer o valor da pressão interna do sangue em cada um destes instantes, para assim calcular sua variação. Vamos a considerar valores promédio de pressões diastólica 80 mmHg e sistólica 120 mmHg, portanto, existirá uma variação de pressão  $q = (120 - 80) \text{ mmHg} = 40 \text{ mmHg} = 5.33 \text{ kPa} = 5.33 \times 10^{-3} \text{ MPa} = 5.33 \times 10^{-3} \text{ N/mm}^2$ .
- **Módulo de Young :** diversos estudos têm mostrado que o valor do módulo de *Young* do tecido de artérias saudáveis é aproximadamente  $300 \text{ kPa} = 0.3 \text{ MPa} = 0.3 \text{ N/mm}^2$  (ver [3]). Este valor  $E_{ref}$  será utilizado como referência para os valores de módulo de *Young* dos elementos e regiões, valor que foi utilizado para definir o valor  $x$  através de  $x_i = \frac{E_i}{E_{ref}}$ .
- **Coefficiente de Poisson:** na Seção 1.2.2 foi introduzida a propriedade da quase incompressibilidade do material. Nos exemplos numéricos utilizaremos o valor  $\nu = 0.49$  procurando considerar um material com  $\nu$  elevado e evitando os problemas numéricos que existem ao usar 0.5 com a formulação de elementos finitos implementada. Este valor é utilizado em alguns artigos da bibliografia, por exemplo em [28]. Na Seção 3.3 variaremos o valor deste parâmetro para analisar o efeito que este parâmetro produz nos resultados, já que estamos utilizando um modelo de elementos finitos.

**Medida do erro das propriedades** Para poder validar o método é necessário contar com alguma forma de medir o erro da solução obtida. Em cada um dos exemplos a resolver, o valor do módulo de *Young* da solução  $\bar{\mathbf{E}}$  será conhecido, portanto, poderemos diretamente calcular a diferença com os valores obtidos através do método  $\mathbf{E}^*$ . Para comparar estes valores introduziremos uma forma particular de calcular o erro. Calcularemos o erro relativo na região ou elemento com o maior erro de todo o domínio. Este tipo de medida é razoável já que, na diagnose, não seria suficiente dar os valores  $\mathbf{E}^*$  e dizer qual é o erro relativo médio. Seria necessário dar uma cota superior do erro cometido pelo método em todo  $\Omega$ . Definimos, portanto, o erro relativo  $\delta_{\mathbf{x}}$  nas propriedades mecânicas da região  $i$  da seguinte forma:

$$\delta_{x_i} = |E_i^* - \bar{E}_i|/\bar{E}_i = |x_i^* - \bar{x}_i|/\bar{x}_i.$$

Como foi dito desejamos obter o máximo de todos estes erros, portanto definiremos a função  $\text{ErroMax}$  que nos dará o valor do máximo erro relativo em todas as regiões

$$\text{ErroMax}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^{n_{reg}} \rightarrow \mathbb{R}^+ \quad \text{ErroMax}(\mathbf{x}) = \|\delta_{\mathbf{x}}\|_{\infty} = \max_i \{|x_i - \bar{x}_i|/\bar{x}_i\}.$$

sendo  $n_{reg}$  o número de regiões utilizadas. Para avaliar o método calcularemos o valor do  $\text{ErroMax}$  para as propriedades obtidas pelo método e veremos se é menor do que a tolerância admissível considerada  $tol_{\text{Erro}}$ :

$$\text{ErroMax}(\mathbf{x}^*) = \max_i \{|x_i^* - \bar{x}_i|/\bar{x}_i\} \leq tol_{\text{Erro}}.$$

no caso que a condição for satisfeita, diremos que o método funciona, segundo o critério  $tol_{\text{Erro}}$ .

**Análise do funcional** Na Seção 2.3.4 foram apresentados três funcionais que podem ser utilizados como função objetivo a minimizar pelo algoritmo de otimização, para resolver o problema inverso formulado. Os funcionais estão associados a deslocamentos ( $\mathcal{F}_{\mathbf{u}}$ ), deformações ( $\mathcal{F}_{\varepsilon}$ ) e tensões ( $\mathcal{F}_{\sigma}$ ), e estão definidos pelas seguintes expressões:

$$\mathcal{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\mathbf{u}}}^2} \quad \mathcal{F}_{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\varepsilon}}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\varepsilon}}^2} \quad \mathcal{F}_{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{\|\mathbf{U}(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\sigma}}^2}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_{\sigma}}^2}$$

Desejamos ver se existem diferenças na eficácia do método ao utilizar diferentes funcionais, portanto, em cada exemplo apresentaremos os resultados obtidos para combinações dos três funcionais mencionados. Começaremos por analisar o desempenho do método para os funcionais  $\mathcal{F}_{\mathbf{u}}$  e  $\mathcal{F}_{\varepsilon}$ , considerando o funcional

combinação convexa  $\mathcal{F}_\alpha$  dado por:

$$\mathcal{F}_\alpha(\mathbf{x}) = \alpha \mathcal{F}_\mathbf{u}(\mathbf{x}) + (1 - \alpha) \mathcal{F}_\varepsilon(\mathbf{x}) \quad \alpha \in \{0, 0.5, 1\}.$$

posteriormente analisaremos os resultados para os funcionais  $\mathcal{F}_\mathbf{u}$  e  $\mathcal{F}_\sigma$  considerando o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  dado por:

$$\mathcal{F}_\beta(\mathbf{x}) = \beta \mathcal{F}_\mathbf{u}(\mathbf{x}) + (1 - \beta) \mathcal{F}_\sigma(\mathbf{x}) \quad \beta \in \{0, 0.5, 1\}.$$

Em cada um dos exemplos resolvidos a continuação serão apresentados os resultados para estes funcionais.

## 3.2 Validação do método usando dados sem erro

Nesta seção aplicaremos o método de validação sob a hipótese de que os dados não incluem erros. Serão resolvidos três exemplos numéricos.

### 3.2.1 Exemplo 1

A resolução de este primeiro exemplo tem como objetivo dar uma primeira aproximação ao problema, e verificar que o método funciona para condições de baixa complexidade.

A geometria considerada é simples em comparação com uma situação real, e a quantidade de regiões ou variáveis do problema de otimização é baixa para a capacidade do algoritmo de otimização que será utilizado. A geometria é definida por um anel com diâmetros interior e exterior,  $\phi_i = 1.2$  mm e  $\phi_e = 2.0$  mm respectivamente.

As condições de contorno estão dadas pela pressão interna, constante no contorno interior  $q = 5.33 \times 10^{-3}$  N/mm<sup>2</sup>, e restrições cinemáticas segundo o esquema da imagem esquerda da Figura 3.3. A justificativa para a utilização desse tipo de apoio foi realizada na Seção 2.3.3. Para a análise de elementos finitos consideramos uma discretização de 448 elementos triangulares lineares. Esta malha é dividida em dez regiões de elementos segundo a imagem da direita na Figura 3.3, onde vemos as regiões identificadas por diferentes cores. Os elementos de uma mesma região  $i$  terão um valor de módulo de *Young* solução  $\bar{E}_i = \bar{x}_i E_{ref}$ , e um valor  $E_i^0 = x_i^0 E_{ref}$  para iniciar o algoritmo de otimização, onde  $E_{ref}$  é o valor referência apresentado anteriormente. Na Tabela 3.1 podemos ver os valores iniciais e finais de  $\mathbf{x}$ , assim como a quantidade de elementos finitos por cada região.

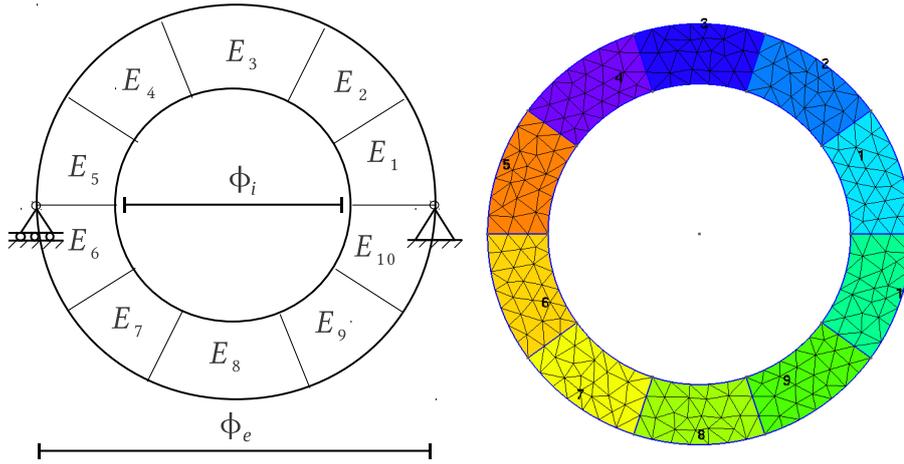


Figura 3.3: esq: Esquema de geometria e condições de contorno de exemplo 1 - dir: Malha e regiões de exemplo 1.

parâmetro	região									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\bar{x}_i$ (solução)	1.0	1.0	1.2	1.6	2.2	1.8	1.4	1.1	1.0	1.0
$x_i^0$ (inicial)	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1
# elemen.	46	44	44	46	44	46	44	44	46	44

Tabela 3.1: Parâmetros do exemplo 1

## Resultados numéricos

Começaremos apresentando os resultados para a formulação 1 (ver Seção 2.3.5), utilizando os funcionais definidos pela variação dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  indicados anteriormente. Posteriormente veremos os resultados da formulação 2 e realizaremos alguns comentários sobre resultados da formulação 3. Os critérios de parada utilizados no FDIPA foram: decréscimo do funcional e norma de gradiente com tolerância zero e norma da direção de descida menor ou igual a  $tol_d = 1.0 \times 10^{-10}$ .

**Formulação 1** Começaremos por analisar os resultados numéricos para os funcionais  $\mathcal{F}_\alpha$  e  $\mathcal{F}_\beta$ , analisando o erro obtido em cada iteração. Lembramos a expressão da formulação 1,

$$(F1) \begin{cases} \min_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(\mathbf{x}) \\ \text{s.a.} \\ 0 < \mathbf{x}_l \leq \mathbf{x} \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{cases}$$

onde  $n = 10$  será a quantidade de regiões, e  $\mathbf{x}$  o vetor de módulos de *Young* e  $\mathbf{x}_l$  a cota inferior de  $\mathbf{x}$ : Na Figura 3.4 vemos na esquerda a evolução do funcional e

na direita o ErroMax em cada iteração. O critério de parada satisfeito no fim do

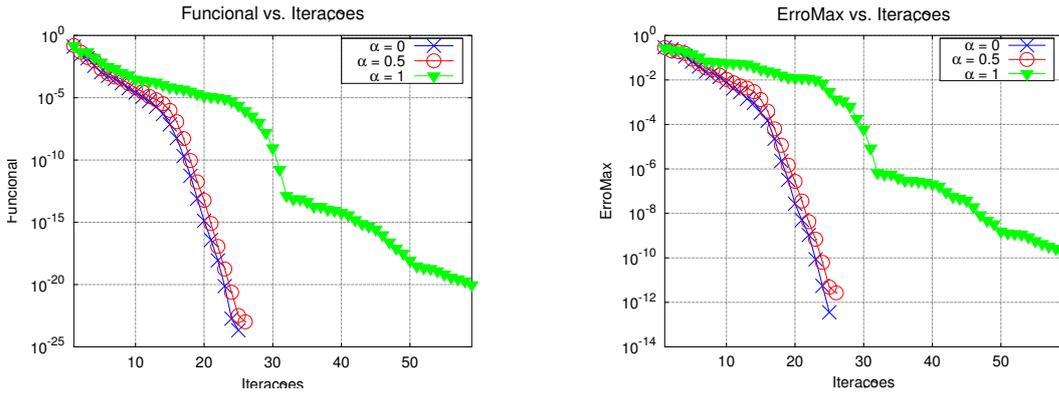


Figura 3.4: esq:  $\mathcal{F}_\alpha$  em escala logarítmica | dir: ErroMax em escala logarítmica.

método para os três casos foi  $\|d^k\| < tol_d$ . Vemos que para os três valores de  $\alpha$  o algoritmo chega a minimizar o funcional e o ErroMax atinge valores inferiores a  $1.0 \times 10^{-10}$ , portanto podemos dizer que, para estas condições, foi possível fazer a caracterização. Também podemos ver que a velocidade de convergência é diferente para cada funcional, já que o funcional  $\mathcal{F}_\varepsilon$  ( $\alpha = 0$ ) necessita menos da metade de iterações que  $\mathcal{F}_u$  ( $\alpha = 1$ ) para finalizar a caracterização segundo o critério de parada utilizado.

A seguir, apresentaremos uma análise similar para o funcional  $\mathcal{F}_\beta$ , combinação de  $\mathcal{F}_u$  e  $\mathcal{F}_\sigma$ , utilizando os mesmos critérios de parada da análise de  $\mathcal{F}_\alpha$ . Na Figura 3.5 vemos os resultados do funcional e o ErroMax. Ao igual que na análise do funcional

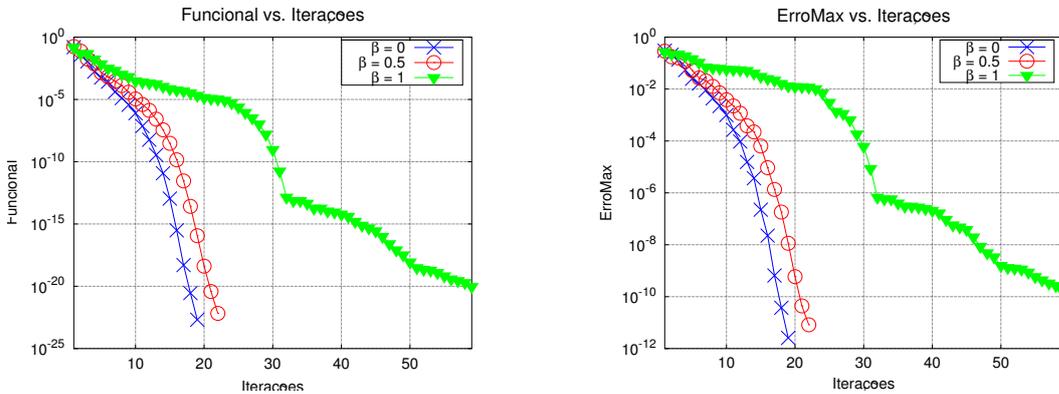


Figura 3.5: esq: evolução de  $\mathcal{F}_\beta$  em escala logarítmica | dir: evolução de ErroMax em escala logarítmica.

$\mathcal{F}_\alpha$ , obtemos que, para todos os valores de  $\beta$ , o método é capaz de caracterizar o material, e em particular para o valor  $\beta = 0$  o desempenho é melhor que para  $\beta = 1$ , por tanto o funcional  $\mathcal{F}_\sigma$  é mais apropriado do que  $\mathcal{F}_u$ . Também vemos que ao utilizar  $\mathcal{F}_\sigma$  o método é mais rápido que para  $\mathcal{F}_\varepsilon$ , portanto neste exemplo o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  tem um melhor desempenho do que  $\mathcal{F}_\alpha$ . Veremos esta diferença em maior medida no exemplo 3.

