

Paulo Miguel Pereira de Brito



*Métodos Numéricos Adaptativos
para a Resolução de Modelos
Multidimensionais em
Engenharia Química*

Departamento de Engenharia Química Faculdade de Ciências e Tecnologia Universidade de Coimbra

COIMBRA

2010

*Métodos Numéricos Adaptativos para a
Resolução de Modelos Multidimensionais
em Engenharia Química*

Paulo Miguel Pereira de Brito

Tese submetida à Faculdade de Ciências e Tecnologia da
Universidade de Coimbra para Doutoramento em Engenharia
Química, especialidade de Processos Químicos

Trabalho realizado sob a orientação do Prof. Doutor António A.T.G. Portugal

Trabalho inicialmente apoiado pela
Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT)
através da Bolsa de Doutoramento
PRAXIS XXI/BD/17137/98
substituída posteriormente por
SFRH/BD/1070/2000



COIMBRA

Setembro de 2010

The saddest aspect of life right now is that science gathers knowledge
faster than society gathers wisdom.

Isaac Asimov

À Lina e à Maria

Scientists investigate that which already is; engineers create that
which has never been.

Albert Einstein

Adaptability is not imitation. It means power of resistance and
assimilation.

Mahatma Gandhi

Agradecimentos

Pela sua importante contribuição no desenrolar do presente trabalho gostaria de agradecer ao Prof. Dr. António A.T.G. Portugal, meu supervisor, pela orientação atenta e interessada que soube manter, e o constante e solidário incentivo que constantemente me propiciou.

Gostaria de estender os meus agradecimentos ao Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Ciência e Tecnologia da Universidade de Coimbra, pelas condições de trabalho proporcionadas, à Fundação para a Ciência e a Tecnologia pelo suporte financeiro concedido, e à minha entidade empregadora, o Instituto Politécnico de Bragança, pelo apoio atribuído através do programa PROTEC.

Agradeço igualmente a todos os meus amigos e colegas no Departamento de Engenharia Química, que me acompanharam neste longo e sinuoso percurso, e a todos aqueles que, de algum modo, contribuíram para a realização deste trabalho.

Finalmente, agradeço à minha esposa Lina e à minha filha Maria pelo apoio e compreensão que sempre me prestaram, e aos meus pais por me terem feito compreender a importância do conhecimento e da qualificação académica.

RESUMO

O objectivo do trabalho de investigação consiste no desenvolvimento e teste de métodos numéricos adaptativos, aplicáveis na resolução eficiente de modelos matemáticos diferenciais evolutivos de dimensão arbitrária, que exibam soluções com gradientes elevados localizados no tempo e no espaço, e sejam relevantes no âmbito específico da modelação de processos químicos. Para tal, idealizam-se códigos computacionais para a aplicação e teste dos algoritmos numéricos desenvolvidos. A opção de programar os algoritmos em linguagem FORTRAN deve-se principalmente ao facto desta linguagem ser extremamente adequada ao desenvolvimento de ciclos complexos de operações lógicas e/ou algébricas, característicos deste tipo de algoritmos matemáticos. Por outro lado, o recurso à versão específica FORTRAN 77 deve-se ao facto desta se revelar suficiente para uma demonstração genérica da capacidade de execução dos programas em condições triviais, definidas num ambiente de processamento referente a um laptop comercial convencional, sem grandes preocupações de optimização intensiva do esforço computacional.

De modo a testar a robustez e eficiência dos métodos, estes foram sujeitos de forma sistemática a modelos de complexidade crescente, desde exercícios de geração de malha, até à integração de problemas de equações diferenciais parciais (PDE's) escalares e sistemas de equações diferenciais (apenas em casos unidimensionais). Os resultados disponibilizados permitem uma confirmação genérica da utilidade dos métodos para uma grande variedade de problemas que abrangem diversas áreas importantes da modelação de processos químicos como: combustão, adsorção, reacção química, mecânica de fluidos, etc; normalmente caracterizados por exibirem soluções com particularidades extremas.

Os métodos de geração de malha apresentados são baseados em estratégias de colocação nodal controladas pela detecção de oscilações ou variações bruscas em aproximações numéricas avaliadas por fórmulas de diferenças finitas, que possibilitam a especificação de dois tipos de critérios denominados por C1 e C2, respectivamente. Estes denotam uma aptidão geral muito satisfatória para a identificação, localização e acompanhamento de frentes abruptas ou descontinuidades nos perfis de solução. Simultaneamente, os algoritmos permitem o reconhecimento das regiões de menor actividade da solução onde a malha mantém a sua esparsidade apenas limitada pela definição da malha base estabelecida por defeito idealizada como garante de um suporte mínimo para a solução numérica. A escolha de aproximações de diferenças finitas para a definição de critérios de refinamento de malha deve-se exactamente a uma tentativa de exploração das suas reconhecidas limitações, ou seja da sua tendência para a introdução de anomalias sem significado físico nas soluções numéricas. Deste modo, a pesquisa desse tipo de anomalias possibilita uma estratégia simples de detecção de regiões de maior actividade da solução e, conseqüentemente, seleccionáveis para refinamento de malhas inicialmente estabelecidas com um nível de resolução mínimo.

A estratégia de integração numérica baseada num procedimento MOL (Method Of Lines) recorre a esquemas de estimação das derivadas espaciais de diferenças finitas (FD) ou de alta resolução (HRS) que geram sistemas de equações diferenciais

ordinárias (ODE's) resolvidos por integradores ODE na direcção temporal. Opta-se por testar a performance das aproximações FD nos procedimentos de integração MOL de modo a demonstrar a potencialidade de uma estratégia conceptualmente mais simples e directa na abordagem a exemplos problemáticos. Esta análise é complementada com o estudo de uma estratégia de discretização HRS claramente direccionada para lidar com as derivadas espaciais de primeira ordem que genericamente definem a natureza hiperbólica dos problemas diferenciais. Os resultados obtidos são geralmente satisfatórios, verificando-se melhores desempenhos dos métodos para diferenças FD descentradas que acompanhem o movimento das ondas em problemas de carácter parabólicos e procedimentos HRS no caso de exemplos essencialmente hiperbólicos. Os algoritmos revelam desempenhos aceitáveis, quer em relação a exactidão dos resultados, como do esforço computacional requerido. Assim, mostram-se bastante eficazes para uma larga gama de equações hiperbólicas e parabólicas e para problemas com condições fronteira de diversos tipos, quer estacionárias como evolutivas.

A performance dos critérios de colocação do tipo C1 e C2 é relativamente equivalente para a generalidade dos exemplos testados. No entanto, verifica-se uma tendência para uma maior sensibilidade do critério C1 que necessita tipicamente de condições mais exigentes referentes a uma escala de tolerância mais reduzida em alguns modelos, para além de uma notória propensão para ao desenvolvimento de perturbações nos perfis de solução do que o critério C2 que se revela comparativamente mais estável. Por outro lado, o critério do tipo C1 ajusta-se satisfatoriamente à integração de problemas bidimensionais.

O passo crítico dos algoritmos de integração numérica adaptativa consiste na operação de interpolação que executa a passagem da solução suportada numa malha gerada no passo temporal anterior para a solução definida sobre a malha seguinte correspondente ao passo actual. Os passos interpolativos são inevitáveis neste tipo de estratégias já que se relacionam intrinsecamente com a natureza estática do processo adaptativo seleccionado. Portanto, a qualidade do procedimento de interpolação revela-se essencial ao sucesso do método adaptativo de integração, principalmente no caso de problemas bidimensionais, onde o número de nodos potencialmente activáveis em cada passo é consideravelmente superior aos problemas unidimensionais. Esta questão demonstra-se especialmente premente em exemplos de carácter parabólico, ou seja predominantemente difusivos em que se constata que a sensibilidade do problema numérico a erros de interpolação relativamente reduzidos é muito superior, promovendo a introdução de fenómenos de instabilidade numérica nos perfis de solução. Assim, conclui-se que os modelos teoricamente menos problemáticos colocam maiores desafios de desenvolvimento de instabilidade e perturbações numéricas do que os problemas correspondentes de natureza predominantemente hiperbólica, onde a aplicação dos algoritmos adaptativos denota uma visível maior eficácia e robustez.

ABSTRACT

The general objective of the present research work relates to the development and implementation of numerical adaptive methods for the effective solution of differential non-stationary mathematical models, which exhibit steep gradient solutions localized in space and time. The problems of interest should have recognized relevance in the particular field of chemical processes modelation. For that purpose, computational codes are constructed for the execution and test of the developed numerical algorithms. The choice of programming the codes in FORTRAN is due to the fact of this language being especially well adapted to the codification of complex loops of logical and/or algebraic operations, which represent the core of this type of mathematical algorithms. On the other hand, the FORTRAN 77 version reveals itself sufficient for a clear demonstration of the implementation ability of the codes under trivial conditions (defined in a processing platform available in a conventional commercial laptop), without any concerns regarding a intensive optimization of computation effort.

In order to test the robustness and effectiveness of the methods, these are systematically subjected to dealing with problems of increasing complexity, from simple exercises of grid generation to the resolution of scalar partial differential equations (PDE's) and systems of PDE's (solely for one-dimensional examples). The available results ensure a generic confirmation of the methods usefulness for a wide variety of problems covering important fields in chemical process modelation and simulation like: combustion, adsorption, chemical reaction, fluid mechanics, etc; usually characterized by developing solutions with extreme features.

The grid generation methods presented in this work are based in nodal collocation techniques controlled by numerical oscillations and steep variations tracking on finite differences (FD) derivative approximations, which define two classes of criteria, named C1 and C2, respectively. These criteria reveal notorious ability to identify, locate and follow steep fronts and discontinuities in the numerical solutions profiles. Furthermore, the algorithms allow the recognition of lower activity regions where the grid maintains its sparsity, only limited by the definition of a default resolution lower threshold, which defines the minimum support to the solution. The choice of including FD approximations in the grid refining procedures is explained as an attempt of exploring its recognized limitations, namely its propensity to introduce non-physical perturbations in the numerical solution. Therefore, the detection of these anomalies allows the development of a simple scheme for the higher activity regions, selected for increasing level refinement operations.

The numerical resolution strategy is based in a MOL (Method Of Lines) procedure that uses FD or high resolution (HRS) spatial derivatives estimation schemes for the generation of ordinary differential equations (ODE's) systems, solved with standard ODE integrators in the time direction. The option of testing the FD approximations performance in the MOL integration process is due to the fact that the FD strategy represents a conceptually simpler and direct approach to difficult problems. This analysis is complemented with the study of the HRS discretizations, clearly directed for dealing with first order spatial derivatives (representing advection phenomena) which

generally define the hyperbolic nature of the problem. These algorithms provide good results, with more successful performances for biased FD formulas that tag along the movement of the waves in parabolic examples, and HRS procedures for mainly hyperbolic cases. These procedures show acceptable result precision and require reasonable computing effort. Thus, they seem rather effective for a large range of hyperbolic and parabolic models, and several types of boundary conditions.

The performance of the C1 and C2 type collocation criteria is relatively equivalent for most tested examples. However, the criterion C1 reveals a noticeable tendency to greater sensitivity towards the solution conditions, as it typically needs more demanding settings referring to reduced tolerance scales in some examples and a notorious propensity to the development of non-physical anomalies in the solutions profiles, comparing to the relatively more stable C2 criterion. On the other hand, the C1 type criterion is rather successful in dealing with two-dimensional problems.

The critical step in the adaptive numerical integration algorithms refers to the interpolation operations that implements the translation of the solution supported on a grid generated at the previous time step to the novel solution defined on actual step grid. The interpolative operations are inevitable in the context of this type of strategies as they are intrinsically related with the static nature of the adaptive nature of the selected adaptive process. Therefore, the quality of the interpolation procedure is rather essential to the success of the integration method, mainly for two-dimensional problems where the number of potentially active nodes at each step is far superior to correspondent one-dimensional examples. This matter is especially important for parabolic mainly diffusive problems, which reveal themselves rather sensitive to otherwise reasonable interpolative errors, promoting the development of numerical instability in the solution profiles. It is concluded that theoretically less problematic models pose greater challenges than predominantly hyperbolic problems, where the application of the adaptive algorithms shows visible robustness and effectiveness.

ÍNDICE

0.	INTRODUÇÃO	1
1.	MODELAÇÃO MATEMÁTICA E ANÁLISE NUMÉRICA	5
1.1	MÉTODO CIENTÍFICO	5
1.2	MODELO	10
1.3	MODELAÇÃO	14
1.4	MODELO MATEMÁTICO	17
1.4.1	ELEMENTOS CONSTITUTIVOS DE UM MODELO MATEMÁTICO	18
1.4.2	TIPOS DE MODELOS MATEMÁTICOS	18
1.4.3	MODELAÇÃO MATEMÁTICA DE PROCESSOS QUÍMICOS	20
1.5	MODELO MATEMÁTICO DIFERENCIAL	24
1.6	EQUAÇÃO DIFERENCIAL	31
1.7	EQUAÇÃO DIFERENCIAL PARCIAL (PDE)	31
1.7.1	CARACTERÍSTICAS BÁSICAS DE UMA PDE	32
1.7.2	CLASSIFICAÇÃO DE PDE'S	34
1.7.3	TERMOS CONSTITUTIVOS DE UMA PDE	39
1.8	ANÁLISE NUMÉRICA	42
1.8.1	INTRODUÇÃO HISTÓRICA	42
1.8.2	MÉTODOS NUMÉRICOS	43
1.8.3	CARACTERIZAÇÃO DE MÉTODOS NUMÉRICOS	47
1.8.4	RESOLUÇÃO DE PDE'S	49
2.	ESTRATÉGIAS DE ADAPTAÇÃO	55
2.1	MALHAS	55
2.2	MÉTODOS DE RESOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS (PDE'S)	57
2.2.1	INTRODUÇÃO	57
2.2.2	MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS (FINITE DIFFERENCES METHOD – FDM)	63
2.2.3	MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (FINITE ELEMENTS METHOD – FEM)	66
2.2.4	MÉTODO DE VOLUMES FINITOS (FINITE VOLUMES METHOD – FVM)	74
2.2.5	ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO (HIGH RESOLUTION SCHEMES – HRS)	76
2.2.6	WAVELETS	80
2.2.7	MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS	83
2.2.8	MÉTODOS MESHLESS	84
2.3	MÉTODO DAS LINHAS (MOL)	86
2.4	CONCEITO GERAL DE ADAPTAÇÃO	87
2.4.1	INTRODUÇÃO	87
2.4.2	ADAPTAÇÃO NO CONTEXTO DA RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE PDE'S	91
2.4.3	ESTRATÉGIAS GERAIS DE ADAPTAÇÃO APLICADAS À RESOLUÇÃO DE PDE'S	91
2.4.4	VANTAGENS DE UTILIZAÇÃO DOS MÉTODOS DE MALHA ADAPTATIVA	94
2.5	PRINCÍPIOS DE ADAPTABILIDADE	98

2.6	REVISÃO DE MÉTODOS ADAPTATIVOS	100
2.6.1	INTRODUÇÃO	100
2.6.2	MÉTODO DAS LINHAS ADAPTATIVO (AMOL)	102
2.6.3	REFINAMENTO DE MALHA ADAPTATIVO (AMR)	103
2.6.4	MÉTODOS DINÂMICOS – MMPDE’S	106
2.6.5	MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS MÓVEIS (MFEM)	108
2.6.6	ESQUEMAS WAVELET	111
3.	MÉTODOS ADAPTATIVOS	121
3.1	INTRODUÇÃO	121
3.2	ESQUEMAS DE DIFERENÇAS FINITAS (FDS)	121
3.3	ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO (HRS)	126
3.4	MALHAS DIÁDICAS	132
3.5	ALGORITMOS NUMÉRICOS ADAPTATIVOS	135
3.5.1	MODELOS UNIDIMENSIONAIS	135
3.5.2	MODELOS BIDIMENSIONAIS	141
4.	MODELOS DE TESTE UNIDIMENSIONAIS	149
4.1	GERAÇÃO DE MALHAS UNIDIMENSIONAIS	149
4.2	RESOLUÇÃO DE MODELOS DIFERENCIAIS UNIDIMENSIONAIS	155
4.2.1	EQUAÇÃO DE ADVECCÃO	156
4.2.2	EQUAÇÃO DE BURGERS UNIDIMENSIONAL	162
4.2.3	EQUAÇÃO DE ALLEN-CAHN	171
4.2.4	EQUAÇÃO DE KORTEWEG-DE VRIES	177
4.2.5	MODELO DE PROPAGAÇÃO DE ONDAS	179
5.	MODELOS DE TESTE BIDIMENSIONAIS	183
5.1	GERAÇÃO DE MALHAS BIDIMENSIONAIS	183
5.2	RESOLUÇÃO DE MODELOS DIFERENCIAIS BIDIMENSIONAIS	200
5.2.1	EQUAÇÃO DE BURGERS BIDIMENSIONAL	201
5.2.2	EQUAÇÃO DE BUCKLEY-LEVERETT BIDIMENSIONAL	206
6.	SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS	211
6.1	MODELO DE DIFUSÃO, CONVECCÃO E REACÇÃO NUMA PARTÍCULA PLANA (DIFPLANA)	211
6.2	MODELOS 1D DE COMBUSTÃO	217
6.3	MODELOS 1D DE DIFUSÃO-CONVECCÃO-GERAÇÃO	226
6.4	MODELO DE PERMUTADOR DE FLUXO EM CONTRA-CORRENTE	241
6.5	MODELO 2D DE COMBUSTÃO	248
7.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO	259
7.1	CONCLUSÕES	259
7.2	SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO	262

ANEXOS

A	ESTRATÉGIAS PARA A DETERMINAÇÃO DE PESOS ASSOCIADAS A ESTRATÉGIAS BASEADAS EM DIFERENÇAS FINITAS	265
A.1	MÉTODO SISTEMATIZADO PARA A ESTIMATIVA DE DERIVADAS DE ORDEM ARBITRÁRIA SOBRE MALHAS UNIDIMENSIONAIS NÃO UNIFORMES	266
A.1.1	INTRODUÇÃO	266
A.1.2	APLICAÇÃO DAS SÉRIES DE TAYLOR PARA A ESTIMATIVA DE DERIVADAS	266
A.2	MÉTODO RECURSIVO DE FORNBERG	276
B	ALGORITMOS ADAPTATIVOS DE INTEGRAÇÃO	279
B.1	MALHAS UNIDIMENSIONAIS	280
B.1.1	ESTRUTURA DA APLICAÇÃO 1D	280
B.1.2	DESCRIÇÃO DE UM EXEMPLO 1D	288
B.2	MALHAS BIDIMENSIONAIS	294
B.2.1	ESTRUTURA DA APLICAÇÃO 2D	294
B.2.2	DESCRIÇÃO DE UM EXEMPLO 2D	302
C	INTEGRADORES NUMÉRICOS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS	307
C.1	DASSL – DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEM SOLVER	308
C.2	RKF45 – RUNGE-KUTTA-FEHLBERG	310

ÍNDICE DE TABELAS

1.1	Cronologia resumida dos principais marcos no desenvolvimento do método científico.	7-9
1.2	Sistemas coordenados cartesiano, cilíndrico e esférico.	25
1.3	Operadores diferenciais num sistema coordenado cartesiano tridimensional (em \mathfrak{R}^3) para o escalar $F=f(x,y,z)$ ou o vector de funções $\mathbf{F}=[F_x, F_y, F_z]$.	25
1.4	Divergência de um vector ($\nabla \cdot$).	26
1.5	Gradiente de um escalar (∇).	27
1.6	Definição de Laplaciano ($\nabla \cdot \nabla$).	27
1.7	Formulação das equações de Maxwell em termos de carga e corrente livre, na forma diferencial.	28
1.8	Classificação de uma equação diferencial de segunda ordem bidimensional quanto à sua linearidade.	35
1.9	Classificação das cónicas e das PDE's correspondentes.	37
1.10	Exemplificação da classificação geométrica de PDE's típicas.	38
1.11	Resultados obtidos pela aplicação do algoritmo numérico apresentado para a resolução de uma equação cúbica de uma variável, $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$ ($x^0=10$; $\varepsilon = 10^{-7}$).	45
1.12	Resumo dos grupos de métodos de integração principais.	53
2.1	Exemplos de aproximações de elementos finitos (EF) lineares e quadráticas e aproximações de diferenças finitas (DF) em malhas 1D uniformes.	72
2.2	Resumo de MMPDE's unidimensionais seleccionadas.	108
3.1	Definição de limitadores de fluxo para esquemas de alta resolução.	128
3.2	Estratégias de geração de malha 1D (gridgen*1).	140
3.3	Rotinas de geração de malha 2D (gridgen*2).	145
4.1	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função degrau.	149
4.2	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função corner.	151
4.3	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função TGH.	152
4.4	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função de Runge.	153
4.5	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação da advecção.	157
4.6	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Burgers, para $v = 1 \times 10^{-3}$.	163
4.7	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Burgers, para $v = 1 \times 10^{-4}$.	165
4.8	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Allen-Cahn.	172
4.9	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Korteweg-deVries.	177
4.10	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de propagação de ondas.	181
5.1	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função 2D step2.	183
5.2	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função wave1.	191
5.3	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função tgh2D.	194
5.4	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função well.	196
5.5	Parâmetros numéricos para a geração de malha da função de Franke.	198
5.6	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação 2D de Burgers.	202
5.7	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação BL 2D.	207
6.1	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação DifPlana.	212

6.2	Tempos de execução para o caso da equação DifPlana.	216
6.3	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de chama.	218
6.4	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de propagação de chama.	222
6.5	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de adsorção.	227
6.6	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo pistdif.	232
6.7	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo catn_isot.	237
6.8	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de permutador.	243
6.9	Tempos de execução para o caso do modelo do permutador.	248
6.10	Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de combustão 2D.	250
<hr/>		
A.1	Diferentes tipos de geometria das aproximações FD.	272
<hr/>		
B.1	Resumo das variáveis de entrada do programa STAT02 fornecidas pelo ficheiro DATA.	282
B.2	Resumo das variáveis presentes nas subrotinas definidas pelo utilizador para a execução do programa STAT02.	284
B.3	Resumo das variáveis de entrada do programa INTEGR2D fornecidas pelo ficheiro DADOS.	296
B.4	Resumo das variáveis presentes nas subrotinas definidas pelo utilizador para a execução do programa INTEGR2D.	299

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Estrutura hierárquica de relação entre os conceitos enunciados nos objectivos.	5
1.2	Modelo da etimologia da palavra model (inglês moderno) e palavras associadas.	11
1.3	Uma versão da representação 3D do bule UTAH.	13
1.4	Manipulação de uma representação 3D do bule UTAH.	13
1.5	Modelo simplificado da evolução da Batalha de Aljubarrota.	15
1.6	Simbologia (ou metamodelo) dos esquemas da Figura 1.5.	16
1.7	Esquema simplificado representativo do processo de modelação generalizado.	17
1.8	Primeira radiografia “médica” de Wilhelm Röntgen, da mão da sua esposa, tirada em 22 de Dezembro de 1895.	21
1.9	Esquema que ilustra a evolução dos diferentes paradigmas relacionados com os níveis de conhecimento em Engenharia Química, quer em termos de objectos de estudo como de unidades de integração.	23
1.10	Representação de elemento de volume genérico definido num espaço tridimensional.	29
1.11	Exemplos para construção de modelos: A – tanque perfeitamente agitado com aquecimento, B – escoamento pistão.	29
1.12	Ilustração das características para a equação 1.22.	34
1.13	Tipos de secções cónicas: 1 – Parábola; 2 – Elipse; 3 – Hipérbole.	36
1.14	Placa cerâmica babilónia YBC 7289 (c. 1800-1600 AC), mostrando uma aproximação a $\sqrt{2}$ no contexto do Teorema de Pitágoras aplicado a um triângulo isósceles.	43
1.15	Lista de problemas matemáticos resolúveis por análise numérica.	46
1.16	Interdependências entre os fenómenos físicos, as suas representações matemáticas abstractas e os processos numéricos de resolução desses modelos.	48
1.17	Ilustração do efeito da difusão e da dissipação numérica em relação à solução exacta.	51
2.1	Exemplo típico de uma malha bidimensional estruturada.	55
2.2	Exemplo típico de uma malha bidimensional não estruturada.	56
2.3	Tipos de aproximações de diferenças finitas definidas num sistema unidimensional, em relação ao sentido de propagação do fluxo \mathbf{F} .	64
2.4	Exemplo de aproximação de diferenças finitas mista de segunda ordem num domínio bidimensional.	65
2.5	Elemento unidimensional aplicado a um nodo.	68
2.6	Estratégia de interpolação linear piecewise a dois intervalos num elemento finito 1D $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.	69
2.7	Função de interpolação $\phi_i(x)$ linear piecewise a dois intervalos – hat function.	70
2.8	Interpolação quadrática num elemento finito 1D $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.	71
2.9	Ilustração de uma subdivisão do domínio 2D em volumes de controlo finitos.	74
2.10	“Volume” de controlo 1D.	75
2.11	Definição das variáveis locais para um exemplo 1D.	77
2.12	Esquema geral para o NVD (Normalised Variable Diagram) representando a região de verificação do CBC (Convective Boundness Criterion).	79
2.13	Diagrama de Sweby, onde se salienta a região admissível de delimitação para esquemas TVD de segunda ordem.	80
2.14	Representação da wavelet de Haar.	82
2.15	Representação da wavelet real de Ricker (Mexican Hat Wavelet).	83
2.16	Representação da wavelet real de Shannon.	83
2.17	Resumo da estratégia geral do Método das Linhas (MOL) para o caso unidimensional.	86
2.18	Representação genérica do Método das Linhas (MOL) para o caso unidimensional: (a) domínio espacial contínuo; (b) discretização do domínio espacial; (c) integração temporal clássica, mantendo inalteradas as posições espaciais definidas pela discretização.	88

2.19	Representação do sistema de controlo adaptativo MRAC – Model Reference Adaptive Control.	89
2.20	Conceito de adaptação no contexto da resolução numérica de modelos matemáticos.	90
2.21	Resultados da equação de Burgers obtidos através da aplicação de um MOL não adaptativo: A – discretização espacial de Diferenças Finitas Centradas de 4ª ordem; B – discretização espacial de Diferenças Finitas biased upwind de 4ª ordem.	96
2.22	Resultados da equação de Burgers obtidos através da aplicação de um MOL adaptativo – AMOL: A – até $t = 2$; B – nível máximo de refinamento atingido pelos nodos da malha original de nível 2; C – até $t = 10$.	97
2.23	Relação entre a perspectiva clássica fixa e a abordagem adaptativa para a resolução numérica de PDE's.	101
2.24	Exemplo de hierarquização de malhas de diversos níveis no contexto dos procedimentos AMR.	105
2.25	Relação hierárquica em árvore das diferentes malhas de diversos níveis apresentadas no exemplo da Figura 2.24.	105
3.1	Funções rampa com diversos declives com origem na abcissa $x=0.1$.	123
3.2	Representação da estimativa da primeira derivada das funções rampa da Figura 3.1, através de diferenças finitas centradas de quarta ordem, numa malha uniforme com $\Delta x = 0.01$.	124
3.3	Pormenor do gráfico da Figura 3.2, centrado sobre a posição de origem das diversas rampas ($x=0.1$).	124
3.4	Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha uniforme de 32 intervalos.	125
3.5	Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha uniforme de 64 intervalos.	125
3.6	Diagramas NVD (Normalised Variable Diagram) para esquemas de alta resolução da Tabela 3.1 para: malha uniforme (---), malha não uniforme com razão de expansão de 2 (----) e malha não uniforme com razão de compressão de 0.5 (----). Os pontos evidenciados a vermelho correspondem às posições nodais da malha (Θ_p, Θ_f) , para cada situação referida anteriormente.	129
3.7	A – Limitador Universal (ULTIMATE); B – restrições TVD para métodos explícitos evolutivos.	130
3.8	Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de um esquema de alta resolução (com limitador MINMOD) numa malha uniforme de 50 intervalos.	131
3.9	Interpolação de uma função pulso através de um esquema de alta resolução (com limitador MINMOD) numa malha uniforme de 50 intervalos.	131
3.10	Exemplo de malhas diádicas unidimensionais: $M=0, N=7$; num domínio $[0,1]$.	133
3.11	Exemplo de malhas diádicas bidimensionais: $M=4, N=6$; num domínio $[0,1]^2$.	134
3.12	Diagrama de fluxo para a descrição esquematizada do algoritmo de integração numérica adaptativa de modelos diferenciais evolutivos unidimensionais, baseado numa estratégia AMOL.	136
3.13	Algoritmo para selecção e colocação nodal em malhas diádicas de nível k crescente.	137
3.14	Relação hierárquica entre malhas de nível sucessivo.	138
3.15	Critérios para colocação nodal em malhas de nível crescente.	139
3.16	Procedimento de refinamento padrão numa malha bidimensional estruturada rectangular.	142
3.17	Diagrama de fluxo para a descrição esquematizada do algoritmo de integração numérica adaptativa de modelos diferenciais evolutivos bidimensionais INTEGR2D, baseado numa estratégia AMOL.	143
3.18	Relação entre os diversos critérios bidimensionais e as correspondentes rotinas de geração de malha.	144
3.19	Ilustração esquemática da estratégia adoptada nos critérios C32.	144

3.20	Algoritmo genérico para selecção e colocação nodal C32 sobre conjuntos de malhas diádicas.	145
4.1	Geração de malha unidimensional para a função degrau negativo.	150
4.2	Geração de malha unidimensional para a função corner.	151
4.3	Geração de malha unidimensional para a função TGH (critério C1).	152
4.4	Geração de malha unidimensional para a função TGH (critério C2).	153
4.5	Geração de malha unidimensional para a função de Runge (critério C1).	154
4.6	Geração de malha unidimensional para a função de Runge (critério C2).	155
4.7	Perfil inicial e geração de malha para a equação de advecção (critério C1).	157
4.8	Perfil inicial e geração de malha para a equação de advecção (critério C2).	158
4.9	Implementação numérica para o caso da equação de advecção (critério C1).	159
4.10	Implementação numérica para o caso da equação de advecção (critério C2).	160
4.11	Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de advecção.	161
4.12	Erro médio obtido na implementação numérica para o caso da equação de advecção.	161
4.13	Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-3}$).	164
4.14	Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C2; $v = 1 \times 10^{-3}$).	165
4.15	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$) – instante inicial $t = 0$.	166
4.16	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 0.2$.	167
4.17	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 1$.	168
4.18	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 5$.	169
4.19	Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$).	170
4.20	Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de Burgers.	170
4.21	Implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1).	171
4.22	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante inicial $t = 0$.	172
4.23	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 2$.	173
4.24	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 5$.	174
4.25	Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 10$.	175
4.26	Implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C2).	176
4.27	Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn.	176
4.28	Implementação numérica para o caso da equação de Korteweg-deVries.	178
4.29	Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de ondas.	180
4.30	Interacção entre as duas ondas propagadas em sentidos contrários.	181
5.1	Representação gráfica da função step2.	184
5.2	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C42m).	184
5.3	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C32m).	185
5.4	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C12m).	186
5.5	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C52m).	186
5.6	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C52m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 20$).	187

5.7	Número de nodos da malha bidimensional em função das tolerâncias para a função step2.	187
5.8	Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C42m com critério 1D C2).	188
5.9	Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C42m – $N_x = N_y = 10$).	189
5.10	Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C32m – $N_x = N_y = 10$).	190
5.11	Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C32m).	190
5.12	Representação gráfica da função wave1.	191
5.13	Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C42m).	192
5.14	Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C12m).	192
5.15	Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C42m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.01$).	193
5.16	Representação gráfica da função tgh2D.	194
5.17	Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C42m).	195
5.18	Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C12m).	195
5.19	Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C42m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.1$).	196
5.20	Representação gráfica da função well.	197
5.21	Geração de malha bidimensional para a função well (critério C42m).	197
5.22	Geração de malha bidimensional para a função well (critério C12m).	198
5.23	Representação gráfica da função de Franke.	199
5.24	Geração de malha bidimensional para a função de Franke (critério C42m).	199
5.25	Malha inicial gerada para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D C1 σ).	203
5.26	Malha gerada ($t = 0.5$) para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D C1 σ).	203
5.27	Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 0.5$) do modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D C1 σ).	204
5.28	Malha gerada ($t = 1.5$) para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D C1 σ).	205
5.29	Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 1.5$) do modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D C1 σ).	205
5.30	Evolução da dimensão das malhas adaptativas para a implementação do modelo invíscido de Burgers 2D.	206
5.31	Malha inicial gerada para o modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D C1 σ).	208
5.32	Malha gerada ($t = 0.5$) para o modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D C1 σ).	208
5.33	Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 0.5$) do modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D C1 σ).	209
5.34	Evolução da dimensão das malhas adaptativas para a implementação do modelo BL 2D.	209
<hr/>		
6.1	Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C1 σ - $t = 0.05$).	213
6.2	Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C1 σ - $t = 0.5$).	214
6.3	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação DifPlana.	214
6.4	Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C2 - $t = 0.05$).	215
6.5	Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C2 - $t = 0.5$).	216
6.6	Implementação numérica para o caso da equação de chama (critério C52/C1 σ).	218
6.7	Implementação numérica para o caso da equação de chama (critério C52/C2).	219
6.8	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de chama.	220
6.9	Malha base não uniforme de nível 0, usada nas implementações do modelo de propagação de chama.	221
6.10	Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama (gridgen11/critério C1).	223

6.11	Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama (gridgen11/critério C2).	224
6.12	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama.	225
6.13	Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C2).	228
6.14	Malha gerada para $t = 0.9$ (modelo de adsorção – gridgen11/critério C2).	229
6.15	Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C1).	229
6.16	Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C1) – segundo run.	230
6.17	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de adsorção.	231
6.18	Malha gerada para $t = 0.5$ (modelo pistdif – gridgen11/critério C2).	232
6.19	Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (gridgen11/critério C2).	233
6.20	Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (gridgen11/critério C1).	234
6.21	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo pistdif.	234
6.22	Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (gridgen21/critério C2).	235
6.23	Malha gerada para $t = 0.5$ (modelo catn_isot – gridgen11/critério C2).	238
6.24	Malha gerada para $t = 800$ (modelo catn_isot – gridgen11/critério C2).	239
6.25	Comparação dos perfis para $t = 850$ (modelo catn_isot – gridgen11/critério C2).	240
6.26	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo catn_isot.	241
6.27	Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2).	244
6.28	Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2); avaliação de derivadas espaciais através de uma estratégia NVSF associada ao limitador de fluxo MINMOD.	245
6.29	Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2); avaliação de derivadas espaciais através de uma estratégia NVSF associada ao limitador de fluxo SMART.	246
6.30	Perfis espaciais da variável v para $t = 0.25$ para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2).	247
6.31	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo do permutador.	248
6.32	Perfis de solução ($t = 0.2$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	250
6.33	Perfis de solução ($t = 0.24$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	251
6.34	Perfis de solução ($t = 0.25$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	251
6.35	Perfis de solução ($t = 0.26$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	252
6.36	Perfis de solução ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	252
6.37	Malha gerada ($t = 0.25$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	253
6.38	Malha gerada ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).	253
6.39	Perfis de solução ($t = 0.24$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).	254
6.40	Perfis de solução ($t = 0.26$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).	255
6.41	Perfis de solução ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).	255
6.42	Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de combustão 2D.	256
<hr/>		
A.1	Stencil para a aproximação FD centrada de segunda ordem.	267
A.2	Stencil para a aproximação FD centrada de quarta ordem.	268
A.3	Stencil para a aproximação FD de quarta ordem para o ponto fronteira, x_1 .	270
A.4	Stencil para a aproximação FD de quarta ordem para o ponto adjacente à fronteira, x_2 .	271
<hr/>		
B.1	Esquema simplificado da estrutura do código STAT02.	281
B.2	Esquema pormenorizado da estrutura da rotina NVSF.	287

B.3	Exemplo de um ficheiro DATA referente ao modelo de propagação de chama.	288
B.4	Ficheiro POSITION para definição das posições da malha não diádica não uniforme de nível 0 (modelo de propagação de chama).	289
B.5	Exemplo do conjunto de subrotinas fornecidas pelo utilizador (modelo de propagação de chama).	290-291
B.6	Esquema simplificado da estrutura do código INTEGR2D.	295
B.7	Esquema do processo de geração de malha adaptativa incluído na estrutura do código INTEGR2D.	300
B.8	Exemplo de um ficheiro DADOS referente ao modelo de combustão 2D.	302
B.9	Exemplo do conjunto de subrotinas fornecidas pelo utilizador (modelo de combustão 2D).	303-304

NOMENCLATURA

- *Símbolos latinos*

a	[L]	Posição espacial da fronteira inferior (problemas unidimensionais).
a_x	[L]	Posição espacial da fronteira inferior na abcissa x (problemas bidimensionais).
a_y	[L]	Posição espacial da fronteira inferior na abcissa y (problemas bidimensionais).
ATOL	[-]	Tolerância absoluta para o integrador DASSL.
b	[L]	Posição espacial da fronteira superior (problemas unidimensionais).
b_x	[L]	Posição espacial da fronteira superior na abcissa x (problemas bidimensionais).
b_y	[L]	Posição espacial da fronteira superior na abcissa y (problemas bidimensionais).
e	[-]	Erro médio global.
erro	[-]	Erro absoluto.
f, g	[-]	Funções genéricas.
i, k, j, n	[-]	Contadores ou variáveis inteiras genéricas.
M	[-]	Nível mínimo de uma malha diádica (problemas unidimensionais).
ML	[-]	Dimensão da banda inferior de uma matriz multidiagonal.
MU	[-]	Dimensão da banda superior de uma matriz multidiagonal.
M_x	[-]	Nível mínimo de uma malha diádica na abcissa x (problemas bidimensionais).
M_y	[-]	Nível mínimo de uma malha diádica na abcissa y (problemas bidimensionais).
N	[-]	Nível máximo de uma malha diádica (problemas unidimensionais).
NEQ	[-]	Número de equações do problema.
NI	[-]	Número de intervalos da malha não diádica de nível 0.
Nint0	[-]	Número de intervalos da malha de nível mínimo.
Nint	[-]	Número de intervalos da malha.
NP	[-]	Número de nodos da malha.
NRef	[-]	Grau máximo de refinamento de uma malha de nível mínimo.
N_x	[-]	Nível máximo de uma malha diádica na abcissa x (problemas bidimensionais).
N_y	[-]	Nível máximo de uma malha diádica na abcissa y (problemas bidimensionais).
RTOL	[-]	Tolerância relativa para o integrador DASSL.
RWORK	[-]	Vector de trabalho da subrotina DASSL.
t	[T]	Variável temporal independente.
u, v	[-]	Variáveis dependentes genéricas.
U_i^n	[-]	Estimativa de uma derivada de ordem n na posição discreta i .
V^j	[-]	Malha diádica de nível j .
x, y, z	[L]	Variáveis espaciais cartesianas.
t_0	[T]	Tempo inicial.
t_{final}	[T]	Tempo final.
WORK	[-]	Vector de trabalho da subrotina RKF45.

- *Símbolos gregos*

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$	[-]	Tolerâncias para os critérios de colocação nodal.
Δt	[T]	Passo temporal.
Δx	[L]	Tamanho local de uma malha.
ϕ	[-]	Função de fluxo.
Φ	[-]	Fluxo normalizado.
Θ	[-]	Variáveis espaciais normalizadas.

- *Subscritos ou superscritos*

D	Posição downwind.
f	Posição da face.

- P Posição do nodo de interesse.
- U Posição upwind.
- x Referente à coordenada espacial x .
- y Referente à coordenada espacial y .
- $*$ Normalizado

- **Operadores**

- ∇ Operador gradiente.
- $\nabla \cdot$ Operador divergência.
- $\nabla \times$ Operador rotacional.
- $\nabla \cdot \nabla$ Operador laplaciano.
- d Operador diferencial total.
- ∂ Operador diferencial parcial.
- O Termo de erro.
- $!$ Factorial.
- $\| \|$ Distância Euclidiana entre dois pontos.
- $\| \|_2$ Norma L_2 .

- **Acrónimos, Siglas e Abreviaturas**

- AB Adams-Bashforth (method) – Método de Adams-Bashforth
- AM Adams-Moulton (method) – Método de Adams-Moulton
- $AMAR$ Adaptive Mesh and Algorithm Refinement
- $AMOL$ Adaptive Method of Lines – Método das linhas adaptativo
- AMR Adaptive Mesh Refinement – Refinamento de malha adaptativo
- AR Algorithm Refinement
- BDF Backward Differentiation Formula
- BL Buckley-Leverett (equation) – Equação de Buckley-Leverett
- BVP Boundary Value Problem – Problema de valor fronteira
- CBC Convection Boundness Criterion
- CDS Central Differencing Scheme
- CFD Computational Fluid Dynamics – Dinâmica de fluidos computacional
- CFL Courant-Friedrichs-Lewy (principle) – Princípio de Courant-Friedrichs-Lewy
- $CLAM$ Curved-Line Advection Method
- $CUBISTA$ Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection
- CWT Continuous Wavelet Transform – Transformada wavelet contínua
- $C1$ Critério (de colocação nodal unidimensional) 1
- $C12$ Critério (de colocação nodal bidimensional) 1
- $C1\sigma$ Critério (de colocação nodal unidimensional) 1 (versão σ - desvio padrão)
- $C2$ Critério (de colocação nodal unidimensional) 2
- $C32$ Critério (de colocação nodal bidimensional) 3
- $C42$ Critério (de colocação nodal bidimensional) 4
- $C52$ Critério (de colocação nodal bidimensional) 5
- $DASSL$ Differential-Algebraic System SoLver
- ENO Essentially Non-Oscillatory
- EP Equidistributing Principle – Princípio de equidistribuição
- FD Finite Differences – Diferenças finitas
- FDM Finite Differences Method – Método de diferenças finitas
- FDS Finite Differences Schemes – Esquemas de diferenças finitas
- FEA Finite Element Analysis – Análise de elementos finitos
- FEM Finite Element Method – Método de elementos finitos
- FVM Finite Volume Method – Método de volumes finitos
- $GAMMA$ GAMMA differencing scheme
- HRS High Resolution Schemes – Esquemas de alta resolução

<i>IBVP</i>	Initial-Boundary Value Problem – <i>Problema de valor inicial-fronteira</i>
<i>INTEGR2D</i>	<i>Algoritmo e programa computacional correspondente para a resolução numérica adaptativa de modelos transientes bidimensionais</i>
<i>IVP</i>	Initial Value Problem – <i>Problema de valor inicial</i>
<i>KdV</i>	Korteweg-deVries (equation) – <i>Equação de Korteweg-deVries</i>
<i>LUDS</i>	Linear Upwind Differencing Scheme
<i>LUMR</i>	Local Uniform Mesh Refinement
<i>MFEM</i>	Moving Finite Element Method – <i>Método de elementos finitos móveis</i>
<i>MM</i>	Meshless (ou Meshfree) Methods
<i>MMPDE</i>	Moving Mesh Partial Differential Equation
<i>MOL</i>	Method Of Lines – <i>Método das linhas</i>
<i>MPM</i>	Meshfree Particle Methods
<i>MRAC</i>	Model Reference Adaptive Control
<i>MRND</i>	Métodos de Redistribuição Nodal Dinâmica
<i>MRNE</i>	Métodos de Redistribuição Nodal Estática
<i>MUSCL</i>	Monotonic Upstream-centered Schemes for Conservation Laws
<i>NA</i>	Não Aplicável
<i>NVD</i>	Normalised Variable Diagram
<i>NVF</i>	Normalised Variable Formulation
<i>NVSF</i>	Normalised Variable and Space Formulation
<i>ODAE</i>	Ordinary Differential Algebraic Equations – <i>(Sistema de) Equações algébrico-diferenciais ordinárias</i>
<i>ODE</i>	Ordinary Differential Equation – <i>Equação diferencial ordinária</i>
<i>PC</i>	Parallel Computing
<i>PDAE</i>	Partial Differential Algebraic Equations – <i>(Sistema de) Equações algébrico-diferenciais parciais</i>
<i>PDE</i>	Partial Differential Equation – <i>Equação diferencial parcial</i>
<i>PM</i>	Particle Methods – <i>Métodos de partículas</i>
<i>PPM</i>	Piecewise Parabolic Method
<i>QUICK</i>	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics (scheme)
<i>RBF</i>	Radial Basis Functions
<i>RK</i>	Runge-Kutta (methods) – <i>Métodos de Runge-Kutta</i>
<i>SCM</i>	Shock Capturing Methods
<i>SMART</i>	Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport
<i>SPH</i>	Smoothed Particle Hydrodynamics
<i>STATO2</i>	<i>Algoritmo e programa computacional correspondente para a resolução numérica adaptativa de modelos transientes unidimensionais</i>
<i>TVD</i>	Total Variation Diminishing
<i>UDS</i>	Upwind Differencing Scheme
<i>ULTIMATE</i>	Universal Limiter – <i>Limitador universal</i>
<i>WACEB</i>	Weighted-Average Coefficient Ensuring Boundedness
<i>WENO</i>	Weighted <i>ENO</i>
<i>1D</i>	<i>Unidimensional</i>
<i>2D</i>	<i>Bidimensional</i>

0. INTRODUÇÃO

O objectivo do presente trabalho consiste essencialmente no desenvolvimento e teste de métodos numéricos adaptativos, aplicáveis na resolução eficiente de modelos matemáticos diferenciais evolutivos de dimensão arbitrária, que exibam soluções com gradientes elevados, e sejam relevantes no âmbito específico da modelação de processos químicos.

Nesse sentido, serve o actual capítulo como uma introdução ao relatório de dissertação, assumindo-se assim como uma apresentação resumida da estrutura genérica idealizada para o documento.

Deste modo, o relatório é iniciado com o Capítulo 1: **MODELAÇÃO MATEMÁTICA E ANÁLISE NUMÉRICA**; onde se pretende realizar uma introdução sumária de um conjunto de conceitos organizados de uma forma hierárquica, discutidos a partir do geral para o particular. Os conceitos que são objecto de reflexão vão desde a questão da modelação geral, passando pelas especificidades da modelação matemática até às características dos modelos diferenciais parciais. Por outro lado, discute-se o conceito de análise numérica e a sua aplicação específica na resolução aproximada de problemas diferenciais parciais definidos sobre domínios de dimensão arbitrária. Assim, pretende-se situar o problema da integração numérica de equações diferenciais no âmbito mais vasto da modelação e simulação de fenómenos físicos. Procura-se deste modo, colocar em evidência a importância da linguagem matemática abstracta na representação da realidade física concreta.

De seguida, o Capítulo 2: **ESTRATÉGIAS DE ADAPTAÇÃO**; consiste num aprofundamento da discussão referente aos métodos específicos de solução numérica de sistemas algébrico-diferenciais ordinários e parciais e numa introdução detalhada ao conceito de adaptação no contexto do desenvolvimento desses esquemas numéricos, nomeadamente na definição da noção de malha adaptativa. Apresenta-se igualmente uma revisão bibliográfica de métodos de malha adaptativa, juntamente com os respectivos processos de adaptação nodal, especificamente idealizados para a resolução numérica de modelos algébrico-diferenciais multidimensionais que exibam soluções caracterizadas por frentes e ondas abruptas ou descontinuidades. Todavia, não se pretende que esta revisão seja demasiado exaustiva, centrando-se somente na descrição e discussão das principais estratégias desenvolvidas e adoptadas para a resolução do problema.

No Capítulo 3: **MÉTODOS ADAPTATIVOS**; descrevem-se os vários algoritmos numéricos adaptativos desenvolvidos no âmbito da investigação realizada e os conceitos teóricos específicos que estiveram na sua origem. Assim, nas diversas secções do capítulo realiza-se: uma síntese das estratégias de discretização baseadas directamente em esquemas de diferenças finitas ou em procedimentos de alta resolução com limitação de fluxo; a definição genérica de malha diádica, e a sua aplicação como elemento estrutural gerador de uma malha adaptativa; a apresentação dos algoritmos adaptativos de resolução numérica de PDE's uni- e bidimensionais, com a descrição dos critérios de adaptação seleccionados.

O Capítulo 4: **MODELOS DE TESTE UNIDIMENSIONAIS**; é o primeiro capítulo de apresentação e discussão de resultados, onde se resumem os resultados obtidos através da

implementação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 para modelos de teste unidimensionais. Verifica-se inicialmente o desempenho dos métodos de colocação nodal e geração de malha para funções de teste unidimensionais. Posteriormente, procede-se ao teste do algoritmo na resolução de modelos diferenciais unidimensionais.

No Capítulo 5: **MODELOS DE TESTE BIDIMENSIONAIS**; introduzem-se os resultados obtidos através da implementação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 para modelos de teste bidimensionais. De uma forma equivalente ao Capítulo 4, opta-se por testar numa primeira fase o desempenho dos métodos de colocação nodal e geração de malha para funções de teste bidimensionais e, de seguida, proceder à verificação do potencial do algoritmo de integração numérica na resolução de modelos diferenciais bidimensionais.

O Capítulo 6: **SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS**; consiste na apresentação dos resultados numéricos obtidos pela implementação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 para a resolução de modelos diferenciais transientes, definidos sobre domínios espaciais de dimensão arbitrária, que representem a simulação de problemas típicos no âmbito da modelação de processos químicos e exibam soluções com atributos notoriamente problemáticos, nomeadamente modelos de propagação, adsorção, combustão, etc.

O relatório é completado com o Capítulo 7: **CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO**; onde se resumem as principais conclusões obtidas através da discussão dos resultados apresentados nos capítulos anteriores. A enumeração e posterior discussão das diferentes conclusões consideradas relevantes, possibilita a definição de um conjunto de sugestões para investigações adicionais que possam no futuro complementar e representar um avanço (quer em termos de reforço ou contradição), relativamente às teses defendidas no contexto do trabalho presente.

O relatório é complementado com diversos anexos que englobam informação adicional suplementar considerada importante na contextualização do trabalho apresentado no corpo principal.

No Anexo A: **ESTRATÉGIAS PARA A DETERMINAÇÃO DE PESOS ASSOCIADAS A ESTRATÉGIAS BASEADAS EM DIFERENÇAS FINITAS**; introduzem-se procedimentos sistematizáveis para a geração de aproximações de diferenças finitas de geometria variada para a estimativa de derivadas de ordem arbitrária sobre malha unidimensionais uniformes e não uniformes.

Por outro lado, no Anexo B: **ALGORITMOS ADAPTATIVOS DE INTEGRAÇÃO**; apresentam-se os algoritmos computacionais (STAT02, unidimensional e INTEGR2D, bidimensional) desenvolvidos para a implementação dos métodos de integração acoplados a critérios de geração de malha adaptativa desenvolvidos no âmbito do presente trabalho e discutidos no Capítulo 3. Descreve-se a estrutura e características principais dos respectivos programas construídos em linguagem FORTRAN para a reprodução e execução computacional desses algoritmos, e introduzem-se alguns exemplos ilustrativos da sua aplicação.

Finalmente, no Anexo C: **INTEGRADORES NUMÉRICOS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS**; descrevem-se algumas aplicações computacionais para a integração numérica de sistemas de

equações diferenciais ordinárias, das quais se destacam o integrador DASSL (Differential-Algebraic System Solver) aplicado na integração de modelos unidimensionais, e o programa RKF45, que implementa o método de Runge-Kutta-Fehlberg de quarta-quinta ordem, adoptado como integrador para exemplos bidimensionais.

PÁGINA EM BRANCO

1. MODELAÇÃO MATEMÁTICA E ANÁLISE NUMÉRICA

O âmbito desta investigação consiste essencialmente na consecução do objectivo seguinte: desenvolvimento e teste de *métodos numéricos adaptativos* para a resolução de *modelos matemáticos algébrico-diferenciais*.

Apesar da sua aparente simplicidade e objectividade, este enunciado de intenções propostas encerra uma multiplicidade de conceitos, que convém escarpelizar com mais pormenor de forma a situar convenientemente o essencial da investigação no universo do conhecimento científico. De facto, a área de estudo engloba um conjunto vasto de campos científicos, cuja relação pode ser esquematizada através de uma estrutura hierárquica como a apresentada na Figura seguinte.

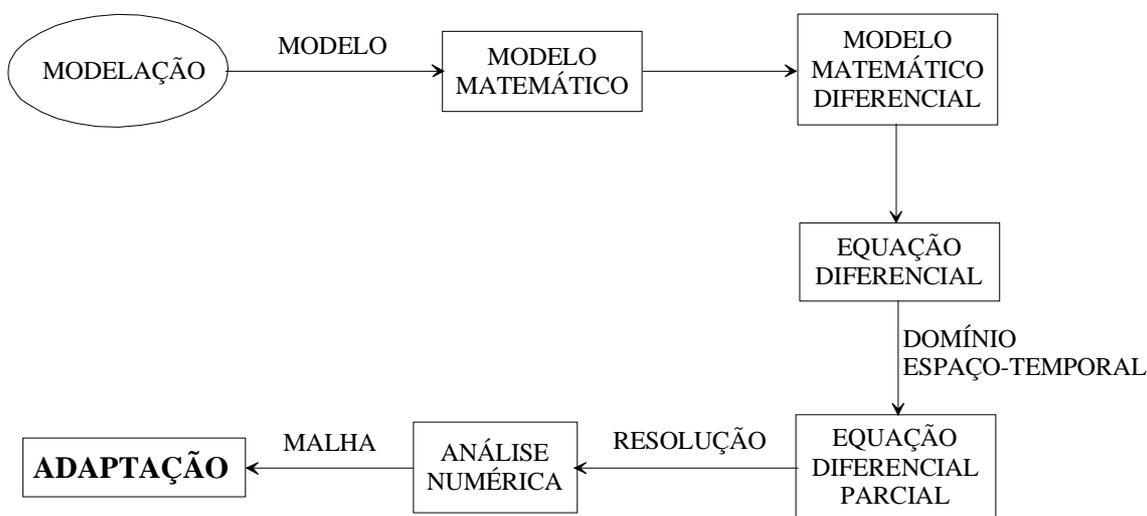


Figura 1.1 Estrutura hierárquica de relação entre os conceitos enunciados nos objectivos.

No presente capítulo pretende-se realizar uma introdução resumida a cada um dos conceitos referidos na figura anterior, partindo-se do geral para o particular de forma a situar o problema da integração numérica de equações diferenciais no âmbito mais vasto da modelação e simulação de fenómenos físicos. Neste sentido, procura-se através desta reflexão, estabelecer uma relação entre as diferentes áreas referidas, no sentido de colocar em evidência a importância da linguagem matemática abstracta na representação da realidade física concreta.

1.1 MÉTODO CIENTÍFICO

Numa perspectiva de construção da reflexão hierárquica proposta anteriormente, através de um encadeamento lógico, parta-se então do conceito mais genérico possível. Pretendendo ser o presente estudo, primeiro que tudo, um trabalho científico, então conclui-se que em primeiro lugar será necessário estabelecer o que significa exactamente a noção de estudo ou procedimento científico. Assim, um estudo científico consiste num processo que segue as regras estipuladas pelo chamado método científico, ou seja, um conjunto de técnicas que permitem a investigação de fenómenos para a construção de novo conhecimento ou aperfeiçoamento de

conhecimento prévio[1]. Para poder ser classificado de científico, o processo deverá ser baseado na recolha de dados observáveis, mensuráveis e empíricos.

Assim, analise-se inicialmente a própria evolução histórica do pensamento inquisitivo na tentativa da procura da “verdade”, que eventualmente desembocou no próprio conceito de inquérito científico. Obviamente que o desenvolvimento de um método dito científico não pode ser dissociado da própria evolução histórica da Ciência. Apesar do método científico apenas ter cristalizado a partir do século XVII (com a designada revolução científica), técnicas comumente associadas ao método científico já são claramente identificáveis, mesmo que apenas de um modo parcial, em registos milenares desenvolvidos no contexto das primeiras civilizações humanas. Portanto, pode concluir-se que o desenvolvimento de um processo de procura da explicação dos fenómenos observáveis de uma forma minimamente eficiente com a preocupação de obtenção de conclusões práticas úteis, aplicáveis e registáveis para aperfeiçoamento contínuo baseado na experiência, foi uma das consequências do advento da organização civilizacional das sociedades humanas. Assim, documentos provenientes de Antigo Egipto descrevem já métodos empíricos aplicados no âmbito da Astronomia, Matemática e Medicina. Mais tarde, os Gregos constatarem e descrevem esses métodos anteriormente utilizados pelos Egípcios durante séculos. No entanto, o primeiro método científico experimental foi desenvolvido por Muçulmanos, que introduziram os conceitos de experimentação e quantificação para a distinção entre diferentes teorias competidoras, igualmente definidos numa orientação genericamente empírica.

Na Tabela 1.1 apresenta-se uma cronologia resumida dos principais marcos no desenvolvimento do método científico[2], onde implicitamente se apresentam as personalidades mais marcantes neste processo, que decorre há pelo menos 4000 anos, segundo os registos disponíveis.

No entanto, é importante destacar igualmente o modelo clássico de inquérito científico definido por Aristóteles, que estabeleceu nomeadamente o esquema tripartido de inferências, abdutiva, dedutiva e indutiva[3]. Estes três processos mentais de racionalização podem ser resumidos da forma seguinte: considerem-se duas observações (A, B) e uma teoria ou regra (C) que as relaciona: uma indução consiste num processo em que se construa C, a partir de A e B – a partir das duas constatações define-se uma teoria que as explica e que constitui normalmente uma generalização; uma dedução é o processo em que a partir de uma observação e de uma teoria, se deduz outra observação (uma conclusão) que é consequência da primeira, ou seja, que lhe está a jusante; finalmente, uma abdução é o processo em que a partir de uma observação e de uma teoria, se obtém outra observação que pode explicar a primeira, ou seja, que lhe está a montante. Assim, admita-se que constatamos os factos seguintes: A – “Sócrates é um homem”: B - “Sócrates é mortal”; aplicando um processo indutivo, obtém-se a possível teoria: C - “Todos os homens são mortais”. Por outro lado, por A e C, pode-se deduzir B e através de B e C, abduz-se A. Estes processos de raciocínio (principalmente os dois primeiros) são consideravelmente importantes na explanação do modelo geral do processo de inquérito científico.

Assim, do ponto de vista estrutural, é genericamente aceite que o método científico pode ser caracterizado por iterações, recursões, intercalações e ordenações dos quatro elementos essenciais seguintes, que constituem no seu conjunto um modelo hipotético/indutivo-dedutivo[4-5]:

1. Caracterização – o arranque do processo implica o reconhecimento de um problema que é apenas constatável depois de analisados dados observáveis disponíveis.
2. Hipótese – formação de uma conjectura baseada nos dados observáveis que possa constituir uma explicação para o fenómeno sob escrutínio; geralmente, este processo implica a identificação de padrões presentes nos dados analisados.
3. Previsão – a partir da teoria construída em 2, deduzem-se as possíveis consequências da aplicação da Hipótese.
4. Teste – procedimento que permite testar a Hipótese formulada, através da verificação das consequências previstas; tal como no passo 1, este processo implica a recolha de dados empíricos observáveis, e o seu objectivo deve passar pela procura de dados que provem a inadequação das consequências, ou seja a busca da contradição de 3, e não pelo erro lógico de apenas procurar demonstrar 3 como prova directa de 2.

Tabela 1.1 Cronologia resumida dos principais marcos no desenvolvimento do método científico[2].

• c. 1600 AC	Um texto médico Egípcio, o <i>papiro Edwin Smith</i> , classifica os componentes seguintes do processo de tratamento de doenças: exame, diagnóstico, tratamento e prognóstico, que revelam uma semelhança nítida com uma metodologia empírica básica.
• c. 400 AC	Na China, Mozi (c. 470 AC - c. 391 AC) e a Escola dos Nomes, advogam a utilização dos Sentidos para a observação do mundo.
• c. 400 AC	Demócrito (c. 460 AC - c. 370 AC) defende o raciocínio indutivo como um processo de análise das causas das percepções sensoriais, para a obtenção de conclusões acerca do mundo exterior.
• c. 320 AC	Surgem os primeiros documentos abrangentes onde se categoriza e subdivide o Conhecimento. A classificação devida a Aristóteles (384 AC - 322 AC) divide o Conhecimento nas áreas seguintes: Física, Poesia, Zoologia, Lógica, Retórica, Política e Biologia. Na sua obra <i>Analíticos posteriores</i> , Aristóteles estabelece o ideal da Ciência como a demonstração necessária a partir de axiomas tidos como certos.
• c. 300 AC	Os <i>Elementos</i> de Euclides (fl. 300 AC) tratam a geometria como um sistema de teoremas que adveem logicamente de axiomas tidos como certos.
• c. 200 AC	Primeira Biblioteca catalogada – Biblioteca de Alexandria.
• c. 800 DC	Um esboço do método experimental emerge entre químicos muçulmanos, através de Geber (c. 721 - c. 815), que introduz o conceito de Experiência Controlada. Por outro lado, em outras áreas do conhecimento (Filosofia Islâmica, Teologia, Leis e Ciência do Hadiz) introduzem-se a Citação, Escrutínio pelos Pares e a Discussão Aberta para o desenvolvimento do Consenso.
• 1021	O cientista e físico iraquiano e muçulmano Alhazen (965 - c. 1039) introduz o método experimental, combinando Observações, Experiências e Discussões Racionais no seu <i>Tratado de Óptica</i> , para demonstração científica da teoria intromissiva da visão, em contradição com a teoria visual emissiva defendida por Ptolomeu (c. 90 - c. 168) e Euclides.
• c. 1025	O cientista persa, Abū Rayhān al-Bīrūnī, (973-1048) desenvolve os primeiros métodos experimentais nas áreas de Mineralogia e Mecânica, e é um dos primeiros a conduzir experiências elaboradas no campo dos fenómenos Astronómicos.
• 1025	No <i>Cânone da Medicina</i> , Avicena (c. 980-1037) descreve os métodos de Concordância, Diferença e Variação concomitante, como factores críticos para o desenvolvimento da lógica indutiva e do método científico.

Tabela 1.1 (Cont.)

• 1027	No <i>Livros das Curas</i> , Avicena (c. 980-1037) critica o método Aristotélico de Indução, argumentando que este “não conduz às premissas exactas, absolutas e universais a que promete conduzir”. Em alternativa, declara a Observação e a Experimentação como os meios para o inquérito científico.
• 1220-1235	Robert Grosseteste (c. 1175-1253), um escolástico inglês, filósofo, teólogo e Bispo de Lincoln, publica os seus <i>Comentários Aristotélicos</i> , que definem as bases para os “métodos correctos da Ciência”.
• 1265	Roger Bacon (c. 1214-1294) um monge inglês, descreve um Método Científico, inspirado nos trabalhos de Grosseteste, baseado num ciclo iterativo de Observação, Hipótese e Experimentação, monitorizado por uma necessária verificação independente. Para tal, registou as suas experiências de forma pormenorizada, para que outros as pudessem reproduzir e verificar os seus resultados de um modo independente.
• 1327	O Princípio da Parcimónia ou <i>Ockham's razor</i> é claramente formulado por William of Ockham (c. 1288 - c. 1348).
• 1403	É publicada a primeira Enciclopédia de contribuições: <i>Yongle Encyclopedia</i> .
• 1590	Introdução de Experiências Controladas por Francis Bacon (1561-1626).
• 1595	Invenção do Microscópio na Holanda.
• 1600	Primeiro Laboratório dedicado.
• 1608	Invenção do Telescópio na Holanda.
• 1620	Publicação do <i>Novum Organum</i> por Francis Bacon (1561-1626).
• 1637	Primeiro Método Científico enunciado por René Descartes (1596-1650).
• 1638	Publicação do <i>Discorsi e dimostrazioni matematiche, intorno a due nuove scienze</i> , de Galileu (1564-1642), que contém duas Experiências Mentais idealizadas com o objectivo de contrariar teorias físicas existentes, através da demonstração de que estas levam a consequências contraditórias.
• 1650	Fundada a primeira Sociedade de especialistas – Royal Society.
• 1650	Evidências experimentais estabelecidas como definidoras da Verdade (Royal Society).
• 1665	Estabelecido o princípio da Repetibilidade por Robert Boyle (1627-1691).
• 1665	Publicação de Revistas Científicas.
• 1675	Estabelecido o Escrutínio pelos Pares.
• 1687	Estabelecida a associação Hipótese/Previsão por Isaac Newton (1643-1727).
• 1739	David Hume (1711-1776) publica <i>Treatise of Human Nature</i> , onde declara a insolubilidade do problema da Indução.
• 1753	Primeira descrição de uma Experiência Controlada realizada por James Lind (1716-1794), para o desenvolvimento de uma cura para o escorbuto.
• 1812	Formulação por Hans Christian Ørsted (1777-1851) do termo Latino-Germânico <i>Gedankenexperiment</i> (lit. experiência conduzida nos pensamentos, ou Experiência Mental), apesar deste conceito já ser usado por filósofos desde a Antiguidade.
• 1815	Design Experimental Ótimo para regressão polinomial, publicado por Joseph Diaz Gergonne (1771-1859).
• 1877-1888	Charles Sanders Peirce (1839-1914) publica <i>Illustrations of the Logic of Science</i> , popularizando a tricotomia, Abdução, Dedução e Indução. Pierce introduz a aleatoriedade como base da inferência estatística.
• 1885	C. S. Peirce (1839-1914) e Joseph Jastrow (1863-1944) criam o conceito de Experiência Cega Aleatória, que se estabelecerá no domínio da Psicologia.
• 1897	Thomas Chrowder Chamberlin (1843-1928) propõe a utilização de múltiplas hipóteses no projecto de experiências (<i>Experimental Design</i>).
• 1926	Projecto Experimental Aleatório analisado e divulgado por Ronald Fisher (1890-1962) (segundo o trabalho de Peirce).
• 1934	Aplicação da Falseabilidade (ou Refutabilidade) como um critério para a avaliação de novas hipóteses, por Karl Popper (1902-1994) em <i>The Logic of Scientific Discovery</i> (segundo o trabalho de Peirce).
• 1937	Primeiro teste controlado com consideração do efeito Placebo.
• 1946	Primeira Simulação Computacional.
• 1950	Definido o conceito de Experiência Duplamente Cega.

Tabela 1.1 (Cont.)

• 1962	Meta-estudo do método científico – <i>The Structure of Scientific Revolutions</i> , de Thomas Kuhn (1922-1996).
• 1964	Modelo de Inferência Forte[6] proposto por John R. Platt (1918-1992).
• 2009	Adam[7] – Primeiro protótipo de um Cientista Robotizado capaz de executar experiências de forma independente e interpretar resultados sem interferência humana.

Assim, este modelo assume-se como a base da revolução científica. Há um milhar de anos, Alhazen (965 - c. 1039) demonstrou a importância dos passos 1 e 4, enquanto Galileu (1564-1642) em 1638 provou a importância do passo 4, também designado por Experiência. Na realidade, este modelo aplica-se com especial sucesso no campo particular das ciências experimentais (e.g., Física, Química).

Obviamente, que o principal objectivo do Método Científico consiste na eliminação de qualquer influência subjectiva na construção de estruturas de conhecimento, como o mero senso comum, extremamente permeável à interferência da experiência e dos preconceitos dos próprios actores do processo. Assim, Charles Sanders Peirce (1839-1914) define o chamado Modelo Pragmático[8], em que distingue quatro métodos possíveis para o estabelecimento e resolução de processos de dúvida, com o objectivo de obtenção de uma matriz sólida para um conhecimento. Numa gradação crescente de sucesso, o Método Científico é o quarto dos métodos enumerados, sendo descrito como o método onde o inquirido se reconhece a si próprio como falível, e efectivamente se testa, critica, corrige e aperfeiçoa continuamente.

Analisando o modelo proposto com mais pormenor, verifica-se que os passos 1 e 4 estão directamente ligados à observação, ou seja à recolha de dados do mundo físico que nos rodeia, e a sua importância reforça o carácter empírico do método. Por outro lado, os passos 2 e 3 relacionam-se principalmente com processos de raciocínio lógico. Assim, o passo 2 pode-se considerar um passo predominantemente indutivo, enquanto o passo 3 se refere a raciocínios dedutivos (ou abductivos).

A eficiência deste procedimento implica que a sua aplicação seja balizada pela verificação de pressupostos adicionais, nomeadamente no que diz respeito ao passo 4, o teste das hipóteses, que qualifica o carácter experimental do Método Científico. No entanto, a forma objectiva com que o processo experimental deve ser executado de forma a assegurar a sua credibilidade implica que certas características tenham de ser asseguradas. Nesse sentido, é essencial introduzir no processo de observação, os conceitos de:

- Controlo – corresponde à comparação dos resultados de uma experiência para uma amostra em estudo, aos obtidos utilizando uma amostra de controlo, que apenas difere em relação à primeira no que diz respeito ao efeito testado (variável independente).
- Repetibilidade – corresponde à capacidade de se realizarem as mesmas medições em condições semelhantes com uma precisão abaixo de um valor aceitável.
- Reprodutibilidade – corresponde à capacidade de se replicarem as mesmas experiências por observadores externos independentes.

A verificação destas características possibilitam a monitorização externa do próprio processo através de uma revisão ou escrutínio realizado pelos pares.

Por outro lado, o Método Científico apresenta a desvantagem de não permitir a verificação absoluta, ou seja a confirmação da “verdade” de 2. Na realidade, apenas pode demonstrar seguramente a sua falsidade. O empirismo do Método implica igualmente a sua dependência da recolha de dados necessariamente afectados por um variável nível de incerteza associada ao próprio processo de observação, e que é inevitável.

É possível afirmar que qualquer mecanismo de formulação de uma Hipótese (passo 2) implica genericamente a construção de um modelo. Assim, a Ciência pode ser definida como o processo de recolha, comparação e avaliação de modelos propostos em relação a dados observáveis. No entanto, o método científico não pode ser visto simplesmente como uma receita, já que o sucesso do inquérito científico implica igualmente inteligência, criatividade e imaginação[9]. Na realidade, consiste num ciclo interminável, que constantemente possibilita o desenvolvimento de modelos e métodos mais úteis, exactos e genéricos. Deste modo, está-se em condições de passar ao estágio seguinte: a definição do conceito de Modelo.

1.2 MODELO

Uma parte da reflexão acerca do significado de um Modelo, já foi efectuada na secção anterior, porque a própria explanação do Método Científico foi apresentada num formato que efectivamente se designou de Modelo. Desse modo, coloca-se a questão a que se tentará responder de forma sucinta na presente secção: Como se define um Modelo?

Uma pesquisa simples[10] permite constatar que existem muitos e variados tipos de modelos, ou seja a palavra “Modelo” pode ser usada para descrever conceitos que se referem a (aparentemente) campos e contextos muito diferentes. Assim, o problema que se coloca consiste em determinar o que todos estes “Modelos” têm em comum.

No sentido do estabelecimento de uma noção abrangente para o conceito de modelo, torna-se conveniente analisar numa primeira fase a etimologia da própria palavra “modelo”, a sua raiz e conseqüente origem, assim como a correspondente evolução ao longo dos séculos, das culturas e respectivas línguas. Nesse sentido importa salientar o trabalho de Favre[11] que apresenta uma reflexão muito interessante sobre, entre outros assuntos, o significado do conceito de modelo e de metamodelo, um modelo de um modelo, ou seja um modelo que permite a descodificação de um modelo.

Com esse objectivo, Favre[11] analisa a etimologia da palavra “model” (inglês moderno) e constrói o modelo da sua evolução (vd. Figura 1.2). Conclui-se que esta tem origem na palavra latina *modus*, que significa medida, através do diminutivo *modulus*, pequena medida. Adicionalmente, verifica-se que *modus* origina igualmente as palavras associadas actuais, *molde*, *módulo* e *modificação* (todas derivadas da raiz comum indo-europeia *med*). O modelo apresentado é adaptado à versão inglesa destas palavras e não é surpreendente, já que as palavras inglesas de origem latina provêm usualmente do francês. No entanto, não seria de todo uma especulação desprovida de sentido concluir que o modelo evolutivo para as palavras

correspondentes em Português (como língua latina) mostrasse uma relação mais directa com a origem latina.

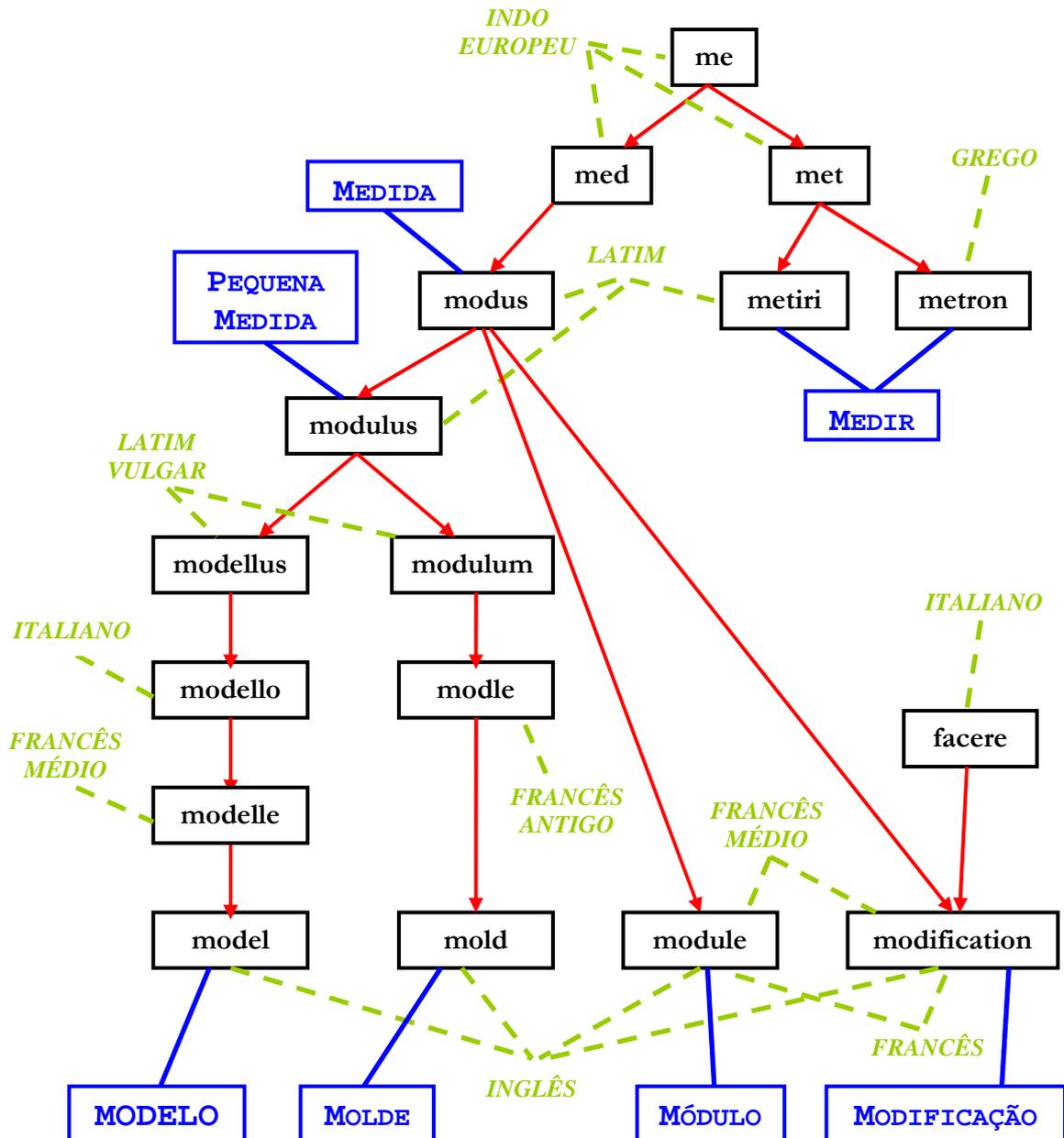


Figura 1.2 Modelo da etimologia da palavra model (inglês moderno) e palavras associadas[11].

De qualquer modo, constata-se que um modelo pode ser geralmente definido como uma representação de entidades tão distintas como abstracções, conceitos, teorias ou objectos. Assim, o conceito pode significar entidades tão distintas como um Modelo de moda (curiosamente afigura-se óbvio que a palavra moda tem a mesma raiz da palavra modelo) ou artístico; um modelo matemático; ou como uma representação gráfica computacional (Computer Graphics – CG). Devido à aparente versatilidade do conceito de Modelo, Favre[11] organiza-o em várias vertentes, a saber:

- Representação – representação de algo (objecto, etc; a uma escala diferente), de uma entidade complexa ou de um processo.

- Exemplo ou Exemplar – alguém ou algo que deve ser imitado; alguém que posa para um artista (fotógrafo, pintor, escultor).
- Tipo – tipo de um produto; categoria de objectos que se distinguem de outros através de alguma característica específica.
- Molde – uma forma ou padrão representativo.

A análise dos diferentes significados de um modelo indica que a sua natureza aparenta estar mais intimamente ligada a uma ideia de maneira, mais precisamente de maneira representativa ou maneira “correcta”, do que do conceito original de medida.

Assim, das diversas vertentes referidas, emerge a representação como característica mais geral de um modelo na sua definição mais lata. Deste modo, o modelo como representação implica a relação entre duas entidades: o representado (o modelado) que podem ser variados objectos, sistemas e conceitos, e a representação (o modelo em si). Este processo é aplicável a entidades abstractas ou concretas para representações virtuais ou reais:

- Abstracto \leftrightarrow Real; e.g. a arte como uma tentativa de representação de conceitos abstractos (emoções humanas) através da construção de objectos concretos: instalações, pintura, escultura, literatura, teatro, etc.
- Concreto \leftrightarrow Real; e.g. maquetas ou modelos de escala como uma representação de objectos através de uma mudança de escala.
- Abstracto \leftrightarrow Virtual; e.g. modelos de conduta.
- Concreto \leftrightarrow Virtual; e.g. CG como representação de objectos, cenários, seres vivos, etc, por simulação computacional.

O processo de construção do modelo (modelação) conduz usualmente a uma simplificação da entidade a representar e a uma alteração de escala e/ou de suporte que se encontra intrinsecamente ligada a essa acção simplificativa. Assim, a representação de algo implica a translação desse algo para um suporte ou domínio mais acessível a manipulação por parte do construtor do modelo (modelador).

No sentido de ilustrar estas características apresenta-se um exemplo que se tornou icónico no âmbito da Computação Gráfica 3D: o chamado bule UTAH (criado por Martin Newell em 1975) – vd. Figura 1.3.

A análise deste exemplo permite concluir que a simples representação geométrica tridimensional não é só por si suficiente. A simulação através de imagens geradas computacionalmente é um processo essencialmente visual. Deste modo, não é apenas a forma do objecto que se revela importante para que a ilusão óptica seja completa e credível¹ (mesmo no caso de um objecto relativamente simples como um bule), mas é igualmente essencial que a simulação incorpore elementos como a textura das superfícies dos objecto, a forma como é iluminado, o cenário que o rodeia, etc. Aplicando a uma definição generalizada de um modelo verifica-se então que um processo de modelação eficiente implica frequentemente a consideração de características que vão muito para além da simples representação do objecto (no sentido genérico do termo) em estudo.

¹ No contexto de uma representação mais fiel possível do objecto simulado.



Figura 1.3 Uma versão da representação 3D do bule UTAH[12].

Por outro lado, o enunciado da representação como uma simplificação conjugada com uma mudança de suporte implica que a modelação possibilite uma forma de acesso privilegiado ao próprio objecto modelado. Assim, torna-se possível manipular (e consequentemente esmiuçar, analisar e estudar) esse objecto através do controlo da sua representação. No caso do exemplo referido anteriormente tal implica que, através da manipulação da simulação 3D, o modelador tem a possibilidade de testar condições que ultrapassam o âmbito do objecto modelado (apesar de o terem como base de partida). Assim, o modelador poderá construir novos bules a partir do original, com cores, texturas ou formatos diferentes, alterar os cenários envolventes, testar outras condições de visualização, simulando diferentes tipos de radiação incidente, ou mesmo optar por manipulações mais radicais que contrariem as regras perceptíveis da realidade física observável e as propriedades do próprio objecto modelado (vd. Figura 1.4).



Figura 1.4 Manipulação de uma representação 3D do bule UTAH[13].

1.3 MODELAÇÃO

O processo de modelação pode ser considerado como um procedimento de construção de um modelo, enquanto que uma simulação pode ser definida como qualquer acção de manipulação, aplicação ou utilização desse modelo.

Deste modo, numa tentativa de ilustração do processo de modelação, considere-se um exemplo, a Batalha de Aljubarrota. A escolha deste evento particular não é de todo inocente. Por um lado, pretende-se seleccionar um tipo de modelo que aparenta situar-se nos antípodas das classes de modelos (modelos matemáticos diferenciais) que constituem o objecto de interesse do presente trabalho. No entanto, a escolha deste acontecimento deve-se igualmente ao facto deste ser de primordial importância na História de Portugal, essencial na definição dos estágios posteriores desse processo histórico e no estabelecimento da identidade nacional. Qualquer processo de modelação deste evento histórico baseia-se numa área científica não relacionada com as ciências físicas, mas com as ciências humanas, mais precisamente com a História, o que talvez o deva tornar ainda mais complexo, já que se refere ao estudo de acontecimentos/fenómenos desfasados temporalmente, portanto não directamente observáveis. Assim, os dados necessários para a consecução da tarefa têm de ser acaudalados através de fontes indirectas, possivelmente enviesadas e necessariamente incompletas.

Apesar destas limitações é possível apresentar um esquema (ou um modelo) resumido dos acontecimentos que se supõe terem ocorrido no Campo de São Jorge, perto de Aljubarrota no dia 14 de Agosto de 1385 (vd. Figura 1.5). As circunstâncias particulares do evento permitem identificar as razões que conduziram a que o próprio acontecimento se tenha desenrolado da forma e com o desfecho conhecidos. No entanto, para descodificar este modelo esquemático é essencial definir a sua linguagem de forma a torná-lo inteligível (vd. Figura 1.6). Ilustra-se assim a importância da linguagem na modelação, definida no sentido lato, como um processo sistemático de comunicação através da utilização de sons ou símbolos convencionados, que permite a leitura da representação modelada.

A escolha particular do exemplo apresentado deve-se igualmente ao facto de a montagem de miniaturas de cenas de batalha ser uma das actividades mais populares no campo da modelação de escala de acontecimentos, que se inclui no campo da construção de maquetas. Na verdade, uma maqueta relativamente fiel de uma batalha como a Batalha de Aljubarrota implicaria uma recolha extremamente alargada de informação de vertentes múltiplas.

De facto, a fidelidade da representação ao objecto modelado é directamente proporcional ao nível de pormenor, ou seja ao grau de sofisticação do próprio modelo, que obviamente depende do esforço dispendido no processo. É óbvio que a credibilidade desta sofisticação depende do julgamento de especialistas externos. É por esta razão que no campo científico, o conceito da revisão pelos pares se revela tão importante para o controlo do próprio processo.

Voltando à análise do exemplo discutido, é necessário ter em conta que qualquer evento histórico não surge de forma isolada, inserindo-se no contexto específico da sua época. Por exemplo, no caso particular em estudo, os dados exteriores a considerar poder-se-iam relacionar com o contexto internacional envolvente,

nomeadamente a História europeia do século XIV nas suas diversas vertentes (económica, social, militar), e no contexto nacional particular, ou seja a chamada Crise de 1383-85, situada no âmbito da Guerra dos Cem Anos.

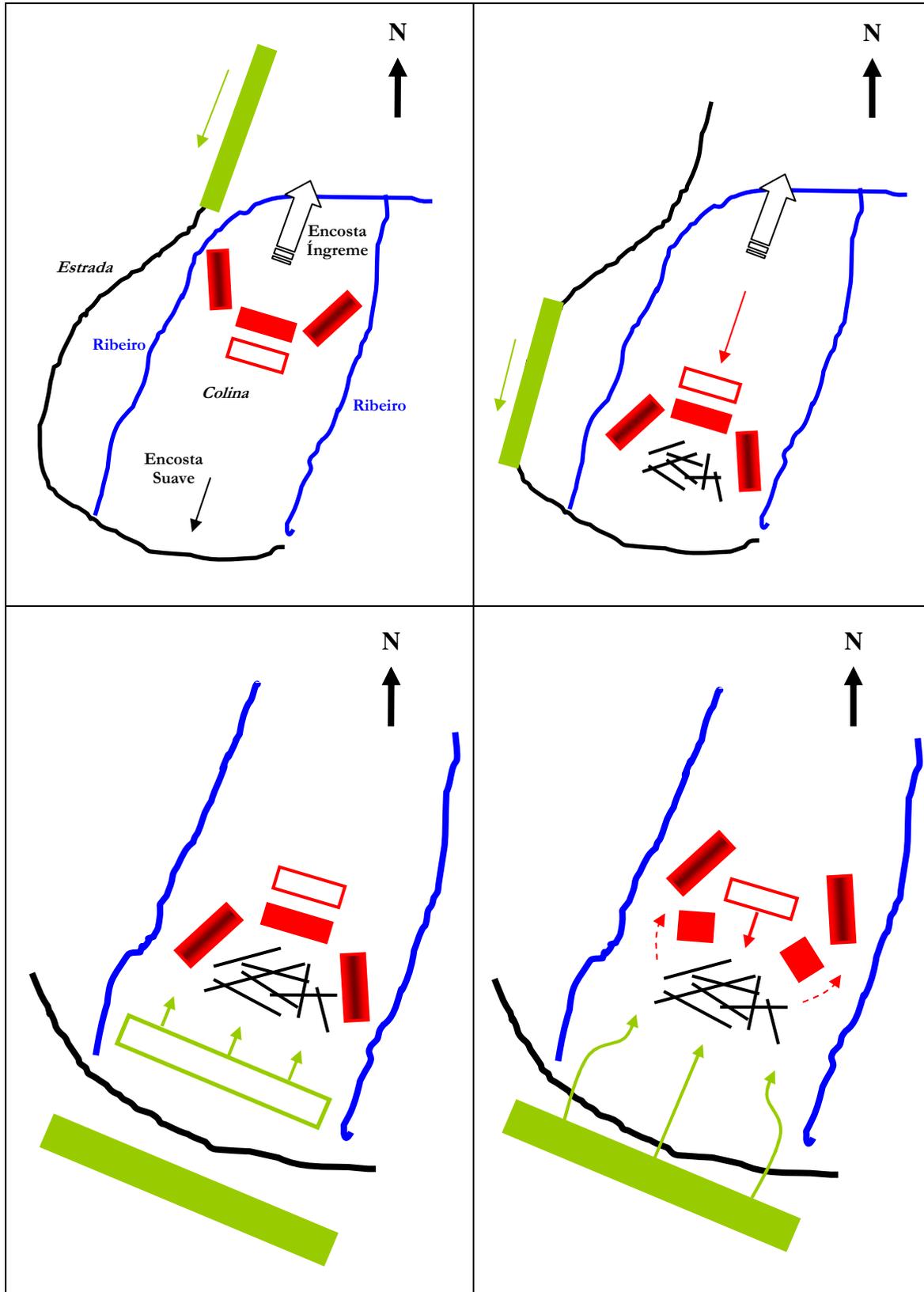


Figura 1.5 Modelo simplificado da evolução da Batalha de Aljubarrota (adaptado de [14]).

Para além destes dados históricos, a própria natureza tridimensional de uma maquete implica a consideração de informação proveniente de outras áreas, p.e. a topografia do terreno, a meteorologia naquele dia particular, etc. Todas estas circunstâncias seriam vitais para a construção de uma maquete credível do evento, conjugadas com as informações directamente relacionadas com o evento em si.

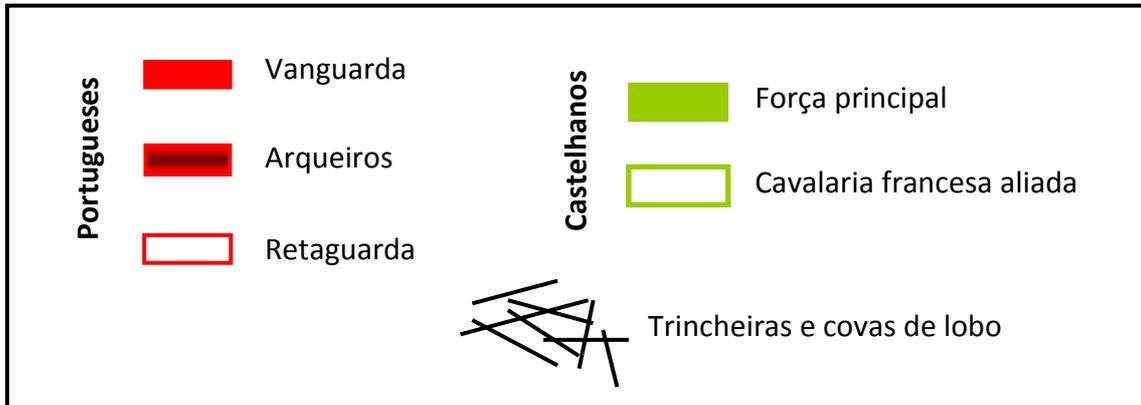


Figura 1.6 Simbologia (ou metamodelo) dos esquemas da Figura 1.5 (adaptado de [14]).

Assim, para além do próprio evento (neste caso) a representar, verifica-se que um processo credível de modelação implica igualmente a recolha de informação em áreas adjacentes ao próprio evento relacionados com o seu contexto, sem as quais a própria construção se encontra seriamente comprometida.

A manipulação do modelo construído permite um teste de possíveis alternativas realistas à própria representação construída. No caso em estudo, o carácter miniaturizado da própria maquete² possibilita a pesquisa necessariamente probabilística de diferentes alternativas para a evolução do acontecimento, dependendo da alteração dos pressupostos conhecidos. Deste modo, apesar do modelo de partida representar geralmente o objecto como a entidade real observada, a manipulação do modelo ou a sua simulação, não tem necessariamente de se limitar à realidade, mas pelo contrário pode ser uma porta de entrada para uma infinidade de opções virtuais. Esta característica extremamente interessante do conceito de modelo ilustra as suas potencialidades extrapolativas. Por outro lado, a simulação apresenta igualmente um carácter interpolativo, que nos permite inferir de uma forma informada sobre os pormenores inacessíveis do objecto modelado, através do recurso à informação conhecida directamente relacionada com esse objecto.

Um esboço da generalização do processo de modelação discutido anteriormente é apresentado no esquema da Figura 1.7.

Um problema recorrente que se coloca aquando do processo de modelação diz respeito à definição do grau de simplificação aplicável conjugada com a utilidade intrínseca do próprio modelo.

Uma solução para este dilema ligado ao balanço representatividade/esforço, pode ser a utilização do chamado princípio da parcimónia, também conhecido como *occam's razor* popularizado por William of Ockham (c. 1288 - c. 1348). Na sua formulação original, o princípio é estabelecido por[15]: “pluralitas non est ponenda sine

² Estrutura não apenas tridimensional mas igualmente dinâmica, ou seja, variável com o tempo.

necessitate” (“pluralidade não deve ser assumida sem necessidade”), mas também pode apresentar a forma, “entia non sunt multiplicanda praeter necessitatem” ou “entidades não devem ser multiplicadas para além da necessidade”. Qualquer uma das formulações anteriores conduz implicitamente à conclusão que a explicação ou estratégia mais simples tende a ser a melhor.