**Formulação 2** Previamente a apresentar os resultados numéricos obtidos para a formulação 2, lembraremos sua expressão vista na Seção 2.3.5,

$$(F2) \begin{cases} \min_{\mathbf{x}, z} z \\ \text{s.a.} \\ z \geq |U_i(\mathbf{x}) - \bar{U}_i| \quad i = 1, \dots, n_{gdl} \\ 0 < x_{li} \leq x_i \quad i = 1, \dots, n \\ (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}. \end{cases}$$

onde  $n_{gdl}$  é o número de graus de liberdade permitidos na malha após aplicar as condições de contorno cinemáticas. Neste caso não utilizaremos os funcionais  $\mathcal{F}$ , portanto não será necessário analisar a variação de  $\alpha$  e  $\beta$ . Os critérios de parada utilizados são os mesmos da formulação 1, e na Figura 3.6 vemos os resultados numéricos obtidos. O critério de parada pelo qual o algoritmo finalizou foi a

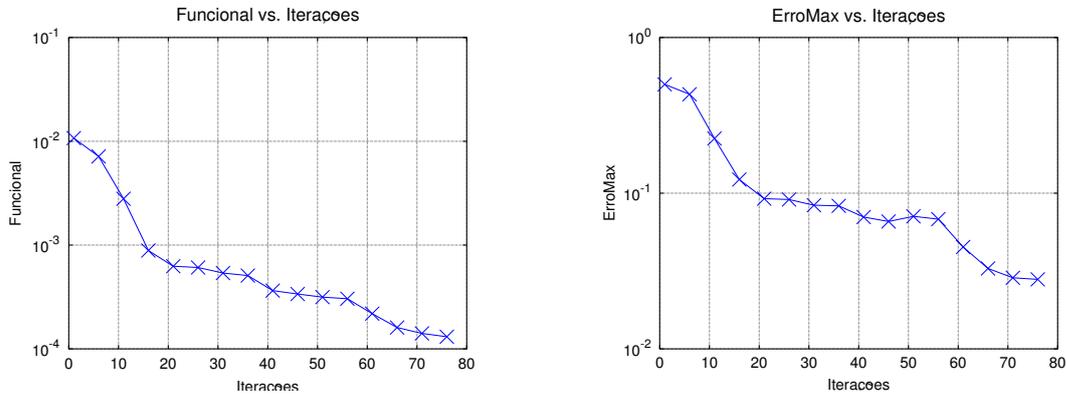


Figura 3.6: esq: Evolução de  $z$  em escala logarítmica | dir: ErroMax em escala logarítmica.

tolerância respeito à direção de descida  $\|d^k\| < tol_d$ . O ErroMax obtido finalmente é 0.025, pelo que podemos concluir que o método foi capaz de caracterizar com erro máximo de 2.5%. Este valor é aceitável, embora, vemos que é superior ao obtido na formulação 1 em vários ordens de magnitude.

É importante destacar que esta formulação tem importantes diferenças em complexidade para o algoritmo de otimização já que são utilizadas restrições não lineares em maior quantidade do que variáveis do problema, e considerando os tamanhos dos sistemas lineares formados pelo algoritmo, supomos que estas afetam negativamente o condicionamento numérico na solução.

A formulação poderia ser modificada mudando o valor absoluto por alguma das normas utilizadas no funcional da formulação 1.

**Formulação 3** A terceira formulação apresentada, representa um aumento de complexidade já que existem restrições não lineares e também é utilizado o funcional  $\mathcal{F}$ .

Ao resolver o exemplo 1 utilizando esta formulação, foi visto que os resultados são de menor nível que os obtidos utilizando a formulação 2. Devemos levar em conta que o algoritmo FDIPA é apropriado para problemas de mediano porte, portanto a inclusão de restrições de igualdade aumenta também o tamanho do sistema linear a resolver, adicionando novas dificuldades numéricas na implementação. Para evitar este resultado negativo pode ser utilizadas variações do FDIPA apropriadas para formulações do tipo SAND.

Nos seguintes exemplos utilizaremos somente a formulação 1 para realizar a caracterização.

### Mapeamentos de propriedades

Para poder apresentar os resultados claramente, introduzimos gráficos de mapeamento das propriedades mecânicas no domínio. Nestes gráficos são desenhados todos os elementos da malha com cores associadas ao valor e módulo de *Young* correspondente a cada elemento em certa iteração. A cor branca corresponderá ao mínimo valor do módulo de *Young* atingido em qualquer iteração ou região durante todo o processo de caracterização, e o preto corresponderá ao máximo valor atingido. Este mapeamento será realizado para a formulação e funcional com o melhor desempenho, portanto, escolhemos a formulação 1 e o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  com  $\beta = 0$  que corresponde ao funcional  $\mathcal{F}_\sigma$ .

Na Figura 3.7 são apresentados os mapeamentos das propriedades mecânicas. Na imagem esquerda-superior vemos os módulos de *Young* da solução do exemplo, na imagem direita-superior vemos o mapeamento dos valores iniciais com os quais foi iniciado o processo de caracterização e as duas imagens inferiores correspondem aos mapeamentos nas iterações 2 e 19. Podemos ver que na segunda iteração o algoritmo identifica a direção no qual deve modificar as propriedades para decrementar o funcional, mas os valores não são ainda os corretos. Na iteração final obtemos um mapeamento igual ao mapeamento da solução, embora existe um erro na ordem de  $10^{-10}$  o qual não podemos ver devido à escala de cores utilizada.

### 3.2.2 Exemplo 2

Neste exemplo consideraremos uma geometria procurando modelar o domínio de uma artéria real. As condições de contorno utilizadas serão iguais das consideradas no exemplo 1, com um ponto fixo e outro com um deslocamento permitido horizontalmente. Nesta geometria o diâmetro interior e o exterior são

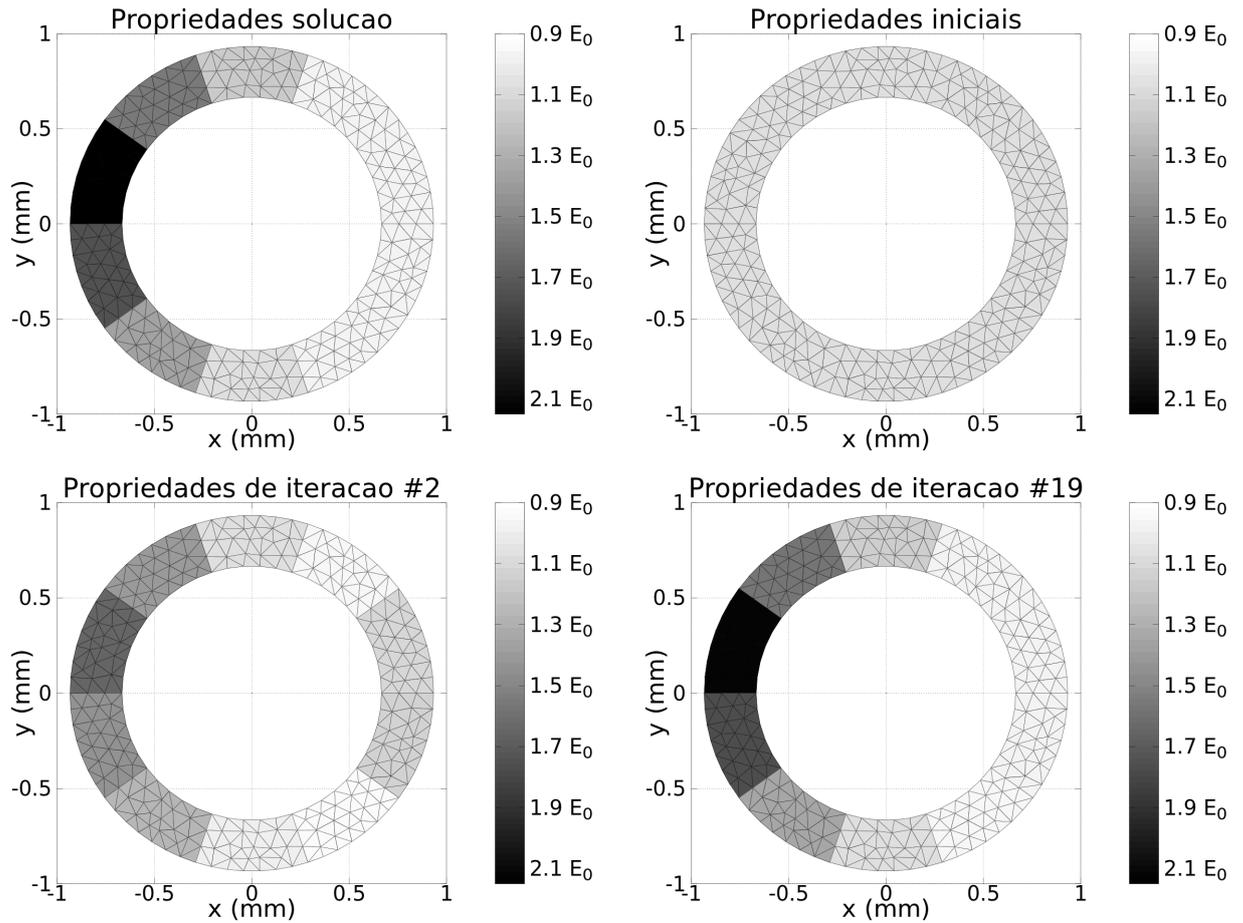


Figura 3.7: 1. Propriedades solucao, 2. Propriedades iniciais, 3. Propriedades na iterao#o 2, 4. Propriedades na iterao#o final

aproximadamente  $\phi_i = 2 \text{ mm}$  e  $\phi_e = 2.8 \text{ mm}$  respectivamente. As condi#o#es de contorno de press#o#o est#o#o dadas pela press#o#o interna constante  $q = 5.33 \times 10^{-3} \text{ N/mm}^2$  ao igual que no exemplo anterior.

Na imagem da esquerda da Figura 3.8 podemos ver uma se#o#o transversal arterial com componentes definidos como foram descritos na Se#o#o 3.1. Na imagem da direita da Figura vemos o modelo discretizado com as condi#o#es de contorno em deslocamentos representadas e as quatro regi#o#es identificadas claramente como os quatro tipos de tecidos descritos: 1 tecido s#o#o, 2 camada fibrosa, 3 ateroma e 4 trombo.

Todos os elementos de cada uma de estas regi#o#es ter#o#o os mesmos valores do m#o#dulo de *Young*, sendo  $x_i E_{ref}$  para a regi#o#o  $i$ . Na Tabela 3.2 podemos ver os par#o#metros do exemplo 2, entre os quais est#o#o os m#o#dulos de *Young* solu#o#o e inicial para o algoritmo. Al#e#m de que os m#o#dulos de *Young* dos materiais reais existentes dentro das art#e#rias podem variar respeito aos considerados neste exemplo, podemos dizer que s#o#o representativos, por exemplo, o ateroma #e# mais r#e#gido que o tecido s#o#o e o tecido que formar#o#o o trombo #e# menos r#e#gido que o tecido s#o#o. O tecido s#o#o ter#o#o

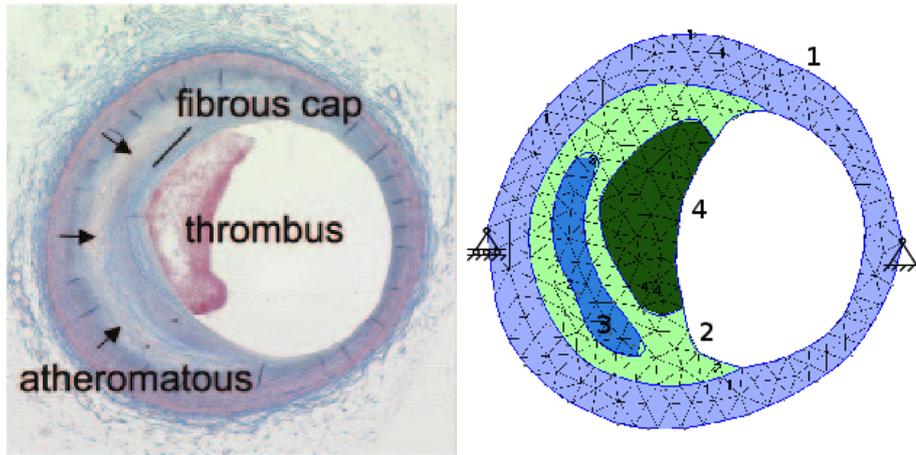


Figura 3.8: esq: imagem artéria real | dir: esquema exemplo 2

parâmetro	região			
	1	2	3	4
$\bar{x}_i$ (solução)	1.1	1.2	1.6	0.7
$x_i^0$ (inicial)	1.1	1.1	1.1	1.1
# elementos	213	104	36	58

Tabela 3.2: Parâmetros do exemplo 2

módulo  $1.1 E_{ref}$ , representado pela região 1, na região 2 vemos outro tipo de tecido são com valor  $1.2 E_{ref}$  e em 3 vemos a camada de ateroma com módulo  $1.6 E_{ref}$ . Finalmente em 4 vemos um potencial de tipo trombo com módulo  $0.7 E_{ref}$ .

## Resultados

Na resolução de este exemplo consideraremos os mesmos valores numéricos considerados no exemplo anterior para os critérios de parada do algoritmo. Na Figura 3.9 podemos ver os resultados para o funcional  $\mathcal{F}_\alpha$ . Vemos um

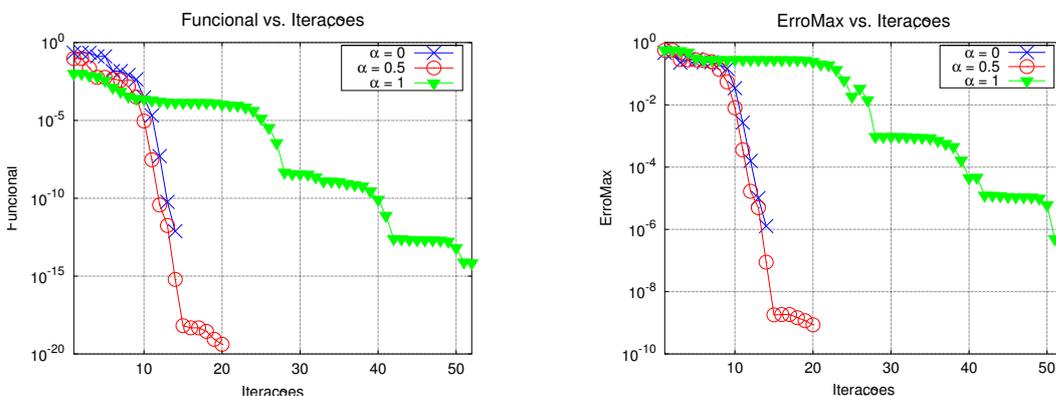


Figura 3.9: esq:  $\mathcal{F}_\alpha$  em escala logarítmica | dir: ErroMax em escala logarítmica.

comportamento similar para valores de  $\alpha$  0 e 0.5, em tanto que para  $\alpha = 1$  o algoritmo requer um maior número de iterações. Além disso, nos três casos o método atinge um ErroMax menor a  $10^{-6}$ , pelo que podemos concluir que é realizada a caracterização.