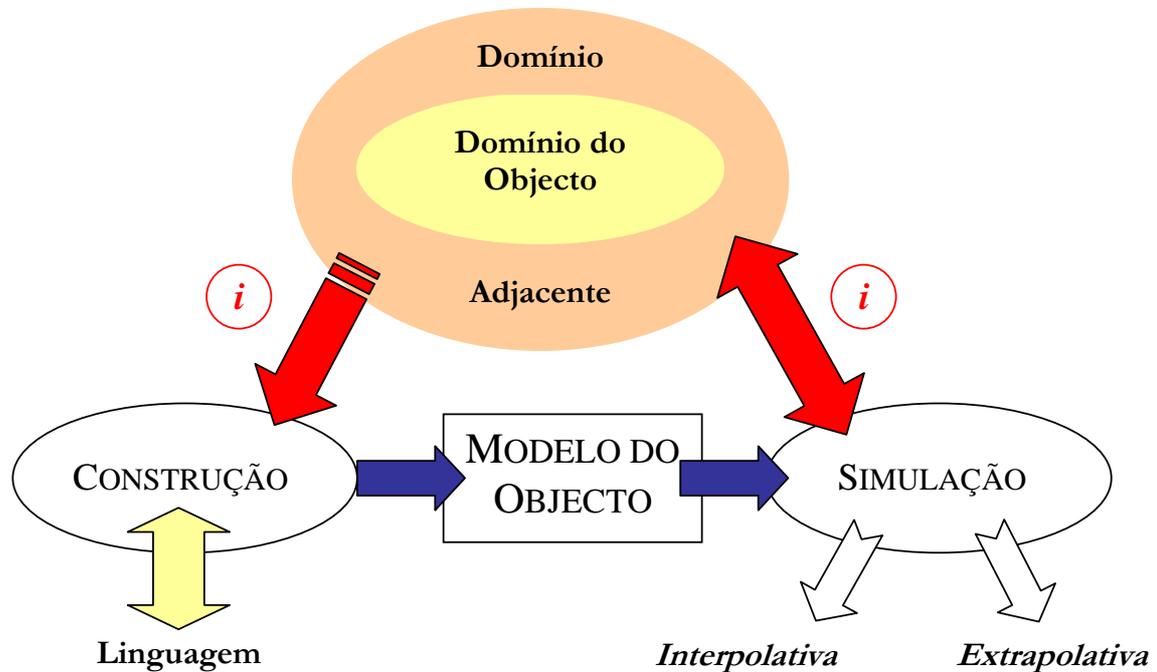


Figura 1.7 Esquema simplificado representativo do processo de modelação generalizado.

De facto, o exercício de modelação implica um investimento quer de tempo como de esforço físico ou intelectual (ou computacional, o seu substituto artificial), ou seja é um processo inevitavelmente associado a um determinado custo. Por outro lado, a construção de um modelo está naturalmente ligada à consecução de um objectivo, que pode ir desde o simples cumprimento de um desafio para satisfação pessoal, até à observância de uma finalidade académica ou teórica, ou de uma aplicação prática. Assim não é surpreendente concluir que uma modelação eficaz e útil implica, de uma forma lógica, um exercício de optimização, de balanço custo/benefício.

1.4 MODELO MATEMÁTICO

Assim, como foi referido anteriormente, a aplicação do método científico pode ser apresentada como uma forma de entendimento dos fenómenos físicos através da avaliação do seu ajuste a modelos que os possam representar adequadamente, ou seja através da modelação e posterior simulação da realidade observável. Para tal, este processo de modelação implica o estabelecimento de um sistema de comunicação entre dois domínios: o domínio do empírico, dos dados observáveis e o domínio da representação desses dados, o modelo em si. Este processo de translação entre estes dois domínios só é realizável através da definição de um conjunto coerente e convencionado de símbolos, ou seja, da definição de uma linguagem específica. Para tal, verifica-se que a linguagem matemática, como um sistema de representação

simbólica de objectos ou ideias matemáticas, se revela bastante adequada para uma representação intelectualmente acessível dos fenómenos, ou seja da sua modelação.

Um modelo matemático é antes de tudo, um modelo que utiliza linguagem matemática para a descrição de um sistema. Através de um modelo matemático, os fenómenos observáveis são representados por relações mais facilmente tratáveis entre entidades abstractas através de operações matemáticas. Deste modo, realiza-se a organização do mundo real observável e a sua consequente adaptação a padrões mais facilmente reconhecíveis e manipuláveis pelo cérebro humano.

1.4.1 ELEMENTOS CONSTITUTIVOS DE UM MODELO MATEMÁTICO

A classe específica de modelos categorizada como modelo matemático é justamente definida pela linguagem particular utilizada. Este tipo de modelos é caracterizado por possuir determinados elementos constitutivos definidos como abstrações que relacionam quantidades através de operações matemáticas convencionadas, ou seja equações matemáticas, que habitualmente contêm:

- Variáveis – símbolos que representam quantidades cujos valores podem variar no contexto do problema definido.
- Parâmetros ou constantes – símbolos representativos de quantidades cujos valores se assumem constantes no contexto de problema em análise.

Deste modo, se as relações entre as variáveis e parâmetros do modelo forem apenas do tipo algébrico, está-se em presença de um modelo algébrico. Se o sistema exhibir operadores diferenciais ou integrais em todas as equações que o compõem, então o modelo diz-se diferencial ou integral, respectivamente. No entanto, existem modelos mistos que combinam equações de diferentes tipos, e.g. um sistema que junte equações algébricas e diferenciais constitui um modelo algébrico-diferencial.

1.4.2 TIPOS DE MODELOS MATEMÁTICOS

De forma a sistematizar a discussão, é conveniente agora fazer-se referência aos diversos tipos de modelos matemáticos possíveis a às particularidades específicas que os distinguem e que definem a sua aplicabilidade. Deste modo, apresenta-se em seguida, um modelo possível de categorização, que está longe de ser exaustiva. Portanto, os modelos matemáticos podem-se classificar segundo as dicotomias:

- Linear/Não linear
- Parâmetros concentrados/distribuídos
- Estático/Dinâmico
- Determinístico/Probabilístico

Logicamente que os modelos lineares se caracterizam por ser constituídos apenas por equações lineares. A linearidade é uma propriedade importante que será tratada com mais pormenor mais adiante, mas pode-se afirmar desde já que, genericamente, implica que os termos das equações que estabelecem o modelo matemático não exibam produtos entre variáveis (ou diferenciais de variáveis) e que todos os termos sejam apenas de grau 0 ou 1 em relação a essas variáveis. Assim, uma equação que possua qualquer termo que não verifique estas especificações é classificada como não

linear e o modelo a que pertença será necessariamente não linear. Esta distinção é especialmente importante já que se refere directamente à estrutura das relações entre as variáveis que definem o estado do sistema e os parâmetros do modelo quanto à sua complexidade relativa, que é consequentemente mais elevada no caso não linear.

Se os fenómenos definidos no espaço-tempo contínuo (à escala macroscópica) exibirem variações sobre as dimensões que definem o domínio, implicando uma variação do estado do sistema ao longo desse domínio, o modelo que os represente é categorizado como sendo de parâmetros distribuídos ou heterogéneo. Num modelo de parâmetros concentrados a simulação de um fenómeno não implica a consideração de gradientes espaciais, ou seja o estado é consistente ao longo do domínio e o modelo diz-se homogéneo.

Por outro lado, se ocorre variação de estado na direcção temporal, representada por termos de acumulação, necessariamente do tipo diferencial, tem-se um modelo dinâmico ou evolutivo. Obviamente que quando tal não se verifica, e o estado do sistema não se altera com o tempo, diz-se que o modelo é estático ou estacionário.

Quando se introduz a incerteza associada aos parâmetros e aos dados de base que constituem o núcleo da construção do modelo, obtém-se um modelo probabilístico. Neste caso, são consideradas cargas aleatórias e o estado do sistema não é definido por valores determinados, mas por distribuições de probabilidade. No caso contrário, se o estado do sistema for unicamente determinado pelos valores dos parâmetros e dos estados anteriores, o modelo é definido como determinístico.

Finalmente, destaca-se o conceito de modelo conservativo como o resultado de um processo de modelação baseado na conservação de extensidades (momento, massa ou densidade, energia) no interior de volumes predefinidos de controlo no espaço tridimensional, delimitados por fronteiras definidas por superfícies de interface.

Outra forma de caracterização importante diz respeito ao tipo de recursos utilizados no processo de construção do modelo. Através desta classificação, um modelo pode ser denominado de:

- Modelo empírico – modelos construídos a partir de dados brutos observáveis, sem qualquer manipulação teórica prévia.
- Modelo teórico – modelos desenvolvidos através da aplicação de princípios científicos (físicos, químicos, etc), ou seja de abstrações teóricas previamente testadas e validadas, que, no fundo, são igualmente modelos já estabelecidos.
- Modelo semi-empírico – modelos mistos que representam um compromisso entre os dois conceitos anteriores, no sentido do aproveitamento das vantagens de cada abordagem em domínios distintos do modelo global.

Salientam-se igualmente duas outras classificações importantes realizadas ao nível da:

- Homegeneidade – num modelo heterogéneo, o domínio tem de ser dividido em diversas fases distintas, ao contrário do modelo homogéneo em que apenas se distingue uma fase (e.g. as fases definidas podem estar relacionadas com diferentes estados da matéria).
- Continuidade – modelo contínuo é um modelo constituído apenas por variáveis contínuas, enquanto que num modelo discreto existe pelo menos uma variável

discreta; por exemplo, é trivial deparar-se com variáveis que representam entidades que só tem significado físico se assumirem valores inteiros (e.g. número de andares de uma coluna de destilação, número de estágios de uma sequência de processos batch, etc).

Tem-se observado recentemente um avolumar da importância da modelação matemática no contexto da investigação científica. Este facto é especialmente relevante devido ao crescimento exponencial da capacidade de cálculo proporcionada pela revolução informática dos últimos 30 anos. Deste modo, é agora possível resolver, mesmo que de uma forma aproximada, modelos que ainda há poucas décadas implicariam um esforço de cálculo proibitivo com os recursos disponíveis. Deste modo, o advento da era computacional abriu caminho para o desenvolvimento de modelos de complexidade crescente.

1.4.3 MODELAÇÃO MATEMÁTICA DE PROCESSOS QUÍMICOS

Inicialmente pretende-se reflectir resumidamente sobre a noção de Tecnologia e a sua relação com o conceito previamente discutido de Ciência. Assim, sabe-se que, por definição:

- Ciência (do Latim *scientia*, que significa “conhecimento”) é, no seu sentido mais lato, qualquer sistema baseado no conhecimento ou prática prescritiva capaz de resultar numa previsão ou num resultado previsível[16].
- Tecnologia (do Grego *technología* (τεχνολογία) – *téchnē* (τέχνη), “arte”, “capacidade” ou “competência” e *-logía* (-λογία), o estudo de algo ou o ramo de conhecimento de uma disciplina) corresponde à capacidade dos humanos (ou de outros animais) de desenvolvimento e utilização de ferramentas ou competências, e a forma como estas afectam a sua aptidão para controlarem ou se adaptarem ao seu meio ambiente[17].

Afigura-se óbvio que ambos os conceitos referidos anteriormente se relacionam com a noção de conhecimento. No entanto, tal não implica que estejam obrigatoriamente relacionados entre si. Na verdade, a organização das sociedades tecnológicas modernas poderia fazer pensar que a Tecnologia seria essencialmente uma aplicação prática do conhecimento científico e, deste modo, estaria dependente deste. No entanto, uma análise à História do Homo sapiens sapiens permite concluir que uma das razões que conduziram ao seu inegável sucesso se deve à sua natural apetência para a adaptação e manipulação do seu meio envolvente ou seja, dada a própria definição, um especial talento para o desenvolvimento e aplicação de Tecnologia. De facto, o Homem constrói Tecnologia desde praticamente o seu surgimento como subespécie específica (há 195 000 anos atrás), muito antes do desenvolvimento formal do conceito de Ciência (e.g. descoberta e utilização do fogo, da roda, da metalurgia, etc). Assim, verifica-se que o fabrico de Tecnologia, a construção de conhecimento tecnológico numa determinada área, é perfeitamente possível, eficaz e útil, sem que o correspondente conhecimento científico se encontre solidificado. Assim, a produção de Tecnologia depende apenas do primeiro passo do modelo apresentado para o Método Científico: a caracterização dependente da observação e da experiência, ou seja de experimentação informal, não sistematizada nem controlada. Este facto continua a ser realidade, mesmo na contemporaneidade. Um exemplo paradigmático

relaciona-se com a descoberta dos Raios-X, oficialmente atribuída a Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923) em Novembro de 1895, cujas propriedades se revelaram imediatamente óbvias para uso no diagnóstico médico (vd. Figura 1.8). A primeira aplicação nesse âmbito foi realizada menos de três meses após a sua detecção fortuita, antes mesmo de se estabelecer um modelo cientificamente aceitável para a representação da própria natureza dos Raios-X (como indica o seu próprio nome)[18]. Deste modo, pode-se concluir que o processo científico pode ser muito importante na evolução (ou aceleração da evolução) da construção de Tecnologia, mas tal não significa que tenha de ser a sua condição necessária.

O profissional que ao longo dos tempos se especializou no desenvolvimento de Tecnologia é geralmente designado por Engenheiro (do Latim *ingenium*, que significa engenho). Genericamente um engenheiro moderno dedica-se ao estudo, desenvolvimento, projecto, construção, operação e controlo de sistemas tecnológicos. Deste modo, é possível afirmar que todos os engenheiros aplicam a Matemática, a Física (ou o conhecimento científico no geral) e engenho na resolução de problemas técnicos de uma forma segura e económica.



Figura 1.8 Primeira radiografia “médica” de Wilhelm Röntgen, da mão da sua esposa, tirada em 22 de Dezembro de 1895[18].

De entre os 4 ramos clássicos da engenharia (os “big 4”): engenharia electrotécnica (ou eléctrica), engenharia civil (ou da construção), engenharia mecânica (ou de máquinas) e engenharia química; que se debruçam sobre o estudo dos sistemas eléctricos, sistemas de construção, sistemas mecânicos e sistemas químicos, respectivamente, importa agora salientar o ramo específico da Engenharia Química.

O surgimento da profissão de engenheiro químico é essencialmente um processo que ocorre na viragem do século XIX para o século XX, num contexto anglo-saxão: da Grã-Bretanha para os Estados Unidos da América. Neste período, verifica-se o aparecimento de um novo profissional (que é designado por engenheiro químico), um especialista que se dedica fundamentalmente ao problema da transição entre os

processos laboratoriais e a produção industrial em grande escala, sob uma perspectiva obrigatoriamente económica. Tal facto surge como resposta à necessidade que advém da crescente complexidade dos processos químicos industriais, nomeadamente devida à generalização de processos contínuos.

No entanto, nem todas as potências industriais adoptaram esta solução. De facto, a resposta alemã para o scale-up industrial envolveu a cooperação entre químicos e engenheiros mecânicos, para a realização da tarefa de transferência do conhecimento químico do laboratório para a indústria. Acreditavam que esta estratégia possibilitava que os investigadores laboratoriais pudessem permanecer criativos, libertos das condicionantes das práticas de engenharia. Deste modo, a profissão de engenheiro químico apenas surge na Alemanha na década de 1960.

Salientam-se algumas personalidades importantes no processo de construção da profissão de engenheiro químico, a saber[19]:

- George E. Davis (1850-1906): considerado o pioneiro na introdução do conceito de Engenharia Química; em 1887 apresenta uma série de 12 palestras sobre a operação de processos químicos na Manchester Technical School; em 1901 publica o "Handbook of Chemical Engineering"; Davis foi o maior responsável pela aplicação do termo "Engenharia Química" à nova profissão emergente, e contribuiu de forma significativa na definição do papel do engenheiro químico actual.
- Lewis Mills Norton (1855-1893): professor de química orgânica e industrial no Massachusetts Institute of Technology (MIT); a partir de 1888, foi responsável pelo primeiro curso de quatro anos em Engenharia Química intitulado "Course X".
- William Page Bryant: foi em 1891, o primeiro graduado de sete candidatos do Curso X, tornando-se o primeiro engenheiro químico formal do mundo.
- Arthur D. Little (1863-1935): introduziu o termo "operação unitária" em 1915 e liderou o "AIChE's Committee on Chemical Engineering Education", que adoptou e enfatizou este conceito, para além de ter procurado acreditar e normalizar os programas dos cursos de formação em Engenharia Química.

Assim, considerando a definição anterior de engenheiro e a história resumida do surgimento da engenharia química, conclui-se que um engenheiro químico se dedica primariamente ao estudo, desenvolvimento, projecto, construção, operação e controlo de sistemas químicos, nomeadamente sistemas químicos industriais ou processos químicos.

Deste modo, convém agora concentrar a atenção no papel da modelação matemática no campo específico dos processos químicos. Mas, como se define um processo químico?

Numa perspectiva rigorosa um processo químico pode ser definido como um sistema onde ocorre pelo menos uma transformação química, ou seja uma modificação dos componentes presentes. No entanto, numa óptica de "engenharia", considera-se que um processo químico representa qualquer unidade que se incorpora num processo de síntese industrial, o que inclui sistemas meramente físicos. Deste modo, um processo

químico na sua definição mais lata, associada ao conceito de operação unitária, consiste numa entidade física identificável e separável, que se apresenta como um passo bem definido numa sequência de estágios inter-relacionados organizáveis num esquema ou flowsheet industrial. Assim, um processo químico assume-se apenas como um tipo específico de entidade física observável, que, como qualquer outra realidade, pode ser objecto de modelação matemática.

De facto, sendo um modelo matemático uma abstracção matemática de uma realidade, verifica-se no caso específico dos processos químicos que os modelos matemáticos podem ser extremamente úteis, para, nomeadamente[20]:

- Possibilitar um melhor entendimento de processos existentes;
- Facultar o projecto e a simulação de novos processos;
- Permitir a optimização das condições operatórias processuais;
- Proporcionar o projecto de estratégias de controlo de processos;
- Constituir uma ferramenta para a formação de operadores.

Devido aos fenómenos característicos envolvidos no âmbito da modelação teórica de processos químicos, verifica-se que esta envolve a conjugação de diversos tipos de áreas de estudo como: transferência de massa, transferência de energia, mecânica de fluidos, termodinâmica, cinética química, síntese orgânica e inorgânica, tecnologia de sólidos, bioquímica (numa tentativa de aproveitamento do potencial das células vivas como microbioreactores geneticamente programáveis), etc; para além das considerações económicas sempre presentes no trabalho de Engenharia.

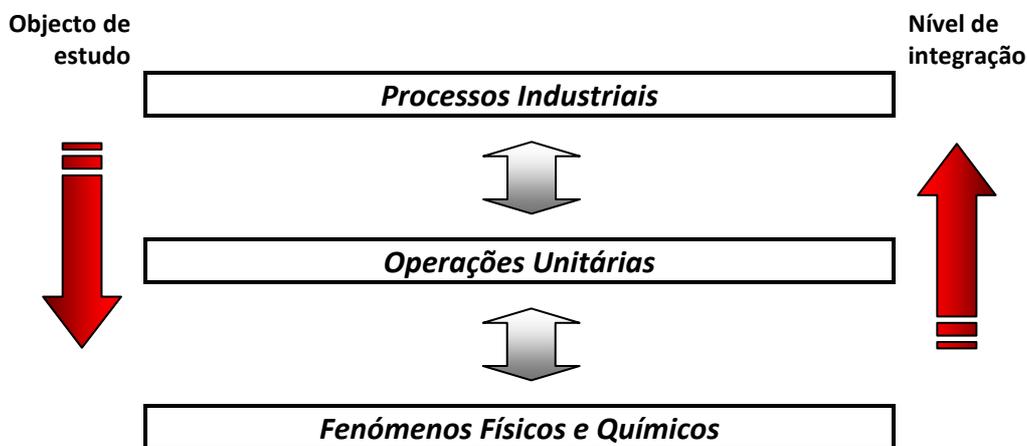


Figura 1.9 Esquema que ilustra a evolução dos diferentes paradigmas relacionados com os níveis de conhecimento em Engenharia Química, quer em termos de objectos de estudo como de unidades de integração.

No entanto, a complexidade do procedimento está directamente relacionada com o grau de interdependência ou de integração entre as diversas operações unitárias presentes no processo industrial (ou mesmo entre processos industriais adjacentes), especialmente importante para processos contínuos, já que a integração (mássica ou energética) se relaciona directamente com a rede de correntes que interliga as diferentes unidades, e que se constituem como as suas entradas e saídas. Ao longo do tempo constata-se um aumento considerável do grau e da escala de integração das unidades industriais, por razões quer económicas (devidas ao aumento do custo da

energia a partir dos anos 70) como ambientais. Curiosamente, observa-se também uma evolução contrária correspondente a uma diminuição de escala dos fenómenos modelados (vd. Figura 1.9), desde o nível mais geral do processo industrial como um todo, até ao nível fundamental das próprias partículas, definidas à escala nanométrica em domínios descontínuos.

1.5 MODELO MATEMÁTICO DIFERENCIAL

No campo dos modelos matemáticos é possível particularizar o objecto de interesse para problemas definidos sobre domínios contínuos espaço-temporais, onde os fenómenos não são apenas caracterizados pelas variáveis que definem o seu estado, mas também pelo gradientes dessas variáveis relativamente às coordenadas independentes. Neste último caso, é necessário recorrer a operadores diferenciais (ou integrais) definidos sobre espaços uni- ou multivariável para construir as equações constitutivas do modelo, que deste modo, são designadas por Equações Diferenciais Ordinárias (Ordinary Differential Equations – ODE) ou Parciais (Partial Differential Equations – PDE), respectivamente.

Para ilustrar a necessidade da adopção de um operador com as propriedades do operador diferencial em análise e na modelação matemática, considere-se o seguinte problema[21]:

“Um tanque contém 50 kg de A e 50 kg de B. O líquido A é introduzido no tanque com um caudal de 5 kg/min. A solução é retirada do tanque ao mesmo caudal. Qual o volume de líquido A que restará no tanque após 1 h.”

Para obter a solução deste problema, tem-se de levar em conta que o conteúdo mássico ϕ_A (% w/w) de A na solução varia com o tempo. Deste modo, a resolução deste problema implica a obtenção da relação $\phi_A(t)$. Para tal, usa-se o habitual princípio da conservação de massa de A aplicado ao presente problema conduz à equação:

$$\left[\begin{array}{l} \text{massa de A presente num} \\ \text{determinado instante} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{massa de A presente num} \\ \text{instante prévio} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{massa de A que sai entre} \\ \text{os dois instantes} \end{array} \right] \quad (1.1)$$

Note-se que o problema enunciado não considera qualquer entrada de A no sistema. O último termo da equação não é conhecido. Este problema pode ser ultrapassado se se assumir que o intervalo de tempo entre os dois instantes é suficientemente pequeno para que a percentagem de A se possa razoavelmente considerar invariante. Assim, o balanço para o intervalo de tempo Δt entre os instantes arbitrários t_0 e $t_0 + \Delta t$ torna-se,

$$\phi_A(t_0 + \Delta t)m_T = \phi_A(t_0)m_T - \phi_A(t_0)F\Delta t, \quad (1.2)$$

em que, m_T – massa total de solução presente no tanque – constante porque os caudais mássicos das correntes de entrada e de saída são iguais (100 kg); F – caudal total da corrente de saída (5 kg/min). Substituindo na equação 1.2 obtém-se,

$$\phi_A(t_0 + \Delta t) = \phi_A(t_0) - \phi_A(t_0) \left(\frac{\Delta t}{20} \right). \quad (1.3)$$

Manipulando a expressão anterior tem-se,

$$\frac{\phi_A(t_0 + \Delta t) - \phi_A(t_0)}{\Delta t} = -\frac{\phi_A(t_0)}{20} \tag{1.4}$$

Nesta equação, o termo da esquerda corresponde à taxa de variação média de ϕ_A , em relação a t . No entanto, a relação é apenas uma aproximação que tende para o valor exacto quando $\Delta t \rightarrow 0$. Assim,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\phi_A(t_0 + \Delta t) - \phi_A(t_0)}{\Delta t} = -\frac{\phi_A(t_0)}{20} \tag{1.5}$$

No limite, obtém-se o operador diferencial que caracteriza a equação diferencial que representa o modelo matemático do problema enunciado e é válida para qualquer $t_0 = t > 0$:

$$\frac{d\phi_A(t)}{dt} = -\frac{\phi_A(t)}{20} \tag{1.6}$$

Assim, considerando a condição inicial $\phi_A(t=0) = 50/(50+50) = 0.5$, a integração da equação 1.6 desde $t = 0$ até um tempo genérico t assegura a dedução da expressão geral para a função solução $\phi_A(t)$. Deste modo, torna-se trivial a obtenção da resposta para a pergunta enunciada através do cálculo de $\phi_A(t=60 \text{ min})$.

Tabela 1.2 Sistemas coordenados cartesiano, cilíndrico e esférico[22].

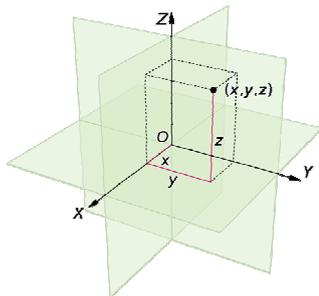
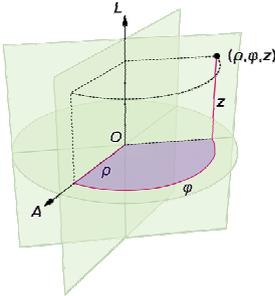
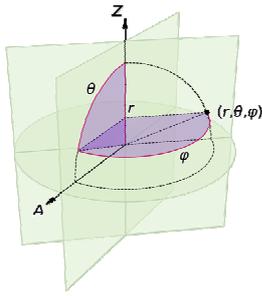
Cartesiano	Cilíndrico	Esférico
		

Tabela 1.3 Operadores diferenciais num sistema coordenado cartesiano tridimensional (em \mathbb{R}^3) para o escalar $F=f(x,y,z)$ ou o vector de funções $\mathbf{F}=[F_x, F_y, F_z]$.

Operador	Símbolo	Tipo de Operado	Tipo	Definição
Gradiente	∇	escalar	vector	$\nabla F = \mathbf{i} \frac{\partial F}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial F}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial F}{\partial z}$
Divergência	$\nabla \cdot$	vector	escalar	$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$
Rotacional	$\nabla \times$	vector	vector	$\nabla \times \mathbf{F} = \mathbf{i} \left(\frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \right) + \mathbf{j} \left(\frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \right) + \mathbf{k} \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right)$

Deste modo, a caracterização de um modelo dito diferencial depende necessariamente da presença de um operador diferencial. Considere-se então o caso mais geral de operadores diferenciais gerados sobre domínios espaciais tridimensionais. Assim, os diferentes operadores diferenciais de primeira ordem deste

tipo são resumidos na Tabela 1.3, definidos sobre os sistemas de referenciais multidimensionais mais comumente utilizados na modelação matemática em Engenharia (vd. Tabela 1.2).

O operador diferencial parcial de primeira ordem $\partial/\partial n$ aplicado a uma função multidimensional F dependente de várias variáveis, incluindo n , pode também ser notado por subscritos, como F_n . Em contrapartida, no caso de diferenciais totais, ou derivadas de funções unidimensionais, a notação para o operador corresponde a d/dn . Adicionalmente, operadores diferenciais parciais ou totais de ordem i são notados como $\partial^i/\partial n^i$ e d^i/dn^i , respectivamente. Assim, a definição dos componentes da divergência de um vector ($\nabla \cdot$) e do gradiente de um escalar (∇), nos diversos sistemas coordenados cartesiano, cilíndrico e esférico, descritos na Tabela 1.2, são apresentados nas Tabelas 1.4 e 1.5.

Tabela 1.4 Divergência de um vector ($\nabla \cdot$)[23].

Sistema coordenado	Componentes
Cartesiano	$\begin{bmatrix} [\nabla_x] = \frac{\partial}{\partial x} \\ [\nabla_y] = \frac{\partial}{\partial y} \\ [\nabla_z] = \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$
Cilíndrico	$\begin{bmatrix} [\nabla_\rho] = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho) \\ [\nabla_\varphi] = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ [\nabla_z] = \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$
Esférico	$\begin{bmatrix} [\nabla_r] = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2) \\ [\nabla_\theta] = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta) \\ [\nabla_\varphi] = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{bmatrix}$

No entanto, é frequente deparar-se com um operador de segunda ordem, que representa a combinação dos operadores precedentes, i.e., a divergência do gradiente de um escalar. Este operador cuja notação corresponde a $\nabla \cdot \nabla$ é designado por Laplaciano e a sua definição é resumida na Tabela 1.6.

Um exemplo representativo de um modelo matemático diferencial corresponde às chamadas Equações de Maxwell, um conjunto de quatro PDE's definidas no tempo e num domínio espacial tridimensional e que relacionam os campos eléctrico e magnético com as suas fontes, as densidades de carga e de corrente. Este modelo, denominado em honra de James Clerk Maxwell (1831-1879), em conjunto com a Lei da Força de Lorentz, constitui as leis básicas do Electromagnetismo Clássico. As equações expressam como: cargas eléctricas produzem campos eléctricos (Lei de Gauss), a corrente eléctrica produz um campo magnético (Lei de Ampère), e variações de campo

magnético produzem campos eléctricos (Lei da indução de Faraday). Uma formulação possível do conjunto das Equações de Maxwell é apresentada na Tabela 1.7.

Tabela 1.5 Gradiente de um escalar (∇)[23].

Sistema coordenado	Componentes
Cartesiano	$\begin{bmatrix} [\nabla_x] = \frac{\partial}{\partial x} \\ [\nabla_y] = \frac{\partial}{\partial y} \\ [\nabla_z] = \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$
Cilíndrico	$\begin{bmatrix} [\nabla_\rho] = \frac{\partial}{\partial \rho} \\ [\nabla_\varphi] = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ [\nabla_z] = \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$
Esférico	$\begin{bmatrix} [\nabla_r] = \frac{\partial}{\partial r} \\ [\nabla_\theta] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ [\nabla_\varphi] = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{bmatrix}$

Tabela 1.6 Definição de Laplaciano ($\nabla \cdot \nabla$)[23].

Sistema coordenado	Definição do operador
Cartesiano	$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
Cilíndrico	$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
Esférico	$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

Outra equação diferencial relevante na modelação de processos químicos é a equação da continuidade, que na sua forma geral tem a forma:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} = s, \tag{1.7}$$

onde, φ representa uma quantidade arbitrária; \mathbf{v} é uma função vectorial que descreve o fluxo de φ e s significa a taxa de remoção (ou geração) de φ . Esta equação pode ser usada para a dedução de equação da continuidade, e.g., as equações de Navier-Stokes ou a equação da advecção. Uma aplicação específica ao caso concreto da equação da continuidade que enuncia o princípio básico da conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \tag{1.8}$$

onde, \mathbf{v} – vector de velocidades de um fluido, ρ – densidade de um fluido; é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (\mathbf{i} v_x \rho + \mathbf{j} v_y \rho + \mathbf{k} v_z \rho) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_x \rho) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y \rho) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z \rho) = 0 \quad (1.9)$$

Tabela 1.7 Formulação das equações de Maxwell em termos de carga e corrente livre, na forma diferencial[24].

Lei de Gauss	$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_f$
Lei de Gauss (magnetismo)	$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
Equação de Maxwell-Faraday (Lei da indução de Faraday)	$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
Lei de Ampère (correção de Maxwell)	$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$

Nomenclatura:

- E** Campo eléctrico;
- B** Campo magnético;
- D** Indução eléctrica;
- H** Campo magnético auxiliar;
- ρ_f Densidade de carga livre;
- \mathbf{J}_f Densidade de corrente livre.

Um exemplo adicional importante corresponde às equações de Navier-Stokes, nomeadas em honra de Claude-Louis Navier (1785-1836) e George Gabriel Stokes (1819-1903) que descrevem o escoamento de fluidos. A sua dedução é baseada no tratamento do fluido como um continuum, e na aplicação da segunda lei de Newton ao movimento de fluidos, conjugada com a assunção que a tensão (stress) do fluido é definida pela soma de um termo viscoso difusivo (proporcional ao gradiente de velocidades) e um termo de pressão[25]. Considerando a conservação de momento num elemento de volume arbitrário (vd. Figura 1.10), num referencial inercial, a forma geral da equação para o movimento do fluido é a seguinte,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f}, \quad (1.10)$$

em que, \mathbf{v} descreve a velocidade do fluxo, ρ a densidade do fluido, p a pressão, \mathbf{T} o tensor de stress e \mathbf{f} as forças exteriores por unidade de volume.

A equação de Navier-Stokes para o balanço de momento é geralmente associada a outros balanços (massa e energia), baseados nos respectivos casos particulares na equação da continuidade.

A aplicação a um elemento de volume genérico de geometria arbitrária num espaço tridimensional do conceito de conservação de massa conduz à expressão geral.

$$\left[\begin{array}{c} \text{taxa de acumulação} \\ \text{de massa} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{taxa de entrada} \\ \text{de massa} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{taxa de saída} \\ \text{de massa} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{taxa de massa} \\ \text{gerada ou consumida} \end{array} \right] \quad (1.11)$$

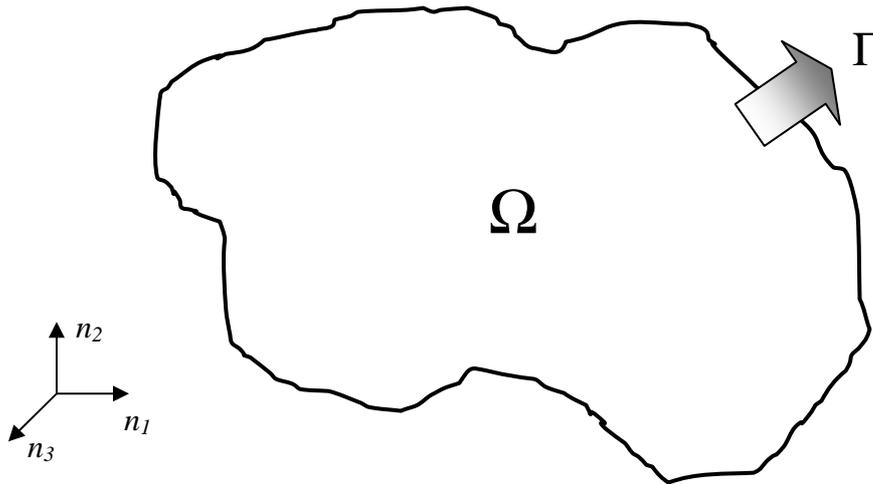


Figura 1.10 Representação de elemento de volume genérico definido num espaço tridimensional.

No caso da energia o raciocínio é equivalente:

$$\left[\begin{array}{c} \text{taxa de acumulação} \\ \text{de energia} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{taxa de entrada} \\ \text{de energia} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{taxa de saída} \\ \text{de energia} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{taxa de energia} \\ \text{gerada ou consumida} \end{array} \right] \quad (1.12)$$

Os termos de entrada e de saída de massa e energia englobam todos os mecanismos de transporte relevantes e incluem as contribuições correspondentes às trocas de massa e energia com o exterior. De seguida, dois processos clássicos em Engenharia Química exemplificam a aplicação das equações anteriores.

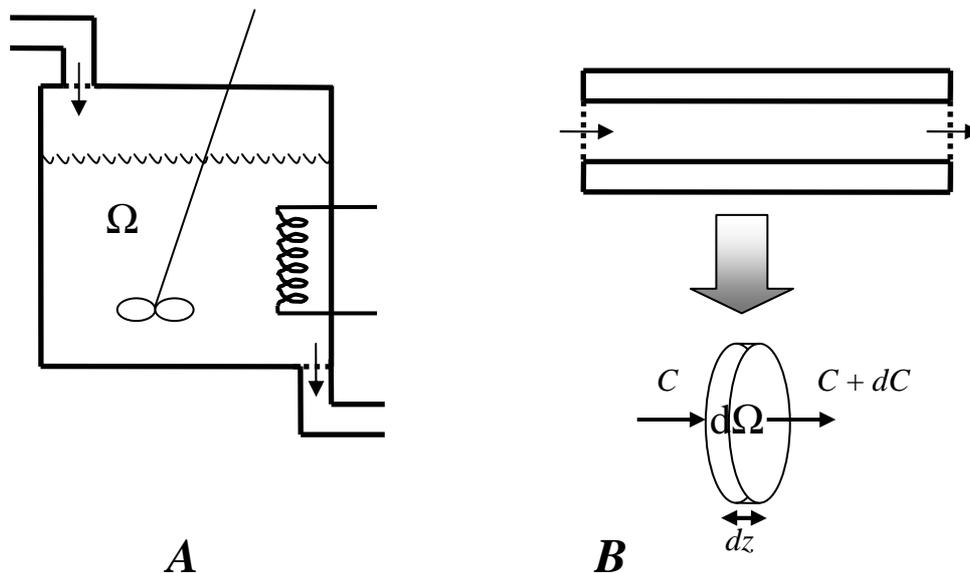


Figura 1.11 Exemplos para construção de modelos: A – tanque perfeitamente agitado com aquecimento, B – escoamento pistão.

Deste modo, considerem-se dois exemplos não reaccionais simples e tradicionalmente utilizados para a ilustração de dois tipos ideais de escoamento de fluidos conceptualmente opostos (vd. Figura 1.11)³:

A. Um tanque de mistura perfeita é caracterizado pela inexistência de gradientes espaciais. O elemento de volume corresponde à totalidade da massa de fluido (Ω). A não ocorrência de qualquer reacção química implica que os termos de geração ou consumo sejam nulos. Considerando que as paredes do tanque são impermeáveis a transferência de massa, as trocas de massa com o exterior resumem-se às secções de entrada e de saída. Neste caso, o balanço mássico macroscópico global ao fluido toma a forma:

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = F_i - F_o, \quad (1.13)$$

onde, V – volume de fluido, ρ – massa volúmica do fluido, F_i – caudal mássico de entrada, e F_o – caudal mássico de saída.

Por outro lado o balanço de energia inclui a transferência de energia ocorrida na interface fluido/resistência:

$$C \frac{d(V\rho(T - T_{ref}))}{dt} = F_i C (T_i - T_{ref}) - F_o C (T - T_{ref}) + H, \quad (1.14)$$

em que, T – temperatura do fluido, C – capacidade calorífica do fluido em base de massa (considerada constante), T_i – temperatura da corrente de entrada, T_{ref} – temperatura de referência para o cálculo da entalpia, H – energia introduzida ou retirada por unidade de tempo.

A ausência de gradientes espaciais conduz a que os modelos mássico e energético sejam evolutivos e de parâmetros concentrados. As suas versões estacionárias resumem-se a equações algébricas.

B. Escoamento pistão correspondente a fluxo de uma solução com ausência de mistura. Apenas ocorrem gradientes espaciais na direcção axial do tubo. O elemento de volume corresponde a uma secção de tubo de espessura dz ($d\Omega$). Mais uma vez se assume que o tubo é impermeável à transferência de massa através da parede. Por outro lado, a consideração de escoamento pistão obriga a que apenas se considere transporte de massa por convecção na direcção axial. Assim, o balanço mássico parcial a um soluto i dissolvido no fluido tem a forma (vd. equação 1.11),

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial t} dV &= \frac{\partial C_i}{\partial t} A dz = Q C_i|_z - Q C_i|_{z+dz} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \frac{\partial C_i}{\partial t} &= \frac{Q}{A} \left(C_i|_z - C_i|_{z+dz} \right) \end{aligned} \quad (1.15)$$

Onde C_i – concentração mássica do soluto i , $dV = A dz$ – volume do elemento $d\Omega$, Q – caudal volumétrico do fluido, A – área de secção recta do tubo. No limite $dz \rightarrow 0$ e sabendo que $Q/A = u$, velocidade do fluido, obtém-se:

³ Nos casos especificados não é necessário recorrer a balanços de momento.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad (1.16)$$

Neste caso, o modelo resume-se a uma equação diferencial parcial evolutiva unidimensional (neste caso, a equação da advecção unidimensional), que se simplifica a uma equação diferencial ordinária para o regime estacionário.

1.6 EQUAÇÃO DIFERENCIAL

Uma equação diferencial é uma equação matemática que apresenta pelo menos um operador diferencial total ou parcial que relacione duas variáveis do sistema. Deste modo, uma equação diferencial tem como solução uma função uni- ou multidimensional e relaciona o valor da função com os valores das suas derivadas de ordens diversas.

O problema de estimativa de uma derivada, ou seja, do cálculo da tangente a uma curva foi estudado por um número considerável de matemáticos desde que Arquimedes (c. 287 AC - c. 212 AC) explorou a questão na Antiguidade Clássica. No entanto, a primeira tentativa de desenvolvimento de um método classificável como de Cálculo moderno deve-se a Gilles Persone de Roberval (1602-1675) durante os anos 30 e 40 do século XVII. Aproximadamente por essa altura, Pierre de Fermat (1601-1665) usou as noções de máximo e de infinitesimal para a avaliação da tangente a uma curva. Todavia, o seu método nunca foi enunciado de forma rigorosa, tendo-se revelado difícil de justificar sem o recurso ao conceito formal de limite. Assim, técnicas generalizadas aceites foram apenas consequência da definição precisa dos métodos desenvolvidos por Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716) e Isaac Newton (1642-1727). Assim, Leibniz estabeleceu a definição do diferencial como[26]:

$$\frac{du}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x}. \quad (1.17)$$

As equações diferenciais surgem no contexto de múltiplas áreas da ciência e da tecnologia, sempre que é necessário estabelecer uma relação determinística entre quantidades continuamente variáveis (representadas por funções) e as suas taxas de variação em relação ao espaço e/ou tempo (expressas pelos operadores diferenciais).

1.7 EQUAÇÃO DIFERENCIAL PARCIAL (PDE)

Uma equação diferencial parcial (Partial Differential Equation – PDE) é um tipo de equação diferencial, i.e., uma relação que envolve uma função (ou funções) desconhecida de várias variáveis independentes e as derivadas parciais em relação a estas variáveis. Estas equações são usadas para formular e assim coadjuvar na resolução de problemas de dimensões múltiplas. De seguida apresenta-se um exemplo possível para uma PDE generalizada:

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \dots\right) = 0. \quad (1.18)$$

As PDE's são uma das abstracções matemáticas mais profusamente utilizadas em Ciência e Engenharia.

1.7.1 CARACTERÍSTICAS BÁSICAS DE UMA PDE

O estudo de PDE's começou no século XVIII com o trabalho de Euler, d'Alembert, Lagrange and Laplace como uma ferramenta essencial na descrição da mecânica do continuum (e.g. cordas vibratórias, elasticidade, campos gravitacionais Newtonianos, electrostática, mecânica de fluidos, condução de calor, electricidade e magnetismo) e como uma estratégia de estudo analítico de modelos aplicados às ciências físicas[27]. De facto, a análise de modelos físicos permaneceu até ao presente como uma das preocupações principais do campo do desenvolvimento de PDE's.

Nesta secção pretende-se apresentar os elementos específicos que caracterizam uma PDE típica.

Assim, a ordem de uma PDE é definida pela derivada de ordem mais elevada presente na equação, enquanto que o grau de uma PDE se refere ao termo elevado à potência total mais elevada (e.g. o termo $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^3$ é de ordem 2 e de grau 3). No caso de um sistema de PDE's, a sua ordem e grau são determinadas pela equação de grau e ordem mais elevada que o compõe.

Um problema diferencial para ser solúvel tem de cumprir alguns critérios que, quando verificados, o determinam como um problema bem colocado ("well posed problem"). Assim, um problema é bem colocado quando[28]:

- a solução existe;
- a solução é única;
- a solução depende continuamente dos dados auxiliares (e.g. condições iniciais ou fronteira).

O tipo de condições auxiliares presentes na enunciação de um problema determina o tipo de problema em estudo. Deste modo, tem-se:

- Problemas de valor fronteira (Boundary Value Problems – BVP's) – problema especificado pelo conjunto das equações diferenciais parciais definidas sobre um domínio, e de um sistema de restrições fixadas sobre a fronteira delimitadora desse domínio.
- Problemas de valor inicial (Initial Value Problems – IVP's) – geralmente associado a problemas de ODE's, onde o valor da solução desconhecida é especificado num ponto arbitrário do domínio. Normalmente, o ponto escolhido situa-se no extremo inferior do domínio e por essa razão é designado por condição inicial. No caso de PDE's, esta classificação é geralmente atribuída a problemas dinâmicos ou evolutivos, ou seja, dependentes do tempo, em que a condição inicial se refere à fronteira correspondente ao extremo inferior temporal.

As condições fronteira podem ser de três tipos. Considerando um domínio Ω , delimitado por uma fronteira Γ , defina-se n e s como as coordenadas normal (apontando para o exterior) e tangente à superfície fronteira, respectivamente, e as funções f e g definidas sobre a fronteira, as condições fronteira possíveis são:

Condições de Dirichlet: $u = f$; em Γ . (1.19)

Condições de Neumann: $\frac{\partial u}{\partial n} = f$ ou $\frac{\partial u}{\partial s} = g$; em Γ . (1.20)

Condições Mistas ou de Robin: $\frac{\partial u}{\partial n} + ku = f, k > 0$; em Γ . (1.21)

A garantia de unicidade da solução não é simples de definir para modelos transientes ou estacionários complicados. No entanto, considera-se geralmente que para um problema apresentar uma solução única é necessário que o número de variáveis desconhecidas seja igual ao número de equações independentes no modelo. Deste modo, introduz-se a noção de grau de liberdade, calculado por:

$$N_F = N_V - N_E,$$

onde, N_F – grau de liberdade, N_V – número de variáveis dependentes, N_E – números de equações independentes (algébricas e diferenciais). Para que um problema seja bem colocado, $N_F = 0$.

A análise de graus de liberdade separa os problemas de modelação em três tipos[20]:

- $N_F = 0$, problema exactamente determinado – número de variáveis iguala o número de equações e o sistema de equações tem uma solução única.
- $N_F > 0$, problema subdeterminado – neste caso, $N_V > N_E$, e conseqüentemente o problema tem uma infinidade de soluções, já que N_F variáveis podem ser especificadas de forma arbitrária ou um conjunto adicional de equações tem de ser introduzido no modelo.
- $N_F < 0$, problema sobredeterminado – o problema tem menos variáveis do que equações e o problema não tem solução. Neste caso, é necessário definir variáveis adicionais para representar o estado do processo ou o número de equações consideradas é excessivo.

Outro conceito importante a reter é o de curva característica de um problema diferencial parcial. Resumidamente, uma característica é uma curva ou uma trajectória determinada no espaço das variáveis independentes do problema sobre a qual a solução pode ser definida apenas por diferenciais totais. Assim, a resolução da PDE original pode ser realizada usando apenas ODE's, sem se recorrer a qualquer aproximação. Considere-se então a equação de primeira ordem transiente e unidimensional:

$$a \frac{\partial u}{\partial t} + b \frac{\partial u}{\partial x} = c, \tag{1.22}$$

com a solução genérica da forma, $u = u(x(t),t)$. Por outro lado a derivada total de u é dada por:

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial t}. \tag{1.23}$$

Comparando 1.22 com 1.23 verificam-se as igualdades $dx/dt = b/a$ e $du/dt = c/a$, que representam duas ODE's com as soluções,

$$x = x_0 + \frac{b}{a}t, \tag{1.24}$$

$$u = u_0 + \frac{c}{a}t, \tag{1.25}$$

para uma condição inicial $u(x_0, t) = u_0$. As equações 1.24 e 1.25 significam duas rectas definidas no plano $[x, t]$ (vd. Figura 1.12). A sua utilização conjunta permite a construção dos perfis da solução $u(x, t)$ para a totalidade do domínio do problema. A importância da noção de curva característica está intimamente relacionada com o sistema de classificação de PDE's e conseqüentemente com as características da sua solução. Tal relação tornar-se-á óbvia na discussão desenvolvida na próxima secção.

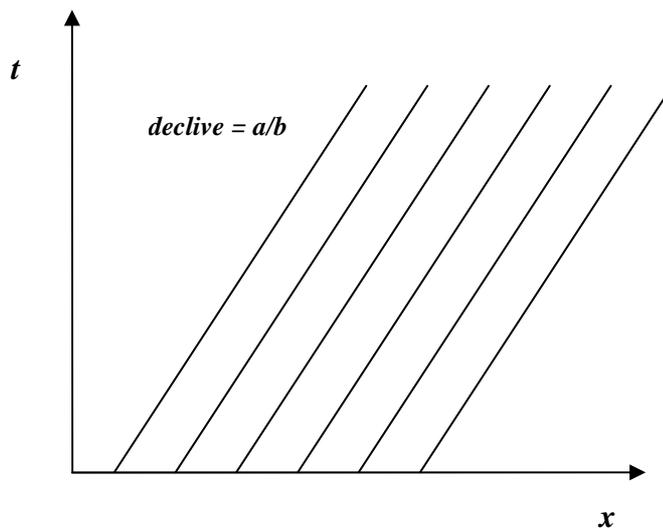


Figura 1.12 Ilustração das características para a equação 1.22.

1.7.2 CLASSIFICAÇÃO DE PDE'S

Nesta secção refere-se os critérios que presidem aos sistemas de classificação mais importantes para as PDE's, de forma a definir as características gerais dos diferentes problemas diferenciais típicos. Estas classificações estão intimamente ligadas às soluções particulares exibidas e conseqüentemente à escolha dos métodos mais adequados para a sua resolução.

As classificações mais importantes relacionam-se com duas características importantes das equações, nomeadamente a linearidade e a geometria. Então, considere-se uma equação diferencial geral de 2ª ordem bidimensional:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + Fu + G = 0. \tag{1.26}$$

Esta equação geral é bastante comum no desenvolvimento de problemas de Engenharia, sendo utilizada como base para a classificação de PDE's. Estas diferenciam-se nas suas propriedades, pela forma como os diversos coeficientes são definidos. Os conceitos apresentados de seguida poderão ser alargados a outros tipos de equações ou sistemas de equações, de diferentes ordens ou dimensões.

A linearidade pode ser genericamente definida da forma seguinte: assumam-se duas soluções diferentes u_α e u_β de uma equação diferencial. Esta equação é linear se $u = u_\alpha$

+ u_β também for uma solução. A linearidade é uma propriedade desejável em muitos sistemas, já que permite a expressão da evolução temporal de um estado inicial arbitrário, $u(x,0)$, em termos da evolução temporal de um conjunto completo de funções simples conhecidas[29].

Assim, a equação 1.26 é classificada no que diz respeito à sua linearidade consoante os critérios apresentados na Tabela 1.8.

Tabela 1.8 Classificação de uma equação diferencial de segunda ordem bidimensional quanto à sua linearidade[30].

Linear	⇒	Se todos os coeficientes dependerem apenas das variáveis independentes x e y .
Quasilinear	⇒	Se os coeficientes forem igualmente definidos em função da variável dependente u e/ou os coeficientes A , B e C dependerem das primeiras derivadas de u .
Caso Particular: Semi-Linear	⇒	Se apenas os termos independentes dependerem da variável dependente u .
Não-Linear	⇒	Todos os outros casos.

Por outro lado, outra classificação relevante diz respeito à sua geometria. Considere-se agora a PDE bidimensional de segunda ordem quasilinear genérica:

$$A\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \Phi\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) \quad (1.27)$$

O grau de não linearidade de uma PDE encontra-se fortemente relacionado com o nível de dificuldade expectável na resolução do problema e, conseqüentemente, determina a escolha do método de integração a utilizar. Este conceito pode ser facilmente generalizado para equações ou sistemas de equações de ordem diferente. Outra forma de classificação de PDE's de segunda ordem do tipo da equação 1.27 é baseada no valor do determinante, $\Delta = B^2 - 4AC$.

De facto, o carácter geral da equação 1.27, que se relaciona com o facto desta representar uma onda, um fenómeno difusivo ou um fenómeno de equilíbrio, depende dos valores dos coeficientes das derivadas de maior ordem, A , B e C . Tal pode ser verificado através da análise das curvas características da equação particular. Se for possível encontrar um conjunto completo de características, conclui-se que a equação representa a propagação de ondas. Neste caso, é necessário encontrar duas características, porque a equação diferencial é de segunda ordem. Assim, considere-se uma destas curvas características definida no plano $[x,y]$ especificada por um incremento diferencial sobre a respectiva curva. Assumindo-se que u , $\partial u/\partial x$ e $\partial u/\partial y$ são as condições iniciais desta curva, pretende-se determinar as condições em que é possível calcular $\partial^2 u/\partial x^2$ e $\partial^2 u/\partial y^2$ a partir da PDE 1.27. Deste modo, diferenciando $\partial u/\partial x$ e $\partial u/\partial y$ ao longo da curva característica considerada e acoplando-a com a PDE, obtém-se o seguinte sistema de equações[31]:

$$\begin{cases} d\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} dy \\ d\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} dx + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} dy \\ \Phi\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) = A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \end{cases} \quad (1.28)$$

Representando o sistema 1.28 na sua forma matricial, tem-se,

$$\begin{bmatrix} dx & dy & 0 \\ 0 & dx & dy \\ A & B & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) \\ d\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \\ \Phi\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) \end{bmatrix}. \quad (1.29)$$

Deste modo, a resolução da equação,

$$\begin{vmatrix} dx & dy & 0 \\ 0 & dx & dy \\ A & B & C \end{vmatrix} = C(dx^2) - B(dx)(dy) + A(dy^2) = 0, \quad (1.30)$$

uma equação quadrática que possibilita o cálculo do declive da característica,

$$A\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - B\left(\frac{dy}{dx}\right) + C = 0. \quad (1.31)$$

Assim, a solução é dada por:

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)^\pm = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}, \quad (1.32)$$

que só será real se o determinante $\Delta > 0$. A equação 1.31 é designada por equação característica.

Esta classificação está intimamente relacionada com a caracterização de equações algébricas quadráticas bidimensionais do tipo:

$$Ax^2 + Bxy + Cy^2 = \phi(x, y). \quad (1.33)$$

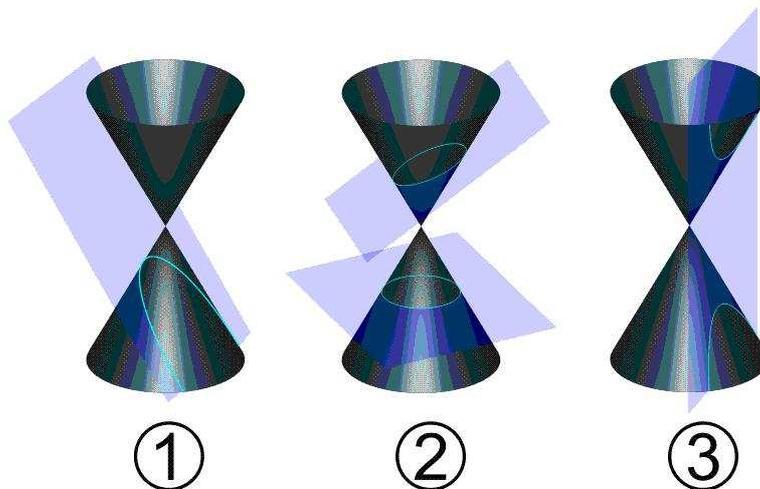


Figura 1.13 Tipos de secções cónicas: 1 – Parábola; 2 – Elipse; 3 – Hipérbole[32].

A equação 1.33 é a representação algébrica do conjunto de secções cónicas, ou seja curvas obtidas pela intersecção entre um cone, ou mais precisamente uma superfície

cónica circular, com um plano, num espaço tridimensional (vd. Figura 1.13). Aplicando a analogia obtém-se a classificação resumida na Tabela 1.9.

Tabela 1.9 Classificação das cónicas e das PDE's correspondentes.

Tipo de Determinante	Classificação da cónica	Classificação da PDE
$B^2 - 4AC < 0$	Elipse	Elíptica
Caso Particular: $A = C \wedge B = 0$	Círculo	
$B^2 - 4AC = 0$	Parábola	Parabólica
$B^2 - 4AC > 0$	Hipérbole	Hiperbólica
Caso Particular: $A + C = 0$	Hipérbole Rectangular	

Como foi referido acima, a importância desta classificação relaciona-se com o facto de os diferentes tipos geométricos de PDE's se caracterizarem por apresentarem soluções que exibem comportamentos distintos. Assim,

- Equações elípticas – não existem características reais, implicando a ausência de qualquer propagação de onda; exibem normalmente soluções suaves estacionárias de energia mínima, apesar de poderem apresentar perfis abruptos na vizinhança das fronteiras; não possuem uma variável de valor inicial e, portanto, têm de ser definidas como problemas de valor fronteira.
- Equações parabólicas – as duas curvas características degeneram numa única; a solução é geralmente caracterizada por uma dispersão temporal suave de uma perturbação inicial, indicando a sua natureza como problemas de valor inicial.
- Equações hiperbólicas – identificam-se duas curvas características reais, o que define a natureza de onda deste tipo de equações; as soluções são caracterizadas por promoverem a propagação temporal de uma perturbação e, assim, tenderem a reter descontinuidades, o que as torna particularmente interessantes no âmbito do presente trabalho.

Na Tabela 1.10 apresentam-se alguns exemplos para as diversas categorias geométricas de PDE's típicas.

Esta classificação não está limitada a equações de segunda ordem do tipo 1.27, podendo ser estendida a equações ou a sistemas de equações de primeira ordem. A relação é muito simples de estabelecer bastando, para tal, transformar a equação geral de segunda ordem inicial no sistema de equações de primeira ordem correspondente, obtendo-se a generalização desta classificação para os dois casos.

Assim, se se definirem as variáveis auxiliares[23]:

$$v = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \omega = \frac{\partial u}{\partial t}, \tag{1.34}$$

obtém-se por diferenciação,

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}, \quad \frac{\partial \omega}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x}. \tag{1.35}$$

Assumindo a igualdade entre as duas derivadas de segunda ordem, tem-se que,

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial \omega}{\partial x}. \tag{1.36}$$

Considerando a equação de onda (vd. Tabela 1.10), então:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = c^2 \frac{\partial v}{\partial x}. \tag{1.37}$$

Assim, conclui-se que a equação de onda (hiperbólica de segunda ordem) pode ser expressa por duas equações hiperbólicas de primeira ordem 1.36 e 1.37 (vd. Tabela 1.10).

Tabela 1.10 Exemplificação da classificação geométrica de PDE's típicas[23].

Exemplo	Ordem em x	Ordem em t	Classificação
$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x}$ (equação da advecção)	1	1	Hiperbólica de 1ª ordem
$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (equação de onda)	2	2	Hiperbólica de 2ª ordem
$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (Lei de <i>Fourier</i> ou Segunda Lei de <i>Fick</i>)	2	1	Parabólica
$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$ (equação de <i>Laplace</i>)	2 (em x,y)	0	Elíptica

Por outro lado, realiza-se a extensão a sistemas de n PDE's unidimensionais de primeira ordem do tipo[30]:

$$\mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{c}^*, \tag{1.38}$$

em que: \mathbf{A} e \mathbf{B}^* são matrizes $n \times n$, \mathbf{u} – vector das variáveis dependentes, \mathbf{c}^* – vector dos termos independentes.

Multiplicando 1.38 por \mathbf{A}^{-1} tem-se:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{c}. \tag{1.39}$$

Através da diagonalização da matriz \mathbf{B} , obtém-se a relação:

$$\mathbf{B} = \mathbf{S} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S}^{-1}, \tag{1.40}$$

onde \mathbf{S} e $\mathbf{\Lambda}$ são a matriz dos vectores próprios e a matriz diagonal dos valores próprios de \mathbf{B} , respectivamente. Ambas as matrizes \mathbf{B} e $\mathbf{\Lambda}$ são quadradas, já que \mathbf{B} apenas é diagonalizável se for quadrada, o que implica que $\mathbf{\Lambda}$ também o seja. Obtém-se então:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{S} \mathbf{\Lambda} \mathbf{S}^{-1} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{c}. \tag{1.41}$$

Deste modo, o sistema de PDE's é:

- Hiperbólico – se os n valores próprios forem reais e diferentes;
- Parabólico – se os n valores próprios forem reais e iguais;

- Elíptico – se os n valores próprios forem complexos.

Assim, a classificação anterior pode ser ainda mais expandida para problemas mais gerais, como PDE's lineares de segunda ordem multidimensionais (com um número arbitrário n de variáveis independentes) ou sistemas de m equações de primeira ordem igualmente n -dimensionais[33]:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \Phi = 0, \quad (1.42)$$

$$\sum_{v=1}^n \mathbf{A}_v \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_v} + \mathbf{B} = 0, \quad (1.43)$$

onde Φ e \mathbf{B} simbolizam os termos de ordem inferior; e a_{ij} e \mathbf{A}_v correspondem respectivamente aos elementos da matriz de coeficientes e às matrizes de coeficientes $m \times m$ para $v = 1, \dots, n$. Nestes casos a definição do tipo de problemas é análoga à dos exemplos anteriores e depende da natureza dos valores próprios da matriz de coeficientes a_{ij} ou do tipo de superfícies características do problema 1.43[33].

A combinação entre as diferentes classes de PDE's é igualmente possível, originando equações do tipo misto. Por exemplo a equação convectiva-difusiva:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.44)$$

é hiperbólica-parabólica e a equação de Euler-Tricomi:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = x \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (1.45)$$

é elíptica-hiperbólica, já que é elíptica para $x < 0$, hiperbólica na região $x > 0$ e parabólica degenerada para $x = 0$.

A utilidade da classificação geométrica manifesta-se pelo facto de permitir à partida: o estabelecimento de uma descrição concisa das características matemáticas genéricas do modelo; a sugestão de abordagens para a resolução numérica da PDE; e a antecipação de dificuldades potenciais no desenvolvimento do procedimento de resolução numérica do problema.

1.7.3 TERMOS CONSTITUTIVOS DE UMA PDE

Destacam-se agora casos particulares de modelos que apresentam especiais dificuldades de resolução, relacionadas com o desenvolvimento de soluções caracterizadas por importantes variações de "relevo", ou seja, zonas de elevada actividade onde ocorrem variações abruptas do valor da função e declives elevados, intercaladas com zonas onde o valor da função varia de uma forma suave (baixa actividade). Adicionalmente, o posicionamento destes aspectos proeminentes nos perfis da solução pode-se alterar com a evolução do procedimento de resolução. Diz-se então que este género de soluções exhibe propagação de ondas abruptas ou descontinuidades/choques móveis. A ocorrência destes fenómenos depende obviamente das propriedades do modelo matemático em estudo, relacionadas com os elementos constitutivos das diversas equações que o compõem. Assim, são

apresentados de seguida, os termos diferenciais e algébricos mais comuns presentes nos modelos diferenciais típicos em modelação de processos químicos, conjuntamente com o seu potencial específico para o desenvolvimento de soluções abruptas móveis.

Os modelos diferenciais que representam fenómenos característicos extremamente importantes na simulação de processos químicos, e que genericamente estão relacionados com a transferência de massa e de energia e mecanismos reaccionais, apresentam termos típicos classificados com advectivos, difusivos e geracionais. A ocorrência deste tipo de equações diferenciais que exibem este tipo de termos, designadas por equações de advecção-difusão, é extremamente comum no campo da modelação de processos químicos. Este tipo de equações resulta, normalmente, da modelação em regime transiente de unidades, cujas propriedades em regime estacionário variam nas dimensões espaciais (e.g. reactores tubulares, colunas de destilação). No caso mais complexo tridimensional a equação da difusão apresenta a forma genérica seguinte:

$$\frac{\partial u(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \nabla \cdot [D(u,\mathbf{r})\nabla u(\mathbf{r},t)], \quad (1.46)$$

onde $u(\mathbf{r},t)$ representa a densidade do componente difundido na posição \mathbf{r} , no tempo t e $D(u,\mathbf{r})$ é o coeficiente difusivo para a densidade u na posição \mathbf{r} ; os operadores diferenciais actuam sobre as dimensões espaciais.

Por outro lado, o operador advectivo, que representa o processo de transporte convectivo, é definido em coordenadas cartesianas por:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla = v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} + v_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (1.47)$$

em que o vector de velocidades \mathbf{v} tem as componentes v_x , v_y e v_z para as direcções x , y e z , respectivamente.

A equação da advecção para uma extensidade escalar u , é expressa matematicamente como:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u\mathbf{v}) = 0, \quad (1.48)$$

onde, $\nabla \cdot$ é o operador diferencial divergência e \mathbf{v} é o vector campo.

Apresentam-se então vários modelos de PDE's cujas soluções desenvolvem tipicamente frentes abruptas móveis. Por uma questão de simplicidade apenas são referidas as versões unidimensionais. Tal comportamento pode ser originado pela não linearidade de termos convectivos, difusivos ou geracionais, quer na própria equação como nas condições fronteiras, ou simplesmente pela advecção de um perfil inicialmente abrupto.

Um exemplo geral unidimensional convectivo-difusivo-geracional corresponde a,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial F(x,t,u)}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left[D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + G(x,t,u), \quad (1.49)$$

onde F , D e G são funções directamente relacionadas com fenómenos convectivos, difusivos e geracionais (e.g. reaccionais), respectivamente.

No caso da difusão linear, o exemplo típico deste tipo de equações é o modelo de difusão num meio isotrópico descrito por ($\varepsilon = 1$ e D constante):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1.50)$$

em que: u – concentração da substância difundida; e D – coeficiente de difusão.

Se D é constante, a equação 1.50 é linear. Em problemas de difusão, a velocidade característica é infinita. Desse modo, a evolução da solução $u(x,t)$, em qualquer ponto genérico (x,t) , depende do valor da solução em todo o domínio. Este comportamento define o carácter global dos problemas de difusão. Por outro lado, no caso de problemas hiperbólicos, as características apresentam uma velocidade de deslocamento finita sendo, deste modo, de natureza local, já que a solução em cada ponto do domínio (x,t) é apenas influenciada pelo valor desta nessa região do domínio.

No caso dos problemas de difusão em que o difundido pode reagir quimicamente, estes são representados pela adição de um termo geracional à equação de difusão linear:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + G(u). \quad (1.51)$$

Se a função $G(u)$ for fortemente não linear, as soluções deste tipo de equações desenvolvem, frequentemente, frentes abruptas móveis. Assim, se o valor de $G(u)$ for bastante elevado, num intervalo pequeno $[u_0, u_1]$, e relativamente pequeno fora deste intervalo, então, duas frentes abruptas expandir-se-ão em ambas as direcções, a partir de qualquer impulso que exceda o valor crítico u_1 . Os termos geracionais podem igualmente estar relacionados com condições fronteira dependentes do tempo.

Para muitos casos de aplicações físicas, os coeficientes de difusão dependem da concentração do difundido. Uma relação consideravelmente não-linear pode provocar frentes móveis bastante abruptas. Então, a equação geral tomará a forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (1.52)$$

Este comportamento ocorre igualmente para modelos de difusão não lineares acoplados a termos geracionais também não lineares.

Os problemas difusivos referidos anteriormente estão relacionados com equações do tipo parabólico. No entanto, existem exemplos de equações hiperbólicas, onde se desenvolvem frentes abruptas, que podem originar choques correspondentes a descontinuidades físicas. O exemplo mais simples deste tipo de equação é a equação escalar de onda unidimensional, uma equação puramente advectiva/convectiva, com $F(u)=au$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (1.53)$$

em que a é uma constante e a solução inicial é definida por uma função genérica: $u(x,0)=u^0(x)$.

A partir do perfil inicial, a solução movimenta-se com velocidade a , mantendo a sua forma inalterável. Assim, qualquer perfil abrupto em $u^0(x)$ transforma-se numa frente abrupta móvel.

No caso de advecção não linear as frentes podem se formar com o tempo e evoluir para a forma de choques. Este comportamento ocorre mesmo se a solução inicial apresentar perfis suaves. O exemplo mais simples deste tipo de equações é a equação invíscida de Burgers em que $a(u)=u$ ou $F(u)=u^2/2$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 . \quad (1.54)$$

No entanto, em muitos processos físicos, os fenómenos convectivos e difusivos ocorrem simultaneamente. Apesar da presença da difusão assegurar que os gradientes da solução sejam finitos, estes podem apresentar valores muito elevados para casos onde a convecção domina. Formam-se assim, quasi-choques, ou seja, frentes bastante abruptas e praticamente descontínuas. O exemplo mais simples deste tipo é a equação de Burgers:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} . \quad (1.55)$$

A equação 1.55 apresenta frentes móveis de espessura de $O(\varepsilon)$ para valores de ε muito baixos ($\varepsilon \ll 1$).

No entanto, o processo de construção e caracterização de um modelo adequado necessita ser complementado com a não menos importante tarefa de o resolver de uma forma eficiente. Assim, este é o assunto que será tratado na próxima secção.

1.8 ANÁLISE NUMÉRICA

1.8.1 INTRODUÇÃO HISTÓRICA

Com a Revolução Agrícola do Neolítico (c. 10000 AC) assiste-se a um aumento dramático na complexidade da organização das sociedades humanas, que se constitui como catalisador do advento das primeiras civilizações (a partir de 5000 AC), com uma crescente hierarquização social, centralização política e administrativa, e consequentemente, burocrática. Tal implicou o surgimento de problemas novos, tais como a construção de estruturas cada vez mais ambiciosas e complexas, a manipulação de solos e terrenos agrícolas, o conceito de propriedade privada móvel e imóvel, o estabelecimento de estruturas penais e fiscais, etc; Deste modo, as sociedades sentiram necessidade de construir novas ferramentas para lidar com esta nova realidade, nomeadamente, para a monitorização e contabilização de recursos progressivamente mais importantes. Assim, não é surpreendente que seja exactamente neste período que se constata o desenvolvimento da Escrita e da Matemática (e da sua linguagem) no sentido mais lato. Estes códigos simbólicos registáveis correspondem a representações (ou seja modelos) para a linguagem oral e para conceitos mais específicos quantificáveis ou geometricamente representáveis, respectivamente. No caso do código matemático, pretende-se salientar o campo especializado que se convencionou designar por Análise Numérica.

De forma a ilustrar a ancestralidade da aplicação de estratégias numéricas apresenta-se na Figura 1.14 um exemplo seleccionado deste tipo de aplicações através de uma placa cerâmica babilónia (c. 1800–1600 AC), onde é notória uma preocupação de resolução de um problema relacionado com a estimativa de números irracionais que advém da necessidade da avaliação do comprimento da diagonal de um quadrado de tamanho $1/2$. Os valores que constam na placa estão codificados num sistema sexagesimal. Assim, para uma aresta de $0;30 = 0+30/60 = 1/2$, obtém-se uma estimativa para o comprimento da diagonal de $0;42,25,35 = 0+42/60+25/60^2+35/60^3 \approx \sqrt{2}/2$ ($|\text{erro absoluto}| < 1 \times 10^{-6}$). Na placa também se encontra gravada a aproximação $1;24,51,10 = 1+24/60+51/60^2+10/60^3 \approx \sqrt{2}$ ($|\text{erro absoluto}| < 1 \times 10^{-4}$). A existência deste artefacto demonstra que já em tempos assaz remotos, se constatou a necessidade do desenvolvimento de estratégias para a resolução aproximada de problemas matemáticos, ou seja de estratégias numéricas.

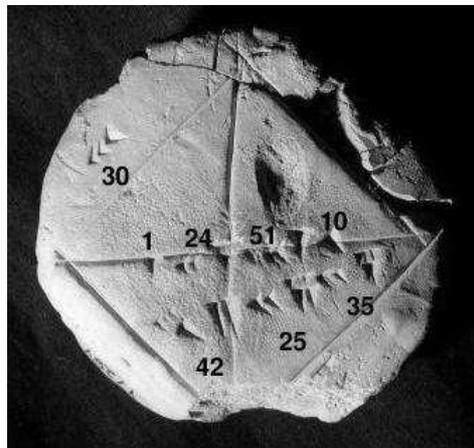


Figura 1.14 Placa cerâmica babilónia YBC 7289 (c. 1800-1600 AC), mostrando uma aproximação a $\sqrt{2}$ no contexto do Teorema de Pitágoras aplicado a um triângulo isósceles[34].

1.8.2 MÉTODOS NUMÉRICOS

Análise Numérica consiste no desenvolvimento e estudo de algoritmos para a resolução de problemas de Matemática Contínua. Assim, um algoritmo ou método numérico define-se como um procedimento eficiente de resolução de um problema através de conjunto sequencial finito de instruções. Partindo de um estado inicial, estas instruções representam um procedimento que estabelece sucessivamente uma série de estados sucessivos, até eventualmente terminar num estado final.

No entanto, importa referir que os métodos disponíveis para a solução de problemas matemáticos podem ser divididos em duas classes principais: analíticos e numéricos. Assim, uma forma de qualificar os métodos numéricos pode ser realizada através da discussão das características que os distinguem dos métodos analíticos alternativos.

Para tal, considere-se o exemplo de uma equação linear:

$$x - 3 = 1. \tag{1.56}$$

É possível discernir um procedimento lógico sequencial que possibilite a manipulação e consequente resolução da equação sem abandonar o carácter genérico da variável x e que só depende do valor dos parâmetros. Deste modo, o carácter contínuo do problema não é alterado e o algoritmo diz-se analítico. Por outro lado o procedimento

aplicado é genérico, ou seja, é passível de ser utilizado com sucesso a qualquer equação do tipo: $ax + b = c$. Assim um algoritmo possível para a resolução desta equação poderá ser:

1. adicionar $-b$ a ambos os membros da equação, obtendo-se $ax = c - b$;
2. multiplicar ambos os membros da equação por $1/a$, obtendo-se a solução: $x = (c - b)/a$

Aplicando o algoritmo anterior à equação 1.56, em que $a = 1$, $b = -3$ e $c = 1$, obtém-se a solução $x = (1 - (-3))/1 = 4$.

No entanto, se considerarmos um exemplo não linear:

$$x^3 - 3x + 1 = 0. \tag{1.57}$$

Verifica-se a impossibilidade de aplicação de um algoritmo semelhante ao anterior, já que a não linearidade da equação impede que a variável possa ser isolada através de uma estratégia simples como a descrita acima, mantendo a generalidade da variável x , ou seja a continuidade do domínio da resolução. No entanto, é relevante salientar que no caso de equações algébricas cúbicas, estão disponíveis métodos analíticos necessariamente mais elaborados que possibilitam a sua resolução, ou seja a determinação das raízes da equação com o segundo membro nulo: $ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$; obtida por manipulação analítica da equação original (e.g. método de Cardano). Uma equação cúbica não é suficientemente complexa para que a aplicação de uma estratégia analítica na sua solução se revele demasiado custosa.

De qualquer modo, interessa utilizar o exemplo presente para ilustrar as características genéricas de um procedimento numérico. Assim, uma estratégia possível seria a aplicação de uma manipulação analítica da equação cúbica de modo a isolar o seu termo linear no membro da esquerda,

$$x = \sqrt[3]{3x - 1}. \tag{1.58}$$

Em seguida, procede-se à discretização do problema, substituindo a variável geral analítica x , por duas variáveis numéricas x^k e x^{k+1} não genéricas, ou seja que possuem sempre um valor atribuído,

$$x^{k+1} = \sqrt[3]{3x^k - 1}. \tag{1.59}$$

A forma específica da equação que representa o processo numérico permite construir uma estratégia através do qual se a variável x^{k+1} pode ser calculada apenas pela atribuição de um valor à variável x^k . A implementação do processo implica três passos essenciais:

1. a iniciação do procedimento, ou seja, a atribuição de um valor inicial de arranque para x^k ($k=0$);
2. o cálculo de x^{k+1} através da aplicação sequencial iterativa da equação 1.59 em que x^k assume o valor de x^{k+1} da iteração anterior ($k = k+1$);
3. a finalização do processo, em que a verificação de um critério de convergência assegura a obtenção de uma aproximação suficientemente exacta ou precisa à solução esperada, em relação a uma tolerância pré-definida ϵ .

A sequência de resultados obtidos através da aplicação do algoritmo descrito anteriormente ao problema 1.57, com os parâmetros de implementação seguintes: $x^0 = 10$, $\varepsilon = 10^{-7}$ para um critério simples de erro absoluto de f ; é apresentada na Tabela 1.11. Assim, verifica-se a convergência do algoritmo para uma das soluções do problema ($x = 1.532089$) e a verificação da tolerância estabelecida em 22 iterações.

Tabela 1.11 Resultados obtidos pela aplicação do algoritmo numérico apresentado para a resolução de uma equação cúbica de uma variável, $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$ ($x^0 = 10$; $\varepsilon = 10^{-7}$).

k	x^k	$f(x^k)$
0	10	9.71E+02
1	3.072317	2.08E+01
2	2.017918	3.16E+00
3	1.716082	9.06E-01
4	1.606774	3.28E-01
5	1.563268	1.31E-01
6	1.545258	5.40E-02
7	1.537679	2.27E-02
8	1.534467	9.64E-03
9	1.533101	4.10E-03
10	1.53252	1.74E-03
11	1.532273	7.42E-04
12	1.532167	3.16E-04
13	1.532122	1.35E-04
14	1.532103	5.74E-05
15	1.532095	2.45E-05
16	1.532091	1.04E-05
17	1.53209	4.44E-06
18	1.532089	1.89E-06
19	1.532089	8.05E-07
20	1.532089	3.43E-07
21	1.532089	1.46E-07
22	1.532089	6.23E-08
...		

O caso descrito acima ilustra as características principais de um esquema numérico iterativo genérico. Os passos essenciais podem ser resumidos da forma seguinte:

1. Como se trata de um procedimento numérico algorítmico (em que apenas se lida apenas com valores numéricos), é necessário antes de tudo seleccionar uma aproximação inicial para arranque do processo de cálculo; este passo não é trivial, já que para muitos métodos numéricos se torna crítico na definição da convergência assintótica do procedimento para a solução.
2. O procedimento algorítmico propriamente dito, representado por uma sequência repetível e sistematizável de operações, conjugada com uma estratégia de monitorização da convergência do processo para a solução numérica.
3. Dado que um método numérico é geralmente aproximado por natureza, é necessário definir um critério de paragem do procedimento, correspondente à definição do nível de exactidão ou de precisão pretendido, e consequentemente do erro considerado aceitável; para tal é necessário estabelecer uma tolerância que determina o grau de esforço pretendido na aplicação do procedimento numérico.

O exemplo apresentado comprova uma das desvantagens dos algoritmos numéricos na resolução de problemas com soluções múltiplas (e.g. as três raízes reais da equação 1.57). O facto do procedimento numérico não facultar a manipulação de abstrações generalizadas, mas de valores concretos, torna apenas possível a obtenção de uma solução do problema por cada implementação. No entanto, essa questão torna-se menos importante no campo da resolução numérica de PDE's, já que, como se referiu anteriormente, um problema diferencial bem colocado deverá ter somente uma solução.

Geralmente, é possível afirmar-se que a aplicação de um procedimento numérico se torna especialmente importante no caso de problemas não lineares, nomeadamente no que diz respeito ao campo da resolução de equações. Como se verificou anteriormente, a própria natureza das relações lineares permite o desenvolvimento de estratégias analíticas para a sua solução que não são de todo possíveis de aplicar no caso de termos altamente não lineares. Deste modo, é expectável que a própria presença de não linearidades num modelo matemático seja indicativo da necessidade do recurso a técnicas numéricas para a sua resolução, excluindo obviamente o caso de exemplos extremamente específicos que exibam propriedades particulares.

O campo da aplicação dos métodos numéricos, possibilita a solução de uma grande variedade de problemas, cuja resolução analítica se revela problemática. Assim uma lista não exaustiva deste tipo de problemas é resumida na Figura 1.15.

Esta classificação não implica a estanquicidade de cada problema em relação aos outros. Na realidade existe uma significativa inter-relação entre este tipo de problemas (e.g. um algoritmo numérico de optimização para a pesquisa de extremos relaciona-se intimamente com um procedimento numérico de pesquisa de zeros, já que um extremo de uma função pode significar um zero da sua primeira derivada).

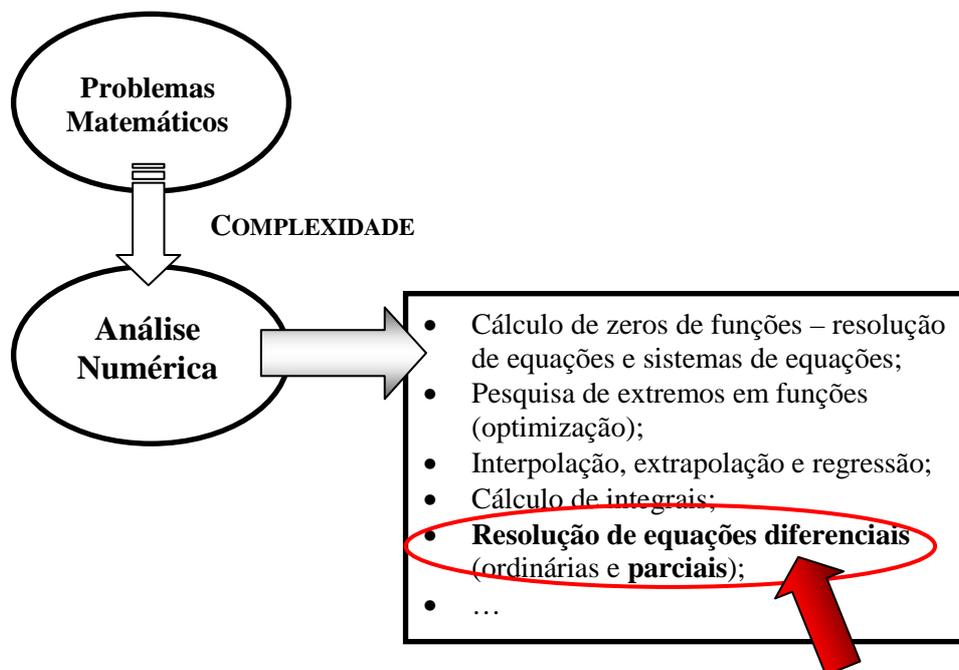


Figura 1.15 Lista de problemas matemáticos resolúveis por análise numérica.

1.8.3 CARACTERIZAÇÃO DE MÉTODOS NUMÉRICOS

Em resumo, apresentam-se de seguida as características básicas de um procedimento numérico:

- Discretização – a translação do espaço contínuo do problema original para o espaço discreto do problema numérico associado,
- Carácter algorítmico que pode ser categorizado como directo ou iterativo:
 - Procedimento directo – atinge-se a solução exacta num número finito de passos repetitivos (e.g. método de eliminação de Gauss para resolução de sistemas lineares de equações; método Simplex para resolução de problemas de Programação Linear – PL⁴)
 - Procedimento iterativo – a partir de um valor inicial, possibilita aproximações sucessivas que apenas convergem para a solução no limite, ou quando o número de passos tende para infinito.

O carácter aproximativo do esquema algorítmico (no caso iterativo) implica o desenvolvimento de procedimentos de avaliação e monitorização da evolução do erro cometido. No entanto, mesmo os esquemas numéricos iterativos podem proporcionar resultados exactos num número finito de iterações em circunstâncias muito particulares (e.g. como o Método de Newton se baseia numa aproximação quadrática da função a resolver, então possibilita a obtenção de soluções exactas no caso desta ser quadrática e possuir uma solução).

De qualquer modo, a evolução de um esquema numérico genérico gera erros de diversos tipos, correspondentes a diferentes proveniências, que incluem as limitações do próprio processo de cálculo, usualmente conduzido num suporte computacional. Assim, tem-se:

- Erro de arredondamento – representa a diferença entre a aproximação calculada de um número e o seu valor matemático exacto (e.g. um número irracional como $\pi = 3,14159265358979323846\dots$, apenas pode ser exactamente representado por um número infinito de casas decimais; deste modo, qualquer representação realista deste valor para efeitos de cálculo, tem de recorrer à eliminação de todas as casas decimais para além de uma posição especificada; esta operação pode ser realizada através da fixação do valor do último dígito considerado, baseada no valor do primeiro dígito eliminado, ou seja de um arredondamento; por exemplo, $\pi \approx 3,141593$).
- Erro de truncatura – erro semelhante ao anterior mas em que a aproximação, e a conseqüente geração de erro associada, é realizada pela simples eliminação de todas as casas decimais para além de uma posição especificada (considerando o exemplo anterior, a aproximação equivalente realizada por truncatura é $\pi \approx 3,141592$).

⁴ Na realidade, os dois métodos numéricos referidos consistem na aplicação da mesma estratégia a dois tipos de problemas diferentes, já que cada passo do método de optimização Simplex (para PL) consiste essencialmente na transição entre soluções básicas admissíveis do sistema linear de restrições lineares que é justamente realizada pela aplicação do método de eliminação de Gauss para resolução de sistemas de equações lineares.

- Erro de discretização – erro resultante do facto da função de uma variável contínua ser representada por um número finito de avaliações (e.g. a aplicação do método de Diferenças Finitas, implica que a função seja representada por uma série de Taylor; esta representação apenas é exacta se se considerar a série completa com um número infinito de termos; como tal não é possível, comete-se inevitavelmente um erro ao descartar todos os termos da série de ordem superior a um termo escolhido, que no fundo é equivalente a um processo de truncatura).

É importante referir que a enunciação da noção de problema numérico bem colocado está estreitamente relacionada com os critérios equivalentes referidos anteriormente para problemas analíticos, e que resumidamente se referem à existência e unicidade da solução do problema.

Por outro lado, as propriedades definidas para avaliação adequada do desempenho de um método numérico, aplicado a um determinado problema são:

- Estabilidade – monitoriza a propagação do erro entre dois passos algorítmicos sucessivos;
- Consistência – mede a influência do incremento das variáveis independentes no comportamento de tendência do erro de truncatura para zero; por outras palavras, mede a tendência do modelo gerado pelo método para o modelo real;
- Convergência – mede a tendência da solução numérica para a solução analítica quando o incremento das variáveis independentes tende para zero.

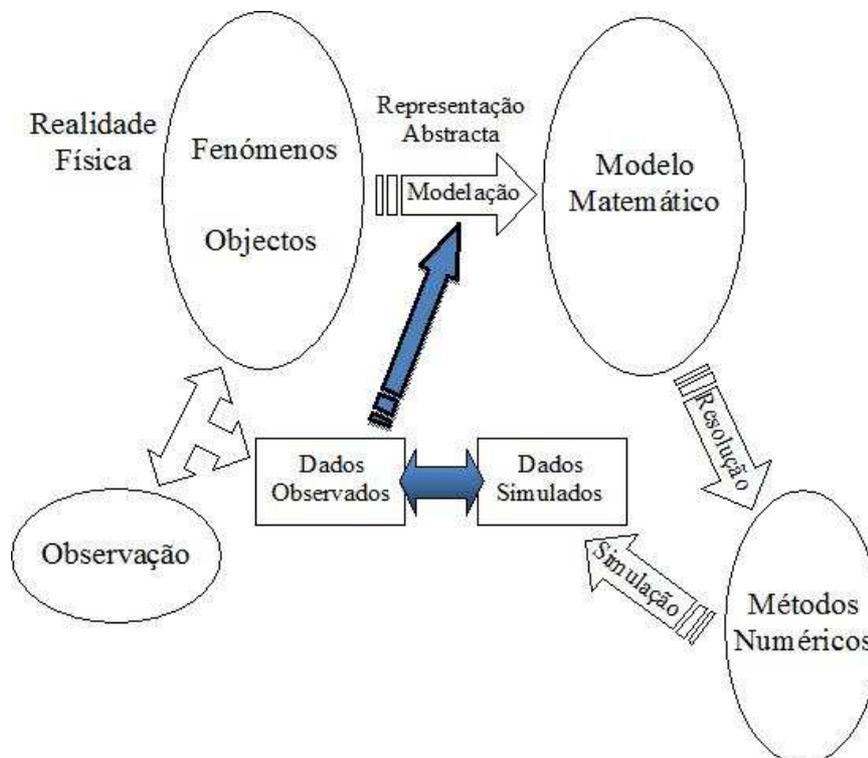


Figura 1.16 Interdependências entre os fenómenos físicos, as suas representações matemáticas abstractas e os processos numéricos de resolução desses modelos.

Assim, incorpora-se o estágio de resolução numérica como último passo no processo de modelação matemática como representação abstracta da realidade física. Na Figura 1.16, apresenta-se um modelo possível para a caracterização das relações entre os diferentes conceitos analisados até à presente secção, de modo a resumir a discussão realizada e estabelecer uma forma eficaz de conclusão da mesma.

1.8.4 RESOLUÇÃO DE PDE's

Uma aplicação importante da Análise Numérica consiste na resolução de PDE's (ou sistemas de PDE's). No entanto, a solução de uma PDE pode ser obtida de duas formas: através da dedução da sua solução analítica ou recorrendo a uma aproximação numérica desta solução. No primeiro caso, a exactidão das soluções analíticas constitui uma grande vantagem. No entanto, os métodos analíticos disponíveis, como os métodos de separação de variáveis, de transformação de variáveis ou de transformadas integrais apenas são aplicáveis no caso de problemas lineares, o que não acontece para a maioria esmagadora dos problemas relevantes na área da Engenharia Química. Para problemas não lineares não existem métodos analíticos de aplicação generalizada. Os métodos disponíveis só podem ser usados em problemas muito específicos e o desenvolvimento de estratégias de resolução assume um carácter casuístico. Deste modo, no caso da maioria dos problemas, é imperioso recorrer a uma resolução numérica.

A aproximação numérica encontra-se associada a um erro que determina a sua qualidade em termos de exactidão. Foram apresentados diversos algoritmos de integração numérica, sucessivamente aperfeiçoados, que constituem vários grupos de métodos numéricos. Cada método representa uma estratégia distinta de resolução do problema. No entanto, estes algoritmos têm em comum, na grande maioria dos casos, a característica de conversão do problema original, enunciado num espaço definido pelas variáveis independentes de natureza contínua, num problema equivalente num espaço discreto. Deste modo, o problema passa a apresentar um carácter algébrico. A solução é calculada sobre uma estrutura constituída por um conjunto de pontos discretos (também designados por nodos) gerada a partir da discretização do domínio contínuo, designada por malha ou grelha.

Uma das escolhas críticas que antecedem o processo de resolução numérica de PDE's consiste na definição da própria malha que representa o suporte discreto e aproximado do continuum. De facto, a geração da malha pode ser essencial para o sucesso do procedimento numérico, nomeadamente nos casos em que a própria solução analítica exiba características heterogéneas ao longo do domínio, alternando zonas que apresentem discrepâncias acentuadas na actividade da solução. Tais casos implicam uma distribuição irregular de nodos através do domínio, de modo a assegurar uma maior eficácia do algoritmo, já que o seu desempenho depende do espaçamento nodal ou tamanho da malha. Consequentemente, torna-se necessário um processo dedicado de construção da malha que depende de alguma forma do perfil expectável da solução. No entanto, é possível que as próprias heterogeneidades se movimentem durante a evolução do procedimento numérico, impondo uma contínua redefinição da malha. Por outro lado, o agregado de posições nodais que caracterizam a malha incorpora-se no conjunto mais alargado de parâmetros numéricos que determinam a evolução do algoritmo. Assim, como qualquer parâmetro

numérico, a malha pode ser reajustada ao longo do processo algorítmico conforme as conveniências. Todavia, importa assegurar que este processo de reajuste, ou de adaptação, obedeça a critérios bem estabelecidos, que contribuam para o desenvolvimento de um algoritmo adaptativo sistematizado, passível de ser incorporado no algoritmo mais geral de integração. O conceito geral de adaptação e a sua aplicação no contexto da resolução numérica de PDE's são discutidos com maior profundidade no capítulo seguinte.