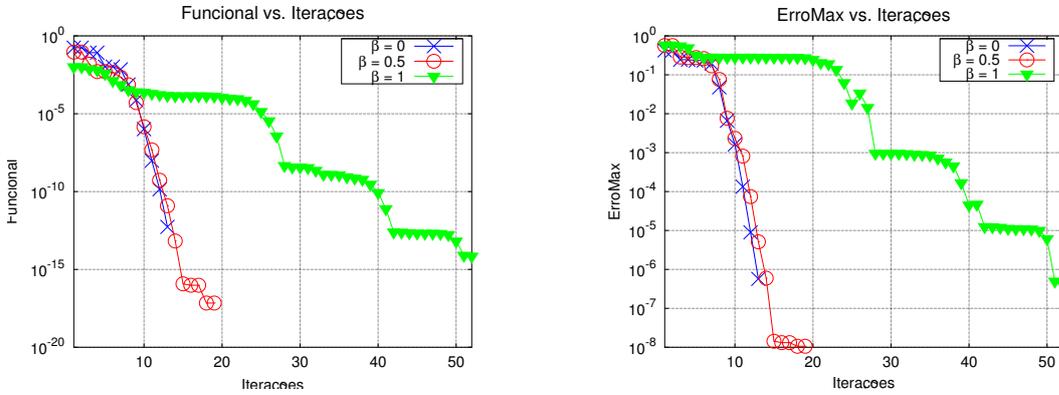


Figura 3.10: esq:  $\mathcal{F}_\beta$  em escala logarítmica | dir: ErroMax em escala logarítmica.

Na Figura 3.10 podemos ver os resultados para o funcional  $\mathcal{F}_\beta$ , onde novamente concluímos que o comportamento é similar ao exemplo 1, assim como também vemos uma maior rapidez para o valor  $\beta = 1$  do que para  $\alpha = 1$ .

Novamente vemos que o funcional  $\mathcal{F}_u$  necessita uma quantidade consideravelmente superior aos outros para cumprir os critérios de parada. Embora seja obtido o mesmo resultado nesse sentido, vemos que encontramos uma diferença com os resultados do exemplo 1 no desempenho dos funcionais  $\mathcal{F}_\beta$  para  $\beta = 0$  e 0.5. Os resultados são similares.

### Mapeamentos de propriedades mecânicas

Na Figura 3.11 vemos os mapeamentos dos módulos de *Young* no domínio do exemplo, obtidos utilizando o funcional  $\mathcal{F}_\sigma$ . Podemos ver que na segunda iteração o método já reconhece que a região 4 tem um módulo menor que os módulos em redor e na iteração final o método atinge as propriedades solução do problema. Além de poder ver as cores neste diagrama e estimar aproximadamente o módulo, é necessário introduzir algum tipo de informação adicional para saber exatamente o nível de erro em cada elemento em cada iteração. Isso será visto na seguinte seção, onde introduziremos um novo mapeamento para visualizar os resultados.

### 3.2.3 Exemplo 3

Neste exemplo aumentaremos o nível de complexidade, eliminando as restrições dos elementos das regiões, portanto, considerando que cada elemento da malha terá um módulo de *Young* diferente a ser identificado, procurando assim dar maior

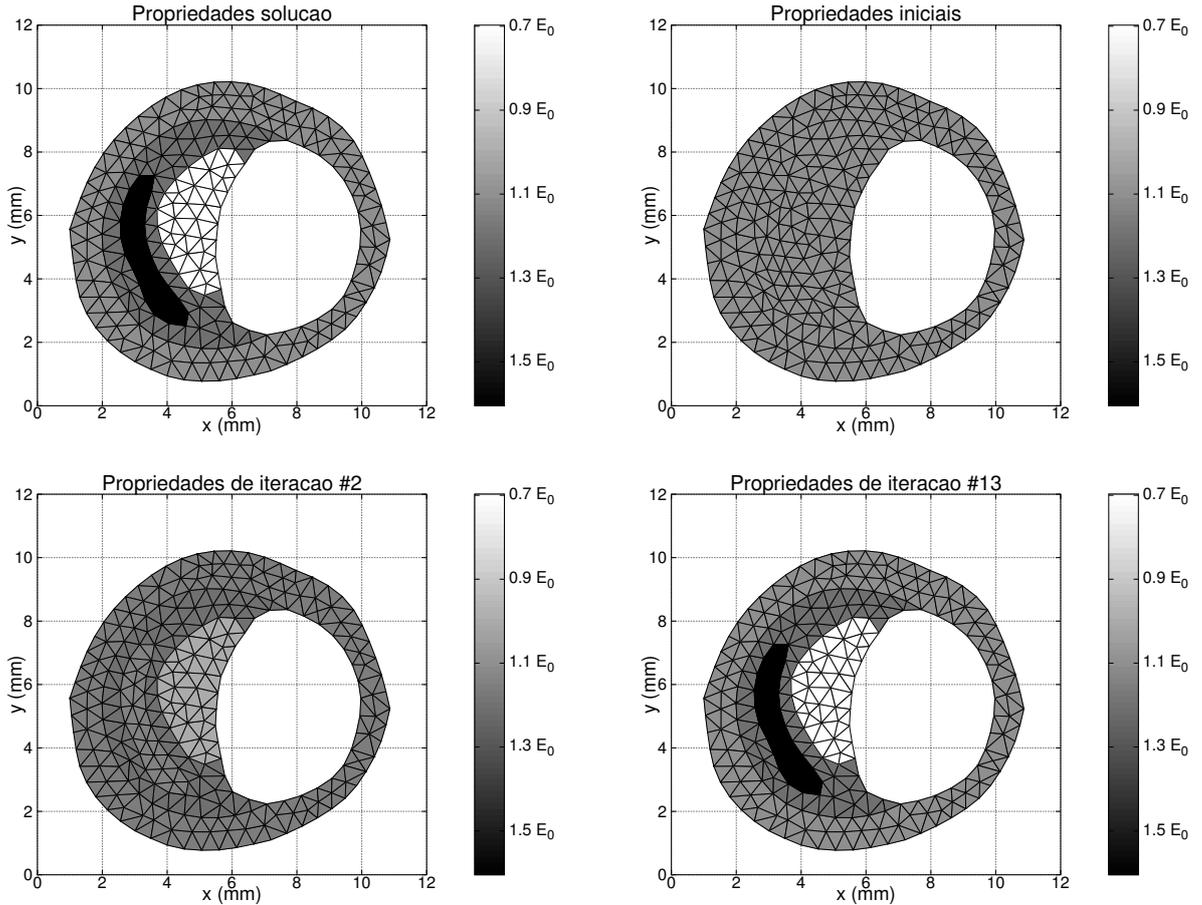


Figura 3.11: (esq-sup): distribuição de propriedades solução | (dir-sup) propriedades iniciais | (esq-inf) propriedades na iteração 2 | dir-inf: propriedades na iteração final

liberdade ao problema e obrigando ao método a reconhecer as regiões de forma automática. Utilizaremos a mesma geometria do exemplo 2 e a mesma discretização de elementos finitos. Os parâmetros da malha e as distribuições de propriedades mecânicas na solução estão dadas pela Tabela 3.2 ao igual que no exemplo 2.

Dado que neste exemplo a dificuldade numérica é maior a dos anteriores, consideraremos um critério de parada menor, mais apropriado para a precisão desejada no valor das propriedades. Consideraremos que a obtenção de um erro relativo de ordem  $10^{-1}$  no valor de cada  $x_i$  é aceitável, portanto utilizaremos uma tolerância para a norma da direção de descida  $tol_d = 10^{-4}$ , com a qual pretendemos seja suficiente para o algoritmo. Os outros critérios de parada do algoritmo serão considerados zero ao igual que nos exemplos anteriores.

## Resultados

Na imagem esquerda da Figura 3.12 podemos ver a evolução do funcional  $\mathcal{F}_\alpha$  em escala logarítmica durante a otimização, e no gráfico da direita podemos ver a evolução o valor ErroMax. São apresentados os resultados para os casos de  $\alpha = 0,0.5$

e 1, e os valores do gráfico cada 50 iterações. O funcional com valor  $\alpha = 1$  tem valores

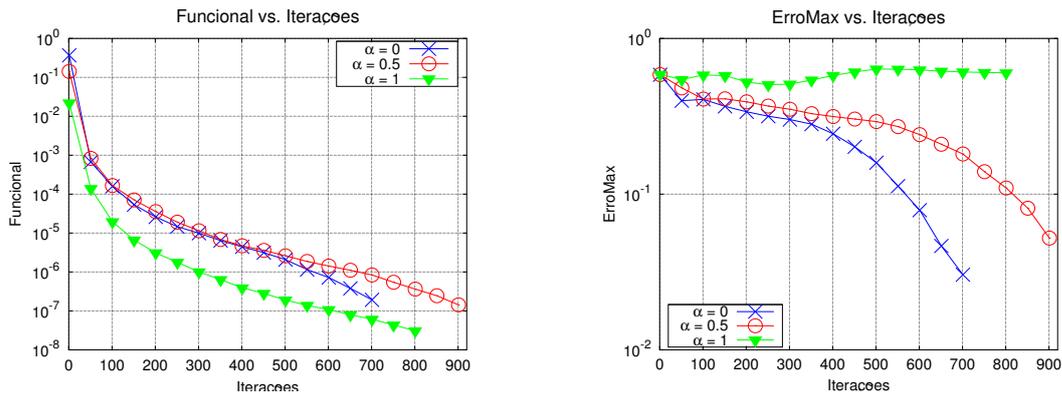


Figura 3.12: esq: Evolução  $\mathcal{F}_\alpha$  em escala logarítmica | dir: Evolução ErroMax em escala logarítmica.

inferiores aos de valores 0.5 e 0, embora o ErroMax não obtêm o decrescimento esperado. O funcional  $\alpha = 0$  produz decrescimento no funcional de menor ordem mais um decrescimento importante no ErroMax, que é o que é importante para caracterizar todo o domínio.

Na Figura 3.13 vemos a evolução do funcional  $\mathcal{F}_\beta$ , e ErroMax o correspondente, ambos em escala logarítmica, durante o processo de caracterização e para os valores  $\beta = 0, 0.5$  e 1. Nos gráficos podemos ver que todos os funcionais com melhor

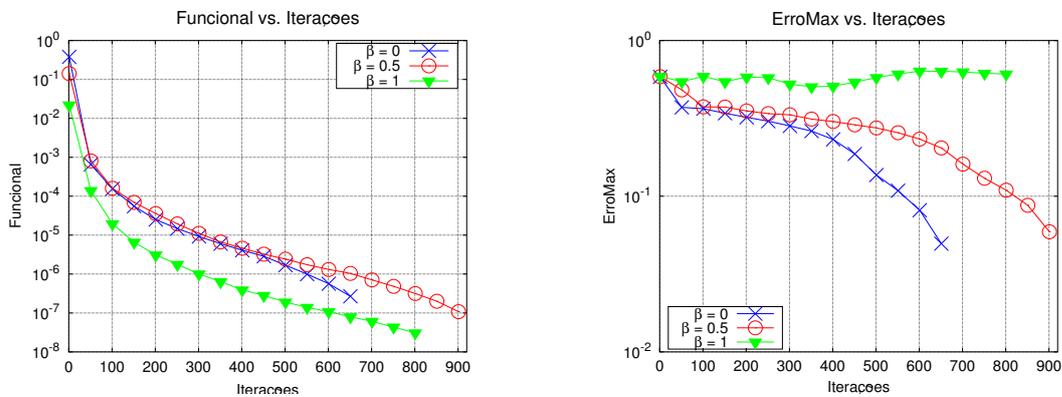


Figura 3.13: esq:  $\mathcal{F}_\beta$  em escala logarítmica | dir: ErroMax em escala logarítmica.

desempenho foram os associados aos valores  $\alpha = 0$  e  $\beta = 0$ . Analisaremos a continuação os resultados numericamente detalhadamente.

Devemos definir um critério de aceitação para as propriedades obtidas em função de seu erro. Sejam os valores de propriedades mecânicas consideradas como solução e as diferenças entre os diferentes valores de cada região, diremos que se o ErroMax é da ordem de 5% ou menor será possível identificar o material, e portanto diremos que o método foi capaz de resolver o problema. No caso contrário diremos que o método não foi capaz de resolver, e que deve ser considerada uma tolerância de maior exigência embora não será possível assegurar resultados positivos. Os

erros das propriedades obtidas ao aplicar o método para os diferentes funcionais considerados podem ser vistos na Tabela 3.3. Concluimos que, como vimos nos

parâmetro $\alpha$	ErroMax( $\mathbf{x}^*$ )	ErroMedio( $\mathbf{x}^*$ )	its.
0	2.89%	0.31%	706
0.5	4.58%	0.46%	915
1	60.17%	6.81%	805
parâmetro $\beta$	ErroMax( $\mathbf{x}^*$ )	ErroMedio( $\mathbf{x}^*$ )	its.
0	4.35%	0.36%	665
0.5	5.29%	0.40%	914
1	60.17%	6.81%	805

Tabela 3.3: Resultados numéricos exemplo 3 funcionais  $\mathcal{F}_\alpha$  e  $\mathcal{F}_\beta$

gráficos os funcionais associados a deformações ( $\alpha = 0$ ) e tensões ( $\beta = 0$ ) são os mais apropriados. Enquanto que no funcional associado a deslocamentos produz um erro não é aceitável segundo o critério estabelecido. Se comparamos os funcionais respectivos a  $\alpha = 0$  e  $\beta = 0$  vemos que são similares em desempenho, já que o primeiro obtém um erro menor, enquanto que necessita mais iterações para finalizar.

### Mapeamentos de propriedades mecânicas

Na Figura 3.14 vemos os mapeamentos dos módulos de *Young* obtidos ao aplicar o método utilizando o funcional  $\mathcal{F}_\sigma$ . Lembramos que na barra da direita vemos os valores da variáveis  $x$  que representam os módulos de *Young* divididos por um valor de referência  $E_0 = E_{ref}$ . Podemos ver que na iteração 25 já é possível identificar a região 4 e que na iteração final parece estar caracterizados completamente os materiais. Esta representação não é capaz de mostrar os erros que já vimos que existem na solução obtida 3.3, portanto a continuação introduziremos um novo mapeamento onde os erros de cada elementos são apresentados.