No caso particular da integração numérica de PDE's, a estabilidade mede a propagação do erro entre dois passos de integração sucessivos, sendo o critério normalmente usado, a condição de Von Neumann. O conceito de estabilidade pode ser facilmente compreendido através da análise da expansão numérica em série de Fourier. Assim, admitindo-se a solução inicial dum problema unidimensional num ponto p , na forma:

$$u_{p,0} = \sum_{n=0}^N A_n e^{i\beta_n p h} , \quad p = 0, 1, \dots, N \quad (1.60)$$

em que: A_n – a amplitude; $\beta_n p h$ – a fase de onda com $\beta_n = \frac{n\pi}{Nh}$; N – número de nodos; h – passo espacial.

A resolução do sistema de $N+1$ equações permite a obtenção dos coeficientes A_i independentes do tempo. Para estimar o erro de propagação devido ao incremento temporal, considera-se que a solução num ponto p para o tempo q é calculada por:

$$u_{p,q} = e^{i\beta_n x} \xi_q , \quad p = 0, 1, \dots, N \quad (1.61)$$

onde, $\xi_q = e^{\alpha t}$ com α – constante complexa.

Para que a solução numérica seja estável, é condição necessária que $|\xi_q| \leq 1$, com q pertencente ao domínio temporal.

Por outro lado, o critério de convergência mais utilizado é a condição de Courant-Friedrichs-Lewy que pode ser resumida da forma seguinte:

- A solução só é convergente no caso da curva característica da equação, num ponto genérico p para o tempo t^{n+1} , interceptar a recta correspondente ao nível t^n entre os pontos espaciais dos quais depende a fórmula de discretização utilizada.

Estas propriedades são muito importantes na escolha dos métodos numéricos a aplicar em cada problema, assim como determinam, frequentemente, os valores admissíveis para os parâmetros associados aos algoritmos de discretização.

No caso em que a solução numérica de um problema prático, envolvendo PDE's ou sistemas de PDE's, apresente um comportamento caracterizado pela existência de perfis abruptos e/ou choques, é inevitável a ocorrência de problemas de difusão e dissipação numérica a quando da aplicação de qualquer algoritmo numérico. Estes factores podem ser entendidos através da análise de Fourier. Embora o factor de amplificação ξ_q (vd. equação 1.61) se mantenha, a amplitude A_i e a fase $\beta_n p h$ (vd. equação 1.60) são alteradas pelo método numérico. A dispersão é provocada pelo facto da propagação de cada uma das ondas se efectuar com uma velocidade diferente devido ao desfasamento provocado. Assim, originam-se oscilações na solução

numérica (vd. Figura 1.17). Por outro lado, a dissipação resulta da atenuação ou amplificação das ondas, o que provoca o alargamento da frente que se estende por uma região do domínio mais larga.

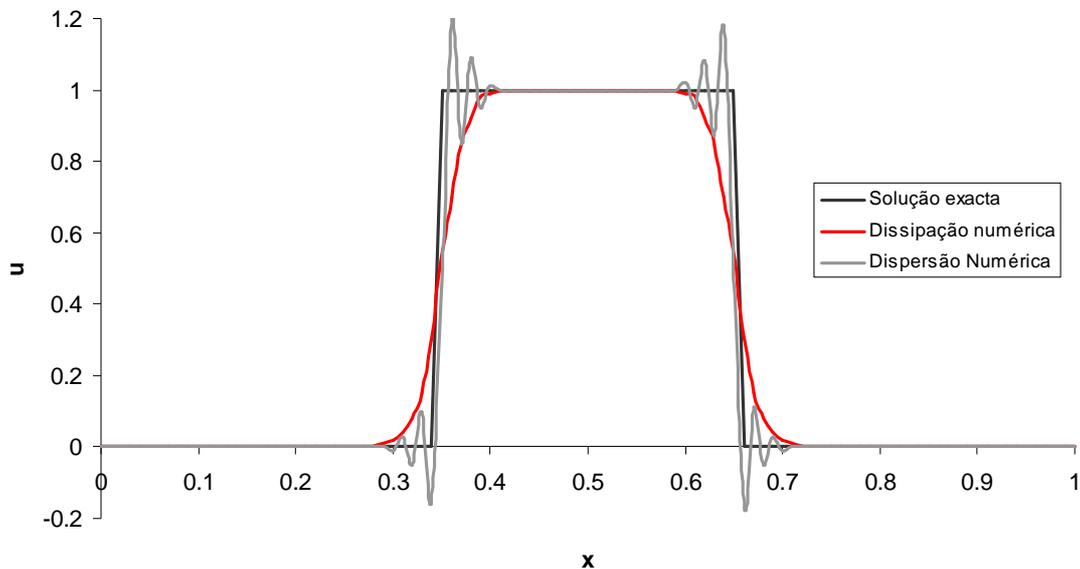


Figura 1.17 Ilustração do efeito da difusão e da dissipação numérica em relação à solução exacta.

É impossível evitar simultaneamente a ocorrência destes dois fenómenos numa simulação numérica. No entanto, é possível, através da adequada parametrização do algoritmo, minimizar os seus efeitos, procurando, na medida do possível, encontrar as condições que evitem a excessiva predominância de um dos efeitos que conduzirá à obtenção de perfis de solução irrealistas.

No contexto do tema tratado no trabalho presente que se relaciona com a resolução de modelos diferenciais caracterizados por soluções que exibem frentes abruptas móveis, é conveniente focar-se a atenção no problema relativo aos termos convectivos. Estes estão normalmente associados ao carácter hiperbólico da solução, e revelam-se bastante importantes na análise do tratamento desses factores. Quando a solução é suave qualquer esquema de discretização de ordem elevada aplicado ao termo convectivo conduz a soluções estáveis com uma malha de dimensão razoável. No entanto, estes esquemas revelam-se inadequados na presença de frentes abruptas móveis, levando à introdução de significativa dispersão numérica ou mesmo de instabilidade nos perfis da solução estimada. Uma excepção corresponde ao upwind difference scheme (UDS) proposto por Courant, Isaacson e Rees (1952)[35,36] que é incondicionalmente estável mas que apresenta a limitação de ser um esquema de primeira ordem, totalmente incompatível com a exigências de desempenho actuais. Uma forma alternativa de contrariar este problema consiste na aplicação dos designados esquemas de alta resolução (High Resolution Schemes – HRS) que genericamente recorrem a limitadores de fluxo/declive de modo a controlar os gradientes em torno de choques ou discontinuidades, de forma a evitar o desenvolvimento de oscilações nos perfis numéricos. Estes esquemas podem ser interessantes no âmbito da discretização específica da função F (vd. equação 1.49) associada a termos convectivos, merecendo uma discussão mais aturada, que é realizada no próximo capítulo.

Os diferentes métodos de geração de soluções numéricas de PDE's não são mais que a aplicação de diversas ferramentas para a resolução do mesmo problema: obtenção duma aproximação numérica da solução com uma exactidão aceitável e utilizando tempos computacionais realistas. Cada uma das estratégias propostas apresenta, necessariamente, vantagens e desvantagens em relação às restantes. Para evidenciar a semelhança estrutural entre os diversos métodos, recorre-se ao conceito de convolução. A convolução é uma operação matemática (notada por *) entre duas funções, f e g , para a construção de uma terceira, que é genericamente considerada como uma versão modificada de uma das funções originais. Assim, por definição,

$$(f * g)(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau)g(t - \tau) d\tau. \quad (1.62)$$

Esta operação tem diversas aplicações, incluindo estatística, processamento de imagem e de sinal, e resolução de equações diferenciais. Deste modo, considere-se a existência de uma solução generalizada para a PDE inicial na forma do operador linear[37]:

$$f(x, t_0 + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} w(\varepsilon) f(x + \varepsilon, t_0) d\varepsilon, \quad (1.63)$$

em que: $w(\varepsilon)$ – função peso ou Kernel escolhida, que pode ser generalizada de modo a se tornar dependente do tempo e da solução, no caso de equações não lineares; τ – incremento no tempo; ε – variável espacial auxiliar; $f(x, t_0)$ – condição inicial; $f(x, t_0 + \tau)$ – solução desejada após o intervalo de tempo τ .

Por uma questão de simplicidade a equação 1.63 corresponde ao caso unidimensional. Assim, os métodos de integração diferem entre si pela forma como é definida a função $w(\varepsilon)$. É claro que, de modo a que o problema seja completamente enunciado, torna-se ainda necessário explicitar as devidas condições fronteira. Assim, através do uso repetido da equação 1.63, obtém-se a solução do problema de valor inicial até ao cálculo de $f(x, T)$ para o tempo $T = N\tau$. É igualmente possível generalizar a equação para o caso de problemas mistos de valor inicial e problemas às condições fronteira.

Como foi referido anteriormente, é necessário converter o problema original para o domínio discreto. Assim, o integral de convolução na forma digital tem a forma:

$$f_j^{n+1} = \sum_{k=-K_M}^{k=+K_M} A_k f_{j+k}^n \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm K_M \quad (1.64)$$

onde: A_k – uma função discreta análoga a $w(\varepsilon)$, dependente do problema no domínio contínuo e do método de conversão utilizado; k – índice de contagem com valor máximo K_M , que é definido de modo a que A_{K_M} ou A_{-K_M} não sejam simultaneamente nulos; j – índice espacial de discretização; n – índice temporal de discretização; f_j^n – condições iniciais discretas; f_j^{n+1} – solução após o passo temporal Δt .

Como anteriormente, é necessário definir as condições fronteiras apropriadas do problema.

O integral de convolução no formato digital é igualmente aplicável a algoritmos de integração do tipo implícito (através da introdução de uma segunda função peso),

assim como pode ser generalizado para problemas multidimensionais e com duas ou mais variáveis dependentes.

A forma como os coeficientes A_k são avaliados é substancialmente diferente para cada método de integração. Na Tabela 1.12 são apresentados os principais grupos de métodos de resolução de equações diferenciais, resumindo-se as diferentes estratégias de cálculo de A_k para cada um deles.

Tabela 1.12 Resumo dos grupos de métodos de integração principais[37].

Método	Método de Cálculo dos Coeficientes da Função Kernel A_k
Computacional	
Diferenças Finitas	⇒ Séries de expansão de Taylor.
Elementos Finitos	⇒ Polinómios de interpolação (lineares, quadráticos, cúbicos, etc) ou de Hermite e Funções Spline.
Espectrais	⇒ Funções ortogonais (Séries de Fourier, Legendre ou Polinómios de Chebishev).
Esquemas de Filtro	⇒ Transformada de Fourier da função de resposta do sistema de equações.
Wavelets	⇒ Funções wavelet.

Os métodos de Diferenças Finitas e de Elementos Finitos são, sem dúvida, os mais amplamente utilizados e estudados, enquanto que os esquemas wavelet são os mais recentes. Algumas das estratégias referidas na Tabela anterior são discutidas com maior pormenor no próximo capítulo.

REFERÊNCIAS

1. http://en.wikipedia.org/wiki/Scientific_method (consulta em 1/02/2010).
2. http://en.wikipedia.org/wiki/Timeline_of_the_history_of_scientific_method (consulta em 1/02/2010).
3. Aristóteles, *Prior Analytics*; Hugh Tredennick (1938) (trans.), pp. 181-531 in Aristotle, **Volume 1**, Loeb Classical Library, William Heinemann, London, UK.
4. P. Godfrey-Smith (2003) *Theory and Reality: An introduction to the philosophy of science*, University of Chicago Press.
5. W.S. Jevons (1874) *The Principles of Science: A Treatise on Logic and Scientific Method*, Dover Publications.
6. J.R. Platt (1964) "Strong inference", *Science*, **146** (3642), pp. 347-353; disponível em http://256.com/gray/docs/strong_inference.html
7. R.D. King, J. Rowland, S.G. Oliver, M. Young, W. Aubrey, E. Byrne, M. Liakata, M. Markham, P. Pir, L.N. Soldatova, A. Sparkes, K.E. Whelan, A. Clare (2009) "The Automation of Science", *Science*, **324** (5923), pp. 85-89; doi:10.1126/science.1165620
8. C.S. Peirce (1877) "The fixation of belief", *Popular Science Monthly*, **12**, pp. 1-15; disponível em <http://www.archive.org/stream/popscimonthly12yoummiss/popscimonthly12yoummiss.txt>
9. A. Einstein, L. Infeld (1938) *The Evolution of Physics: from early concepts to relativity and quanta*, Simon and Schuster, New York.
10. <http://en.wikipedia.org/wiki/Modelling> (consulta em 1/02/2010).
11. J.M. Favre (2006) Megamodelling and Etymology, in *Transformation Techniques in Software Engineering* (J.R. Cordy, R. Lämmel, A. Winter, eds.), Dagstuhl Seminar Proceedings 05161, Internationales Begegnungs- und Forschungszentrum für Informatik (IBFI), Schloss Dagstuhl, Germany: Dagstuhl, Germany; disponível em <http://drops.dagstuhl.de/opus/volltexte/2006/427>

12. http://www-inst.eecs.berkeley.edu/~cs184/fa08/Utah_teapot.png
13. http://www.cs.utah.edu/gdc/projects/alpha1/help/man/html/model_repo/model_teapot/fine-ray-small.jpg
14. Muriel Gottrop (2005); disponível em <http://en.wikipedia.org/wiki/Aljubarrota> (14/05/2005).
15. "Occam's razor" (2003) in *Merriam-Webster's Collegiate Dictionary*, 11th ed., Merriam-Webster, New York.
16. <http://en.wikipedia.org/wiki/Science> (consulta em 1/02/2010).
17. <http://en.wikipedia.org/wiki/Technology> (consulta em 1/02/2010).
18. <http://en.wikipedia.org/wiki/X-ray> (consulta em 1/02/2010).
19. W. Pafko (2000) *History of Chemical Engineering*; disponível em <http://www.pafko.com/history>
20. D.E. Seborg, T.F. Edgar, D.A. Mellichamp (1989) *Process Dynamics and Control*, John Wiley & Sons, Singapore.
21. F. Patrone (2005) *Introduction to Ordinary Differential Equations*; notas disponíveis em http://www.diptem.unige.it/patrone/differential_equations_intro.pdf
22. Jorge Stolfi (2009); disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Cartesian_coordinate_system, http://en.wikipedia.org/wiki/Cylindrical_coordinate_system, http://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_coordinate_system; (3/05/2009).
23. A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W. Schiesser (2001) "Chapter 1 – Introduction", in *Adaptive Method of Lines*, (A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W.E. Schiesser, eds.), Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, pp. 1-37.
24. http://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell's_equations (consulta em 1/02/2010).
25. http://en.wikipedia.org/wiki/Navier-Stokes_equations (consulta em 1/02/2010).
26. D. Ginsburg, B. Groose, J. Taylor, B. Vernescu "Chapter 2 – History of the Differential from the 17th Century", in *The History of the Calculus and the Development of Computer Algebra Systems*; disponível em <http://www.math.wpi.edu/IQP/BVCalcHist/calc2.html>
27. H. Brezis, F. Browder (1998) "Partial Differential Equations in the 20th Century" *Adv. Math.*, **135** (1), pp. 76-144.
28. A. Otto (2009) "Chapter 3 – Properties of Partial Differential Equations", in *Methods of Numerical Simulation*, pp. 29-44; disponível em <http://how.gi.alaska.edu/ao/sim/chapters/chap3.pdf>
29. <http://webphysics.davidson.edu/Faculty/wc/waveHTML/node6.html> (consulta em 1/02/2010).
30. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc. Thesis, DEQ-FACTUC, Coimbra, Portugal.
31. F. Liu (2007) *Classification of Partial Differential Equations*, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of California, Irvine – não publicado.
32. Pbroks13 (2009); disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Conic_section (10/02/2009).
33. http://en.wikipedia.org/wiki/Partial_differential_equation (consulta em 1/02/2010).
34. Bill Casselman (2007); disponível em <http://www.math.ubc.ca/~cass/Euclid/ybc/ybc.html> (25/05/2007); Yale Babylonian Collection.
35. R. Courant, E. Isaacson, M. Rees (1952) "The solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences", *Commun. Pure Appl. Math.*, **5** (3), pp. 243-255.
36. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method", *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
37. M.B. Abbott, D.R. Basco (1989) *Computational Fluid Dynamics*, Longman Scientific & Technical, Singapore.

2. ESTRATÉGIAS DE ADAPTAÇÃO

No capítulo precedente apresentou-se uma reflexão centrada na relação entre as características da racionalização científica, a consequente necessidade de construção de modelos matemáticos e a sua posterior resolução através de estratégias numéricas. Neste capítulo, o interesse centra-se agora no aprofundamento da discussão referente aos métodos específicos de solução numérica de sistemas algébrico-diferenciais parciais e à introdução do conceito de adaptação no contexto desses esquemas numéricos.

2.1 MALHAS

A aplicação da resolução numérica de equações diferenciais que representam a modelação de fenómenos no espaço-tempo contínuo envolve necessariamente a discretização do domínio do problema. Tal implica a determinação da solução u em posições discretas no espaço e no tempo. O conjunto destas posições define uma grelha ou malha de nodos onde a solução, para o caso mais simples unidimensional, é geralmente notada por,

$$u_j^n = u(x_j, t_n), \quad (2.1)$$

correspondente ao nodo situado na posição espacial j , para o tempo n .

A questão da fragmentação de um domínio contínuo num conjunto de subdomínios discretos constitui-se como um campo de pesquisa especializado designado por Mesh (or Grid) Generation – Geração de Malhas (ou de Grelhas) com aplicação numa gama diversificada de áreas distintas, incluindo a resolução de equações diferenciais parciais, principalmente no contexto de implementação de estratégias de elementos finitos[1,2].

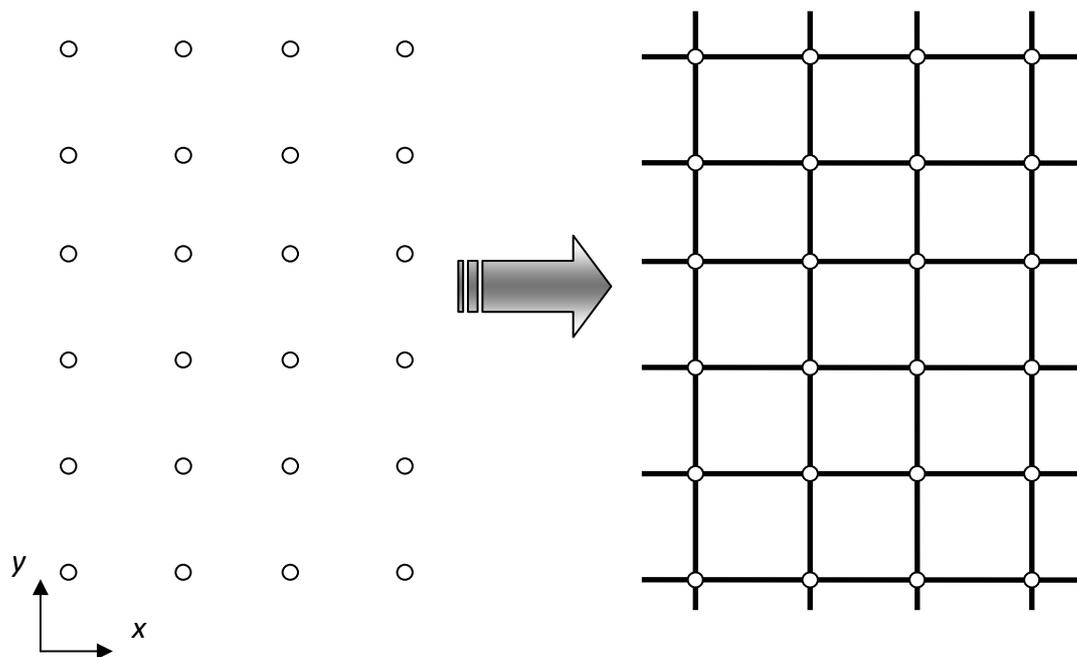


Figura 2.1 Exemplo típico de uma malha bidimensional estruturada.

No entanto, a malha não pode ser somente definida como um mero conjunto de nodos mas igualmente pelas relações estabelecidas entre subconjuntos de nodos que representam geometrias locais. A informação que determina os mecanismos de comunicação entre cada nodo e os seus vizinhos (que é dispensada na implementação dos designados métodos meshless) constitui um aspecto muito importante no processo de geração de uma malha.

Assim, as malhas de nodos podem ser classificadas como[3]:

- Malhas estruturadas (vd. Figura 2.1) – formada pela intersecção de superfícies relacionadas com as direcções coordenadas;
- Malhas não estruturadas (vd. Figura 2.2) – a distribuição das intersecções nodais não apresenta qualquer relação aparente com as direcções coordenadas.

Uma malha estruturada ou regular consiste numa tesselação¹ de um espaço Euclidiano através de um conjunto coerente e regular de figuras geométricas (e.g. rectângulos no caso bidimensional ou paralelepípedos em espaços tridimensionais). Assim, a mera definição da distribuição das posições nodais ao longo do domínio descreve implicitamente a geometria local da malha que se repete regularmente ao longo da totalidade do domínio. Deste modo, não é necessário estabelecer qualquer informação adicional na construção da malha, já que a sua regularidade torna óbvias as relações de comunicação entre vértices vizinhos e a geometria de cada elemento (vd. Figura 2.1).

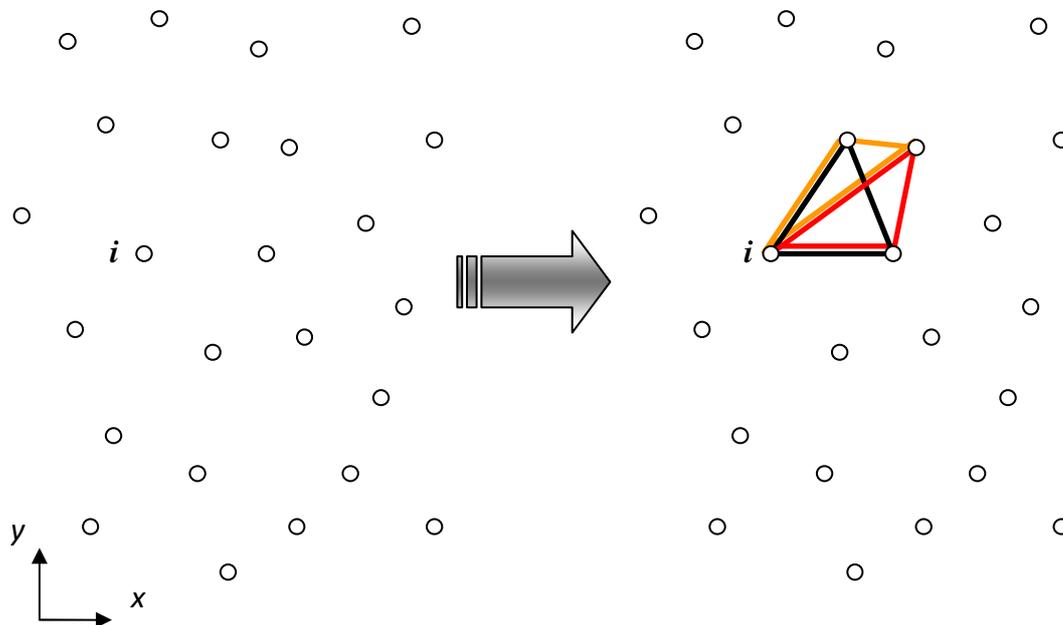


Figura 2.2 Exemplo típico de uma malha bidimensional não estruturada.

Por outro lado, uma malha não estruturada ou irregular é uma tesselação de um espaço Euclidiano por estruturas geométricas simples (e.g. triângulos ou tetraedros que representam os simplex, ou seja, as figuras mais simples passíveis de ser

¹ Tesselação de um espaço consiste no preenchimento da totalidade desse espaço através da introdução de um conjunto de figuras geométricas que se encaixam entre si sem qualquer sobreposição.

construídas em espaços bi- e tridimensionais, respectivamente) dispostas de uma forma irregular. Ao contrário das malhas estruturadas, a geração de malhas não estruturadas implica o estabelecimento adicional de informação que especifique a forma como cada conjunto local de vértices define os elementos individuais, ou seja, a geometria local específica da malha. Por exemplo, considere-se o nodo i presente na malha não estruturada representada na Figura 2.2. Verifica-se facilmente que a natureza irregular da malha implica a definição suplementar do conjunto de nodos que comunicam directamente com o nodo i , já que é possível definir diferentes alternativas para um elemento que inclua i (vd. Figura 2.2, onde três destas alternativas são esquematizadas). No entanto, constata-se na prática que esta aparente desvantagem característica das malhas não estruturadas, é frequentemente compensada pela sua notória flexibilidade, que as torna especialmente adequadas para aplicação no âmbito da análise de elementos finitos ou e volumes finitos, especialmente no contexto da geração adaptativa de malhas. A rigidez típica das malhas estruturadas e a sua natureza ordenada são mais apropriadas para a implementação de esquemas de diferenças finitas.

2.2 MÉTODOS DE RESOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS (PDE'S)

2.2.1 INTRODUÇÃO

No capítulo anterior são apresentados os principais métodos de integração numérica de equações diferenciais parciais. No entanto, apenas são referidas as estratégias gerais em que se baseia cada método de uma forma superficial. É óbvio que, a partir de cada perspectiva, foi desenvolvido um grande número de algoritmos numéricos distintos, através da aplicação dos conceitos básicos associados a cada método.

De facto, a resolução numérica de equações diferenciais está longe de ser uma questão recente. Na verdade, revela-se um problema assaz antigo, que constitui um objecto de estudo já com alguns séculos de história. De forma a ilustrar esse facto, destaca-se o trabalho de Gear e Skeel, 1990[4], que apresentam uma interessante revisão histórica sobre a origem e evolução de métodos numéricos para a resolução de ODE's. Assim, os autores citam a afirmação de Forest Ray Moulton (1872-1952) que atribui aos *Principia (Philosophiae Naturalis Principia Mathematica)* de Newton, a primeira aplicação de métodos numéricos para a obtenção de soluções aproximadas de equações diferenciais[5].

Posteriormente, os sucessores de Newton aplicaram estratégias numéricas na aproximação e resolução de problemas práticos específicos descritos por modelos diferenciais desenvolvidos para a simulação dos mecanismos da mecânica celeste. Este tipo de cálculos intensivos e extremamente morosos, que implicava o recurso a processos manuais e à possível ajuda de dados tabelados, conduziu a um dos processos de cálculo mais importantes da História da Ciência realizado pela colaboração entre Alexis Claude de Clairaut (1713-1765), Joseph Jérôme Lalande (1732-1807) e Nicole-Reine Étable de la Brière Lepaute (1723-1788), que levou à previsão de um atraso no regresso do cometa Halley de 1682, devido a perturbações na sua órbita induzidas pela influência dos planetas gigantes Júpiter e Saturno. Deste modo, foi obtida uma estimativa para o periélio do cometa Halley, de 13 de Abril de 1749, que se verificou estar errada apenas por 31 dias. A evolução dos procedimentos

de cálculo, ainda manuais, permitiu que o regresso seguinte do Halley em 1835 fosse previsto com um erro de 5 dias, e que a estimativa seguinte para 1910 apresentasse um erro de somente 2.7 dia[6].

De acordo com Goldstine[7], o precursor dos métodos numéricos actuais é indubitavelmente Leonhard Euler (1707-1783) que no seu capítulo, *De integratione Aequationum Differentialium per Approximationem*, não só apresenta uma descrição do chamado método poligonal ou de Euler para a equação geral do tipo IVP:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad (2.1)$$

como define um método sequencial baseado na série de Taylor que é aplicado a vários exemplos como $f(x, y) = x^n + cy$. O método de Euler constituiu a fundamentação para a primeira demonstração de existência de soluções de ODE's realizada por Augustin-Louis Cauchy (1789-1857) um século depois. Posteriormente, partindo da ideia simples de passo único inerente ao Método de Euler, desenvolveram-se métodos mais complexos baseados em processos em que o intervalo finito de integração é dividido em passos intermédios, possibilitando assim um aumento da ordem de aproximação do método. Desta forma, a avaliação de quantidades nas posições intermédias implica necessariamente a aplicação de um esquema interpolador. Adicionalmente, pode-se distinguir dois tipos de procedimentos numéricos: explícitos e implícitos. No caso de métodos explícitos, as operações de cálculo da solução para um determinado nível n dependem apenas de quantidades referentes a níveis anteriores. Por outro lado, no caso de métodos implícitos o cálculo de uma solução no nível n depende igualmente de quantidades definidas a esse nível. Assim, uma estratégia de aplicação de métodos implícitos implica o estabelecimento de um algoritmo de dois passos em que o primeiro passo, dito preditivo utiliza um processo explícito para estimar a solução, e o segundo passo, designado por correctivo, introduz a estimativa prévia preditiva para a avaliação da solução através da expressão implícita. No entanto, a estratégia preditiva-correctiva também pode ser aplicada num contexto totalmente explícito. Como exemplo de métodos referidos anteriormente, é possível destacar a bem conhecida família de métodos designados genericamente por Runge-Kutta(RK), nomeados em homenagem a Carl Runge (1856-1927) e Wilhelm Kutta (1867-1944). A expressão geral para os métodos RK explícitos é dada por[8]:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (2.2)$$

onde, h é o tamanho do passo global, s é o número de passos intermédios associado à ordem de aproximação do método, b_i são parâmetros dedutíveis característicos de cada algoritmo e k_i são declives médios correspondentes a valores de f em pontos intermédios pré-estabelecidos.

Runge, um especialista em Matemática Aplicada, apresentou num trabalho de 1895[9] dois métodos bem conhecidos de segunda ordem em dois passos baseados na regra do ponto médio e na regra trapezoidal, respectivamente[7]. Karl Heun (1859-1929), em 1900, desenvolveu o trabalho de Runge e determinou os coeficientes de um conjunto de fórmulas do tipo RK, incluindo a correspondente a um procedimento em três passos de terceira ordem[4,10]. No entanto, foi Kutta que em 1901[11]

estabeleceu a definição geral dos métodos de RK explícitos no formato conhecido actualmente, e deduziu as equações não lineares que determinam os valores dos parâmetros correspondentes a uma determinada ordem de aproximação.

Por outro lado, refere-se igualmente o desenvolvimento de algoritmos multi-passo, que utilizam a informação obtida em passos anteriores para a implementação dos passos posteriores. Assim, os métodos multi-passo lineares de Adams-Bashforth(AB) e de Adams-Moulton(AM) foram deduzidos pelo matemático britânico John Couch Adams (1819-1892) em 1883 como ferramentas para a resolução de modelos diferenciais de capilaridade deduzidos por Francis Bashforth (1819-1912)[4,12]. O método AB é definido por expressões explícitas, apresentando-se de seguida a expressão geral para a versão AB de dois passos[13]:

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{3}{2}hf(t_{n+1}, y_{n+1}) - \frac{1}{2}hf(t_n, y_n) \quad (2.3)$$

O método AM é semelhante ao método AB, apresentando no entanto uma natureza implícita. Deste modo enquanto que um algoritmo AB de passo s apenas atinge uma ordem s , o correspondente algoritmo AM pode atingir uma ordem $s+1$.

O método implícito de Adams-Moulton, tal como o método explícito de Adams-Bashforth, são devidos ao trabalho exclusivo de Adams. Porém, o nome de Forest Ray Moulton, um professor de Astronomia da Universidade de Chicago, foi associado a este método devido ao facto deste se ter apercebido em 1926 que os dois métodos anteriores, AB e AM, podiam ser usados em conjunto numa lógica preditiva-correctiva[4,13,14].

No entanto, estes algoritmos estavam limitados a aplicações de passo fixo e a problemas não stiff. O progressivo aumento da capacidade de memória computacional proporcionou o desenvolvimento a partir de meados do século XX, de métodos numéricos ditos adaptativos de passo variável, de que se destaca um dos pioneiros devido a R.H. Merson em 1957[15], que ficou conhecido como o método Runge-Kutta-Merson, e de algoritmos adequados a sistemas diferenciais stiff. Os esquemas adaptativos baseiam-se intimamente em algoritmos de passo fixo acoplados a estratégias de estimativa do erro local que são usadas para ajuste do valor do passo h , de modo a que um determinado nível de exactidão seja verificado. Como se verá adiante, a conveniente monitorização do erro associado à aproximação numérica consiste na característica essencial e emblemática de qualquer esquema numérico adaptativo.

Por outro lado, o trabalho mais antigo relacionado com equações diferenciais stiff deve-se a Curtiss e Hirschfelder em 1952[16] que descreve um algoritmo numérico de resolução que posteriormente será designado por Backward Differentiation Formula – BDF. Os métodos BDF são, como a própria designação indica, definidos por fórmulas de diferenciação backward, ou seja estabelecidas no sentido contrário ao sentido da evolução da integração do IVP. Este tipo de métodos é particularmente útil na resolução de equações diferenciais ou algébrico-diferenciais stiff.

É conveniente agora estabelecer uma referência ao significado da propriedade genericamente designada por stiffness no contexto dos problemas diferenciais ordinários. Apesar de ser reconhecidamente importante neste âmbito, não existe uma definição universalmente aceite para a noção de stiffness. No entanto, pode-se afirmar

que está necessariamente relacionada com os valores próprios (λ_i 's) da matriz Jacobiana do problema que caracterizam a estabilidade do sistema. Assim, no caso da parte real de λ_i , $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ para todos os valores próprios, uma medida de stiffness pode ser dada pela definição do índice de stiffness[17]:

$$L = \max |\text{Re}(\lambda_i)|, \quad (2.4)$$

ou pela razão de stiffness,

$$S = \frac{\max |\text{Re}(\lambda_i)|}{\min |\text{Re}(\lambda_i)|}. \quad (2.5)$$

Um problema é considerado stiff se a sua medida de stiffness for “elevada” (e.g. > 500). Torna-se claro a partir dos anos 50 do século XX a necessidade de desenvolvimento de procedimentos numéricos que levem em conta esta questão, já que se verifica que a ocorrência de problemas diferenciais stiff é muito mais vulgar do que o esperado. No entanto, é conhecida a adequação dos métodos implícitos a problemas em que a questão da estabilidade não é de todo trivial, restringindo consideravelmente a fixação do passo de integração. No entanto, este tipo de métodos implica normalmente a geração de sistemas não lineares de equações algébricas que exigem a aplicação de esquemas eficientes para a sua resolução.

Os esquemas BDF, também designados por método de Gear[18], possibilitam a avaliação de uma aproximação a derivada de y na posição x_n em termos dos valores de $y(x)$ em x_n e em posições anteriores x_{n-1} até x_{n-s} . Estes valores são calculados através da avaliação de polinómios interpolativos de ordem s e da sua consequente diferenciação para posterior determinação da estimativa de y' em x_n . Assim, uma fórmula BDF de ordem s apresenta a forma genérica[19]:

$$hy'_n = \sum_{j=0}^s \alpha_{sj} y_{n-j}, \quad (2.6)$$

em que os coeficientes α_{sj} são característicos de cada ordem. A equação 2.6 possibilita uma ilustração relativamente simples da estratégia em que se baseiam os métodos BDF para problemas diferenciais e algébrico-diferenciais de índice não superior a 1. No entanto, as aplicações computacionais destes esquemas implementam versões de passo e ordem variáveis deste método (vd. Anexo C para a descrição do código DASSL).

Discutiu-se acima uma cronologia histórica resumida da evolução dos métodos numéricos mais importantes para a resolução de ODE's (ou sistemas de ODE's). Importa agora focar a atenção nas estratégias numéricas desenvolvidas para a resolução de problemas diferenciais parciais. Nesse sentido, salientam-se as abordagens de Thomée, 2001[20] e de Oden, 1990[21], que apresentam uma interessante perspectiva histórica sobre o progresso dos métodos de diferenças finitas e elementos finitos. O trabalho de Thomée[20] analisa a origem do método de diferenças finitas no final dos anos 20, e o seu subsequente desenvolvimento nas décadas seguintes, e discute a emergência posterior do método de elementos finitos e a sua crescente importância no âmbito da análise numérica de PDE's a partir da década de 1960. Por outro lado, Oden[21] centra-se exclusivamente na discussão do desenvolvimento e consequente evolução dos esquemas de elementos finitos.

Apesar de ser difícil identificar uma contribuição individual bem definida que se possa considerar como a origem incontestável dos métodos numéricos de Diferenças Finitas (FDM), afigura-se consensual a importância do trabalho devido a Richard Courant (1888-1972), Kurt Friedrichs (1901-1982) e Hans Lewy (1904-1988) em 1928[22], tido como seminal no contexto do campo da resolução numérica de PDE's.

Para além de aplicações numéricas de diferenças finitas para resolução de problemas como a equação de onda, o artigo de Courant et al., 1928[22] apresenta o enunciado da condição necessária para a convergência de esquemas numéricos para resolução de PDE's, designado por princípio Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), já apresentado no capítulo anterior numa versão textual. Este princípio é especialmente importante para aplicações a modelos de carácter hiperbólico, ou seja afectados por advecção de uma forma total ou parcial.

Assim, para o caso particular de problemas unidimensionais, a condição CFL pode ser enunciada algebricamente da forma seguinte[23]:

$$\frac{v\Delta t}{\Delta x} < C, \quad (2.7)$$

em que a quantidade $\frac{v\Delta t}{\Delta x}$ é designada por número de Courant. É óbvio que a verificação da condição CFL implica a limitação do valor do passo temporal Δt , dependente do tamanho local da malha espacial Δx . Resumidamente, a condição CFL traduz a imposição de um passo temporal suficientemente pequeno de modo a que a onda advectiva que parte de uma posição nodal específica i não ultrapasse as posições nodais dos pontos adjacentes, nomeadamente dos que definem a aproximação à solução no nodo i . Como corolário desta condição, conclui-se que à medida que os espaçamentos nodais diminuem, o limite superior para o passo temporal admissível também se vai reduzindo. Deste modo, o controlo da condição de estabilidade pode tornar-se problemática no caso de malhas de espaçamento reduzido, já que impõe severas restrições ao avanço da integração temporal. Este problema pode ser parcialmente ultrapassado através do recurso a estratégias implícitas.

No contexto dos métodos de diferenças finitas para problemas evolutivos, verifica-se a ocorrência de significativo progresso durante os anos de 1940, quando as aplicações de larga escala se tornaram possíveis devido ao desenvolvimento do cálculo automático computacional[20]. Neste período pode-se destacar o trabalho de John von Neumann (1903-1958) e um esboço inicial da teoria aplicável a problemas parabólicos, devido a John, 1952[24]. Estabelecem-se igualmente os primeiros métodos implícitos para problemas mistos de valor inicial e fronteira, e.g. Crank e Nicolson, 1947[25].

Posteriormente, a teoria de diferenças finitas para IVP's gerais e problemas parabólicos em particular, conheceu um intenso desenvolvimento através das décadas de 1950 e 1960, em que o conceito de estabilidade foi explorado através do teorema da equivalência de Lax e os lemas da matriz de Kreiss, e se verificaram variadas contribuições adicionais de Douglas, Lees, Samarskii, Widlund e outros. Por outro lado, tendo como ponto de partida o trabalho de, e.g., Friedrichs, Lax e Wendroff, o método de diferenças finitas assumiu um papel dominante na resolução de equações do tipo

hiperbólico (especificamente, leis conservativas não lineares) que se mantém até ao tempo presente[20].

A origem do método de Elementos Finitos (FEM) é um assunto controverso, já que depende da selecção da sua característica distintiva mais importante, ou seja da definição do que efectivamente é um método de elementos finitos.

Assim, se a opção recair sobre o destaque da estratégia de utilização de aproximações polinomiais definidas em intervalos (piecewise polynomial approximations), é normalmente seleccionado como trabalho pioneiro, o artigo de Courant, 1943[26], baseado numa comunicação realizada na American Mathematical Society, em 1941, onde se propõe a utilização de funções aproximativas lineares contínuas piecewise, definidas sobre um conjunto de estruturas triangulares (elementos) adaptadas à geometria do domínio. Apesar de esta ideia não ser propriamente nova e já aparecer em trabalhos anteriores de outros autores, incluído o próprio Courant, o artigo de 1943 é geralmente creditado como o ponto de partida para o método de Elementos Finitos, juntamente com o trabalho de Alexander Hrennikoff (1896-1984) em 1941[27], que propõe uma estratégia baseada numa “lattice analogy”, em que a aproximação global a uma equação diferencial parcial é construída a partir de uma sequência de aproximações locais definidas sobre subdomínios. O método de Hrennikoff implica igualmente uma discretização do domínio em subdomínios que posteriormente foram designados por elementos. No entanto, o desenvolvimento e a consequente análise do método apenas ocorreriam algum tempo mais tarde. Ainda no âmbito das características de aproximação funcionais piecewise do FEM, Oden[21] refere a possibilidade de se recuar até ao trabalho de Gottfried Leibniz (1646-1716) para a resolução do problema Brachistochrone proposto por Bernoulli em 1696, baseado na dedução de um problema diferencial (cuja solução é uma curva cicloide) através uma aproximação linear piecewise. No entanto, reconhece-se que a creditação deste trabalho como um proto-método do tipo FEM é algo abusivo já que Leibniz reconhecidamente não pretendia resolver, mas deduzir um modelo diferencial.

Alternativamente, se o critério distintivo seleccionado for o recurso a uma formulação variacional do problema diferencial para a sua resolução numérica, é possível recuar a 1851, quando Schellbach[28] propôs uma solução do tipo FEM para o problema de Plateau, baseada na construção de uma malha triangular sobre a qual a solução é aproximada por funções lineares piecewise. Por outro lado, a abordagem variacional para a resolução numérica de problemas de valor fronteira, deve-se originalmente às contribuições de Lord Rayleigh (1842-1919) em 1894 e 1896[29] e Walther Ritz (1878-1909) em 1908[30]. A opção de Ritz consistia na aproximação da solução através de uma combinação finita linear de funções (por exemplo, polinómios ou polinómios trigonométricos).

A ideia de utilização da condição de ortogonalidade em alternativa à minimização de um funcional quadrático é atribuída a Galerkin, 1915[31], sendo a sua aplicação a problemas evolutivos normalmente designada por método de Faedo-Galerkin, ou método de Petrov-Galerkin (ou Bubnov-Galerkin) quando a ortogonalidade é definida em relação a um espaço distinto. Tal como qualquer outra aplicação numérica, o FEM evoluiu historicamente em duas vertentes diferentes, mas obviamente interligadas: o desenvolvimento e análise teórica (relacionada com o campo da análise numérica), e a consequente aplicação prática, necessariamente computacional, agora

intrinsecamente ligada à área da programação informática. De facto, o FEM como aplicação computacional surge em meados da década de 1950, quando engenheiros de estruturas (fundamentalmente dos campos das engenharias aeronáutica e civil) relacionaram a análise de base já bem estabelecida relativa aos métodos variacionais no contexto da mecânica do continuum, com um processo de discretização em que o domínio é pensado com um conjunto de elementos onde as deformações e esforços internos são localmente definidos. Neste âmbito, salienta-se os trabalhos pioneiros de Turner et al., 1956[32], e Argyris, 1954[33], 1955[34] que contribuíram significativamente para uma organização eficaz dos conceitos num método de elementos finitos dito primitivo. Por esta altura, são estabelecidos os conceitos fundamentais de matriz stiffness e de geração de elementos. No entanto, a primeira referência inequívoca à designação: Método de Elementos Finitos, apenas surge num artigo de Clough, 1960[35]. A fundamentação teórica rigorosa do método é apresentada com a publicação de *An Analysis of The Finite Element Method* de Strang e Fix[36] em 1973. Nas últimas décadas, a análise de Elementos Finitos constitui-se por direito próprio como um ramo da Matemática Aplicada, para a modelação e simulação numérica de sistemas físicos relacionados com uma alargada variedade de Ciências da Engenharia, e.g. Electromagnetismo e Dinâmica de Fluidos.

Muitos dos conceitos e técnicas característicos dos métodos de diferenças e elementos finitos são semelhantes e em alguns casos particulares são mesmo coincidentes. Todavia, a possibilidade de utilização sistemática de uma abordagem variacional, a sua reconhecida flexibilidade geométrica e uma maior disponibilidade estrutural para uma eficaz monitorização de erros, conduziram a que o método de Elementos Finitos se tornasse a estratégia dominante quer numa perspectiva teórica como de aplicação prática. Esta tendência foi potenciada pela crescente necessidade de compreensão dos modelos diferenciais parciais que representam a realidade física e a revolução computacional que proporcionou o acesso à resolução de problemas de elevada escala, possibilitando a evolução do conceito de matemática computacional para um âmbito mais vasto do que o da análise matemática clássica.

Expõe-se nas secções seguintes, uma apresentação mais pormenorizada das diversas estratégias mais importantes de discretização e resolução numérica de equações diferenciais, incluindo os já discutidos métodos de Diferenças Finitas e de Elementos Finitos. Para tal, é necessário ter em conta novamente a definição do integral de convolução na forma discreta em que se baseia a generalidade dos métodos de discretização do domínio contínuo e de aproximação da solução analítica às diversas funções base disponíveis. Assim, considere-se então (vd. secção 1.8.4) a relação[37],

$$u_j^{n+1} = \sum_{k=-K_M}^{k=+K_M} A_k u_{j+k}^n \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm K_M \quad (1.64)$$

que é a expressão genérica de translação do espaço contínuo para a sua correspondente versão digital que se fundamentam as diferentes abordagens de integração numérica.

2.2.2 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS (FINITE DIFFERENCES METHOD – FDM)

A base do cálculo dos coeficientes da função-peso A_k para os métodos de Diferenças Finitas (FDM) é a expansão em série de Taylor. Por exemplo, considerando a expressão

genérica para o valor da solução no nodo $j+1$, a partir da expansão de Taylor em torno do nodo j , para o nível de tempo n , obtém-se:

$$u_{j+1}^n = u_j^n + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^n \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^n \frac{\Delta x^2}{2!} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^n \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (2.8)$$

Um possível rearranjo da equação anterior conduz a:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^n \frac{\Delta x}{2!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^n \frac{\Delta x^2}{3!} + \dots \quad (2.9)$$

Admitindo aproximações de primeira ordem, ou seja truncando a expressão 2.9 a partir da segunda derivada, tem-se então:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^n = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (2.10)$$

Assim, uma aproximação deste tipo aplicada a todas as derivadas espaciais e temporais possibilita a conversão do problema original num sistema de equações algébricas, a partir do qual é calculada a solução aproximada em cada nodo da malha.

A manipulação de equações da forma 2.8, permite explicitar os coeficientes A_k correspondentes a este método, para cada posição j e n . Deste modo, obtêm-se expressões relativas à conversão para o domínio discreto de derivadas de diferentes ordens, considerando vários níveis de aproximação, variando a dimensão e a geometria do conjunto de nodos envolvido na análise, ou seja, o valor de K_M (vd. equação 1.64).

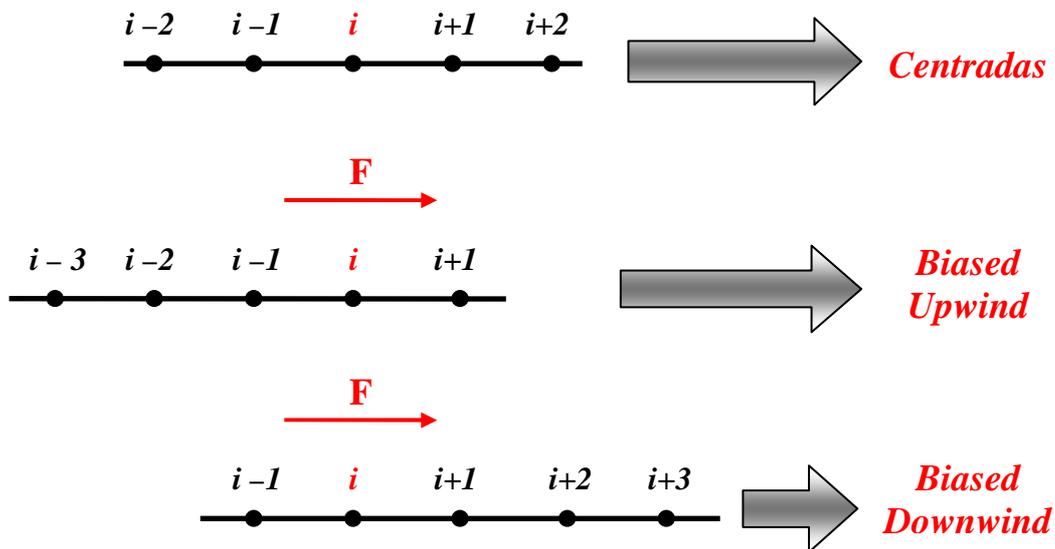


Figura 2.3 Tipos de aproximações de diferenças finitas definidas num sistema unidimensional, em relação ao sentido de propagação do fluxo F .

Deste modo, assumindo discretizações num domínio unidimensional, a colocação relativa do conjunto de nodos usado na estimativa da derivada numa posição específica i define o tipo de aproximação de diferenças finitas aplicada. Assim, no caso

já referido de o valor de K_M ser igual nos dois sentidos a partir do nodo i considerado, obtém-se uma aproximação centrada (vd. Figura 2.3). No entanto, a distinção entre as diferentes aproximações possíveis depende do sentido de propagação do fluxo associado à solução da PDE a integrar. No caso mais geral, os K_M definidos em cada um dos sentidos podem assumir valores distintos, K_{Mu} ou K_{Md} , a montante e a jusante de i , respectivamente, em relação ao sentido de propagação do fluxo \mathbf{F} (vd. Figura 2.3). Assim, tem-se uma aproximação do tipo upwind se o K_{Mu} for superior ao K_{Md} : biased upwind se $K_{Md} \neq 0$ e upwind se $K_{Md} = 0$. No caso contrário, diz-se que a aproximação é do tipo downwind: biased downwind se $K_{Mu} \neq 0$ e downwind se $K_{Mu} = 0$.

No Anexo A procede-se à apresentação de estratégias sistematizadas para a estimativa de derivadas de ordem e geometria arbitrária baseadas em malhas unidimensionais de espaçamento geral variável. No entanto, um método mais expedito é apresentado por Fornberg, 1988[38], 1992[39], que desenvolveu algoritmos recursivos para o cálculo do valor dos pesos de aproximação, para o caso mais geral de malhas de espaçamento arbitrário (vd. Anexo A).

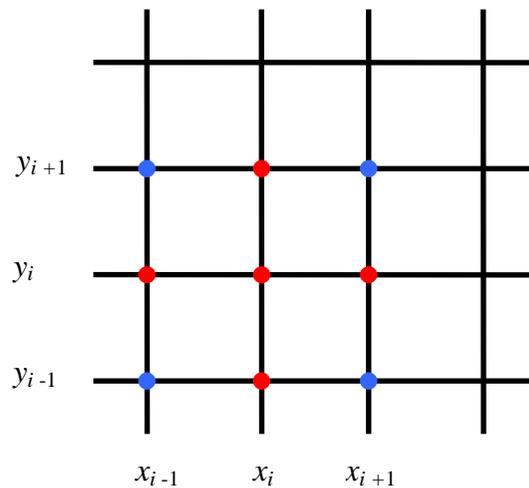


Figura 2.4 Exemplo de aproximação de diferenças finitas mista de segunda ordem num domínio bidimensional.

A estratégia de manipulação sucessiva de aproximações de derivadas de ordem crescente permite a construção de estimativas de diferenças finitas em geometrias de dimensão superior à unidimensional. Por exemplo, estima-se a derivada mista bidimensional de segunda ordem num nodo (i,j) [40]:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+1,j} - \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2), \quad (2.11)$$

aplicando as aproximações DF,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+1,j} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{2\Delta y} + O(\Delta y^2) \quad (2.12)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i-1,j} = \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{2\Delta y} + O(\Delta y^2) \quad (2.13)$$

definidas sobre o stencil esquematizado na Figura 2.4. A substituição de 2.12 e 2.13 em 2.11 conduz à aproximação de segunda ordem bidimensional:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y} + O(\Delta x^2, \Delta y^2) \quad (2.14)$$

O FDM é um método relativamente simples, acessível e fácil de implementar, mas implica um considerável nível de estruturação das malhas discretas, o que o torna geometricamente rígido, limitando a sua aplicação em problemas definidos sobre geometrias complicadas, quer do domínio como das superfícies fronteira.

2.2.3 MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS (FINITE ELEMENTS METHOD – FEM)

As dificuldades de conformação a geometrias complexas características do FDM podem ser superadas com a aplicação do que, muito provavelmente é a estratégia dominante no campo de resolução numérica PDE's: o método de Elementos Finitos (FEM).

É manifestamente complicado abordar o FEM de uma forma generalizada, já que se encontram na literatura múltiplas formas de apresentação fundamental de estratégias que são passíveis de ser enquadradas na família dos métodos de elementos finitos. Como meros exemplos da abordagem a esta questão podem-se destacar casos com preocupações práticas que se concentram essencialmente na definição do conceito de elemento dentro de um contexto de modelos típicos específicos do campo da mecânica estrutural[41], ou explanações de carácter mais teórico que, no entanto, podem ser alicerçadas em variadas abordagens devidas a Ritz[42], Galerkin[43], etc, que de uma forma ou de outra, são classificáveis como estratégias de elementos finitos. Desta forma, o que caracteriza fundamentalmente um FEM?

O método de elementos finitos (e a sua aplicação prática, normalmente conhecida por Análise de Elementos Finitos: Finite Element Analysis – FEA) é uma técnica sistematizável de aproximação da solução de equação diferencial parcial, baseada em funções base e na projecção de um dado domínio num conjunto finito e consistentes de células, ou seja, uma malha[43].

De forma a introduzir as principais características do FEM, recorre-se então à abordagem que posteriormente deu origem ao designado Método de Ritz. Deste modo, considere-se o problema de minimização seguinte[42]:

$$\min_{u \in \Sigma} J(u); \quad J(u) = \int_{\Omega} f\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) d\Omega \quad (2.15)$$

com $\Sigma = \{u \mid u \text{ suave}; u|_{\Gamma} = g\}$. No entanto, a resolução deste problema só é possível através da introdução de um número finito de incógnitas. Tal pode ser alcançado pela aproximação da solução $u(\mathbf{x})$ a uma combinação linear de um conjunto finito de funções $\phi_k(\mathbf{x})$ da forma:

$$u^n(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^n a_k \phi_k(\mathbf{x}) \quad (2.16)$$

As funções $\phi_k(\mathbf{x})$, denominadas por funções base, são escolhidas de forma a verificarem a condição: $\phi_k(\mathbf{x}) \in \Sigma$ para qualquer k . Assim, estas funções devem ser suaves e satisfazer as condições fronteira homogêneas. Tal implica que o conjunto das funções $\phi_k(\mathbf{x})$ representa um subespaço de Σ . Deste modo, o método de Ritz consiste na resolução do problema de minimização 2.15 sobre este subespaço. Como apenas os parâmetros a_k de 2.16 são desconhecidos, então o problema 2.15 reduz-se a:

$$\min_{a_i \in \mathbb{R}^n} J(a_1, a_2, \dots, a_n) \quad (2.17)$$

Obviamente que a condição necessária para a existência de um mínimo de 2.17 é dada por,

$$\frac{\partial J(u^n)}{\partial a_k} = 0, \quad k=1,2,\dots,n \quad (2.18)$$

que representa um sistema de n equações e n incógnitas que, em determinadas circunstâncias, apresenta uma solução única. Esta solução pode ser usada para a construção da solução aproximada $u^n(\mathbf{x})$, que deverá convergir para a solução analítica $u(\mathbf{x})$, à medida que n , o número de funções base, aumente. Afigura-se claro que uma escolha adequada das funções base se revela essencial para a convergência e velocidade de convergência do método de Ritz.

No entanto, porque razão se recorre a um procedimento de optimização para caracterizar um método de resolução numérica de PDE's? Esta aparente contradição é facilmente explicada se se tomar em conta que é possível provar que a solução de um problema de minimização integral satisfaz um problema diferencial associado. Por exemplo, o problema diferencial seguinte,

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = F(x) \quad (2.19)$$

com, $u(0)=0$, $\frac{du}{dx}(1)=0$, representa um conjunto de soluções que satisfazem igualmente o problema de minimização,

$$\min_{u \in \Sigma} J(u) = \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - F(x)u(x) \right\} dx \quad (2.20)$$

em que, $\Sigma = \{u | u \text{ suave}; u(0)=0\}$, desde que a solução $u(x)$ seja duplamente diferenciável no domínio definido. Deste modo, a resolução do problema diferencial 2.19 e do problema de optimização 2.20 são perfeitamente equivalentes. No entanto, o que é importante reter na abordagem de Ritz no âmbito da FEA é a estratégia particular de aproximação da solução em termos da combinação linear de funções base representada pela equação 2.16.

Outra característica importante de uma estratégia FEM é o possível recurso à formulação variacional do problema diferencial original. Deste modo, assuma-se como exemplo um problema unidimensional não evolutivo semelhante a 2.19[44]:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x) \quad (2.21)$$

com $x \in [0,1]$ e as condições fronteira, $u(0)=u(1)=0$.

Se $u(x)$ é solução de 2.21, a conversão para o equivalente variacional (ou formulação “fraca”) implica que qualquer função $\phi(x)$ suave que satisfaça as condições fronteira, i.e. $\phi(0)=\phi(1)=0$, verifica a relação,

$$\int_0^1 f(x)\phi(x) dx = \int_0^1 \left(\frac{d^2 u}{dx^2} \right) \phi(x) dx. \quad (2.22)$$

Através de integração por partes, obtém-se a expressão:

$$\int_0^1 f(x)\phi(x) dx = \int_0^1 \left(\frac{d^2 u}{dx^2} \right) \phi(x) dx = \left. \frac{du}{dx} \phi(x) \right|_0^1 - \int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \right) \left(\frac{d\phi}{dx} \right) dx = -\Phi(u, \phi). \quad (2.23)$$

Deste modo, a resolução do problema baseia-se na sua discretização, ou seja, na transformação do problema de dimensão infinita,

$$\text{encontrar } u \in \Sigma, \text{ tal que } \forall \phi \in \Sigma, \quad -\Phi(u, \phi) = \int f\phi, \quad (2.24)$$

numa versão finita definida por,

$$\text{encontrar } u \in V, \text{ tal que } \forall \phi \in V, \quad -\Phi(u, \phi) = \int f\phi, \quad (2.25)$$

em que V é um subespaço de Σ . Existem muitas possibilidades de escolha para V , que conduzem ao desenvolvimento de diferentes estratégias numéricas. No entanto, para o FEM, assume-se V como o espaço de funções polinomiais piecewise (definidas em intervalos). Assim, tome-se como exemplo o caso específico de aproximações do tipo linear.

Para tal, considere-se inicialmente a definição genérica de elemento que está associada à região do domínio que rodeia um determinado nodo (vd. Figura 2.5 para um exemplo unidimensional com apenas um nodo).

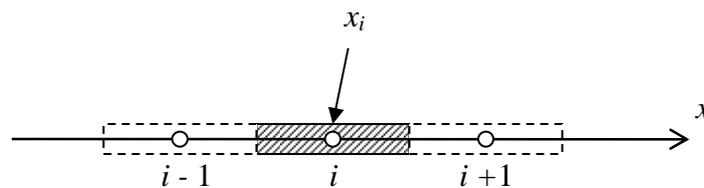


Figura 2.5 Elemento unidimensional aplicado a um nodo.

No entanto, a região do domínio seleccionada para a construção de um elemento finito pode igualmente incluir os nodos vizinhos do nodo de interesse. Assim, na Figura 2.6 esquematiza-se um exemplo de um elemento finito centrado para o nodo localizado na posição x_i definido com base numa estratégia de interpolação linear.

Num domínio unidimensional, uma estratégia interpoladora do tipo linear (vd. Figura 2.6) implica a utilização da expressão geral de uma recta:

$$u(x) = mx + b, \quad (2.26)$$

em cada intervalo. Os coeficientes m e b representam o declive e a ordenada na origem, respectivamente, e são avaliados através do uso das posições nodais conhecidas: $u = u_1$ para $x = x_1$ e $u = u_2$ para $x = x_2$. Assim, para o par de equações:

$$\begin{cases} u_1 = mx_1 + b \\ u_2 = mx_2 + b \end{cases} \quad (2.27)$$

obtém-se,

$$m = \frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1} \quad e \quad b = \frac{u_1 x_2 - u_2 x_1}{x_2 - x_1}. \quad (2.28)$$

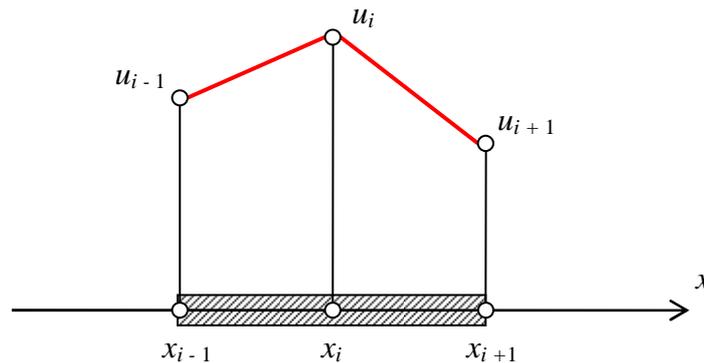


Figura 2.6 Estratégia de interpolação linear piecewise a dois intervalos num elemento finito 1D $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Introduzindo 2.28 em 2.26 e rearranjando, tem-se:

$$u = \left(\frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} \right) u_1 + \left(\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \right) u_2, \quad (2.29)$$

que, comparando com a expressão geral que inclui as funções interpoladoras ou de forma, ϕ , corresponde a,

$$u = \phi_1 u_1 + \phi_2 u_2 \quad (2.30)$$

com,

$$\phi_1 = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} \quad e \quad \phi_2 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}, \quad (2.31)$$

ou genericamente,

$$u = \Phi \mathbf{u}. \quad (2.32)$$

É importante frisar que a dedução anterior referente ao nodo i apenas considera o intervalo à direita desse nodo. Como se irá verificar mais à frente, um raciocínio semelhante tem de ser aplicado ao intervalo à sua esquerda.

Uma formulação alternativa, mas equivalente à análise anterior é proporcionada pela aplicação da função interpoladora $\phi_i(x)$ conhecida por função “hat” ou “chapeau”, representada graficamente na Figura 2.7, e dada pela expressão geral:

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{se } x_{i-1} \leq x < x_i \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & \text{se } x_i \leq x < x_{i+1} \\ 0 & \text{se } x < x_{i-1} \vee x \geq x_{i+1} \end{cases}, \quad (2.33)$$

É notório que esta função tem a desvantagem de não ser diferenciável nas posições nodais.

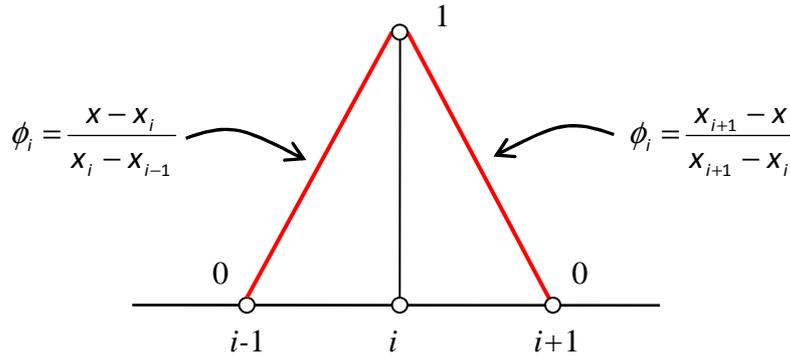


Figura 2.7 Função de interpolação $\phi(x)$ linear piecewise a dois intervalos – hat function.

Os valores interpolados, $u(x)$, podem então ser avaliados através da equação interpoladora baseada nas funções base ϕ_i , com a forma,

$$u(x) = \sum_{i=0}^n \phi_i(x) u_i. \quad (2.34)$$

A estratégia de discretização e interpolação representada pelas equações 2.33 e 2.34 possibilita uma avaliação das derivadas da solução u em termos das derivadas independentes espaciais (x , neste caso) e temporal (t). Assim, considere-se a diferenciação formal de 2.30 na direcção x :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \phi_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial x_1} + \phi_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial x_1}. \quad (2.35)$$

Por razões óbvias,

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u_2}{\partial x} = \dots = \frac{\partial u_i}{\partial x} = 0. \quad (2.36)$$

Assim, a equação 2.35 reduz-se a,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = u_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial x_1} \quad (2.37)$$

e, considerando 2.31, obtém-se:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = -\frac{1}{x_2 - x_1} \quad e \quad \frac{\partial \phi_2}{\partial x} = \frac{1}{x_2 - x_1}. \quad (2.38)$$

Numa malha uniforme, $x_2 - x_1 = \Delta x = \text{constante}$, e então a aproximação de elementos finitos toma a forma,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \left(-\frac{1}{\Delta x}\right)u_1 + \left(\frac{1}{\Delta x}\right)u_2 = \frac{u_2 - u_1}{\Delta x}. \quad (2.39)$$

No entanto, esta aproximação só leva em conta a metade do elemento finito que se situa à direita do nodo 1, já que apenas se considera o intervalo $[x_1, x_2]$. Deste modo esta é apenas a aproximação “à direita”. Assim, se se repetir o procedimento anterior para o intervalo à esquerda $[x_0, x_1]$, é perfeitamente trivial concluir que a aproximação correspondente é,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_1 - u_0}{\Delta x}. \quad (2.40)$$

Deste modo, a derivada de u em torno do nodo 1, é estimada por,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{dir} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{esq} \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{u_2 - u_1}{\Delta x} + \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} \right] = \frac{u_2 - u_0}{2\Delta x}, \quad (2.41)$$

para o elemento em torno do nodo 1. A expressão genérica para um nodo i toma a forma (vd. Tabela 2.1),

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (2.42)$$

Da mesma forma, para uma derivada de segunda ordem, tem-se:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{dir} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{esq}}{\Delta x} = \frac{\frac{u_2 - u_1}{\Delta x} - \frac{u_1 - u_0}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{\Delta x^2}, \quad (2.43)$$

e, de uma forma geral (vd. Tabela 2.1),

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}. \quad (2.44)$$

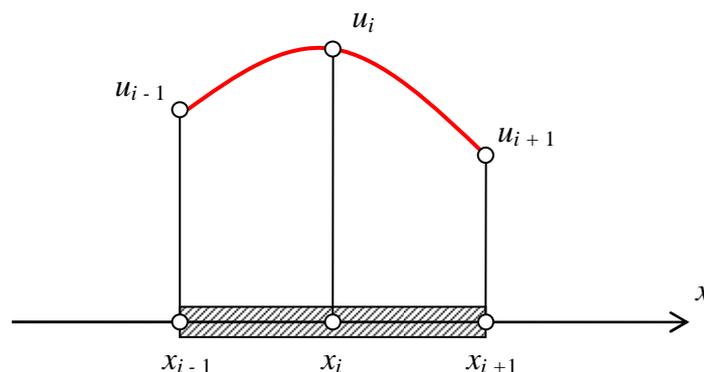


Figura 2.8 Interpolação quadrática num elemento finito 1D $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Deste modo, o procedimento anterior que conduz às expressões 2.42 e 2.44 revela que os gradientes do modelo diferencial podem ser determinados a partir das funções base interpolativas $\phi_i(x)$. No entanto, para além da função “hat” existem obviamente muitas

outras possibilidades de escolha para uma função base adequada. As mais comumente seleccionadas são, de facto, as funções polinomiais (das quais, a interpolação linear constitui o caso especial de menor ordem). A aproximação de ordem imediatamente mais elevada baseia-se na interpolação através de polinómios quadráticos piecewise, que requerem necessariamente três nodos para ajuste a cada curva, e possuem a forma geral para o caso unidimensional:

$$u(x) = c_2x^2 + c_1x + c_0, \tag{2.45}$$

esquematizada na Figura 2.8. Os elementos unidimensionais ditos quadráticos² possibilitam igualmente através de um raciocínio equivalente ao descrito anteriormente, a dedução de fórmulas algébricas para a estimativa de derivadas sobre uma malha uniforme (vd. Tabela 2.1).

Tabela 2.1 Exemplos de aproximações de elementos finitos (EF) lineares e quadráticas e aproximações de diferenças finitas (DF) em malhas 1D uniformes[37].

	$\partial u / \partial x$	$\partial^2 u / \partial x^2$
EF lineares	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$	$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2}$
EF quadráticos (nodo extremo)	$\frac{u_{i-2} - 4u_{i-1} + 4u_{i+1} - u_{i+2}}{4\Delta x}$	$\frac{-u_{i-2} + 8u_{i-1} - 14u_i + 8u_{i+1} - u_{i+2}}{4\Delta x^2}$
EF quadráticos (nodo central)	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$	$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2}$
DF 3 pontos	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$	$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2}$
DF 5 pontos	$\frac{u_{i-2} - 8u_{i-1} + 8u_{i+1} - u_{i+2}}{12\Delta x}$	$\frac{-u_{i-2} + 16u_{i-1} - 30u_i + 16u_{i+1} - u_{i+2}}{12\Delta x^2}$

Deste modo, no método FEM, os coeficientes A_k do integral de convolução na forma digital da equação 1.64, são definidos através das funções de interpolação usadas para calcular o valor das variáveis independentes em todas as posições não nodais. A escolha das funções referidas pode variar consideravelmente desde relações lineares até aproximações quadráticas ou expressões de ordem superior (cúbicas, Hermite ou outras funções spline). No entanto, estas requerem mais pontos nodais para a sua definição através de interpolação. Duma maneira geral, pode-se afirmar que os coeficientes de convolução são definidos pelo enunciado do problema no espaço contínuo e os graus dos polinómios de interpolação, através dos quais é realizado o processo de conversão. Esta perspectiva é semelhante à do FDM, já que as expansões de Taylor estão intimamente relacionadas com polinómios de interpolação.

Aproximações do tipo das apresentadas na Tabela 2.1 podem ser usadas para estimativa dos gradientes espaciais do modelo diferencial parcial, e consequente geração de um sistema diferencial ordinário ou algébrico consoante o problema original seja evolutivo ou estacionário, respectivamente. Por outro lado, a resolução

² O termo elemento finito tanto pode ser usado para referir uma subregião do domínio definida por um determinado número de nodos que conjuntamente com o espaço contínuo que os rodeia, estabelecem uma estrutura geométrica local, como o tipo de funções base interpolativas usadas para a aproximação da solução nas posições não nodais da estrutura geométrica referida.

FEM pode basear-se igualmente na integração numérica da formulação variacional da PDE original.

Outra estratégia possível passa pela resolução de uma formulação residual. Neste caso, o método dito de Galerkin assume uma solução aproximada, u_a , definida por[37],

$$u_a = \sum_{i=0}^n a_i \phi_i, \quad (2.46)$$

onde ϕ_i 's são funções interpolativas conhecidas e os a_i 's são coeficientes que têm de ser calculados. Assim, a solução u_a quando introduzida no problema diferencial original, gera um resíduo R não nulo. Assim, através do método de Galerkin, os coeficientes desconhecidos a_i 's são avaliados pela resolução de um sistema de equações dado por,

$$\langle R, \phi_k \rangle = 0, \quad k=1, \dots, n \quad (2.47)$$

em que R representa a equação residual e ϕ_k 's são funções peso. No caso do método de Galerkin tradicional as funções interpolativas e as funções peso são idênticas e a abordagem é global, já que tanto as funções interpolativas como as peso se estendem pela totalidade do domínio. Por outro lado, a adaptação FEM do método de Galerkin aplica uma estratégia local sobre elementos finitos que representam subregiões localizadas do domínio, permitindo a utilização de funções de ordem baixa e gerando sistemas matriciais esparsos. Deste modo, o método de Galerkin pode ser incluído no âmbito mais geral dos Métodos de Resíduos Pesados (methods of weighted residuals) que englobam diversas classes de estratégias que recorrem a diferentes tipos de funções peso que não necessitam ser obrigatoriamente semelhantes às funções interpolativas.

Finalmente, explana-se resumidamente a construção da estratégia FEM na sua versão matricial para o problema exemplo 2.21 e funções base genéricas.

Se $u(x) = \sum_{i=1}^n u_i \phi_i(x)$ e $f(x) = \sum_{i=1}^n f_i \phi_i(x)$, então o problema 2.25: $-\Phi(u, \phi) = \int f \phi$; pode ser escrito como,

$$-\sum_{i=1}^n u_i \Phi(\phi_i, \phi_j) = \sum_{i=1}^n f_i \int \phi_i \phi_j, \quad j=1, \dots, n, \quad (2.48)$$

$$\text{com } \Phi(u, v) = \int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \right) \left(\frac{dv}{dx} \right) dx.$$

Se se denotar como \mathbf{u} e \mathbf{f} , os vectores $[u_1, \dots, u_n]^T$ e $[f_1, \dots, f_n]^T$, respectivamente, e se $\mathbf{L} = (L_{kj})$ e $\mathbf{M} = (M_{kj})$ forem matrizes com as entradas $L_{kj} = \Phi(\phi_k, \phi_j)$ e $M_{kj} = \int \phi_k \phi_j$, então 2.48 pode ser reformulada na forma matricial como:

$$-\mathbf{L}\mathbf{u} = \mathbf{M}\mathbf{f} \quad (2.49)$$

Se as funções base possuírem um suporte reduzido, grande parte das entradas de \mathbf{M} e \mathbf{L} são nulas (as matrizes são esparsas), tornando o sistema linear 2.49 para o cálculo de \mathbf{u} de mais fácil resolução. A matriz \mathbf{L} é normalmente designada por matriz stiffness, enquanto que a matriz \mathbf{M} é denominada por matriz de massa.

2.2.4 MÉTODO DE VOLUMES FINITOS (FINITE VOLUMES METHOD – FVM)

O método de volumes finitos (Finite Volume Method – FVM) consiste numa estratégia de representação numérica e posterior resolução de equações diferenciais parciais através da sua aproximação a sistemas de equações algébricas que tira partido do conceito de lei conservativa na forma integral. O domínio V é subdividido em volumes de controlo não sobreponíveis V_i [45],

$$V = \bigcup_{i=1}^N V_i, V_i \cap V_j = \emptyset, \forall i \neq j, \quad (2.50)$$

que se definem como regiões do domínio ou células que rodeiam cada nodo da malha (vd. Figura 2.9). As equações de aproximação ao problema diferencial são obtidas por conservação dos fluxos intervolumes.

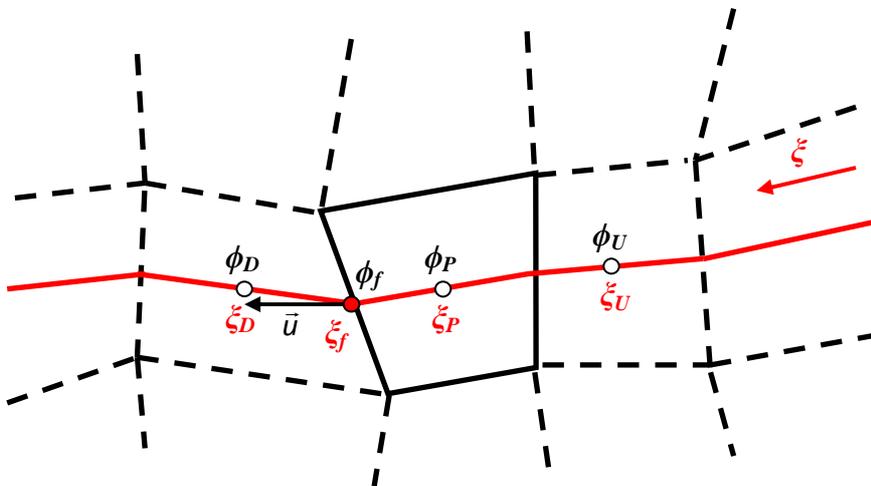


Figura 2.9 Ilustração de uma subdivisão do domínio 2D em volumes de controlo finitos[46].

Considere-se a equação de difusão unidimensional definida no intervalo $x \in [0,1]$:

$$-\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{du}{dx} \right) = f \quad \text{com} \quad \lambda \frac{du}{dx}(0) = 0, -\lambda \frac{du}{dx}(1) = \alpha(u - u_r). \quad (2.51)$$

Integra-se a equação 2.51 sobre o “volume” de controlo $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ (vd. Figura 2.10) para se obter[42],

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{du}{dx} \right) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f dx \quad (2.52)$$

ou

$$-\lambda \frac{du}{dx} \Big|_{x_{i+1/2}} + \lambda \frac{du}{dx} \Big|_{x_{i-1/2}} = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f dx. \quad (2.53)$$

Aplicam-se esquemas numéricos para aproximar as derivadas do membro esquerdo e o integral do membro direito de 2.53. Assim, se se aplicar diferenças centradas à esquerda e integração a um ponto à direita, 2.53 fica:

$$\lambda_{i-1/2} \frac{u_i - u_{i-1}}{h_i} - \lambda_{i+1/2} \frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1}} = \frac{1}{2} (h_i + h_{i+1}) f_i + E_T \quad (2.54)$$

que depois de rearranjada conduz a,

$$-\frac{\lambda_{i-1/2}}{h_i} u_{i-1} + \left(\frac{\lambda_{i-1/2}}{h_i} + \frac{\lambda_{i+1/2}}{h_{i+1}} \right) u_i - \frac{\lambda_{i+1/2}}{h_{i+1}} u_{i+1} = \frac{1}{2} (h_i + h_{i+1}) f_i + E_T, \quad (2.55)$$

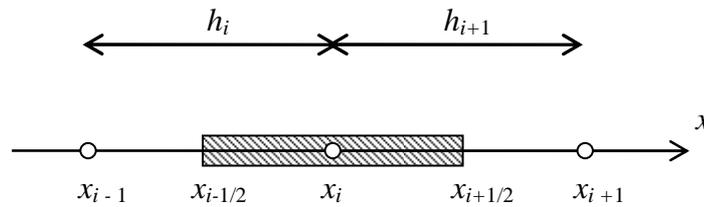


Figura 2.10 “Volume” de controlo 1D.

Os volumes fronteira são sujeitos a um tratamento semelhante mas diferenciado de forma a se levar em conta a influência das condições fronteira. Deste modo, deduz-se um sistema de equações algébricas lineares que é resolvido para a estimativa da aproximação do perfil da solução $u(x)$ (descartando obviamente o termo do erro E_T).

Considere-se agora o problema conservativo geral dado por[47],

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad (2.56)$$

onde \mathbf{u} representa o vector de estados e \mathbf{f} significa o tensor de fluxo correspondente.

Para cada volume de controlo V_i , aplica-se o integral de volume sobre o volume total v_i , obtendo-se:

$$\int_{v_i} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dv + \int_{v_i} \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{u}) dv = \mathbf{0}. \quad (2.57)$$

Integrando o primeiro termo de forma a calcular a extensidade \mathbf{u} média no volume V_i , definida por,

$$\bar{\mathbf{u}}_i = \frac{1}{v_i} \int_{v_i} \mathbf{u} dv, \quad (2.58)$$

e aplicando o teorema da divergência, i.e.

$$\int_v \nabla \cdot \mathbf{f} dv = \oint_S \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.59)$$

ao segundo termo, obtém-se,

$$v_i \frac{d\bar{\mathbf{u}}_i}{dt} + \oint_{S_i} \mathbf{f}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{0}. \quad (2.60)$$

S_i representa a área de superfície total do volume V_i e \mathbf{n} é o vector unitário normal à superfície que aponta para o exterior. Assim, deduz-se a expressão geral:

$$\frac{d\bar{u}_i}{dt} + \frac{1}{v_i} \oint_{s_i} \mathbf{f}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{0}, \quad (2.61)$$

que corresponde a um sistema de ODE's que pode ser aproximado a um sistema de equações algébricas através de um esquema numérico. Assim, como o fluxo que entra num determinado volume é idêntico ao que sai de um volume adjacente, um FVM é conservativo. Deste modo, um FVM pode-se definir como uma aproximação geometricamente conservativa da forma integral da PDE e o sistema de equações mantém a conservação da massa, energia e momento, de volume para volume. Outra vantagem do FVM é que, tal como o FEM, pode ser facilmente formulado sobre malhas não estruturadas.

O esquema numérico efectivo que se deverá utilizar em cada caso dependerá da geometria do problema, do tipo de malha e da natureza da solução.

A utilização de valores médios associados a cada volume de controlo resulta em descontinuidades na interface das células geométricas. Assim, a aplicação da discretização FVM é frequentemente associada a estratégias de alta resolução (High Resolution Schemes – HRS) quando a solução apresenta gradientes elevados ou choques, e.g. Cruz et al., 2005[48]. A definição deste tipo de métodos e os objectivos e características típicas a eles relacionados são discutidos com algum pormenor na secção seguinte.

No entanto, é de destacar que os métodos FVM se distinguem da maioria da estratégias de resolução numérica de PDE's (como o FDM ou o FEM) por se fundamentar num processo integral conservativo e não se basear numa abordagem interpolativa da solução aproximada discreta, forçada a se conformar a um determinado conjunto de funções base com propriedades específicas, ou seja, a estratégia de discretização convolutiva representada pela equação 1.64.

2.2.5 ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO (HIGH RESOLUTION SCHEMES – HRS)

Os Esquemas de Alta Resolução (High Resolution Schemes – HRS) são métodos aplicados no contexto da integração numérica de modelos diferenciais com propriedades hiperbólicas, geralmente associados a discretizações de diferenças ou volumes finitos. Constituem a classe mais moderna dos designados métodos de captura de choques (shock-capturing methods – SCM).

Os problemas de natureza hiperbólica são caracterizados por possuírem termos advectivos determinados pela presença de variáveis de fluxo. Assim, os HRS são úteis na discretização desses termos de avaliação tradicionalmente complicada, especialmente em problemas que desenvolvem choques ou ondas abruptas móveis.

Os HRS distinguem-se dos métodos clássicos de captura de choques (e.g. métodos de MacCormack ou de Lax-Wendroff) por representarem geralmente uma abordagem baseada em discretizações upwind, em contraste com as estratégias centradas ou simétricas clássicas, que não consideram qualquer informação relacionada com a direcção de propagação das ondas[49]. Assim, estes esquemas aplicam uma estratégia de diferenciação enviesada na direcção determinada pelo sinal da velocidade característica.

Considere-se então um modelo diferencial evolutivo unidimensional geral constituído por uma equação não linear do tipo,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial \phi(u)}{\partial x} + \Gamma\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}\right) \quad (2.62)$$

completada por uma condição inicial adequada e condições fronteira que podem assumir diversas formas (Dirichlet, Neumann ou Robin). A função Γ pode incluir termos difusivos ou fonte. No entanto, quando a equação 2.62 é dominada por advecção, é designada como hiperbólica. Neste caso, o tratamento numérico do termo advectivo, $\frac{\partial \phi}{\partial x}$, representativo de fenómenos de convecção, implica a utilização de métodos especializados (e.g. HRS), de modo a prevenir o desenvolvimento de fortes oscilações sem significado físico nos perfis da solução numérica[50].

Pretende-se agora caracterizar resumidamente e de uma forma genérica a essência dos HRS através da apresentação de um exemplo de discretização sobre uma malha unidimensional não necessariamente uniforme (vd. Figura 2.11).

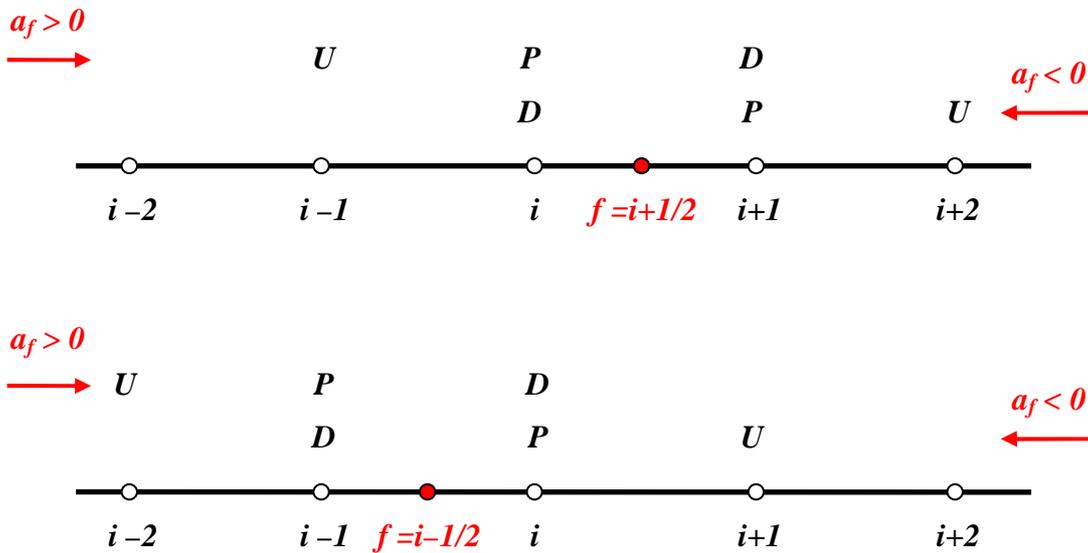


Figura 2.11 Definição das variáveis locais para um exemplo 1D[51].

Os exemplos ilustrados na Figura 2.11 representam uma estratégia de classificação dos nodos adjacentes ao nodo P , dependente da avaliação da velocidade local, a , na face f através de interpolação linear,

$$a_f = \frac{a_{i+1} - a_i}{2}, \quad (2.63)$$

onde $a_i \equiv \left(\frac{d\phi(u)}{du}\right)_i$. Assim, avalia-se o sentido de propagação do fluxo ϕ , e estabelece-se a atribuição dos nodos U e D às posições imediatas a montante e a jusante de P , respectivamente, para a face $i+1/2$ e $i-1/2$.

De seguida, aplica-se um esquema de estimação da derivada espacial de fluxo, $\frac{\partial \phi}{\partial x}$, pela consideração de uma aproximação numérica dependente dos valores do fluxo definidos nas faces,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = F(\phi_f). \quad (2.64)$$

No entanto, como os ϕ_f 's são desconhecidos, torna-se necessário recorrer a esquemas interpolativos mais ou menos complexos, de geometria e ordem variável para a estimativa dos seus valores.

Genericamente, a classificação dos nodos locais e a escolha de um esquema específico de discretização permitem a avaliação do fluxo em cada face através de uma estratégia que estabelece uma relação do tipo,

$$\phi_f = g(\phi_U, \phi_D, \dots). \quad (2.65)$$

Para tal, vários métodos foram propostos na literatura, como os esquemas: upwind de primeira ordem UDS de Courant et al., 1952[52]; upwind de segunda ordem LUDS de Shyy, 1985[53]; upwind de terceira ordem QUICK de Leonard, 1979[54]; e os centrais de segunda e quarta ordem, CDS2 e CDS4, respectivamente. Todos estes métodos, com a excepção do UDS, apresentam a desvantagem de não assegurarem a delimitação da solução podendo conduzir ao desenvolvimento de oscilações nos perfis respectivos para fluxos convectivos elevados. A ocorrência deste tipo de perturbações são evitadas se o valor de ϕ_f se situar dentro dos limites impostos pelos fluxos nos nodos adjacentes, ϕ_p e ϕ_D , satisfazendo assim o Convection Boundness Criterion (CBC) de Gaskell e Lau, 1988[55], válido para avaliações implícitas de fluxo estacionário. Assim, a alternativa consiste na utilização de procedimentos de discretização não lineares intrinsecamente delimitados e de ordem elevada.

No entanto, o teorema de Godunov demonstra que apenas os esquemas lineares de primeira ordem preservam a monotonia do método numérico e, conseqüentemente são Total Variation Diminishing (TVD), um conceito introduzido por Harten, 1983[56 ou 57]. Assim, os esquemas lineares de ordem mais elevada, apesar de serem mais exactos no caso de soluções suaves, não são TVD e tendem a gerar dispersão numérica em regiões de declives elevados. De modo a ultrapassar estes problemas, desenvolveram-se técnicas HRS não lineares, recorrendo à aplicação de limitadores de fluxo ou de declive (Flux/Slope Limiters).

Neste contexto, salientam-se então os esquemas de discretização desenvolvidos no contexto de TVD, como a estratégia mais recente NVSF (Normalised Variable and Space Formulation) de Darwish e Moukalled, 1994[58], que representa uma extensão para malhas não uniformes da Normalised Variable Formulation (NVF) de Leonard, 1988[59]. Outra abordagem delimitada comumente aplicada consiste nos esquemas ENO (Essentially Non-Oscillatory) de Harten et al., 1987[60] e WENO (Weighed ENO), desenvolvidos por Stanley Osher e colaboradores[61]. Outros métodos importantes que se incluem na classe dos SCM são o esquema Flux-Corrected Transport de Boris e Book, 1976[62], os Monotonic Upstream-centered Schemes for Conservation Laws (MUSCL), baseados na abordagem de Godunov e introduzidos por Van Leer,

1979[63],[64] e o Piecewise Parabolic Method (PPM) de Colella e Woodward, 1984[65].

Assim, uma possível estratégia HRS (por exemplo, no âmbito do esquema NVSF) consiste na avaliação do fluxo na face através de uma relação do tipo,

$$\phi_f = g(\phi_U, \phi_D, \Phi_f), \quad (2.66)$$

que depende do fluxo normalizado, definido genericamente na posição i por,

$$\Phi_i = \frac{\phi_i - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}. \quad (2.67)$$

Este é calculado na face por um esquema não linear de limitação de fluxo adequado. Os limitadores de fluxo são avaliados através de uma relação genérica:

$$\Phi_f = f(\Phi_p, \Theta_p, \Theta_f), \quad (2.68)$$

em que,

$$\Theta_p = \frac{x_p - x_U}{x_D - x_U} \quad (2.69)$$

$$\Theta_f = \frac{x_f - x_U}{x_D - x_U}. \quad (2.70)$$

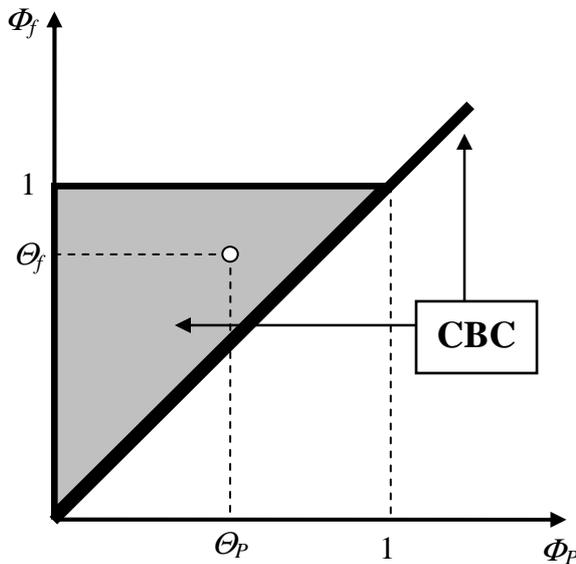


Figura 2.12 Esquema geral para o NVD (Normalised Variable Diagram) representando a região de verificação do CBC (Convective Boundness Criterion)[46].