### Mapeamentos de erros

Da mesma forma que foi desenhado o mapeamento de módulos de *Young* podemos mapear os erros relativos para cada elemento para qualquer iteração. Cada elemento será associado a uma cor onde a cor branca representará o erro relativo zero, enquanto que a preta definirá o maior erro relativo atingido por qualquer elemento ou região em todas as iterações do método. Na Figura 3.15 vemos os mapeamentos dos erros obtidos para algumas iterações importantes, com a barra de referência do valor de erro correspondente a cada cor. Os mapeamentos são realizados para: a iteração solução (erro zero), iteração inicial, iteração 25 e iteração 650 próxima ao final. Vendo a imagem dos erros dos módulos iniciais podemos verificar que nessa

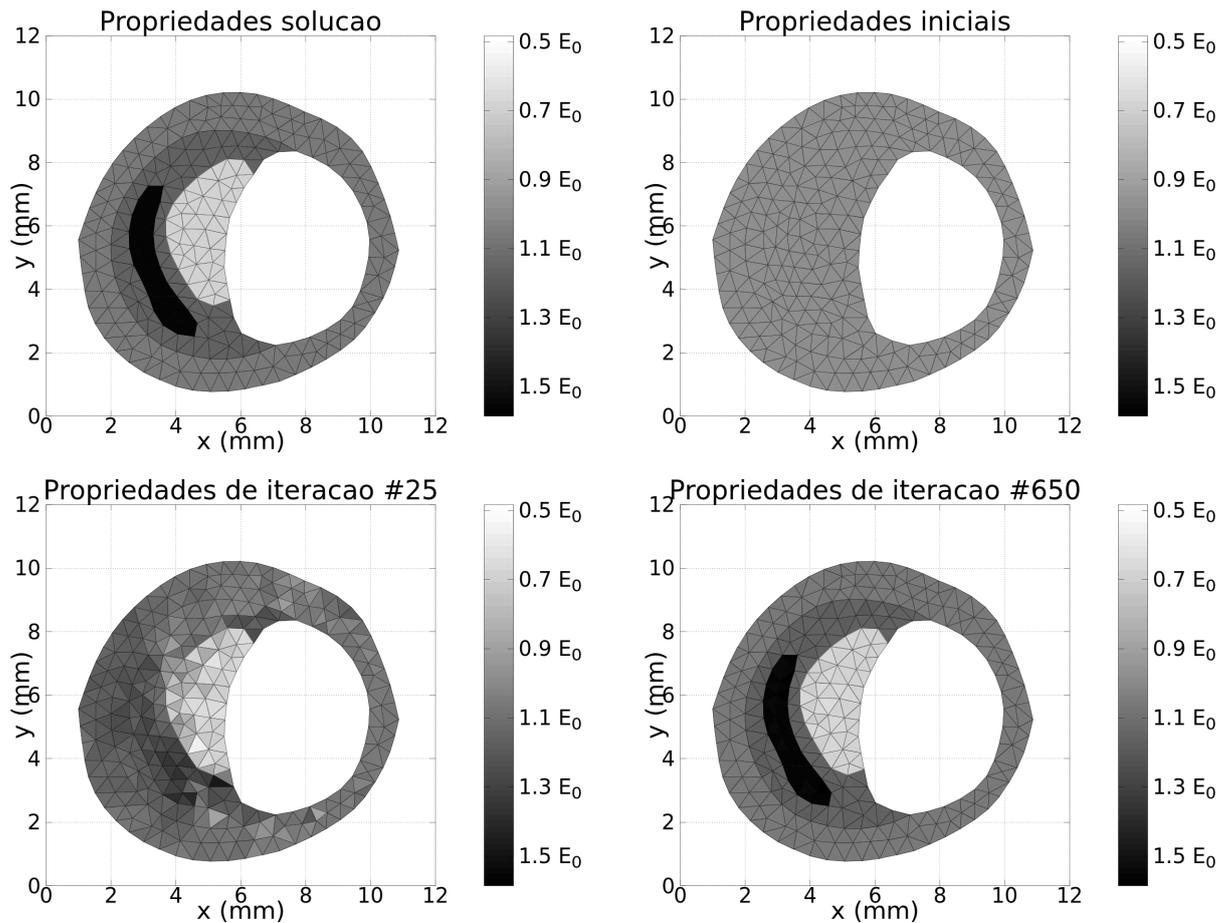


Figura 3.14: 1. Propriedades em soluo - 2. Propriedades iniciais - 3. Mapeamento de propriedades na iterao 25 - 4. Mapeamento de propriedades na iterao 650.

iterao existia um erro de aproximadamente 50% nos elementos da regio 4, o qual   correto lembrando os valores utilizados como ponto inicial e os valores soluo, apresentados na Tabela 3.2:  $\frac{|x^0(4) - \bar{x}(4)|}{\bar{x}(4)} \approx 0.5$ . Na imagem dos mapeamentos finais podemos ver que existe um tom de cor diferente a branco dentro da regio 4 portanto, confirmamos que o erro  $\text{ErroMax}$  obtido s3 existe em uma quantidade pequena de elementos da discretizao.

No Ap ndice B podemos ver os mapeamentos dos erros para um maior n mero de iteraes e apreciar a evoluo do erro produzida pelo m todo. Tamb m so apresentados ali os mapeamentos dos erros para os exemplos 1 e 2.

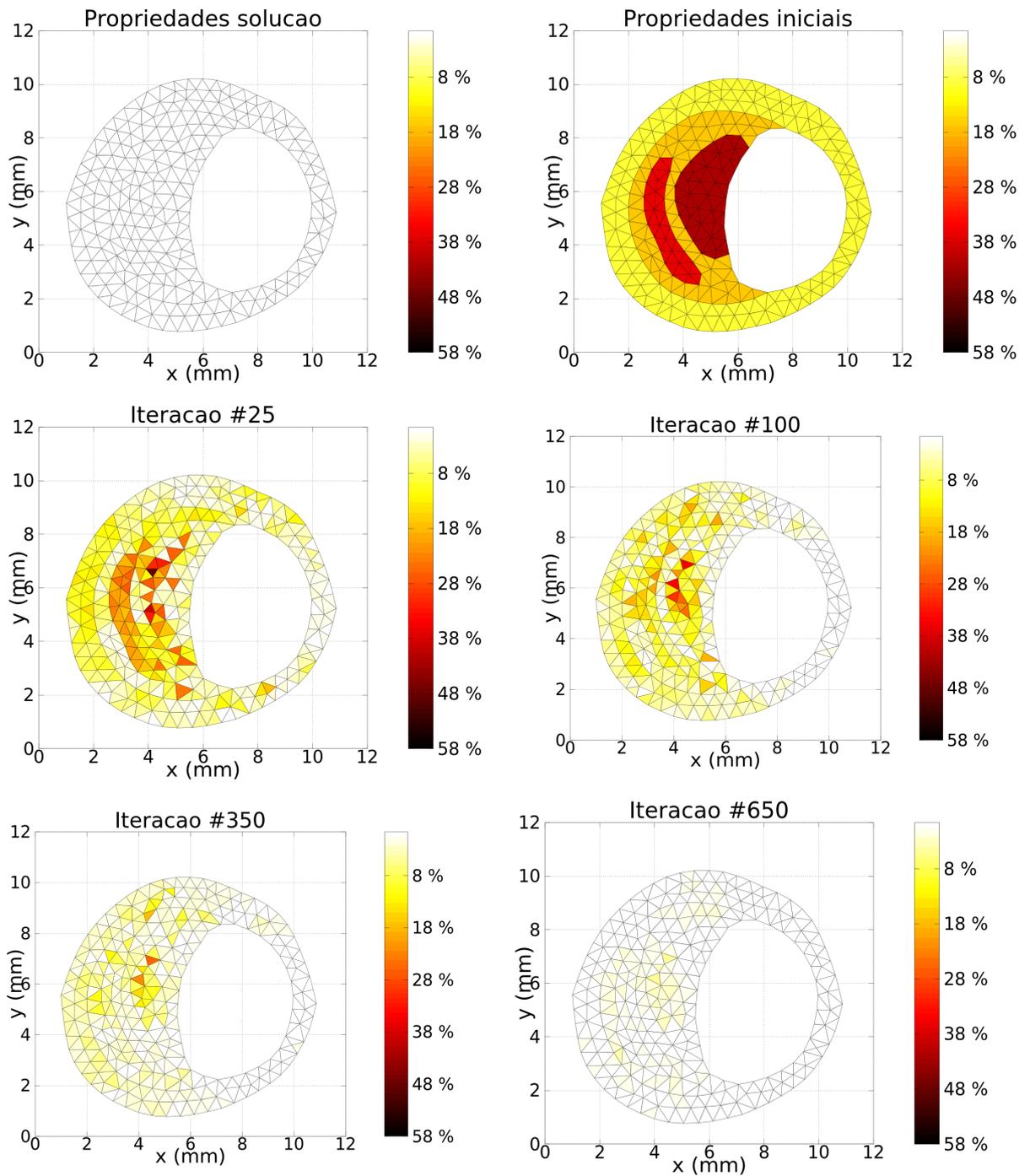


Figura 3.15: 1.mapeamento de erros em soluo - 2. mapeamento de erros iniciais - 3. mapeamento de erros na iterao 25 - 4. mapeamento de erros na iterao 100 - 5. mapeamento de erros na iterao 350 - 6. mapeamento de erros na iterao final (650)

### 3.3 Validação do método usando dados com erro de discretização

Analisando os resultados dos exemplos anteriores podemos concluir que, ao aumentar o número variáveis do funcional a otimizar para uma mesma geometria, aumenta a quantidade de iterações que o método necessita para resolver o problema de caracterização formulado. Em uma eventual aplicação real do método, se pretenderá resolver a diagnose em um tempo menor a um tempo máximo, dado por processos médicos, portanto é introduzida uma limitação para a quantidade de iterações que o método pode empregar. Devido a isto e utilizando a conclusão anterior, vemos que indiretamente é imposta uma limitação no número de variáveis do problema, e portanto no número de elementos da discretização do domínio.

Por outro lado, nessa aplicação médica, os deslocamentos dados seriam obtidos através de procedimentos de obtenção de imagens e posterior processamento (ver Figura 2.5), obtendo assim um campo de vetores de uma resolução possivelmente superior ou inferior à definida pelo conjunto de nós da discretização máxima considerada. Para poder aplicar o método seria necessário levar os deslocamentos dados com alta resolução aos nós da malha de elementos finitos utilizada no método, portanto deve ser realizada alguma interpolação provocando a perda de dados ou introdução de erro nestes. Este erro de interpolação entre deslocamentos de distintas malhas será chamado de erro de discretização.

Nesta seção analisaremos a variação da eficácia do método ao utilizar dados com maior resolução que as malhas utilizada para a análise de elementos finitos realizada em cada iteração do método. Resolveremos três exemplos utilizando como deslocamentos dados, os obtidos através da análise de elementos finitos utilizando uma malha de elevado número de elementos. Posteriormente estes deslocamentos serão interpolados à malha utilizada no método com um número menor de elementos. Para analisar de forma mais completa o erro devido à discretização, consideraremos também uma variação no valor do coeficiente de *Poisson*  $\nu$ . Assim, veremos se o fato de considerar valores cercanos a 0.49 pode modificar o erro de discretização obtido.

#### 3.3.1 Exemplo 4

Neste problema utilizaremos a geometria, condições de contorno e parâmetros físicos do exemplo 1, com os mesmos valores de propriedades iniciais  $\mathbf{x}^0$  e solução  $\bar{\mathbf{x}}$  definidos pela Tabela 3.1. Ao igual que no exemplo, cada região terá uma décima parte da quantidade de elementos total da discretização. Para emular os dados obtidos através de algum processo médico com alta resolução, realizaremos a análise de elementos finitos com uma malha de 2054 elementos, obtendo assim um campo de

deslocamentos de alta resolução que será considerado o “real”  $\bar{\mathbf{U}}_{real}$ . Posteriormente estes deslocamentos serão interpolados a três malhas diferentes utilizadas no método de caracterização de 110, 240 e 530 elementos, o deslocamento obtido através da interpolação que será o dado  $\bar{\mathbf{U}}$ . Além de comparar os deslocamentos ao variar o tamanho do elemento da malha, consideraremos uma variação no valor do módulo de *Poisson*  $\nu$ .

Começamos analisando o nível de erro introduzido ao interpolar os deslocamentos reais à malha de menor quantidade de elementos. Utilizaremos como medida o erro relativo na norma, definido pelo quociente

$$\frac{\|\mathbf{U}_{real} - \mathbf{U}_{int}\|}{\|\mathbf{U}_{real}\|}.$$

Na imagem esquerda da Figura 3.16 podemos ver os resultados para as três malhas utilizadas e considerando uma variação no módulo de *Poisson*  $\nu$ . Como esperávamos

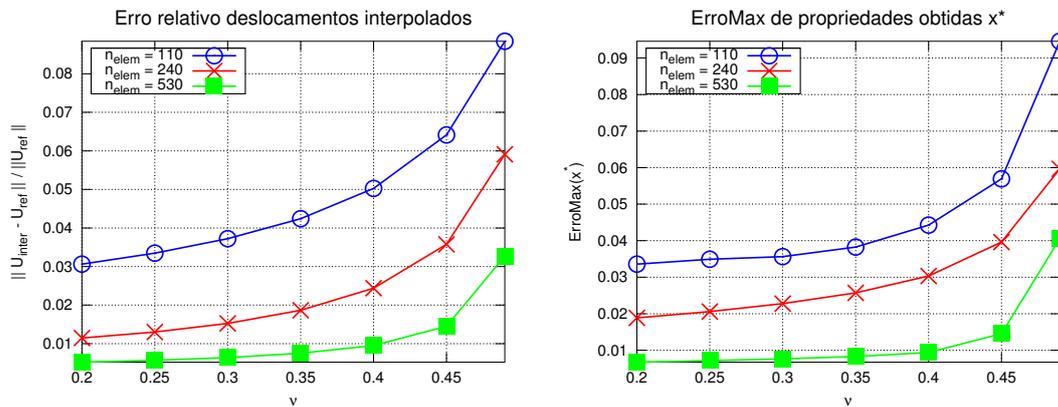


Figura 3.16: Resultados exemplo 4

vemos que ao aumentos a quantidade de elementos da malha o erro da interpolação diminui e também ao utilizar valores maiores de  $\nu$  o erro aumenta.

Na imagem da direita da Figura 3.16 vemos os ErroMax na última iteração do método para diferentes valores de  $\nu$ , utilizando como dados os três campos de deslocamentos interpolados e com tolerância  $tol_d = 10^{-3}$  para a direção de descida. Já que este exemplo tem uma complexidade de nível baixo o erro obtido é insignificante para todos os valores de  $\nu$ , embora, existe importante aumento ao utilizar valores cercanos a 0.49.

### 3.3.2 Exemplo 5

Neste problema utilizaremos a geometria do exemplo 2 com as 4 regiões definidas no mesmo. Para obter os deslocamentos dados  $\bar{\mathbf{U}}_{real}$  realizaremos uma análise de

elementos finitos com uma malha de 2095 elementos e, ao igual que no exemplo anterior, interpolaremos estes campos de deslocamentos aos nós definidos por três malhas de 264, 546 e 1087 elementos.