Existem múltiplos limitadores de fluxo não lineares como, por exemplo, MINMOD[56], SMART[55], WACEB[66] ou CUBISTA[46], entre muitos outros. O critério CBC, que determina o carácter delimitado de um esquema é ilustrado na Figura 2.12, que representa uma abordagem Normalized Variable Diagram (NVD) introduzida por Gaskell e Lau[55] e Leonard[58,67] que relaciona Φ_f com Φ_p . Assim, o CBC é verificado na zona sombreada conjugada com a recta de declive um. Deste modo, esquemas que

respeitam as regiões de admissibilidade, são esquemas que possuem a propriedade de delimitação do fluxo.

Uma forma alternativa de definição das regiões admissíveis de delimitação para esquemas TVD recorre aos designados diagramas de Sweby, 1984[68],[69] que relacionam a função limitadora Φ com a razão r entre gradientes sucessivos da solução discreta,

$$r_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i}, \quad (2.71)$$

restringido a valores não negativos, i.e. $r \geq 0$. Na Figura 2.13 apresenta-se um diagrama de Sweby geral que representa novamente como uma área sombreada as regiões de admissibilidade para esquemas de limitação de fluxo TVD de segunda ordem.

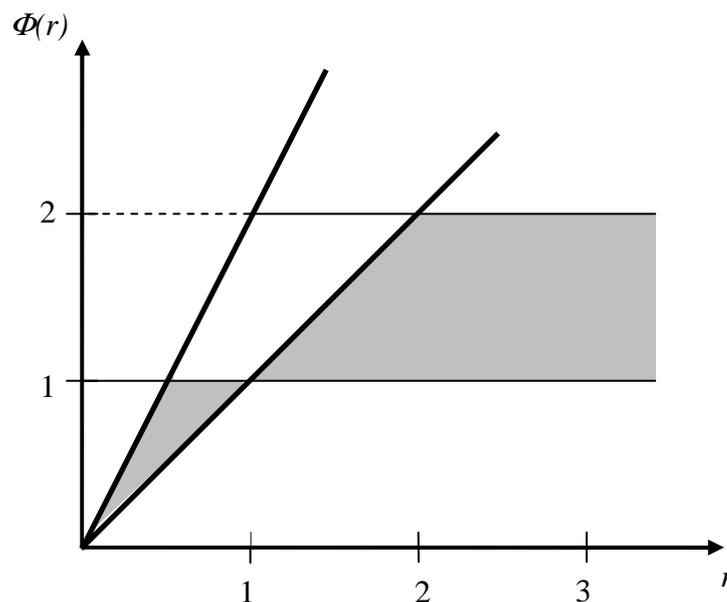


Figura 2.13 Diagrama de Sweby, onde se salienta a região admissível de delimitação para esquemas TVD de segunda ordem[68,69].

A explanação mais detalhada das técnicas HRS, que conjugam o procedimento de discretização com os limitadores de fluxo testados neste trabalho, é realizada no capítulo seguinte.

2.2.6 WAVELETS

A questão da utilização de funções designadas por wavelets como famílias de funções base adequadas para a representação de funções genéricas é uma ideia relativamente recente. De facto, o termo wavelet é devido a Jean Morlet (1931-2007) e Alexander Grossmann (1930-) no princípio da década de 1980³. De facto, uma wavelet é uma função que define uma oscilação do tipo onda, com uma amplitude que tende para zero nas extremidades[70].

³ Em rigor, Morlet e Grossmann estabeleceram a versão francesa do termo: ondelette (onda pequena) que rapidamente foi vertido para o correspondente inglês através da tradução de “onde” por “wave”; em português o termo correcto é onduleta.

As wavelets são funções que exibem propriedades específicas que satisfazem certos pressupostos matemáticos, úteis na representação de dados e de outras funções. Assim, as wavelets são uma ferramenta matemática que possibilita a extracção de informação a partir de uma grande variedade de tipos de dados, incluindo sinais de áudio e de vídeo (e obviamente funções definidas sobre domínios de dimensão arbitrária). No entanto, a ideia subjacente de aproximação de funções através da sobreposição de outras funções não é nova. Na verdade, esta ideia remonta ao início do século XIX, quando Joseph Fourier (1768-1830) em 1807 propôs a sua teoria de análise de frequências (ou síntese de Fourier) como um processo de representação de funções genéricas pela adição de funções trigonométricas (senos e co-senos). Este trabalho desempenhou um papel essencial na evolução dos conceitos matemáticos acerca das funções e abriu caminho a um universo funcional completamente novo.

Por outro lado, a ideia fundamental referente à análise wavelet relaciona-se com um estudo baseado na escala. De facto, os algoritmos wavelet processam os dados a escalas e resoluções diferentes. Dito de uma forma metafórica, o objectivo da análise wavelet consiste na possibilidade de observar simultaneamente a floresta e as árvores[71] (e os ramos e as folhas, etc). Na verdade, as funções base trigonométricas da análise Fourier são por definição não locais (estendendo-se para o infinito), o que as tornam desadequadas para a representação de descontinuidades ou perfis abruptos. No entanto, as funções wavelet exibem um formato compacto (sendo apenas definidas em intervalos finitos), o que as torna especialmente apropriadas para a simulação de características abruptas da função.

Assim, as características das wavelets possibilitam que a análise wavelet seja localizada no tempo (tomando tempo como uma variável independente arbitrária) e na frequência, ao contrário da análise Fourier que é apenas localizada no domínio de frequência.

A análise wavelet pode ser resumida da forma seguinte[71,72]: inicialmente adopta-se uma função protótipo wavelet, ψ (conhecida como analysing wavelet ou mother wavelet – wavelet mãe); a análise temporal é realizada por uma versão contraída de alta-frequência da wavelet mãe, enquanto que a análise de frequência é feita com uma versão dilatada de baixa frequência da mesma wavelet. Como o sinal ou função original a tratar pode ser representado em termos de uma expansão wavelet (através da utilização de uma combinação linear de funções wavelet), as operações de manipulação de dados podem ser realizadas apenas pela aplicação dos coeficientes wavelet correspondentes. Posteriormente, se se escolher as wavelets melhor adaptadas aos dados específicos analisados ou se se trunchar os coeficientes abaixo de um determinado limite, obtém-se uma representação esparsa dos próprios dados. Esta possibilidade de compactação torna as wavelets particularmente interessantes no campo da compressão de dados, ou na área equivalente de adaptação de malhas na resolução numérica de PDE's (já que uma forma de adaptação nodal consiste precisamente na compactação dos dados discretos de uma função definida sobre uma malha de nodos).

A primeira função actualmente reconhecida como wavelet é referida num anexo da tese do matemático húngaro Álfred Haar (1885-1933) em 1909[73] (vd. Figura 2.14), e é dada pela wavelet mãe (considerando $t = x$):

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x \leq 1/2 \\ -1 & 1/2 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.72)$$

e a função wavelet de escala, ϕ ,

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.73)$$

A wavelet de Haar corresponde à wavelet mais simples possível. Porém, tem a desvantagem de ser descontínuo e portanto, não diferenciável. Esta propriedade pode no entanto constituir uma vantagem no caso de funções ou sinais que exibam transições bruscas.

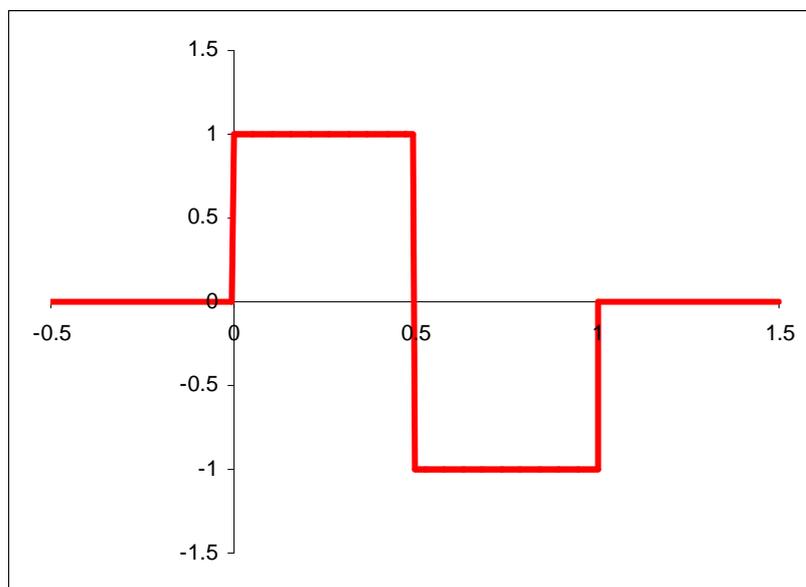


Figura 2.14 Representação da wavelet de Haar.

A partir do trabalho de Haar, o desenvolvimento da teoria das wavelets pode ser relacionado com diferentes correntes de pensamento e diversos campos do conhecimento. Outras notáveis contribuições podem ser atribuídas ao desenvolvimento da transformada wavelet contínua (Continuous Wavelet Transform – CWT) de George Zweig em 1975 (originalmente conhecida como a transformada Cóclear, já que foi estabelecida no âmbito do estudo da reacção do ouvido ao som), à formulação CWT de Grossman, Morlet e Goupillaud[74], ao trabalho inicial sobre wavelets discretas de Strömberg (1983), às wavelets ortogonais de suporte compacto de Daubechies, 1988[75], à abordagem multiresolução de Mallat, 1989[76], entre muitas outras[70].

No contexto deste trabalho de investigação muitas possibilidades de funções wavelet têm sido propostas ao longo do tempo, e.g. as wavelets reais de Ricker e de Shannon[77], ilustradas nas Figuras 2.15 e 2.16, respectivamente.

A descrição referente ao presente trabalho não pretende debruçar-se numa extensa e completa derivação matemática da teoria que constitui a base da chamada análise wavelet, mas apenas consiste na explanação dos conceitos e definições mais

importantes, necessários a um entendimento adequado do seu papel na aplicação específica da resolução numérica adaptativa de PDE's, inspirado pelo trabalho de Cruz et al.[78-80]. O tratamento matematicamente mais detalhado deste assunto pode ser encontrado por exemplo em Daubechies, 1992[81]. De qualquer modo, as potencialidades adaptativas dos esquemas wavelet são apresentadas com maior pormenor na secção 2.6.6.

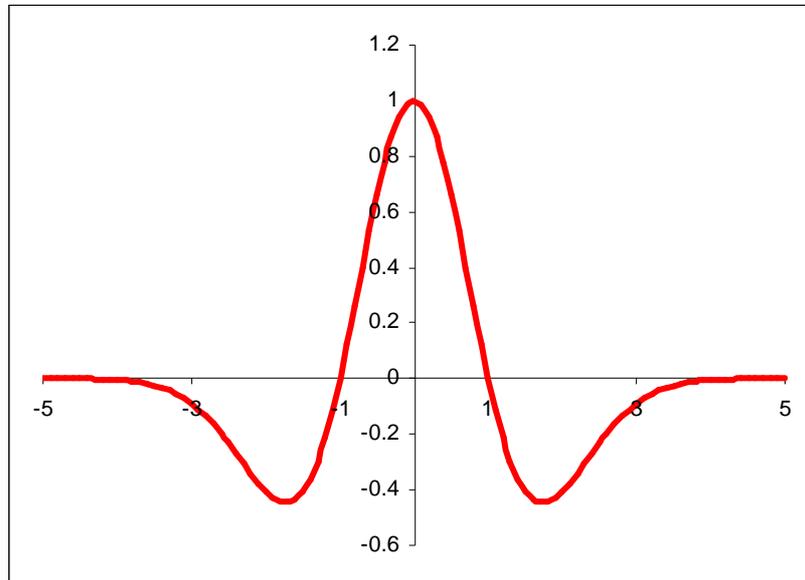


Figura 2.15 Representação da wavelet real de Ricker (Mexican Hat Wavelet).

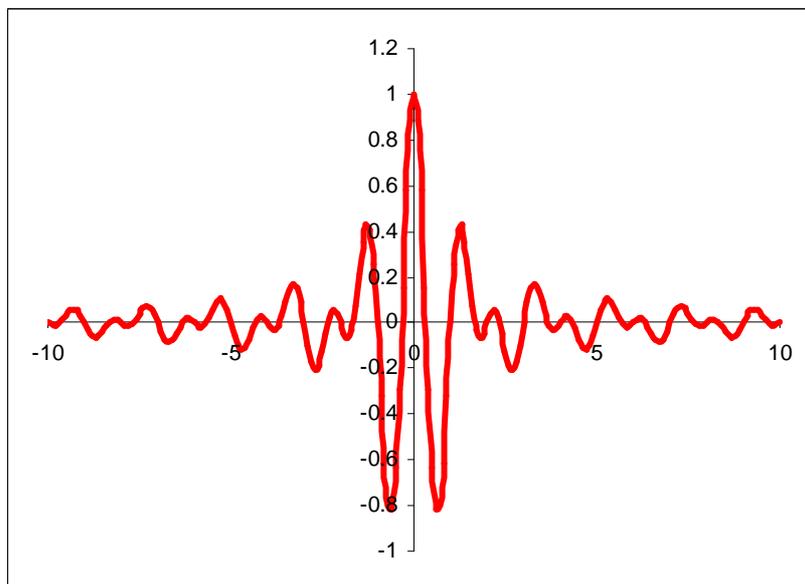


Figura 2.16 Representação da wavelet real de Shannon.

2.2.7 MÉTODO DAS CARACTERÍSTICAS

É importante referir ainda um outro tipo de método de integração, que se constitui como uma perspectiva algo diferente das referidas anteriormente. Neste caso, explora-se directamente o conceito de característica de uma PDE (ou de um sistema de PDE's), apresentado no capítulo anterior. Assim, pela própria definição de

característica demonstra-se que a solução deste sistema coincide com a solução de um sistema de ODE's ao longo de determinadas trajectórias no espaço, definidas pelas coordenadas independentes e que se denominam trajectórias ou curvas características. Deste modo, a discretização do problema ocorre naturalmente através da aplicação da própria definição de característica, não se procedendo a qualquer aproximação, ou seja, não sucede perda de exactidão nessa transformação. Introduce-se, assim, uma perspectiva Lagrangiana na resolução das equações diferenciais, já que, neste caso, os nodos são afectados de um movimento com uma velocidade determinada (velocidade característica) de forma a percorrerem as trajectórias características pretendidas (vd. Figura 1.12 referente à equação 1.22; página 34).

Este método é bastante adequado para problemas caracterizados por propagação de frentes abruptas móveis e/ou descontinuidades, problemas hiperbólicos que apresentem características reais não degeneradas, já que qualquer choque introduzido no sistema se propaga ao longo das características, e nunca através destas, evitando-se gradientes elevados no sistema de equações integrado nessas trajectórias. No entanto, o método é pouco geral, ou seja, a sua aplicação tem de ser estudada de forma casuística, além de se tornar difícil a avaliação das velocidades características dos nodos, e conseqüentemente a integração das ODE's respectivas, no caso de problemas não lineares que apresentem alguma complexidade.

2.2.8 MÉTODOS MESHLESS

Outro paradigma relativamente recente proposto na área da resolução numérica de PDE's diz respeito a uma classe de métodos genericamente denominados por Meshless (ou Meshfree) Methods (Métodos sem Malha, numa tradução possível para o português). De facto, o conceito básico associado às técnicas mais comuns de resolução numérica de PDE's (FEM, FVM ou FDM) baseia-se numa análise realizada sobre uma aproximação discreta ao domínio contínuo do problema, que conduz à construção de uma estrutura de centros posicionais (nodos) ou um sistema celular genericamente designado por grelha ou malha. Uma alternativa possível a esta estratégia consiste no desenvolvimento de procedimentos que não recorram à consideração deste tipo de estrutura e conseqüentemente, apresentem a vantagem de dispensarem todas as questões (muitas vezes problemáticas) relacionadas com a geração e manipulação do sistema discreto que pode assumir um grau de complexidade assinalável. Assim, este tipo de métodos, ditos Meshless (ou Meshfree) Methods, MM, por razões óbvias, seria geométrica e dimensionalmente independente.

No entanto, o facto de um MM dispensar o recurso formal a uma malha não implica que não apresente igualmente uma estrutura discreta. Pelo contrário, na verdade os MM's estão intimamente relacionados com um tipo particular de métodos designados por Particle Methods, PM's (Métodos de Partículas), podendo ser igualmente referidos como MPM's (Meshfree Particle Methods). Os PM's correspondem a uma classe de procedimentos que recorrem a um conjunto finito de partículas discretas para a representação do estado de um sistema, cujo movimento pode ser tratado através de perspectivas Eulerianas ou Lagrangianas. Cada partícula pode ser associada a uma objecto físico discreto ou gerada como a representação de uma partição finita de domínio contínuo. Assim, a escala das partículas pode variar desde o muito pequeno (nano ou microescala) até ao extremamente grande (escala astronómica)[82].

Assim, a natureza discreta dos PM's (e dos MPM's associados) é uma característica fundamental do próprio exercício de modelação e não uma mera estratégia aproximativa de resolução através de uma discretização posterior de um problema idealizado à partida como contínuo. De certo modo, é possível afirmar que dada a essência fundamentalmente discreta da matéria, a abordagem PM é mais realista do que a modelação sobre um espaço contínuo discutida anteriormente. No entanto, é óbvio que o grau de aproximação associado a qualquer estratégia de modelação contínua depende da escala característica do próprio fenómeno modelado.

Nas últimas décadas, foram propostos vários tipos de métodos baseados no conceito meshfree. Viana et al.[83] apresentam uma interessante revisão deste tipo de estratégias inserida numa organização cronológica de uma história ainda relativamente curta. De facto, o advento da ideia meshfree data de 1977 quando Monaghan e Gingold [84] e Lucy [85] desenvolveram um método designado por Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), um PM do tipo Lagrangiano que se baseia na ideia de substituir um fluido por um conjunto de partículas móveis e transformar as PDE's que representam o problema nos integrais estimados de núcleo (kernel) correspondentes[83].

Da grande variedade de algoritmos apresentados que se enquadram na classificação geral MM, um método é objecto de maior atenção no âmbito do trabalho presente: o chamado método RBF (Radial Basis Functions). RBF's foram pela primeira vez aplicadas na resolução de PDE's (associadas à função multiquádrica) por Kansa, 1990[86-87] no contexto da modelação de problemas de dinâmica de fluidos.

Assim, para o conjunto de nodos definido num domínio de dimensão arbitrária n , $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$, o formato básico de uma aproximação RBF é dado por[88],

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi_{\varepsilon_j}(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|), \quad (2.74)$$

em que a função $\phi(r)$ é definida para $r \geq 0$. Dados os valores da função escalar nas posições nodais $f_i = f(\mathbf{x}_i)$, os coeficientes de expansão λ_j são calculados através da resolução do sistema de equações lineares:

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}, \quad (2.75)$$

onde os elementos da matriz de interpolação \mathbf{A} , são avaliados por,

$$a_{ij} = \phi_{\varepsilon_j}(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|). \quad (2.76)$$

Assim, a aproximação interpolativa através de um esquema RBF apenas depende da distância entre os centros discretos, sendo independente das suas posições.

Existem várias possibilidades para a definição da função $\phi(r)$. No entanto, salienta-se uma escolha relativamente vulgar: uma função infinitamente suave com um parâmetro, designada por multiquádrica[88-89] e já referida anteriormente,

$$\phi_{\varepsilon}(r) = \sqrt{1 + (\varepsilon r)^2} \quad (2.77)$$

Esta função é bastante sensível relativamente ao valor do parâmetro de forma, ε . De facto, em condições extremas para exemplos unidimensionais, no limite $\varepsilon \rightarrow \infty$, o esquema tende para interpolação linear por intervalos (piecewise), e quando $\varepsilon \rightarrow 0$, representa interpolação polinomial global. Deste modo, esta estratégia de interpolação RBF é usada como base de um procedimento adaptativo de resolução numérica de PDE's uni- e bidimensionais apresentado por Driscoll e Heryudono, 2007[88] (vd. Anexo B).

2.3 MÉTODO DAS LINHAS (MOL)

O interesse reside numa estratégia geral para a resolução de PDE's designada por Método das Linhas[90] (Method Of Lines – MOL), cuja estrutura permite acomodar diferentes métodos de discretização ou de geração de malha.

De uma forma genérica, a solução numérica de uma PDE implica a aproximação do problema diferencial original definido num domínio contínuo, a um sistema de equações algébricas assentes sobre um domínio discreto. Na verdade, a resolução numérica propriamente dita consiste geralmente, em última análise, na solução de um sistema de equações algébricas. Esta transformação pode ser realizada simultaneamente ao longo de todas as coordenadas do domínio, utilizando qualquer método de discretização disponível. No entanto, é possível recorrer em alternativa a um procedimento sequencial que pode ser resumido da forma seguinte:

1. Discretização do problema original em todas as direcções exceptuando uma, normalmente o tempo em PDE's ou sistemas de PDE's evolutivas, ou seja problemas de valor inicial e fronteira – IBVP's – Initial-Boundary Value Problems;
2. Integração na direcção restante (geralmente o tempo) do sistema de ODE's obtido, ou seja um problema de valor inicial (Initial Value Problems – IVP), através de um método de integração de ODE's.

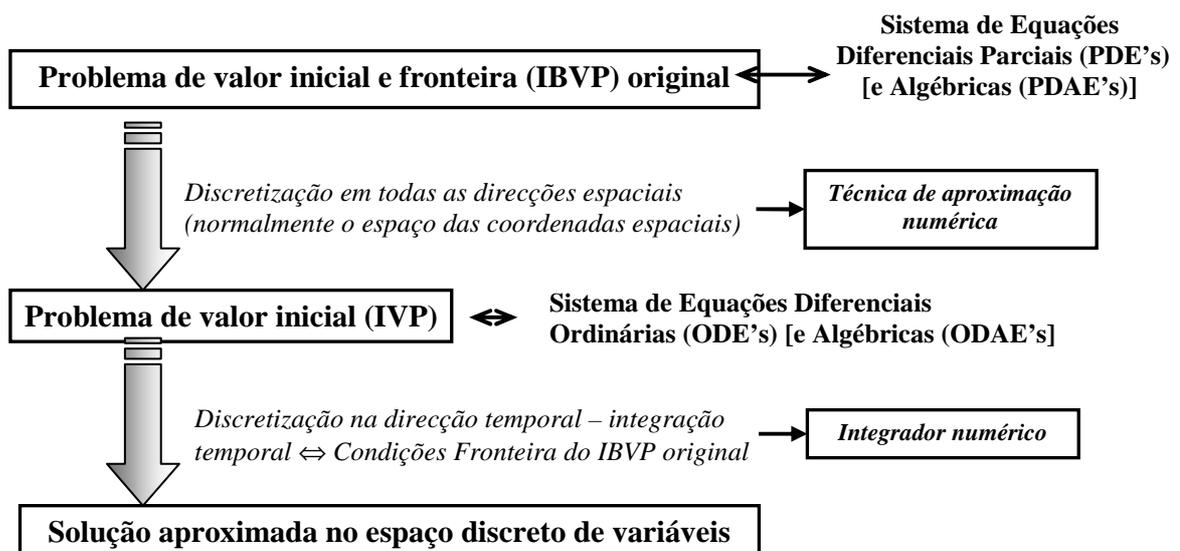


Figura 2.17 Resumo da estratégia geral do Método das Linhas (MOL) para o caso unidimensional.

Assim, o problema PDE original é aproximado a um sistema de ODE's que é resolvido por um integrador ODE padrão. Esta estratégia, genericamente designada por Método das Linhas (MOL), é esquematizada na Figura 2.17. O passo de discretização pode igualmente ser realizado por uma estratégia de aproximação de derivadas espaciais baseada nos métodos descritos na secção 2.1. Adicionalmente, a extensão desta estratégia a problemas algébrico-diferenciais é perfeitamente trivial.

Por outro lado, na Figura 2.18 apresenta-se a representação genérica do MOL para o caso unidimensional, onde o significado da designação de Método das Linhas se torna evidente.

É importante assegurar que a implementação do método respeite as condições auxiliares do problema diferencial parcial original. Assim, no caso de modelos multidimensionais evolutivos, a discretização prévia do domínio espacial implica que a condição inicial da PDE possa ser usada para a construção do conjunto de soluções iniciais do sistema de ODE's obtido após a discretização. Por outro lado, a verificação das condições fronteira é assegurada pela aplicação de um tratamento especializado conveniente sobre as linhas que definem as fronteiras do modelo original que obviamente depende do tipo de condições fronteira presentes na sua formulação.

A discretização espacial conduz geralmente à construção um sistema de ODE's stiff (sistema caracterizado por um conjunto de valores próprios definidos em escalas muito diferentes, ou seja, possuindo valores muito díspares). Como a restrição de estabilidade de um método explícito de integração temporal depende inversamente de uma potência do espaçamento local da malha, Δx (sendo esta potência normalmente igual à maior ordem da derivada espacial presente no sistema), então o passo temporal pode ser drasticamente limitado numa implementação sobre uma malha fina em relação à correspondente resolução numa malha esparsa.

Assim, os métodos explícitos de Runge-Kutta (RK) revelam-se computacionalmente inadequados e torna-se necessário recorrer a métodos implícitos (e.g. métodos BDF – backward differentiation formula; ou RK implícitos) para uma resolução eficaz do problema numérico. A escolha de um integrador ODE é um aspecto essencial na integração MOL de sistemas de PDE's. Felizmente, existe uma considerável oferta e disponibilidade de packages de integradores ODE eficientes. De facto, uma das maiores vantagens da estratégia MOL para a resolução de sistemas de PDE's consiste na possibilidade de se tirar partido dos avanços no desenvolvimento de integradores ODE e dos seus códigos computacionais associados[91].

2.4 CONCEITO GERAL DE ADAPTAÇÃO

2.4.1 INTRODUÇÃO

Introduz-se agora uma curta reflexão acerca do conceito de adaptação, uma noção genérica que pode ser aplicada a variados campos do conhecimento. De facto, uma definição particular de adaptação refere-se à área específica da biologia evolutiva, sendo enunciada como um processo ou mecanismo evolutivo através do qual uma população ou um organismo se torna mais adequado (ou melhor adaptado) ao habitat particular em que se insere.

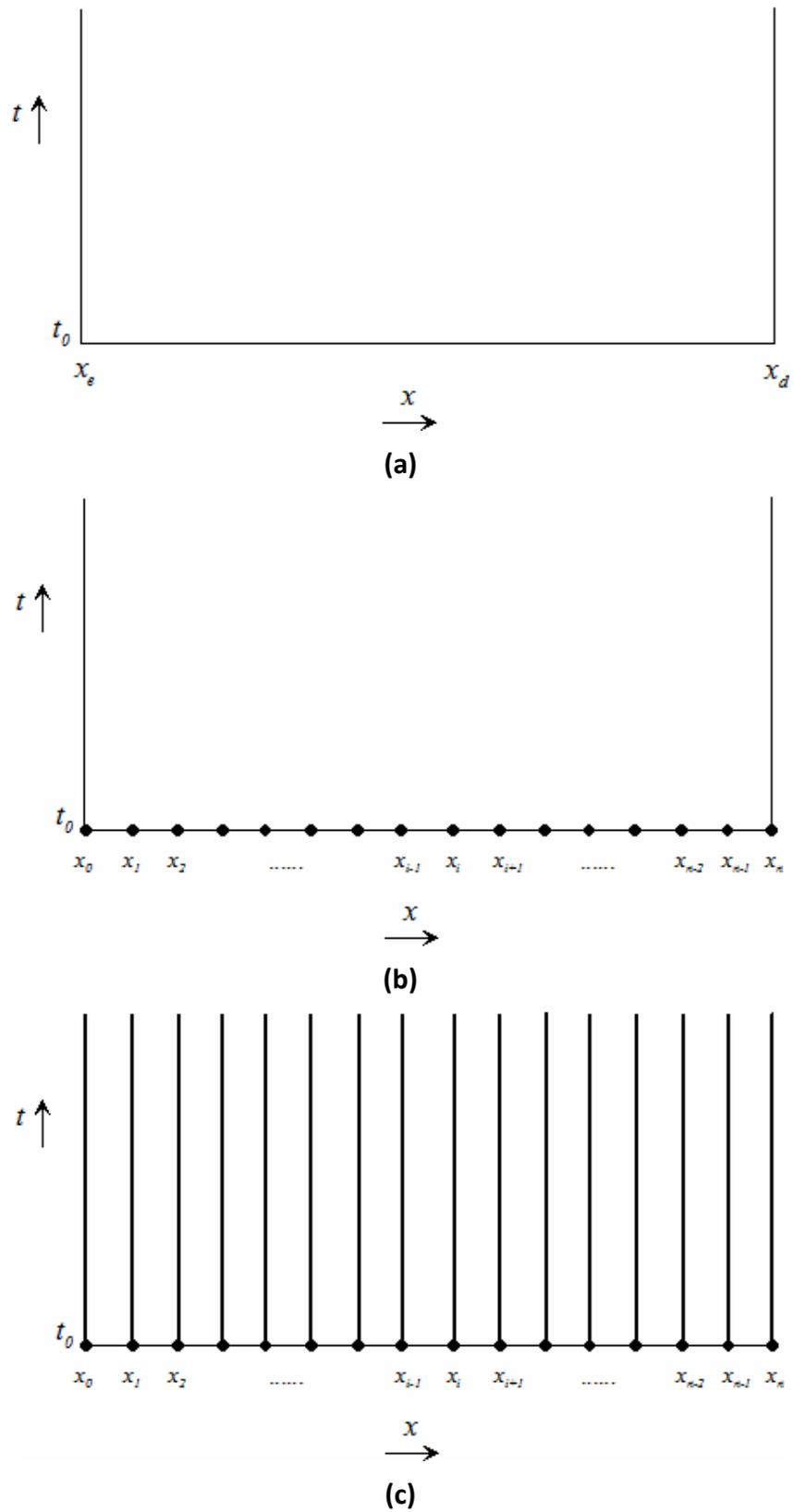


Figura 2.18 Representação genérica do Método das Linhas (MOL) para o caso unidimensional: (a) domínio espacial contínuo; (b) discretização do domínio espacial; (c) integração temporal clássica, mantendo inalteradas as posições espaciais definidas pela discretização.

Outro exemplo de aplicação da noção de adaptação, agora mais directamente ligada ao campo da engenharia, refere-se ao sistema de controlo de processos designado por controlo adaptativo. De facto, a implementação de um sistema que garanta a imposição de controlo sobre o valor (ou a evolução do valor) de uma variável processual implica necessariamente a introdução no sistema de uma peça de equipamento especializada (um controlador) que permita a promoção de uma actuação directa e automática sobre o próprio processo. Porém, a forma de actuação deste controlador depende necessariamente do estabelecimento de uma lei de controlo (definida por um conjunto de parâmetros) que influi no seu desempenho particular. Assim, é possível afirmar de uma forma simplista, que a sintonização de um determinado controlador consiste na estimativa dos valores ideais para o conjunto de parâmetros que possibilitem um desempenho de controlo mais eficiente possível, ou seja, uma performance óptima. Na implementação clássica, a lei de controlo (o modelo matemático que determina a acção de controlo) e o valor do conjunto de parâmetros que a rege permanecem inalterados durante todo o processo de controlo. No entanto, é possível definir ciclos de controlo mais complexos que possibilitem a modificação da lei de controlo para que o controlador possa lidar de forma mais eficiente com alterações no comportamento do processo ao longo do tempo. Este tipo de controlo designa-se por adaptativo já que possibilita a adaptação do sistema de controlo às condicionantes do processo a controlar. Na Figura 2.19 apresenta-se o esquema descritivo de uma das estratégias de controlo adaptativo disponível e passível de ser implementada, denominada MRAC – Model Reference Adaptive Control. Através da análise desta figura verifica-se que o controlador é continuamente ajustado por um mecanismo cuja acção depende da comparação entre a resposta do processo real e a resposta estimada através de um modelo de referência que deverá representar uma aproximação ao comportamento do processo.

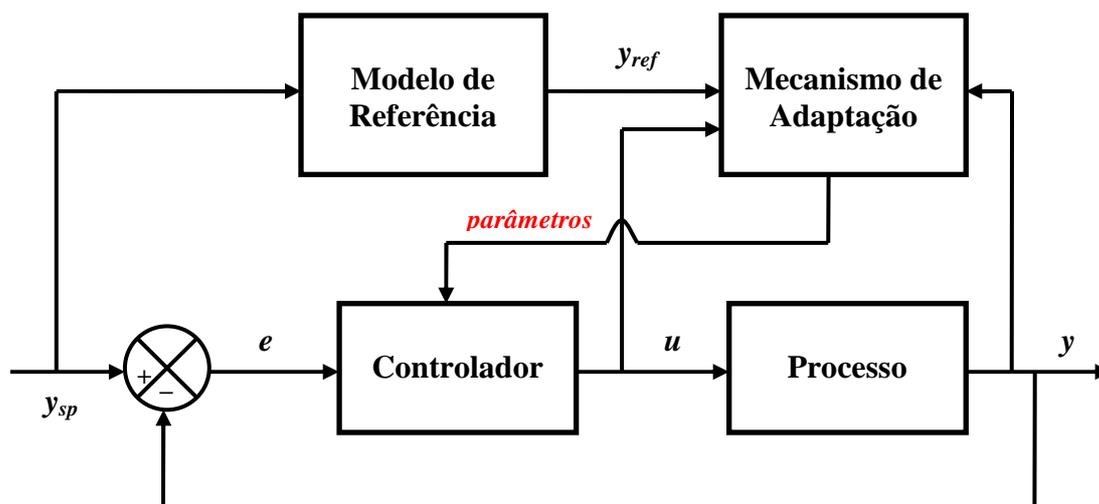


Figura 2.19 Representação do sistema de controlo adaptativo MRAC – Model Reference Adaptive Control[92].

As duas definições para a adaptabilidade seleccionadas e enunciadas acima, apesar de aparentemente de referirem a contextos de estudo assaz distintos (desde a biologia

evolutiva até à engenharia de controlo de processos), representam a ilustração de um conceito muito importante no âmbito do presente trabalho.

Assim, retira-se da discussão anterior que a adaptabilidade se baseia nos mecanismos de interacção entre pelo menos duas entidades: o sistema determinado por um conjunto de características flexíveis, passíveis de serem modificadas; um meio evolutivo em que se insere o sistema anterior ou um segundo sistema que interage com o primeiro e cuja evolução depende das suas características.

Assim, um sistema adaptativo, ou seja um sistema capaz de se adaptar, é uma entidade que se modifica de forma a melhor se ajustar às circunstâncias do meio que o rodeia ou a melhorar o desempenho do segundo sistema que dele depende. Assim, é óbvio que a aplicação da adaptabilidade só se torna possível através de uma monitorização dessas mesmas condições variáveis, já que a adaptação se pretende constituir como uma resposta bem sucedida às variações referidas.

Há que reter então dois pressupostos essenciais para a aplicação da adaptação: recolha e análise de informação relevante e capacidade de alteração como resposta a essa informação, ou seja de adaptação a circunstâncias e estruturas mutáveis. Para tal, analise-se agora a aplicação específica do conceito de adaptação ao campo da construção e implementação de processos algorítmicos.

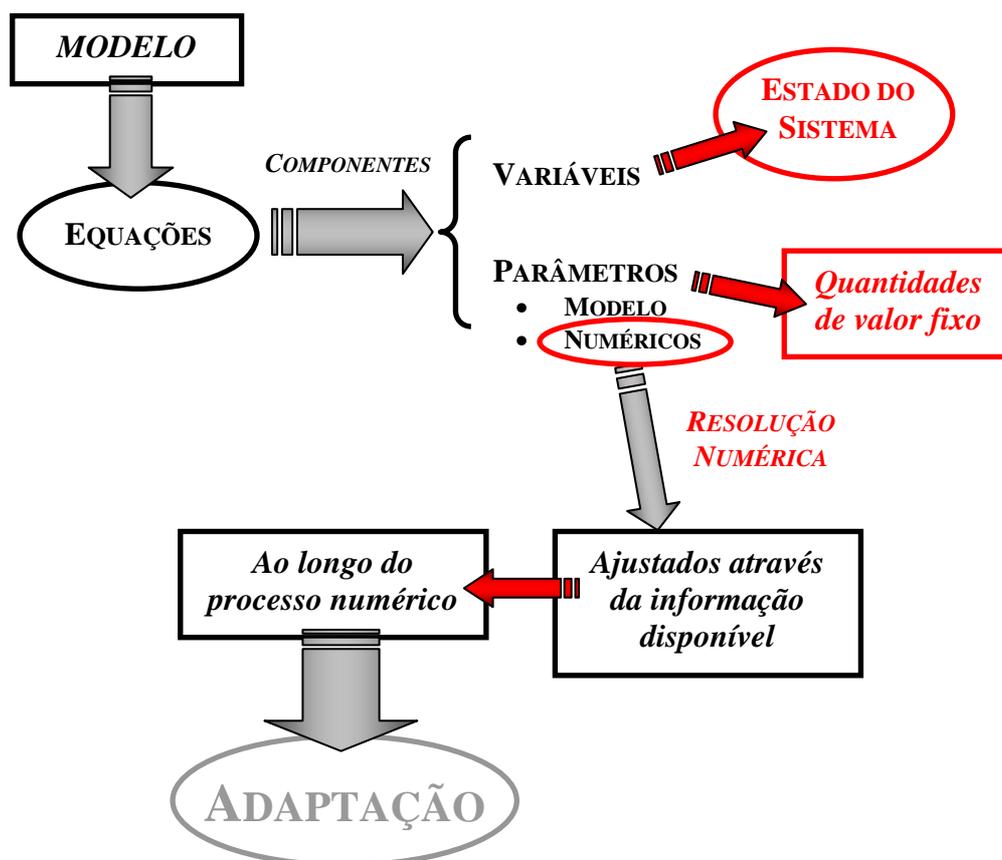


Figura 2.20 Conceito de adaptação no contexto da resolução numérica de modelos matemáticos.

De uma forma geral, a abordagem clássica à solução de qualquer tipo de problema através de um procedimento algorítmico baseia-se no desenvolvimento de uma

estrutura rígida em que os passos repetitivos são determinados por um conjunto de parâmetros, que pela própria definição, assumem valores fixos e não alteráveis durante a execução do processo de cálculo. Esta estratégia não é adaptável às condições particulares da evolução do algoritmo. Uma forma de toronar problemas que possam advir da falta de flexibilidade do procedimento clássico consiste na introdução do conceito de adaptação. Deste modo, a adaptabilidade implica o ajuste dos parâmetros de um procedimento algorítmico numérico às circunstâncias específicas da evolução da sua solução (vd. Figura 2.20). No caso particular da resolução numérica de PDE's, a própria malha gerada pelo processo de discretização, e que engloba o conjunto de posições nodais e das suas relações que representam no seu todo a aproximação do domínio contínuo, constitui uma parcela do conjunto de parâmetros numéricos que definem o algoritmo numérico. Assim, a forma mais comum de aplicação da noção de adaptação a este tipo de problemas consiste na possibilidade de introdução de um processo de redefinição de malha no algoritmo geral de integração numérica de PDE's. Deste modo, esta questão é abordada de forma mais pormenorizada nas secções seguintes.

2.4.2 ADAPTAÇÃO NO CONTEXTO DA RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE PDE'S

O interesse deste trabalho relaciona-se com o estudo de soluções de PDE's caracterizadas pela propagação de frentes móveis abruptas. Normalmente, todos os esquemas desenvolvidos a partir de uma malha fixa, caracterizados pela constância da malha inicial, revelam-se satisfatórios no caso de problemas que apresentem apenas perfis suaves ou gradientes elevados confinados a zonas do domínio previamente conhecidas e fixas. Nestes casos, uma escolha adequada da malha inicial, concentrando nodos nas zonas críticas de maior actividade da solução, revela-se suficiente para a obtenção da solução com uma exactidão aceitável, usando tempos computacionais razoáveis. No entanto, no estudo de problemas que desenvolvem frentes móveis e/ou choques, a malha exigível para a implementação de um esquema de malha fixa é, na maioria dos casos, bastante fina. Deste modo, os tempos de computação necessários à obtenção da solução tornam-se inoportáveis. Assim, desenvolveram-se métodos numéricos que, para além de possibilitarem a integração das equações, se preocupam igualmente na movimentação dos nodos, concentrando-os nas zonas de maior actividade da solução (ou seja, nas regiões de gradientes mais elevados). Este grupo de métodos é genericamente denominado por Métodos de Malha Adaptativa, já que a malha é redefinida ao longo do procedimento algorítmico de resolução numérica, adaptando-se à evolução das características da solução.

Os algoritmos de mobilidade ou de adaptação nodal podem ser associados a cada um dos métodos numéricos de discretização referidos anteriormente na secção 2.2. No entanto, a informação recolhida na bibliografia, está normalmente relacionada com a aplicação dos métodos de Diferenças Finitas e Elementos Finitos, já que estas são as estratégias mais antigas e de utilização mais generalizada.

2.4.3 ESTRATÉGIAS GERAIS DE ADAPTAÇÃO APLICADAS À RESOLUÇÃO DE PDE'S

No campo da resolução numérica de PDE's, a aplicação dos conceitos de geração ou de adaptação de malha relaciona-se com os objectivos seguintes:

- h-refinement – refinamento e relaxação de malha.

- p-refinement – ajuste das ordens associadas às funções de aproximação.
- r-refinement – introdução de movimentação nodal através da introdução do deslocamento espacial das posições dos nodos que constituem a malha.

Estas estratégias representam classes diferentes de métodos adaptativos que não são de todo mutuamente exclusivas, podendo ser combinadas no desenvolvimento de algoritmos mistos (e.g. hp-refinement que associa a capacidade de refinamento e relaxação das malhas com a adaptação das ordens correspondentes às funções base de aproximação).

Por outro lado, os métodos de malha adaptativa podem ser classificados em dois grandes grupos:

- Métodos de Redistribuição Nodal Estática (MRNE).
- Métodos de Redistribuição Nodal Dinâmica (MRND).

Os MRNE caracterizam-se pelo facto da malha ser redefinida em intervalos de tempo previamente fixados a partir de estimativas de erro local, com critérios de equidistribuição. Incluem duas abordagens distintas, relacionadas com:

- Redistribuição nodal – redefinição do posicionamento dos nodos após um intervalo de tempo de integração pré-definido, mantendo-se constante o seu número total.
- Refinamento ou relaxamento de malha – adição ou supressão de nodos em posições intermédias da malha inicial; esta estratégia consiste simplesmente na relaxação ou refinamento da malha através do uso de nodos suplementares e está directamente relacionada com os procedimentos designados por h-refinement.

O algoritmo de obtenção da solução é completamente independente do algoritmo de redefinição da malha. No caso de alteração desta, efectua-se a transferência entre malhas, calculando-se os valores da solução na nova malha por interpolação, utilizando a informação proveniente da anterior.

Por outro lado, nos MRND, ou de r-refinement, os dois algoritmos são interdependentes, avaliando-se a solução e a malha conjuntamente e continuamente ao longo do tempo. A introdução do movimento nodal pode seguir vários critérios, tais como:

- Equidistribuição do integral de medidas de erro baseadas em propriedades características da solução;
- Minimização do integral de indicadores de erro local;
- Aplicação de pseudoforças de atracção e repulsão entre nodos.

Uma desvantagem dos MRND, referida por Dwyer et al.[93], baseia-se no facto da computação simultânea das posições dos nodos e da solução transformar um problema linear num não linear ou, frequentemente, dificultar a resolução dum problema inicialmente não linear. Porém, para problemas stiff, a utilização de MRNE pode provocar instabilidade se os passos espaciais não forem suficientemente reduzidos.

A aplicação de adaptação na área específica da resolução de PDE's tem já algumas décadas e a quantidade e variedade de métodos propostos é bastante extensa[94-95]. No entanto, pode-se afirmar que os objectivos essenciais do procedimento adaptativo são sempre os mesmos, ou seja, a construção ou geração de malhas que sucessivamente permitam a concentração de nodos nas regiões do domínio onde a solução manifeste maior actividade (i.e. exiba gradientes mais elevados) e a dispersão de nodos nas regiões restantes, acompanhando de forma eficiente a evolução das características problemáticas da solução. Assim, os critérios de adaptação mais comuns referidos anteriormente, quer para MRNE's como para MRND's, são discutidos de um modo mais pormenorizado na secção 2.5.

A aplicação do conceito de adaptação no contexto da estratégia MOL é perfeitamente trivial. A estrutura do método possibilita que o primeiro passo de discretização espacial (ou de geração da malha espacial) seja passível de ser associado a uma estratégia de adaptação estática, geralmente caracterizada por redefinições sucessivas da malha. Por outro lado, o segundo passo, geralmente associado à integração temporal pode igualmente ser completado com técnicas dinâmicas de movimentação de malha. Deste modo, é relativamente simples afectar o algoritmo clássico MOL com qualquer tipo de método adaptativo de forma a se construir uma estratégia AMOL (Adaptive Method Of Lines).

No âmbito da discussão do conceito de adaptação importa referir resumidamente uma aplicação recente de adaptabilidade baseada numa lógica mais geral e alargada, designada por Algorithm Refinement (AR). AR consiste num paradigma emergente no campo da modelação e simulação de problemas multiescala. Uma forma eficiente de resolver este tipo de problemas consiste em executar cálculos mais sofisticados, através de um algoritmo complexo e dispendioso, apenas nas regiões do problema onde estes se revelem absolutamente necessários, e acoplar este processo a um método mais simples (menos exigente) que pode ser usado no domínio restante. Estes métodos ditos "híbridos" associam tipicamente (pelo menos) dois esquemas computacionais diferentes (do ponto de vista estrutural e algorítmico), que podem ser aplicados a regiões distintas do problema (e.g., o interior ou o exterior de uma onda de choque)[96-97]. Assim, esta abordagem multi-algoritmo é frequentemente conhecida como o referido AR. Uma classe possível deste tipo de métodos híbridos envolve a conjugação de Métodos de Partículas (Particle Methods – PM; vd. secção 2.2.8) a integradores de PDE's definidas no continuum.

Os modelos matemáticos usam linguagens significativamente distintas para a representação de fenómenos a escalas microscópicas e macroscópicas e, conseqüentemente os algoritmos correspondentes manifestam essa disparidade. Por um lado, os PM's são uma classe de métodos normalmente usada na modelação à escala microscópica, que interpretam o sistema físico através de entidades discretas interactuantes, que podem representar desde átomos individuais até elementos de fluido, bactérias ou mesmo automóveis. Por outro lado, algoritmos baseados em campos são tipicamente utilizados em modelação à escala macroscópica, e advêm de modelos definidos essencialmente por PDE's estabelecidas num sistema físico representado por campos contínuos.

A conjugação destes dois tipos de métodos e a sua aplicação adaptada às regiões do problema onde estes se revelem mais adequados consiste numa ideia base possível

para a estratégia geral denominada por AR. Assim, a formulação de um esquema AR implica o estabelecimento de um “critério de refinamento” que especifique quando a representação microscópica é necessária ou quando uma reprodução macroscópica se demonstra suficiente[98].

Uma aplicação directa do conceito AR no campo dos métodos adaptativos para a resolução numérica de PDE's refere-se à estratégia designada por AMAR (Adaptive Mesh and Algorithm Refinement) que genericamente corresponde a um aperfeiçoamento do método clássico AMR (Adaptive Mesh Refinement – apresentado e discutido mais à frente neste capítulo) através da introdução de procedimentos PM fisicamente mais realistas como substitutos dos integradores contínuos à escala mais reduzida[99].

Neste contexto, convém relevar de modo sucinto outro conceito importante que se refere a uma aplicação abrangente do tipo de métodos discutido neste capítulo denominada por Computational Fluid Dynamics (CFD). CFD corresponde a um ramo da Dinâmica de Fluidos que se especializou no desenvolvimento e aplicação sistematizada de algoritmos para a resolução e análise de problemas que modelem e simulem o escoamento de fluidos. De facto, o suporte fundamental de quase todos os problemas CFD são as já referidas equações de Navier-Stokes, um modelo matemático diferencial definido no domínio espaço-temporal. Deste modo, as estratégias CFD constituem-se obviamente como uma aplicação relevante no campo da integração numérica de modelos diferenciais, incorporando a área específica da geração de malhas multidimensionais e a óbvia introdução de potencialidades adaptativas de manifesta utilidade na potenciação da eficiência dos algoritmos numéricos, genericamente associados a métodos de discretização baseados em volumes ou elementos finitos.

No entanto, a resolução de problemas deste tipo discretizados sobre domínios espaciais tridimensionais (obviamente através de ferramentas computacionais), pode conduzir ao desenvolvimento de outro campo de pesquisa periférico, Parallel Computing (PC), agora relacionado com a implementação computacional per se, mais precisamente com a gestão do imenso fluxo de informação e de operações matemáticas gerado pelo algoritmo numérico. Tradicionalmente, um programa computacional apresenta uma estrutura sequencial. Assim, o algoritmo é construído e implementado como uma sequência de instruções executada num processador único. Deste modo, PC consiste numa estratégia possível alternativa que possibilita que várias operações de cálculo possam concorrer simultaneamente em múltiplos processadores, baseada no princípio que problemas de dimensão elevada podem ser divididos em conjuntos de problemas pequenos resolúveis de um modo paralelo.

2.4.4 VANTAGENS DE UTILIZAÇÃO DOS MÉTODOS DE MALHA ADAPTATIVA

A grande vantagem deste tipo de métodos consiste no facto do movimento dos nodos possibilitar uma grande economia de esforço computacional para problemas que exibam soluções com descontinuidades móveis, superfícies de contacto e correntes deslizantes, já que, nestes casos, apenas uma pequena região do domínio necessita de baixos tamanhos de malha. Assim, a utilização de malhas fixas uniformes implica uma menor separação entre nodos de modo a se obter erros de truncatura aceitáveis em zonas de gradientes elevados. No entanto, estas separações são muito menores do que as necessárias para as regiões de baixo gradientes, conduzindo a um grande

desperdício de esforço computacional. De qualquer modo, desde que a solução não exiba essas características, os métodos de malha fixa revelam-se perfeitamente satisfatórios, já que são menos complexos que os métodos de malha adaptativa.

A resolução apropriada de uma onda de choque requer que a separação nodal na sua vizinhança seja algumas vezes menor que a espessura do choque. Geralmente, esta espessura está directamente relacionada com o valor dos coeficientes associados a termos difusivos (segundas derivadas espaciais) presentes nas PDE's do problema, sendo frequentemente da ordem de grandeza destes. Portanto, a redução dos coeficientes de segunda ordem, implica um reforço do carácter hiperbólico do problema e uma consequente diminuição da espessura da onda propagada. Para se evitar declives infinitos, ou seja, descontinuidades sem significado físico, os coeficientes terão de ser não nulos. O uso de métodos adaptativos possibilita a utilização de tamanhos de malha locais muito menores e consequentemente, a aplicação de coeficientes de segunda ordem menores (fisicamente, mais realistas) com ondas de choque bastante mais finas do que pode ser usado, geralmente, no caso de métodos não adaptativos. É de notar, igualmente, que no caso em que os nodos se movimentem com a frente, podem ser introduzidos passos temporais consideravelmente maiores dos que são possíveis de aplicar no caso de métodos de malha fixa não uniforme.

De modo a concretizar estas vantagens dos métodos adaptativos, relembra-se a equação de Burgers unidimensional,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1.55)$$

sujeita às condições fronteira:

$$\begin{cases} u(0,t) = u_L; \\ u(1,t) = u_R; \end{cases} \quad (2.78)$$

e à condição inicial:

$$u(x,0) = u^0(x). \quad (2.79)$$

Segundo Herbst, 1982[100] é necessário que, na zona do choque propagado, o passo espacial h seja aproximadamente igual a ε para que a solução obtida seja estável. Caso contrário, os perfis de $\partial u / \partial x$ tornam-se oscilatórios. Portanto, se se pretender a utilização de um método de malha fixa, é necessário que o espaçamento nodal em todo o domínio seja aproximadamente ε . Pelo contrário, através da aplicação de um método adaptativo, tal não se torna necessário, já que os nodos tenderão idealmente a concentrar-se na região da onda abrupta, satisfazendo assim a condição de estabilidade ($h \approx \varepsilon$). Nas outras zonas do domínio, onde o perfil da solução é suave, a malha pode ser mais larga.

Considere-se um exemplo específico do modelo geral 1.55 com as condições fronteira: $u_L = u_R = 0$; e a condição inicial,

$$u(x,0) = 1/2 \sin(\pi x) + \sin(2\pi x). \quad (2.80)$$

A resolução deste modelo é problemática e difícil de obter através da utilização de um método não adaptativo, devendo-se tal facto, essencialmente ao tipo de condição inicial considerado. O comportamento da solução pode ser resumido da seguinte forma: partindo da onda sinusoidal inicial, cada uma das secções desta (positiva e negativa) deslocam-se em sentidos opostos, originando uma frente abrupta em $x \approx 0.6$

para $t \approx 0.2$, cuja espessura é proporcional ao valor do coeficiente de difusão ε ; a partir deste instante, a frente desloca-se para a direita (na direcção positiva de x), ao mesmo tempo que a sua amplitude se reduz progressivamente; por volta de $t \approx 1.4$, já depois da secção negativa da frente ter desaparecido, esta embate na fronteira direita ($x = 1$), mantendo-se nessa posição onde se desvanece lentamente. Deste modo, a maior dificuldade na integração deste modelo consiste na definição correcta da frente formada pela solução, e do seu movimento posterior. Neste caso, esta terá uma espessura da ordem de $\varepsilon = 1 \times 10^{-3}$, exigindo que o espaçamento entre os nodos situados nas regiões onde a frente se forma e se desloca, não seja muito superior a esse valor. Assim, se se pretender integrar este modelo numa malha fixa, esta terá de ser necessariamente bastante fina, provocando um esforço computacional excessivo na integração do modelo.

De forma a ilustrar esta questão apresenta-se um exemplo de resolução numérica do modelo 1.55 retirado de Brito, 1998[94]. Assim, aplica-se na solução do problema o procedimento MOL descrito acima através do recurso a discretizações de diferenças finitas (FD) de quarta ordem centradas (aproximação FD centrada com 5 nodos) sobre uma malha uniforme fixa de 41 nodos. No caso das posições situadas junto às fronteiras onde a geometria centrada não pode ser usada sem a introdução de fronteiras falsas, optou-se por utilizar a aproximação de quarta ordem de geometria disponível baseada no conjunto de 5 nodos mais próximos do nodo de interesse. É manifestamente notório o desenvolvimento de forte dispersão numérica que irradia a partir da região onde se deveria formar a frente abrupta inicial (vd. Figura 2.21A). Os erros são propagados e amplificados em cada passo numérico executado. Desta forma, a prossecução do processo de integração numérica torna-se impossível a partir de $t \approx 0.2$, devido à instabilidade introduzida do sistema de ODE's.

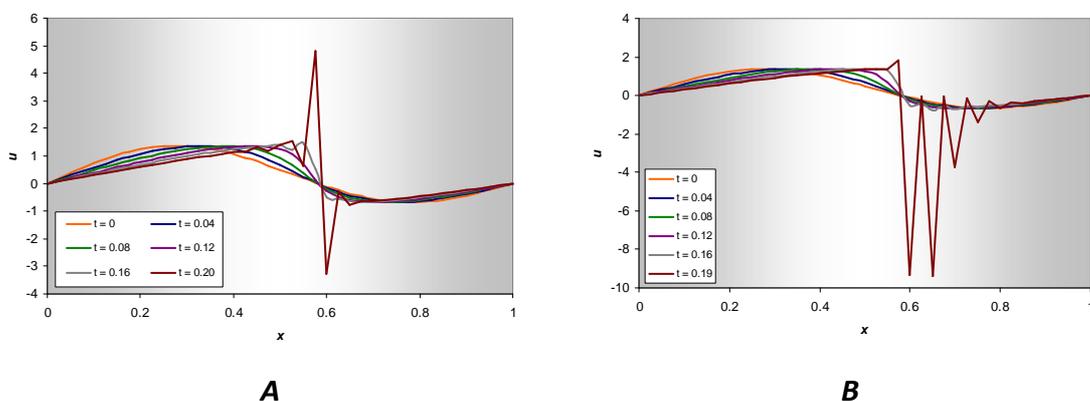


Figura 2.21 Resultados da equação de Burgers obtidos através da aplicação de um MOL não adaptativo: A – discretização espacial de Diferenças Finitas Centradas de 4ª ordem; B – discretização espacial de Diferenças Finitas biased upwind de 4ª ordem[94].

Por outro lado, testou-se a aplicação do mesmo procedimento MOL mas agora com fórmulas de discretização FD de quarta ordem biased upwind (três nodos à esquerda e um nodo à direita do nodo de interesse) numa malha fixa e uniforme de 41 nodos. Os resultados obtidos nestas condições são apresentados na Figura 2.21B. Novamente se observa o desenvolvimento de instabilidade na solução a partir do tempo $t \approx 0.15$, perfeitamente constatada pela ocorrência de fortes oscilações de amplitude crescente nos perfis. As oscilações (cuja amplitude é superior à observada no caso anterior) são predominantemente negativas e ocorrem na secção do domínio situada após a frente

(ao contrário do que sucedia no caso anterior). Por outro lado, verifica-se que, enquanto foi possível efectuar o avanço temporal da integração (até $t = 0.19$) a formação da zona superior da frente ocorre de uma forma relativamente normal. Assim, é possível concluir-se que este esquema de diferenças se revela mais adequado que o anterior para a zona do domínio anterior à frente, já que aí a velocidade da onda é positiva. Do mesmo modo, verifica-se que este esquema é absolutamente inadequado para a região negativa dos perfis, onde uma discretização de diferenças finitas adiantadas ou downwind seria a mais indicada.

Por análise dos resultados obtidos, é possível concluir que o método de Diferenças Finitas fixas não conduz a resultados aceitáveis, principalmente quando aplicado a modelos caracterizados por termos advectivos não lineares, associados a termos difusivos de influência reduzida. Por outro lado, se se partir de soluções iniciais caracterizadas por advecção, este tipo de equações tendem a desenvolver frentes abruptas móveis de espessura múltipla do factor de difusão (ε) que somente seriam resolvidas satisfatoriamente por este tipo de estratégia se se utilizassem grelhas de espaçamento muito reduzido, o que implicaria esforços computacionais inoportáveis. O aparecimento de instabilidade e a conseqüente dificuldade na integração é o resultado de estimativas oscilatórias da segunda derivada de valor absoluto progressivamente mais elevado, resultantes do desenvolvimento da frente abrupta.

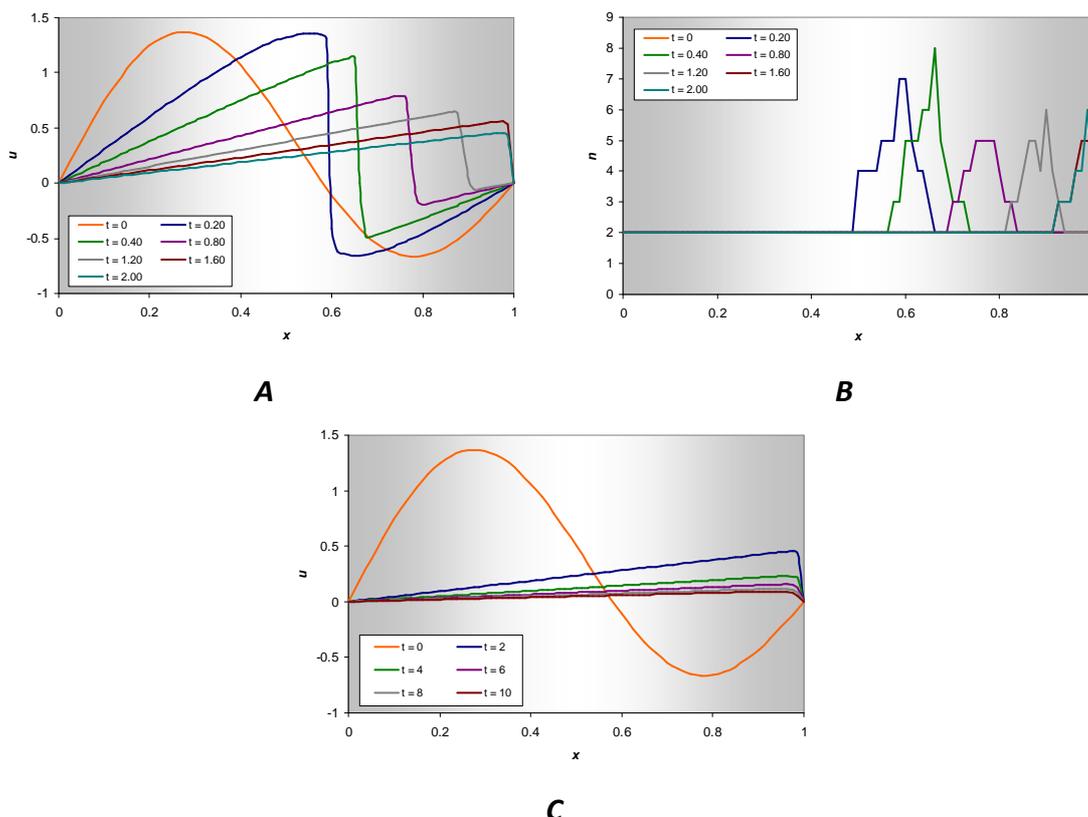


Figura 2.22 Resultados da equação de Burgers obtidos através da aplicação de um MOL adaptativo – AMOL: A – até $t = 2$; B – nível máximo de refinamento atingido pelos nodos da malha original de nível 2; C – até $t = 10$ [94].

A exemplificação do potencial da adaptação neste campo particular de estudo, realiza-se através da análise dos resultados igualmente apresentados por Brito, 1998[94],

obtidos pela aplicação de um MOL adaptativo (AMOL) baseado no sucessivo refinamento uniforme de uma malha inicial igualmente espaçada com 41 nodos.

A estratégia adaptativa é descrita em pormenor em [94], e é controlada pela comparação entre a solução numérica obtida através da integração temporal (num intervalo de tempo pré-especificado) do problema discretizado sobre duas malhas equidistribuídas de nível sucessivo (uma malha fina construída pela colocação de nodos adicionais nas posições intermédias dos intervalos de uma malha esparsa de nível imediatamente inferior). Este processo é executado iterativamente até se atingir o grau de precisão pretendido, sem ultrapassar o nível de malha máximo admissível.

Assim, o recurso a um método adaptativo possibilita os resultados numéricos resumidos na Figura 2.22. Ao contrário do constatado para o caso dos resultados não adaptativos, observa-se agora a notória capacidade do algoritmo adaptativo de simular satisfatoriamente a formação e a propagação da frente abrupta (vd. Figura 2.22B), ilustrando as vantagens da aplicação do conceito de adaptação na resolução deste tipo de problemas.

Em todos os casos apresentados nesta secção utilizou-se o integrador implícito DASSL (vd. Anexo C) para a implementação do avanço temporal MOL da solução.

2.5 PRINCÍPIOS DE ADAPTABILIDADE

A generalidade dos métodos adaptativos procedem a uma transferência das variáveis dependentes do problema discretizadas (vector \mathbf{u}), das coordenadas físicas iniciais (\mathbf{x} , t), para um espaço computacional de coordenadas (ξ , τ), no qual se pretende que os nodos estejam equidistribuídos, ou seja igualmente espaçados. Deste modo, as incógnitas do sistema computacional são $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \tau)$ e $\mathbf{x}(\xi, \tau)$. No entanto, na direcção temporal a transformação reduz-se normalmente a $t = \tau$.

A aplicação de uma estratégia MOL ao princípio de equidistribuição descrito acima implica que cada PDE seja transformada num conjunto de ODE's temporais (uma para cada nodo da malha) através da aplicação de um método de discretização (e.g. FDM, FEM). Estas ODE's podem ser escritas na forma geral:

$$\frac{du^k}{dt} = F^k(t) \quad (2.81)$$

onde, u^k – valor da aproximação à solução no nodo k .

Os detalhes da computação de F^k são definidos pelo método de discretização particular escolhido, e contêm os termos adicionais ($\partial x^k / \partial t$, $\partial u^k / \partial x^k$) resultantes da transformação para o sistema coordenado computacional.

Deste modo, estas ODE's podem ser integradas através de métodos de diferenças finitas com passo temporal, explícitos ou implícitos. Normalmente, a aplicação de métodos implícitos permite a utilização de passos no tempo bastante maiores que os métodos explícitos, sem causar instabilidade na solução. No entanto, requerem a resolução de equações matriciais, aumentando consideravelmente o tempo computacional de integração. De qualquer modo revelam-se essenciais para problemas que necessitem de espaçamentos mais apertados entre os nodos.

Através da derivada temporal de u^k em cada nodo é possível calcular o valor de u^k para o próximo passo. Como du^k/dt pode variar consideravelmente de nodo para nodo, provocando o aumento e decaimento da solução em zonas distintas do domínio, o sistema de ODE's é frequentemente stiff.

Como referido acima, uma das abordagens mais aplicadas para a avaliação da adaptação nodal (quer em termos de colocação como de movimentação de nodos) é baseada no princípio da equidistribuição. Assim, para um exemplo ilustrativo unidimensional, considere-se uma malha definida pelo conjunto de posições x_i , $i = 1, \dots, n$. Através da observação do princípio da equidistribuição este sistema de nodos é estabelecido de modo a que uma quantidade especificada, definida por uma função monitora $M(u)$, seja uniformemente distribuída sobre o domínio espacial, ou seja[91],

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} M(u) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} M(u) dx = c, \quad 2 \leq i \leq n-1, \quad (2.82)$$

que, no formato discreto é aproximada por,

$$M_{i-1} \Delta x_{i-1} = M_i \Delta x_i = c, \quad 2 \leq i \leq n-1, \quad (2.83)$$

onde, $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ é o tamanho local da malha, M_i representa a estimativa discreta de $M(u)$ no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$, e c é uma constante.

A técnica de equidistribuição pode ser usada de múltiplas formas nos procedimentos de integração numérica de PDE's tanto numa perspectiva estática como um meio de colocação ou redistribuição nodal como numa vertente dinâmica como estratégia geradora de equações de movimentação de nodos. Uma das primeiras tentativas de aplicação da equidistribuição deve-se a White, 1982[101] que recorreu ao arc-length (comprimento do arco) da solução como função monitora,

$$M(u) = \sqrt{\alpha + \|u_x\|_2^2}. \quad (2.84)$$

Outra possibilidade consiste na equidistribuição do erro de truncatura local ou da curvatura local[90], e.g.,

$$M(u) = \|u_{xx}\|. \quad (2.85)$$

Abordagens alternativas referem-se à definição da adaptação nodal através da minimização de um funcional dependente de medidas de erro e/ou de propriedades estruturais da malha. Por exemplo, Hyman, 1983[102] e Petzold, 1987[103] apresentam métodos dinâmicos que se enquadram nesta última categoria, em que o movimento da malha é definido através da minimização de uma quantidade dependente da combinação entre as velocidades nodais e os gradientes temporais da solução. Numa perspectiva MOL, a minimização simultânea da variação temporal na solução e na malha conduz a uma variação lenta do Jacobiano do sistema ODE semi-discreto com uma conseqüente redução dos custos computacionais. No entanto, no caso de métodos dinâmicos torna-se frequentemente necessária a introdução de esquemas de repulsão ou de viscosidade nodal de forma a impedir as conseqüências negativas da possível coalescência ou mesmo cruzamento de nodos.

Por outro lado, o método mais importante representativo da classe de estratégias adaptativas optimizadoras é o Método de Elementos Finitos Móveis (MFEM – Moving Finite Element Method) de Miller et al., 1981[104-105],[106] onde a medida do erro

corresponde ao quadrado do resíduo da PDE na sua forma FE. Deste modo, são obtidas ODE's para a solução e as posições nodais pela minimização do integral dessa medida do erro em relação às derivadas temporais das posições nodais.

Alternativamente, os processos de colocação (refinamento ou relaxação) ou de redistribuição podem depender simplesmente da análise directa de propriedades da solução ou de técnicas de interpolação que permitam uma inferência dos erros de discretização efectuados. Esta lógica de refinamento/relaxação sobre uma estrutura de malhas de resolução crescente é a base das já clássicas estratégias de Refinamento de Malha Adaptativa (AMR – Adaptive Mesh Refinement) originalmente desenvolvidas por Berger, 1982[107]

2.6 REVISÃO DE MÉTODOS ADAPTATIVOS

2.6.1 INTRODUÇÃO

Nesta secção apresenta-se uma revisão bibliográfica dos Métodos de Malha Adaptativa, juntamente com os respectivos processos de adaptação nodal. No entanto, não se pretende que esta revisão seja demasiado exaustiva, mas apenas que constitua uma introdução sucinta ao tema, através da descrição das principais estratégias desenvolvidas e adoptadas para a resolução do problema.

As simulações numéricas de sistemas de PDE's consistem, geralmente, na aplicação de um gerador da malha conjugado com um integrador das equações diferenciais. Em qualquer caso, é estabelecida uma ligação do gerador para o integrador. Esta ligação é feita quando a integração é realizada através da malha de pontos que cobre o espaço físico. No caso da solução desenvolver gradientes elevados, é necessário igualmente estabelecer uma ligação de comunicação do integrador para o gerador da malha. Esta é alterada de acordo com as características da solução denominando-se adaptativa (vd. Figura 2.23). Portanto, esta revisão bibliográfica tem como objectivo primordial a discussão geral referente às diversas estratégias adaptativas desenvolvidas.

Foram publicadas várias discussões gerais referentes a este tipo de problemas tais como as apresentadas por Thompson et al., 1982[108], 1985[109], Thompson, 1984[110], e Turkel, 1984[111], que se referem igualmente a todo o campo mais genérico da geração de malhas. Uma malha é definida como um conjunto organizado de pontos fixados no domínio (normalmente espacial), formado pelas intersecções das linhas de um sistema de coordenadas curvilíneas de ajuste a condições fronteira. No entanto, o interesse do trabalho presente concentra-se sobre a adaptação nodal desenvolvida de forma a satisfazer propriedades da solução, e não propriedades estabelecidas por condições fronteira. Neste sentido, foram igualmente apresentadas revisões mais especializadas sobre métodos adaptativos para resolução de PDE's por Anderson, 1983[112], Thompson, 1985[113], Eisman, 1987[114], Hawken et al., 1991[95], Duarte, 1994[115] e Brito, 1998[94]. Estes últimos trabalhos focam a sua atenção em técnicas adaptativas especificamente aplicadas a métodos de integração baseados em discretizações de Diferenças Finitas ou Elementos Finitos.

A maioria dos métodos adaptativos desenvolvidos requer que as equações diferenciais envolvidas apresentem soluções contínuas. No entanto, se as equações forem não lineares (que constituem o caso mais comum) tenderão a formar perfis descontínuos,

e conseqüentemente, provocar problemas numéricos se não se introduzirem termos de viscosidade ou análogos, na resolução numérica.

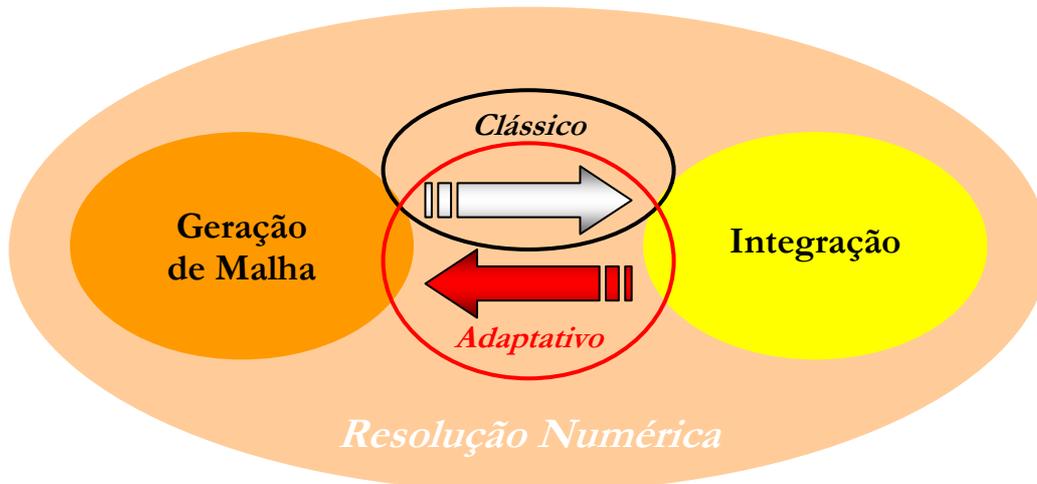


Figura 2.23 Relação entre a perspectiva clássica fixa e a abordagem adaptativa para a resolução numérica de PDE's.

Os métodos de adaptação de malha tendem a apresentar várias características comuns, tais como[110]:

1. Um método de ordenação e numeração dos nodos ao longo da região física de interesse;
2. Um meio de “comunicação” entre os nodos, de modo a que a sua distribuição permaneça relativamente regular, apesar da sua movimentação relativa;
3. Um processo de representação discreta da solução contínua e de avaliação dos valores discretos com uma exactidão aceitável;
4. Uma forma de monitorização da estimativa do erro associado à discretização efectuada (erro de truncatura);
5. Um meio de redistribuição dos nodos, baseado na estimativa da medida do erro efectuada em 4., de modo a reduzir os erros cometidos no cálculo da solução numérica.

Como já foi referido anteriormente, o objectivo desta revisão bibliográfica não consiste numa enumeração de uma sequência extensa de contribuições de autores (ou conjuntos de autores) que tenham desenvolvido e/ou aplicado qualquer estratégia que possa ser enquadrada (mesmo que de um modo periférico) na classificação de resolução adaptativa de modelos parciais⁴, como tal foi definida nas secções anteriores. De facto, o conjunto de trabalhos apresentados neste campo da análise numérica de PDE's nos últimos quarenta anos, é já de tal forma vasto e complexo, que a própria pretensão de uma estruturação completa e exaustiva da revisão conduziria a uma tarefa fastidiosa e totalmente contraproducente. Assim, optou-se por concentrar a atenção nas ideias teóricas básicas que constituem a origem do desenvolvimento das diversas estratégias numéricas adaptativas e de aplicação dos princípios de

⁴ Ou campos adjacentes relacionados como Métodos Multi-Malha ou Métodos de Geração de Malha.

adaptabilidade discutidos na secção anterior. Estes procedimentos gerais são representados pelos seus trabalhos bibliográficos seminais e pelos desenvolvimentos posteriores mais relevantes. A explanação desse trabalho de pesquisa bibliográfica é resumida nas subsecções seguintes deste capítulo.

Convém igualmente salientar que o interesse do autor neste tipo específico de pesquisa se baseia essencialmente na sua já considerável experiência[94,116-118] no desenvolvimento e teste deste tipo de métodos numéricos associados a perspectivas estáticas e dinâmicas para a resolução de problemas relacionados com vários sistemas, como, processos extremos de combustão do tipo termite[119-121] e ultrafiltrações por membrana[122-124].

2.6.2 MÉTODO DAS LINHAS ADAPTATIVO (AMOL)

Uma das classes de métodos adaptativos disponíveis consiste na conjugação entre uma estratégia de discretização MOL com técnicas de adaptação ou movimentação de malhas incorporadas no processo de integração posterior. Este tipo de métodos é designado genericamente por AMOL (Adaptive Method Of Lines).

De facto, a própria estrutura dos processos MOL, organizada em dois estágios independentes, possibilita a introdução do conceito de adaptação de uma forma perfeitamente trivial. Assim, no MOL clássico (vd. secção 2.3), a malha permanece inalterada durante a totalidade da integração temporal. No entanto, a manipulação dessa fase de integração possibilita o desenvolvimento de estratégias adaptativas estáticas, através da subdivisão do passo completo em subintervalos e a especificação de posições intermédias onde a malha é redefinida por técnicas de h-refinement, ou a introdução de equações adicionais de movimentação nodal através de processos dinâmicos de r-refinement. Assim, qualquer estratégia adaptativa (incluindo p-refinement para manipulação selectiva de ordens de aproximação) pode ser acoplada a uma lógica de integração do tipo MOL, sendo suficientemente versátil para se adaptar a diferentes procedimentos de discretização e a modelos construídos sobre domínios espaciais de dimensão arbitrária.

Deste modo, os algoritmos estáticos inseridos numa filosofia MOL são organizados em quatro passos básicos[91]:

1. Aproximação das derivadas espaciais numa malha fixa não uniforme;
2. Integração do sistema de ODE's semi-discreto resultante, em vários passos temporais;
3. Adaptação da malha espacial entre cada passo temporal, concentrando nodos nas regiões mais activas e/ou promovendo a relaxação da malha nas restantes zonas do domínio espacial;
4. Interpolação da solução para cada nova malha gerada.

A principal vantagem desta abordagem consiste no facto dos procedimentos de solução e de adaptação de malha serem totalmente autónomos, possibilitando o recurso a diversas estratégias de adaptação como a adopção de um número variável de nodos (i.e., refinamento de malha). Por outro lado, as principais desvantagens do procedimento são:

- A paragem periódica do processo de integração temporal para a redefinição da malha, que resulta em ineficiência computacional, já que exige um frequente reinício do integrador. Por outro lado, como as posições nodais apenas são alteradas em tempos discretos, estas podem tornar-se desactualizadas com o evoluir da integração temporal, porque a colocação somente é controlada pelas características da solução no início do passo de integração. Assim, em modelos que exibam soluções de evolução rápida, é necessário impor passos relativamente reduzidos de forma a reter a exactidão desejada.
- O recurso obrigatório a uma técnica de interpolação para a transferência da solução entre a malha anterior e a nova malha, que obviamente se constitui como uma nova fonte de erros numéricos.

A abordagem dinâmica consiste na movimentação contínua no tempo dos nodos da malha de modo a que as respectivas localizações sigam o deslocamento das frentes de uma forma optimizada. Assim, a probabilidade da frente móvel cruzar as posições nodais especificadas reduz-se significativamente, e os passos temporais podem ser aumentados. Esta estratégia requer uma perspectiva dita Lagrangiana do problema diferencial, ou seja, considera as trajectórias contínuas no tempo dos nodos[91]:

$$x^L = x_0 < x_1(t) < \dots < x_i(t) < \dots < x_{N-1} < x_N = x^R, \quad (2.86)$$

para um exemplo unidimensional. Ao longo de cada trajectória $x(t) = x_i(t)$, a derivada total de u é dada por,

$$\dot{u} = u_t + \dot{x}u_x = f(u) + \dot{x}u_x. \quad (2.87)$$

Assim, a estratégia dinâmica implica a definição de equações que representem a movimentação nodal, $\dot{x} = g(t)$, que são deduzidas com base em informações físicas disponíveis, nomeadamente quantidades relacionadas com fluxos. Por exemplo, uma escolha óbvia consiste na afectação aos nodos de uma velocidade definida de modo a que percorram as respectivas trajectórias características (e.g., para a equação de advecção $u_t = -vu_x$, define-se $\dot{x} = v$, de modo a que $\dot{u}(x(t), t) = 0$, sendo v a velocidade do fluxo). Portanto, o objectivo primordial desta abordagem corresponde à minimização da variação temporal da solução (no referencial móvel) de forma a permitir a aplicação do maior passo temporal possível. Outra estratégia de estabelecimento do movimento nodal implica a equidistribuição espacial de uma função monitor que assegure a suavização do problema no espaço (vd. secção 2.6.4). A obtenção simultânea de uma suavização espacial e temporal do problema não se revela genericamente possível num único procedimento[125].

Os procedimentos AMOL são introduzidos e divulgados principalmente por W.E. Schiesser, A. Vande Wouwer e Ph. Saucez[126] e podem ser encontrados numa grande variedade de fontes bibliográficas para múltiplas aplicações, e.g. [127-134].

2.6.3 REFINAMENTO DE MALHA ADAPTATIVO (AMR)

Uma das classes de métodos mais populares englobados no contexto da adaptação estática é indubitavelmente o Refinamento de Malha Adaptativo (Adaptive Mesh Refinement). O desenvolvimento desta estratégia é originalmente devido ao trabalho

seminal de Marsha Berger and Joseph Berger que apresentaram o denominado método de Berger-Oliger em meados dos anos 80 do século XX.

Berger e Oliger, 1984 [135] desenvolvem um algoritmo de refinamento de grelha para o cálculo da solução de problemas transientes bidimensionais, descritos por PDE's hiperbólicas, através de técnicas de diferenças finitas. A malha de base é refinada por sobreposição sucessiva de submalhas de forma rectangular, localmente uniformes e com orientação arbitrária. A nova malha gerada não tem necessariamente que coincidir com as anteriores, como acontece na maioria dos algoritmos de refinamento.

O algoritmo de refinamento gera uma série de malhas de diferentes níveis (vd. Figura 2.24), em que a inicial (malha 1) coincide com o domínio espacial do problema. Cada nível é constituído por grelhas rectangulares. Se uma malha gera uma outra malha de nível de refinamento superior (e.g., a malha 4 gera a malha 8), a primeira malha (como exemplo considere-se a malha 4) é designada por malha parent da segunda (malha 8), e conseqüentemente a segunda (neste exemplo, 8) é a malha child da primeira (malha 4). Um exemplo simples para a estrutura de hierarquização e a representação da relação hierárquica entre malhas de diferentes níveis é apresentado nas Figuras 2.24 e 2.25, respectivamente.

Este algoritmo que na sua versão inicial se pode inserir na classe genérica de métodos denominada por LUMR (Local Uniform Mesh Refinement) pode ser dividido em diversos passos fundamentais como:

1. Arranque com uma malha base esparsa de nível 0 (que coincide com a discretização do domínio espacial inicial bidimensional);
2. Estimativa do erro de truncatura local em todos os nodos da malha;
3. Identificação das regiões do domínio que necessitam refinamento onde o erro de truncatura exceda um determinado limite;
4. Sobrepor submalhas mais finas nas regiões de refinamento seleccionadas.
5. Repetir o passo 4. recursivamente até que um limite do nível de refinamento seja excedido ou o erro de truncatura seja inferior ao limite estabelecido em todos os nodos da malha.

Torna-se óbvio que a partir do simples algoritmo anterior, é possível desenvolver uma variedade extensa de métodos alternativos recorrendo a diversas técnicas e estratégias disponíveis para a execução dos diferentes passos.

No caso particular do método de Berger-Oliger, o critério de refinamento baseia-se numa estimativa do erro de truncatura local a partir de um processo de extrapolação de Richardson proposta por Hyman e Naughton, 1985[136]. O algoritmo é adaptativo no espaço e no tempo, mantendo constante a razão entre os passos temporal e espacial em todas as malhas. A estratégia de decomposição do domínio permite a utilização de diferentes aproximações de diferenças finitas para submalhas distintas.

No entanto, a maior desvantagem deste algoritmo reside no facto da técnica de divisão do domínio resultar na manipulação de estruturas de dados bastante complexas para as zonas de intercepção de malhas[94]. Este algoritmo é posteriormente aperfeiçoado através de múltiplas contribuições de que se destaca a correspondente a Philip Colella (Berger e Colella, 1989[137]).

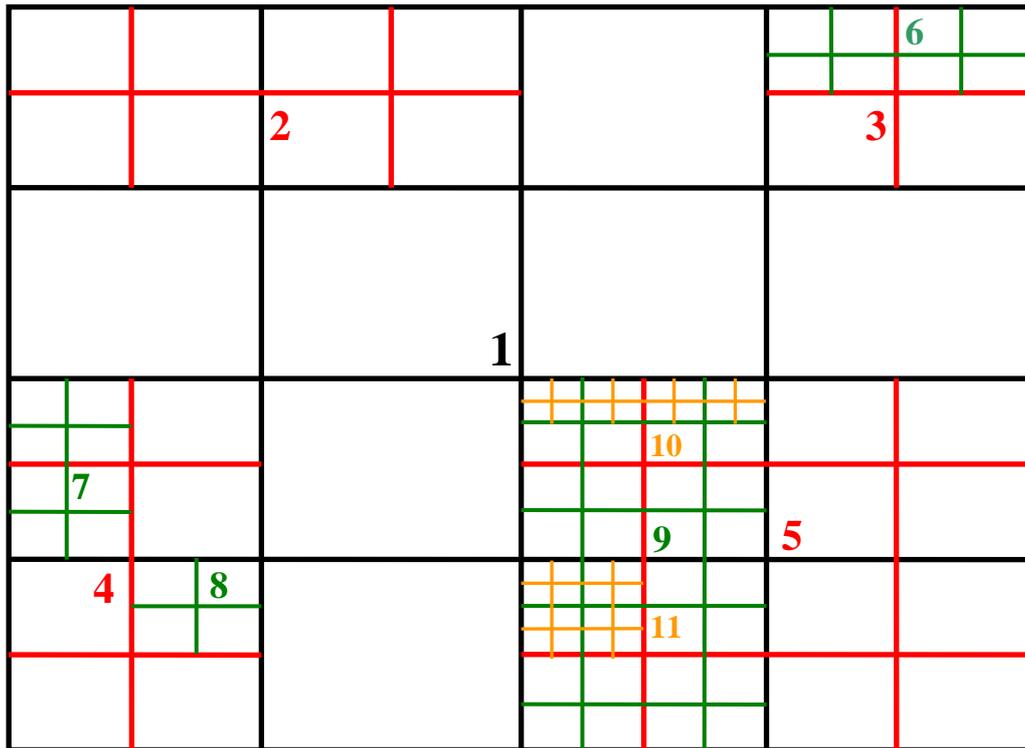


Figura 2.24 Exemplo de hierarquização de malhas de diversos níveis no contexto dos procedimentos AMR.

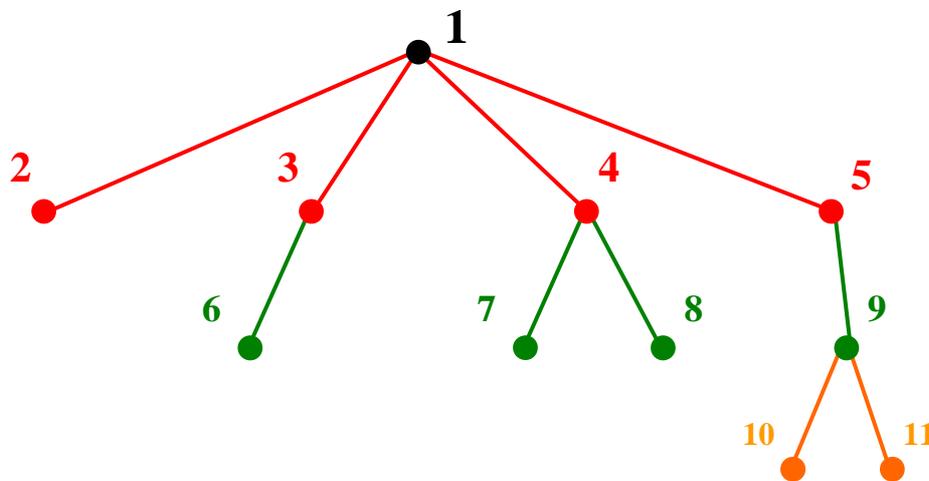


Figura 2.25 Relação hierárquica em árvore das diferentes malhas de diversos níveis apresentadas no exemplo da Figura 2.24.

Assim, existem numerosas versões de procedimentos ditos AMR (e.g., [138-143]), aplicáveis a problemas bi- e tridimensionais de aplicação abrangente que recorrem a diferentes abordagens para a implementação dos diferentes passos do algoritmo, como estratégias de avaliação do erro de truncatura, geometria local da malha (e.g. triangular, rectangular, poligonal em casos 2D) e técnicas de refinamento, conjugação entre as diversas malhas de níveis diferentes e o procedimento de integração temporal, etc. Por outro lado, a estrutura genérica do método AMR possibilita a sua associação a estratégias dinâmicas de movimentação das submalhas geradas (e.g.,

[144-145]), ou seja, uma combinação entre redefinições de malha estáticas e integrações temporais dinâmicas incorporadas numa estratégia geral do tipo MOL.

Brito, 1998[94] apresenta uma revisão relativamente desenvolvida de alguns dos métodos AMR (estáticos ou dinâmicos) propostos até meados da década de 1990.

2.6.4 MÉTODOS DINÂMICOS – MMPDE'S

Outra classe popular de métodos, que como se verificou na secção anterior pode igualmente ser combinada com processos de redefinição de malha adaptativa comumente associados a métodos estáticos, é a dos denominados métodos dinâmicos ou de r-refinement. Nestes casos o procedimento de integração temporal é realizado através da transformação do sistema coordenado inicial espacio-temporal num sistema de variáveis dinâmicas em que a movimentação contínua nodal é representada por equações adicionais deduzidas por um conjunto vasto de estratégias alternativas. Brito, 1998[94] apresenta uma revisão razoavelmente extensa deste conjunto de métodos, enquanto que uma lista de referências importantes compilada por Tao Tang pode ser encontrada em [146].

Como referido anteriormente, o objectivo essencial dos métodos dinâmicos consiste na suavização da solução no espaço e/ou no tempo. Tal implica a definição de trajectórias nodais no domínio espacio-temporal computacional que possibilitem uma minimização da variação da solução no sistema coordenado original. Este propósito pode ser alcançado através do recurso a estratégias diversas, nomeadamente de optimização ou de equidistribuição.

Um exemplo para um algoritmo que implica uma optimização de uma quantidade dependente da solução é baseado na aplicação de equações deduzidas por Petzold, 1987[103], que consistem numa generalização do esquema desenvolvido por Hyman, 1983[102] para modelos explícitos da forma: $u_t = f(u, u_x, u_{xx})$, para modelos que não dependam explicitamente de f , ou seja, equações diferenciais implícitas da forma:

$$F(u_t, u, u_x, u_{xx}) = 0. \quad (2.88)$$

Considerando $u_{\bar{t}}$ como a derivada da solução em relação ao tempo num nodo pertencente a uma malha fixa x_j , a transformação das variáveis para o sistema móvel é dada pela equação 2.87:

$$\dot{u} = u_{\bar{t}} + u_x \dot{x}. \quad (2.87)$$

Efectuando-se a minimização da taxa de variação no tempo de u e x :

$$\min_{\dot{x}} [\|\dot{u}\|_2^2 + \alpha \|\dot{x}\|_2^2] = \min_{\dot{x}} [\Sigma \dot{u}^2 + \alpha \dot{x}^2] = \min_{\dot{x}} [(u_{\bar{t}} + u_x \dot{x})^2 + \alpha \dot{x}^2], \quad (2.89)$$

obtém-se, por resolução da equação quadrática em \dot{x} , o mínimo para cada ponto da malha, pela expressão:

$$(u_{\bar{t}} + u_x \dot{x}) u_x + \alpha \dot{x} = 0, \quad (2.90)$$

que através de 2.87 pode ser escrita da forma:

$$\alpha \dot{x} + \dot{u} u_x = 0. \quad (2.91)$$

A equação 2.91 consiste na equação diferencial de movimentação nodal, no seu formato implícito.

Uma característica típica dos métodos dinâmicos relaciona-se com o facto da sua viabilidade depender frequentemente da introdução de acções de controlo da movimentação nodal, de modo a evitar problemas como coalescência ou cruzamento de nodos que comprometam a sua implementação. Por exemplo, neste caso específico, o problema é suavizado pela adição de uma função de penalidade à expressão de minimização considerada anteriormente (vd. equação 2.89), que possibilita que nodos vizinhos se movimentem com velocidades semelhantes:

$$\min_{\dot{x}_j} \left[\|\dot{u}_j\|_2^2 + \alpha \|\dot{x}_j\|_2^2 + \lambda \left(\left\| \frac{\dot{x}_j - \dot{x}_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \right\|_2^2 + \left\| \frac{\dot{x}_{j+1} - \dot{x}_j}{x_{j+1} - x_j} \right\|_2^2 \right) \right]. \quad (2.92)$$

Desta forma, deduz-se uma equação de movimentação nodal dinâmica, que pode ser apresentada da seguinte forma:

$$\alpha \dot{x}_j + \dot{u}_j u_{x_j} + \lambda \left(\frac{\dot{x}_j - \dot{x}_{j-1}}{(x_j - x_{j-1})^2} - \frac{\dot{x}_{j+1} - \dot{x}_j}{(x_{j+1} - x_j)^2} \right) = 0. \quad (2.93)$$

O efeito da introdução de um termo de penalidade assemelha-se à de um factor extra de difusão ou suavização das velocidades nodais na malha. No entanto, apesar da introdução do termo adicional se revelar bastante eficaz na eliminação da maioria dos cruzamentos de nodos, não garante a sua erradicação total.

Outro exemplo paradigmático consiste na série de trabalhos de W. Huang, Y. Ren e R.D. Russell referentes às denominadas MMPDE's – Moving Mesh Partial Differential Equations. Inspirados pelo trabalho de Ren e Russell, 1992[147], Huang et al., 1994[148-149] apresentam e deduzem vários tipos de PDE's relacionadas com o movimento da malha unidimensional (MMPDE's). Estes trabalhos baseiam-se em equações desenvolvidas a partir do princípio de equidistribuição que são estudadas tanto do ponto de vista teórico como numérico. Ren e Russell, 1992[147] concluem que a equidistribuição implica a resolução de uma PDE no domínio de coordenadas computacionais. Algumas das equações são originalmente deduzidas por Huang et al., 1994[149], enquanto outras relacionam-se com a aplicação de estratégias desenvolvidas por outros autores.

Assim, partindo de uma função monitor $M(x,t)$, o princípio de equidistribuição (EP – Equidistributing Principle) pode ser expresso na forma integral por:

$$\int_0^{x(\xi,t)} M(x,t) dx = \xi \theta(t), \quad (2.94)$$

onde, $\theta(t)$ é definida em White, 1979[150].

Através de diferenciação simples ou dupla da equação 2.94 obtêm-se as duas formas diferenciais do EP:

$$M(x(\xi,t),t) \frac{\partial x(\xi,t)}{\partial \xi} = \theta(t) \quad (2.95)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ M(x(\xi, t), t) \frac{\partial x(\xi, t)}{\partial \xi} \right\} = 0. \quad (2.96)$$

Estas equações que não contêm o termo de velocidade nodal são denominadas quasi-estáticas. Através de manipulação destas equações, Huang et al. 1994[149] deduzem vários tipos de MMPDE's. As equações mais importantes estão resumidas na Tabela 2.2, juntamente com as referências em que cada uma se baseia.

Tabela 2.2 Resumo de MMPDE's unidimensionais seleccionadas[149].

MMPDE	Equação	Ref. ^a
1	$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial \xi} \dot{x} \right) = - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[149]
2	$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial \xi} \dot{x} \right) = - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial M}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[149]
3	$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (M \dot{x}) = - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[149]
4	$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} \right) = - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[149]
5	$\dot{x} = - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[151]
6	$\frac{\partial^2 \dot{x}}{\partial \xi^2} = - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[152],[153]
7	$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \dot{x}}{\partial \xi} / \frac{\partial x}{\partial \xi} = - \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)$	[154]

As equações consideradas não só forçam a equidistribuição da malha $x(\xi, t)$ como impedem o cruzamento nodal. Assim, a resolução numérica é efectuada por intermédio de diferenças centrais na malha uniforme (ξ, t) , e consequente aplicação do MOL.

Assim, os próprios autores, juntamente com outros colaboradores[155-166] aperfeiçoaram este tipo de estratégias e desenvolveram o estudo de MMPDE's adicionais, assim como procedimentos de implementação adequada deste tipo de problemas.

Para além disso, é possível encontrar na literatura da especialidade muitas outras contribuições versando o tema específico da idealização e implementação de métodos adaptativos de r-refinement a problemas de aplicações variadas definidos sobre domínios de dimensão arbitrária (e.g., [125,167-175]).

2.6.5 MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS MÓVEIS (MFEM)

O objectivo desta secção consiste na apresentação de uma panorâmica geral sobre o Método de Elementos Finitos Móveis (MFEM – Moving Finite Element Method), que rigorosamente é passível de se enquadrado na classe do métodos adaptativos dinâmicos. No entanto, importa salientar particularmente este método dada a

importância que entretanto assumiu neste campo específico de pesquisa. Não se pretende aqui efectuar uma descrição muito pormenorizada das diferentes formulações que têm sido apresentadas ao longo do tempo, referentes a este método. Este trabalho já foi anteriormente realizado através da revisão bibliográfica apresentada por variados autores, e.g. Duarte, 1994[115].

A formulação inicial do MFEM foi proposta por K. Miller e R.N. Miller em 1981[104-105]. Originalmente, o processo foi desenvolvido para a resolução de PDE's evolutivas unidimensionais, sujeitas a condições fronteira de Dirichlet. Para tal, considera-se a PDE,

$$u_t = Lu, \quad (2.97)$$

válida no domínio fixo $a \leq x \leq b$, caracterizada por condições fronteira fixas de Dirichlet, sendo L um operador espacial não linear.

A técnica de discretização de elementos finitos aproxima a solução em cada elemento através da expressão:

$$U(x, t) = \sum_{j=1}^{n+1} U_j \alpha_j(x, \mathbf{s}(t)), \quad (2.98)$$

onde:

$\mathbf{U} = [U_0, U_1, \dots, U_{n+1}]$ – vector da solução nos nodos;

$\mathbf{s} = [s_0, s_1, \dots, s_{n+1}]$ – vector das posições nodais;

α_j – funções base elementares implicitamente dependentes do tempo através das posições nodais;

x – posição espacial.

Por derivação de 2.98 em ordem ao tempo obtém-se:

$$U_t(x, t) = \sum_{j=1}^{n+1} \dot{U}_j(t) \alpha_j(x, \mathbf{s}(t)) + \dot{s}_j(t) \beta_j(x, \mathbf{U}(t), \mathbf{s}(t)), \quad (2.99)$$

em que β_j são igualmente funções base, definidas por:

$$\beta_j(x, \mathbf{U}(t), \mathbf{s}(t)) = \frac{\partial U}{\partial s_j}. \quad (2.100)$$

Deste modo, torna-se necessário para a implementação deste método, recorrer a uma estratégia de aproximação, de forma a avaliar os valores de β_j . Inicialmente, o método formulado baseava-se em aproximações lineares piecewise (linhas rectas poligonais) pelo que:

$$\beta_j = -U_x \alpha_j \quad (2.101)$$

Assim, as funções α_j e β_j são definidas por:

$$\alpha_j = \begin{cases} \frac{x - s_{j-1}}{s_j - s_{j-1}}, & s_{j-1} \leq x \leq s_j \\ \frac{s_{j+1} - x}{s_{j+1} - s_j}, & s_j \leq x \leq s_{j+1} \\ 0, & -\infty < x < s_{j-1} \quad e \quad s_{j+1} < x < +\infty \end{cases} \quad (2.102)$$

e

$$\beta_j = \begin{cases} -m_j \frac{x - s_{j-1}}{s_j - s_{j-1}}, & s_{j-1} \leq x \leq s_j \\ -m_{j+1} \frac{s_{j+1} - x}{s_{j+1} - s_j}, & s_j \leq x \leq s_{j+1} \\ 0, & -\infty < x < s_{j-1} \quad e \quad s_{j+1} < x < +\infty \end{cases}, \quad (2.103)$$

onde, $m_j = \frac{U_j - U_{j-1}}{s_j - s_{j-1}}$ corresponde ao declive da solução no elemento finito j estimado por diferenças finitas.

A solução da PDE (\mathbf{U}) e a nova malha (\mathbf{s}) são determinadas por minimização da norma quadrada L_2 dos resíduos da aproximação à solução em todo o domínio, em ordem das derivadas temporais da solução nos nodos e das velocidades nodais: $\|U_t - LU\|_{L_2}^2$.

A substituição das derivadas pelas correspondentes aproximações resulta num sistema de ODE's do tipo:

$$\mathbf{A}(\mathbf{y})\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}), \quad (2.104)$$

em que:

$$\mathbf{y} = [U_1, s_1, \dots, U_n, s_n]^T;$$

\mathbf{A} – matriz de massas quadrada e tridiagonal, constituída por blocos $\mathbf{A}_{k,k}$ de dimensões 2×2 , que mantêm uma estrutura constante no tempo.

É possível que, em determinadas circunstâncias, o determinante de qualquer bloco $\mathbf{A}_{k,k}$ se torne nulo, tornando o sistema 2.104 indeterminado e conseqüentemente, de resolução impossível. As condições que provocam a degenerescência do sistema de ODE's podem ser de dois tipos distintos:

- Choque nodal \Rightarrow consiste na coalescência de um nodo com o seu precedente.
- Paralelismo elementar \Rightarrow definido pela colinearidade das aproximações da solução em dois elementos consecutivos.

Cada uma destas singularidades dá origem a equações linearmente dependentes que tornam o sistema 2.104 irresolúvel. De forma a ultrapassar estes problemas, Miller, 1981[105] recorre à introdução de funções de penalização na função objectivo de forma a adicionar forças de viscosidade internodal que regularizem o movimento da malha.

Posteriormente, muitos outros investigadores apresentaram numerosos trabalhos baseados no método original (e.g., [115,176-177]), que possibilitam a sua aplicação a uma gama cada vez mais generalizada de modelos típicos. Assim, desenvolveram-se estratégias alternativas de forma a ultrapassar os problemas encontrados, através da utilização de métodos alternativos para a avaliação da aproximação elementar (e.g., funções quadráticas, cúbicas de Hermite) e para eliminação das singularidades (e.g. supressão nodal, manipulação matricial). Tang[146] apresenta igualmente uma lista de referências bibliográficas importantes referentes a métodos inspirados na estratégia MFEM original.

2.6.6 ESQUEMAS WAVELET

Uma estratégia relativamente mais recente introduzida a partir do final da década de 1980 consiste no aproveitamento das propriedades de funções base designadas por wavelets como instrumentos na aplicação do conceito adaptativo no contexto da resolução numérica de PDE's. As wavelets são uma ferramenta matemática que pode ser usada na extracção de informação a partir de diferentes fontes de dados, incluindo sinais de áudio ou vídeo. Geralmente, a análise completa de dados implica a aplicação de conjuntos de wavelets. Assim, um conjunto de wavelets complementares proporciona a desconstrução dos dados sem gerar omissões ou sobreposições de modo a que o processo seja reversível. Desta forma, estes conjuntos complementares de wavelets revelam-se úteis no desenvolvimento de algoritmos de compressão/descompressão onde seja desejável recuperar a informação original (ou uma aproximação credível) com um mínimo de perdas.

A grande vantagem deste tipo de funções consiste na sua capacidade de representar diferentes regiões situadas no espaço e no tempo através de diversos níveis de resolução. Assim, quando um conjunto de dados sofre uma transformação wavelet, este é decomposto em dois tipos de coeficientes: um representa as características gerais (coeficientes da função de escala) e o outro exprime as características localizadas (coeficientes wavelet). No processo de compressão de dados, os coeficientes wavelet correspondentes a regiões do espaço identificadas como de menor importância na representação global dos dados são parcialmente eliminados. Assim, quando os dados são reconstruídos, mantém-se a alta resolução apenas em regiões relevantes.

A filosofia deste procedimento de compressão (ou simplificação) de dados coincide com o objectivo primordial da aplicação da adaptação no âmbito da solução numérica de PDE's. De facto, a acção do esquema adaptativo promove uma compressão dos dados correspondentes à solução discretizada definida sobre uma estrutura nodal definida sobre um espaço espacial de dimensão arbitrária, de modo a que seja retida a informação relevante (associada à maior actividade localizada da solução) e seja descartada a informação restante classificada como redundante.

Deste modo, observa-se o surgimento de literatura relacionada com o desenvolvimento de métodos de resolução de PDE's baseados em wavelets. Este tipo de métodos podem ser classificados em duas classes distintas[79]: métodos de colocação (e.g., [80,178-182]) e métodos de Galerkin (e.g., [183-187]). Os métodos de Galerkin resolvem o problema no espaço dos coeficientes wavelet e podem ser geralmente considerados como métodos meshless. Por outro lado, os métodos de

colocação obtêm a solução no espaço físico sobre uma malha adaptada. Cada wavelet é associada a um nodo de colocação e o processo de adaptação é estabelecido pela análise da escala de grandeza dos coeficientes wavelet. Assim, em cada tempo de integração, a malha é definida pelo conjunto de nodos que correspondem a coeficientes wavelet cujo valor exceda uma tolerância pré-determinada que controla o grau de precisão pretendida.

A descrição e discussão particular de cada esquema wavelet para integração de PDE's, relacionado com as diversas famílias (ortogonal e biortogonal) de funções wavelet, e as estratégias de análise wavelet disponíveis (como a estratégia multiresolução) não representam os objetivos do presente trabalho. O aprofundamento deste tipo de questões pode ser encontrado em trabalhos como o de Dahmen, 2001[188].

REFERÊNCIAS

1. R. Schneiders, *Mesh Generation & Grid Generation on the Web*; at <http://www-users.informatik.rwth-aachen.de/~roberts/meshgeneration.html> (consulta em 1/02/2010).
2. S. Owen, *Mesh Generation: A Quick Introduction*; at <http://www.andrew.cmu.edu/user/sowen/mintro.html> (consulta em 1/02/2010).
3. J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatherill, eds. (1999) *Handbook of Grid Generation*, CRC Press, Boca Raton.
4. C.W. Gear, R.D. Skeel (1990) "The development of ODE methods: a symbiosis between hardware and numerical analysis", in *A History of Scientific Computing* (S.G. Nash, ed.), ACM Press, pp. 88-105.
5. F.R. Moulton (1930) *Differential Equations*, MacMillan, New York.
6. R.S. Richardson (1967) *Getting Acquainted with Comets*, McGraw-Hill, New York.
7. H.H. Goldstine (1977) *A History of Numerical Analysis from the 16th Through the 19th Century*, Springer-Verlag, New York.
8. http://en.wikipedia.org/wiki/Runge-Kutta_methods (consulta em 1/02/2010).
9. C.D.T. Runge (1895) "Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen", *Math. Ann.*, **46** (2), pp. 167-178.
10. K. Heun (1900) "Neue Methode zur approximativen Integration der Differentialgleichungen einer unabhängigen Veränderlichen", *Zeit. Math. Phys.*, **45**, pp. 23-38.
11. M.W. Kutta (1901) "Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen", *Zeit. Math. Phys.*, **46**, pp. 435-453.
12. F. Bashforth, J.C. Adams (1883) *An Attempt to Test the Theories of Capillary Action*, Cambridge University Press.
13. http://en.wikipedia.org/wiki/Linear_multistep_method (consulta em 1/02/2010).
14. F.R. Moulton (1926) *New Methods in Exterior Ballistics*, University of Chicago Press.
15. R.H. Merson (1957) "An operational method for the study of integration processes", *Proc. Symposium on Data Processing*, Weapons Research Establishment, Salisbury, South Australia.
16. C.F. Curtiss, J.O. Hirschfelder (1952) "Integration of stiff equations", *Proc. US Nat. Acad. Sci.*, **38** (3), pp. 235-243.
17. L.F. Shampine, S. Thompson (2007) "Stiff systems", *Scholarpedia*, **2** (3), pp. 2855; at http://www.scholarpedia.org/article/Stiff_systems.
18. M. Baumgartner, O. Dean, V. Patel, J. Schweitzer, E. Van Beek (2007) "Solving ODEs with Mathematica", in *University of Michigan Chemical Engineering Process Dynamics and Controls*

- Open Textbook*; at http://controls.engin.umich.edu/wiki/index.php/Solving_ODEs_with_Mathematica.
19. C.W. Gear (2007) "Backward differentiation formulas", *Scholarpedia*, **2** (8) pp. 3162; at http://www.scholarpedia.org/article/Backward_differentiation_formulas.
 20. V. Thomée (2001) "From finite differences to finite elements: a short history of numerical analysis of partial differential equations" *J. Comput. Appl. Math.*, **128** (1-2), pp. 1-54.
 21. J. Tinsley Oden (1990) "Historical comments on finite elements", in *A History of Scientific Computing* (S.G. Nash, ed.), ACM Press, pp. 152-166.
 22. R. Courant, K.O. Friedrichs, H. Lewy (1928) "Über die partiellen Differenzgleichungen der Mathematischen Physik", *Math. Ann.*, **100**, pp. 32-74 (tradução inglesa in *IBM J. Res. Develop.* (1967), **11** (2), pp. 215-234).
 23. http://en.wikipedia.org/wiki/Courant-Friedrichs-Lewy_condition (consulta em 1/02/2010).
 24. F. John (1952) "On integration of parabolic equations by difference methods : I. Linear and quasi-linear equations for the infinite interval", *Comm. Pure Appl. Math.*, **5** (2), pp. 155–211.
 25. J. Crank, P. Nicolson (1947) "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of heat-conduction type", *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **43** (1), pp. 50–67.
 26. R. Courant (1943) "Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations", *Bull. Amer. Math. Soc.*, **49** (1), pp. 1-23.
 27. A. Hrennikoff (1941) "Solutions of problems in elasticity by the framework method", *ASME J. Appl. Mech. A*, **8**, pp. 169-175.
 28. K. Schellbach (1851) "Probleme der Variationsrechnung", *J. Reine Angew. Math.*, **41**, pp. 293-363.
 29. Lord Rayleigh (1894, 1896) *Theory of Sound*, Vols. I, II, Macmillan, London.
 30. W. Ritz (1908) "Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik", *J. Reine Angew. Math.*, **135**, pp. 1-61.
 31. B.G. Galerkin (1915) "Rods and plates. Series occurring in various questions concerning the elastic equilibrium of rods and plates", *Vestnik Inzh. Tekhn.*, **19**, pp. 897-908.
 32. M.J. Turner, R.W. Clough, H.C. Martin, L. Topp (1956) "Stiffness and deflection analysis of complex structures", *J. Aero. Sci.*, **23** (9), pp. 805-823.
 33. J.H. Argyris (1954) "Energy theorems and structural analysis", *Aircr. Eng.*, **26** (10-11), pp. 347-356; 383-387.
 34. J.H. Argyris (1955) "Energy theorems and structural analysis", *Aircr. Eng.*, **27** (2-4), pp. 42-58; 80-94; 125-134.
 35. R.W. Clough (1960) "The finite element method in plane stress analysis", *Proceedings of Second ASCE Conference on Electronic Computation*, **Vol. 8**, Pittsburg, Pennsylvania, pp. 345-378.
 36. W.G. Strang, G.J. Fix (1973) *An Analysis of The Finite Element Method*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
 37. M.B. Abbott, D.R. Basco (1989) *Computational Fluid Dynamics*, Longman Scientific & Technical, Singapore.
 38. B. Fornberg (1988) "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids", *Math. Comput.*, **51** (184), pp. 699-706.
 39. B. Fornberg (1992) "Fast generation of weights in finite difference formulas", in *Recent Developments in Numerical Methods and Software for ODEs/DAEs/PDEs*, (G.D. Byrne, W.E. Schiesser, eds.), World Scientific, Singapore, pp. 97-124.
 40. R. Heinzl (2007) *Concepts for Scientific Computing*, Section 2.4 – Finite Differences; at <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/heinzl/node27.html> (consulta em 1/02/2010).

41. http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_element_method_in_structural_mechanics (consulta em 1/02/2010).
42. J. van Kan, A. Segal, F. Vermolen (2005) *Numerical Methods in Scientific Computing*, VSSD, Delft.
43. R. Heinzl (2007) *Concepts for Scientific Computing*, Section 2.3 – Finite Elements; at <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/heinzl/node26.html> (consulta em 1/02/2010).
44. http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_element_method (consulta em 1/02/2010).
45. R. Heinzl (2007) *Concepts for Scientific Computing*, Section 2.2 – Finite Volumes; at <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/heinzl/node25.html> (consulta em 1/02/2010).
46. M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho (2003) “A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection”, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **41** (1), pp. 47-75.
47. http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_volume_method (consulta em 1/02/2010).
48. P. Cruz, J.C. Santos, F.D. Magalhães, A. Mendes (2005) “Simulation of separation processes using a finite volume method”, *Comput. Chem. Eng.*, **30** (1), pp. 83-98.
49. http://en.wikipedia.org/wiki/Shock_capturing_methods (consulta em 1/02/2010).
50. B.A. Finlayson (1992) *Numerical Methods for Problems with Moving Fronts*, Ravenna Park Publishing Inc., Seattle.
51. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) “Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method”, *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
52. R. Courant, E. Isaacson, M. Rees (1952) “The solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences”, *Commun. Pure Appl. Math.*, **5** (3), pp. 243-255.
53. W. Shyy (1985) “A study of finite difference approximations to steady-state, convection dominated flow problems”, *J. Comput. Phys.*, **57** (3), pp. 415-438.
54. B.P. Leonard (1979) “A stable and accurate convective modelling procedure based in quadratic upstream interpolation”, *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, **19** (1), pp. 59-98.
55. P.H. Gaskell, A.K.C. Lau (1988) “Curvature compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm”, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **8** (6), pp. 617-641.
56. A. Harten (1983) “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, *J. Comput. Phys.*, **49** (3), pp. 357-393.
57. A. Harten (1997) “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws”, *J. Comput. Phys.*, **135** (2), pp. 260-278.
58. M.S. Darwish, F. Moukalled (1994) “Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes”, *Numer. Heat Transfer, Part B*, **26** (1), pp. 79-96.
59. B.P. Leonard (1988) “Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities”, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **8** (10), pp. 1291-1318.
60. A. Harten, B. Engquist, S. Osher, S.R. Chakravarthy (1987) “Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III”, *J. Comput. Phys.*, **71** (2), pp. 231-303.
61. X.D. Liu, S. Osher, T. Chan (1994) “Weighted essentially non-oscillatory schemes”, *J. Comput. Phys.* **115** (1), pp. 200-212.
62. J.P. Boris, D.L. Book (1976) “Flux-Corrected transport III. Minimal error FCT algorithms”, *J. Comput. Phys.*, **20** (4), pp. 397-431.
63. B. van Leer (1979) “Towards the ultimate conservative difference scheme, V. A second order sequel to Godunov's method”, *J. Comput. Phys.*, **32** (1), pp. 101-136.
64. A. Kurganov, E. Tadmor (2000) “New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations”, *J. Comput. Phys.*, **160** (1), pp. 241-282.

65. P. Colella, P. Woodward (1984) "The piecewise parabolic method (PPM) for gasdynamical simulations", *J. Comput. Phys.*, **54** (1), pp. 174-201.
66. B. Song, G.R. Liu, K.Y. Lam, R.S. Anamo (2000) "On a higher-order bounded discretization scheme", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **32** (7), pp. 881-897.
67. B.P. Leonard (1991) "The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection", *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, **88** (1), pp. 17-74.
68. P.K. Sweby (1984) "High-resolution schemes using flux-limiters for hyperbolic conservation laws", *SIAM J. Numer. Anal.*, **21** (5), pp. 995-1011.
69. http://en.wikipedia.org/wiki/Flux_limiters (consulta em 1/02/2010).
70. <http://en.wikipedia.org/wiki/Wavelet> (consulta em 1/02/2010).
71. A. Graps (2004) *An introduction to wavelets*, Section 1 – Overview; at http://www.amara.com/IEEEwave/IW_overview.html (consulta em 1/02/2010).
72. A. Graps (1995) "An introduction to wavelets", *IEEE Comput. Sci. Eng.*, **2** (2), pp. 50-67.
73. A. Haar (1910) "Zur theorie der orthogonalen funktionensysteme", *Math. Ann.*, **69** (3), pp. 331-371.
74. P. Goupillaud, A. Grossman, J. Morlet (1984) "Cycle-octave and related transforms in seismic signal analysis", *Geoexploration*, **23** (1), pp. 85-102.
75. I. Daubechies (1988) "Orthonormal bases of compactly supported wavelets", *Comm. Pure Appl. Math.*, **41**, (7), pp. 906-996.
76. S. Mallat (1989) "Multiresolution approximation and wavelet orthogonal bases of $L^2(R)$ ", *Trans. Am. Math. Soc.*, **315** (1), pp. 69-87.
77. W.J. Phillips (2003) *Wavelets and Filter Banks Course Notes*, Section 3 – Time-Scale Analysis; at <http://www.engmath.dal.ca/courses/engm6610/notes/node4.html> (consulta em 1/02/2010).
78. P.J.R. Cruz (2003) *Simulação e Optimização de Processos Cíclicos de Adsorção*, PhD Thesis, DEQ-FEUP, Porto, Portugal.
79. P. Cruz, A. Mendes, F.D. Magalhães (2002) "Wavelet-based adaptive grid method for the resolution of nonlinear PDEs", *AIChE J.*, **48** (4), pp. 774-785.
80. P. Cruz, A. Mendes, F.D. Magalhães (2001) "Using wavelets for solving PDEs: an adaptive collocation method", *Chem. Eng. Sci.*, **56** (10), pp. 3305-3309.
81. I. Daubechies (1992) *Ten Lectures on Wavelets*, SIAM, Philadelphia.
82. G.R. Liu, M.B. Liu (2003) *Smoothed Particle Hydrodynamics – a meshfree particle method*, World Scientific Publishing, Singapore.
83. S.A. Viana, D. Rodger, H.C. Lai (unknown) *Overview of Meshless Methods*; at <http://www.compumag.org/j/site/images/stories/newsletter/ICS-07-14-2-Rodger.pdf> (consulta em 1/02/2010).
84. R.A. Gingold, J.J. Monaghan (1977) "Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars" *Mon. Not. R. Astr. Soc.*, **181**, pp. 375-389.
85. B.L. Lucy (1977) "A numerical approach to testing the fission hypothesis" *Astron. J.*, **82** (12), pp. 1013-1024.
86. E.J. Kansa (1990) "Multiquadrics - A scattered data approximation scheme with applications to Computational Fluid-Dynamics - I", *Comput. Math. Appl.*, **19** (8-9), pp. 127-145.
87. E.J. Kansa (1990) "Multiquadrics - A scattered data approximation scheme with applications to Computational Fluid-Dynamics - II", *Comput. Math. Appl.*, **19** (8-9), pp. 147-161.
88. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.

89. R. Chen, Z. Wu (2005) "Solving hyperbolic conservation laws using multiquadric quasi-interpolation", *Numer. Meth. Part. Diff. Eq.*, **22** (4), pp. 776-796.
90. W.E. Schiesser (1991) *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*, Academic Press, San Diego.
91. A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W. Schiesser (2001) "Chapter 1 – Introduction", in *Adaptive Method of Lines*, (A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W.E. Schiesser, eds.), Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, pp. 1-37.
92. D.E. Seborg, T.F. Edgar, D.A. Mellichamp (1989) *Process Dynamics and Control*, John Wiley & Sons, Singapore.
93. H.A. Dwyer, M.D. Smooke, R.J. Kee (1982) "Adaptive gridding for finite difference solutions to heat and mass transfer problems", in *Numerical Grid Generation*, (J.F. Thompson, ed.) North-Holland, Amsterdam, pp. 339-356.
94. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
95. D.F. Hawken, J.J. Gottlieb, J.S. Hansen (1991) "Review of some adaptive node-movement techniques in finite-element and finite-difference solutions of partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **95** (2), pp. 254-302.
96. F.J. Alexander, A.L. Garcia, D.M. Tartakovsky (2002) "Algorithm refinement for stochastic partial differential equations: I. Linear diffusion", *J. Comput. Phys.*, **182** (1), pp. 47-66.
97. F.J. Alexander, A.L. Garcia, D.M. Tartakovsky (2002) "Algorithm refinement for stochastic partial differential equations: II. Correlated systems", *J. Comput. Phys.*, **207** (2), pp. 769-787.
98. J.B. Bell, J. Foo, A.L. Garcia (2007) "Algorithm refinement for the stochastic Burgers' equation", *J. Comput. Phys.*, **223** (1), pp. 451-468.
99. S.A. Williams, J.B. Bell, A.L. Garcia (2008) "Algorithm refinement for fluctuating hydrodynamics", *Multiscale Model. Simul.*, **6** (4), pp. 1256-1280.
100. B.M. Herbst (1982) *Moving Finite Element Methods for the Solution of Evolution Equations*, PhD Thesis, University of the Orange Free State.
101. A.B. White, Jr. (1982) "On the numerical solution of initial/boundary-value problems in one space dimension", *SIAM J. Numer. Anal.*, **19** (4), pp. 683-697.
102. J.M. Hyman (1983) "Adaptive moving mesh methods for partial differential equations", in *Advances in Reactor Computations*, American Nuclear Society Press, pp. 24-43.
103. L.R. Petzold (1987) "Observations on an adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **3** (4), pp. 347-360.
104. K. Miller, R.N. Miller (1981) "Moving finite elements I", *SIAM J. Numer. Anal.*, **18** (6), pp. 1019-1032.
105. K. Miller (1981) "Moving finite elements II", *SIAM J. Numer. Anal.*, **18** (6), pp. 1033-1057.
106. R.J. Gelinas, S.K. Doss, K. Miller (1981) "The moving finite element method: applications to general partial differential equations with multiple large gradients", *J. Comput. Phys.*, **40** (1), pp. 202-249.
107. M.J. Berger (1982) *Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations*, PhD thesis, Computer Science Dept., Stanford University.
108. J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin (1982) "Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations – a review", *J. Comput. Phys.*, **47** (1), pp. 1-108.
109. J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin (1985) *Numerical Grid Generation*, North-Holland, New York.

110. J.F. Thompson (1984) "Grid generation techniques in computational fluid dynamics", *AIAA J.*, **22** (11), pp. 1505-1523.
111. E. Turkel (1984) "Progress in computational physics", *Comput. Fluids*, **11** (2), pp. 121-144.
112. D.A. Anderson (1983) "Adaptive grid methods for partial differential equations", in *Advances in Grid Generation*, (K.N. Ghia, U. Ghia, eds.), ASME, New York, pp. 1-15.
113. J.F. Thompson (1985) "A survey of dynamically-adaptive grids in the numerical solution of partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **1** (1), pp. 3-27.
114. P.R. Eiseman (1987) "Adaptive grid generation", *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **64** (1-3), pp. 321-376.
115. B.P.M. Duarte (1994) *Método dos Elementos Finitos Móveis Aplicado à Resolução de Modelos de Frente de Reacção*, PhD Thesis, FCTUC, Coimbra, Portugal.
116. P.M.P. Brito, A.A.T.G. Portugal (1998) "Application of adaptive methods based on finite difference discretizations in the simulation of a tubular reactor system", in *ACOMEN98 - International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering*, Ghent, Belgium, 2-4 Sept., pp. 697-704.
117. P.M.P. Brito, A.A.T.G. Portugal (1998) "Application of adaptive methods based on finite difference discretizations to systems of PDAEs", in *NMDE98 - 2nd Meeting on Numerical Methods for Differential Equations*, Coimbra, Portugal, 25-27 Feb., pp. 410-419.
118. P. Brito, A. Portugal (2010) "Adaptive collocation methods for the solution of partial differential equations", in *International Conference on Systems, Computing Sciences and Software Engineering (SCSS 09)*, in *International Joint Conferences on Computer, Information, and Systems Sciences, and Engineering (CISSE 2009) – Vol. 2: Innovations in Computing Sciences and Software Engineering*, (T. Sobh, K. Elleithy, eds.), Springer – aguarda publicação.
119. P. Brito, L. Durães, J. Campos, A. Portugal (2007) "Simulation of Fe₂O₃/Al combustion: sensitivity analysis", *Chem. Eng. Sci.*, **62** (18-20), pp. 5078-5083.
120. L. Durães, P. Brito, J. Campos, A. Portugal (2006) "Modelling and simulation of Fe₂O₃/aluminum thermite combustion: experimental validation", in *16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering – ESCAPE-16 & PSE-2006* (W. Marquardt, C. Pantelides, eds.), *Computer Aided Chemical Engineering*, **21A**, Elsevier, pp. 365-370.
121. P. Brito, L. Durães, J. Campos, A. Portugal (2005) "Modelling and simulation of Fe₂O₃/aluminum thermite combustion", in *Chempor'2005 - 9th International Chemical Engineering Conference*, Coimbra, Portugal, 21-23 Sept., pp. 157-158 & CD-ROM (6 pp.).
122. P. Brito, L.M. Gando-Ferreira, A. Portugal (2009) "Simulation of membrane separations using a modified Maxwell-Stefan model", *Chem. Prod. Process Model.*, **4** (4), Article 4, 12 pp.; disponível em <http://www.bepress.com/cppm/vol4/iss4/4>.
123. P. Brito, L.M. Ferreira, A. Portugal, M. Blox, P. Kerkhof (2004) "Modelização de separações por membrana através de métodos de refinamento de malha", in *Congresso de Métodos Computacionais em Engenharia (VIII Congresso Nacional de Mecânica Aplicada e Computacional e VI Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería)*, Lisboa, Portugal, 31 Maio - 2 Junho, pp. 473 & CD-ROM (15 pp.).
124. L.M. Ferreira, P. Brito, A. Portugal, M. Blox, P. Kerkhof (2003) "A simulation study on the transport phenomena in ultrafiltration", in *Workshop on Modelling and Simulation in Chemical Engineering*, Coimbra, Portugal, 30 June - 4 July, 8 pp.
125. R.M. Furzeland, J.G. Verwer, P.A. Zegeling (1990) "A numerical study of three-moving grid methods for one-dimensional partial differential equations which are based on the method of lines", *J. Comput. Phys.*, **89** (2), pp. 349-388.
126. A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W.E. Schiesser (eds.) (2001) *Adaptive Method of Lines*, Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton.

127. P. Saucez, A. Vande Wouwer, W.E. Schiesser, P. Zegeling (2004) "Method of lines study of nonlinear dispersive waves" *J. Comput. Appl. Math.*, **168** (1-2), pp. 413-423.
128. P. Saucez, A. VandeWouwer, P.A. Zegeling (2005) "Adaptive method of lines solutions for the extended fifth-order Korteweg-de Vries equation" *J. Comput. Appl. Math.*, **183** (2), pp. 343-357.
129. A. VandeWouwer, P. Saucez, W.E. Schiesser, S. Thompson (2005) "A MATLAB implementation of upwind finite differences and adaptive grids in the method of lines" *J. Comput. Appl. Math.*, **183** (2), pp. 245-258.
130. J.R. Cash (2005) "Efficient time integrators in the numerical method of lines", *J. Comput. Appl. Math.*, **183** (2), pp. 259-274.
131. J. Lang (2005) "Adaptive computation for boundary control of radiative heat transfer in glass" *J. Comput. Appl. Math.*, **183** (2), pp. 312-326.
132. R. Wang, P. Keast, P. Muir (2004) "A comparison of adaptive software for 1D parabolic PDEs" *J. Comput. Appl. Math.*, **169** (1), pp. 127-150.
133. U. Nowak (1996) "A fully adaptive MOL-treatment of parabolic 1-D problems with extrapolation techniques", *Appl. Numer. Math.*, **20** (1-2), pp. 129-141.
134. M. Häfele, A. Kienle,, M. Boll, C.-U. Schmidt, M. Schwibach (2005) "Dynamic simulation of a tubular reactor for the production of low-density polyethylene using adaptive method of lines" *J. Comput. Appl. Math.*, **183** (2), pp. 288-300.
135. M.J. Berger, J. Oliger (1984) "Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **53** (3), pp. 484-512.
136. J.M. Hyman, M.J. Naughton (1985) "Static Rezone Methods for Tensor Product Grids", *Large Scale Computations in Fluid Mechanics, in Fifteenth Summer Seminar on Applied Mathematics*, La Jolla, USA, 27 June-8 July 1983, pp. 321-343.
137. M.J. Berger, P. Colella (1989) "Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics", *J. Comput. Phys.*, **82** (1), pp. 64-84.
138. P.J. Coelho, J. Argain (1997) "A local grid refinement technique based upon Richardson extrapolation", *Appl. Math. Model.*, **21** (7), pp. 427-436.
139. P. Colella, M.R. Dorr, D.D. Wake (1999) "Numerical solution of plasma fluid equations using locally refined grids", *J. Comput. Phys.*, **152** (2), pp. 550-583.
140. P. Colella, J. Bell, N. Keen, T. Ligocki, M. Lijewski, B. van Straalen (2007) "Performance and scaling of locally-structured grid methods for partial differential equations", *J. Phys. Conf. Ser.*, **78** (1), pp. 1-13.
141. W.F. Mitchell, E. Tiesinga (2005) "Adaptive grid refinement for a model of two confined and interacting atoms", *Appl. Numer. Math.*, **52** (2-3), pp. 235-250.
142. R.A. Trompert, J.G. Verwer (1991) "A static-regridding method for two-dimensional parabolic partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **8** (1), pp. 65-90.
143. R.A. Trompert, J.G. Verwer (1993) "Analysis of the implicit Euler local uniform grid refinement method", *SIAM J. Sci. Comput.*, **14** (2), pp. 259-278.
144. W.D. Gropp (1987) "Local uniform mesh refinement with moving grids", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **8** (3), pp. 292-304.
145. D.C. Arney, J. E. Flaherty (1989) "An adaptive local mesh refinement method for time-dependent partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **5** (4), pp. 257-274.
146. <http://lsec.cc.ac.cn/~ttang/MMref/> (consulta em 1/02/2010).
147. Y. Ren, R.D. Russell (1992) "Moving mesh techniques based upon equidistribution, and their stability", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13** (6), pp. 1265-1286.
148. W. Huang, Y. Ren, R.D. Russell (1994) "Moving mesh methods based on moving mesh partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **113** (2), pp. 279-290.

149. W. Huang, Y. Ren, R.D. Russell (1994) "Moving mesh partial differential equations (MMPDEs) based on the equidistribution principle", *SIAM J. Numer. Anal.*, **31** (3), pp. 709-730.
150. A.B. White Jr. (1979) "On selection of equidistributing meshes for two-point boundary-value problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, **16** (3), pp. 472-502.
151. D.A. Anderson (1983) "Application of adaptive grids to transient problems", in *Adaptive Computational Methods for Partial Differential Equations*, (I. Babuska, J. Chandra e J. E. Flaherty, eds.), SIAM, Philadelphia, pp. 208-223.
152. J.B. Greenberg (1985) "A new self-adaptive grid method", *AIAA J.*, **23** (2), pp. 317-320.
153. N.K. Madsen (1984) "Molag: A method of lines adaptive grid interface for nonlinear partial differential equations", in *PDE Software: Modules, Interfaces and Systems*, (B. Engquist, T. Smedsaas, eds.), North-Holland, Amsterdam, pp. 207-224.
154. E.A. Dorfi, L. O' C. Drury (1987) "Simple adaptive grids for 1-D initial value problems", *J. Comput. Phys.*, **69** (1), pp. 175-195.
155. W. Huang, R.D. Russell (1997) "Analysis of moving mesh partial differential equations with spatial smoothing", *SIAM J. Numer. Anal.*, **34** (3), pp. 1106-1126.
156. W. Huang, D.M. Sloan (1994) "A simple adaptive grid method in two dimensions", *SIAM J. Sci. Comput.*, **15** (4), pp. 776-797.
157. W. Huang, R.D. Russell (2001) "Adaptive mesh movement - the MMPDE approach and its applications" *J. Comput. Appl. Math.*, **128** (1-2), pp. 383-398.
158. W. Huang (2001) "Practical aspects of formulation and solution of moving mesh partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **171** (2), pp. 753-775.
159. W. Huang, R. D. Russell (1996) "A moving collocation method for solving time dependent partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **20** (1-2), pp. 101-116.
160. W. Huang, R. D. Russell (1998) "A high dimensional moving mesh strategy", *Appl. Numer. Math.*, **26** (1-2), pp. 63-76.
161. W. Cao, W. Huang, R.D. Russell (2003) "Approaches for generating moving adaptive meshes: location versus velocity", *Appl. Numer. Math.*, **47** (2), pp. 121-138.
162. A.R. Soheili, S. Salahshour (2008) "Moving mesh method with local time step refinement for blow-up problems", *Appl. Math. Comput.*, **195** (1), pp. 76-85.
163. A.R. Soheili, J.M. Stockie (2008) "An adaptive mesh method with variable relaxation time", *Journal of the Franklin Institute*, **344** (5), pp. 757-764.
164. A.R. Soheili, J.M. Stockie (2008) "A moving mesh method with variable mesh relaxation time", *Appl. Numer. Math.*, **58** (3), pp. 249-263.
165. J.M. Stockie, J.A. Mackenzie, R.D. Russell (2001) "A moving mesh method for one-dimensional hyperbolic conservation laws", *SIAM J. Sci. Comput.*, **22** (5), pp. 1791-1813.
166. S. Li, L. Petzold, Y. Ren (1998) "Stability of moving mesh systems of partial differential equations", *SIAM J. Sci. Comput.*, **20** (2), pp. 719-738.
167. S. Li, L. Petzold (1997) "Moving mesh methods with upwinding schemes for time-dependent PDEs", *J. Comput. Phys.*, **131** (2), pp. 368-377.
168. J.M. Hyman, S. Li, L.R. Petzold (2003) "An adaptive moving mesh method with static rezoning for partial differential equations", *Comput. Math. Appl.*, **46** (10), pp. 1511-1524.
169. J. Han, H. Tang (2007) "An adaptive moving mesh method for two-dimensional ideal magnetohydrodynamics", *J. Comput. Phys.*, **220** (2), pp. 791-812.
170. R. Li, T. Tang, P. Zhang (2001) "Moving mesh methods in multiple dimensions based on harmonic maps", *J. Comput. Phys.*, **170** (2), pp. 562-588.

171. P.A. Zegeling, H.P. Kok (2004) "Adaptive moving mesh computations for reaction-diffusion systems" *J. Comput. Appl. Math.*, **168** (1-2), pp. 519-528.
172. J.G. Verwer, J.G. Blom, R.M. Furzeland, P.A. Zegeling (1989) "A moving grid method for one-dimensional PDEs based on the method of lines", in *Adaptive Methods for Partial Differential Equations*, (J.E. Flaherty, P.J. Paslow, M.S. Shephard, J.D. Vasilakis, eds.), SIAM, Philadelphia, pp. 160-175.
173. J.G. Verwer, J.G. Blom, J.M. Sanz-Serna (1989) "An adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **82** (2), pp. 454-486.
174. J.G. Blom, J.M. Sanz-Serna, J.G. Verwer (1988) "On simple moving grid methods for one-dimensional evolutionary partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **74** (1), pp. 191-213.
175. J.G. Blom, P.A. Zegeling (1994) "Algorithm 731: A moving-grid interface for systems of one-dimensional time-dependent partial differential equations", *ACM Trans. Math. Softw.*, **20** (2), pp. 194-214.
176. C.A. Sereno (1989) *Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicações em Engenharia Química*, PhD Thesis, FEUP, Porto.
177. M.C.C.P. Coimbra (2000) *Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicação a Sistemas de Equações de Derivadas Parciais Bidimensionais*, PhD Thesis, FEUP, Porto.
178. S. Bertoluzza (1996) "Adaptive wavelet collocation method for the solution of Burgers equation", *Transp. Theory Stat. Phys.*, **25** (3), pp. 339-352.
179. L. Jameson (1998) "A wavelet-optimized, very high order adaptive grid and order numerical method", *SIAM J. Sci. Comput.*, **19** (6), pp. 1980-2013.
180. M. Holmström (1999) "Solving hyperbolic PDEs using interpolating wavelets", *SIAM J. Sci. Comput.*, **21** (2), pp. 405-420.
181. J. Waldén (1999) "Filter bank methods for hyperbolic PDEs", *SIAM J. Numer. Anal.*, **36** (4), pp. 1183-1233.
182. O.V. Vasilyev, S. Paolucci (1997) "A fast adaptive wavelet collocation algorithm for multidimensional PDEs", *J. Comput. Phys.*, **138** (1), pp. 16-56.
183. G. Beylkin, J. Keiser (1997) "On the adaptive numerical solution of nonlinear partial differential equations in wavelet bases", *J. Comput. Phys.*, **132** (2), pp. 233-259.
184. W. Dahmen, A. Kunoth, K. Urban (1996) "A wavelet Galerkin method for the Stokes equations", *Computing*, **56** (3), pp. 259-301.
185. J. Frölich, K. Schneider (1997) "An adaptive wavelet-vaguelette algorithm for the solution of nonlinear PDEs", *J. Comput. Phys.*, **130** (2), pp. 174-190.
186. J. Restrepo, G. Leaf (1995) "Wavelet-Galerkin discretization of hyperbolic equations", *J. Comput. Phys.*, **122** (1), pp. 118-128.
187. S. Lazaar, P.J. Ponenti, J. Liandrat, Ph. Tchamitchian (1994) "Wavelet algorithms for numerical resolution of partial differential equations", *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, **116** (1-4), pp. 309-314.
188. W. Dahmen (2001) "Wavelet methods for PDEs – some recente developments" *J. Comput. Appl. Math.*, **128** (1-2), pp. 133-185.

3. MÉTODOS ADAPTATIVOS

3.1 INTRODUÇÃO

Nos dois capítulos prévios pretendeu-se apresentar uma panorâmica resumida acerca da importância do conceito de adaptação no contexto da resolução numérica de sistemas algébrico-diferenciais assentes sobre domínios multidimensionais, e consequentemente, da sua aplicabilidade e utilidade no campo mais vasto da modelação e simulação de fenómenos físicos, definidos no âmbito da observação, classificação e compreensão da Realidade Física, actividade a que costumeiramente se atribui a designação de Ciência.

Agora, o objectivo do presente capítulo consiste na descrição dos vários algoritmos numéricos adaptativos desenvolvidos no âmbito da investigação realizada e dos conceitos teóricos específicos que estiveram na sua génese. Assim, nas secções subsequentes realiza-se: uma síntese das estratégias de discretização baseadas directamente em esquemas de diferenças finitas ou em procedimentos de alta resolução com limitação de fluxo; a definição genérica do conjunto de malhas diádicas, e a sua aplicação como elemento estrutural gerador do conceito específico de malha global adaptativa; a apresentação dos algoritmos adaptativos de resolução numérica de PDE's uni- e bidimensionais, nomeadamente a descrição dos critérios de adaptação seleccionados.

3.2 ESQUEMAS DE DIFERENÇAS FINITAS (FDS)

No âmbito do estudo particular realizado, adopta-se uma estratégia de resolução numérica de modelos diferenciais multidimensionais baseada num procedimento MOL Method Of Lines, vd. secção 2.3), em que o passo de discretização espacial da PDE (ou dos sistema de PDE's ou PDAE's) é realizado através de aproximações de diferenças finitas (Finite Difference Schemes – FDS) ou de alta resolução (High Resolution Schemes – HRS)¹.

As estratégias FD caracterizam-se fundamentalmente pela dedução de expressões de aproximação para a estimativa de derivadas (de diferentes ordens) em posições discretas i , através do recurso à manipulação algébrica de expansões de Taylor definidas em torno da posição i construídas para a avaliação da solução em nodos vizinhos a i (e.g. $i+1$, $i-1$). De facto, pode-se afirmar que um método FD é justamente caracterizado pela utilização da aproximação em expansão de Taylor (obviamente truncada a partir de uma ordem especificada) para a estimativa de derivadas sobre domínios discretizados. Obviamente que a ordem específica da aproximação FD escolhida depende da dimensão do stencil de aproximação considerado, e a sua geometria depende da posição relativa dos nodos que constituem esse stencil em relação ao nodo de interesse i .

¹ É importante salientar que FDS e HRS são conceitos não necessariamente exclusivos, já que os HRS podem, na sua essência, basear-se igualmente em procedimentos de diferenças finitas, ou seja, a estratégia HRS pode ser definida em termos de discretizações FD. Assim, convencionou-se que qualquer referência a procedimentos FDS se limita a esquemas puramente de diferenças finitas sem quaisquer outras considerações associadas, nomeadamente referentes ao controlo de instabilidade numérica.

No Anexo A do presente trabalho procede-se à apresentação de estratégias sistematizadas para a estimativa de derivadas de ordem e geometria arbitrária baseadas em malhas unidimensionais (1D) de espaçamento fixo ou variável. No entanto, um método menos oneroso do ponto de vista computacional é apresentado por Fornberg, 1988[1], 1992[2], que desenvolveu algoritmos recursivos para o cálculo do valor dos pesos de aproximação, para o caso de malhas de espaçamento arbitrário

Considere-se como exemplo ilustrativo, aproximações de diferenças finitas de quarta ordem centradas, obtidas através do método recursivo de Fornberg (vd. Anexo A) para a avaliação dos coeficientes correspondentes a uma malha 1D uniformemente espaçada de tamanho Δx . Deste modo, a matriz de diferenciação (5×5) para derivadas de primeira ordem tem a forma concentrada²:

$$\mathbf{u}_x = \frac{1}{24\Delta x} \begin{bmatrix} -50 & 96 & -72 & 32 & -6 \\ -6 & -20 & 36 & -12 & 2 \\ 2 & -16 & 0 & 16 & -2 \\ -2 & 12 & -36 & 20 & 6 \\ 6 & -32 & 72 & -96 & 50 \end{bmatrix} \mathbf{u}, \quad (3.1)$$

onde, as primeira, segunda, quarta e quinta linhas se referem a coeficientes utilizados na estimativa das derivadas nos nodos “especiais”, situados junto às fronteiras, onde a expressão de discretização central genérica com 5 nodos não pode ser utilizada sem se recorrer a fronteiras fictícias definidas por nodos auxiliares externos. Deste modo, a aplicação de uma aproximação baseada em 5 nodos requer um ajuste da geometria do conjunto de discretização que passa a ser determinado pelos 5 nodos mais próximos da posição de interesse, incluindo o próprio nodo associado a essa posição onde a estimativa é avaliada.

Por outro lado, a linha central representa a aproximação nos pontos genéricos situados no interior do domínio onde a fórmula de discretização centrada com 5 nodos pode ser aplicada.

Finalmente, \mathbf{u}_x simboliza o vector da estimativa da primeira derivada da solução u na totalidade da malha, e o vector \mathbf{u} é o stencil de aproximação utilizado para a estimativa da derivada em cada nodo particular. Neste caso, \mathbf{u} representa um vector de dimensão 5, e.g. $[u_0, u_1, u_2, u_3, u_4]^T$ para os nodos 0 e 1, ou $[u_{i-2}, u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+2}]^T$ para um nodo i genérico.

As aproximações para a segunda derivada podem ser calculadas a partir dos valores da primeira derivada (por aplicação da equação 3.1), ou directamente através dos valores da solução u . Neste caso, existem diversas formas de definição da matriz de diferenciação, dependentes do tipo de condições fronteira considerado.

Para o caso de condições fronteira de Dirichlet, deduz-se a seguinte matriz de diferenciação geral para diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha 1D uniforme, utilizando uma estratégia de representação semelhante à descrita para a equação 3.1:

² A forma de representação adoptada nas equações 3.1 e 3.2 não é totalmente correcta do ponto de vista algébrico mas revela-se útil para efeitos de ilustração devido à sua estrutura compacta.

$$\mathbf{u}_{xx} = \frac{1}{12\Delta x^2} \begin{bmatrix} 35 & -104 & 114 & -56 & 11 \\ 11 & -20 & 6 & 4 & -1 \\ -1 & 16 & -30 & 16 & -1 \\ -1 & 4 & 6 & -20 & 11 \\ 11 & -56 & 114 & -104 & 35 \end{bmatrix} \mathbf{u}. \quad (3.2)$$

De forma semelhante, é possível desenvolver fórmulas de aproximação equivalentes de ordem diferente (variando a dimensão do conjunto de nodos de avaliação) e/ou através do enviesamento da geometria da aproximação para montante (diferenças Upwind) ou jusante (diferenças Downwind) do nodo onde se pretende estimar a derivada em relação ao sentido de deslocação do fluxo, para o caso de problemas predominantemente hiperbólicos (vd. Anexo A).

A aplicação de estratégias de discretização FD baseadas em aproximações do tipo 3.1 ou 3.2 no contexto da resolução numérica de PDE's, nomeadamente na implementação do MOL, não constitui problema significativo no caso dos perfis de solução serem suaves. No entanto, a questão torna-se consideravelmente mais complexa para modelos em que ocorra desenvolvimento de perfis abruptos (descontinuidades ou choques) nos perfis de solução.

Considere-se o conjunto de funções rampa apresentado na Figura 3.1, em que a variação de declive localizada na posição $x = 0.1$ varia num intervalo alargado entre 0.5 e 500, para a simulação de transições de suavidade decrescente, desde um perfil de gradiente quase constante até uma quasi-descontinuidade. As funções são diferenciadas através da aplicação do esquema representado pela equação 3.1. Assim, os perfis da aproximação FD das derivadas das funções da Figura 3.1 são exibidos na Figura 3.2. Na Figura 3.3 salientam-se os resultados obtidos em torno da posição de origem das diversas rampas ($x = 0.1$), onde ocorre a transição do declive das funções.

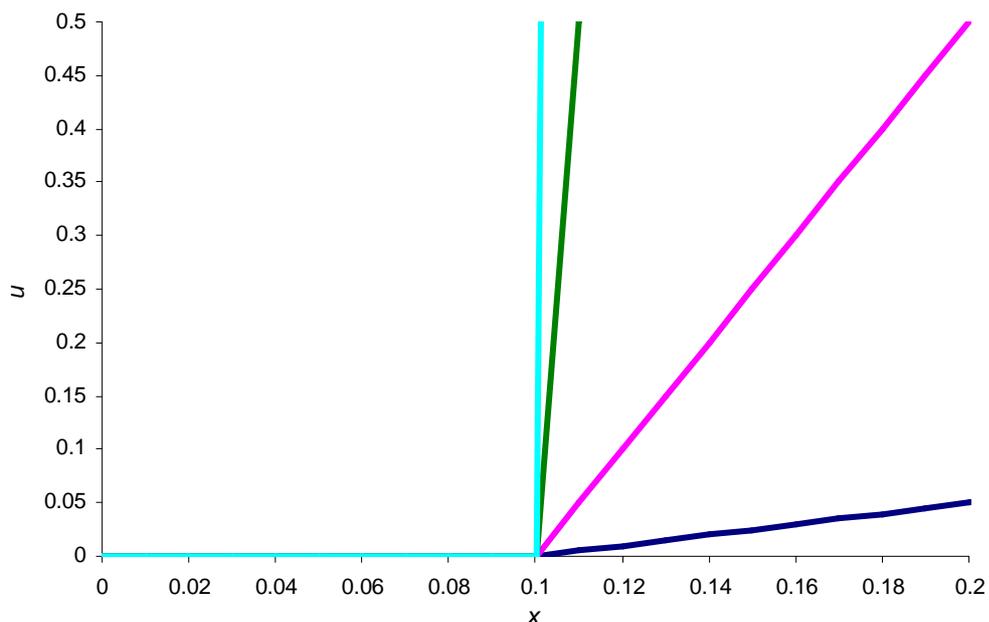


Figura 3.1 Funções rampa com diversos declives com origem na abcissa $x=0.1$.

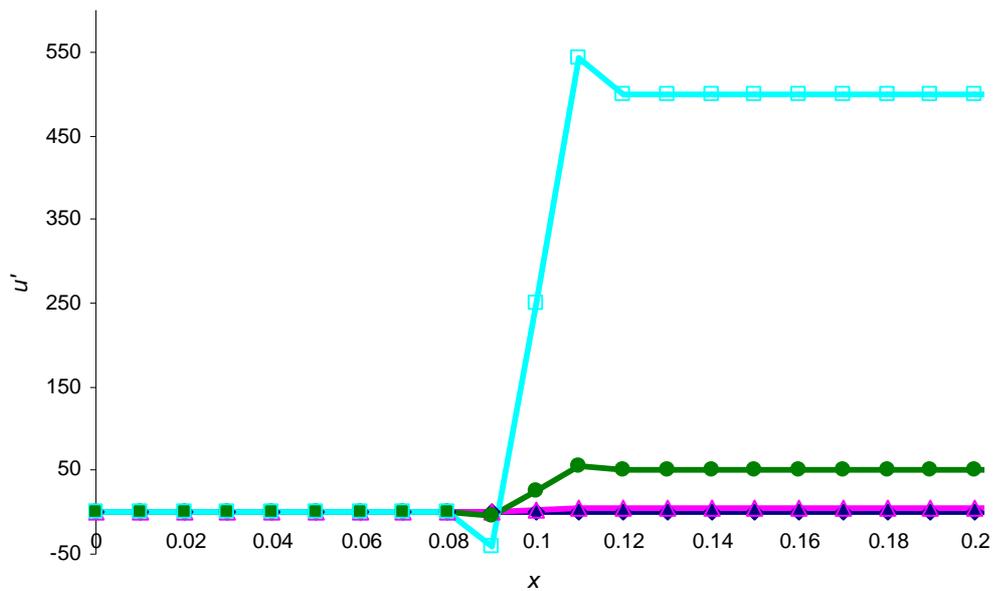


Figura 3.2 Representação da estimativa da primeira derivada das funções rampa da Figura 3.1, através de diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha uniforme com $\Delta x = 0.01$.

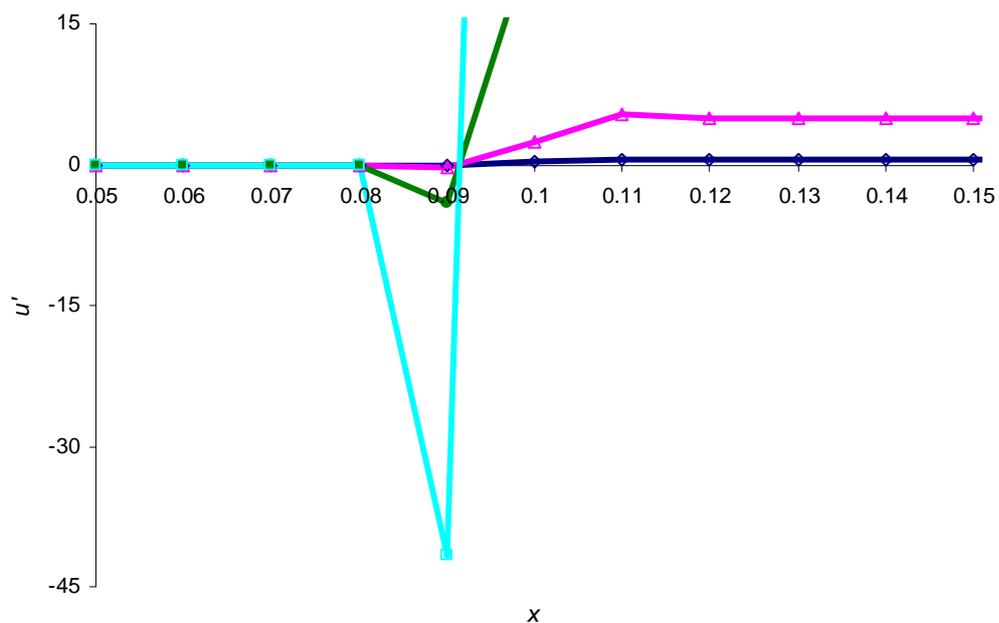


Figura 3.3 Pormenor do gráfico da Figura 3.2, centrado sobre a posição de origem das diversas rampas ($x=0.1$).

A análise das Figuras 3.2 e 3.3 permite concluir que o aumento da intensidade do choque na função induz o desenvolvimento de notória instabilidade nos perfis da primeira derivada estimada por FD, manifestada pela ocorrência de oscilações centradas na abcissa de transição, cuja amplitude é directamente proporcional à variação do declive da função. Deste modo, conclui-se que as aproximações de diferenças finitas per se não possuem propriedades de delimitação, demonstrando propensão para a geração de perfis de derivadas artificialmente oscilatórios que potencialmente poderão introduzir instabilidade em soluções numéricas de equações

diferenciais, principalmente no caso destas serem caracterizadas por gradientes elevados.

A mesma conclusão pode ser retirada através da análise das Figuras 3.4 e 3.5 que representam aproximações do tipo 3.1 da primeira derivada de uma função pulso de largura 0.2, centrada em $x = 0.5$, sobre malhas uniformes com 32 e 64 intervalos, respectivamente.

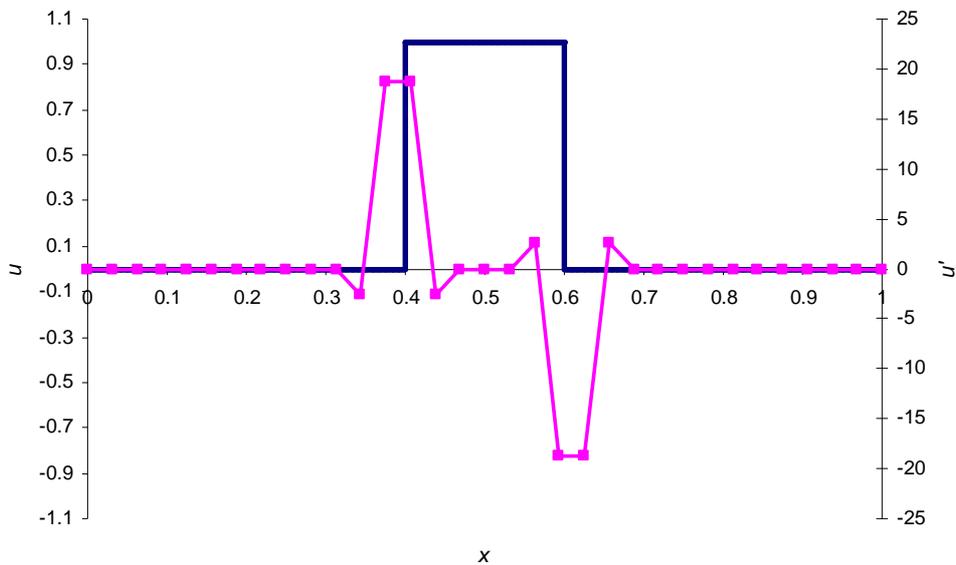


Figura 3.4 Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha uniforme de 32 intervalos.

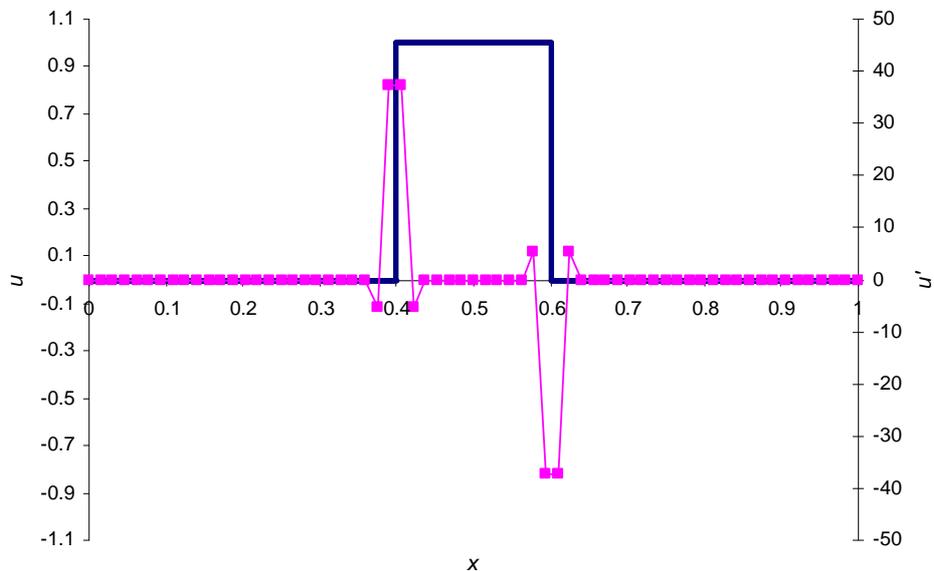


Figura 3.5 Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de diferenças finitas centradas de quarta ordem numa malha uniforme de 64 intervalos.

Constata-se novamente a formação de oscilações nos perfis da estimativa da primeira derivada da função, que se localizam na zona da descontinuidade. Um aumento na

resolução da malha induz um esperado estreitamento das perturbações observadas. Porém, observa-se igualmente um aumento na amplitude das oscilações com a diminuição do tamanho da malha.

Conclusões semelhantes às referidas acima poderiam ser retiradas, se se analisassem aproximações da segunda derivada de tipo equivalente (vd. equação 3.2). No entanto, é óbvio que as perturbações observadas nos perfis aproximados das derivadas obtidos por FDS se localizam nas regiões do domínio caracterizadas por maior actividade da solução. Assim, a detecção destas anomalias poderia definir uma estratégia para localização de perfis abruptos, descontinuidades ou choques na solução.

Deste modo, tira-se partido desta aparente desvantagem das aproximações de diferenças finitas, usando aproximações de FD de diversos tipos como a base do desenvolvimento de um método de adaptação de malha que permita localizar as regiões de maior actividade da solução através da detecção de oscilações, variações bruscas ou inversões em perfis de derivadas de funções aproximadas por FD. Os algoritmos específicos estabelecidos para a execução destas tarefas são apresentados com maior pormenor na secção 3.5.

3.3 ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO (HRS)

Uma forma alternativa de estabelecer aproximações numéricas a termos diferenciais de primeira ordem implica o recurso a técnicas de alta resolução (HRS). Estes esquemas são descritos de uma forma genérica e sucinta no capítulo anterior. Agora, procede-se a uma apresentação dos métodos HRS efectivamente utilizados no decurso do presente trabalho. Deste modo, considerem-se novamente modelos diferenciais unidimensionais evolutivos constituídos por equações de advecção-difusão-reacção da forma geral[3],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial \phi(x,t,u)}{\partial x} + \nu \frac{\partial}{\partial x} \left[D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + G(x,t,u), \quad (3.3)$$

Completado por condições iniciais $u_0(x)$ e condições fronteira de Dirichlet, Neumann ou mistas. O membro evolutivo da esquerda de 3.3 é relacionado com o membro da direita definido por termos advectivos (representativos de fenómenos convectivos de transporte), difusivos e reactivos geracionais (igualmente designados por termos fonte). Um modelo 3.3 fundamentalmente hiperbólico é caracterizado pelo domínio da advecção, ou seja, $\nu \rightarrow 0$. Neste caso, o termo advectivo, determinado pela primeira derivada espacial de uma função de fluxo, ϕ , tem de ser estimado através de esquemas numéricos especializados que tenham em conta um controlo de dispersão numérica significativa, inevitavelmente introduzida pela aproximação numérica, conduzindo ao desenvolvimento de fortes oscilações sem significado físico nos perfis da solução.

A ocorrência de perturbações é evitada se o valor de ϕ se situar dentro dos limites impostos pelos fluxos nos nodos adjacentes, satisfazendo assim o já referido Convection Boundness Criterion (CBC).

No caso presente, opta-se por estimar a derivada de fluxo ϕ no nodo i genérico de uma malha, através da aproximação[3],

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{(\phi_{i+1/2} - \phi_i)(x_i - x_{i-1})^2 + (\phi_i - \phi_{i-1/2})(x_{i+1} - x_i)^2}{(x_i - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})/2}, \quad (3.4)$$

em que os valores desconhecidos do fluxo nas duas faces $\phi_{i+1/2}$ e $\phi_{i-1/2}$ definidas nas respectivas posições intermédias (vd. Figura 2.11; página 76), são interpolados através de um esquema de discretização apropriado.

Recorre-se então a esquemas de alta resolução não lineares de ordem elevada e intrinsecamente delimitados, como o método NVSF (Darwish e Moukalled, 1994[4]), em que os fluxos na face são estimados por,

$$\phi_f = \phi_U + \Phi_f(\phi_D - \phi_U). \quad (3.5)$$

Os valores de fluxo normalizado, Φ , são definidos por,

$$\Phi = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}, \quad (3.6)$$

depois de estabelecidas as posições adjacentes upwind, U, e downwind, D (vd. Figura 2.11; página 76), que dependem do sentido de propagação do fluxo em i .

O fluxo normalizado é calculado na face, através da introdução de limitadores de fluxo adequados, que dependem das variáveis normalizadas:

$$\Phi_p = \frac{\phi_p - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}, \quad (3.7)$$

$$\Theta_p = \frac{x_p - x_U}{x_D - x_U}, \quad (3.8)$$

$$\Theta_f = \frac{x_f - x_U}{x_D - x_U}. \quad (3.9)$$

É possível aplicar uma grande variedade de limitadores de fluxo que assegurem a propriedade de delimitação do fluxo, garantindo o não desenvolvimento de perfis de solução oscilatórios, e conseqüentemente, promovendo a estabilização da aproximação numérica. Os limitadores de fluxo seleccionados para aplicação no presente trabalho são resumidos na Tabela 3.1, para a versão particular e simplificada NVF[5] – Normalised Variable Formulation (para malhas uniformes, em que, $\Theta_p = 1/2$ e $\Theta_f = 3/4$) e o caso mais genérico NVSF[4] – Normalised Variable and Space Formulation (para malhas não uniformes).

Uma forma alternativa de representação algébrica de um limitador de fluxo, mais compacta e totalmente equivalente à exposta na Tabela 3.1[3], é apresentada de seguida, tomando como exemplo, o limitador Super-B (Roe, 1985[12]). Assim, a definição do fluxo normalizado na face, Φ_f , também pode ser estabelecida (para a estratégia Super-B) através de:

$$\Phi_f = \max \left\{ \Phi_p, \min \left[2\Phi_p, 1, \max \left(\frac{\Theta_f}{\Theta_p} \Phi_p, \frac{1 - \Theta_f}{1 - \Theta_p} \Phi_p + \frac{\Theta_f - \Theta_p}{1 - \Theta_p} \right) \right] \right\} \quad (3.10)$$

Tabela 3.1 Definição de limitadores de fluxo para esquemas de alta resolução[6].

	Malha não uniforme (NVSF)	Malha Uniforme (NVF)
MINMOD[7]	$\Phi_f = \begin{cases} \frac{\Theta_f}{\Theta_p} \Phi_p & 0 < \Phi_p \leq \Theta_p \\ \frac{1-\Theta_f}{1-\Theta_p} \Phi_p + \frac{\Theta_f - \Theta_p}{1-\Theta_p} & \Theta_p \leq \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p \geq 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} \frac{3}{2} \Phi_p & 0 < \Phi_p \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \Phi_p + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \leq \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p \geq 1 \end{cases}$
SMART[8]	$\Phi_f = \begin{cases} \frac{\Theta_f(1-3\Theta_p+2\Theta_f)}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p & 0 < \Phi_p \leq \frac{\Theta_p}{3} \\ \frac{\Theta_f(1-\Theta_f)}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p + \frac{\Theta_f(\Theta_f - \Theta_p)}{1-\Theta_p} & \frac{\Theta_p}{3} \leq \Phi_p \leq \frac{\Theta_p}{\Theta_f}(1+\Theta_f - \Theta_p) \\ 1 & \frac{\Theta_p}{\Theta_f}(1+\Theta_f - \Theta_p) < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} 3\Phi_p & 0 < \Phi_p < \frac{1}{6} \\ \frac{3}{4}\Phi_p + \frac{3}{8} & \frac{1}{6} \leq \Phi_p \leq \frac{5}{6} \\ 1 & \frac{5}{6} < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$
CLAM[9]	$\Phi_f = \begin{cases} \frac{\Theta_f - \Theta_p^2}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p - \frac{\Theta_f - \Theta_p}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p^2 & 0 < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p \geq 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} \Phi_p(2 - \Phi_p) & 0 < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p \geq 1 \end{cases}$
WACEB[10]	$\Phi_f = \begin{cases} 2\Phi_p & 0 < \Phi_p < \frac{\Theta_p \Theta_f (\Theta_f - \Theta_p)}{2\Theta_p(1-\Theta_p) - \Theta_f(1-\Theta_f)} \\ \frac{\Theta_f(1-\Theta_f)}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p + \frac{\Theta_f(\Theta_f - \Theta_p)}{1-\Theta_p} & \frac{\Theta_p \Theta_f (\Theta_f - \Theta_p)}{2\Theta_p(1-\Theta_p) - \Theta_f(1-\Theta_f)} \leq \Phi_p \leq \frac{\Theta_p}{\Theta_f}(1+\Theta_f - \Theta_p) \\ 1 & \frac{\Theta_p}{\Theta_f}(1+\Theta_f - \Theta_p) < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} 2\Phi_p & 0 < \Phi_p < \frac{3}{10} \\ \frac{3}{4}\Phi_p + \frac{3}{8} & \frac{3}{10} \leq \Phi_p \leq \frac{5}{6} \\ 1 & \frac{5}{6} < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$
GAMMA[11]	$\Phi_f = \begin{cases} \Phi_p \left[1 + \frac{1}{\beta} \frac{\Theta_f - \Theta_p}{1-\Theta_p} (1-\Phi_p) \right] & 0 < \Phi_p \leq \beta \\ \frac{1-\Theta_f}{1-\Theta_p} \Phi_p + \frac{\Theta_f - \Theta_p}{1-\Theta_p} & \beta \leq \Phi_p \leq 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} \Phi_p \left[1 + \frac{1}{2\beta} (1-\Phi_p) \right] & 0 < \Phi_p \leq \beta \\ \frac{1}{2} \Phi_p + \frac{1}{2} & \beta \leq \Phi_p \leq 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$
CUBISTA[6]	$\Phi_f = \begin{cases} \left[1 + \frac{\Theta_f - \Theta_p}{3(1-\Theta_p)} \right] \frac{\Theta_f}{\Theta_p} \Phi_p & 0 < \Phi_p < \frac{3}{4} \Theta_p \\ \frac{\Theta_f(1-\Theta_f)}{\Theta_p(1-\Theta_p)} \Phi_p + \frac{\Theta_f(\Theta_f - \Theta_p)}{1-\Theta_p} & \frac{3}{4} \Theta_p \leq \Phi_p \leq \frac{1+2(\Theta_f - \Theta_p)}{2\Theta_f - \Theta_p} \Theta_p \\ 1 - \frac{1-\Theta_f}{2(1-\Theta_p)} (1-\Phi_p) & \frac{1+2(\Theta_f - \Theta_p)}{2\Theta_f - \Theta_p} \Theta_p < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$	$\Phi_f = \begin{cases} \frac{7}{4} \Phi_p & 0 < \Phi_p < \frac{3}{8} \\ \frac{3}{4} \Phi_p + \frac{3}{8} & \frac{3}{8} \leq \Phi_p \leq \frac{3}{4} \\ \frac{1}{4} \Phi_p + \frac{3}{4} & \frac{3}{4} < \Phi_p < 1 \\ \Phi_p & \Phi_p > 1 \end{cases}$

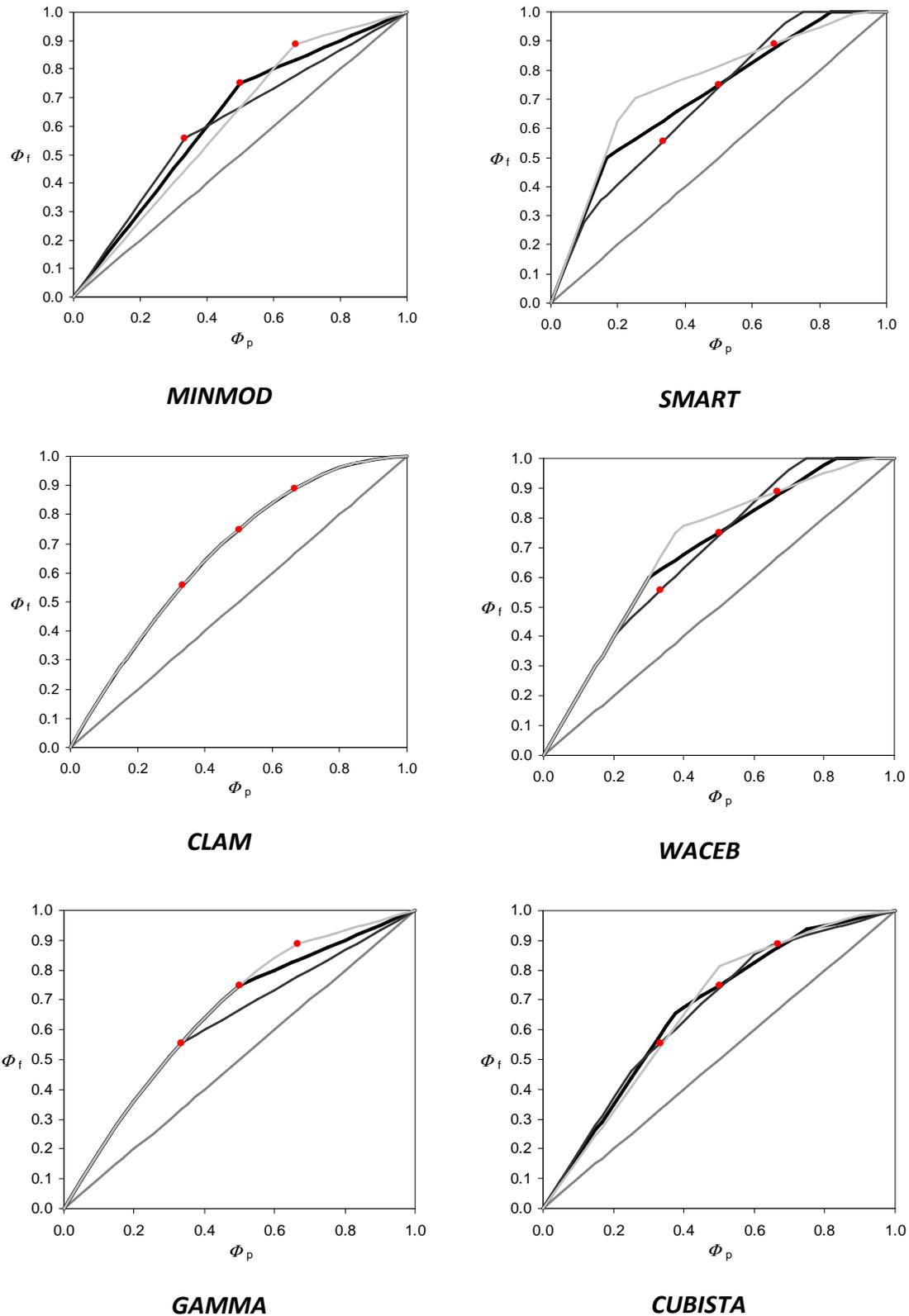


Figura 3.6 Diagramas NVD (Normalised Variable Diagram) para esquemas de alta resolução da Tabela 3.1 para: malha uniforme (----), malha não uniforme com razão de expansão de 2 (-.-.-) e malha não uniforme com razão de compressão de 0.5 (....). Os pontos evidenciados correspondem às posições nodais da malha (Θ_p, Θ_f), para cada situação referida anteriormente.

A representação gráfica dos limitadores de fluxo descritos na Tabela 3.1, através de esquemas Normalised Variable Diagram (NVD), é apresentada na Figura 3.6. Os esquemas conhecidos pelos acrónimos MINMOD[7], SMART[8], WACEB[10] e CUBISTA [6] são derivados pela construção e combinação piecewise de relações lineares no NVD. Por outro lado, relações de ordem superior correspondentes a funções curvas são igualmente propostas, e.g., o esquema CLAM de van Leer, 1974[9] ou o limitador GAMMA de Jazak et al., 1999[11]. Os esquemas da Tabela 3.1 são formalmente de segunda ordem, com a excepção dos procedimentos WACEB, SMART e CUBISTA que podem atingir uma exactidão de terceira ordem em malhas uniformes.

Por outro lado, a análise dos diagramas da Figura 3.6 permite concluir que todos os esquemas se situam na região de limitação de fluxo do diagrama NVD (vd. Figura 2.12, página 78), verificando o Convection Boundness Criterion (CBC).

No entanto, a verificação do CBC não garante necessariamente que um esquema delimitado produza convergência para uma solução numérica. De facto, são requeridas condições mais exigentes do que a condição CBC, para que os esquemas iterativos de resolução de equações algébricas, que advêm de discretizações implícitas, converjam para a verificação de uma tolerância pré-estabelecida. De facto, a natureza compósita (piecewise) de alguns HRS pode introduzir instabilidade numérica, por exemplo, no caso em que a posição nodal coincida com as posições de transição em que a curva NVD do esquema não é diferenciável[8,10-11]. Deste modo, Leonard, 1991[13] introduziu a noção de Limitador Universal (ULTIMATE), válido para resoluções transientes explícitas (vd. Figura 3.7A), e que notoriamente se reduz ao CBC no caso de fluxos estacionários (em que o número de Courant tende para zero, $C \rightarrow 0$).

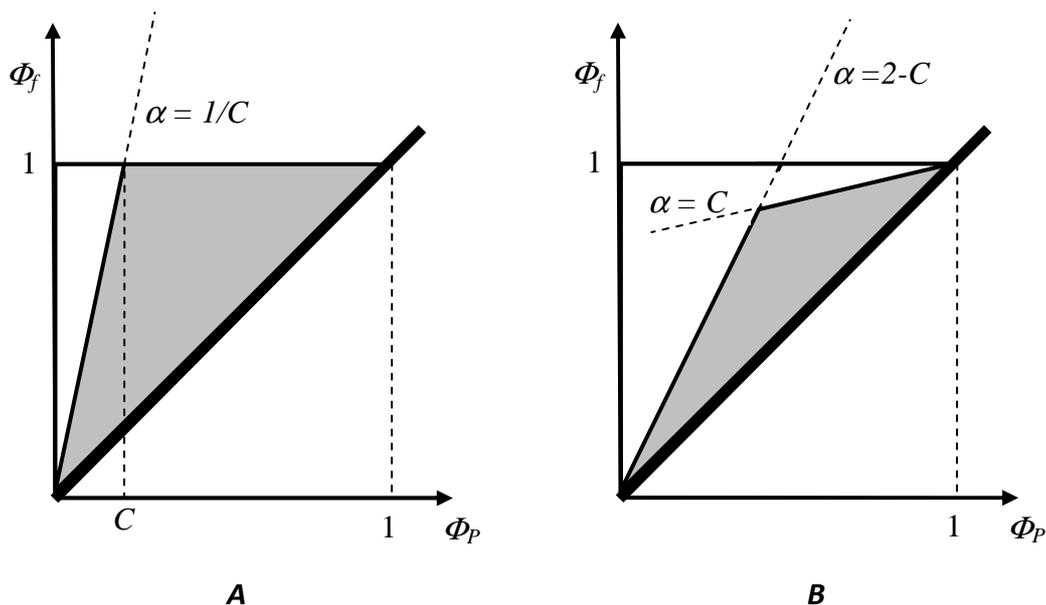


Figura 3.7 A – Limitador Universal (ULTIMATE); B – restrições TVD para métodos explícitos evolutivos[6].

Por outro lado, as condições que definem um método transiente explícito como TVD (Total Variation Diminishing) são ainda mais restritivas do que o limitador universal de Leonard com se torna óbvio pela observação da Figura 3.7B. De facto, apesar da condição TVD ser notoriamente mais exigente do que a mera condição de limitação, baseada na preservação de monotonia, a sua verificação garante a convergência da

solução de qualquer esquema conservativo para a solução fraca da lei de conservação subjacente.

Procede-se agora ao teste do desempenho do HRS descrito anteriormente na estimativa das derivadas de funções 1D caracterizadas por exibirem perfis problemáticos, nomeadamente gradientes extremamente elevados.

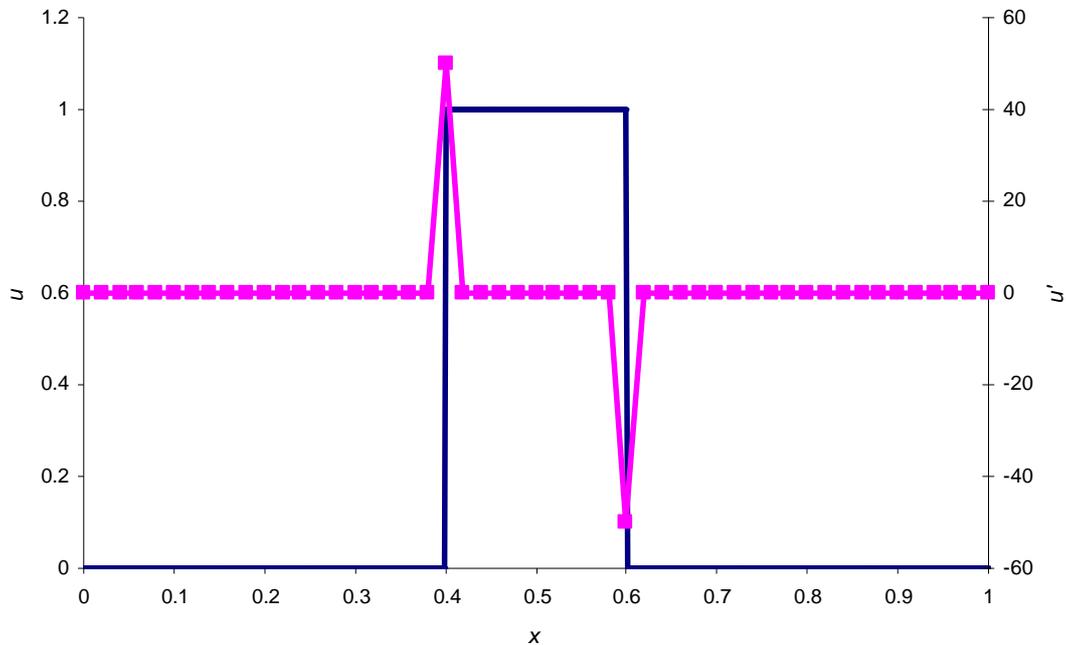


Figura 3.8 Representação da estimativa da primeira derivada de uma função pulso através de um esquema de alta resolução (com limitador MINMOD) numa malha uniforme de 50 intervalos.

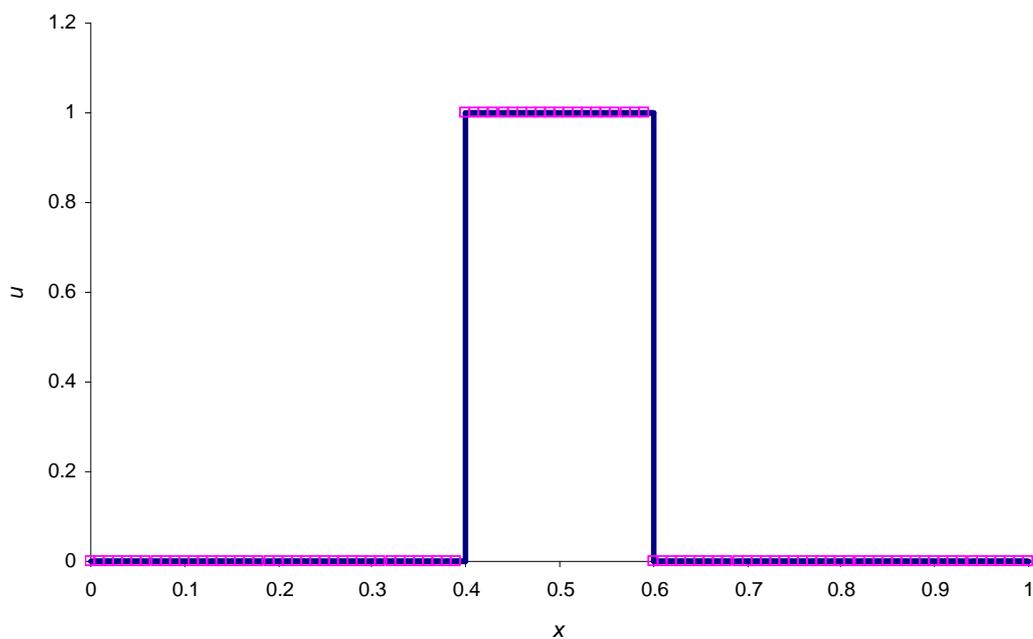


Figura 3.9 Interpolação de uma função pulso através de um esquema de alta resolução (com limitador MINMOD) numa malha uniforme de 50 intervalos.

O cálculo da primeira derivada aproximada de uma variável dependente u através de HRS pode simplesmente ser realizada assumindo uma função de fluxo do tipo $\phi=u$, sendo a velocidade local $d\phi/du$ constante e unitária sobre a totalidade do domínio. Desta forma aplica-se o procedimento descrito acima (com o limitador de fluxo MINMOD) para estimar a derivada de uma função pulso de largura 0.2, centrada em $x = 0.5$. Os resultados obtidos com uma malha uniforme com 50 intervalos são apresentados na Figura 3.8. Verifica-se que, ao contrário dos FDS, o esquema lida de forma satisfatória com as duas descontinuidades que definem o pulso nas posições $x = 0.4$ e $x = 0.6$ sem introduzir perturbações oscilatórias sem significado físico no perfil da derivada.

Por outro lado, a própria natureza do esquema de alta resolução implica a estimativa do valor da variável fluxo (neste caso, a própria solução u) nas posições intermédias dos intervalos da malha, designados por faces, já que num exemplo 1D, estes intervalos podem ser considerados equivalentes a volumes finitos unidimensionais. Deste modo, o procedimento HRS inclui necessariamente uma qualidade interpolativa da função discretizada inicial. Na Figura 3.9 apresenta-se o perfil discreto interpolativo da função pulso gerado no contexto da diferenciação numérica representada na Figura 3.8. A comparação entre o perfil interpolado e a função pulso original permite concluir que o HRS aplicado possibilita uma reconstrução interpolativa de uma versão discretizada de uma função analítica com gradientes acentuados e/ou descontinuidades sem introduzir características artificiais nos perfis reconstruídos potencialmente geradoras de instabilidade numérica.

As propriedades constatadas anteriormente tornam os HRS especialmente interessantes para aplicação no contexto da resolução numérica adaptativa de equações ou sistemas de equações diferenciais. No entanto, os algoritmos específicos desenvolvidos no âmbito do presente trabalho são apresentados de modo mais detalhado na secção 3.5.

3.4 MALHAS DIÁDICAS

A malha adaptativa global considerada no trabalho presente é construída através da sobreposição de um conjunto de malhas diádicas parciais.

Um conjunto de malhas diádicas uniformes 1D é definido de uma forma normalizada para um intervalo $[0,1]$ através de,

$$V^j = \{x_k^j \in \mathfrak{R} : x_k^j = 2^{-j}k, k = 0, \dots, 2^j\}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.11)$$

em que j estabelece o nível de resolução da malha e k representa a posição específica.