Na Figura 3.17 podemos ver os resultados obtidos ao realizar a caracterização. Lembramos que a tolerância utilizada é  $tol_d = 10^{-3}$ , a qual é maior à que foi utilizada no exemplo 2 portanto os erros obtidos serão maiores. Nos resultados vemos que

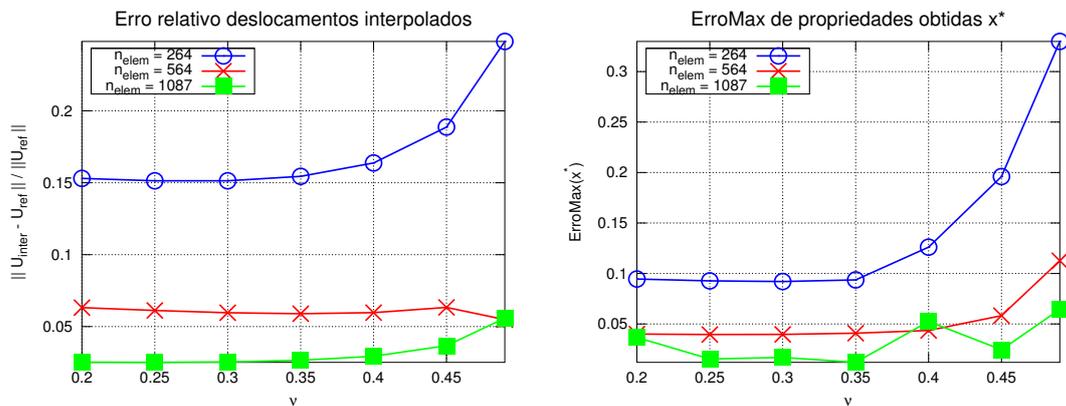


Figura 3.17: Resultados exemplo 5

existe um salto importante no erro ao passar da malha de 546 a 264 elementos. Também vemos que a diminuição ao duplicar os elementos de 564 a 1087 não é do nível de melhora que poderíamos esperar, portanto podemos concluir que a malha da ordem de 500 elementos parece ser uma opção razoável. No exemplo 2 foi considerada uma malha desta ordem de elementos.

Estes gráficos também permitem concluir que considerar o valor  $\nu = 0.49$  provoca um aumento no erro notavelmente maior para a malha de 264 elementos, tanto no erro nos deslocamentos como no *ErroMax*, este efeito não é tão marcado na malha de 564 elementos.

### 3.3.3 Exemplo 6

Neste problema utilizaremos a geometria do exemplo 3, com os valores iniciais e solução utilizados para as 4 regiões definidas da mesma forma. Para obter os deslocamentos dados realizaremos a análise de elementos finitos com uma malha de 2095 elementos. Neste caso consideraremos duas malhas sobre as quais realizaremos a interpolação dos deslocamentos dados, por um lado a malha de 264 elementos utilizada no exemplo anterior e uma segunda malha que será obtida a partir do refinamento desta. No refinamento cada elemento triangular será dividido em quatro novos triângulos formados pelos pontos meios dos lados do triângulo original, como vemos no esquema apresentado na Figura 3.18. Ao aplicar este simples processo de

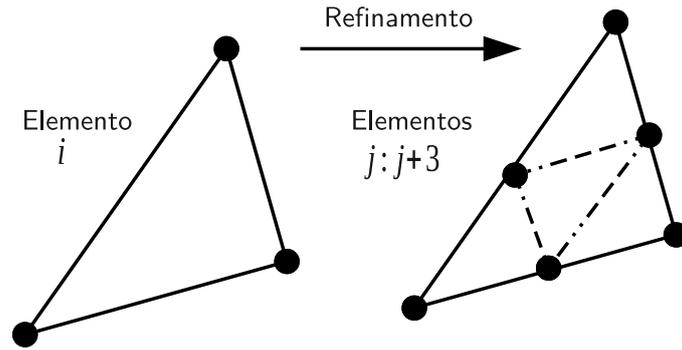


Figura 3.18: Esquema refinamento

refinamento à malha de 264 elementos obtemos uma nova malha de 1056 elementos. Além do aumento na quantidade de elementos consideraremos que o mesmo número de variáveis, portanto para a caracterização com a malha de 264 elementos cada elemento terá uma variável, enquanto na malha de 1056 elementos decidimos manter a restrição de que cada grupo de quatro elementos obtidos a partir de um triângulo  $i$  na malha de 264 terá um valor variável a definir  $x_i$ .

Através destas novas características da análise procuramos ver se é possível melhorar o desempenho do método sem aumentar o número de variáveis de uma forma que ao mesmo tempo colabora com a redução do erro de interpolação ou erro de discretização.

Na Figura 3.19 podemos ver os resultados para as malhas. Vemos que

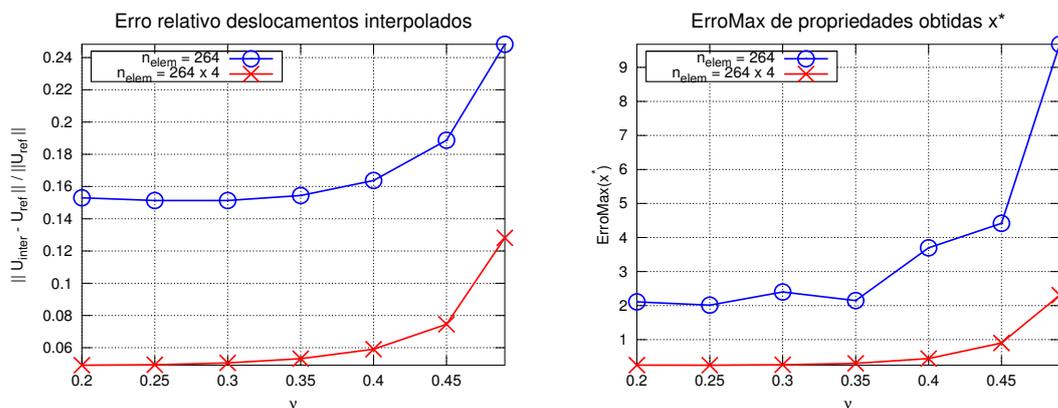


Figura 3.19: Resultados exemplo 6

efetivamente ao considerar um a malha com mais elementos, o erro diminui de forma importante e vemos novamente que o aumento de  $\nu$  afeta negativamente os resultados.

Os resultados dos Erromax poderiam ser melhores se for utilizada uma tolerância  $tol_d$  menor, como no exemplo 4.

### 3.4 Análise de sensibilidade

Na Seção 3.3 foi apresentada uma análise da variação dos resultados do método ao introduzir erros nos dados de entrada  $\bar{\mathbf{U}}$ . Nesta seção será realizada uma análise teórica para estimar o erro que é produzido na solução ao introduzir um erro de tipo geral nos dados. Nesta análise, estes erros são considerados aleatórios já que podem ser gerados devido a erros de representação e cálculo numérico, erros na medição, as hipóteses consideradas nos modelos, etc.

Para medir o nível de erro nos dados utilizamos o quociente de normas respeito à matriz  $\mathbf{M}_u$ , e diremos que o erro, ou ruído, tem valor relativo  $r$  se verifica

$$\frac{\|\delta\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}}{\|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}} = r.$$

Se a técnica numérica de obtenção dos deslocamentos é conhecida de forma teórica, é possível estimar o nível de ruído  $r$  introduzido nos dados. Posteriormente, ao aplicar o método é obtido o candidato a solução  $\mathbf{x}^*$  e podemos estimar o erro relativo respeito à solução real  $\bar{\mathbf{x}}$ . Neste trabalho acharemos o erro na solução para um ruído  $r$ .

Lembrando a expressão obtida na Seção 2.3.6 e supondo que  $\delta\mathbf{x}$  é pequeno, obtemos a seguinte expressão para a cota do erro relativo em  $\mathbf{x}$

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}_u}}{\|\bar{\mathbf{x}}\|_{\mathbf{M}_u}} \approx \frac{\|\delta\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}_u}}{\|\mathbf{x}^*\|_{\mathbf{M}_u}} \leq \frac{1}{\sigma_{min}} \frac{1}{\|\mathbf{x}^*\|_{\mathbf{M}_u}} \|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u} r$$

sendo  $\sigma_{min} = \min_r\{\sigma_i\}$  e  $\sigma_i$  os valores singulares da matriz  $\left(\mathbf{M}_u^{\frac{1}{2}}\mathbf{A}\mathbf{M}_E^{-\frac{1}{2}}\right)$ . Esta desigualdade pode ser reescrita como

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}_u}}{\|\bar{\mathbf{x}}\|_{\mathbf{M}_u}} \leq C_x r \quad C_x = \frac{1}{\sigma_{min}} \frac{1}{\|\mathbf{x}^*\|_{\mathbf{M}_u}} \|\bar{\mathbf{U}}\|_{\mathbf{M}_u}$$

Vemos assim que para analisar a variação da cota do erro relativo de  $\mathbf{x}$  devemos estudar a variação do parâmetro  $C_x$  ao variar o número de elementos da discretização  $n$ . Na Figura 3.20 vemos o gráfico do parâmetro  $C_x$  em função de  $n$  o número de elementos da malha. Podemos concluir que a cota é aproximadamente  $2n$ , o qual é verificado ao realizar os cálculos numéricos. Também verificamos assim o resultados teórico obtido na Seção 2.3.6 de que o parâmetro  $C_x$  é de ordem  $n$ . Finalmente obtemos um estimador simples para o erro em  $\mathbf{x}$  dado por

$$\frac{\|\delta\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}_u}}{\|\bar{\mathbf{x}}\|_{\mathbf{M}_u}} \leq 2nr.$$

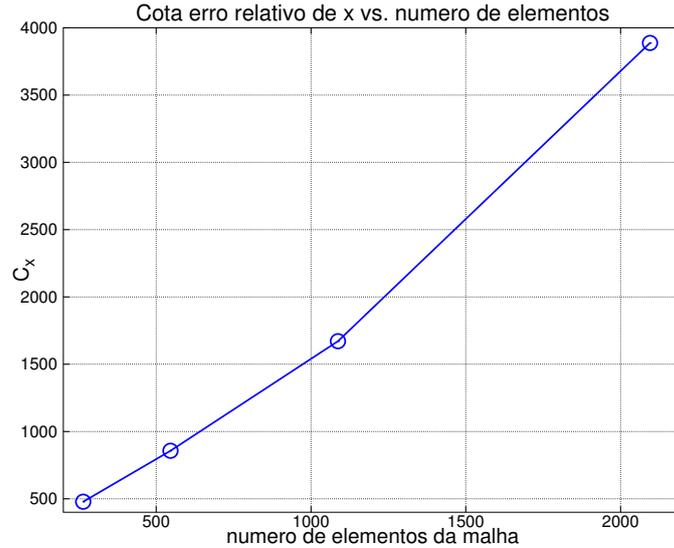


Figura 3.20: Análise de sensibilidade cota do erro

Consideremos que podemos aceitar um erro relativo meio da ordem de um 5% em  $\mathbf{x}$ , portanto para uma malha de 250 elementos, o máximo ruído  $r$  que o método poderia incluir nos dados e da ordem de

$$\frac{0.05}{2 \cdot 250} = 0.01\%.$$

Isto quer dizer que, se o erro relativo introduzido pelo método de obtenção de dados é maior a 0.1 por mil, então não é recomendável aplicar o método diretamente, portanto, será necessário aplicar métodos de regularização. Este comportamento foi verificado experimentalmente ao executar o método com dados com erros da ordem de 1 por mil, e foi aplicado o método utilizando como ponto inicial a solução real. O método obteve um ótimo diferente ao solução com um erro não aceitável para o critério definido.

Além de parecer razoável a utilização de regularização, a decisão final deve ser tomada somente quando é conhecido ou estimado o erro introduzido pelo procedimento de obtenção de dados utilizado na aplicação real. Um dos métodos de regularização que pode ser aplicado foi apresentado brevemente no Capítulo 1, e como vimos na resolução do exemplo da barra, efetivamente ajuda a reduzir o erro da solução.

# Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um método numérico para a caracterização de propriedades mecânicas de modelos de artérias. O método foi baseado na utilização do Método dos Elementos Finitos para a resolução do problema de elasticidade linear; na formulação do problema inverso de caracterização como um problema de otimização; e na utilização de um algoritmo de ponto interior para resolver o problema de otimização formulado. Para ilustrar o desempenho do método, foram resolvidos exemplos numéricos com solução conhecida, utilizando dados sem erros, com erros de discretização e também finalmente realizando uma análise de sensibilidade teórica ao considerar erros de tipo geral nos dados.

No Capítulo 1 foram descritos conceitos da medicina necessários para compreender o problema, em particular: o funcionamento do sistema cardiovascular e as propriedades das artérias. Posteriormente foi introduzida a doença Aterosclerose, e sua importância como causa de morte em humanos. Também foi introduzido um modelo constitutivo para a modelagem do tecido arterial, sob um conjunto de hipóteses utilizadas em parte da bibliografia. Finalmente, foram apresentados conceitos da teoria matemática dos problemas inversos e a otimização, utilizados na correta análise teórica-numérica do problema. Em particular na Seção 1.4 foi apresentado o algoritmo de ponto interior de direções viáveis FDIPA. Este algoritmo foi apropriado para o método sob as hipóteses realizadas, obtendo resultados aceitáveis segundo os critérios definidos. Algumas modificações no algoritmo podem ser realizadas para melhorar o desempenho para os funcionais do tipo considerado nestes exemplos, por exemplo, incluindo técnicas de mínimos quadrados na construção dos sistemas. Também pode ser possível procurar resolver os problemas numéricos que existiram na implementação neste trabalho, obtendo assim melhoras na formulação 2 e 3, podendo talvez, aproveitar as vantagens de formulações como as do tipo SAND.

No Capítulo 2 foi formulado um problema matemático através do qual é possível realizar a caracterização de propriedades mecânicas de sólidos, e posteriormente foi proposto um método para sua resolução. Para introduzir o mesmo, foi descrito um exemplo de caracterização de módulos de *Young* de uma barra, mostrando que o problema inverso contínuo é mal-posto, enquanto que o problema discreto

é bem-posto, sendo possível achar uma cota teórica para o erro acometido na solução. Foi também visto que ao considerar uma maior quantidade de elementos, o problema fica mal condicionado, e portanto, foi descrito o processo para aplicar algumas técnicas de regularização para obter resultados com menor efeito dos erros. Posteriormente foi formulado o problema geral de caracterização para sólidos em espaços de dimensão maior a um, sendo introduzidas também formulações deste como problemas de otimização não linear. Durante esta fase do trabalho, foram considerados vários tipos de funcionais objetivo a minimizar, inicialmente utilizando funcionais de diferença entre deslocamentos, posteriormente incluindo informação sobre deformações e tensões e finalmente, logo da análise de resultados, foi sugerido normalizar pela norma dos deslocamentos dados facilitando a comparação dos diferentes funcionais. Para melhorar o desempenho do algoritmo de otimização, foi dividido o funcional pela norma do gradiente no ponto inicial.