Deste modo, logo que uma malha diádica V^j é estabelecida, a malha de nível imediatamente superior, V^{j+1} , é gerada pela colocação de nodos adicionais nas posições intermédias dos j intervalos da malha inicial. Por outro lado, por 3.11 é notório que uma malha diádica 1D se caracteriza por possuir um número de intervalos equivalente a uma potência de 2, ou seja, a malha V^j consiste numa estrutura discretizada com 2^j intervalos. A forma de comunicação hierárquica entre malhas assegura que, se V^j for diádica, V^{j+1} também o é, e vice-versa. Outra propriedade do conjunto 3.11 consiste no facto dos nodos de índice par de V^{j+1} também pertencerem a V^j , ou seja,

$$x_{2k}^{j+1} = x_k^j, \quad (3.12)$$

o que implica que,

$$u_{2k}^{j+1} = u_k^j. \quad (3.13)$$

Assim, apenas a solução nos nodos de índice ímpar de V^{j+1} é desconhecida e deve ser avaliada através de um esquema interpolativo adequado.

A representação gráfica de um exemplo de um conjunto de malhas do tipo diádico, construído desde um nível de resolução mínimo $M = 0$, até a um nível de resolução máximo $N = 7$, é apresentada na Figura 3.10.

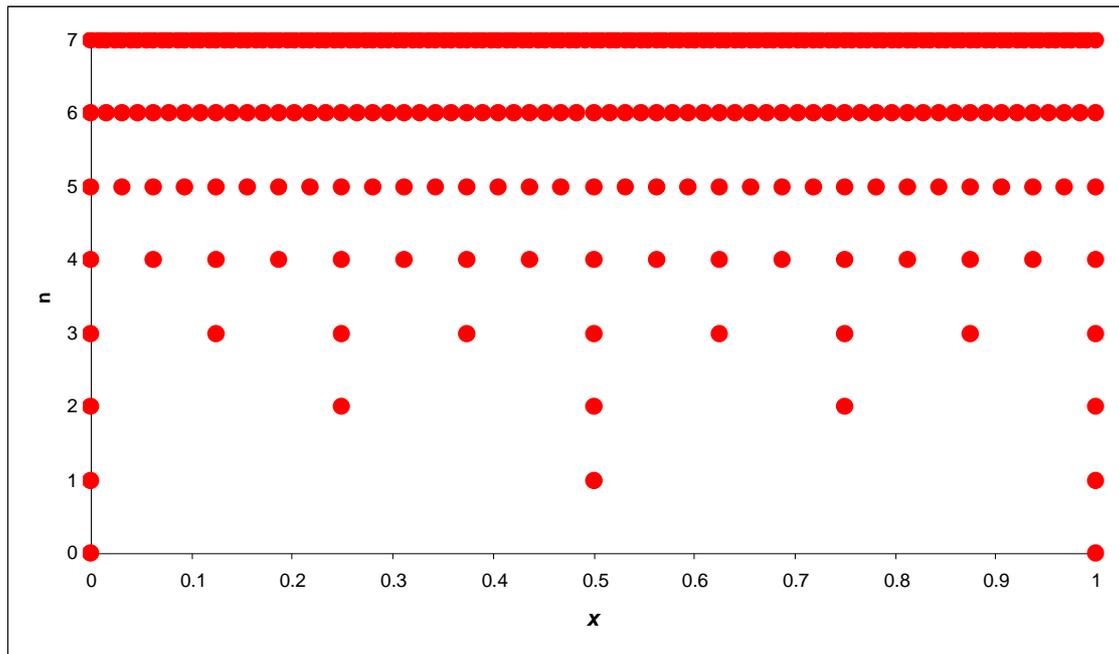


Figura 3.10 Exemplo de malhas diádicas unidimensionais: $M=0$, $N=7$; num domínio $[0,1]$.

A extensão da definição do conjunto 3.11 para espaços multidimensionais é perfeitamente trivial. Nestes casos, os intervalos são substituídos por células finitas e o refinamento de uma malha de nível j para o nível imediatamente superior $j+1$, consiste genericamente na subdivisão da célula j em 2^n células (em que n é a dimensão do espaço discretizado). Na Figura 3.11 é apresentado um exemplo típico bidimensional ($n=2$) constituído por três malhas de níveis sucessivos. A malha mais esparsa de nível 4 é refinada (parcialmente devido à necessidade de uma visualização adequada) até ao nível 6 de resolução. Verifica-se que cada célula mãe de um nível inferior é dividida em 4 (2^2) subcélulas do nível seguinte, em cada operação de refinamento.

O conceito de malha diádica não se limita ao caso particular de malhas uniformes, podendo ser estendido facilmente a estruturas mais genéricas não equidistribuídas no espaço. Por outro lado, a estratégia de hierarquização pode igualmente ser aplicada a malha não diádicas de forma completamente equivalente. No entanto, é óbvio que a aplicação deste tipo de procedimentos implica que o conjunto de malhas base utilizado seja estruturado e quadrangular.

A reunião de malhas diádicas de níveis diferentes parcialmente activadas permite a construção de malhas de resolução múltipla, ou seja, com diversas escalas de

resolução para regiões distintas do domínio. O algoritmo de adaptação deve lidar com o procedimento de activação parcial de cada malha diádica (entre níveis de resolução mínimo e máximo pré-especificados), aplicando um critério adequado que promova a retenção de nodos situados em regiões de maior actividade da solução e a consequente eliminação dos nodos localizados em zonas do domínio caracterizadas por baixa actividade da solução. Posteriormente a conjugação das diversas malhas adaptadas permite a geração da malha global adaptativa, definida em múltiplos níveis de resolução. Deste modo, a utilização de conjuntos de malhas diádicas estruturadas e uniformes, não implica necessariamente que a malha global gerada seja também uniforme.

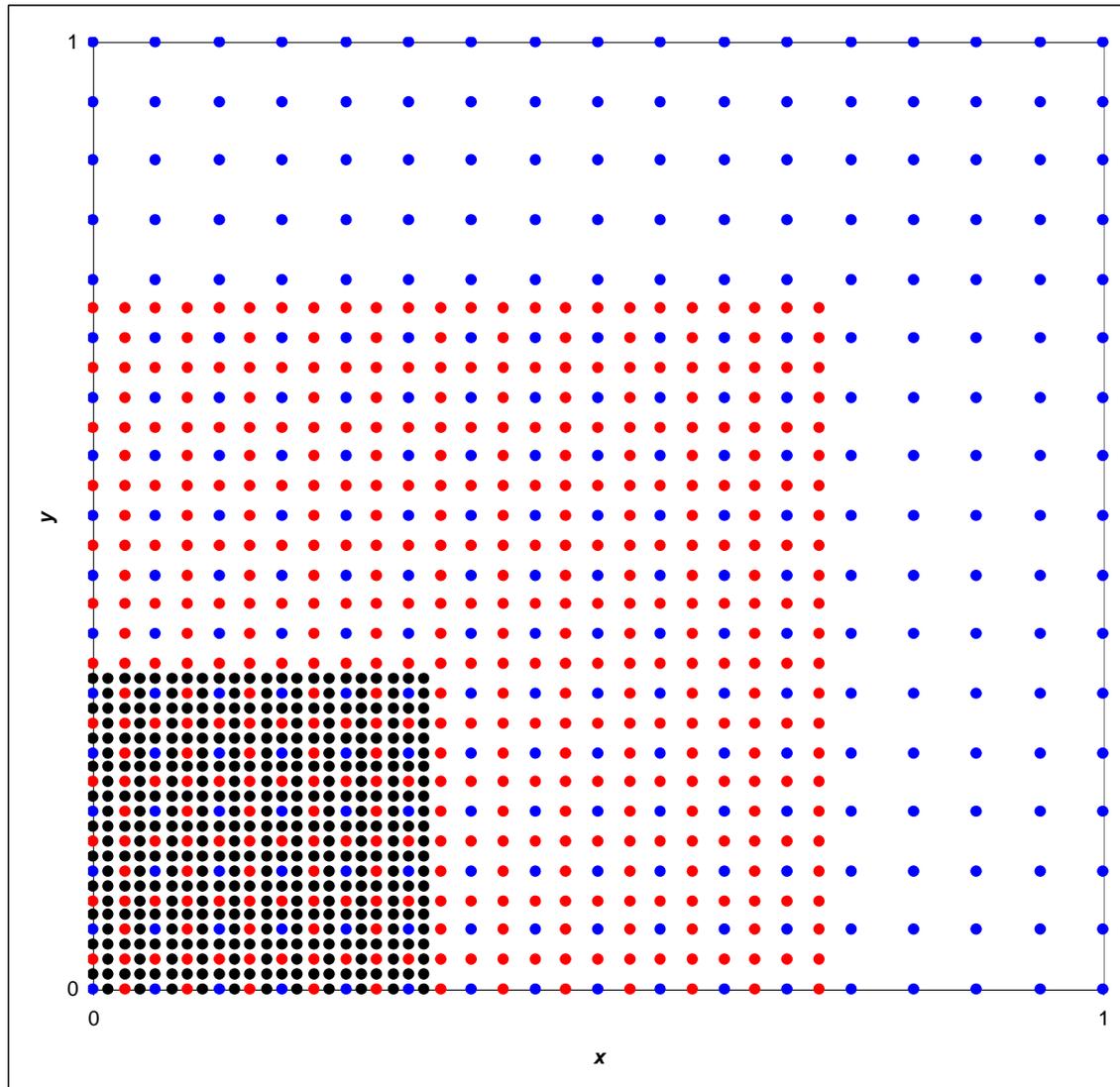


Figura 3.11 Exemplo de malhas diádicas bidimensionais: $M=4$, $N=6$; num domínio $[0,1]^2$.

Os algoritmos numéricos adaptativos desenvolvidos para implementação do procedimento de construção da malha global, através de selecção nodal sobre um conjunto de malhas diádicas, conjugada com colocação nodal baseada em aproximações diferenciais de diferenças finitas, e interpolação e diferenciação de alta resolução, são apresentados com maior pormenor na secção seguinte.

3.5 ALGORITMOS NUMÉRICOS ADAPTATIVOS

Nas secções anteriores apresentam-se os princípios e conceitos teóricos principais que estão na base dos algoritmos numéricos do tipo MOL (Method of Lines) desenvolvidos para a resolução de modelos diferenciais uni- e bidimensionais caracterizados pela exibição de particularidades problemáticas, nomeadamente perfis abruptos e/ou descontinuidades móveis. Na presente secção pretende-se realizar uma apresentação detalhada dos próprios algoritmos, das considerações que motivaram a sua construção, para além de uma descrição das respectivas estruturas e das principais características que determinam o seu desempenho.

3.5.1 MODELOS UNIDIMENSIONAIS

O algoritmo numérico para a resolução de modelos (algébrico-)diferenciais desenvolvido no âmbito do presente trabalho baseia-se no conceito AMOL (Adaptive Method of Lines), com uma estratégia adaptativa estática do tipo h-refinement (vd. secção 2.4.3, página 90). Os passos principais da versão 1D do algoritmo (designada por STAT02) encontram-se resumidos de uma forma esquemática no diagrama de fluxo da Figura 3.12.

O algoritmo divide-se numa estrutura iterativa que engloba os seguintes passos sequenciais:

- Definição do tipo de conjunto de malhas de nível crescente, uniformes ou não uniformes, do tipo diádico e não diádico, utilizado para a construção da malha global adaptativa;
- Algoritmo de selecção e colocação nodal operado sobre o conjunto de malhas definido anteriormente, para geração da malha adaptativa, quer a partir do perfil espacial inicial ($t = t_0$) como de perfis espaciais em tempos intermédios;
- Integração do sistema (algébrico-)diferencial ordinário construído pela discretização do modelo (algébrico-)diferencial parcial original (em conjugação com as condições fronteira definidas) sobre a malha adaptativa gerada em cada instante, através de um integrador ODE escolhido (vd. Anexo C).
- Procedimento interpolativo para reconstrução de perfis intermédios para suporte do algoritmo de geração de malhas intermédias.

Os quatro procedimentos principais descritos acima organizam-se de forma a estabelecer o algoritmo do programa STAT02 (descrito de forma detalhada no Anexo B). Assim, partindo de um esquema MOL tradicional, procede-se a geração da malha inicial de arranque do procedimento geral ($k = 0$, para $t = t_0$), através do algoritmo de colocação nodal sobre o conjunto de malhas pré-definido. Assim, discretiza-se o modelo diferencial parcial em relação à malha gerada e integra-se o sistema de ODE's obtido até um instante temporal definido por uma passo de integração pré-estabelecido (Δt), através de um integrador ODE. Obtém-se a aproximação discreta da solução num nível temporal $t_0 + \Delta t$, disponível apenas nas posições espaciais determinadas pela malha gerada. Utilizando uma estratégia adaptativa h-refinement típica reconstrói-se o perfil parcial da solução até ao nível de resolução máxima do conjunto de malhas escolhido. Posteriormente, aplica-se o esquema de geração de malha adaptativa para a construção da nova malha de discretização para o passo de

integração temporal seguinte ($k = k + 1$). Repetem-se de modo iterativo os passos de integração, reconstrução de perfil e geração de malha, até se atingir o nível de tempo final (t_{final}), onde o algoritmo é finalizado.

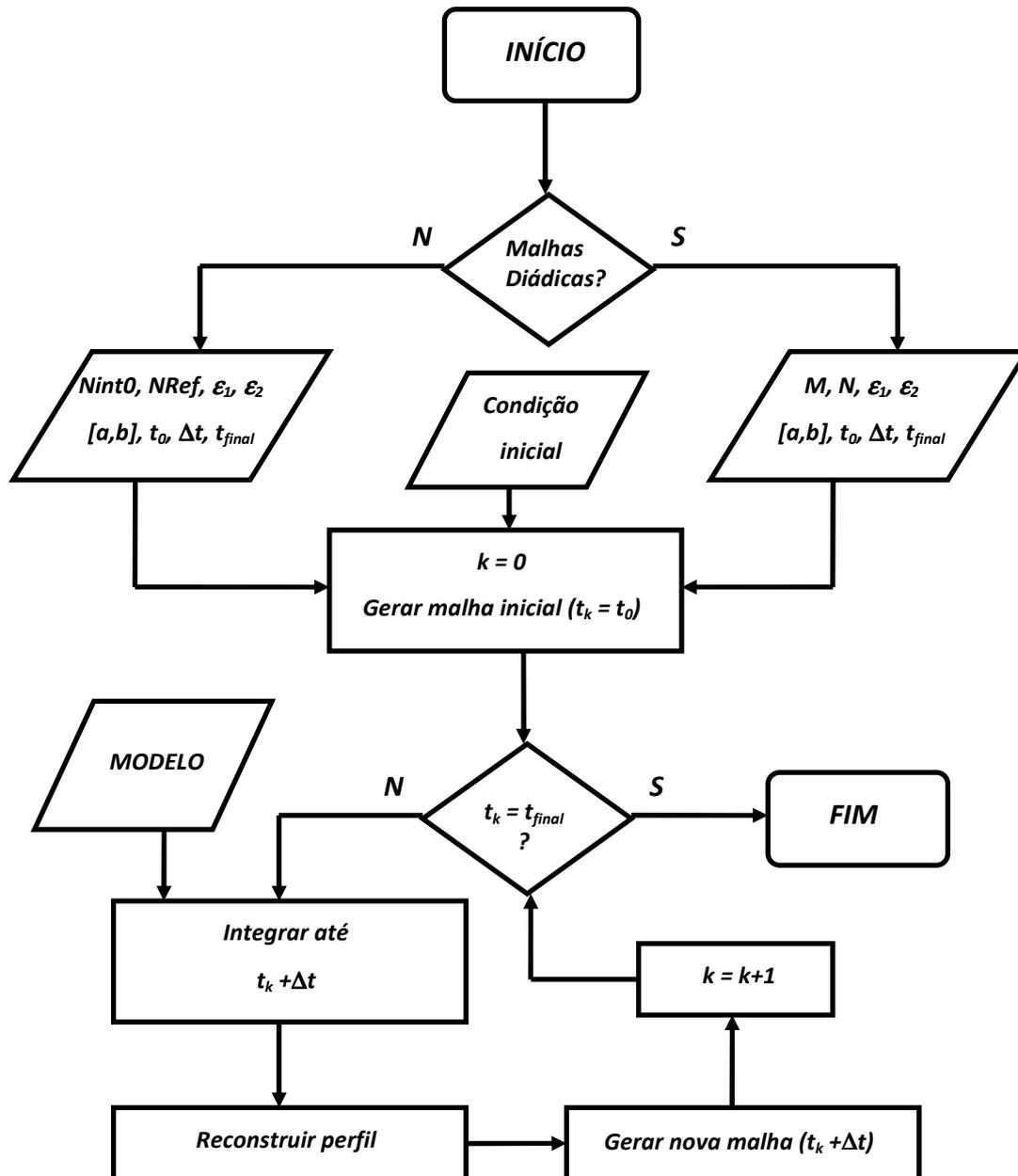


Figura 3.12 Diagrama de fluxo para a descrição esquematizada do algoritmo de integração numérica adaptativa de modelos diferenciais evolutivos unidimensionais STAT02, baseado numa estratégia AMOL.

O elemento determinante para o sucesso do desempenho do algoritmo descrito na Figura 3.12, consiste no algoritmo de selecção e colocação nodal que estabelece a estrutura discreta designada por malha, sobre a qual o processo de integração é realizado. Através deste procedimento, a malha de integração é reconstruída com uma frequência apropriada, para que o sistema nodal que aproxima o domínio contínuo se adapte progressivamente às características evolutivas da solução. Deste modo, o algoritmo adaptativo de geração de malha deve forçosamente incluir um processo de

monitorização da evolução dos resultados numéricos e da detecção das características mais importantes da solução computada em tempo real.

O algoritmo geral de colocação nodal desenvolvido é resumido na Figura 3.13. O conceito de base relaciona-se com a possibilidade de construção de uma malha multiresolução e multiescala, ou seja de tamanho variável ao longo do domínio espacial, através da sobreposição de um conjunto de malhas estruturado e hierarquizado de malhas base de nível crescente. O procedimento de definição deste conjunto depende somente do estabelecimento de uma malha de nível mínimo (que corresponde a uma esparsidade máxima) e de um nível máximo de refinamento da malha inicial, já que a operação de geração da malha de nível seguinte consiste apenas na colocação de nodos adicionais nas posições intermédias de todos os intervalos da malha de nível imediatamente anterior, até à obtenção do maior nível de refinamento possível previamente imposto. Deste modo, uma malha de nível $k + 1$, inclui todos os nodos contidos na malha de nível k que lhe deu origem. A estratégia específica adoptada no procedimento de geração do conjunto de malhas não limita a natureza da malha esparsa pré-definida, que pode ser diádica ou não diádica, uniforme ou não uniforme. No caso do conjunto de malhas seleccionado ser do tipo diádico (vd. equação 3.11), é necessário escolher o nível mínimo (M) e máximo (N) das malhas base diádicas que o definem. Por outro lado, é igualmente possível optar pela geração de um conjunto de malhas não diádico, sendo agora necessário o estabelecimento do número de intervalos da malha de nível mínimo ($Nint0$) e o grau de refinamento máximo admissível dessa malha ($NRef$).

- $k = M$; Para $i = 1, \dots, 2^k - 1$
- Estimativa de U_i^n por FD (derivada de ordem n em i)
- Se se verificar o critério de colocação:
- Seleccionam-se os nodos intermédios da malha de nível $k+1$: $x_{2i-1}^{k+1}; x_{2i}^{k+1}; x_{2i+1}^{k+1}$
- Faz-se $k = k + 1$ para $k = M, \dots, N - 1$

Figura 3.13 Algoritmo para selecção e colocação nodal em malhas diádicas de nível k crescente.

Posteriormente, é necessário definir um algoritmo de selecção nodal que permita a monitorização da solução aproximada sobre o conjunto de malha de escala decrescente e possibilite a desactivação de nodos que não verifiquem os critérios de colocação nodal e a sua conseqüente eliminação da malha adaptativa global. Obviamente que estes critérios devem facultar uma forma de estimação do erro de discretização cometido através da implementação do procedimento numérico e, deste modo, possibilitar uma medida da distribuição da actividade da solução ao longo do domínio discretizado. Desta forma, procede-se a uma concentração de nodos, ou seja uma diminuição da escala local da malha através da activação de nodos de nível superior, nas regiões de maior actividade, e uma relaxação da malha, através da desactivação de nodos, nas zonas de menor actividade da solução.

Assim, o algoritmo de colocação nodal (vd. Figura 3.13 para o caso diádico) consiste num procedimento de varrimento do conjunto de malhas base, a partir da malha de

nível mínimo (M), sobre as quais se procede a uma aproximação de diferenças finitas (FD) da derivada de nível n da solução. Estas estimativas são posteriormente utilizadas na definição de critérios de colocação que são testados em todos os nodos da malha de nível k . No caso do critério seleccionado ser verificado num nodo i , procede-se à activação desse nodo e dos nodos adjacentes situados na malha de nível imediatamente superior $k + 1$ (vd. Figura 3.14). Após o teste da totalidade da malha de nível k , aumenta-se o nível de resolução ($k = k + 1$) e procede-se à avaliação dos nodos da malha seguinte até se atingir o nível máximo de $N - 1$ (para o caso de um conjunto diádico).

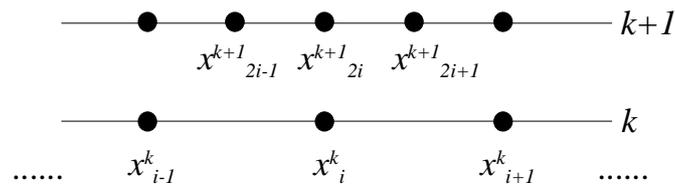


Figura 3.14 Relação hierárquica entre malhas de nível sucessivo.

Os critérios de colocação são estabelecidos de forma a satisfazerem o alcance de alguns objectivos, respeitantes aos perfis aproximados como:

- Captura de oscilações;
- Detecção de valores elevados;
- Detecção de variações acentuadas.

A utilização de aproximações FD revela-se especialmente adequada principalmente no caso da captura de oscilações nos perfis numericamente gerados. Como se referiu anteriormente (vd. secção 3.2), a aplicação de aproximações do tipo FD a funções que exibam perfis abruptos ou descontinuidades conduz à construção de perfis diferenciais contendo oscilações não físicas localizadas nas regiões do domínio onde se situam aquelas características problemáticas. Desta forma, a detecção do posicionamento de oscilações em aproximações FD, permite a identificação de regiões de refinamento no domínio da solução.

Desta forma, definem-se dois critérios possíveis para a selecção e consequente colocação nodal sobre o conjunto de malhas base, designados por C1 e C2 (vd. Figura 3.15).

O critério C1 é estabelecido com o objectivo da identificação de oscilações não físicas (relacionadas com os parâmetros δ) em aproximações diferenciais de ordem n , (associadas a regiões de maior actividade da solução), conjugado com a detecção de valores elevados (relativos ao tamanho local da malha) e de variações significativas da estimativa de derivadas. No caso apresentado, este último factor é controlado através da monitorização de uma média das estimativas adjacentes. No entanto, é possível generalizar este procedimento à avaliação do desvio padrão (versão σ) do mesmo conjunto de variáveis.

Por outro lado, o critério C2 representa um controlo das variações de estimativas de derivadas adjacentes, associada à detecção de valores elevados em aproximações locais.

Critério C1:

$$\delta_1 = U_i^n \times U_{i-1}^n; \delta_2 = U_{i+1}^n \times U_i^n$$

$$\Delta x = \frac{x_{i+1}^k - x_{i-1}^k}{2}$$

$$|U_i^n \times \Delta x| > \varepsilon_1 \quad \vee \quad \begin{cases} \delta_1 \leq 0 \\ \delta_2 \leq 0 \end{cases}$$

$$\wedge$$

$$\frac{|U_{i-1}^n| + |U_i^n| + |U_{i+1}^n|}{3} > \varepsilon_2$$

Critério C2:

$$\delta_1 = U_i^n - U_{i-1}^n; \delta_2 = U_{i+1}^n - U_i^n$$

$$\Delta x = \frac{x_{i+1}^k - x_{i-1}^k}{2}$$

$$|U_i^n \times \Delta x| > \varepsilon_1 \quad \vee \quad \delta_1 \times \delta_2 \leq 0$$

$$\wedge$$

$$\frac{|\delta_1| + |\delta_2|}{2} > \varepsilon_2$$

Figura 3.15 Critérios para colocação nodal em malhas de nível crescente.

As operações apresentadas na Figura 3.15 são apenas exemplos possíveis de critérios de colocação nodal, directamente aplicáveis a malhas 1D ou de forma direccional, a malhas de dimensão superior. Outros critérios podem ser desenvolvidos através de considerações semelhantes às referidas anteriormente, com diferentes combinações de avaliações consentâneas com os objectivos enumerados acima.

Os procedimentos de geração de malha efectivamente construídos e discutidos de forma detalhada no Anexo B são resumidos na Tabela 3.2.

No entanto, a aplicação do esquema de geração de malha adaptativa acoplado ao esquema de colocação nodal descrito acima (vd. Figura 3.14), implica a disponibilidade dos valores da solução em todas as posições da malha de nível mais elevado. Tal não constitui qualquer problema para o caso da geração da malha correspondente ao perfil inicial (em $t = t_0$), obrigatoriamente disponível para a resolução de problemas de valor inicial. Porém, a questão muda de figura quando se trata de instantes temporais intermédios, ou seja entre duas integrações, onde se revele necessário proceder a uma readaptação da malha, já que neste caso, não existe qualquer garantia da

disponibilidade de aproximações à solução sobre todas as posições discretas da malha mais fina, como exigido pela estrutura do algoritmo da Figura 3.15.

Tabela 3.2 Estratégias de geração de malha 1D (gridgen*1).

Algoritmo	Descrição
gridgen11	Algoritmo da Figura 3.13 acoplado aos critérios C1 ou C2 (incluindo possíveis variantes) em que todos os nodos (de todos os níveis de resolução) são analisados.
gridgen21	Algoritmo da Figura 3.13 acoplado aos critérios C1 ou C2 (incluindo possíveis variantes) em que apenas os nodos activados de níveis de resolução anteriores são analisados.
gridgen31	Algoritmo de geração de malha RBF (Radial Basis Function) de Driscoll e Heryudono, 2007[14] ³ .
gridgen41	Algoritmo da Figura 3.13 acoplado a um critério de colocação RBF apresentado por Driscoll e Heryudono, 2007[14].

Deste modo, torna-se fulcral aplicar um esquema interpolativo de reconstrução do perfil intermédio da solução aproximada, que possa ser posteriormente introduzido no procedimento de geração de malha. Uma alternativa mais flexível consiste em acoplar o próprio processo de interpolação no procedimento de geração de malha, que apenas recorreria a uma acção interpolativa quando e se verificasse que a posição nodal pretendida não estivesse incluída na malha global gerada no passo temporal anterior.

O efectivo esquema de interpolação desenvolvido, em conjunto com as estratégias interpolativas adoptadas (linear, splines cúbicas, HRS ou RBF), são discutidos com maior pormenor no Anexo B, assim como as formas mais adequadas para a sua introdução na estrutura genérica do algoritmo adaptativo de resolução de PDE's.

No Anexo B são também descritos e caracterizados os programas escritos em linguagem FORTRAN, desenvolvidos para a implementação dos métodos numéricos de resolução de modelos diferenciais 1D discutidos na presente secção.

Finalmente, é necessário igualmente escolher um integrador ODE apropriado para a integração do sistema de equações ordinários gerado pelo processo de discretização efectuado sobre a malha adaptativa. No entanto, nesta questão é conveniente salientar que o esquema de discretização espacial pode ser baseado quer em procedimentos FD como em métodos HRS. No caso de estimativas diferenciais do tipo FD, opta-se por estabelecer uma relação entre a estratégia específica escolhida para o critério de geração de malha (igualmente do tipo FD) e o esquema de estimativa de derivadas. Por exemplo, se se definir uma estratégia de geração de malha assente em FD centradas de quarta ordem, tal implica que o esquema de aproximação de derivadas espaciais incorporado no algoritmo AMOL também é baseado em FD centradas de quarta ordem, no caso da não especificação deste como a alternativa HRS.

No que diz respeito à integração temporal, procede-se à descrição resumida de alguns integradores ODE de eficácia amplamente demonstrada no Anexo C, com especial destaque para o integrador DASSL (Differential-Algebraic System Solver), que aplica uma versão do método de Gear ou BDF, de passo e ordem variáveis[15] e a rotina RKF45 que implementa o método de Runge-Kutta-Fehlberg[16].

³ Algoritmo de colocação referido resumidamente na secção 2.2.8 e no Anexo B.

3.5.2 MODELOS BIDIMENSIONAIS

Nesta secção efectua-se a descrição dos métodos numéricos desenvolvidos no âmbito da resolução numérica adaptativa de modelos diferenciais parciais evolutivos bidimensionais (2D).

A introdução de pelo menos uma dimensão espacial adicional no problema implica um acréscimo significativo na complexidade da estruturação da sua discretização. De facto, num domínio 1D, a comunicação internodal de uma malha está à partida determinada, já que os nodos apenas se podem acomodar numa direcção bem definida. No entanto, a consideração de uma direcção coordenada suplementar conduz a um incremento inexorável das possibilidades de organização do nodos de discretização de uma malha, que pode ser controlado através da definição de um modo estruturante da geometria local e global.

Assim, considere-se um exemplo de uma malha 2D estruturada rectangular uniforme ($\Delta x = \Delta y = c.$ ^{te}) de nível k arbitrário⁴. A forma mais simples de proceder a um refinamento de malha, ou seja de construir a malha de nível $k + 1$ derivada, consiste em refinar todas as malhas 1D contidas na malha 2D inicial, em ambas as direcções espaciais x e y . Assim, através de um refinamento equidistante colocam-se nodos nas posições médias de todos os intervalos da malha de nível k (vd. Figura 3.16; quadrados cinzentos), correspondentes às arestas dos quadriláteros definidos pelos nodos de nível k (vd. Figura 3.16; círculos vermelhos), que constituem a geometria local da malha. No entanto, a bidimensionalidade do domínio implica que a operação de refinamento não esteja completa sem a execução de uma colocação adicional de um nodo adicional no centro geométrico de cada quadrilátero referido (vd. Figura 3.16; círculos cinzentos) situado na intersecção dos eixos definidos pelos quatro nodos colocados nas arestas. Tal facto implica um acréscimo notório de complexidade no processo de refinamento de malha 2D em relação ao caso 1D, já que aquele não se limita a uma simples sequência de operações de refinamento 1D, mas obriga igualmente a uma geração de nodos adicionais ou internos, representativos da influência conjugada das duas direcções consideradas.

Assim, apresenta-se na Figura 3.17 o diagrama de fluxo descritivo da estrutura do algoritmo de resolução numérica de PDE's evolutivas 1D, designado por INTEGR2D, idealizado no contexto de uma estratégia AMOL e de lógicas de hierarquização de malhas semelhantes à apresentada na Figura 3.16. Apesar da estrutura do algoritmo revelar semelhanças óbvias em relação à correspondente a problemas 1D (vd. Figura 3.12), é notório que possui igualmente atributos completamente distintos.

A primeira diferença a assinalar diz respeito ao facto da versão 2D estar projectada de forma a apenas lidar com conjuntos de malhas do tipo diádico. No entanto, salienta-se que esta característica não consiste numa exigência inalienável relacionada com qualquer questão estrutural que resulte do aumento da complexidade geométrica do domínio, mas deve-se simplesmente a uma opção do programador. Afigura-se óbvio que a generalização do procedimento a conjuntos de malhas não diádicas é uma tarefa perfeitamente trivial e, portanto, não necessita ser tratada como um factor relevante.

⁴ É de salientar que este caso não representa a malha 2D mais eficiente possível, já que o quadrilátero não é o simplex dos espaços bidimensionais.

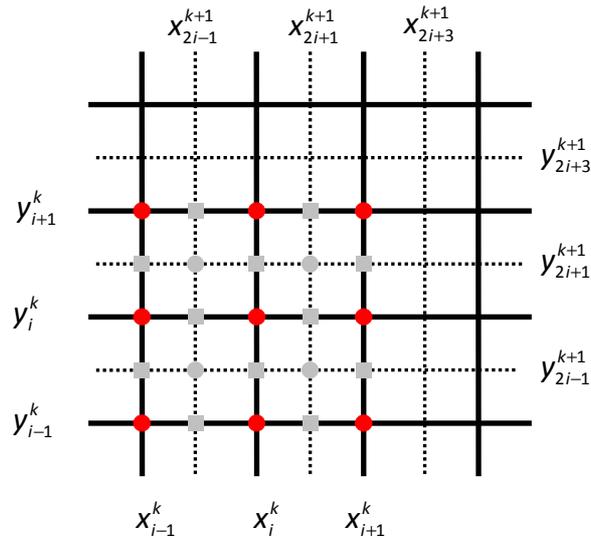


Figura 3.16 Procedimento de refinamento padrão numa malha bidimensional estruturada rectangular.

O algoritmo apresenta no contexto do seu desenho iterativo diversas operações essenciais sequenciadas, tais como:

1. Definição do tipo de conjunto de malhas diádicas de nível crescente, uniformes ou não uniformes, usado na geração da malha global adaptativa;
2. Algoritmo de colocação nodal para geração da malha adaptativa inicial, a partir da condição inicial do problema ($t = t_0$);
3. Translação do problema PD(A)E 2D original para um formato unidimensional tratável pelo integrador temporal de sistemas de OD(A)E's escolhido;
4. Integração temporal do sistema construído pela discretização do modelo original (juntamente com as condições fronteira definidas) sobre a malha adaptativa gerada, através do integrador ODE referido (vd. Anexo C) até ao instante $t + \Delta t$;
5. Reconstrução do problema 2D em $t + \Delta t$, a partir da versão 1D integrável;
6. Geração de nova malha adaptada ao perfil discreto em $t + \Delta t$, acoplada a um processo de interpolação interno para a estimativa da solução nos nodos não previamente activados;
7. Repetição dos passos 3 a 6 até à consecução do tempo final (t_{final}).

Consideram-se diversos tipos de critérios 2D de selecção e colocação nodal baseados em estratégias de detecção de gradientes elevados consideravelmente diferentes. Os vários critérios desenvolvidos e aplicados no âmbito do presente trabalho são resumidos na Figura 3.18. A maioria destes critérios é idealizado como uma sequência de gerações de malhas 1D conjugada com um procedimento de activação de nodos internos.

A excepção corresponde ao critério C32 que se fundamenta na bissecção de conjuntos de quatro quadriláteros de nível k (centrados sobre os nodos de nível k não fronteira) em oito triângulos rectângulos (vd. Figura 3.19 onde se ilustra um exemplo de um

conjunto de quadriláteros k centralmente determinados pelo nodo (x_i^k, y_i^k) de uma malha quadrangular subdivididos em oito triângulos por duas bissetrizes – linhas verdes tracejadas). Em cada triângulo é estimado o declive do plano ajustado à solução nos três nodos que o definem. Deste modo, para cada conjunto centrado no nodo genérico (x_i^k, y_i^k) , obtêm-se oito declives correspondentes aos oito triângulos gerados, através da rotina *plane2*.

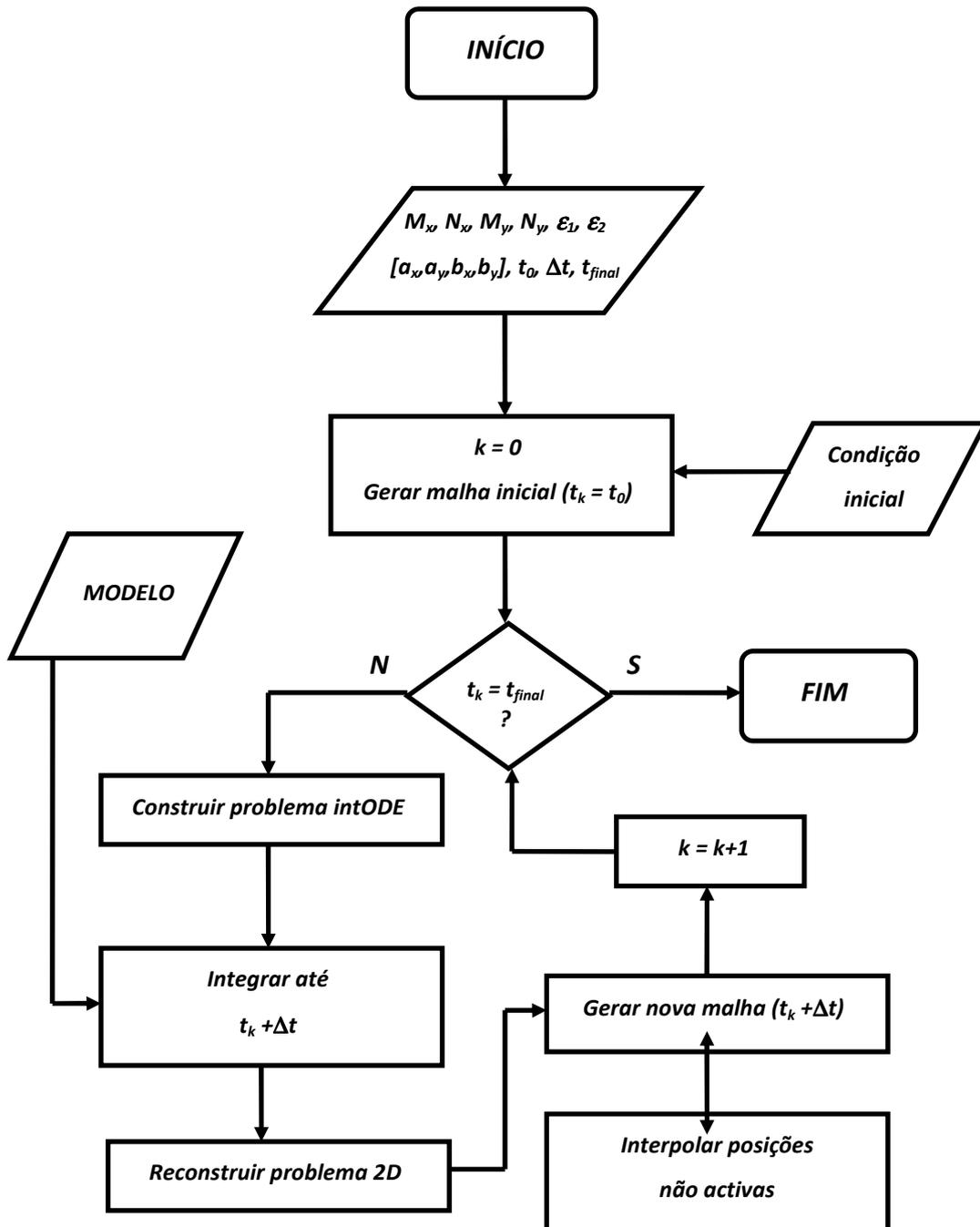


Figura 3.17 Diagrama de fluxo para a descrição esquematizada do algoritmo de integração numérica adaptativa de modelos diferenciais evolutivos bidimensionais INTEGR2D, baseado numa estratégia AMOL.

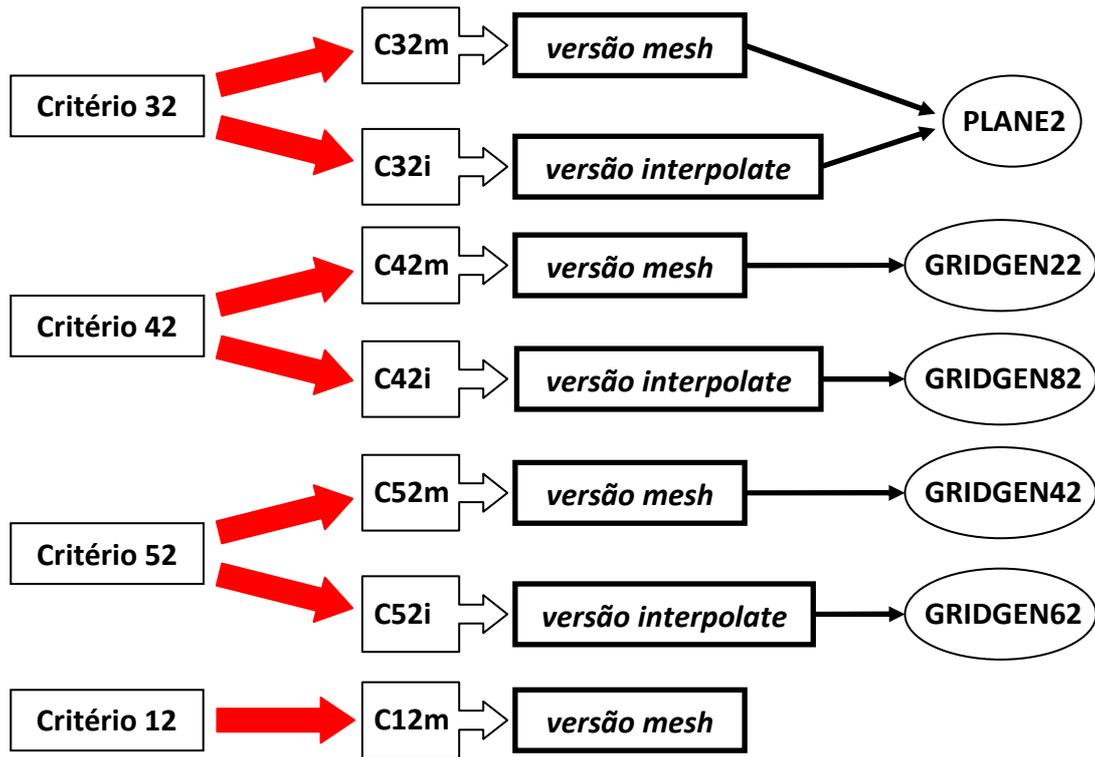


Figura 3.18 Relação entre os diversos critérios bidimensionais e as correspondentes rotinas de geração de malha.

A análise da variação entre os diversos declives calculados permite a definição de critérios que determinem a execução de operações de refinamento nas duas direcções principais, x e y , nas oito arestas exteriores (vd. Figura 3.19; quadrados azuis) e quatro arestas interiores (vd. Figura 3.19; quadrados cinzentos) do conjunto de quadriláteros considerado. Posteriormente, estas operações de colocação definem a necessidade de activação dos quatro nodos internos (vd. Figura 3.19; círculos amarelos) presentes no conjunto referido.

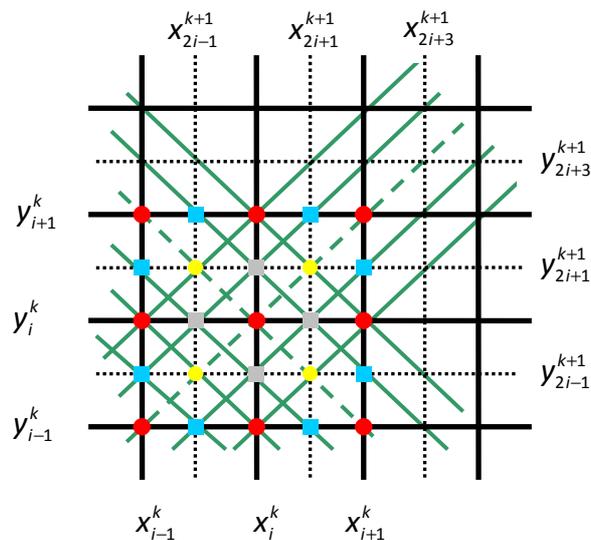


Figura 3.19 Ilustração esquemática da estratégia adoptada nos critérios C32.

A vantagem deste procedimento é a sua flexibilidade já que é compatível com uma multiplicidade de estratégias de colocação nodal, dependentes das formas específicas como se procede à análise do conjunto de oito declives calculados para cada grupo de quadriláteros k . Após a análise de todos os nodos não fronteira da malha de nível k , aumenta-se a resolução do procedimento de geração de malha, repetindo as operações descritas anteriormente para conjuntos de quadriláteros bisseccionados (vd. Figura 3.19 – linhas verdes contínuas), agora centrados em nodos $k + 1$ previamente activados. O algoritmo do critério C32 é esquematizado na Figura 3.20.

○ $k_x = M_x$ e $k_y = M_y$; Para $i = 1, \dots, 2^{k_x} - 1$ e $j = 1, \dots, 2^{k_y} - 1$

○ Se $(x_i^{k_x}, y_j^{k_y})$ é um nodo activo:

- Bissecção do conjunto de 4 quadriláteros centrados em $(x_i^{k_x}, y_j^{k_y})$ da malha (k_x, k_y)
- Cálculo dos 8 declives de planos ajustados à solução definida nos vértices dos triângulos gerados
- Seleccionam-se os nodos intermédios da malha de nível $(k_x + 1, k_y + 1)$ que verifiquem o critério de colocação.

▪ Nodos externos: $(x_{2i-1}^{k_x+1}, y_{2j-2}^{k_y+1}); (x_{2i+1}^{k_x+1}, y_{2j-2}^{k_y+1}); (x_{2i-2}^{k_x+1}, y_{2j-1}^{k_y+1}); (x_{2i}^{k_x+1}, y_{2j-1}^{k_y+1});$
 $(x_{2i+2}^{k_x+1}, y_{2j-1}^{k_y+1}); (x_{2i-1}^{k_x+1}, y_{2j}^{k_y+1}); (x_{2i+1}^{k_x+1}, y_{2j}^{k_y+1}); (x_{2i-2}^{k_x+1}, y_{2j+1}^{k_y+1}); (x_{2i}^{k_x+1}, y_{2j+1}^{k_y+1});$
 $(x_{2i+2}^{k_x+1}, y_{2j+1}^{k_y+1}); (x_{2i-1}^{k_x+1}, y_{2j+2}^{k_y+1}); (x_{2i+1}^{k_x+1}, y_{2j+2}^{k_y+1})$

▪ Nodos internos: $(x_{2i-1}^{k_x+1}, y_{2j-1}^{k_y+1}); (x_{2i+1}^{k_x+1}, y_{2j-1}^{k_y+1}); (x_{2i-1}^{k_x+1}, y_{2j+1}^{k_y+1}); (x_{2i+1}^{k_x+1}, y_{2j+1}^{k_y+1})$

○ Faz-se $k_x = k_x + 1$ e $k_y = k_y + 1$, para $k_x = M_x, \dots, N_x - 1$ e $k_y = M_y, \dots, N_y - 1$

Figura 3.20 Algoritmo genérico para selecção e colocação nodal C32 sobre conjuntos de malhas diádicas.

Tabela 3.3 Rotinas de geração de malha 2D (gridgen*2).

Rotina	Descrição
gridgen22	Versão 2D da rotina de geração de malha 1D gridgen21, através de um incremento no nível de resolução baseado no conjunto de malhas diádicas estruturadas da forma esquematizada na Figura 3.16.
gridgen42	Versão 2D da rotina de geração de malha 1D gridgen11, através de pesquisas sucessivas direccionais em x , com um varrimento de todos os domínios 1D de nível máximo com y constante, seguido de pesquisas em y , com um varrimento dos x 's de nível máximo.
gridgen82	Versão interpolativa da rotina gridgen22.
gridgen62	Versão interpolativa da rotina gridgen42 que analisa apenas domínios 1D com nodos activos.

Como referido anteriormente, os restantes critérios (C12, C42 e C52) constituem-se como seqüências de pesquisas 1D sobre malhas diádicas 2D de nível crescente. Para tal, recorrem a rotinas de colocação do tipo *gridgen* (vd. Figura 3.18) que correspondem a versões adaptadas de rotinas correspondentes 1D (vd. Tabela 3.3).

Estas rotinas aplicam estratégias de colocação nodal baseadas em aproximações FD de derivadas de ordem arbitrária da solução para a detecção espacial de anomalias (critérios 1D C1, C2, ou variantes). Todos os critérios 2D apresentados podem igualmente lidar com problemas 1D como casos particulares de modelos genéricos 2D, com a excepção notória do já descrito critério C32, apenas aplicável a problemas 2D.

Exceptuando C12, cada um dos critérios é definido em duas versões: *i* (interpolate) e *m* (mesh) (vd. Figura 3.18). As versões *m* correspondem a rotinas mais simples em que a solução (ou a sua aproximação) já se encontra à partida disponível em todas as posições do domínio espacial definidas pela malha de nível máximo. Assim, a utilização das rotinas *m* implica o acesso a uma expressão analítica da função discretizada, ou uma reconstrução prévia do perfil para todas as posições da malha de nível mais elevado (N_x, N_y) através de operações sucessivas e intensivas de interpolação. Tal facto pode exigir esforços de cálculo significativos, já que, se por exemplo $N_x = N_y = 10$, seria necessário avaliar os valores discretos da solução em $(2^{10} + 1)(2^{10} + 1) = 1050625$ nodos, o que é manifestamente excessivo.

Por outro lado, as versões *i* possuem um esquema interpolativo associado que permite a estimativa da solução em posições não anteriormente activadas, à medida que esta se revele necessária, dispensando a reconstrução prévia do perfil discreto até ao nível máximo de resolução.

Deste modo, opta-se por aplicar uma estratégia de geração de malha do tipo *m* nas condições iniciais de arranque do procedimento MOL de integração (passo 2 do algoritmo). Por outro lado, usam-se rotinas do tipo *i* para a geração de novas malhas adaptativas nos instantes temporais intermédios, localizados entre dois passos de integração numérica (passo 6 do algoritmo).

O critério C12 é apenas usado na sua versão *m*, já que se baseia numa pesquisa e activação nodal direccionada sequenciada realizada através da aplicação dos critérios C1 ou C2, cuja progressão no sistema hierárquico de malhas diádicas é muito semelhante à adoptada pelos critérios do tipo C32 e genericamente representada na Figura 3.16 (vd. Figura 3.20). De facto, parte-se da malha de nível mínimo (M_x, M_y) activada por defeito (que corresponde ao nível de refinamento mínimo, onde a disponibilidade da solução está à partida garantida) e incrementa-se sucessivamente até ao nível (N_x, N_y) . No entanto, ao contrário de C32, a estrutura do critério C12 aplica uma análise 1D correspondente à rotina de colocação nodal *gridgen11*, o que implica uma análise de todos os nodos até à malha de nível máximo e, deste modo, torna aconselhável o recurso a somente uma versão *m* do algoritmo.

No que diz respeito ao critério C42, a estratégia de navegação no sistema de malhas diádicas é semelhante à dos critérios C12 e C32 (vd. Figura 3.16), mas agora a estratégia de colocação nodal 1D está associada à rotina *gridgen22* (ou *gridgen82* para a versão *i*) equivalente à rotina *gridgen21*, que apenas analisa a verificação de critérios de refinamento em nodos previamente activos (vd. Tabela 3.3).

Por outro lado, no critério C52 adopta-se uma estratégia de sequenciação da análise das malhas 1D algo diferente. Agora efectuam-se pesquisas direccionais, primeiro em x , com um varrimento sequencial para todos os domínios 1D de nível de resolução máximo com y constante, seguido de pesquisas em y , com um varrimento de todos os x 's igualmente de nível máximo. Em cada pesquisa 1D, aplica-se uma versão da rotina de colocação nodal *gridgen11* (vd. Tabela 3.3), o que implica que na sua versão m o procedimento tenha de analisar todos os nodos da malha 2D de máxima resolução. No entanto, a versão C52i limita-se a pesquisar domínios 1D com nodos previamente activados, utilizando a malha discreta da integração anterior como suporte para a construção da malha seguinte. As pesquisas individuais são realizadas através do procedimento usual de incremento no nível de resolução sobre um conjunto de malhas diádicas estritamente 1D (*gridgen42* ou *gridgen 62*).

Após a detecção e activação de nodos internos (não aplicável no caso dos critérios C52), o último passo dos algoritmos de colocação nodal em cada nível de resolução consiste numa activação dos nodos fronteira de nível superior a (M_x, M_y) , que se situam nas extremidades das malhas 1D direccionais (quer em x como em y), que possuam pelo menos um nodo activo.

Por outro lado, é necessário definir um integrador ODE adequado para a integração do sistema de equações ordinários (passo 4 do algoritmo) construído através do processo de discretização realizado sobre a malha adaptativa. Assim como no caso 1D discutido anteriormente, o esquema de discretização espacial pode ser baseado quer em procedimentos FD como em métodos de aproximação HRS. No caso particular de estimativas diferenciais do tipo FD, opta-se por impor uma relação entre a estratégia específica escolhida para o critério de geração de malha (igualmente do tipo FD) e o esquema de estimativa de derivadas.

Adicionalmente, como os integradores ODE usados são projectados de forma a tratarem vectores unidimensionais que representam o conjunto de variáveis dependentes discretizadas do problema, torna-se necessário desenvolver um procedimento que transforme o modelo discreto 2D numa versão 1D (\mathbf{u}), mantendo a informação relevante acerca do posicionamento de cada elemento de \mathbf{u} no domínio 2D (passo 3 do algoritmo). Após cada passo de integração temporal, o formato 2D do problema é restaurado a partir do problema ODE 1D, de modo a que uma nova malha possa ser gerada (passo 5 do algoritmo).

No Anexo C são resumidamente descritos alguns integradores ODE relevantes, nomeadamente o integrador DASSL (Differential-Algebraic System Solver), e a rotina RKF45.

Por outro lado, descrevem-se no Anexo B os programas implementados em FORTRAN, desenvolvidos para a execução dos métodos numéricos de resolução de modelos diferenciais 2D discutidos acima.

REFERÊNCIAS

1. B. Fornberg (1988) "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids", *Math. Comput.*, **51** (184), pp. 699-706.

2. B. Fornberg (1992) "Fast generation of weights in finite difference formulas", in *Recent Developments in Numerical Methods and Software for ODEs/DAEs/PDEs*, (G.D. Byrne, W.E. Schiesser, eds.), World Scientific, Singapore, pp. 97-124.
3. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method", *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
4. M.S. Darwish, F. Moukalled (1994) "Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes", *Numer. Heat Transfer, Part B*, **26** (1), pp. 79-96.
5. B.P. Leonard (1988) "Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **8** (10), pp. 1291-1318.
6. M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho (2003) "A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **41** (1), pp. 47-75.
7. A. Harten (1997) "High resolution schemes for hyperbolic conservation laws", *J. Comput. Phys.*, **135** (2), pp. 260-278.
8. P.H. Gaskell, A.K.C. Lau (1988) "Curvature compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **8** (6), pp. 617-641.
9. B. van Leer (1974) "Towards the ultimate conservative difference scheme, II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme", *J. Comput. Phys.*, **14** (4), pp. 361-370.
10. B. Song, G.R. Liu, K.Y. Lam, R.S. Anamo (2000) "On a higher-order bounded discretization scheme", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **32** (7), pp. 881-897.
11. H. Jasak, H.G. Weller, A.D. Gosman (1999) "High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **31** (2), pp. 431-449.
12. P.L. Roe (1985) "Some contributions to the modelling of discontinuous flows", in *Large Scale Computations in Fluid Mechanics: Pt. 2.*, in *Lectures in Applied Mathematics – Vol. 22* (E. Engquist, S. Osher, R.J.C. Sommerville, eds.), American Mathematical Society, Providence, pp. 163-193.
13. B.P. Leonard (1991) "The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection", *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, **88** (1), pp. 17-74.
14. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.
15. L.R. Petzold (1982) *A description of DASSL: a differential/algebraic system solver*, Sandia Tech. Rep. **82-8637**.
16. E. Fehlberg (1969) *Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control*, NASA Tech. Rep. **R-315**.

4. MODELOS DE TESTE UNIDIMENSIONAIS

No presente capítulo apresentam-se os resultados obtidos através da implementação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 para modelos de teste unidimensionais. Numa primeira fase, verifica-se o desempenho dos métodos de colocação nodal e geração de malha para funções de teste unidimensionais. Posteriormente, testa-se o algoritmo de resolução de modelos diferenciais unidimensionais, incluindo o método de geração de malha adaptativa referido inicialmente.

4.1 GERAÇÃO DE MALHAS UNIDIMENSIONAIS

A primeira fase do teste do desempenho dos algoritmos numéricos desenvolvidos no presente trabalho consiste na verificação da sua capacidade de geração de malhas adequadas à representação das características principais de funções unidimensionais que exibam peculiaridades problemáticas como descontinuidades ou perfis abruptos. Todas as simulações foram realizadas com recurso à estratégia de geração de malhas adaptativas *gridgen11* com aproximações FD centradas de cinco nodos.

Deste modo, selecciona-se como primeira função unidimensional testada, uma função degrau negativo que exhibe uma descontinuidade localizada na posição central ($x = 0.5$) de um intervalo $[0,1]$:

$$\begin{cases} u(x) = 1, & 0 \leq x < 0.5 \\ u(x) = 0, & 0.5 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

A implementação do algoritmo de geração de malha descrito na secção 3.5.1, com os parâmetros da Tabela 4.1, proporciona os resultados resumidos na Figura 4.1.

Tabela 4.1 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função degrau.

Critério	M	N	Ordem da Derivada	ε_1	ε_2
C1	4	12	1	0.1	0.1

Deste modo, a aplicação do critério de colocação nodal C1 (baseado essencialmente na captura de oscilações artificiais no perfil diferencial aproximado por diferenças finitas), a uma aproximação FD da primeira derivada da solução, com as tolerâncias ε_1 e ε_2 fixadas em 0.1, e sobre um conjunto de malhas diádicas, cujo nível varia entre 4 e 12, possibilita a geração da malha representada na Figura 4.1. É notório que o algoritmo de colocação consegue lidar satisfatoriamente com a detecção da descontinuidade localizada na abcissa 0.5, colocando nodos de nível crescente (até ao valor máximo de 12) na vizinhança da perturbação de forma a que os seus vértices possam ser representados com uma exactidão satisfatória. De facto, constata-se que a proximidade à descontinuidade impõe a colocação sucessiva de nodos de nível mais elevado. Por outro lado, as restantes zonas do domínio, onde a actividade da função é praticamente nula são correctamente simuladas de forma discreta pela malha de ordem mais reduzida ($M = 4$).

A atribuição de um nível mínimo ao conjunto de malhas base que constitui o suporte da malha global adaptativa, assegura que mesmo as zonas de menor actividade da função, sejam representadas de forma discreta por uma malha suficientemente fina,

sem uma esparsidade excessiva, que poderia introduzir dificuldades na sua posterior aplicação no contexto de uma integração numérica.

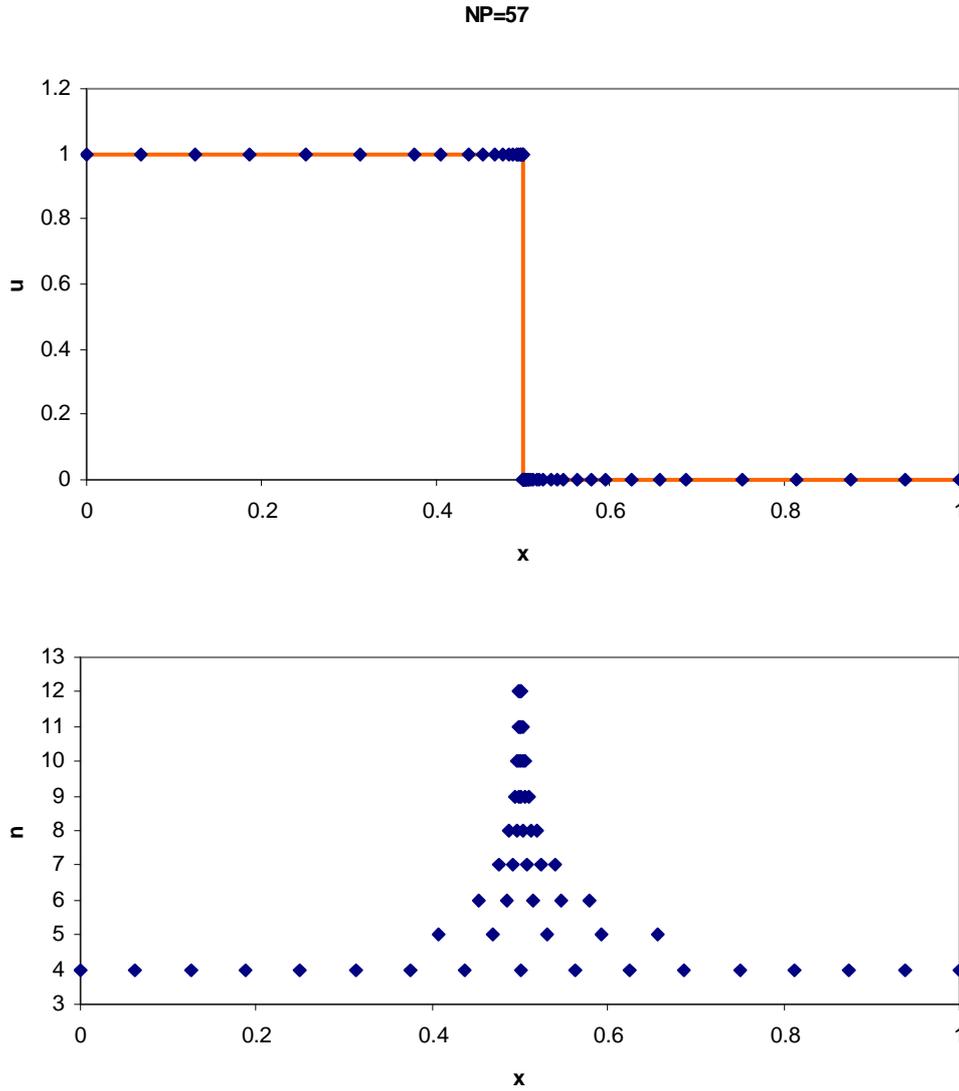


Figura 4.1 Geração de malha unidimensional para a função degrau negativo.

Assim, conclui-se que o algoritmo de colocação gera uma malha com 57 nodos (56 intervalos) que representa satisfatoriamente as características essenciais da função degrau discretizada.

Testou-se em seguida o desempenho do algoritmo no caso de uma função contínua, mas não continuamente diferenciável como [1],

$$u(x) = |x + 0.04|, \tag{4.2}$$

para $x \in [-1,1]$. Esta função, aqui designada por corner, exibe uma descontinuidade na primeira derivada localizada em $x = -0.04$, e uma evolução linear no domínio restante.

Implementa-se o procedimento de geração de malha, tendo em conta os parâmetros apresentados na tabela seguinte.

Tabela 4.2 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função corner.

Critério	M	N	Ordem da Derivada	ϵ_1	ϵ_2
C2	4	12	1	0.01	0.01

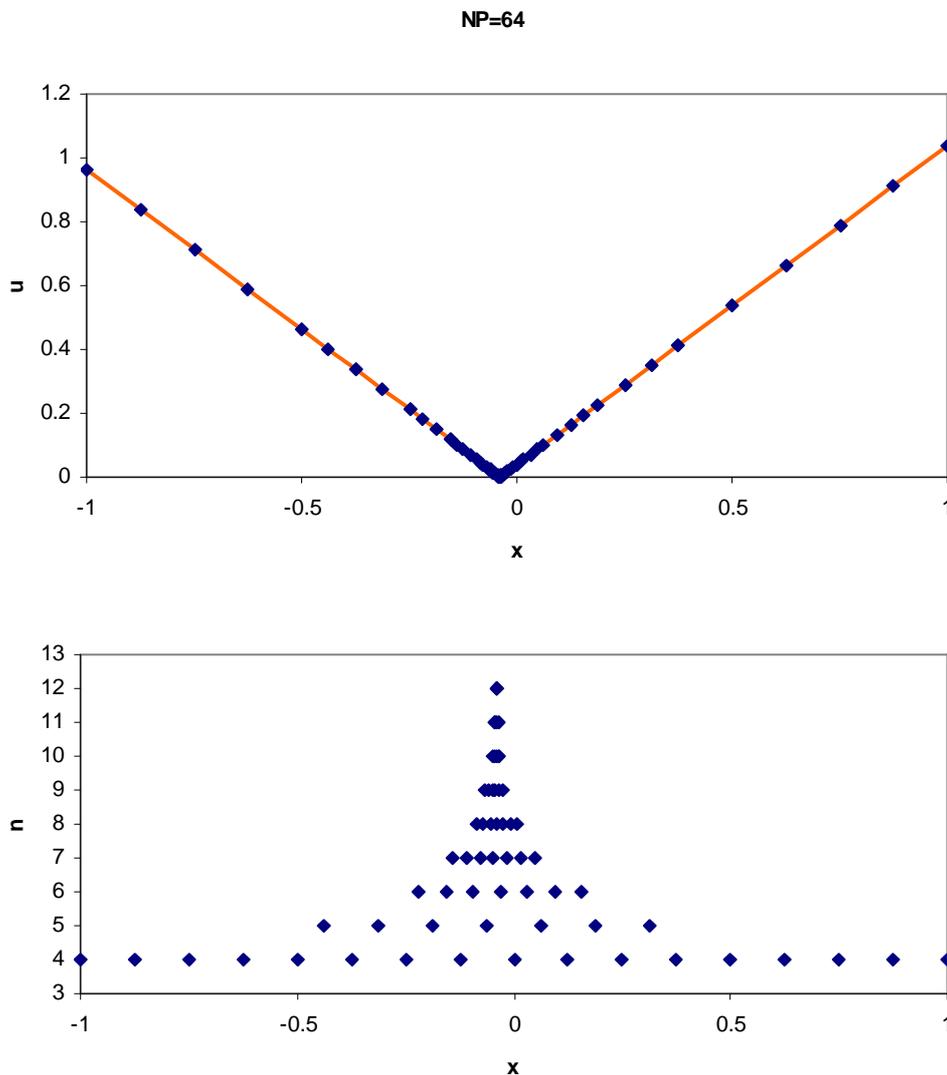


Figura 4.2 Geração de malha unidimensional para a função corner.

Observa-se novamente uma detecção notória da descontinuidade e um refinamento sucessivo na sua vizinhança até ao nível máximo admissível (vd. Figura 4.2). Nas regiões restantes do domínio, onde a evolução da função é suave, esta é satisfatoriamente representada pela malha mais esparsa. Globalmente, a função é aproximada numericamente sobre uma malha com somente 64 nodos.

Pretende-se testar igualmente a eficácia do algoritmo de colocação para lidar com uma função que desenvolva um perfil assaz abrupto, ou seja, que exiba gradientes localizados extremamente elevados. No caso presente, esta característica é gerada pela existência de um operador de tangente hiperbólica[1]:

$$u(x) = \tanh(60x - 0.01). \tag{4.3}$$

A função é definida no intervalo $[-1,1]$ e apresenta uma frente abrupta centrada na posição $x = 0$. O esquema utiliza os parâmetros resumidos na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função TGH.

Critério	M	N	Ordem da Derivada	ε_1	ε_2
C1 ou C2	4	12	1	0.1	0.1

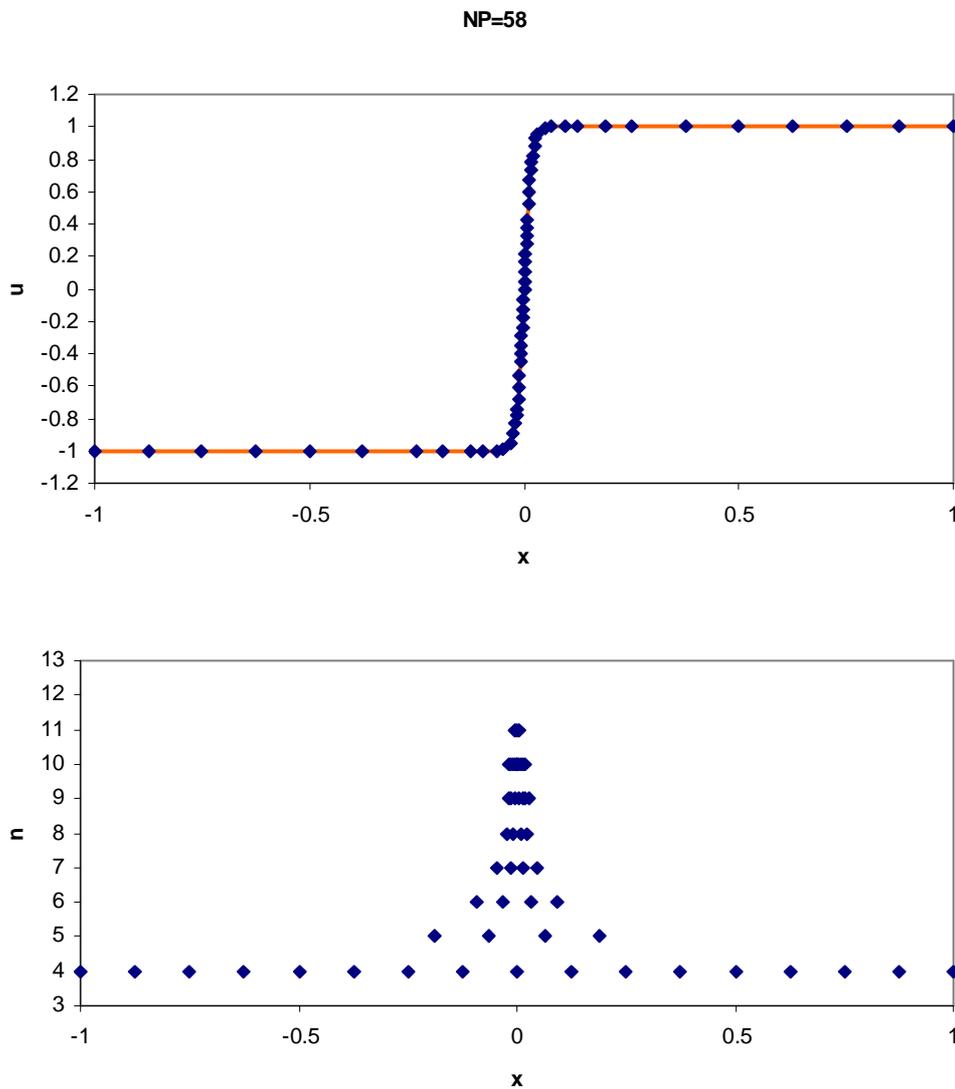


Figura 4.3 Geração de malha unidimensional para a função TGH (critério C1).

Verifica-se de novo a capacidade do algoritmo de colocação associado ao critério C1 de detectar a frente problemática e refinar a malha na região adjacente de modo a simular adequadamente quer o perfil abrupto e a curvatura dos seus contornos, como as duas zonas planas que o rodeiam (vd. Figura 4.3). Deste modo, a função é representada de uma forma discreta por uma malha com apenas 58 nodos.

A aplicação do critério C2 conduz a resultados semelhantes aos observados para o caso anterior (vd. Figura 4.4). Verifica-se novamente a mesma capacidade de identificação da frente, de refinamento na zona abrupta e de simulação da curvatura das extremidades. No entanto, manifesta-se uma maior sensibilidade do critério C2 em relação a C1 (em condições de implementação equivalentes), necessitando de atingir um maior nível de refinamento para a representação do declive acentuado da função discretizada.

Tabela 4.4 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função de Runge.

Critério	M	N	Ordem da Derivada	ϵ_1	ϵ_2
C1 ou C2	4	10	1	0.05	0.05

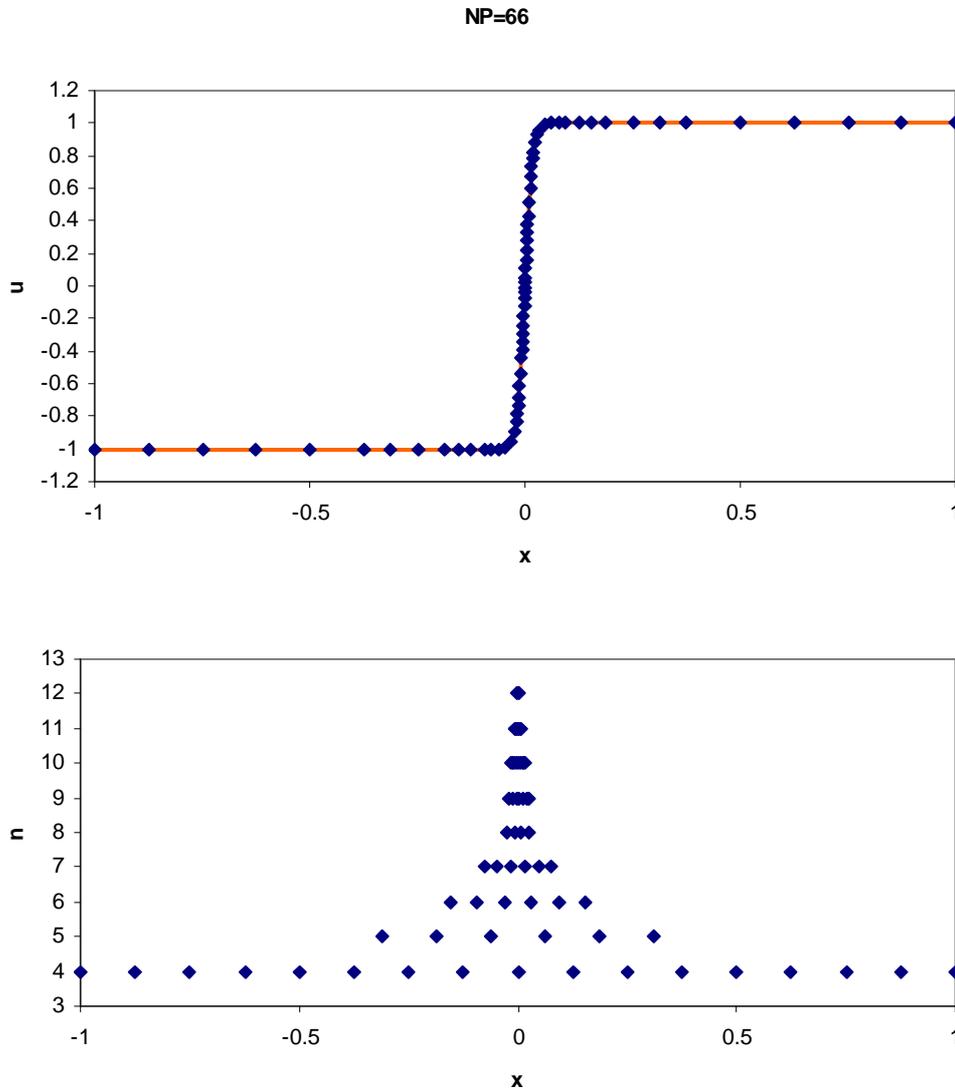


Figura 4.4 Geração de malha unidimensional para a função TGH (critério C2).

Testa-se agora o desempenho do algoritmo de colocação nodal no caso da função de Runge[1], definida sobre o intervalo $[-1,1]$:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{25x^2 + 1}} \tag{4.4}$$

Neste caso, pretende-se aplicar o procedimento de discretização a uma função que representa uma onda relativamente suave que se estende pela quase totalidade do domínio.

Na Figura 4.5 apresentam-se os resultados obtidos através de uma simulação implementada com os parâmetros da Tabela 4.4 (para o critério C1). Consta-se que o algoritmo manifesta uma capacidade notória de simular numericamente a função, construindo uma malha que cobre satisfatoriamente o domínio, representando de

forma adequada a curvatura da onda, através de um refinamento proporcional ao gradiente local da função. De facto, verifica-se uma distribuição simétrica de nodos de nível crescente, consentânea com a própria natureza simétrica da função. A malha global gerada contém 63 nodos.

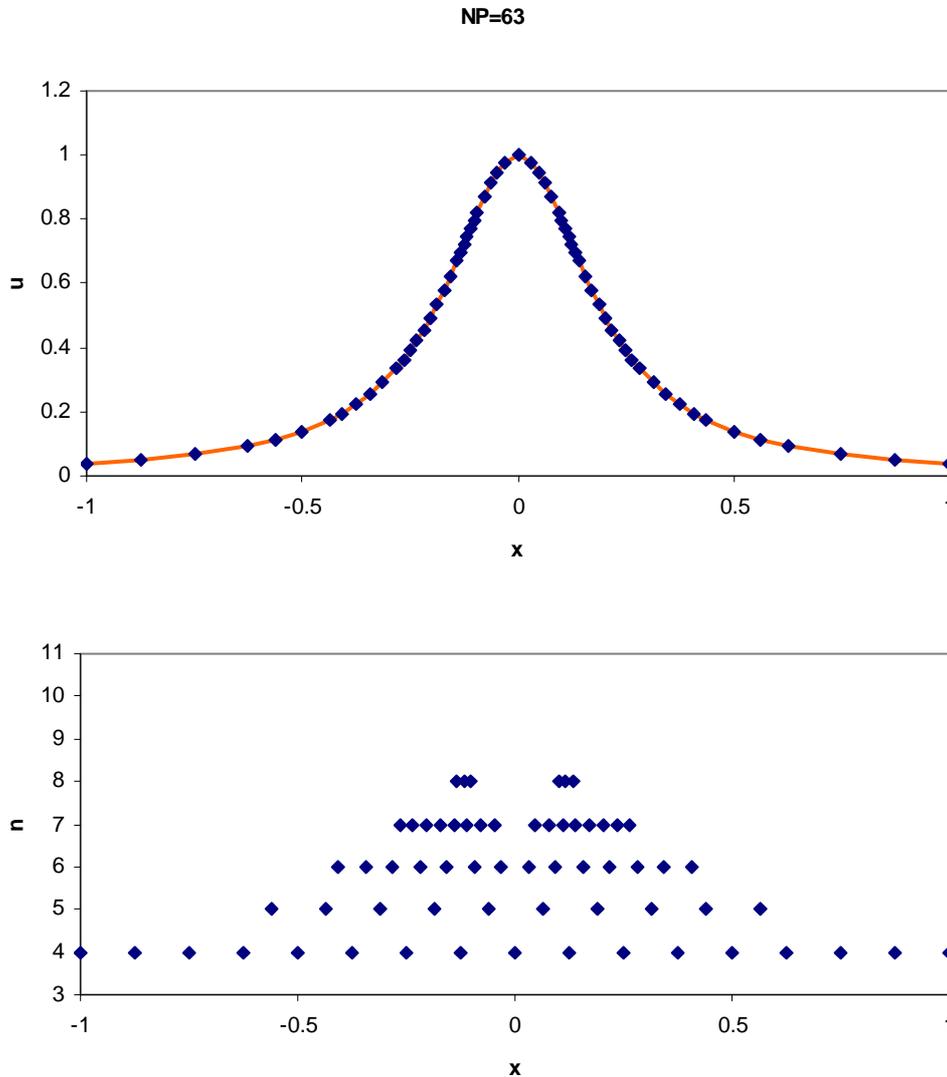


Figura 4.5 Geração de malha unidimensional para a função de Runge (critério C1).

Por outro lado, a aplicação do critério C2 (mantendo todos os restantes parâmetros inalterados) proporciona a construção de uma malha semelhante à discutida anteriormente (vd. Figura 4.6). O critério C2 baseia-se fundamentalmente na detecção de variações bruscas no perfil diferencial da função aproximado por diferenças finitas. Constata-se um comportamento equivalente do algoritmo mas, ao contrário do observado no exemplo anterior, este não necessita de recorrer neste caso a refinamentos de nível tão elevado. De facto, a aplicação do critério C2 activa nodos de nível máximo 7 (ao contrário do observado no caso do critério C1 em que o nível de refinamento alcançado é de 8). Assim, a utilização do critério C2 permite a geração de uma malha global que representa apropriadamente as características principais do perfil da função discretizada, recorrendo a um menor número de nodos (57 em comparação com a malha de 63 nodos gerada pela aplicação do critério C1).

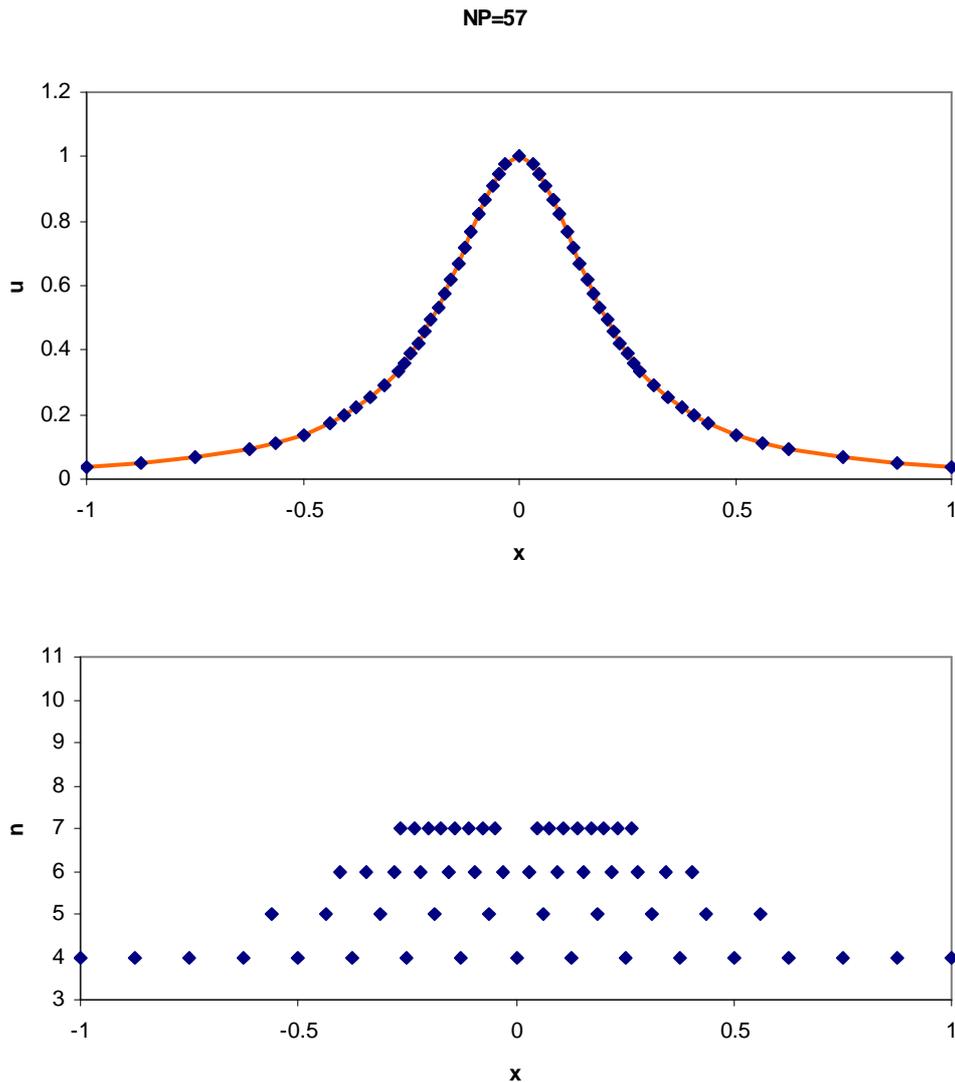


Figura 4.6 Geração de malha unidimensional para a função de Runge (critério C2).

Deste modo, conclui-se que ambos os critérios de colocação nodal, C1 e C2, associados ao algoritmo de geração de malha, se revelaram eficazes na discretização adequada de funções que exibam características problemáticas como descontinuidades, frentes abruptas e mesmo formatos de onda de curvatura relativamente suave.

4.2 RESOLUÇÃO DE MODELOS DIFERENCIAIS UNIDIMENSIONAIS

Após a verificação da capacidade dos algoritmos de colocação nodal para a representação de particularidades problemáticas em funções unidimensionais, está-se em condições de passar à fase seguinte, em que se pretende testar a performance do algoritmo de resolução numérica adaptativa STAT02 descrito na secção 3.5.1, acoplado ao procedimento de geração de malhas *gridgen11*. Nesta secção, apresentam-se os resultados numéricos obtidos pela aplicação desse algoritmo a modelos diferenciais de teste unidimensionais seleccionados, conhecidos por exibirem características complicadas, como a representação do movimento de ondas e frentes abruptas, ou o

desenvolvimento progressivo de frentes do mesmo tipo, de natureza estática ou dinâmica.

4.2.1 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO

Um exemplo clássico do tipo de problemas pretendido é a bem conhecida equação de advecção, um modelo diferencial extremamente simples composto por um termo de inércia, caracterizado pela taxa de variação temporal de uma extensidade u , que depende somente de um termo de advecção, associado a uma determinada velocidade de propagação. Este termo advectivo é usualmente aplicado para a simulação de transporte por convecção. Assim, é possível constatar na literatura uma notória ligação entre os termos “advecção” e “convecção”, frequentemente utilizados como sinónimos. Genericamente, a equação de advecção é uma PDE que representa o movimento de uma variável escalar conservada, que é advectada por um campo de velocidades conhecido.

Deste modo, considere-se um modelo advectivo unidimensional do tipo,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (4.5)$$

definido no domínio $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1$, e completada pela condição fronteira,

$$u(0,t) = 0 \quad (4.6)$$

e a condição inicial,

$$u(x,0) = \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\varepsilon}\right). \quad (4.7)$$

O interesse do modelo de advecção pura consiste no facto da sua solução representar simplesmente uma translação temporal de velocidade μ , no sentido positivo do eixo coordenado espacial x , do perfil espacial inicial, sem que ocorra a introdução de qualquer tipo de distorção. Deste modo, se a condição inicial estabelecida for uma função que exiba descontinuidades e/ou frentes ou ondas abruptas (como é o caso da equação 4.7; vd. Figura 4.7 e 4.8), a integração temporal corresponde a um deslocamento destes atributos ao longo do domínio, mantendo inalteradas as suas características abruptas, já que a ausência de termos difusivos não permite a suavização ou dispersão das frentes.

Fixem-se então os parâmetros $\mu = 1$, $x_0 = 0.5$ e $\varepsilon = 10^{-4}$. Neste caso, a condição inicial é uma função que contém uma onda extremamente estreita e abrupta centrada no ponto médio do domínio, $x = 0.5$. Esta onda vai propagar-se ao longo do tempo, sem distorção ou suavização, com velocidade unitária, até embater na fronteira direita, $x = 1$, e sair do domínio considerado.

Inicialmente testa-se a capacidade do algoritmo de colocação nodal de gerar uma malha apropriada à representação da onda através da aplicação dos critérios de colocação C1 e C2 e os dados resumidos na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação da advecção.

Colocação nodal	• critério	C1; C2	
	• ordem da derivada	1 e 2; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	1×10^{-2}	1×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M	N
		4	10
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	NA	
Interpolação		splines cúbicas; 9 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

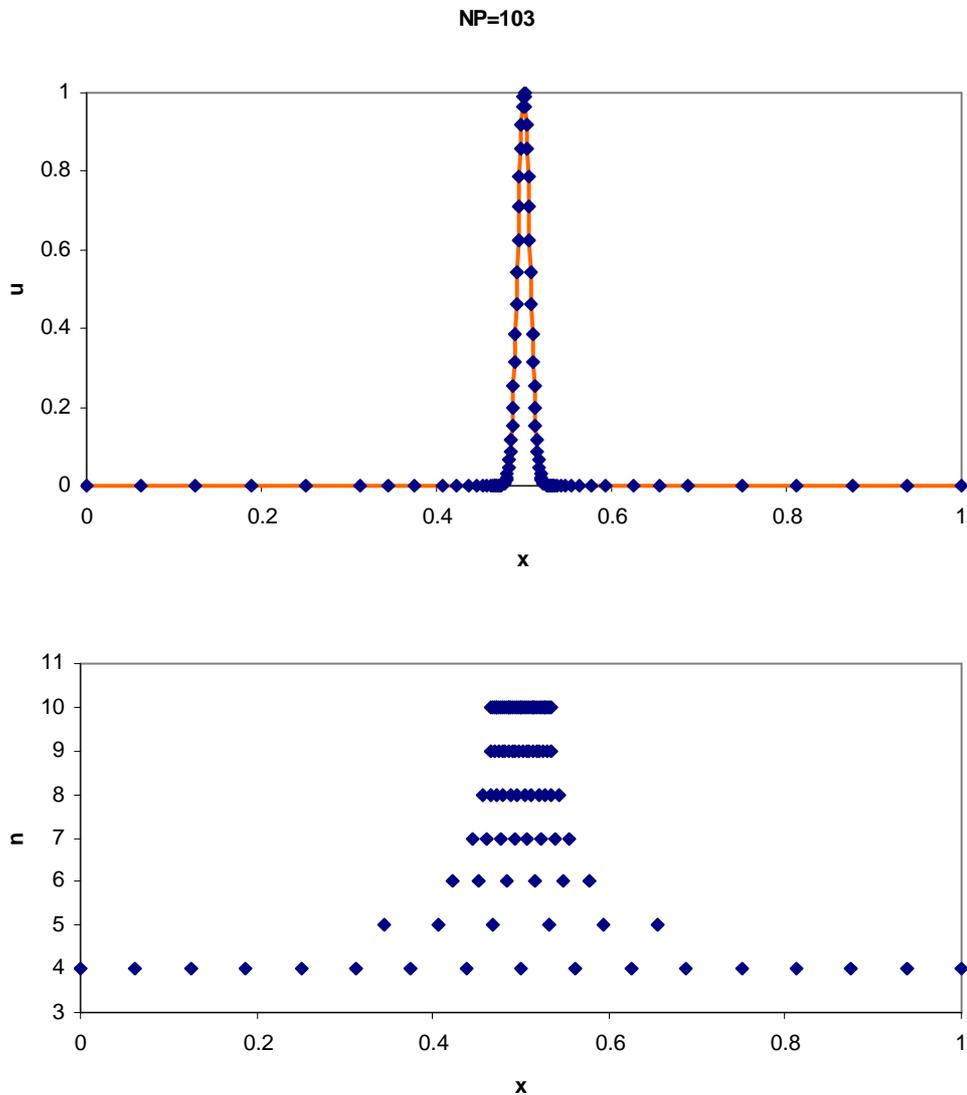


Figura 4.7 Perfil inicial e geração de malha para a equação de advecção (critério C1).

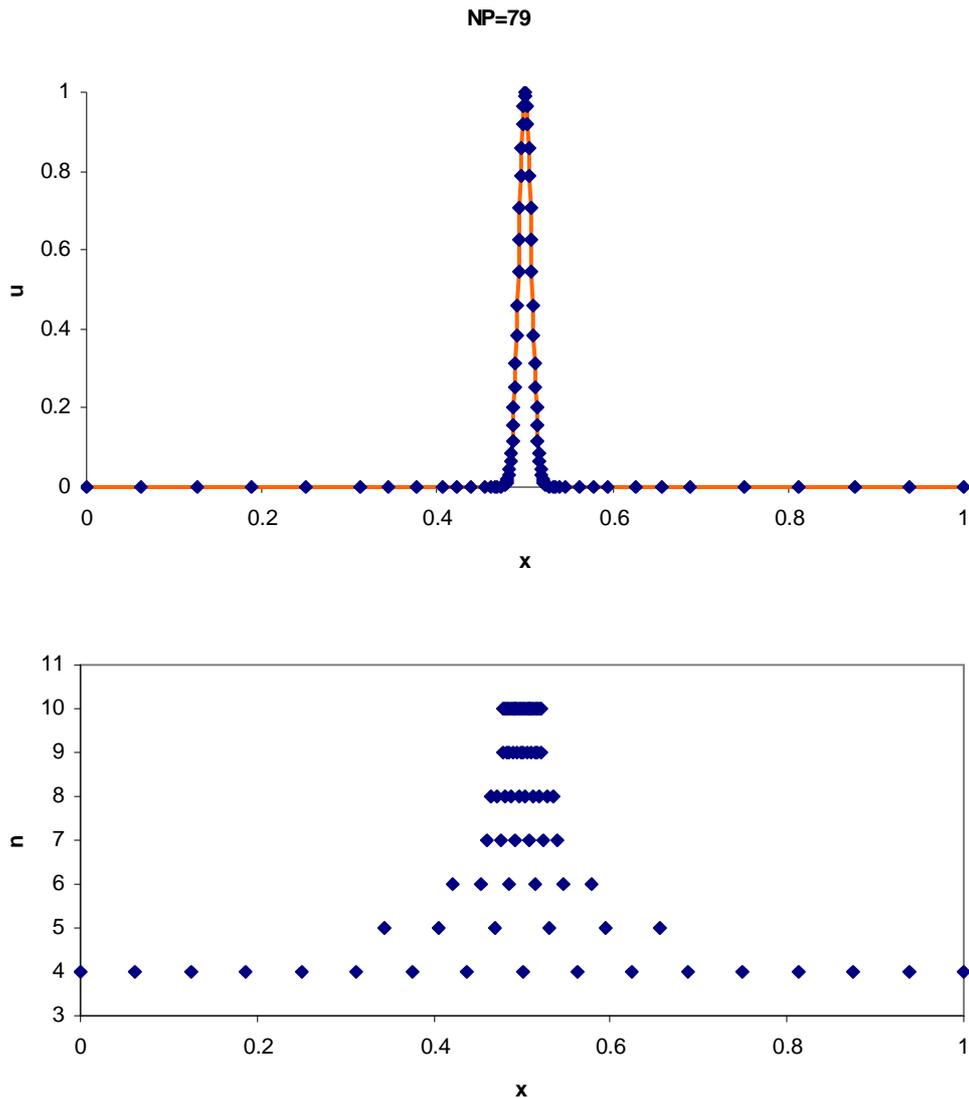


Figura 4.8 Perfil inicial e geração de malha para a equação de advecção (critério C2).

Testam-se os critérios de colocação nodal C1 e C2, com a análise FD da sequência 1.^a e 2.^a derivadas, e apenas da 1.^a derivada, respectivamente. As tolerâncias de colocação são fixadas em 0.01 para ambos os critérios. A malha adaptativa global é construída através da sobreposição de malhas diádicas uniformes parcialmente activadas, cujo nível varia entre 4 e 10. Usam-se aproximações de FD centradas com cinco nodos para a estimativa das derivadas espaciais, quer no processo de geração de malha como no de integração temporal. O esquema de interpolação baseia-se em splines cúbicas com nove nodos e a integração temporal é executada com o integrador DASSL, sendo as tolerâncias (absoluta e relativa) fixadas em 1×10^{-6} e ao passo é atribuído o valor de 1×10^{-3} .

Pela análise das Figuras 4.7 e 4.8 torna-se notório que o algoritmo de colocação se revela eficiente na geração de uma malha apropriada que se ajusta convenientemente aos atributos principais da função discretizada.

Verifica-se igualmente que a utilização do critério C1 tende a ser mais exigente que a do critério C2 (nas condições assumidas), obrigando a um maior refinamento da malha

na região da onda. Deste modo, a malha C1 apresenta um maior número total de nodos (103; vd. Figura 4.7) do que a malha C2 (79; vd. Figura 4.8). No entanto, convém salientar que a implementação C1 usou dois varrimentos sucessivos da função com consequente monitorização sequencial da aproximação FD da primeira e segunda derivada. Ao contrário, a implementação C2 apenas procedeu à geração da malha a partir da avaliação da aproximação da primeira derivada (vd. Tabela 4.5). Deste modo, não surpreende que o critério C1 aplicado em dose dupla tenha atingido graus de refinamento máximo ($N = 10$) numa zona mais alargada do que a correspondente ao critério C2, conduzindo a uma malha visivelmente mais densa. Todavia, qualquer uma das malhas referidas representa convenientemente a discretização da condição inicial (vd. equação 4.7) do modelo de advecção.

Nas Figuras 4.9 e 4.10 apresentam-se agora os resultados da implementação do algoritmo numérico adaptativo STAT02 ao modelo de advecção (vd. equações 4.5 a 4.7), adoptando os parâmetros resumidos na Tabela 4.5 com os critérios de colocação nodal C1 e C2, respectivamente. As integrações temporais são realizadas com recurso ao integrador ODE DASSL (vd. Anexo C).

Afigura-se óbvio que os resultados numéricos obtidos através das duas execuções referidas são bastante semelhantes e igualmente satisfatórios.

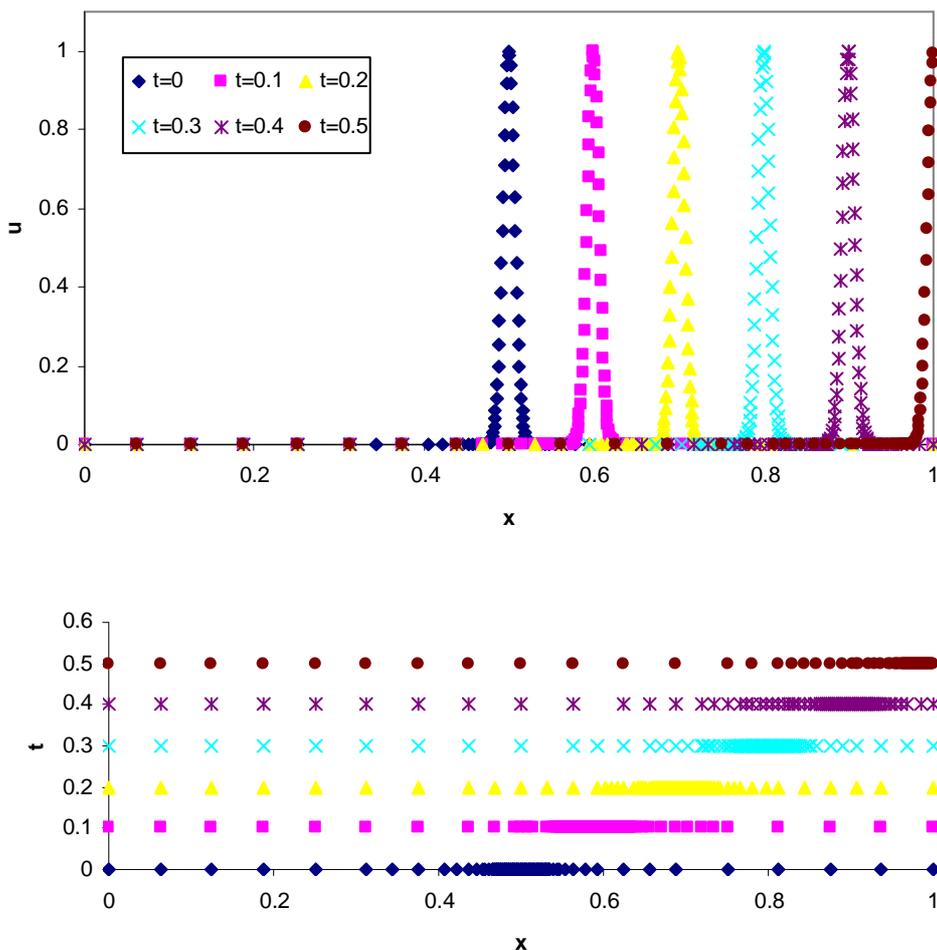


Figura 4.9 Implementação numérica para o caso da equação de advecção (critério C1).

Ambas as implementações demonstram a capacidade do algoritmo acompanhar a movimentação das ondas abruptas até ao seu embate na fronteira direita, situada na abcissa $x = 1$, sem se constatar a introdução de qualquer tipo de distorção ou perturbação numérica visível. Por outro lado, a escolha de um passo de integração temporal apropriado (vd. Tabela 4.5) proporcionou a execução das operações de readaptação da malha nos instantes adequados, possibilitando uma eficiente evolução temporal das zonas de refinamento intensivo.

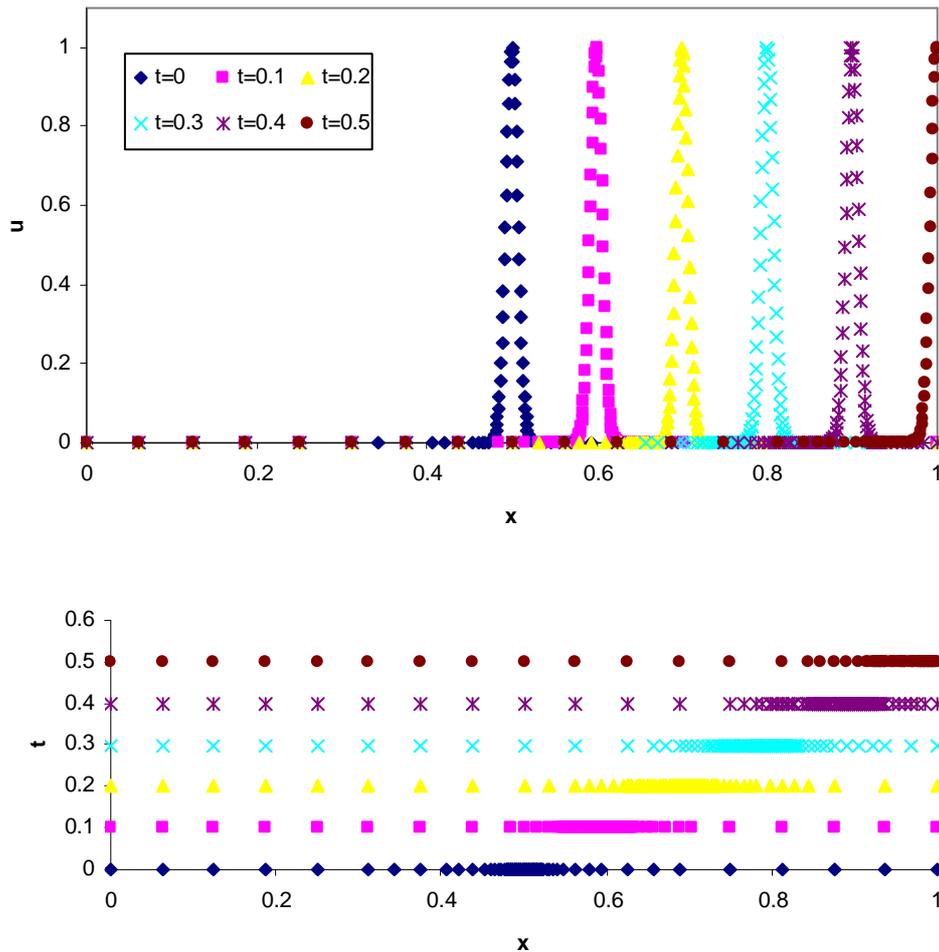


Figura 4.10 Implementação numérica para o caso da equação de advecção (critério C2).

Analisa-se igualmente a evolução da complexidade da malha adaptativa ao longo da integração numérica. Verifica-se que o procedimento adaptativo permite uma estabilização e manutenção do número de intervalos da malha em valores razoáveis inferiores a 120 durante toda a execução (vd. Figura 4.11), notando-se uma progressiva diminuição para tempos próximos de 0.5, que coincide com a saída da onda do domínio considerado.

Por outro lado é importante comparar os perfis numéricos com a solução analítica do modelo 4.5 a 4.7, dada por,

$$u_{anal}(x,t) = \exp\left(-\frac{[(x - \mu t) - x_0]^2}{\varepsilon}\right). \tag{4.8}$$

A exactidão é avaliada através do cálculo da norma-L₂ do erro da solução numérica em relação à solução exacta 4.8, definida por[2],

$$\|e\|_2 = \sqrt{\frac{1}{(b-a)} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)}{2} (erro(x_i)^2 + erro(x_{i+1})^2)}. \quad (4.9)$$

Verifica-se que os dados disponíveis da medida do erro calculado em todo o domínio espacial para um determinado instante de integração (vd. Figura 4.12) correspondem a valores bastante aceitáveis e de ordem de grandeza suficientemente reduzida (da ordem de 10⁻⁴).

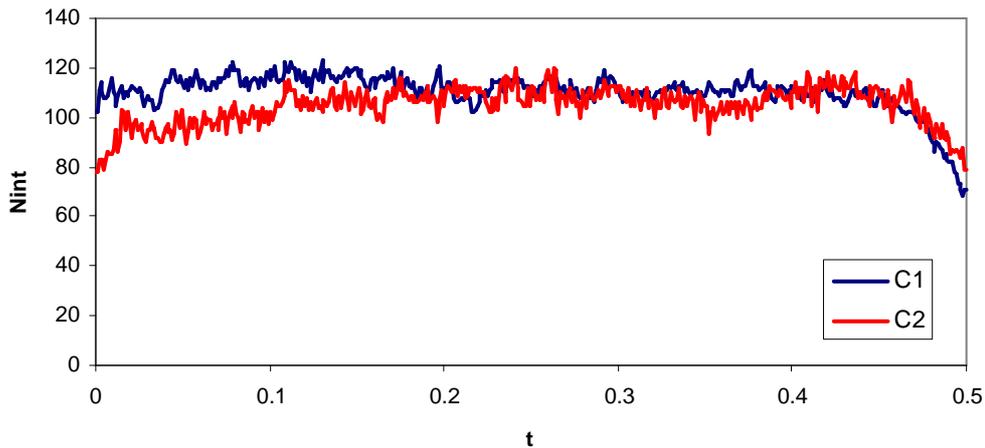


Figura 4.11 Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de advecção.

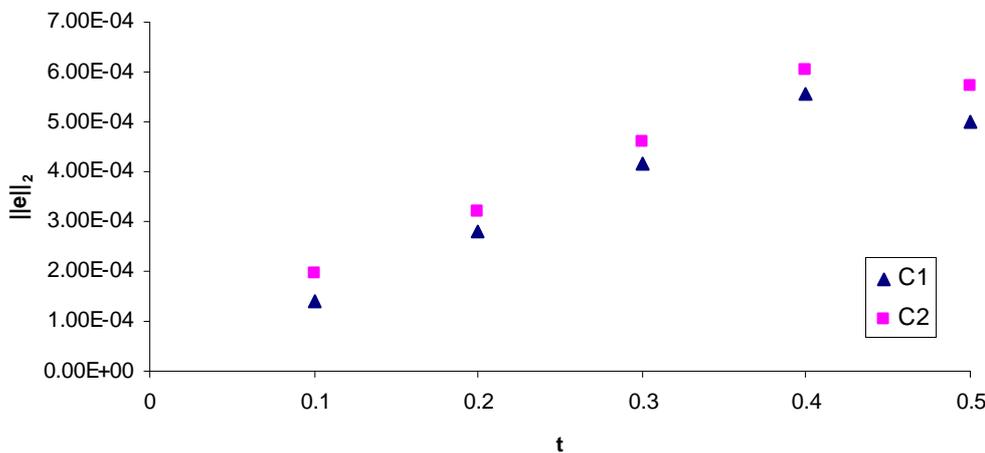


Figura 4.12 Erro médio obtido na implementação numérica para o caso da equação de advecção.

Deste modo, conclui-se que o desempenho do algoritmo STAT02 na resolução numérica deste modelo de advecção, definido para a simulação da propagação de uma onda abrupta, é satisfatório. Prova-se assim a sua capacidade para lidar com problemas diferenciais unidimensionais que coloquem dificuldades desta natureza. Para além disso, demonstra-se a capacidade dos critérios de colocação nodal

seleccionados de adaptarem convenientemente a malha discreta à evolução do esquema numérico de integração do tipo MOL.

4.2.2 EQUAÇÃO DE BURGERS UNIDIMENSIONAL

Em seguida efectua-se o teste do algoritmo numérico para resolução de PDE's para um problema modelo, extremamente comum na literatura especializada referente a métodos numéricos adaptativos de integração de equações diferenciais parciais: a equação de Burgers [1,3-6]. Esta equação diferencial parcial, que deve o seu nome ao físico holandês Johannes Martinus Burgers (1895-1981), é um modelo fundamental no campo da Mecânica de Fluidos. A equação de Burgers resulta da aplicação da equação de Navier-Stokes a um fluxo unidireccional sem gradiente de pressão[5]. Pode igualmente ser deduzida a partir da equação de Fokker-Planck. A sua natureza versátil permite a modelação de problemas tão distintos como os correspondentes a dinâmica de gases, dinâmica de líquidos em sólidos, ou fluxo de tráfego automóvel.

O modelo específico testado corresponde à equação geral de Burgers unidimensional, caracterizada pela presença de um termo difusivo, ou seja de um carácter parabólico de influência extremamente reduzida em relação ao termo dominante hiperbólico do tipo advectivo. A equação referente à situação limite puramente hiperbólica com o coeficiente de viscosidade ou difusivo $\nu = 0$, é designada por equação invíscida e consiste no caso mais simples de uma PDE hiperbólica não linear. Assim, tem-se a PDE,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (4.10)$$

em que $\nu \approx 0$, e $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq t \leq 10$; com as condições fronteira,

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad (4.11)$$

e a condição inicial,

$$u(x,0) = \sin(2\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x). \quad (4.12)$$

A solução deste problema consiste inicialmente numa curva sinusoidal que assume valores positivos em $x \in [0,0.58]$, correspondente à região esquerda do domínio espacial, e valores negativos no restante domínio referente à região direita deste. Como $\nu \approx 0$, o modelo é fundamentalmente hiperbólico revelando um comportamento semelhante a um modelo de advecção. No entanto, no caso particular da equação de Burgers, a função de fluxo é dada por $\phi = u^2/2$ e, deste modo, a solução u é advectada por si própria (vd. equação 4.10), ou seja, a velocidade de propagação em cada posição do domínio, $d\phi/du = u$, assume o próprio valor da solução. Neste sentido, à medida que a integração temporal avança, a parte positiva da curva sinusoidal, ou seja a onda positiva é projectada para a direita e a onda negativa é deslocada para a esquerda. Assim, as duas ondas acabam por coalescer numa frente centrada no zero da condição inicial, que se estreita progressivamente até se transformar numa frente abrupta cuja espessura é proporcional ao valor do coeficiente de difusão, ν . Deste modo, é trivial concluir que quanto menor for ν , mais hiperbólica será a PDE 4.10, mais estreita e consequentemente mais abrupta será a frente desenvolvida, e mais difícil será a integração numérica da equação referida. Depois de completamente formada a frente

abrupta ($t \approx 0.2$), esta inicia um movimento de deslocação no sentido positivo do eixo coordenado da variável independente x (porque a amplitude da onda positiva é superior à da onda negativa), conjugado com uma diminuição progressiva da amplitude, quer da secção positiva como da negativa. Este movimento culmina com o embate da onda na fronteira direita do domínio, $x = 1$. Nesta altura, a secção negativa da onda já se extinguiu completamente. Finalmente, observa-se a continuação do esvair da onda positiva, tendendo a solução progressivamente para um perfil nulo no domínio definido.

Desta forma, procede-se inicialmente à resolução numérica do problema 4.10 a 4.12 (com $\nu = 1 \times 10^{-3}$) pela aplicação do algoritmo numérico STAT02 com os parâmetros numéricos de implementação resumidos na Tabela 4.6. Testam-se os critérios de colocação nodal C1 e C2, com a análise FD da sequência 1.ª e 2.ª derivadas, e apenas da 1.ª derivada, respectivamente. As tolerâncias de colocação são fixadas em 1 para o critério C1 e 0.1 para o critério C2. A malha adaptativa global é construída através da sobreposição de malhas diádicas uniformes parcialmente activadas, de nível entre 4 e 10. Usam-se aproximações de FD centradas com cinco nodos para a estimativa das derivadas espaciais, sendo a derivada de segunda ordem avaliada por fórmulas FD directas. O esquema de interpolação baseia-se em splines cúbicas com sete nodos e a integração temporal é executada com a DASSL, sendo o passo fixado em 1×10^{-2} e as tolerâncias (absoluta e relativa) fixadas em 1×10^{-6} .

Tabela 4.6 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Burgers, para $\nu = 1 \times 10^{-3}$.

Colocação nodal	• critério	C1; C2	
	• ordem da derivada	1 e 2; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	1; 0.1	1; 0.1
Malhas	• diádicas	M	N
		4	10
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	directa	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-2}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

Os resultados numéricos obtidos são apresentados nas Figuras 4.13 e 4.14 para as implementações referentes à aplicação dos critérios C1 e C2, respectivamente. O caso específico analisado é caracterizado por um coeficiente difusivo relativamente pouco exigente ($\nu = 1 \times 10^{-3}$) e representa um exemplo de menor dificuldade de integração.

Através da análise das Figuras 4.13 e 4.14, verifica-se a obtenção de resultados semelhantes com a aplicação dos dois critérios estudados. De facto, no que concerne à capacidade de formação da frente, quer do declive abrupto, como da curvatura das extremidades, ambos os critérios revelam desempenhos equivalentes. No entanto, é notório que nas condições estabelecidas o critério C2 denota uma maior dificuldade na

reprodução de perfis mais suaves, já que demonstra uma visível incapacidade em formar o topo da curvatura do perfil correspondente a $t = 10$ (vd. Figura 4.14).

Conclui-se então que o algoritmo numérico de integração conjugado com os critérios de colocação C1 e C2 patenteia um desempenho bastante satisfatório na resolução de um modelo que desenvolve progressivamente frentes abruptas ou descontinuidades a partir de perfis iniciais suaves, já que se demonstra a sua capacidade de detecção, cobertura e acompanhamento dessas características problemáticas.

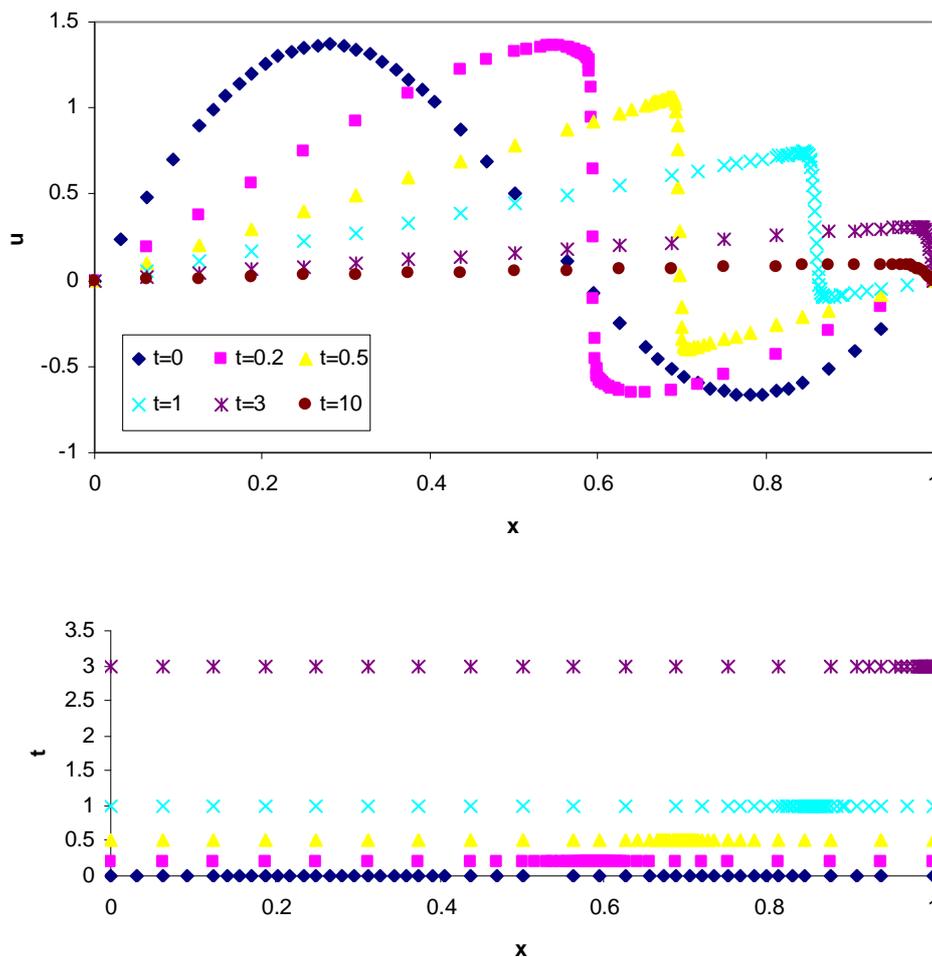


Figura 4.13 Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C1; $\nu = 1 \times 10^{-3}$).

De seguida, aumenta-se o nível de dificuldade do problema, diminuindo a influência do termo difusivo na equação 4.10 e conseqüentemente aumentando a sua natureza hiperbólico. Assim, reduz-se o valor de ν num factor de 10 para 1×10^{-4} .

Para a implementação da resolução desta segunda versão do modelo de Burgers, define-se o conjunto de parâmetros numéricos apresentados na Tabela 4.7. Agora, testa-se apenas o desempenho do critério de colocação nodal C1, associado a uma análise FD da sequência 1.^a e 2.^a derivadas. As tolerâncias de colocação nodal são fixadas em 1 e a malha adaptativa global é construída através da sobreposição de malhas diádicas uniformes parcialmente activadas, de nível entre 4 e 12. Usam-se novamente aproximações de FD centradas com cinco nodos e interpolações de splines

cúbicas com sete nodos. A integração temporal é executada com um passo de 2.5×10^{-3} e as tolerâncias do integrador DASSL são fixadas em 1×10^{-6} .

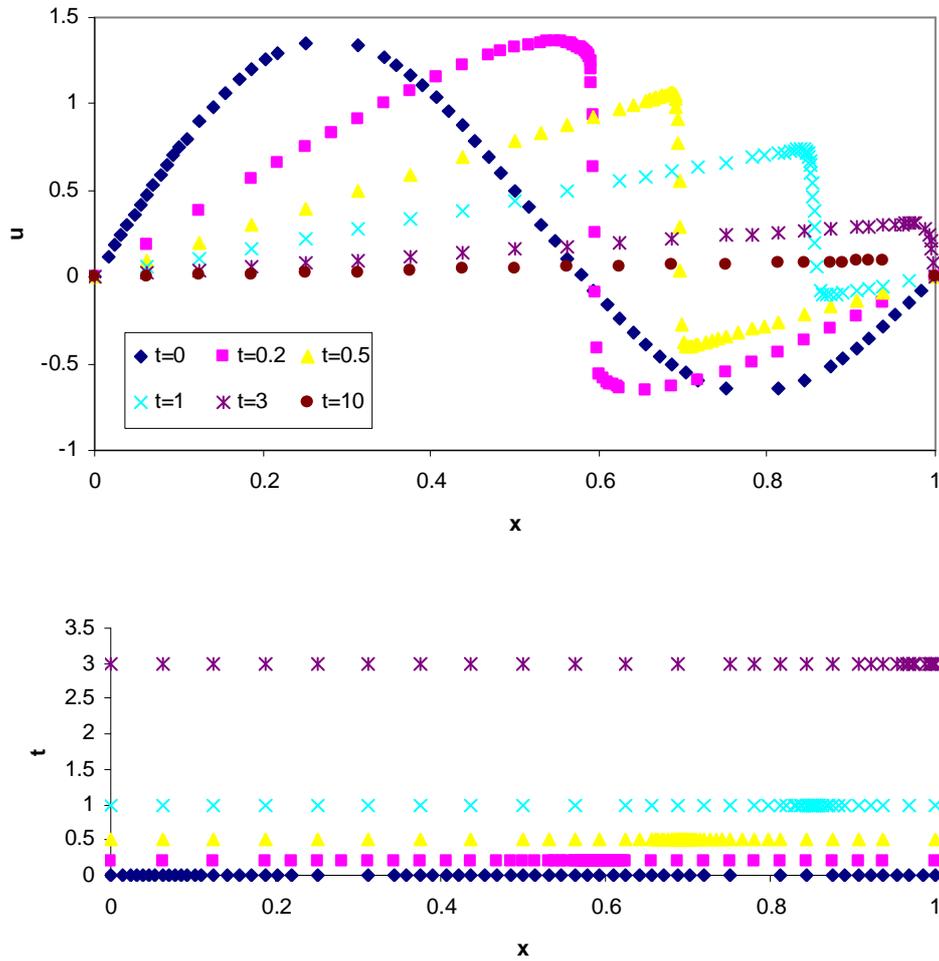


Figura 4.14 Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C2; $v = 1 \times 10^{-3}$).

Tabela 4.7 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Burgers, para $v = 1 \times 10^{-4}$.

Colocação nodal	• critério	C1	
	• ordem da derivada	1 e 2	
		ϵ_1	ϵ_2
Malhas	• tolerâncias	1	1
		M	N
	• diádicas	4	12
Discretização espacial		uniforme	
	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
Interpolação	• diferenciação ($n > 1$)	directa	
		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	2.5×10^{-3}	
		$ATOL$	$RTOL$
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

No que concerne às alterações efectuadas em relação à execução do caso anterior, destaca-se a necessidade do aumento do grau de resolução máximo admissível, que implica um decréscimo do tamanho da malha de nível superior ($N = 12$), de modo a que o algoritmo possa lidar com a redução significativa da espessura da frente formada (de um factor de 10). Por outro lado, a estabilização da evolução da integração temporal tornou necessária a diminuição do passo temporal ($\Delta t = 2.5 \times 10^{-3}$).

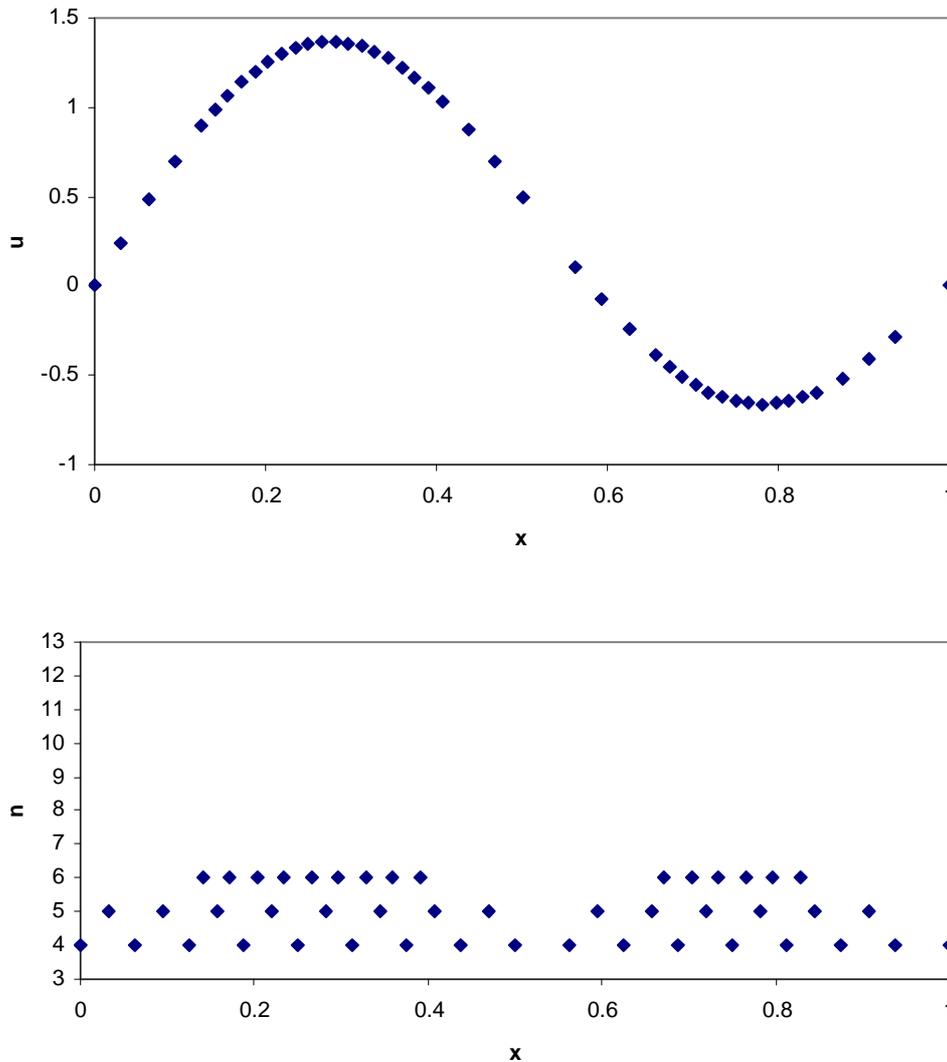


Figura 4.15 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $\nu = 1 \times 10^{-4}$) – instante inicial $t = 0$.

De forma a melhor ilustrar o comportamento do algoritmo adaptativo STAT02 na resolução numérica do modelo 4.10 a 4.12, com um coeficiente difusivo reduzido ($\nu = 1 \times 10^{-4}$), apresenta-se uma monitorização mais detalhada da evolução da solução numérica ao longo da respectiva integração temporal. Assim, o desempenho do algoritmo relativo à execução do caso presente é resumido nas Figuras 4.15 a 4.18.

Inicialmente, considere-se a geração da malha correspondente à condição inicial do problema (vd. Figura 4.15). Verifica-se uma representação muito satisfatória do perfil sinusoidal relativamente suave da função que não exige níveis de refinamento superiores a 6.

Posteriormente, visualiza-se o estado da solução numérica para $t = 0.2$, quando a frente abrupta já se encontra completamente formada (vd. Figura 4.16). Aqui constata-se uma mudança radical nas características da solução, em que é notória a existência de uma quasi-descontinuidade localizada na abcissa $x \approx 0.58$, que obriga a um refinamento agressivo na região do domínio onde esta se situa. No entanto, afigura-se óbvio que o algoritmo de refinamento manifesta uma capacidade considerável de detecção e de simulação desta peculiaridade problemática.

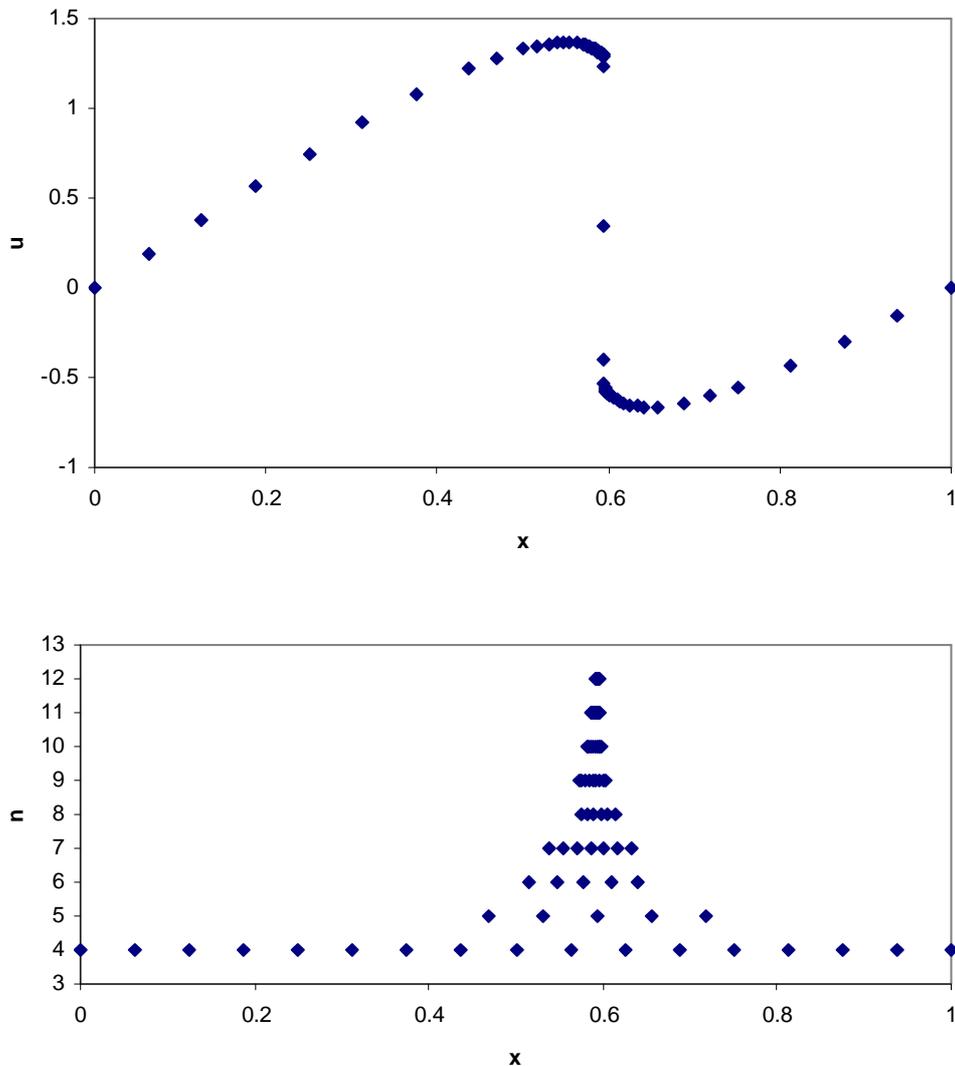


Figura 4.16 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $\nu = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 0.2$.

O esforço de adaptação é essencialmente dispendido na modelação da curvatura das duas extremidades (inferior e superior) da frente abrupta. De facto, esta é somente representada por 5 nodos. Todavia, dada a reduzida espessura da frente, o algoritmo é obrigado a recorrer a nodos do nível máximo permitido ($N = 12$) para a sua correcta representação.

Depois de formada e estabilizada, a frente abrupta inicia um movimento no sentido positivo do eixo coordenado da variável independente, x . Este deslocamento é perfeitamente notório quando se compara os perfis correspondentes aos instantes $t =$

0.2 e $t = 1$ (vd. Figura 4.17). Este último perfil de solução apresenta uma frente abrupta posicionada agora em $x \approx 0.85$. O algoritmo necessita novamente de elevar o nível de refinamento ao valor máximo admissível ($N = 12$) para a correcta representação da frente e das suas bordas. Constata-se igualmente um visível e esperado decréscimo na amplitude da frente. Por outro lado, as regiões do domínio onde a solução tem uma evolução suave são simuladas por nodos de nível mínimo ($M = 4$) como seria expectável.

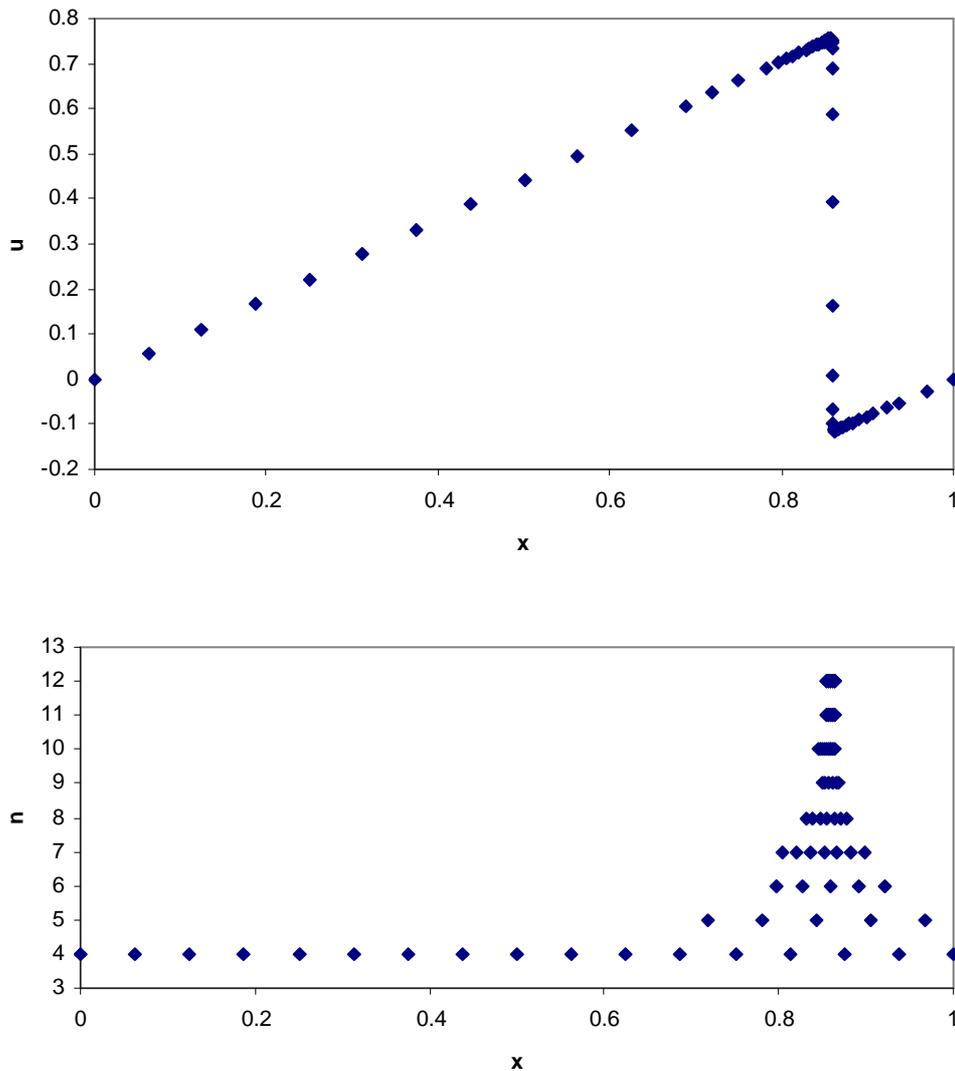


Figura 4.17 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $\nu = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 1$.

Finalmente, opta-se por apresentar na Figura 4.18, o perfil numérico obtido para um instante temporal consideravelmente mais avançado ($t = 5$). Neste caso, constata-se que a onda móvel já embateu na fronteira direita ($x = 1$), mantendo as suas características abruptas, agora potenciadas pela verificação da condição fronteira de Dirichlet nula especificada na referida fronteira (vd. equação 4.11). Observa-se de novo a capacidade do algoritmo de integração de lidar com o perfil abrupto centrado neste caso numa das extremidades do domínio, mantendo a esparsidade da malha nas

regiões restantes deste. Verifica-se também uma significativa redução da amplitude da onda propagada, reforçada pelo completo desaparecimento da sua secção negativa.

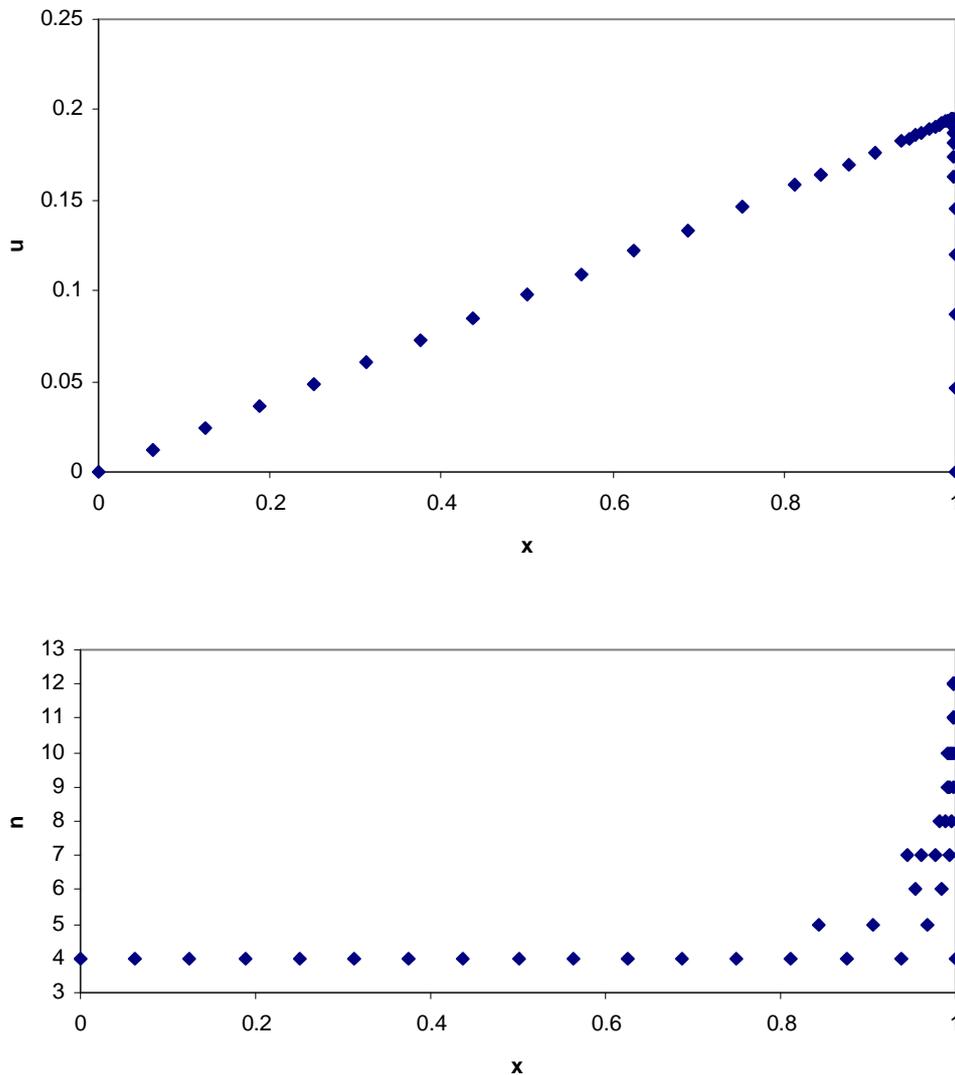


Figura 4.18 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Burgers (critério C1; $\nu = 1 \times 10^{-4}$) – instante $t = 5$.

Na Figura 4.19 resume-se num único gráfico, toda a implementação discutida anteriormente de forma mais detalhada. Aqui é evidente a evolução dos perfis espaciais ao longo da integração temporal, incluindo a formação da frente abrupta, o seu deslocamento e o seu lento desaparecimento após o embate com a fronteira do domínio.

Por outro lado apresenta-se na Figura 4.20 a evolução da dimensão da malha adaptativa para as três execuções referentes às duas versões da equação de Burgers estudadas. Através da análise desta figura, é visível a esperada maior exigência do modelo com $\nu = 1 \times 10^{-4}$, que necessita de malhas de dimensão significativamente maior para uma implementação eficaz do método, principalmente nas fases de formação e deslocamento da frente. Observa-se igualmente um abaixamento brusco e

uma progressiva estabilização da dimensão das malhas a partir do instante de embate da frente na fronteira direita.

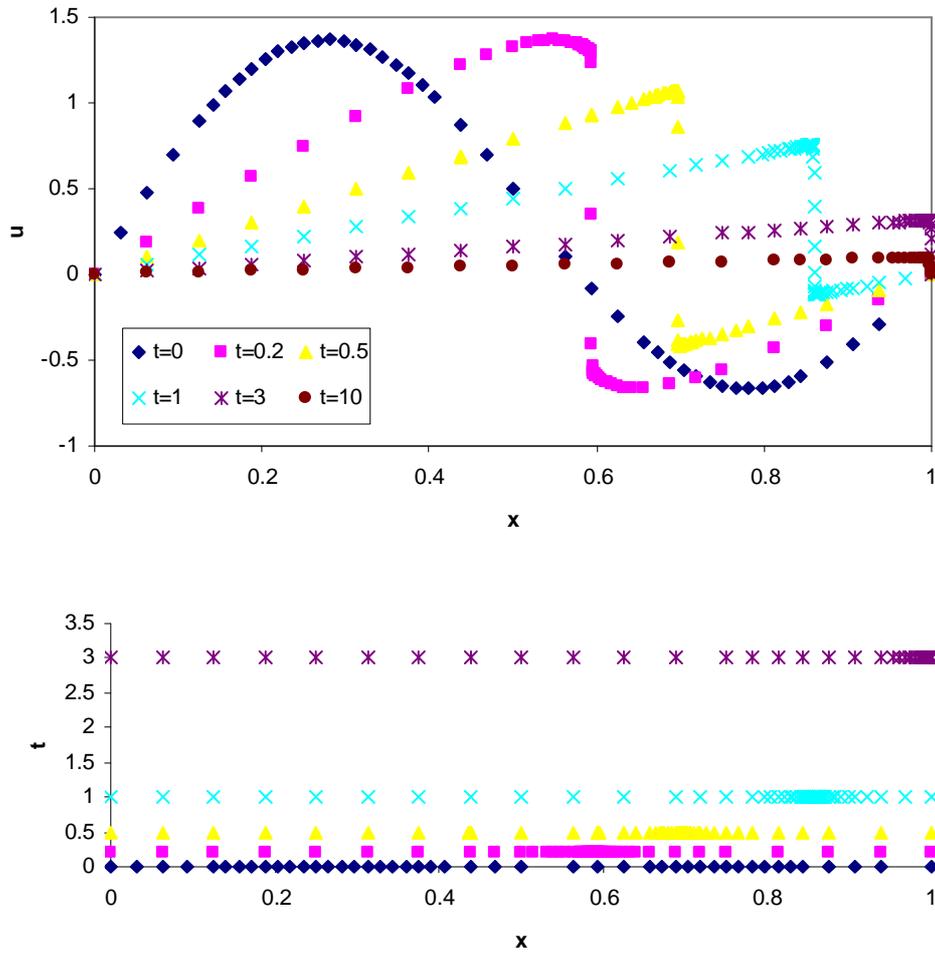


Figura 4.19 Implementação numérica para o caso da equação de Burgers (critério C1; $v = 1 \times 10^{-4}$).

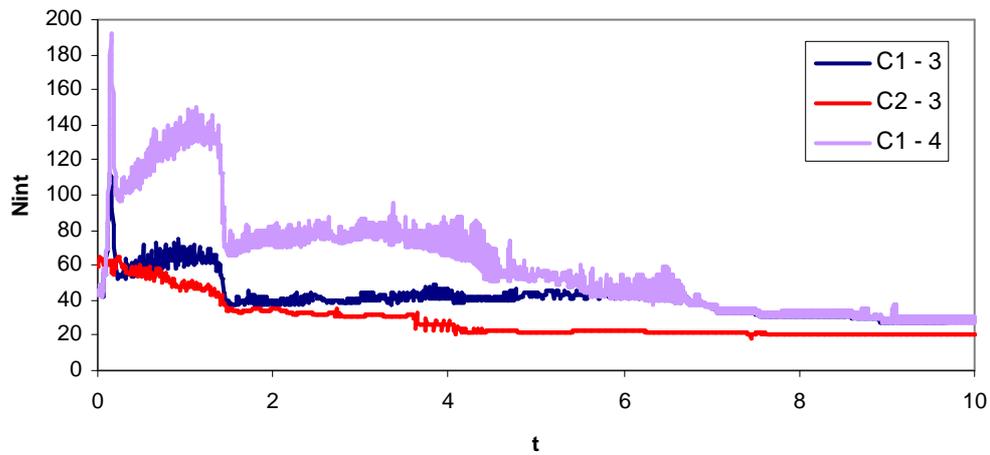


Figura 4.20 Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de Burgers.

Conclui-se então que o algoritmo adaptativo STAT02 revela um desempenho bastante satisfatório na resolução do exemplo estudado, caracterizado pela formação progressiva de perfis abruptos móveis a partir de perfis iniciais de solução suaves.

4.2.3 EQUAÇÃO DE ALLEN-CAHN

Agora, o objectivo consiste na resolução numérica da PDE denominada de Allen-Cahn, que adveio do trabalho de John Werner Cahn e Samuel M. Allen em 1975, sobre transições de fase em ligas de ferro, nomeadamente transições de ordem-desordem. Assim, tem-se uma versão da equação de Allen-Cahn, dada por[1,6],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u^2), \tag{4.13}$$

com $-1 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 10$; as condições fronteira,

$$u(\pm 1, t) = \pm 1, \tag{4.14}$$

e a condição inicial:

$$u(x, 0) = 0.6x + 0.4 \sin\left[\frac{\pi}{2}(x^2 - 3x - 1)\right]. \tag{4.15}$$

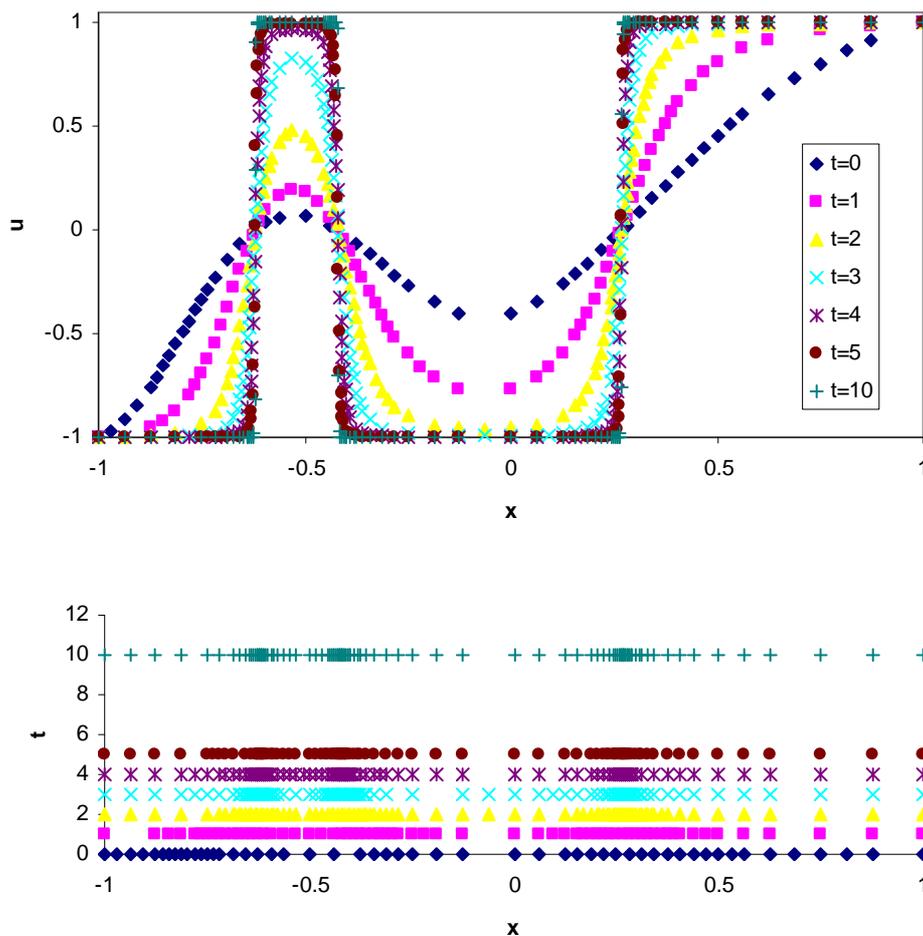


Figura 4.21 Implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1).

Tabela 4.8 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Allen-Cahn.

Colocação nodal	• critério	C1; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.1; 1	0.1; 1
Malhas	• diádicas	M	N
		4	10
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n>1$)	directa	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-2}	
		$ATOL$	$RTOL$
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

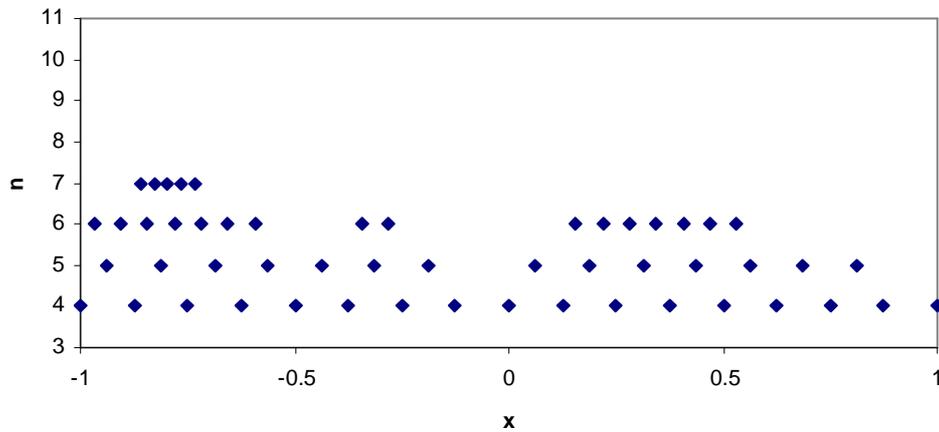
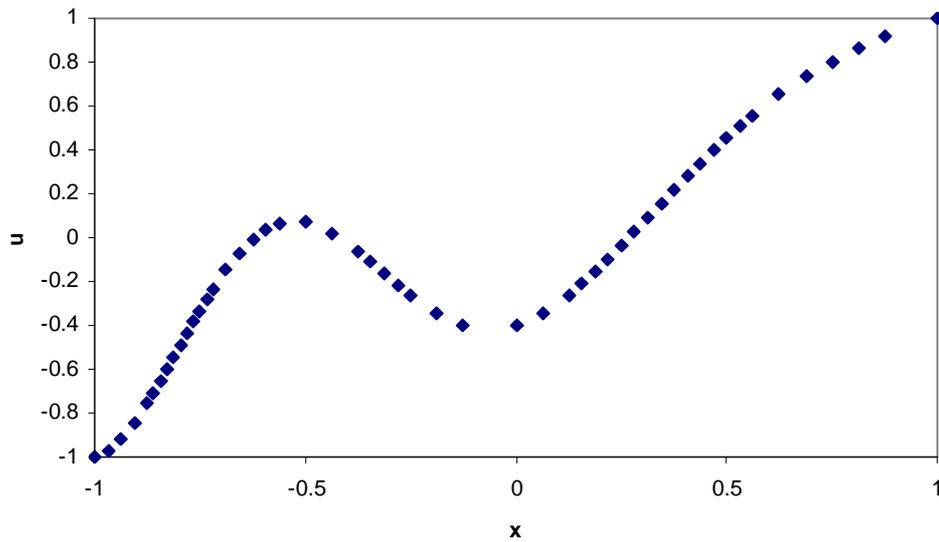


Figura 4.22 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante inicial $t = 0$.

Pretende-se resolver o problema apresentado com $\nu=10^{-6}$, e os parâmetros numéricos indicados na Tabela 4.8.

Verifica-se que partindo de uma solução inicial visivelmente suave, a integração temporal conduz ao desenvolvimento de três frentes abruptas (ou mesmo descontinuidades) que se posteriormente se mantêm estáticas. O resumo dos resultados numéricos obtidos pela aplicação do critério de colocação nodal C1 é agrupado na Figura 4.21. Nas Figuras 4.22 a 4.25 é possível observar de modo pormenorizado a evolução da solução descrita anteriormente.

Deste modo, atente-se primeiro ao perfil da Figura 4.22. Neste caso específico apresenta-se a função sinusoidal inicial que apresenta um comportamento suave que não exige grande esforço ao procedimento de colocação nodal. De facto, tomando como base uma malha diádica de nível 4, a representação discreta da função inicial é satisfatoriamente realizada por refinamentos que não excedem a colocação de nodos de nível 7.

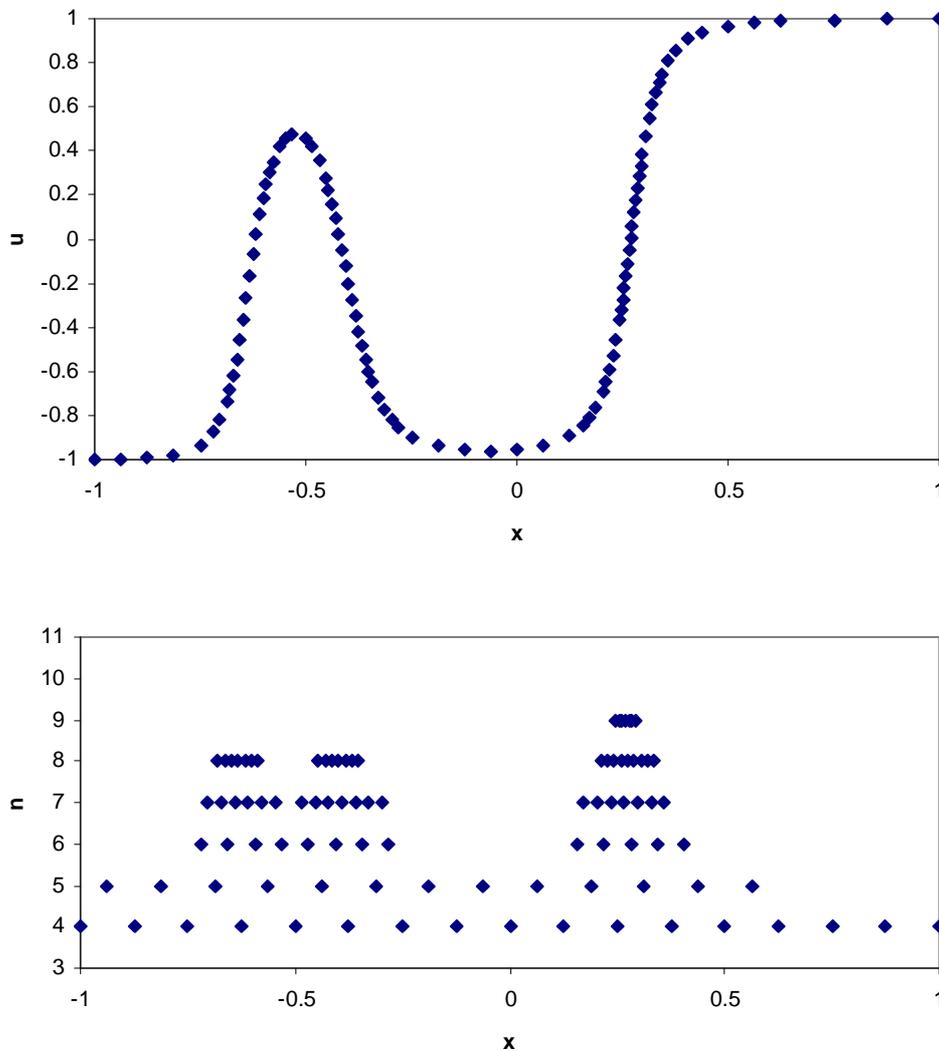


Figura 4.23 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 2$.

Em seguida, analise-se o perfil numérico da solução para o instante $t = 2$ (vd. Figura 4.23). Agora, é observado um incremento notório da intensidade das ondas, que obriga a um claro aumento do esforço de refinamento para a sua correcta representação discreta, que coincide com a localização das futuras discontinuidades. Consta-se igualmente a formação das frentes de uma forma ainda esboçada.

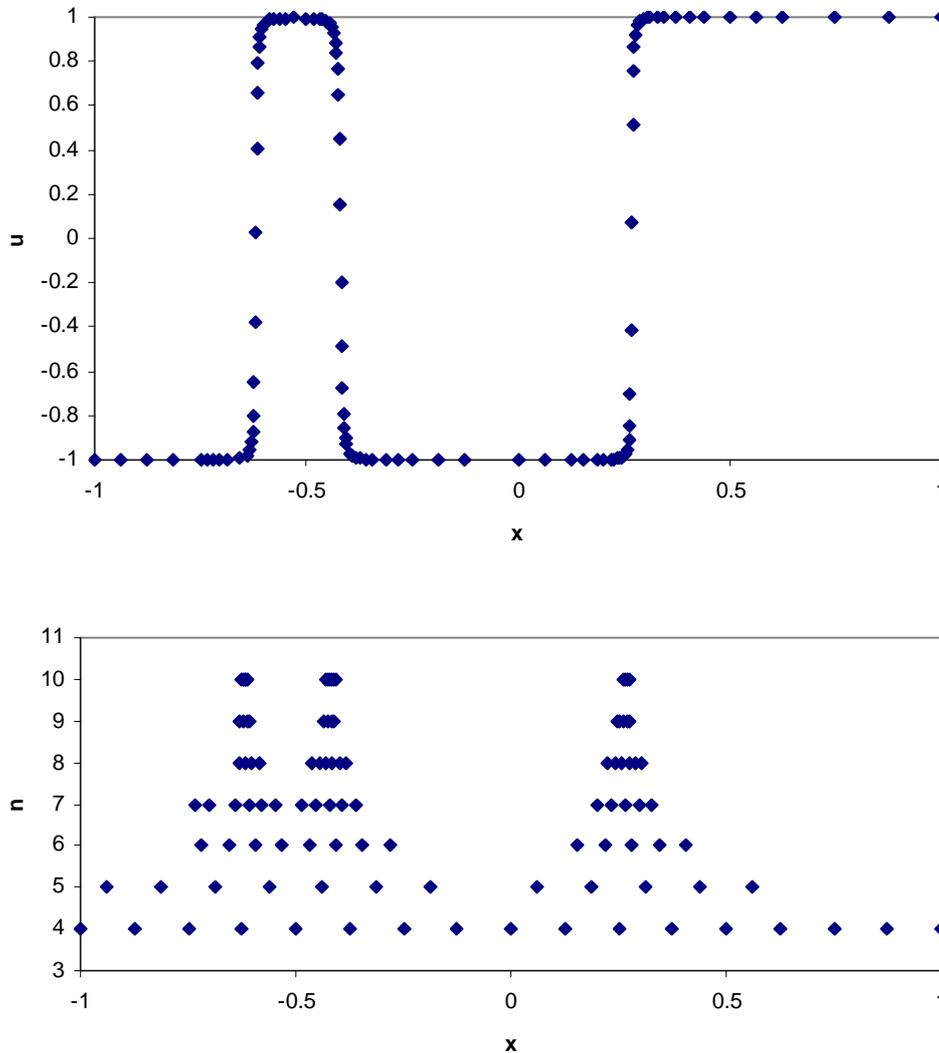


Figura 4.24 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 5$.

No instante $t = 5$, as frentes abruptas já estão claramente formadas (vd. Figura 4.24) e o esforço de refinamento para a sua simulação atinge agora o nível máximo admitido ($N = 10$). Finalmente, a análise da Figura 4.24 permite concluir que o perfil se encontra completamente formado e estabilizado para $t = 10$. O algoritmo de colocação não revela quaisquer dificuldades em lidar com as discontinuidades geradas, o que indicia mais uma vez a sua adequação para a resolução de problemas que tendam a gerar progressivamente peculiaridades problemáticas a partir de soluções iniciais suaves.

Os resultados obtidos pela aplicação do critério C2 nas condições da Tabela 4.8 são perfeitamente equivalentes aos alcançados na implementação discutida acima, como pode ser facilmente constatado através da análise da Figura 4.26.

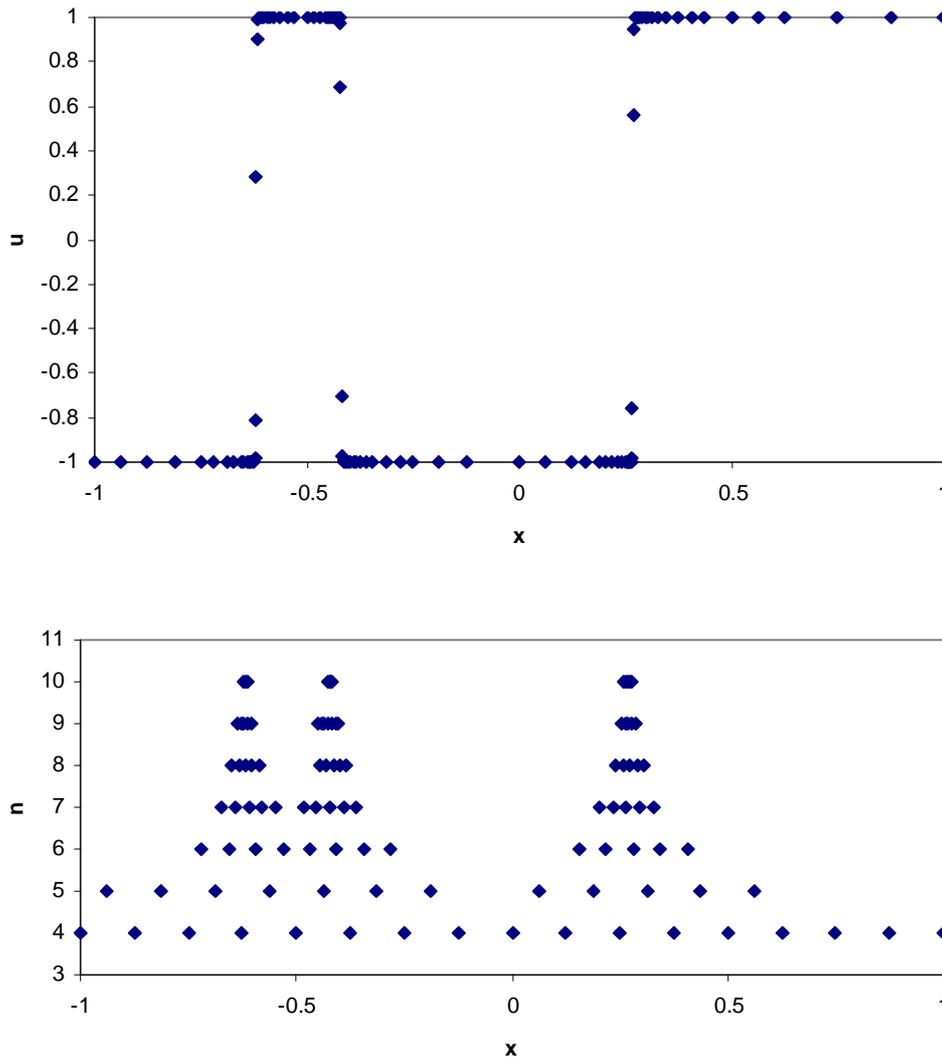


Figura 4.25 Perfil espacial da solução e malha para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C1) – instante $t = 10$.

Finalmente destaca-se na Figura 4.27 a evolução da malha adaptativa para as implementações da equação de Allen-Cahn discutidas atrás. Através da análise desta figura, é notório um aumento do esforço de adaptação à medida que a integração evolui, consentâneo com a formação progressiva das discontinuidades no perfil da solução. No entanto, o algoritmo de colocação está adequadamente sintonizado de forma a proporcionar um equilíbrio entre a correcta representação das propriedades dos perfis e a complexidade e densidade razoável das malhas de discretização que não são excessivamente pesadas permitindo a exequibilidade do avanço do processo de integração temporal. De facto, a representação dos três pulsos que constituem a solução estacionária do modelo é efectuada de modo eficiente através do recurso a malhas que não excedem 120 intervalos de dimensão. É igualmente notório que as condições de execução do ensaio correspondentes ao critério C2 são inicialmente menos exigentes do que o ensaio referente ao critério C1. No entanto, tal não inviabiliza a capacidade do método para evoluir no sentido da construção de malhas de dimensão semelhante em ambas as execuções.

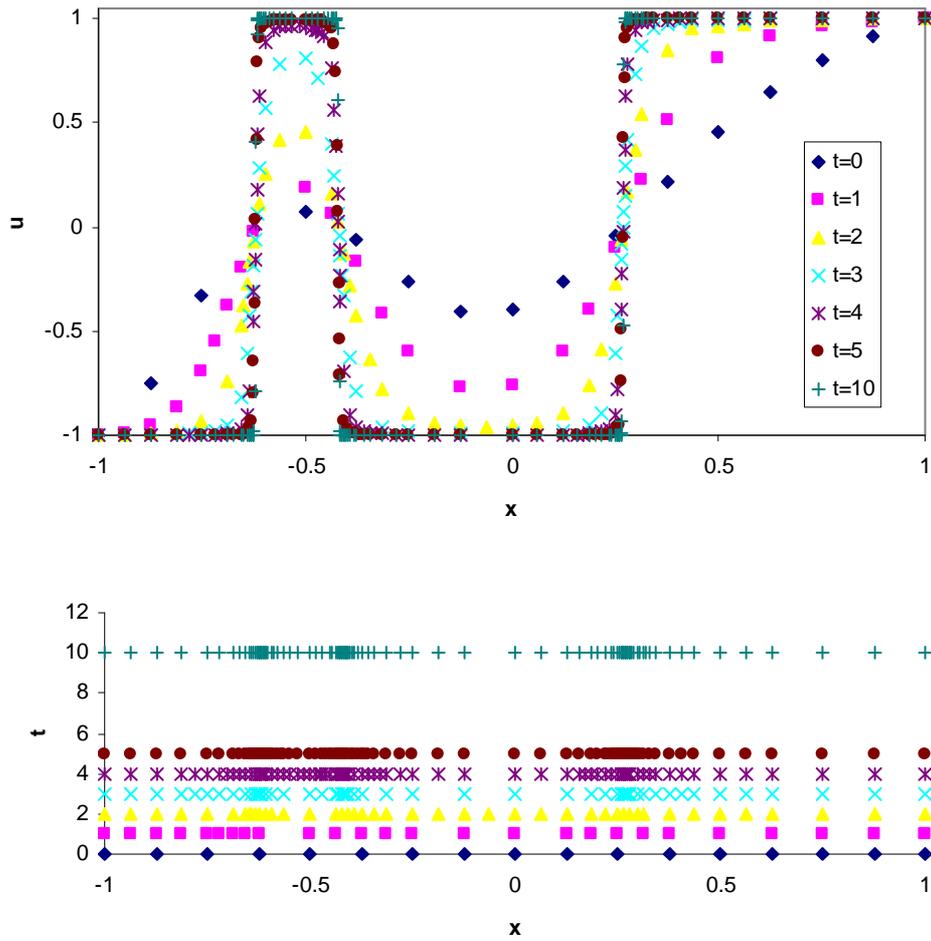


Figura 4.26 Implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn (critério C2).

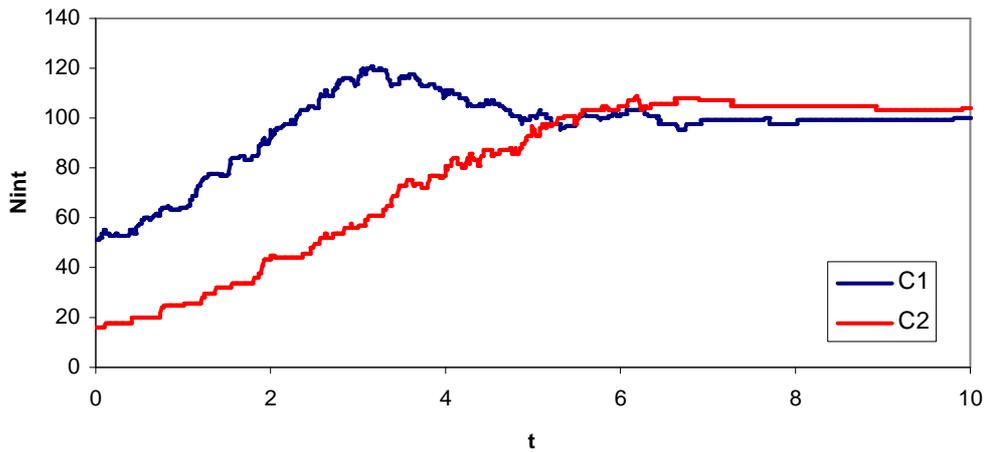


Figura 4.27 Evolução do número de intervalos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de Allen-Cahn.

Conclui-se novamente sobre a clara capacidade do algoritmo adaptativo STAT02 de lidar de modo muito satisfatório com a resolução do exemplo estudado, caracterizado pelo desenvolvimento de perfis abruptos fixos a partir de perfis iniciais suaves.

4.2.4 EQUAÇÃO DE KORTEWEG-DEVRIES

Nesta secção pretende-se resolver um modelo diferencial com múltiplas aplicações, inicialmente deduzido por Diederik J. Korteweg (1848-1941) e Gustav deVries (1866-1934) em 1895, para a simulação da propagação unidimensional de ondas de baixa amplitude em superfícies de água pouco profunda.

Considere-se então a versão clássica da equação de Korteweg-deVries (KdV) dada por[2],

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \tag{4.16}$$

definida em $-\infty < x < +\infty$, para $t \geq 0$, para a condição inicial:

$$u(x,0) = 0.5s \operatorname{sech}^2[0.5\sqrt{s}x]. \tag{4.17}$$

Deste modo, a versão original do problema consiste num IVP puro, ou seja sem condições fronteira atribuídas. No entanto, para efeitos práticos de resolução de resolução do problema diferencial parcial, revela-se de manifesta utilidade proceder à construção de um problema IBVP auxiliar relacionado com o exemplo original. Deste modo, estabelece-se um domínio espacial suficientemente alargado, e.g. $-30 < x < 70$, escolhido de modo a que os perfis da solução não atinjam as posições fronteira especificadas no intervalo de tempo de integração adoptado, por exemplo, $0 \leq t \leq 70$.

Posteriormente, fixam-se condições fronteira de Dirichlet artificiais como,

$$u(-30,t) = u(70,t) = 0. \tag{4.18}$$

A condição inicial representa uma função de onda que se movimenta com uma velocidade constante de uma forma semelhante à do exemplo de advecção discutido anteriormente (vd. secção 4.2.1). A forma da onda gerada e a sua velocidade de propagação dependem do valor do parâmetro s especificado. No exemplo particular estudado, fixa-se $s=0.5$, que determina uma onda relativamente estreita e de amplitude razoável. Deste modo, a solução do problema exhibe atributos de carácter abrupto que se propagam a uma velocidade constante considerável.

Tabela 4.9 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de Korteweg-deVries.

Colocação nodal	• critério	C1	
	• ordem da derivada	1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	1×10^{-2}	1×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M	N
		4	10
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	5×10^{-4}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

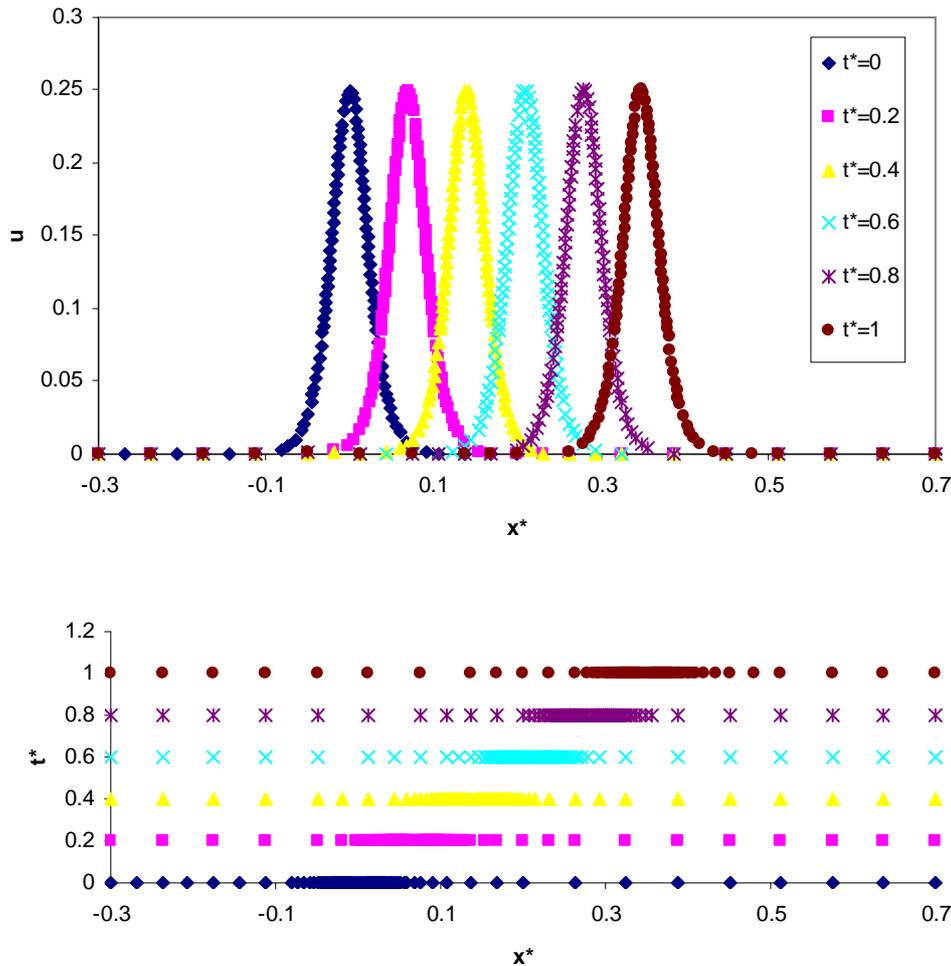


Figura 4.28 Implementação numérica para o caso da equação de Korteweg-deVries.

De modo a ultrapassar problemas numéricos que possam advir do carácter stiff do modelo original, opta-se por proceder à resolução de uma versão normalizada deste, definida por uma transformação das variáveis independentes dada por, $x^* = x/100$ e $t^* = t/70$. Os factores de normalização correspondem à dimensão total dos domínios espacial e temporal escolhidos.

Os parâmetros numéricos sintonizados para uma implementação eficiente do algoritmo de integração numérica são apresentados na Tabela 4.9. Opta-se agora por analisar apenas a performance do critério de colocação C1 (já que se têm denotado diferenças pouco significativas entre os desempenhos de ambos os critérios, desde que apropriadamente sintonizados).

Os resultados numéricos obtidos pela implementação do algoritmo STAT02 ao modelo normalizado KdV, nas condições indicadas na Tabela 4.9, são apresentados de forma sintética na Figura 4.28. A execução do procedimento numérico possibilita uma visualização privilegiada do comportamento dos perfis discretos de solução ao longo da integração temporal AMOL.

Observa-se assim que a evolução da solução do modelo KdV descrito como a propagação estacionária de uma onda relativamente pronunciada sem qualquer

distorção ou dissipação do seu declive. O algoritmo de geração de malha adaptativa demonstra uma capacidade considerável de detecção do posicionamento da onda e de simulação discreta apropriada dos seus atributos principais. Deste modo, manifesta elevado potencial para acompanhar o seu movimento progressivo através do domínio espacial, sem introduzir qualquer tipo de perturbação significativa (vd. Figura 4.28).

Conclui-se novamente sobre a adequação do algoritmo STAT02 na representação numérica aproximada da solução de um modelo caracterizado por uma propagação uniforme de uma onda ou frente abrupta.

4.2.5 MODELO DE PROPAGAÇÃO DE ONDAS

O modelo de propagação de ondas[3-4,7] simula o movimento de duas ondas em sentidos contrários. Cada uma das ondas é inicialmente definida como um pulso cossinusoidal, centrado inicialmente nas posições $x = 0.3$ e $x = 0.7$, respectivamente, do domínio espacial $[0,1]$. As ondas sofrem interferência mútua ao se cruzarem, manifestada pela diminuição significativa da sua amplitude.

As PDE's que constituem o modelo são dadas por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} - 100uv, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x} - 100uv, \quad (4.20)$$

completadas pelas condições fronteira de Dirichlet:

$$u(0,t) = u(1,t) = v(0,t) = v(1,t) = 0, \quad (4.21)$$

e as condições iniciais,

$$u(x,0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \in [0,0.2] \cup x \in [0.4,1] \\ 0.5[1 + \cos(10\pi(x - 0.5))] & \text{se } x \in [0.2,0.4] \end{cases}, \quad (4.22)$$

$$v(x,0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \in [0,0.6] \cup x \in [0.8,1] \\ 0.5[1 + \cos(10\pi(x - 0.5))] & \text{se } x \in [0.6,0.8] \end{cases}, \quad (4.23)$$

que representam os pulsos iniciais associados a cada uma das variáveis dependentes referidos acima.

A implementação da integração numérica do modelo 4.19 a 4.23 é realizada recorrendo aos parâmetros numéricos mostrados na Tabela 4.10. Neste caso, opta-se por testar a aplicação do critério de colocação C2 sobre um conjunto de malhas diádicas uniformes cujo nível varia entre 5 e 10. Os resultados gerais obtidos na actual execução são apresentados nas Figuras 4.29 e 4.30.

Verifica-se mais uma vez que o desempenho da integração numérica do modelo estudado é bastante satisfatório. O critério de colocação C2 revela uma aptidão apreciável na identificação, localização e simulação das duas ondas de propagação, assim como do acompanhamento da sua movimentação. Assim, demonstra-se a capacidade do algoritmo STAT02 de lidar com sistemas de PDE's, caracterizados pela presença de propriedades abruptas múltiplas e deslocadas no espaço e no tempo.

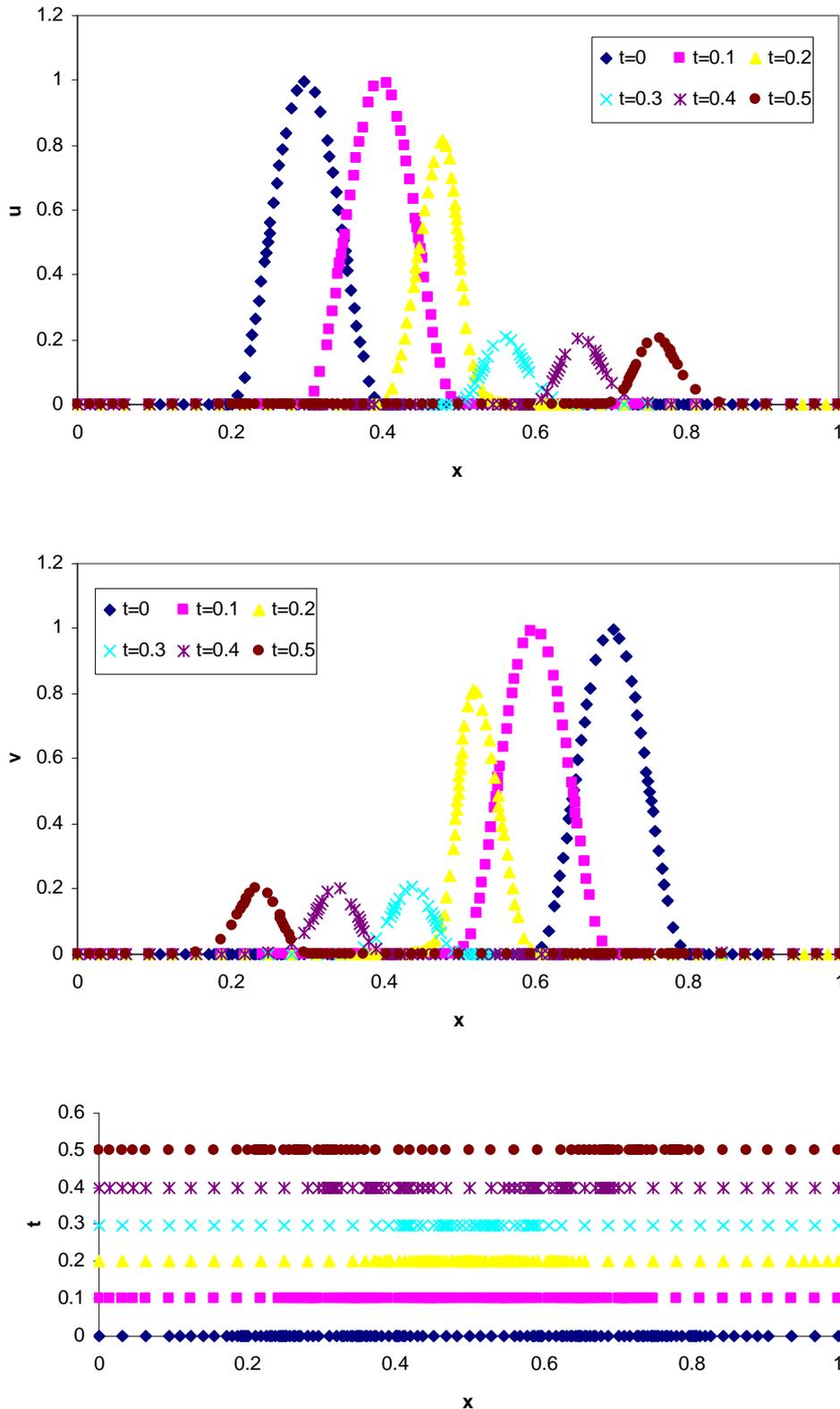


Figura 4.29 Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de ondas.

No entanto, como o algoritmo de integração não está projectado de modo a processar diversas malhas simultaneamente (cada uma associada a uma variável dependente do modelo), está obrigado a gerar uma malha única que se adapte às características do

conjunto dos perfis de solução. Assim, uma variável do sistema é integrada sobre uma malha globalizada construída como a reunião de todas as malhas geradas pela aplicação do algoritmo de colocação nodal à totalidade dos perfis de solução do sistema diferencial em estudo. Deste modo, esta malha adaptativa global reúne todas as propriedades de refinamento introduzidas para fazer face às características de todos os perfis da solução (vd. Figura 4.29). A não separabilidade das malhas consoante as variáveis integradas pode constituir um esforço de cálculo adicional e, conseqüentemente uma desvantagem do procedimento numérico. A resolução desta questão poderá possibilitar um passo posterior de optimização da eficiência do algoritmo adaptativo de integração numérica.

Tabela 4.10 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de propagação de ondas.

Colocação nodal	• critério	C2	
	• ordem da derivada	1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.1	0.1
Malhas	• diádicas	M	N
		5	10
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	NA	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-2}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

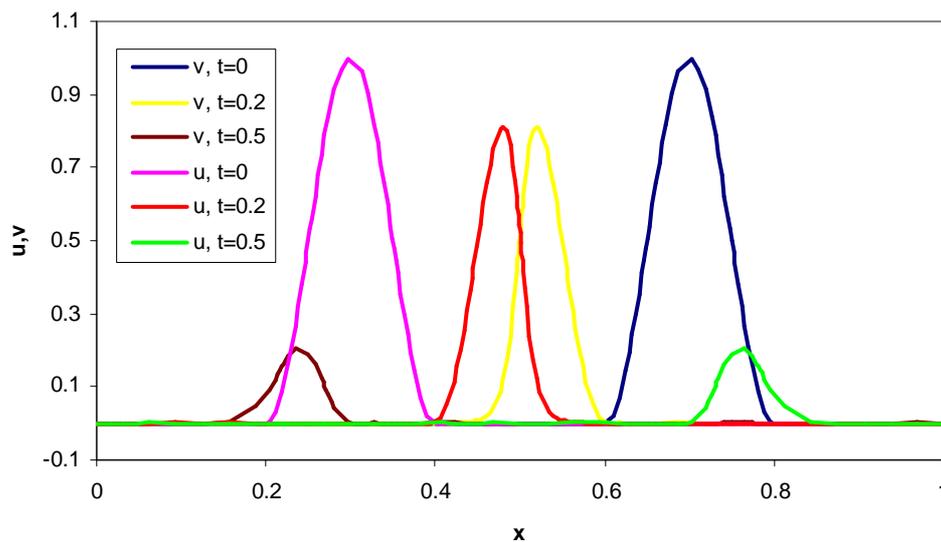


Figura 4.30 Interação entre as duas ondas propagadas em sentidos contrários.

De qualquer modo, é clara a aptidão do algoritmo para lidar com a resolução do modelo de propagação de ondas, incluindo a fase mais importante referente à interferência entre as duas ondas que afecta de forma importante a sua amplitude (vd.

Figura 4.30). Este processo é representado pela coalescência das duas regiões de refinamento da malha global (vd. Figura 4.29) que posteriormente voltam a divergir à medida que as ondas se afastam novamente. No entanto, é notório que as segundas zonas de refinamento (após a interferência mútua) são visivelmente menos intensas do que as iniciais (referentes às ondas anteriores à interferência) devido ao facto das ondas de propagação se tornarem consideravelmente menos abruptas e mais estreitas com a interacção entre si.

Conclui-se finalmente que o algoritmo STAT02 se revela eficiente na representação numérica aproximada da solução de um sistema de PDE's caracterizado por uma propagação de um conjunto de ondas ou frentes abruptas.