No Capítulo 3 foi validado o método através da resolução de exemplos numéricos com solução conhecida. A partir das propriedades solução, foi resolvido o problema de elasticidade linear para gerar assim os deslocamentos dados de forma artificial. Estes deslocamentos foram gerados através da utilização do programa de elementos finitos implementado para este trabalho. Para analisar os resultados foi utilizada uma medida proposta de forma de considerar o maior erro relativo de todas as propriedades dos elementos em cada iteração, esta medida foi chamada *ErroMax*. Através da análise dos resultados numéricos foi concluído que o método é capaz de obter as propriedades mecânicas solução para os funcionais associados a deformações e tensões, não sendo assim para o funcional de deslocamentos. No caso dos exemplos 1 e 2 o algoritmo é capaz de resolver o problema em menos de 30 iterações, obtendo um erro insignificante para os três funcionais. Enquanto no exemplo 3 foi obtido *ErroMax* da ordem de 2% para os funcionais tensões e deformações. Embora de ser uma porcentagem não desprezível, foi possível caracterizar o material e portanto no caso da aplicação real pode ser um resultado que aporte informação. No caso do funcional associado aos deslocamentos o desempenho não foi satisfatório, obtendo um *ErroMax* da ordem de até 60%. Também foi realizada uma análise da variação do erro ao modificar o tamanho da malha e o módulo de *Poisson*  $\nu$ , vendo que para valores  $\nu$  próximos a 0.49 e malhas com menor número de elementos se geram resultados com maiores erros. Isto pode ser devido a que o programa foi implementado para resolver problemas utilizando elementos lineares triangulares, portanto parte dos erros gerados são devidos à pouca capacidade destes elementos de representar campos de deslocamentos quase incompressíveis. Finalmente, foi realizado o desenvolvimento teórico da análise de sensibilidade com o qual concluímos que para dados com erros maiores a 0.1 %, é necessário aplicar

técnicas de regularização, modificando o funcional como foi descrito no Capítulo 1. Testes numéricos devem ser realizados para verificar estes resultados.

## **Futuras linhas de trabalho**

Durante o processo da modelagem computacional do problema médico estudado, foram feitas várias aproximações e hipóteses, e cada uma delas representa uma futura linha de trabalho a desenvolver.

**Hipóteses de elasticidade** No modelo mecânico utilizado foram formuladas hipóteses sobre o problema de elasticidade linear, sendo as seguintes as mais importantes: quase incompressibilidade, pequenas deformações e deslocamentos, elasticidade-linear. A primeira hipótese tem mostrado ser importante já que o erro aumenta ao considerar módulos cercanos a 0.49. Novas formulações do problema, levando em conta a incompressibilidade devem ser testadas para assim evitar o fenômeno visto ao aumentar o valor de  $\nu$ . A hipótese de pequenas deformações e deslocamentos é sem dúvida a próxima modificação a realizar no modelo, a qual será feita na próxima instância de estudo. Na última hipótese também existe uma nova linha de trabalho, já foi visto que segundo a bibliografia recente, o tecido arterial é modelado de forma mais precisa utilizando modelos viscoelásticos (com análise dinâmica) do que com modelos elástico-lineares [24].

**Regularização** Como foi dito no Capítulo 3, sob certas condições a solução obtida pelo método tem erro de nível aceitável, e não é necessário realizar regularização. Entretanto, em uma aplicação real, serão utilizados mais elementos dos considerados na Seção 3.4, e os erros existentes nos dados serão superiores ao valor com um erro não aceitável segundo os critérios estabelecidos. Nesta dissertação foi colocado o caminho que deve ser seguido para realizar a regularização dos dados. A introdução da regularização no método deve ser uma das seguintes tarefas a realizar para desenvolver métodos de maior complexidade que procurem resolver problemas de maior proximidade aos da realidade.

**Formulações de otimização** Como vimos, existem várias formas de formular o problema de otimização, e os resultados apresentaram uma importante variação para diferentes funcionais utilizados, incluso para uma mesma formulação. Além disso, podem ser utilizados algoritmos apropriados para outras formulações como por exemplo o FAIPA-SAND, uma variação do FDIPA, ideado para a resolução de problemas de otimização do tipo SAND, como a formulação 3. Com estas mudanças pode ser possível aproveitar a potencialidade do algoritmo de otimização e melhorar o desempenho do método.

**Processamento de imagens** Uma das partes mais importantes do método é a obtenção dos deslocamentos da artéria a partir das imagens do IVUS. Durante este processamento são introduzidos erros, portanto, uma das perguntas abertas é se utilizando deslocamentos com erros será possível ou não realizar a caracterização. Para poder dar resposta a essa pergunta é necessário validar o método resolvendo um exemplo do tipo resolvido no Capítulo 3, utilizando, como entrada, campos de deslocamentos que logrem reproduzir os erros introduzidos pelo processamento de imagens. Existe uma vasta área de trabalho em ultra-som onde é analisada a natureza dos erros introduzidos pelo IVUS e como esses erros são transmitido aos campos de deslocamentos ao aplicar métodos como o Fluxo Ótico.

**Programa de elementos finitos** Através das conclusões sobre o modelo constitutivo, vemos que programa deve ser modificado, realizando uma implementação em Fortran ou C para poder resolver problemas de maior porte, incluir elementos com maior capacidade para representar soluções de modelos constitutivos mais gerais.

**Condições de contorno** Como foi visto no Capítulo 1, a modelagem das condições de contorno reais às quais se encontra submetida a artéria, está em suas etapas de desenvolvimento iniciais. Existe muito trabalho a ser desenvolvido nesta área, como propor novas possíveis condições de contorno que junto com a opinião dos médicos possam modelar de melhor forma o comportamento real das artérias no espaço tridimensional. Como vimos, este tipo de análises entre engenheiros e médicos é recente, portanto, com certeza existirá um gram avanço neste tipo de temas no futuro.

**Tensões residuais** Como foi dito, na bibliografia podemos ver que em artérias humanas existem tensões residuais não desprezíveis, portanto esta deve ser outra característica a considerar em futuros modelos.

# Referências Bibliográficas

- [1] SARMENTO-LEITE, R., KREPSKY, A. M., GOTTSCHALL, C. A. M. “Infarto agudo do Miocárdio. Um século de historia.” *Arquivos Brasileiros de Cardiologia*, v. 77, n. 6, pp. 593–601, 2001.
- [2] COLLINS, J. *Patología Estructural y Funcional de Robbins*. 6 ed. Mexico, McGraw-Hill Interamericana, 2000.
- [3] DE KORTE, C. L., PASTERKAMP, G., VAN DER STEEN, A. F., et al. “Characterization of plaque components with intravascular ultrasound elastography in human femoral and coronary arteries in vitro”, *Circulation*, v. 102, pp. 617–623, 2000.
- [4] CÉSPEDES, I., OPHIR, J., PONNEKANTI, H., et al. “Elastography: elasticity imaging using ultrasound with application to muscle and breast in vivo”, *Ultrasonic Imaging*, v. 15, pp. 73–88, 1993.
- [5] KALLEL, F., BERTRAND, M. “Tissue Elasticity Reconstruction Using Linear Perturbation Method”, *IEEE Transactions on medical imaging*, v. 15, n. 3, pp. 299–313, 6 1996.
- [6] CHANDRAN, K., MUN, J., CHOI, K., et al. “A method fo in-vivo analysis for regional arterial wall material property alterations with arterosclerosis: preliminary results”, *Medical Engineering and Physics*, v. 25, pp. 289–298, 2003.
- [7] HERSKOVITS, J. “Feasible direction interior-point technique for nonlinear optimization”, *Journal of Optimization Theory and Applications*, v. 99, n. 1, pp. 121–146, 10 1998.
- [8] HERSKOVITS, J., MAPPA, P., GOULART, E., et al. “Mathematical programming models and algorithms for engineering design optimization”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 194, n. 30–33, pp. 3244–3268, 2005.

- [9] MAZZA, E., NAVA, A., BAUER, M., et al. *Mechanical properties of the human uterine cervix: An in vivo study*. Relatório técnico, Institute for Structural Analysis, Graz University of Technology, 2005.
- [10] CINGOLANI, H. E., HOUSSAY, A. B. *Fisiología Médica de Houssay*. 7 ed. Argentina, El Ateneo, 2010.
- [11] NICHOLS, W. W., O’ROURKE, M. F. *McDonald’s Blood Flow in Arteries: Theoretical, experimental and clinical principles*. 4 ed. London, Arnold, 1998.
- [12] RIBEIRO SALES, F. J. *Análise e quantificação tridimensional em imagens de ultra-som intravascular*. Tese de Doutorado, Universidad de Sao Paulo, 2009.
- [13] “Guías colombianas de cardiología síndrome coronario agudo sin elevación del ST”. 12 2008. Revista colombiana de cardiología.
- [14] “Primer Consenso Nacional de Aterosclerosis.” 2004. Sociedad Uruguaya de Aterosclerosis, Sociedad Uruguaya de Cardiología.
- [15] KASPER, D. L., BRAUNWALD, E., FAUCI, A. S., et al. *Principios de Medicina Interna de Harrison*. 16 ed. Mexico, McGraw-Hill, 2006.
- [16] NELSON, T. R., PRETORIUS, D. H. “Three-dimensional ultrasound imaging”, *Ultrasound in Medicine and Biology*, v. 24, n. 9, pp. 1243–1270, 12 1998.
- [17] OPHIR, J., CÉSPEDES, I., PONNEKANTI, H., et al. “Elastography: a quantitative method for imaging the elasticity of biological tissues”, *Ultrasonic Imaging*, v. 13, pp. 111–134, 1991.
- [18] MAZZA, E., NAVA, A., BAUER, M., et al. *In vivo experiments to characterize the mechanical behaviour of the human uterine cervix*. Relatório técnico, Institute for Structural Analysis, Graz University of Technology, 2005.
- [19] OPHIR, J., KALLEL, F., VARGHESE, T., et al. “Imagerie acoustique et optique des milieux biologiques optical and acoustical imaging of biological media”, *Media*, v. 2147, n. 1, pp. 1193–1212, 2001.
- [20] HONDA, Y., FITZGERALD, P. J. “Frontiers in Intravascular Imaging Technologies”, *Circulation*, v. 117, pp. 2024–2037, 2008.

- [21] YUN LIANG, H. Z., GEHRIG, T., FRIEDMAN, M. “Estimation of coronary arterial wall strain in clinical IVUS images”. In: *Biomedical Imaging: From Nano to Macro, 2007. ISBI 2007. 4th IEEE International Symposium on*, pp. 884–887, 5 2007.
- [22] VERESS, A. I., WEISS, J. A., GULLBERG, G. T., et al. “Strain Measurement in Coronary Arteries Using Intravascular Ultrasound and Deformable Images”, *Journal of Biomechanical Engineering*, v. 124, n. 6, pp. 734–741, 2002.
- [23] HORN, B. K., SHUNCK, B. G. “Determining Optical Flow”, *Artificial Intelligence*, v. 17, n. 30-33, pp. 185–203, 1981.
- [24] VALDEZ-JASSO, D., HAIDER, M. A., BANKS, H. T., et al. “Analysis of Viscoelastic Wall Properties in Ovine Arteries”, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 56, n. 2, pp. 210–219, 2 1996.
- [25] VAN HOUTEN, E. E. W., DOYLEY, M. M., KENNEDY, F. E., et al. “A Three-Parameter Mechanical Property Reconstruction Method for MR-Based Elastic Property Imaging”, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, v. 24, n. 3, pp. 311–324, 3 2005.
- [26] HOLZAPFEL, G. A., GASSER, T. C., OGDEN, R. W. “A new constitutive framework for arterial wall mechanics and a comparative study of material models”, *Journal of Elasticity*, v. 61, n. 1, pp. 1–48, 2000.
- [27] HUMPHREY, J. D. *Cardiovascular Solid Mechanics: Cells, Tissues, and Organs*. 1 ed. New York, Springer-Verlag, 2002.
- [28] CHEN, E. J., NOVAKOFSKI, J., JENKINS, W. K., et al. “Young’s modulus measurements of soft tissues with application to elasticity imaging”, *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency control*, v. 43, n. 1, pp. 191–194, 1 1996.
- [29] FORMAGGIA, L., GERBEAU, J., NOBILE, F., et al. “On the Coupling of 3D and 1D Navier-Stokes equations for Flow Problems in Compliant Vessels”, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, v. 191, n. 6–7, pp. 561–582, 2001.
- [30] MOIREAU, P., NAN, X., ASTORINO, M., et al. “External tissue support and fluid-structure simulation in blood flows”, *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, v. 11, n. 1, pp. 1–18, 2012. doi:10.1007/s10237-011-0289-z.

- [31] GURTIN, M. E. *An introduction to continuum mechanics*. San Diego, Academic Press, 1981. ISBN: 0-12-309750-9.
- [32] VOGEL, C. R. *Computational Methods for Inverse Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1 2002.
- [33] ASTER, R., BORCHERS, B., THURBER, C. *Parameter Estimation and Inverse Problems (International Geophysics)*. Academic Press, 1 2005.
- [34] PELUFFO, A., EZZATTI, P., CANELAS, A. “Técnicas de regularización para análisis de estructuras viscoelásticas usando un método de funciones de influencia”, *Mecánica Computacional*, v. XXIX, pp. 4431–4444, 11 2010.
- [35] IZMAILOV, A., SOLODOV, M. *Otimização - volume 2, Métodos Computacionais*. Rio de Janeiro, IMPA, 2007.
- [36] LUENBERGER, D. G. *Linear and Nonlinear Programming*. 2 ed. California, Addison-Wesley, 1984.
- [37] CANELAS, A., ROCHE, J. R., HERSKOVITS, J. “Inductor shape optimization for electromagnetic casting”, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, v. 39, n. 6, pp. 589–606, 2009.
- [38] QUARTERONI, A., SACCO, R., SALERI, F. *Numerical Mathematics*. Springer, 2000. ISBN: 0-387-98959-5.
- [39] HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method*. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall, 1987.
- [40] QUARTERONI, A., SALERI, F. *Scientific Computing with Matlab and Octave*. 2nd ed. Milano, Springer, 2006. ISBN: 3-540-32612-X.
- [41] COSKUN, A., YEGHIAZARIANS, Y., KINLAY, S., et al. “Reproducibility of coronary lumen, plaque, and vessel wall reconstruction and of endothelial shear stress measurements in vivo in humans”, *Catheterization and Cardiovascular Interventions*, v. 60, n. 1, pp. 67–78, 4 2003.
- [42] TIMOSHENKO, S. *Résistance des Matériaux*. 1 ed. New Jersey, D. Van Nostrand, 1941.
- [43] TIMOSHENKO, S., GOODIER, J. *Theory of Elasticity*. 2 ed. New York, McGraw-Hill, 1951.

# Apêndice A

## Validação do programa de elementos finitos

Neste Capítulo validaremos o programa de elementos finitos desenvolvido, através da resolução de três problemas da mecânica dos sólidos, com solução analítica conhecida disponível na bibliografia [42, 43]. Compararemos os resultados obtidos com as soluções teóricas, determinando finalmente se o programa proposto é apropriado para a resolução do tipo dos problemas proposto nesta dissertação. Brevemente enumeramos os problemas a ser resolvidos:

- Problema 1: chapa quadrada com tração no contorno superior e apoios deslizantes no contorno inferior.
- Problema 2: viga homogênea engastada com carga pontual no extremo livre.
- Problema 3: viga heterogênea engastada com carga pontual no extremo livre

Nos problemas 1 e 2 consideraremos como critério para aceitar os resultados, a comparação dos deslocamentos e a análise do erro do valor de energia de deformação numérico com o valor teórico.

$$U_{teo} = \int_{\Omega} \sigma \cdot \varepsilon d\Omega$$

escrita em componentes, considerando problemas de estado plano de tensões ou deformações, pode ser simplificada a:

$$U_{teo} = \int_{\Omega} \sigma_x \varepsilon_x d\Omega + \int_{\Omega} \sigma_y \varepsilon_y d\Omega + \int_{\Omega} \sigma_{xy} \varepsilon_{xy} d\Omega$$

contra a energia de deformação obtida pelo método dos elementos finitos

$$U_{MEF} = \sum_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\Omega^e} U^e \mathbf{B}^e \mathbf{C} \mathbf{B}^e U^e d\Omega = f^t \mathbf{U}$$

**Problema A.1** (Chapa). Neste exemplo consideramos uma chapa como vemos na figura A.1. Submetida a um estado plano de tensões.

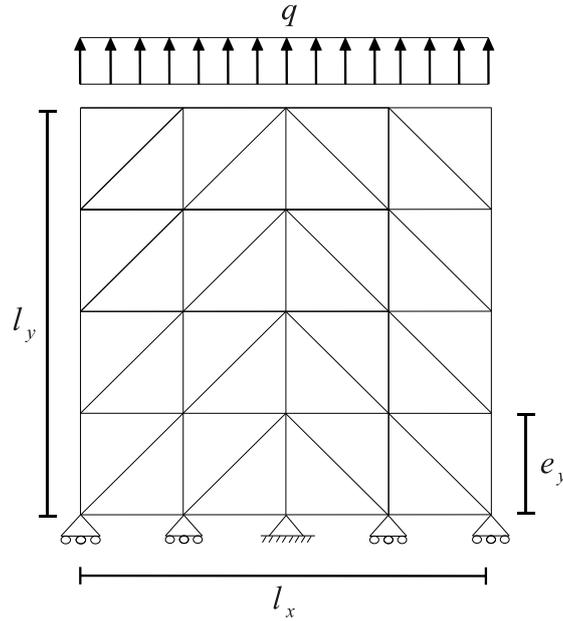


Figura A.1: Esquema do Problema A.1

Consideraremos que:

- $l_x = l_y = 1m$  e que a espessura é unitária  $1m$ .
- O módulo de elasticidade será  $E = 100,000 \text{ N/m}^2 = 100 \text{ kPa}$ .
- O valor do carregamento  $q = 10,000 \text{ N/m}^2 = 10 \text{ kPa}$

Calculamos a energia de deformação teórica. A partir do equilíbrio obtemos que

$$\sigma_y = q \quad \sigma_x = \sigma_{xy} = 0,$$

e aplicando a equação constitutiva obtemos as deformações

$$\epsilon_y = \frac{q}{E} \quad \epsilon_x = \epsilon_z = \frac{-\nu q}{E} \quad \epsilon_{xy} = 0$$

obtendo o valor analítico de energia:

$$\mathcal{U}_{\text{teo}} = \int_{\Omega} \frac{q^2}{E} d\Omega = \frac{q^2}{E} l_x l_y l_z = 1 \text{ N m}$$

## Resultados

Na Figura A.2 é apresentada a malha deformada, e na Figura A.3 vemos a validação do campo de deslocamentos  $u_y$  no conjunto de nós da linha  $x = 0$ .

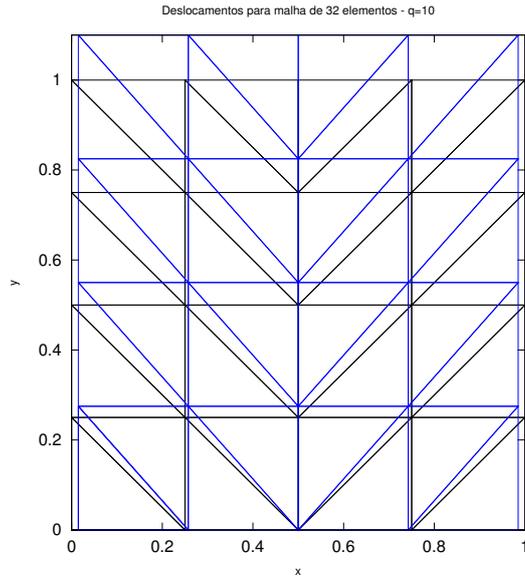


Figura A.2: Malha deformada por tensão  $q = 10$  kPa.

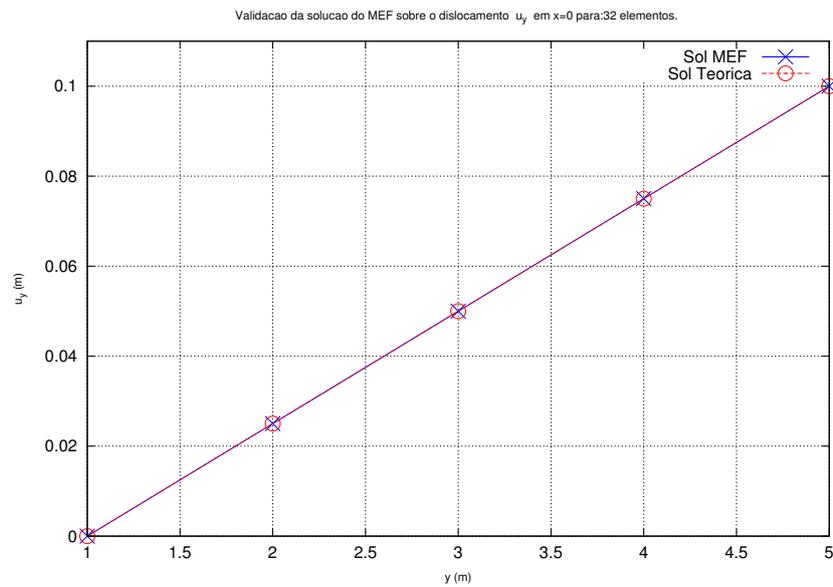


Figura A.3: Malha deformada por tensão  $q = 50$ .

A energia de deformação teórica é 1 e a obtida pelo programa do MEF também, e o valor de  $\varepsilon_y$  também é igual ao valor exato 0.1. Concluímos portanto que o programa resolve de forma exata o problema 1.

**Problema A.2.** Neste segundo exemplo consideramos uma viga esbelta engastada no extremo esquerdo e livre no direito com uma carga  $P$ , como vemos na Figura A.4.

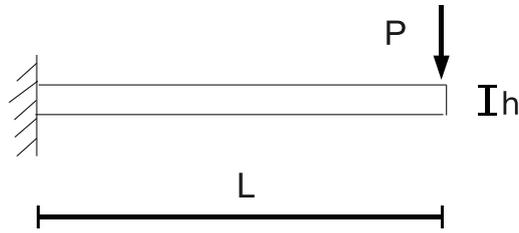


Figura A.4: Esquema do Problema A.2

Para resolver este problema consideraremos um estado plano de tensões e será comparado com a solução analítica do problema da viga com largura unitária ( $b = 1m$ ). Para os outros valores consideraremos:  $L = 10m$ ,  $h = 1m$ ,  $P = 1N$  e  $E = 200,000N/m^2$ , portanto a inércia de segunda ordem será  $I = 1/12m^4$ .

Consideraremos também as hipóteses de teoria de vigas, onde seções transversais permanecem planas e perpendiculares ao eixo da deformada. Considerando o critério normal para sinal do momento  $M$ , onde do lado direito do ponto o momento interno é positivo se e anti-horário. Também lembrando que trabalhamos com pequenos deslocamentos, então é válida a equação de *Navier* para vigas:

$$\frac{d^2 u_y(x)}{dx^2} = \frac{M}{EI}(x)$$

As propriedades  $I$  e  $E$  são constantes em toda a viga. Utilizando que o momento é dado pela equação  $M(x) = P(x - L)$ , obtemos a expressão para o deslocamento vertical em qualquer coordenada  $x$ :

$$u_y(x) = u_y(0) + \frac{du_y}{dx}(0) + \int_0^x \int_0^x \frac{P(\xi - L)}{EI} d\xi dx$$

Já que nosso problema é um engastamento, aplicamos as condições de contorno

$$u_y(0) + \frac{du_y}{dx}(0)$$

e calculando a integral obtemos a expressão do deslocamento solução

$$u_y(x) = \frac{P x^2}{6 EI}(x - 3L).$$

## Resultados

Na Figura A.5 vemos o diagrama de tensões  $\sigma_x$  para uma malha de 1280 elementos. Na Figura A.6 vemos o esquema da deformada da viga, a linha no meio

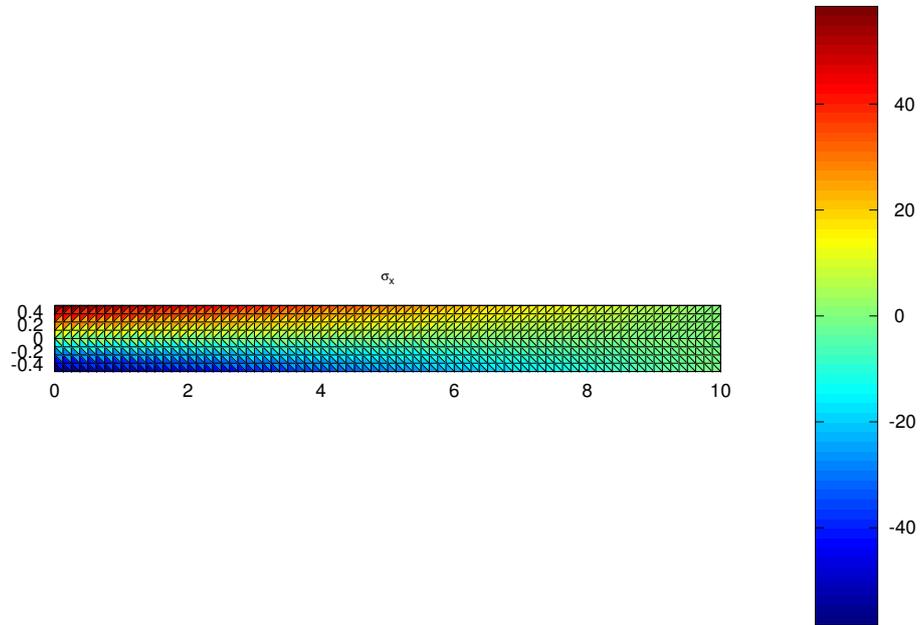


Figura A.5: Diagrama de  $\sigma_x$  do Problema A.2.

formada por círculos é a solução analítica do problema, entretanto que os elementos triangulares amostram a deformada da viga segundo a solução de elementos finitos. Na Figura A.7 podemos ver o gráfico do erro relativo da energia de deformação

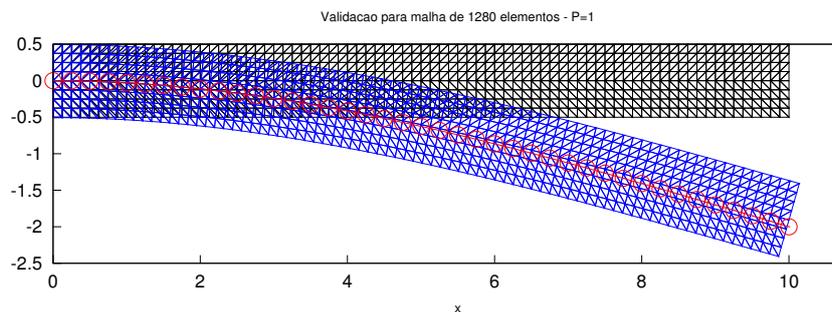


Figura A.6: Deformada de viga do Problema A.2.

elástica para diferentes tamanhos dos elementos da malha. Vemos que é quase linear e que efetivamente ao utilizar mais elementos o erro diminui, portanto o programa funciona corretamente.

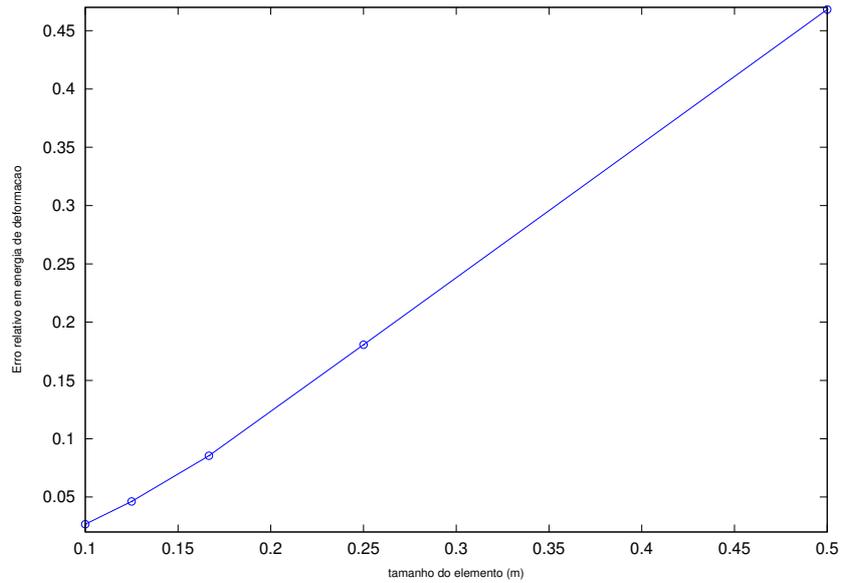


Figura A.7: Gráfico de erro relativo de energia de deformação do Problema A.2.

**Problema A.3** (Viga heterogênea). Neste exemplo consideramos a mesma viga do problema 2 e a mesma carga  $P$ , mais consideramos que o módulo de elasticidade  $E$  é uniforme para todos os pontos  $x < a$  igual a  $E_1$  e desde  $a$  a  $L$  o valor será  $E_2 = \alpha E_1$ . Com  $\alpha = 5$  e  $a = L/2$ .

A viga é formada por um material com um módulo de elasticidade fixo na primeira metade do comprimento da viga (de esquerda a direita na figura A.8), e um valor cinco vezes inferior na outra metade, portanto devemos ver uma deformação maior na segunda metade e valores de tensão inferiores.

Na Figura A.8 vemos o deslocamento da malha de elementos finitos utilizada em azul e uma linha vermelha com círculos no centro representando o deslocamento da linha neutra da solução analítica. Na Figura A.9 vemos o diagrama de tensões

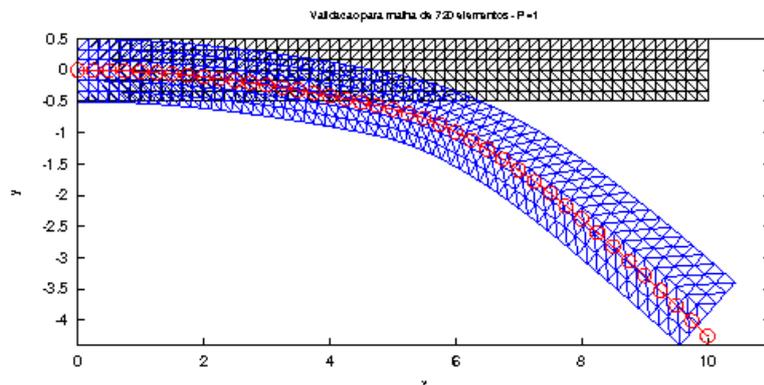


Figura A.8: Deslocamentos do Problema A.3.

$\sigma_x$  para o exemplo resolvido. Vemos que o resultado verifica os valores esperados

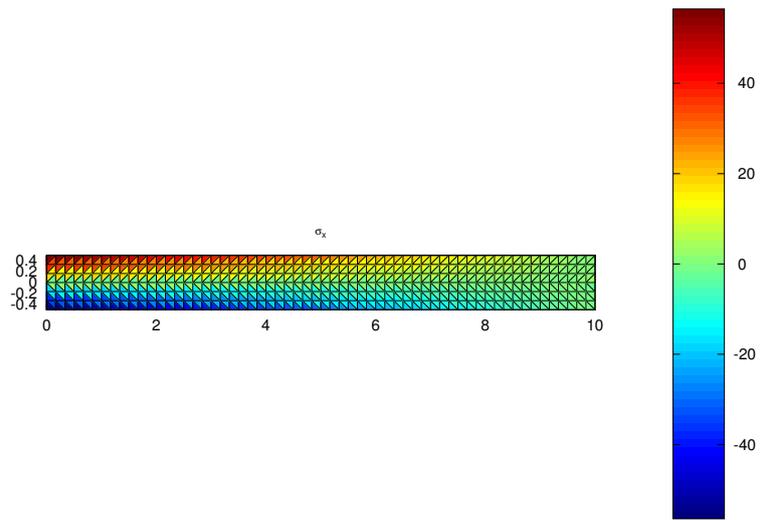


Figura A.9: Diagrama  $\sigma_x$  Problema A.3.

inicialmente e o programa é portanto apropriado para resolver problemas de estado plano de deformações o tensões.

# Apêndice B

## Mapeamentos de Erros

Neste Capítulo serão apresentadas figuras com maior detalhe sobre a evolução dos mapeamentos dos erros obtidos para os três primeiros exemplos resolvidos no Capítulo 3. Já que os funcionais  $\mathcal{F}_\beta$  produziram os melhores resultados, serão os que amostraremos aqui. Na Figura B.1 vemos os mapeamentos dos erros obtidos ao resolver o exemplo 1 utilizando o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  para  $\beta = 0$ . Na Figura B.2 vemos os mapeamentos dos erros obtidos ao resolver o exemplo 2 utilizando o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  com  $\beta = 0$ . Na Figura B.3 vemos os mapeamentos dos erros obtidos ao resolver o exemplo 3 utilizando o funcional  $\mathcal{F}_\beta$  com  $\beta = 0$ .

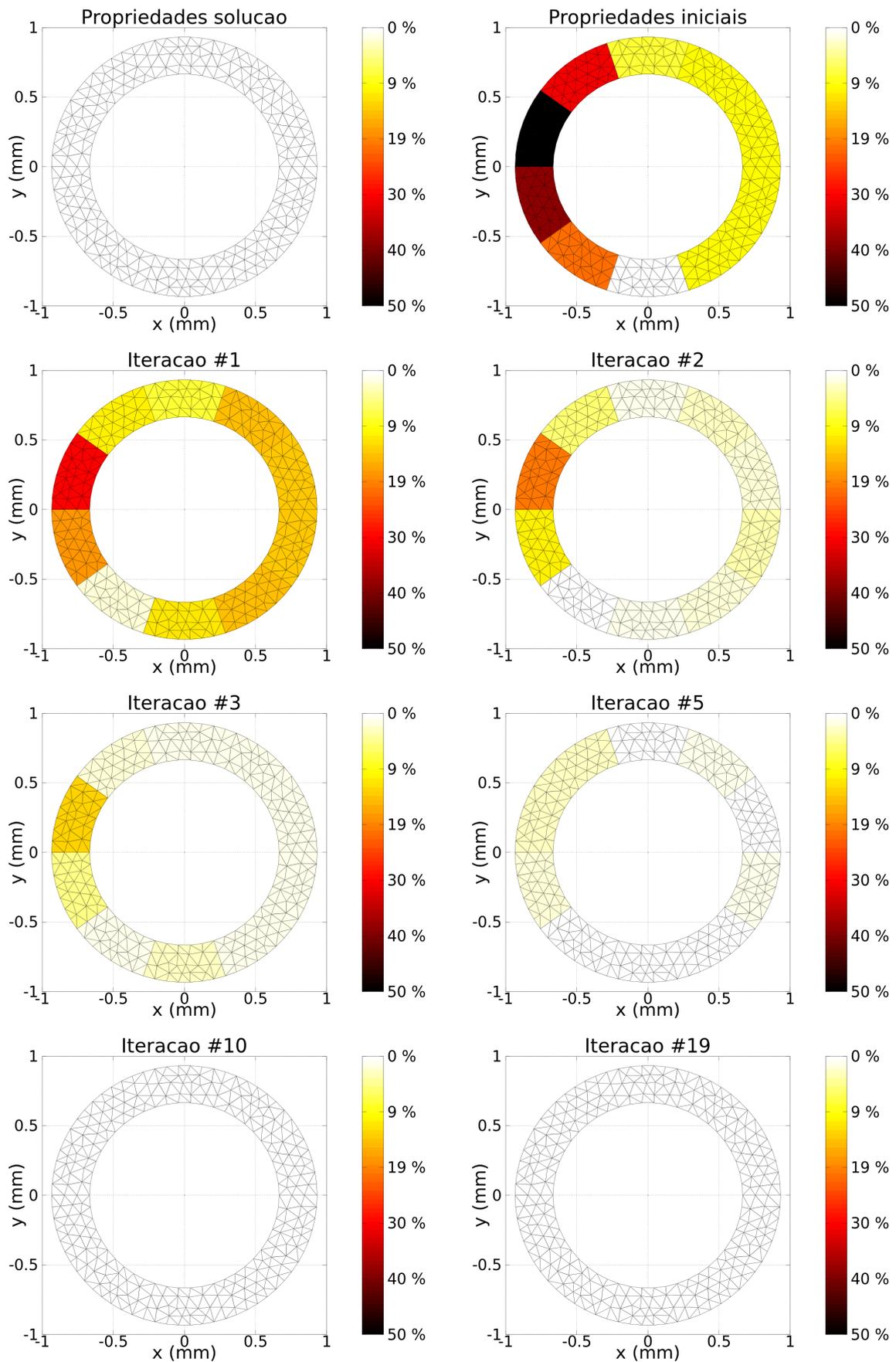


Figura B.1: Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 1

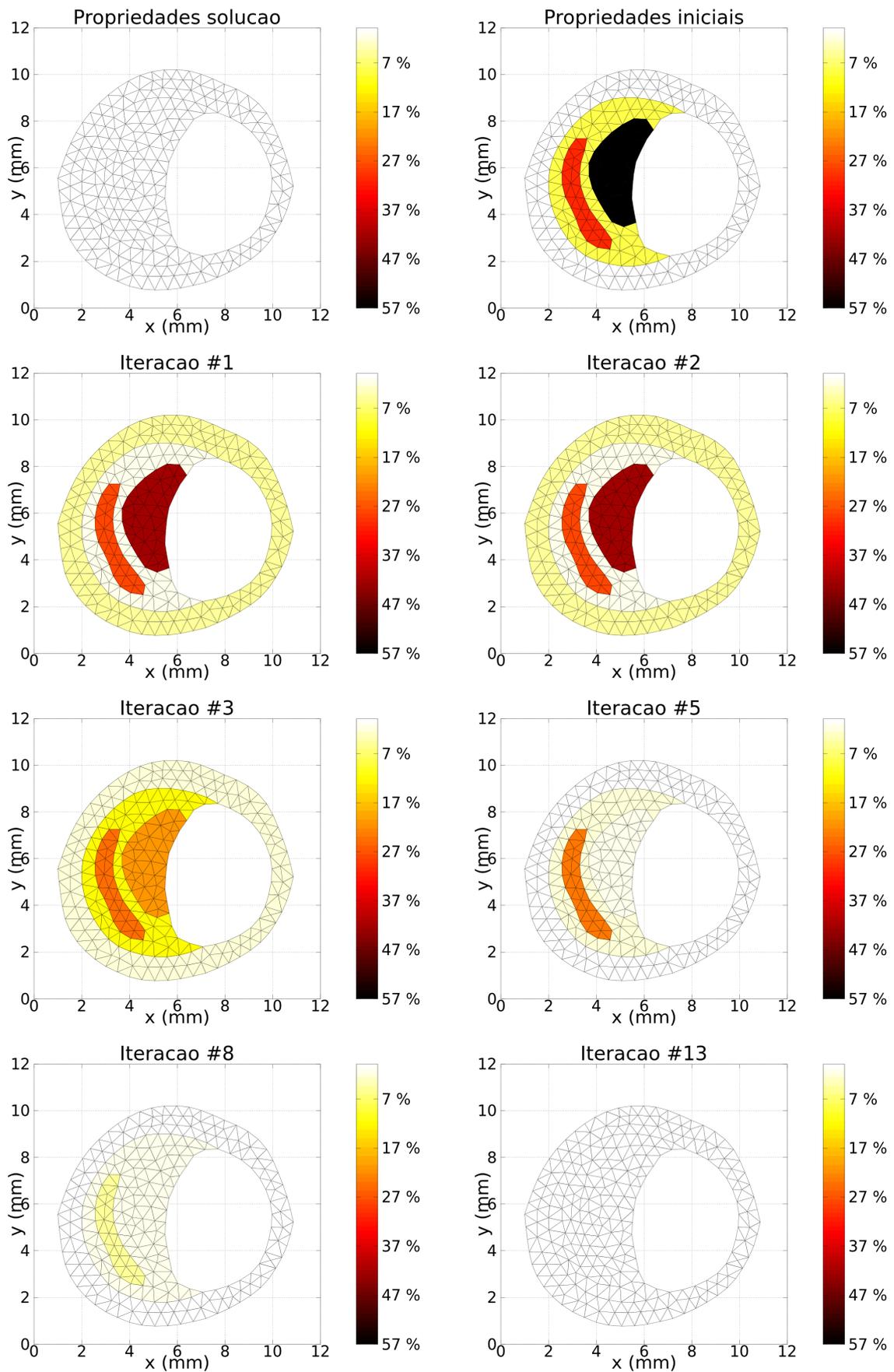


Figura B.2: Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 2

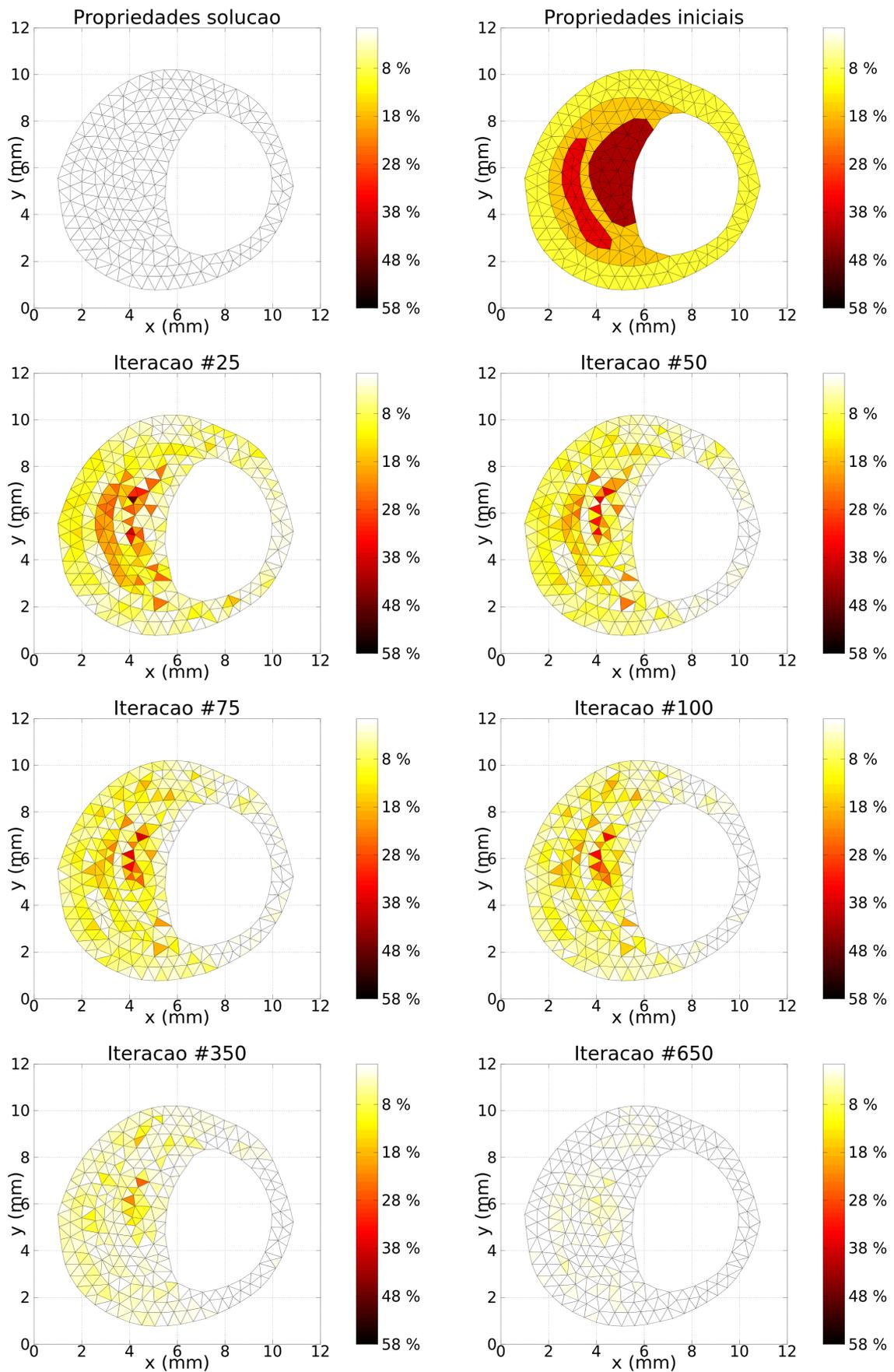


Figura B.3: Evolução do mapeamento de erros - Exemplo 3