REFERÊNCIAS

1. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.
2. A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W. Schiesser (2001) "Chapter 2 – Application of the adaptive method of lines to nonlinear wave propagation problems", in *Adaptive Method of Lines*, (A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W.E. Schiesser, eds.), Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, pp. 39-64.
3. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
4. B.P.M. Duarte (1994) *Método dos Elementos Finitos Móveis Aplicado à Resolução de Modelos de Frente de Reacção*, PhD Thesis, FCTUC, Coimbra, Portugal.
5. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method", *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
6. A.-K. Kassam, L.N. Trefethen (2005) "Fourth-order time-stepping for stiff PDEs", *SIAM J. Sci. Comput.*, **26** (4), pp. 1214-1233.
7. J.G. Verwer, J. G. Blom, J. M. Sanz-Serna (1989); "An adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **82** (2), pp. 454-486.

5. MODELOS DE TESTE BIDIMENSIONAIS

Neste capítulo introduzem-se os resultados obtidos com a implementação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 para modelos de teste bidimensionais. De uma forma equivalente ao capítulo anterior, opta-se por, numa primeira fase, testar o desempenho dos métodos de colocação nodal e geração de malha para funções de teste bidimensionais. Em seguida, procede-se à verificação da capacidade do algoritmo de integração numérica descrito anteriormente (associado aos métodos de geração de malha adaptativa referidos) para a resolução eficiente de modelos diferenciais bidimensionais.

5.1 GERAÇÃO DE MALHAS BIDIMENSIONAIS

A primeira fase do teste do desempenho dos algoritmos numéricos referidos acima consiste na confirmação da sua aptidão para a geração de malhas adequadas à representação das características principais de funções bidimensionais caracterizadas por exibirem atributos problemáticos, nomeadamente descontinuidades ou perfis abruptos.

No âmbito das implementações apresentadas de seguida, usam-se aproximações centradas de quarta ordem (5 nodos) na avaliação dos critérios de colocação nodal 1D, quando tal é aplicável. Os algoritmos de colocação nodal 2D são testados na sua versão m (mesh).

Considere-se então uma função 2D degrau designada por step2 definida no domínio $[0,1]^2$ da forma:

$$\begin{cases} u(x,y)=0, & x < y \\ u(x,y)=1, & \text{else in } [x,y] \in [0,1]^2 \end{cases} \quad (5.1)$$

Tabela 5.1 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função 2D step2.

Critério 2D		M_x	M_y		
C12, C32, C42, C52		4	4		
Critério 1D	Ordem da Derivada	N_x	N_y	ε_1	ε_2
C1 σ	1	8	8	0.1	0.1

Esta função é graficamente representada na Figura 5.1. A observação desta figura permite concluir que a função em estudo exhibe uma descontinuidade (ladeada por dois patamares constantes), localizada sobre a recta definida por $y = x$, estendendo-se pela totalidade do domínio espacial. Assim, testam-se os diferentes critérios de colocação 2D descritos no Capítulo 3 e atesta-se sobre a capacidade de cada algoritmo de geração de malha de detectar e representar simultaneamente a descontinuidade e planos adjacentes, de forma satisfatória e eficiente.

A execução do algoritmo de geração de malha descrito na secção 3.5.2, com os parâmetros da Tabela 5.1, proporciona os resultados apresentados nas Figuras 5.2 a 5.5. O critério de colocação 1D C1 é usado na sua versão σ (desvio padrão).

Verifica-se que a aplicação do critério C42m sintonizado com os parâmetros da Tabela 5.1, promove uma distribuição nodal apropriada à representação discreta da função

2D descontínua através de um refinamento intenso e selectivo ao longo da descontinuidade (até ao nível máximo de resolução, $N = 8$) e a manutenção de uma malha esparsa ($M = 4$) nas regiões planas do domínio.

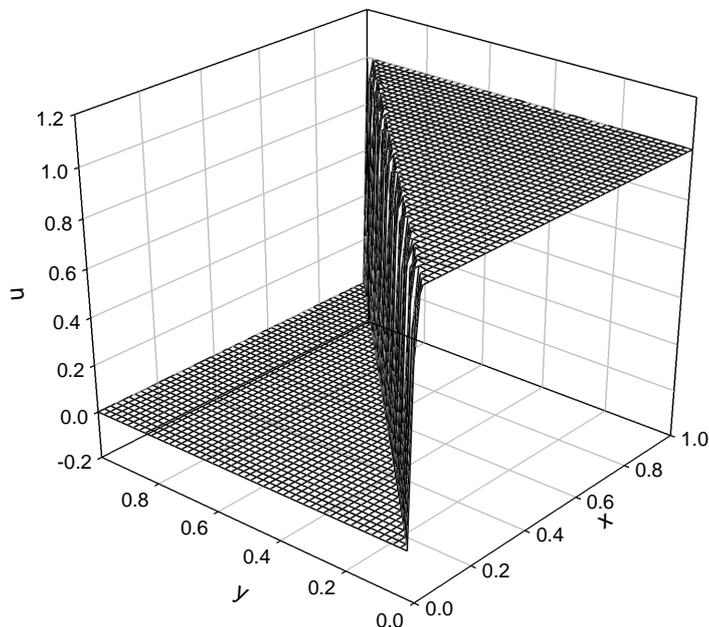


Figura 5.1 Representação gráfica da função step2.

Assim, as características da função step 2 são completamente descritas de uma forma discreta através de uma malha 2D algo densa com 5261 nodos.

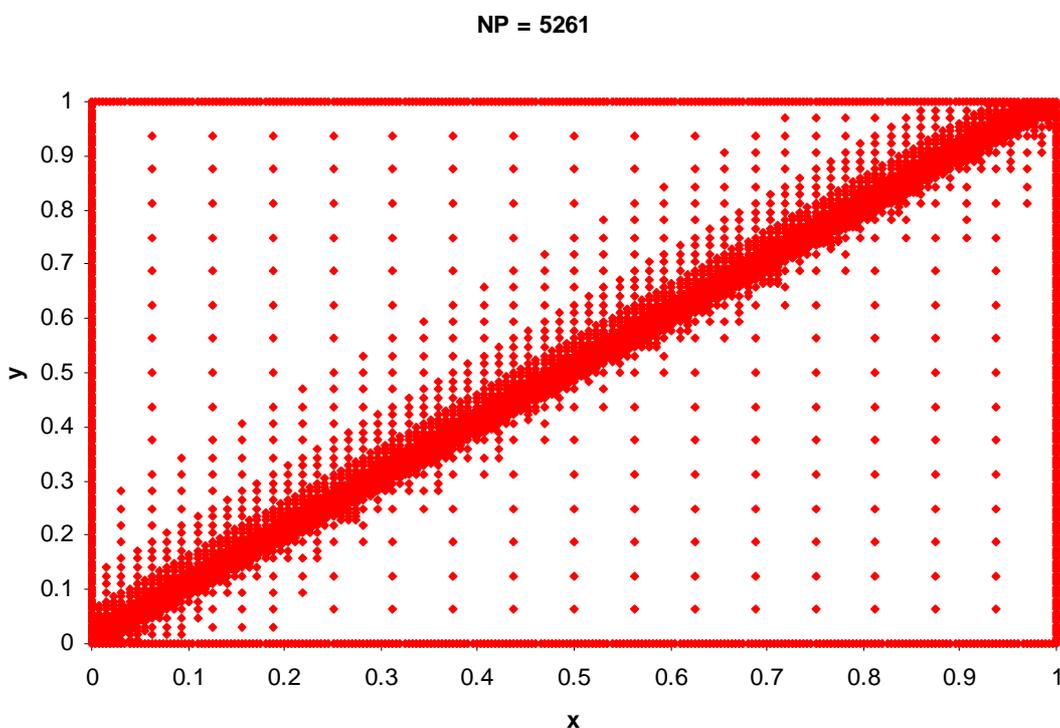


Figura 5.2 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C42m).

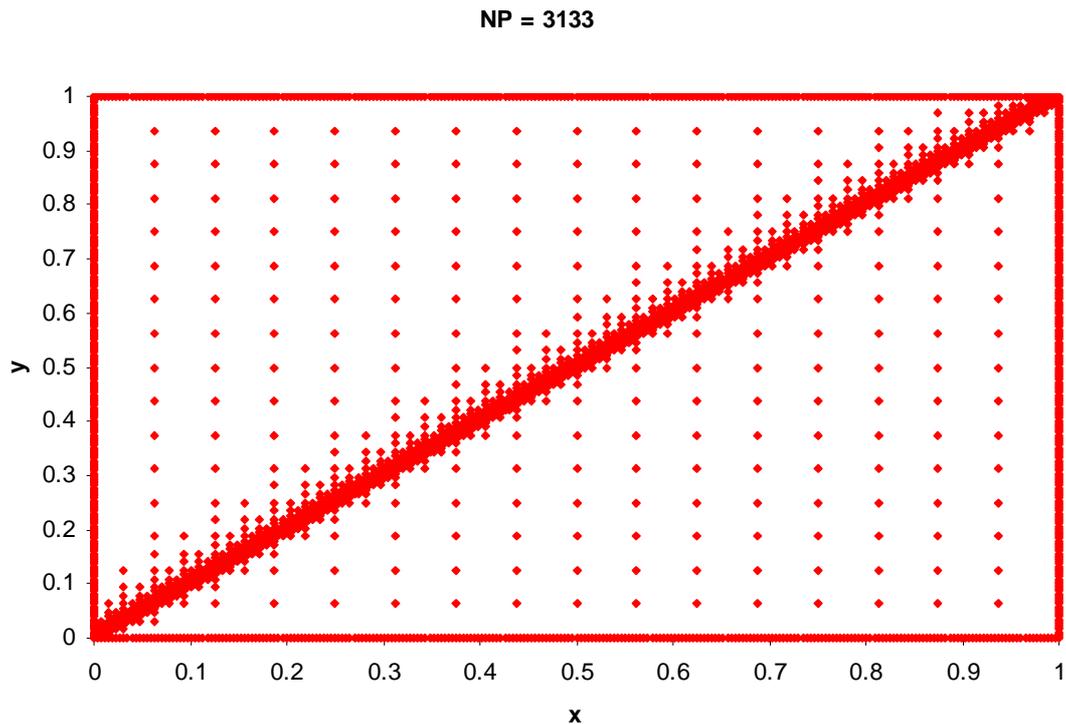


Figura 5.3 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C32m).

Em contrapartida a execução da geração de malha nas mesmas condições com o critério de colocação C32m (vd. Figura 5.3) possibilita a construção de uma estrutura discreta que revela as mesmas propriedades de simulação das características da função constatadas no caso anterior. No entanto, esta operação é realizada com um número de nodos significativamente inferior ($NP = 3133$), correspondente a uma banda de refinamento sobre a descontinuidade consideravelmente mais estreita. Tal é explicável pelo facto do critério C42m adoptar a aplicação de uma pesquisa direccional 1D baseada no critério $C1\sigma$ associado a aproximações calculadas sobre conjuntos de 5 nodos, enquanto que o critério C32m é aplicado sobre quadriláteros definidos por apenas 3 nodos por aresta. Assim, é expectável que o alcance espacial de qualquer perturbação detectada na solução e a sua propagação no procedimento de refinamento tenha uma menor extensão no ensaio C32m, em relação ao referente ao caso C42m nas condições específicas escolhidas.

No entanto, é relevante salientar que em todas as execuções referentes à função step2, as propriedades desta função conduzem a operações de refinamento que atingem o nível máximo de resolução para qualquer posição de x ou de y , já que a descontinuidade atravessa a totalidade do domínio nas duas direcções. Nestas condições, o desenho dos algoritmos de colocação (vd. secção 3.5.2) exige que todos os nodos fronteira sejam activados, o que introduz à partida $4 \times 2^8 = 1024$ nodos na malha gerada. Por outro lado, a malha base que define o suporte fundamental da função discretizada possui por defeito uma dimensão de $(2^4 - 1) (2^4 - 1) = 225$ nodos interiores. Assim, as malhas apresentadas nas Figuras 5.2 a 5.5, têm de possuir $1024 + 225 = 1249$ nodos, cuja colocação não é directamente devida à análise das características da função, mas à estrutura idealizada para os algoritmos de colocação testados.

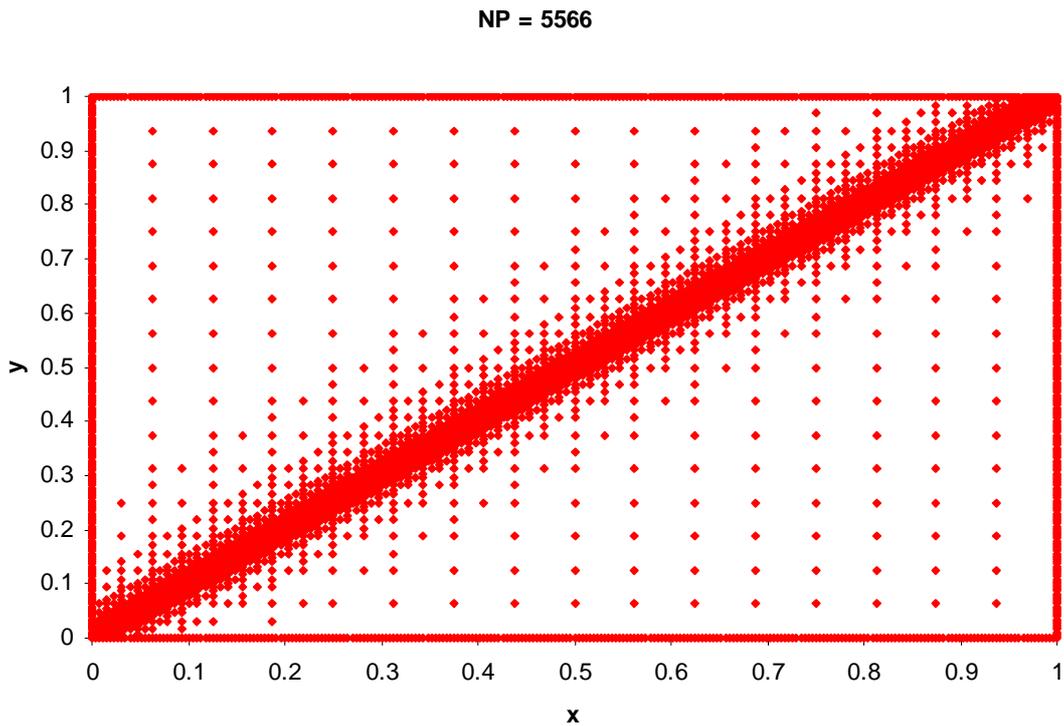


Figura 5.4 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C12m).

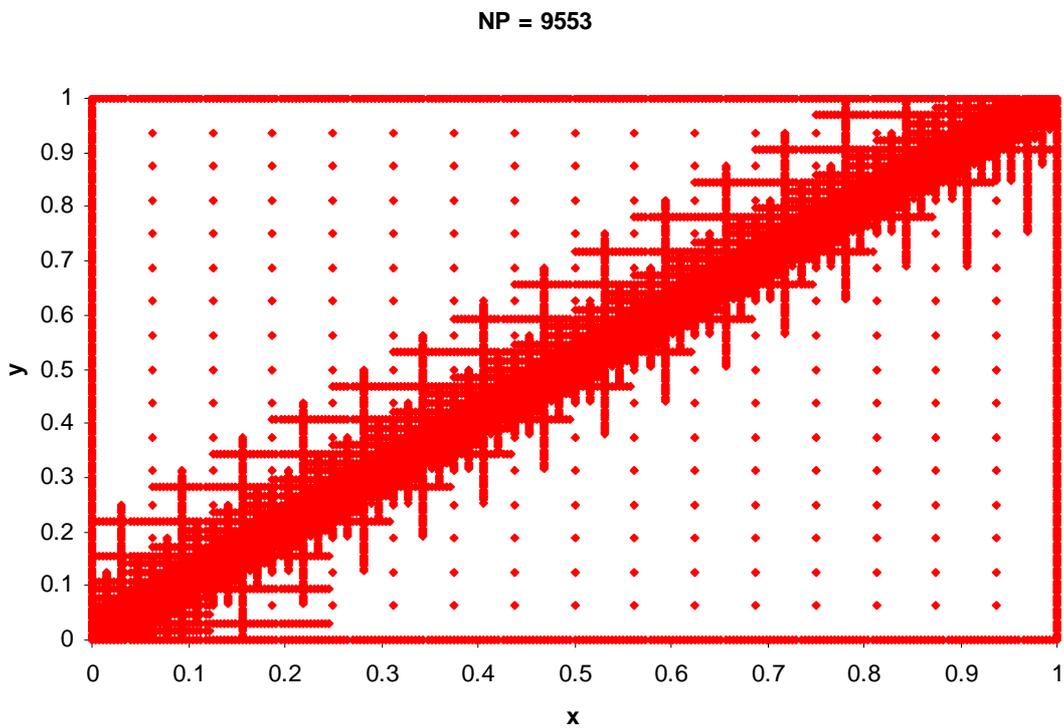


Figura 5.5 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C52m).

Na Figura 5.4 é representada a malha gerada com a aplicação do critério C12m nas condições resumidas na Tabela 5.1. Afigura-se óbvio que os resultados obtidos são

muito semelhantes aos relativos ao critério C42m, tendo a malha construída um desenho de colocação equivalente com uma dimensão comparável (NP = 5566).

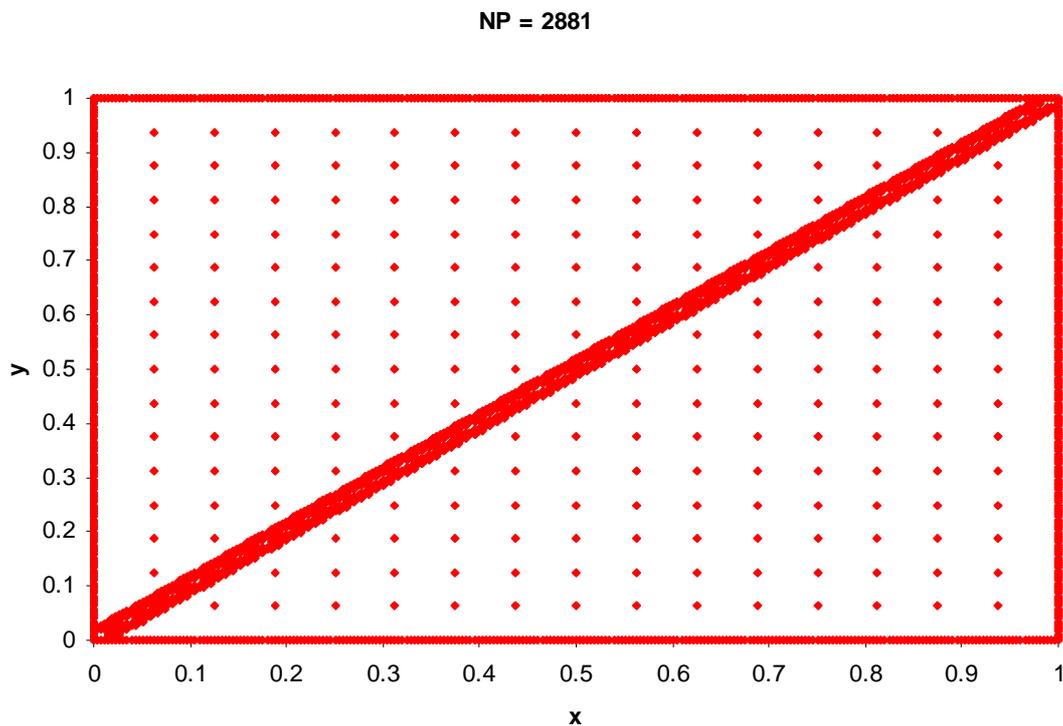


Figura 5.6 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C52m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 20$).

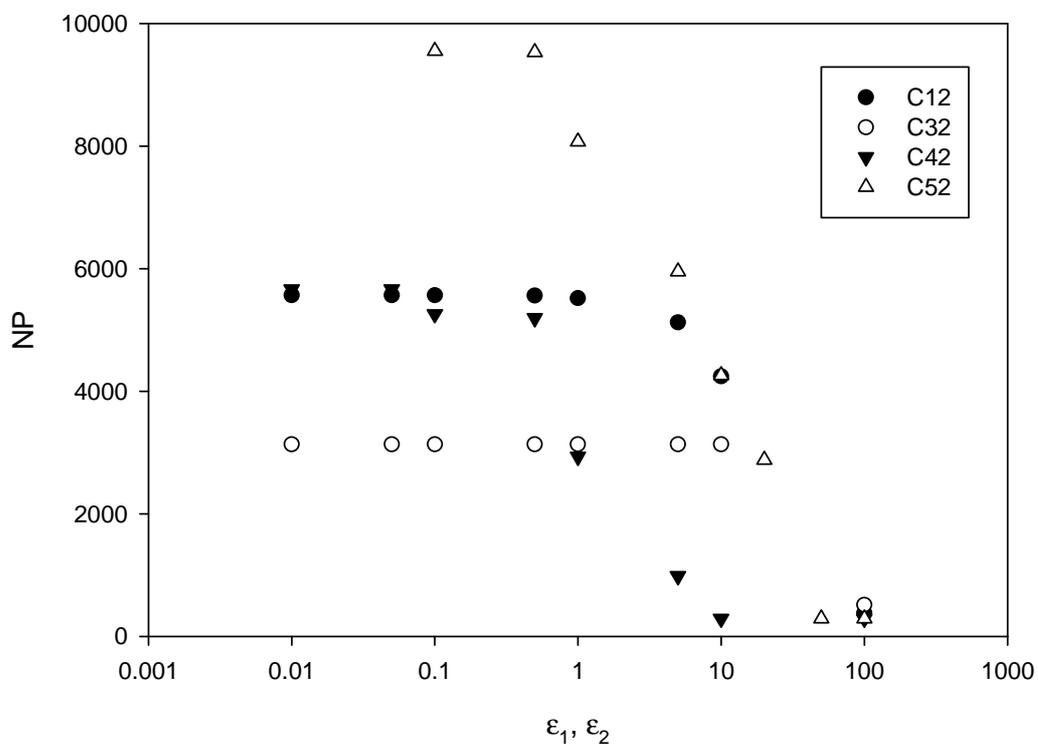


Figura 5.7 Número de nodos da malha bidimensional em função das tolerâncias para a função step2.

A aplicação do critério C52m em condições semelhantes proporciona os resultados visualizados na Figura 5.5. É notório que este critério de colocação baseado num varrimento sequenciado no nível de resolução máximo se revela consideravelmente mais sensível do que os restantes, já que obriga a um refinamento intensivo e abrangente para a representação da descontinuidade. Para além da banda de refinamento ser claramente mais larga, observa-se a formação de estrias alongadas verticais e horizontais, que se verifica deverem-se a acções continuadas de colocação nodal ao longo de x e de y , respectivamente. Deste modo a malha gerada é relativamente pesada, dado que é constituída por 9553. Assim, conclui-se que as condições genéricas de geração de malha da Tabela 5.1 não são adequadas ao caso específico do critério C52, já que os valores impostos para as tolerâncias se revelam demasiado exigentes. De facto, se estes forem aumentados de um factor de 200, demonstra-se a possibilidade do critério promover a geração de uma malha representativa da descontinuidade através de uma banda de refinamento apropriada e assaz estreita (vd. Figura 5.6).

A elevada sensibilidade relativa da estratégia C52 é igualmente ilustrada no gráfico da Figura 5.7. Para valores de tolerâncias semelhantes, é visível que este critério tende a gerar as malhas de maior dimensão. Constata-se também uma tendência de estabilização da dimensão das malhas para valores de tolerâncias mais reduzidos em todos os critérios estudados. Por outro lado, o relaxamento das tolerâncias conduz à ausência completa de operações de refinamento, induzindo uma total incapacidade do algoritmo na detecção da descontinuidade, e à conseqüente construção de malhas simples de nível de resolução mínimo ($M = 4$).

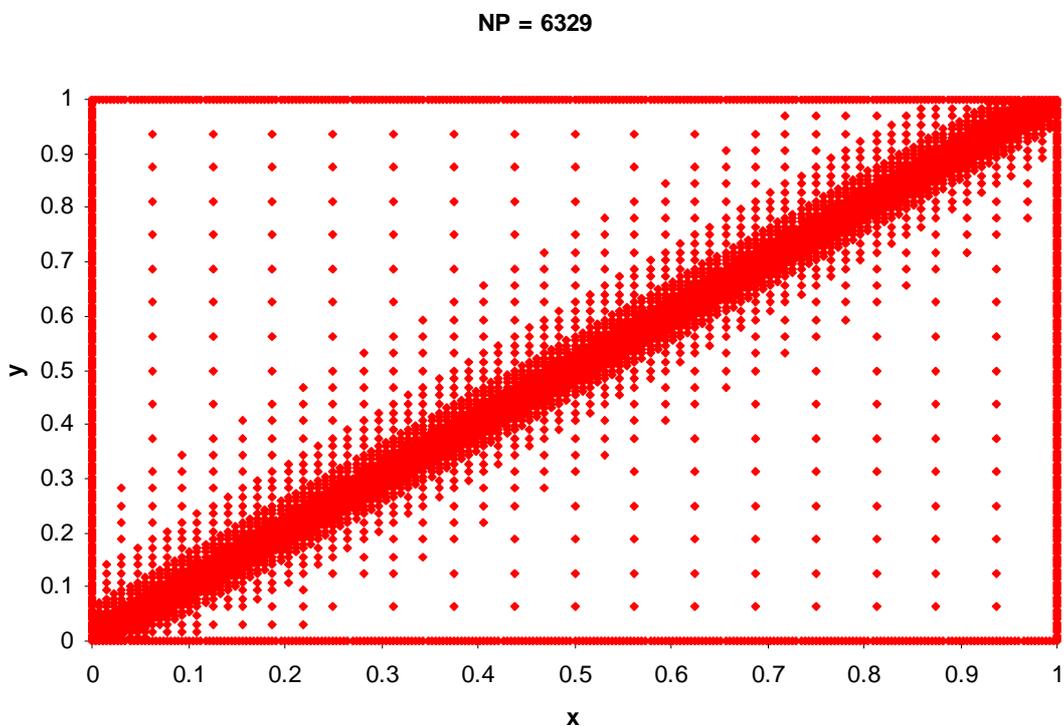


Figura 5.8 Geração de malha bidimensional para a função step2 (critério C42m com critério 1D C2).

A influência da aplicação do critério de colocação 1D C2 é apresentada na Figura 5.8, para o caso particular C42 (NP = 6329). Nota-se uma semelhança clara entre a malha

da Figura 5.8 e a malha gerada no ensaio correspondente C1 σ (vd. Figura 5.2). No entanto, é visível uma maior sensibilidade do critério C2 na representação discreta da descontinuidade, já que a malha se revela relativamente mais densa (NP = 6329). De qualquer modo, as diferenças entre os dois ensaios não são significativas, permitindo a conclusão que o desempenho dos critérios 1D testados é aproximadamente equivalente no exemplo específico discutido.

Considere-se outra função 2D degrau (step4) igualmente definida no domínio $[0,1]^2$ dada por:

$$\begin{cases} u(x,y)=0, & x+y < 0.2 \\ u(x,y)=1, & \text{else in } [x,y] \in [0,1]^2 \end{cases} \quad (5.2)$$

Agora a descontinuidade sobre o domínio espacial estabelecido é menos extensa, situando-se sobre a recta $x + y = 0.2$.

A limitada extensão da descontinuidade possibilita o teste de malhas de nível de resolução ainda mais elevado (e.g. $N = 10$) sem arriscar a geração de malhas de dimensão excessivamente elevada.

A aplicação do critério de colocação 2D C42m ao exemplo 5.2, com dados da Tabela 5.1 e níveis de resolução máxima de 10, é ilustrada na Figura 5.9. Verifica-se de novo a capacidade do algoritmo de detectar e acompanhar a descontinuidade, possibilitando a simulação correcta da função discretizada, sem recorrer a operações de refinamento supérfluas nas regiões de menor actividade. Constatam-se igualmente a tendência da estratégia C42 de gerar malhas de dimensão relativamente elevada nestas condições específicas (NP = 4832).

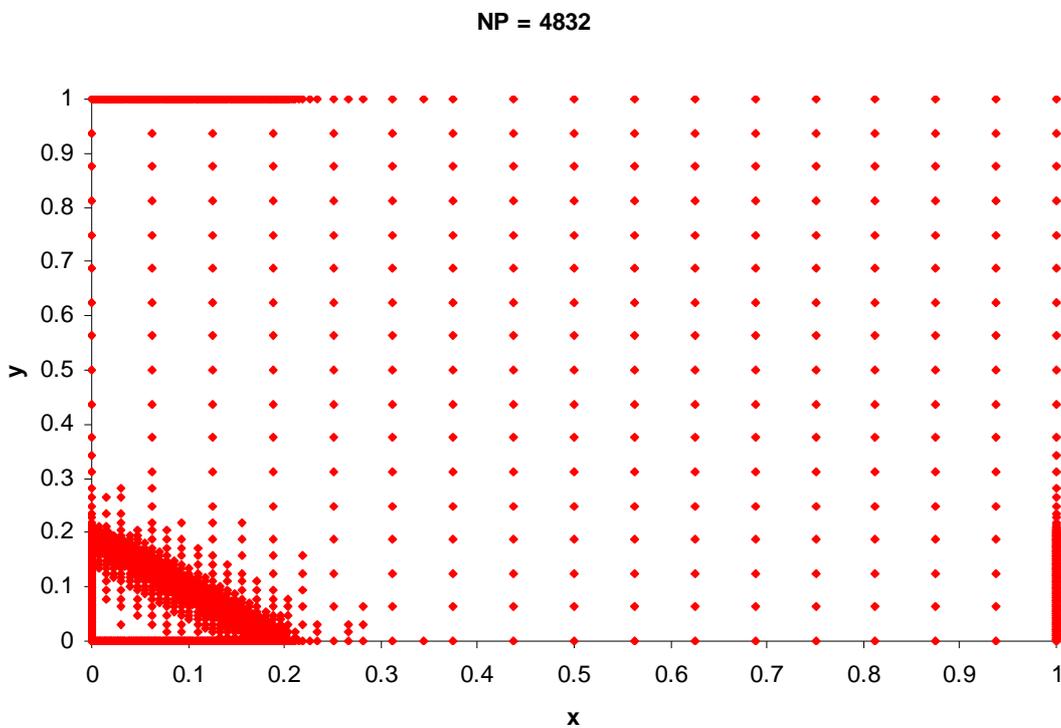


Figura 5.9 Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C42m – $N_x = N_y = 10$).

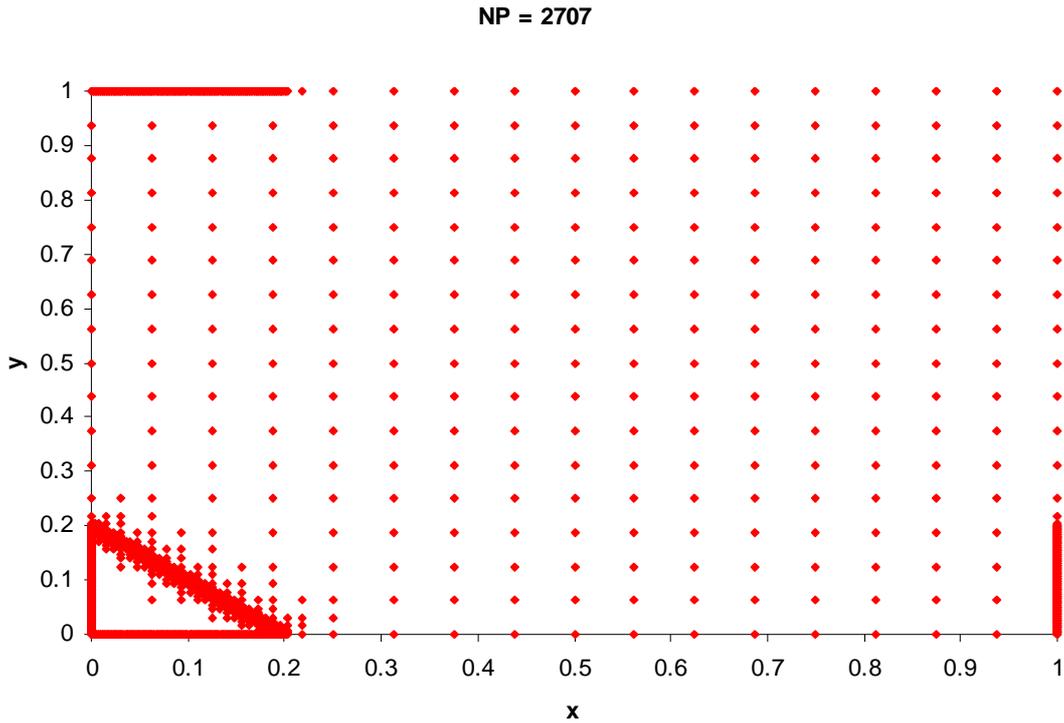


Figura 5.10 Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C32m – $N_x = N_y = 10$).

Por outro lado, a aplicação equivalente da estratégia C32 conduz a uma malha semelhante à anterior, mas com características claramente menos pesadas, já que a banda de refinamento é visivelmente mais estreita.

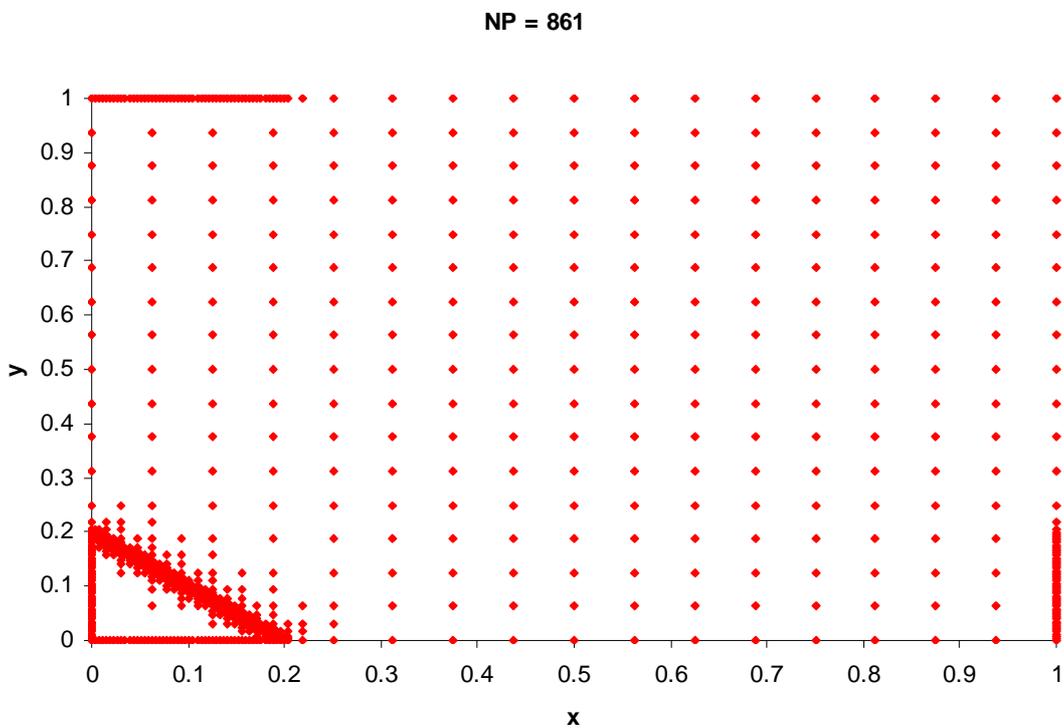


Figura 5.11 Geração de malha bidimensional para a função step4 (critério C32m).

Uma experiência adicional é realizada nas condições padrão da Tabela 5.1 para o critério C32m (vd. Figura 5.11). Verifica-se novamente o potencial da estratégia de colocação nodal para a detecção e representação da descontinuidade através de uma malha com apenas 861 nodos.

Após o teste de exemplos caracterizados pela exibição de descontinuidades, opta-se agora por verificar o desempenho dos algoritmos de geração de malha em funções 2D que representem perfis ou ondas abruptas.

Tem-se então uma função denominada por wave1, que representa uma onda 2D relativamente abrupta (vd. Figura 5.12):

$$u(x,y) = e^{-10(x^2+y^2)}, \tag{5.3}$$

e é definida em $[-1,1]^2$.

A aplicação das estratégias de geração de malha C12 e C42 com os dados constantes na Tabela 5.2, proporciona os resultados apresentados nas Figuras 5.13 e 5.14.

Tabela 5.2 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função wave1.

Critério 2D		M_x	M_y		
C12, C42		4	4		
Critério 1D	Ordem da Derivada	N_x	N_y	ϵ_1	ϵ_2
C1 σ	1	8	8	0.05	0.05

Neste caso, o processo de colocação deve possibilitar a representação de onda pronunciada situada no centro do domínio considerado rodeada por uma região plana. Assim, a utilização do critério C42m conduz à construção de uma malha que assinala satisfatoriamente a onda e permite a simulação da sua curvatura (vd. Figura 5.13).

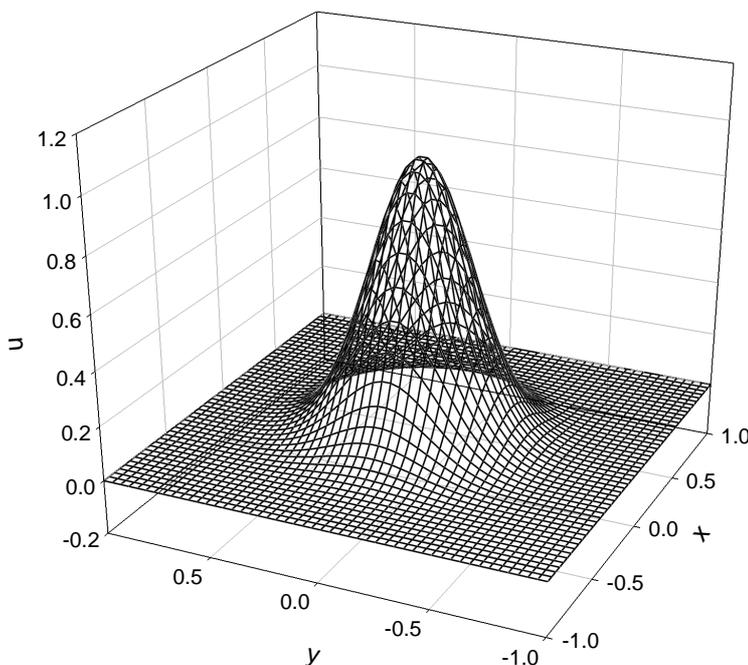


Figura 5.12 Representação gráfica da função wave1.

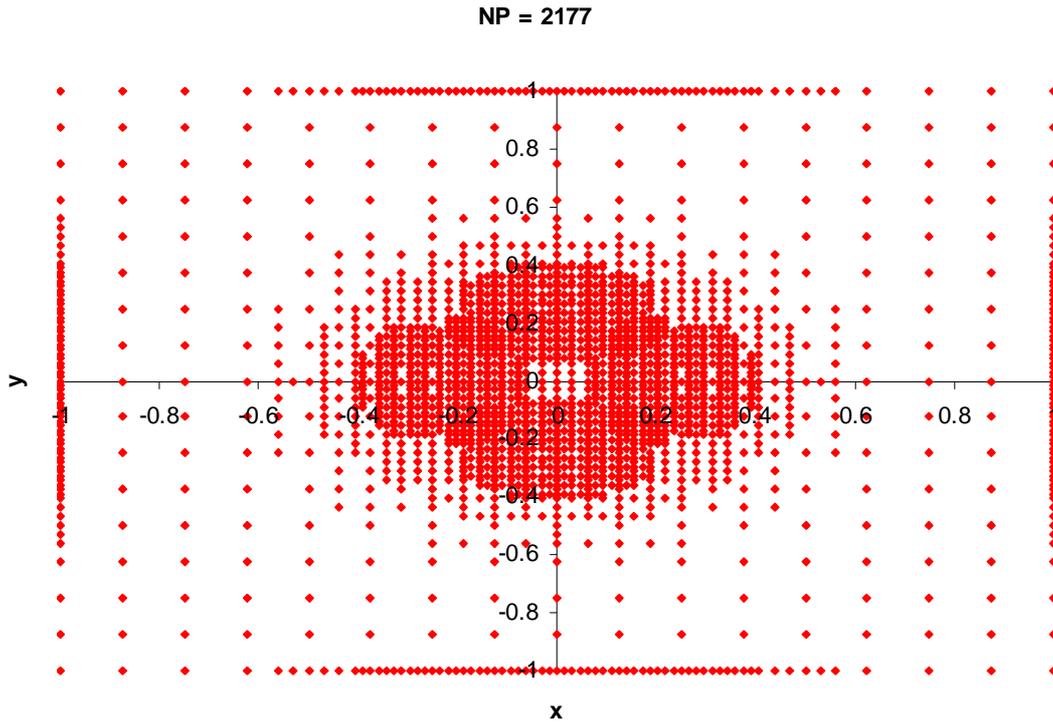


Figura 5.13 Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C42m).

A região plana envolvente é representada convenientemente por uma malha relaxada de nível mínimo de resolução. Todas as características da função são reproduzidas de um modo discreto através de uma malha de dimensão razoável (NP = 2177).

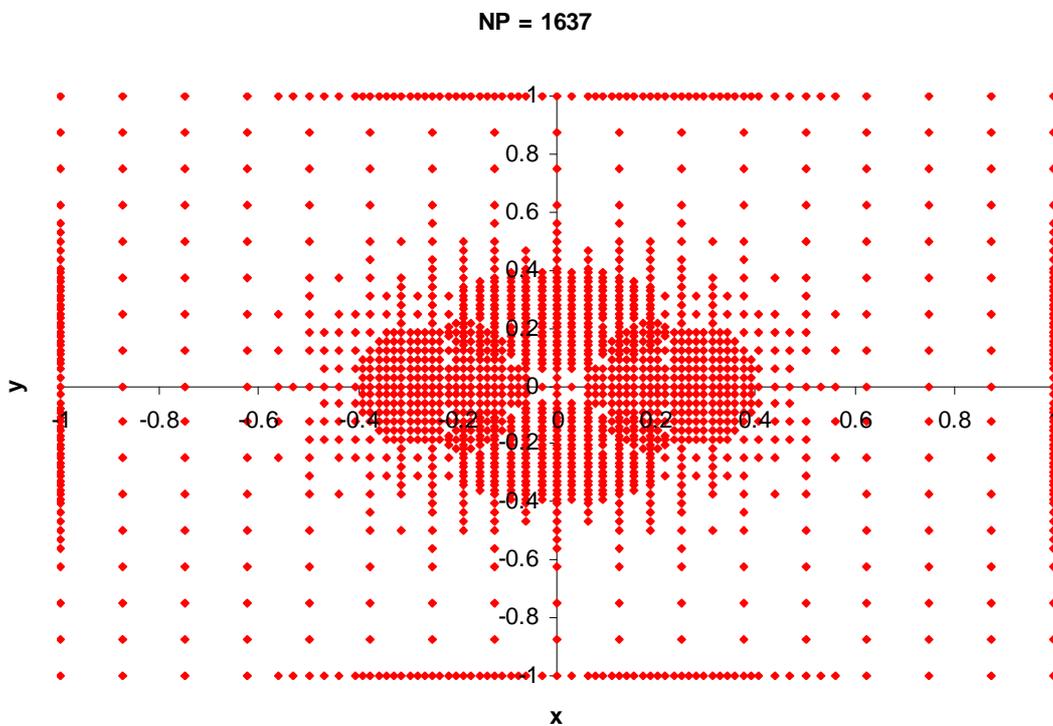


Figura 5.14 Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C12m).

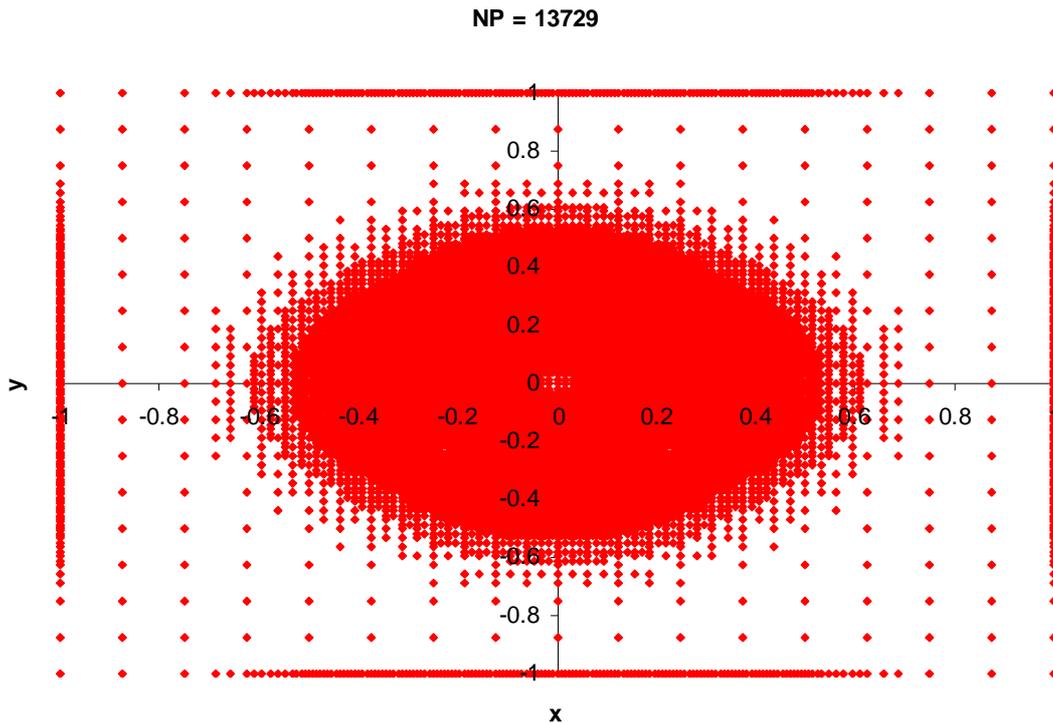


Figura 5.15 Geração de malha bidimensional para a função wave1 (critério C42m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.01$).

As mesmas conclusões podem ser retiradas pela análise dos resultados obtidos com a aplicação do critério C12m (vd. Figura 5.14). A malha gerada é muito semelhante à correspondente ao critério C42m. No entanto, a malha C12 é relativamente menos densa, o que demonstra novamente o carácter menos sensível da estratégia C12 comparativamente à C42, para condições de execução equivalentes.

Na Figura 5.15 apresenta-se uma experiência radical de geração de malha relativa ao critério C42m com tolerâncias de colocação nodal 5 vezes menores do que as condições de referência constantes na Tabela 5.2. Verifica-se que o aumento de exigência na detecção de anomalias na função leva a um esforço considerável de refinamento que induz a construção de uma malha excessivamente densa (NP = 13729) e notoriamente redundante para uma representação discreta eficiente da função em estudo. Esta execução demonstra a importância de uma correcta sintonização dos parâmetros de implementação das estratégias de colocação, nomeadamente das tolerâncias de activação nodal como elementos críticos de controlo do processo de geração de malha.

Agora, atente-se à função 2D seguinte[1],

$$u(x,y) = -0.4 \tanh(50xy) + 0.6, \quad (5.4)$$

com $[x,y] \in [-1,1]^2$. Esta função designa-se por tgh2D e é representada graficamente na Figura 5.16. A análise desta figura permite constatar a presença de quatro frentes abruptas que partem perpendicularmente de cada uma das quatro fronteiras do domínio no sentido do centro onde se juntam através de uma transição suave.

Mais uma vez se opta por testar a performance dos critérios de colocação nodal 2D C12m e C42m (vd. Tabela 5.3) na representação discreta desta função.

Tabela 5.3 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função tgh2D.

Critério 2D		M_x	M_y		
C12, C42		4	4		
Critério 1D	Ordem da Derivada	N_x	N_y	ϵ_1	ϵ_2
C1 σ	1	8	8	0.25	0.25

Os resultados obtidos através da aplicação dos dois critérios referidos com os dados resumidos na Tabela 5.3 são apresentados nas Figuras 5.17 e 5.18.

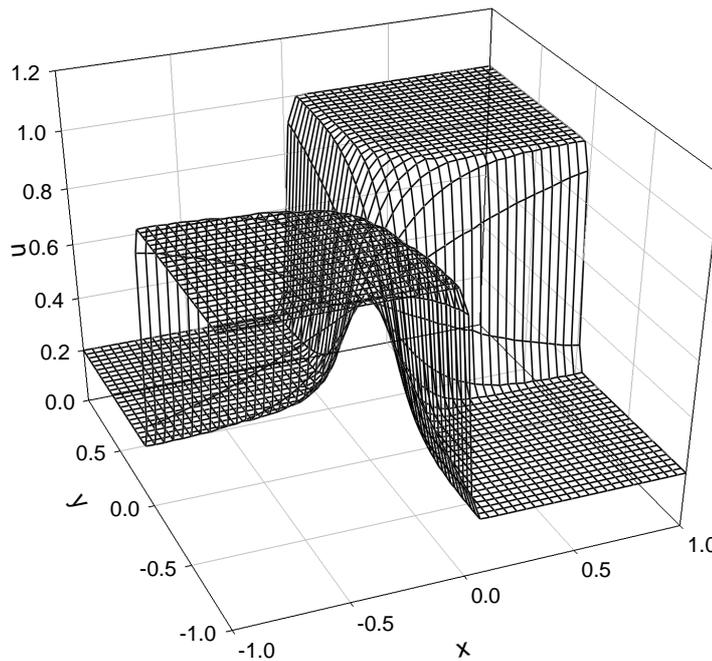


Figura 5.16 Representação gráfica da função tgh2D.

O algoritmo de colocação C42m possibilita uma detecção e representação conveniente das quatro frentes que caracterizam a superfície da função 5.4 (vd. Figura 5.13). Deste modo, o critério C42m possibilita a construção de uma malha que assinala a presença dos declives pronunciados e permite uma simulação correcta das suas curvaturas (vd. Figura 5.17).

Por outro lado, as quatro regiões planas correspondentes são representadas por malhas de relaxamento adequado referente ao nível mínimo de resolução. As características essenciais da função são reproduzidas de uma forma discreta por uma malha de dimensão bastante razoável (NP = 1485).

Conclusões semelhantes podem ser retiradas através da análise dos resultados conseguidos com a aplicação do critério C12m (vd. Figura 5.18). Agora, a malha gerada é relativamente semelhante à referente ao critério C42m. Todavia, neste caso a malha C12 é notoriamente mais densa (NP = 2709), para condições de execução equivalentes, conduzindo a um processo de refinamento mais intenso e concentrado nas regiões do domínio ocupadas pelas frentes abruptas.

Na Figura 5.19 ilustra-se uma experiência mais exigente relativa ao critério C42m, com tolerâncias de colocação nodal 2.5 vezes menores do que as condições da Tabela 5.3.

Novamente se verifica que o aumento de sensibilidade na detecção de gradientes elevados na função leva a um aumento considerável do esforço de refinamento, que conduz à construção de uma malha desnecessariamente densa (NP = 3917).

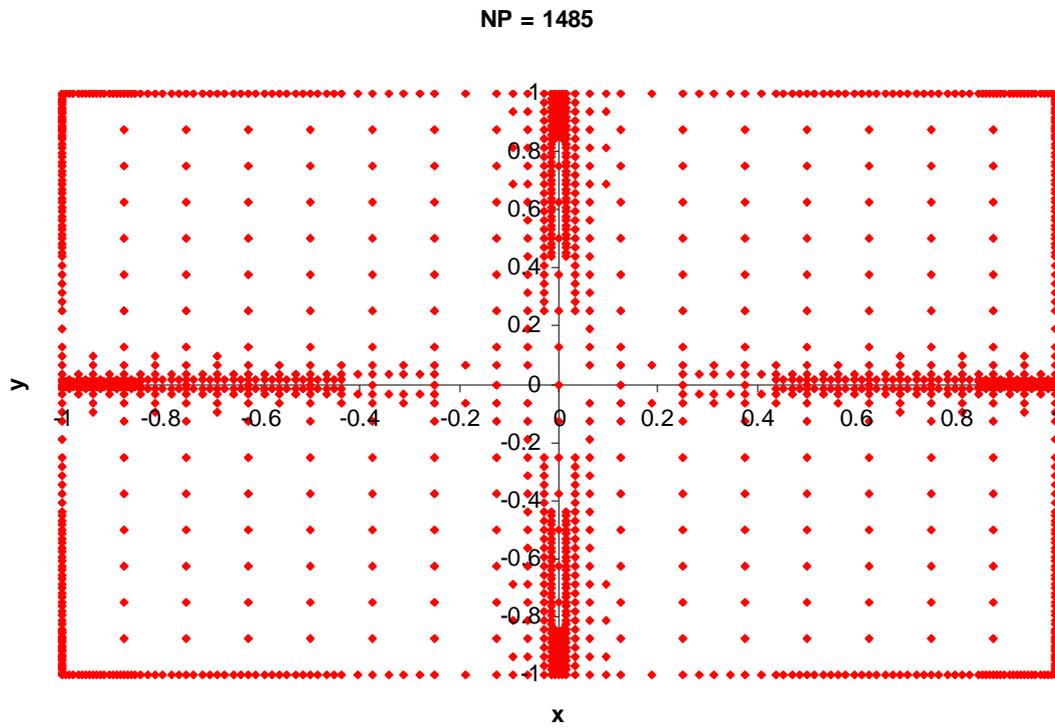


Figura 5.17 Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C42m).

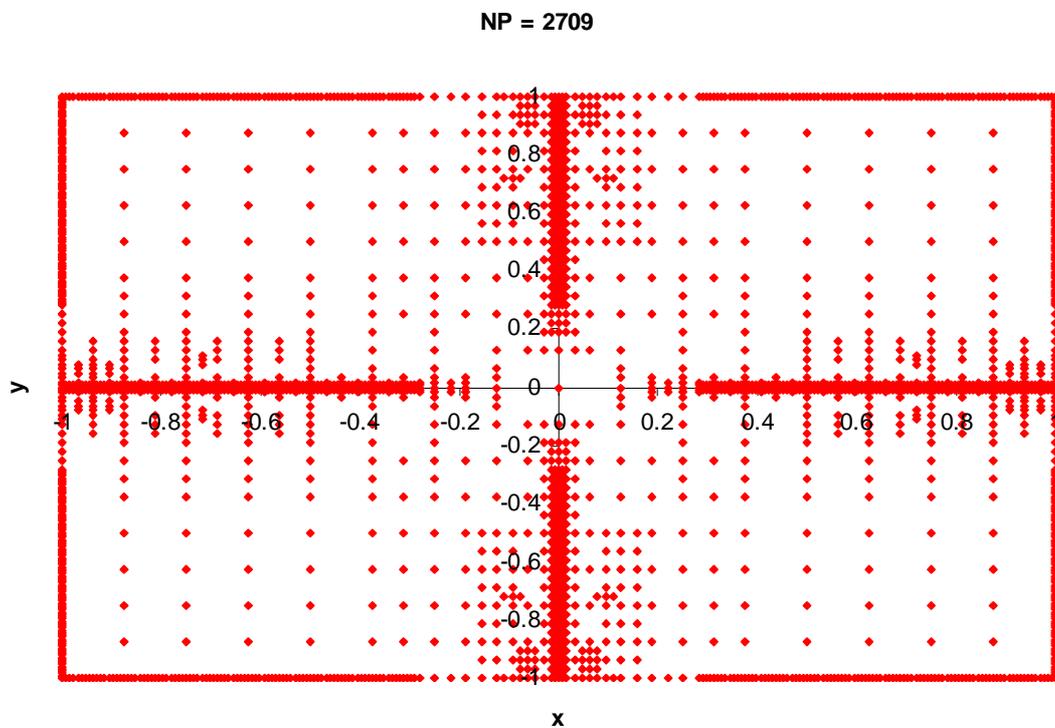


Figura 5.18 Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C12m).

NP = 3917

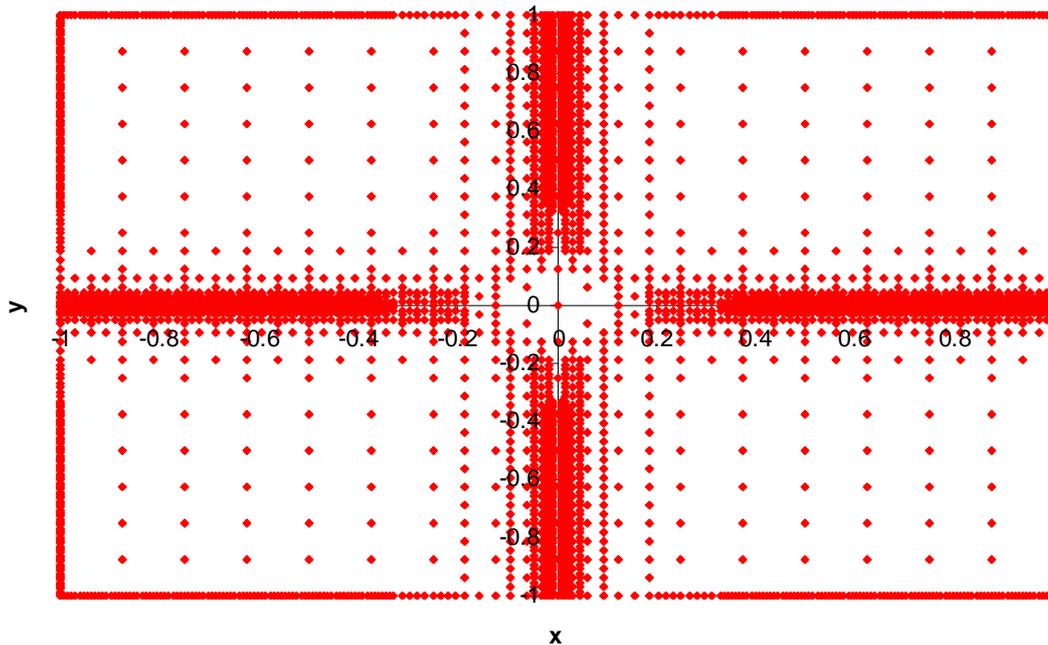


Figura 5.19 Geração de malha bidimensional para a função tgh2D (critério C42m – $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.1$).

Pretende-se agora analisar uma função que define uma depressão pronunciada (vd. Figura 5.20), designada por função well, e que é dada por[1]:

$$u(x,y) = -e^{-60(y-2x^2)^2} + 1.2, \tag{5.5}$$

definida no domínio bidimensional $[-1,1]^2$. A representação gráfica da função 5.5 é realizada na Figura 5.20.

Tabela 5.4 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função well.

Critério 2D		M_x	M_y		
C12, C42		4	4		
Critério 1D	Ordem da Derivada	N_x	N_y	ε_1	ε_2
C1 σ	1	8	8	0.2	0.2

A implementação dos critérios de geração de malha 2D C12 e C42 com os dados da Tabela 5.4, origina os resultados apresentados nas Figuras 5.21 e 5.22.

No exemplo em estudo, o procedimento de colocação deve representar a depressão pronunciada em forma de crescente rodeada por uma região plana. A utilização do critério C42m leva à geração de uma malha que detecta satisfatoriamente a depressão e possibilita uma simulação correcta do seu formato particular (vd. Figura 5.21). A região plana é reproduzida pela malha de nível mínimo de resolução. Assim, as características essenciais da função são simuladas discretamente por uma malha de dimensão aceitável (NP = 3201).

Conclusões semelhantes são obtidas pela análise dos resultados conseguidos com a aplicação do critério C12m (vd. Figura 5.22). A malha gerada revela-se muito semelhante à correspondente ao critério C42m. Porém, a malha C12 apresenta uma

dimensão ligeiramente superior ($NP = 3579$), para condições de execução equivalentes, revelando uma maior apetência para a simulação da curvatura das vertentes da depressão, o que no caso presente se revela pouco significativo.

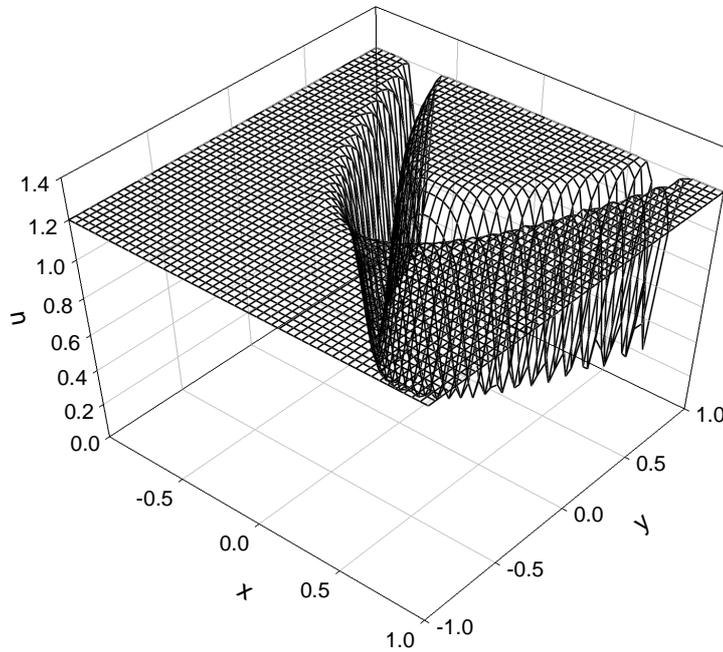


Figura 5.20 Representação gráfica da função well.

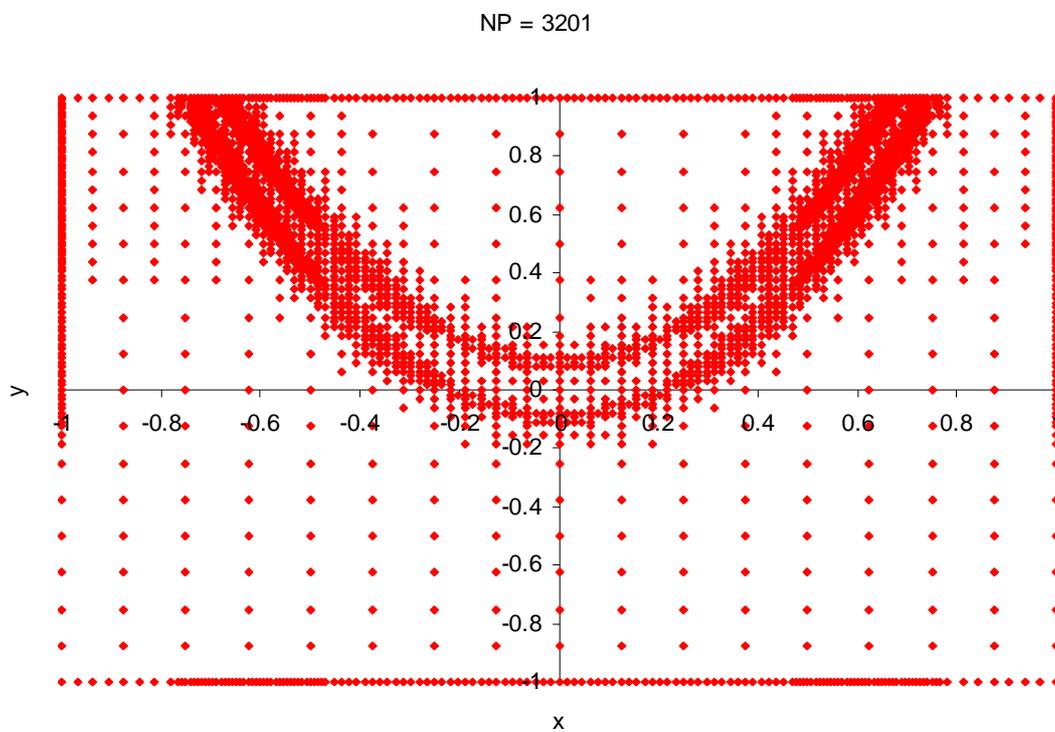


Figura 5.21 Geração de malha bidimensional para a função well (critério C42m).

NP = 3579

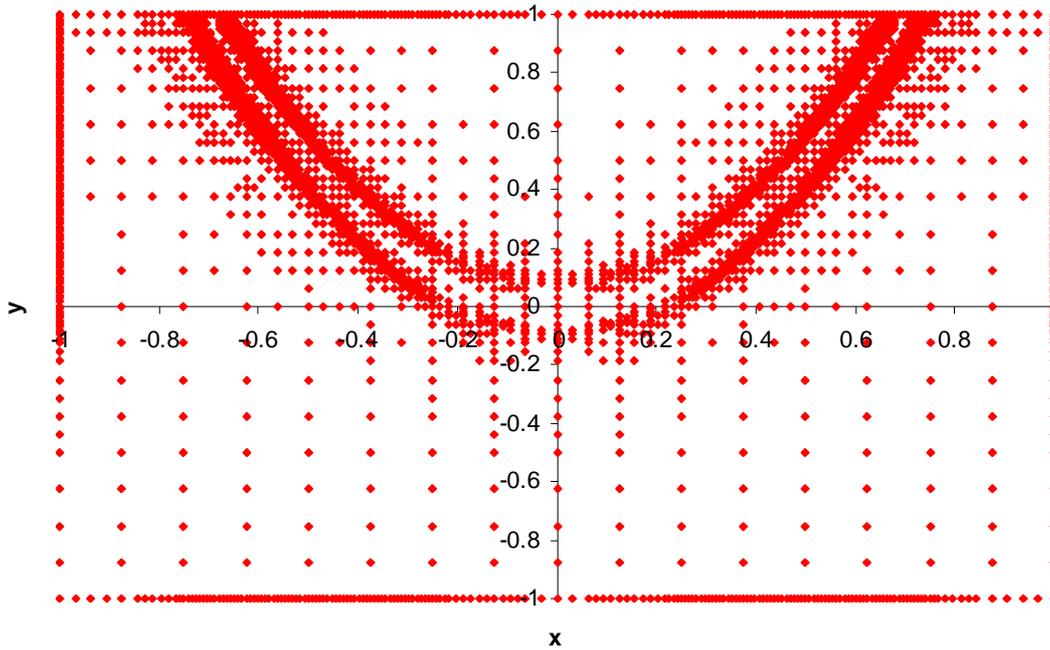


Figura 5.22 Geração de malha bidimensional para a função well (critério C12m).

Considere-se agora para finalizar, a análise de uma função do tipo Franke[1],

$$u(x,y) = e^{-0.1(x^2+y^2)} + e^{-5((x-0.5)^2+(y-0.5)^2)} + e^{-15((x+0.2)^2+(y+0.4)^2)} + e^{-9((x+0.8)^2+(y-0.8)^2)} \quad (5.6)$$

em $[-1,1]^2$. As características desta função podem ser visualizadas no gráfico da Figura 5.23. A observação desta figura permite constatar que a função 5.6 exhibe três elevações ou picos distribuídos por grande parte do domínio espacial.

Testa-se o critério de colocação C42m e verifica-se acerca da sua capacidade de detectar e representar de forma satisfatória e eficiente cada um dos picos referidos acima e as regiões de baixa actividade da função localizadas principalmente no quarto quadrante do domínio. Assim, a implementação do algoritmo de geração de malha C42m, com os parâmetros da Tabela 5.5, proporciona os resultados apresentados nas Figuras 5.24.

Tabela 5.5 Parâmetros numéricos para a geração de malha da função de Franke.

Critério 2D		M_x	M_y		
C42		4	4		
Critério 1D	Ordem da Derivada	N_x	N_y	ϵ_1	ϵ_2
C1 σ	1	8	8	0.05	0.05

Constata-se que a aplicação do critério referido sintonizado com os parâmetros da Tabela 5.5, promove uma distribuição nodal apropriada à representação discreta das particularidades específicas da função 2D, através de acções de refinamento selectivo que possibilitam uma reprodução adequada dos três picos que caracterizam a sua superfície. Assim, a simulação da elevação mais larga localizada no primeiro quadrante (vd. Figura 5.24) exige níveis de resolução consideravelmente mais baixos.

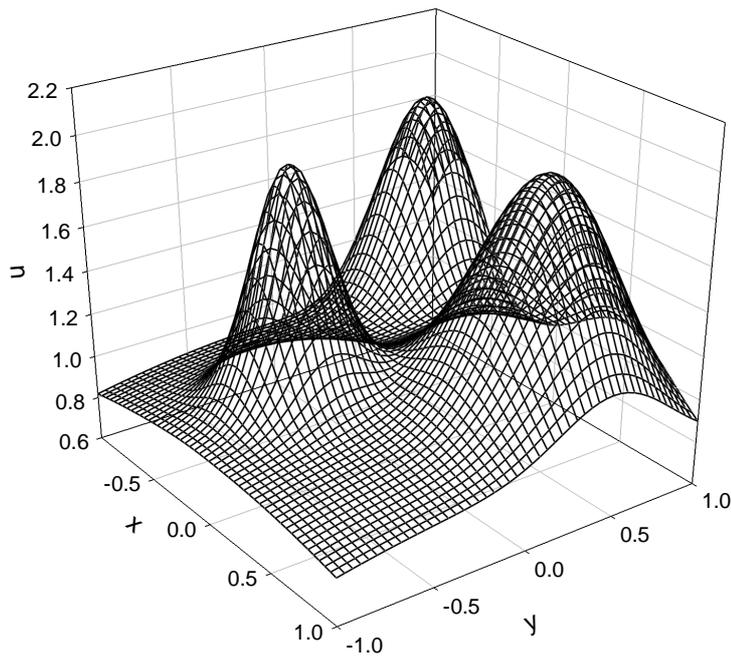


Figura 5.23 Representação gráfica da função de Franke.

Por outro lado, a reprodução discreta dos dois picos restantes exige o recurso a operações de refinamento mais intensas, que permitem o tratamento dos declives mais pronunciados que as caracterizam.

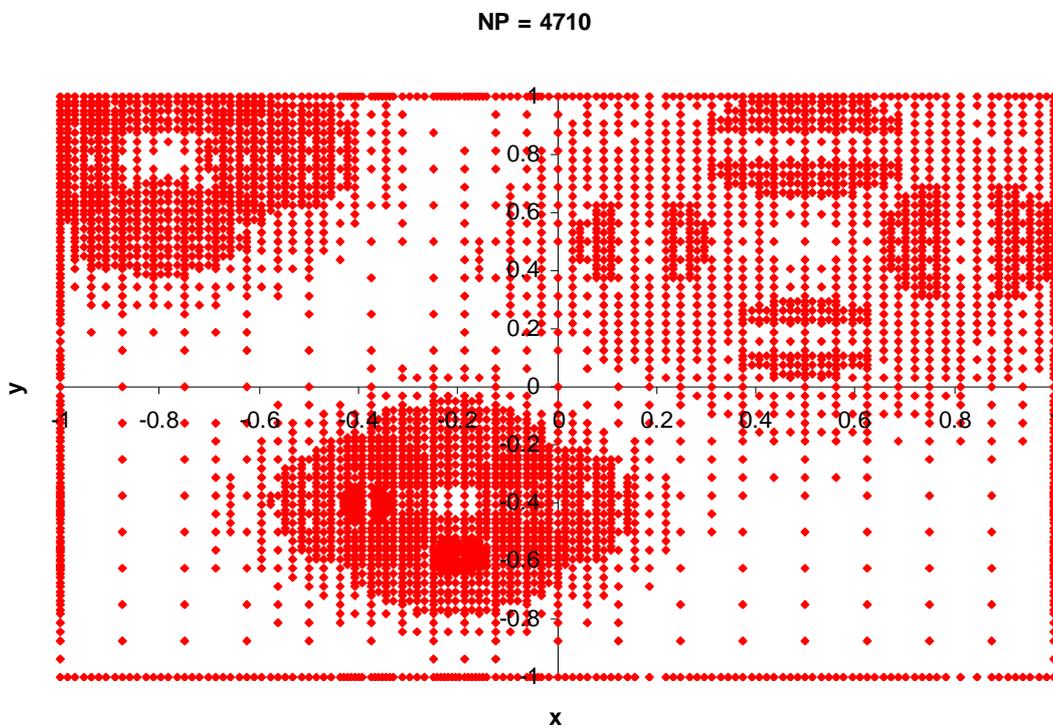


Figura 5.24 Geração de malha bidimensional para a função de Franke (critério C42m).

As regiões mais suaves da função são igualmente sustentadas de modo eficiente por malhas com níveis de resolução adequados à sua correcta representação.

Deste modo, conclui-se que a implementação da estratégia C42 ao caso particular da função 5.6 é notoriamente bem sucedida.

Os resultados apresentados nesta secção permitem avaliar a capacidade dos algoritmos de colocação nodal 2D de gerarem malhas adequadas à representação discreta de funções 2D que revelem atributos problemáticos. A demonstração desta capacidade é demonstrada pelo facto de todas as representações das funções 2D testadas serem executadas através do recurso a malhas construídas no âmbito do presente trabalho.

5.2 RESOLUÇÃO DE MODELOS DIFERENCIAIS BIDIMENSIONAIS

Na secção anterior confirma-se a capacidade dos algoritmos de colocação nodal na representação de características problemáticas em funções bidimensionais. O passo seguinte consiste no teste do desempenho do algoritmo de resolução numérica INTEGR2D descrito na secção 3.5.2, acoplado a diferentes critérios de geração de malhas adaptativas 2D. Deste modo, apresentam-se em seguida os resultados numéricos obtidos pela aplicação do algoritmo a modelos diferenciais de teste bidimensionais, caracterizados por possuírem atributos complicados, como a representação do movimento de ondas e frentes abruptas, ou o desenvolvimento progressivo de frentes estáticas ou dinâmicas do mesmo tipo.

No entanto, o incremento de uma direcção coordenada conduz a um aumento considerável da complexidade das malhas adaptativas geradas. Assim, um problema 1D típico conduz à construção de malhas adaptativas definidas por $NP = 200-250$ nodos no máximo, e conseqüentemente, o processo de discretização MOL gera sistemas de ODE's com $n \times NP$ variáveis e equações (em que n corresponde ao número de variáveis do sistema de PDE's original). Por outro lado, uma malha 2D pode atingir facilmente uma dimensão da ordem dos milhares de nodos (como é facilmente perceptível através da análise dos exemplos apresentados na secção precedente. Assim, o sistema de ODE's gerado para casos 2D pode ser constituído por 10^3-10^4 equações e variáveis.

A utilização do integrador DASSL (vd. Anexo C) implica o cálculo do Jacobiano do problema PDE. No entanto, como se pretende que as aplicações desenvolvidas sejam o mais genéricas possível, é impraticável o desenvolvimento de uma rotina geral JAC e, deste modo, é possível recorrer a duas alternativas: 1 – atribuir a responsabilidade da construção da rotina JAC ao utilizador que a define consoante o problema particular que se pretende resolver e a estratégia de discretização espacial considerada; 2 – recorrer à possibilidade da própria DASSL estimar automaticamente a matriz jacobiana através de aproximações numéricas. A opção escolhida em todas as implementações de resolução numérica de modelos diferenciais parciais evolutivos que envolvem o integrador DASSL (ou seja, os exemplos unidimensionais) é a segunda. Porém tal implica a utilização de capacidades consideráveis de memória, já que é exigido o armazenamento de uma enorme quantidade de dados auxiliares. De facto, a execução do integrador DASSL de uma matriz Jacobiana do tipo total (full) para um modelo com NEQ equações, conduz à definição de um vector de trabalho ($RWORK$) com dimensão

da ordem de NEQ^2 [2]. Assim, é fácil verificar que a resolução de modelos discretizados constituídos por 10^3 - 10^4 (ou mesmo 10^5) equações (associados a malhas de dimensão correspondente) coloque graves problemas de implementação computacional devido às suas óbvias exigências de memória. Uma alternativa viável seria a possibilidade prevista no código DASSL de se proceder à definição de matrizes multidagonais (banded), que explora o facto da maioria dos elementos do Jacobiano serem efectivamente nulos. Deste modo, seria necessário estabelecer o tamanho das bandas acima (MU) e abaixo (ML) da diagonal que definem o domínio dos elementos da matriz que são estimados (sendo todos os restantes fixados como nulos). Neste caso, as exigências de memória reduzem-se drasticamente para valores de MU e ML razoáveis ($2ML + MU < NEQ$), já que $RWORK$ apresenta agora uma dimensão da ordem de $(2ML + MU)NEQ$. No entanto, a forma como as variáveis são organizadas no vector solução (sequências sucessivas da solução definidas ao longo da direcção x , para diferentes variáveis ou localizações em y) implica que a estratégia anterior apenas seja praticável na resolução de exemplos constituídos por PDE's simples unidimensionais, em que a solução em cada posição apenas depende da solução nas posições adjacentes. Tal não acontece no caso de sistemas de PDE's 1D ou modelos 2D, já que, nestes casos, a solução discreta é igualmente definida pela solução discreta referente a outras variáveis ou a diferentes valores da segunda coordenada (y), que não se situam em posições adjacentes à localização de interesse no vector solução. Deste modo, as larguras das bandas teriam de ser consideravelmente expandidas de modo a se levar em conta este problema de forma conveniente, o que aumenta consideravelmente as necessidades de memória da aplicação.

Como se referiu anteriormente a questão revela-se pouco importante para exemplos 1D, que não atingem dimensões excessivas. Todavia, o caso muda de figura para problemas 2D. Deste modo, opta-se por adoptar um integrador menos complexo na integração deste tipo de problemas. A aplicação seleccionada corresponde à rotina RKF45 que implementa o método de Runge-Kutta-Fehlberg de quarta-quinta ordem[3-4], um método de baixa ordem do tipo Runge-Kutta, desenvolvido por Fehlberg, 1969[5]. Este método é consideravelmente menos exigente (nomeadamente em termos de necessidade de armazenamento de dados, e.g. vector $WORK$ de dimensão $3+6NEQ$) do que o algoritmo BDF da rotina DASSL. Por outro lado, apresenta a desvantagem de ser concebido para problemas não stiff ou moderadamente stiff, e aplicações de exactidão não demasiado elevada.

Os exemplos de aplicação apresentados em seguida pretendem ilustrar a eficiência e robustez do algoritmo INTEGR2D na resolução de modelos de teste evolutivos definidos em domínios espaciais bidimensionais.

5.2.1 EQUAÇÃO DE BURGERS BIDIMENSIONAL

O modelo de Burgers já referida no capítulo anterior resulta da aplicação da equação de Navier-Stokes a fluidos incompressíveis com gradientes de pressão desprezáveis[6]. Assim, a sua versão bidimensional na forma conservativa sem influências difusivas é dada pela equação de Burgers invíscida 2D que tem a forma,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\left(\frac{\partial f(u)}{\partial x} + \frac{\partial f(u)}{\partial y}\right), \quad (5.7)$$

em que a função $f(u)$ é definida por $f(u) = u^2/2$. Neste caso particular, consideram-se os domínios: $-1 \leq x \leq 1$, $-1 \leq y \leq 1$, $0 \leq t \leq 1.5$; as condições fronteira,

$$u(-1, y, t) = u(1, y, t) = u(x, -1, t) = u(x, 1, t) = 0, \tag{5.8}$$

e a condição inicial é estabelecida como pulso cilíndrico unitário:

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & (x + 0.5)^2 + (y + 0.5)^2 \leq 0.4^2 \\ 0, & \text{else in } [x, y] \in [-1, 1]^2 \end{cases} \tag{5.9}$$

Deste modo, executa-se a resolução numérica deste modelo através da aplicação da estratégia de geração de malha 2D C52 e as condições resumidas na Tabela 5.6.

Assim testam-se os critérios de colocação 1D C1σ e C2 para monitorização da 1.ª derivada da solução aproximada por FD de 4.ª ordem centradas avaliadas nas direcções coordenadas x e y . As tolerâncias de colocação nodal (ϵ_1 e ϵ_2) são fixadas em 0.1 e malha adaptativa é construída sobre um conjunto de malhas diádicas uniformes que variam entre os níveis de resolução 4 e 8 em ambas as direcções.

As derivadas espaciais de 1.ª ordem do modelo são estimadas por esquemas de alta resolução (HRS), nomeadamente o método NVSF associado a limitadores de fluxo MINMOD ou SMART. O processo de interpolação é realizado através de splines cúbicas de 7 nodos e a integração temporal adoptada recorre ao integrador RKF45 com tolerâncias de 1×10^{-5} e um passo de integração global de 0.01.

O esquema de geração de malhas 2D C52 para sistemas discretos (C52i) é semelhante ao correspondente C52m, apresentando no entanto algumas características distintas adicionais, essenciais para uma correcta representação das superfícies numéricas intermédias utilizadas como suporte da sequência dos passos de integração temporal que constituem o procedimento MOL.

Tabela 5.6 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação 2D de Burgers.

Colocação nodal	• Critério 2D	C52	
	• Critério 1D	C1σ; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.1	0.1
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		4	8
		M_y	N_y
		4	8
		FD centradas; 5 pontos uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	HRS – NVSF/SMART; MINMOD	
	• diferenciação ($n > 1$)	NA	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-2}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-5}	1×10^{-5}

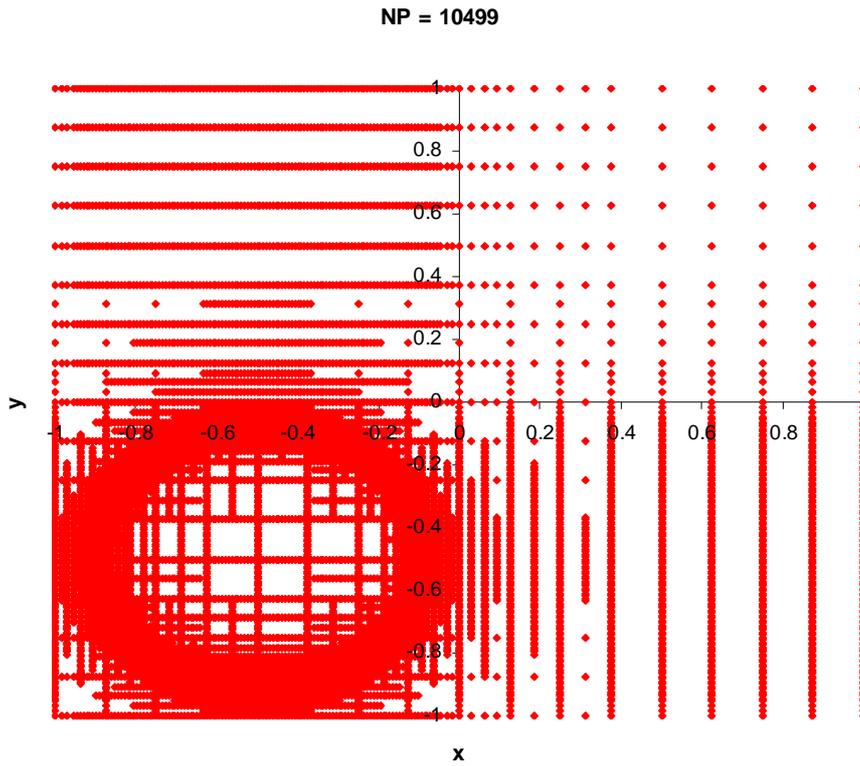


Figura 5.25 Malha inicial gerada para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

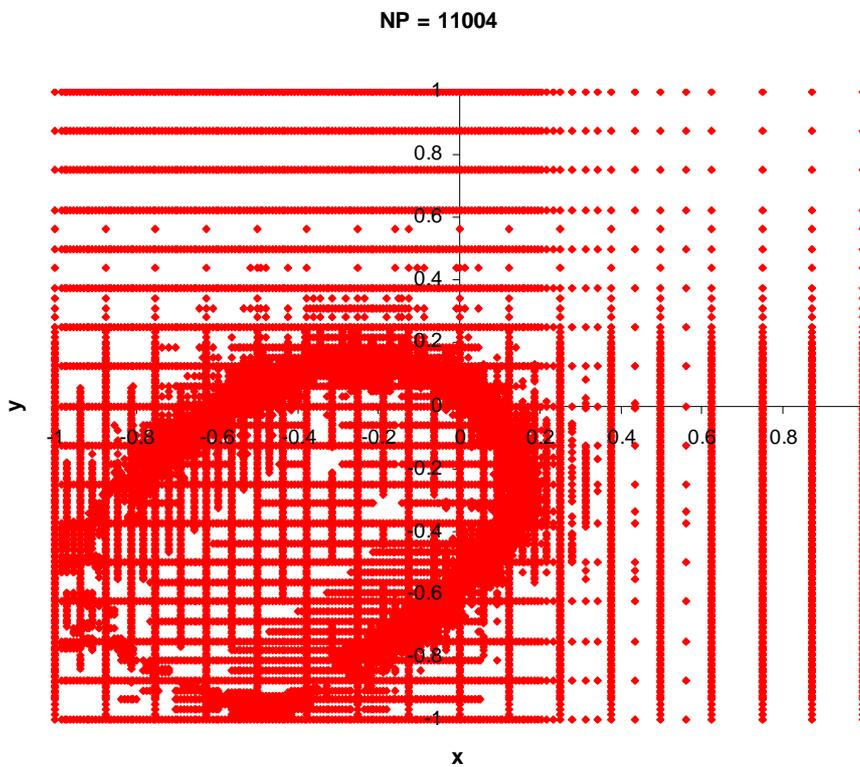


Figura 5.26 Malha gerada ($t = 0.5$) para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

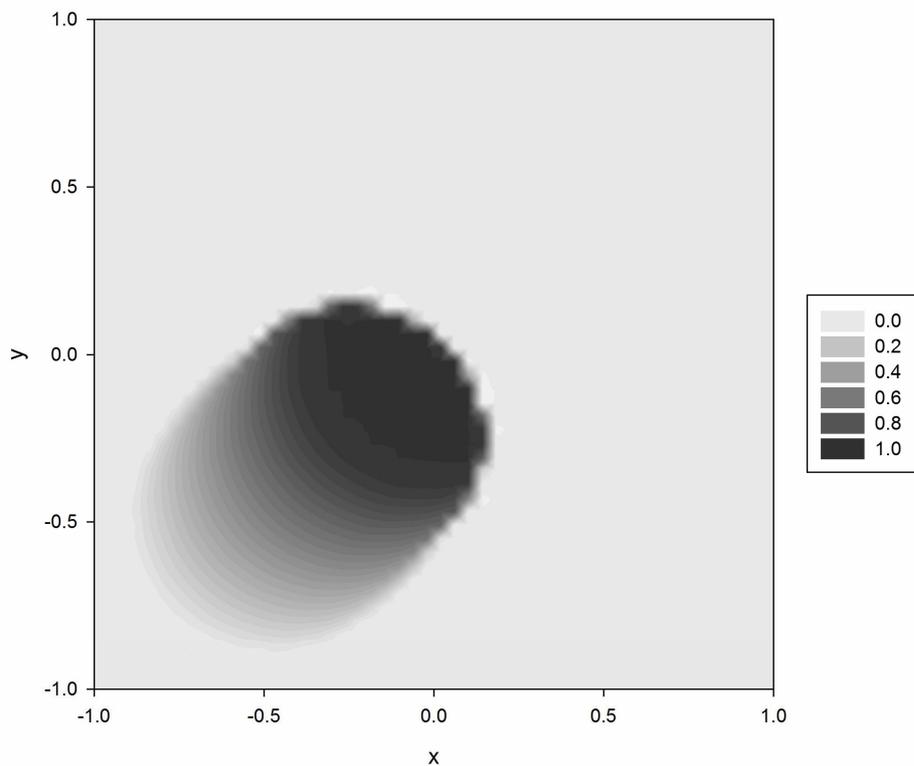


Figura 5.27 Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 0.5$) do modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

A versão original do procedimento C52m implica a activação de todos os nodos fronteira correspondentes às sequências 1D em x e y que possuam pelo menos um nodo activo interior associado a qualquer nível de resolução. Porém, no algoritmo C52i introduz-se um procedimento suplementar de colocação nodal que, nas condições referidas anteriormente, coloca igualmente todos os nodos de nível M referentes a domínios 1D previamente activados.

A aplicação desta estratégia à condição inicial do problema nas condições definidas na Tabela 5.6 leva à geração da malha apresentada na Figura 5.25. No entanto, é importante referir que a geração da malha inicial é executada através de uma implementação sucessiva das rotinas C52m (para uma solução analítica disponível) e C52i para um melhorado varrimento do domínio discretizado. As diferenças relativas entre os dois procedimentos descritos conduzem à construção de malhas substancialmente diferentes. Assim, a malha C52i possibilita um suporte mais robusto para o arranque do processo de integração temporal. De qualquer modo, frisa-se que a estratégia de varrimento inicial duplo é especialmente importante em casos em que as características problemáticas da solução são introduzidas através das fronteiras do domínio e não estão explicitamente presentes na condição inicial do problema, como se verifica no caso presente.

A análise da Figura 5.25 permite concluir que o esquema de geração de malha associado ao critério de colocação $C1\sigma$ possibilita uma simulação apropriada dos contornos do pulso cilíndrico inicial centrado no terceiro quadrante do domínio.

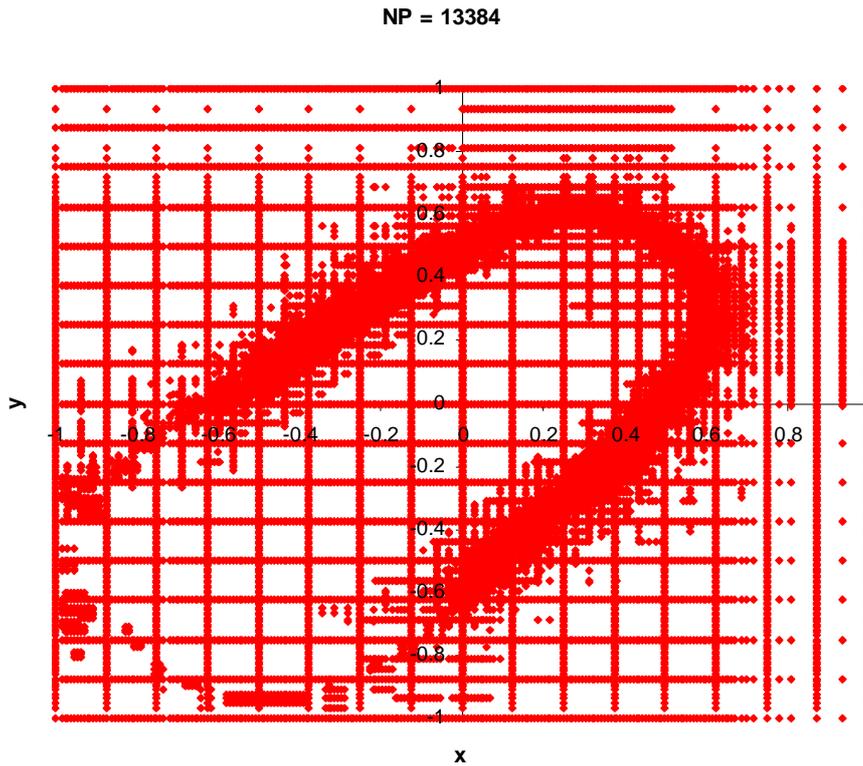


Figura 5.28 Malha gerada ($t = 1.5$) para o modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

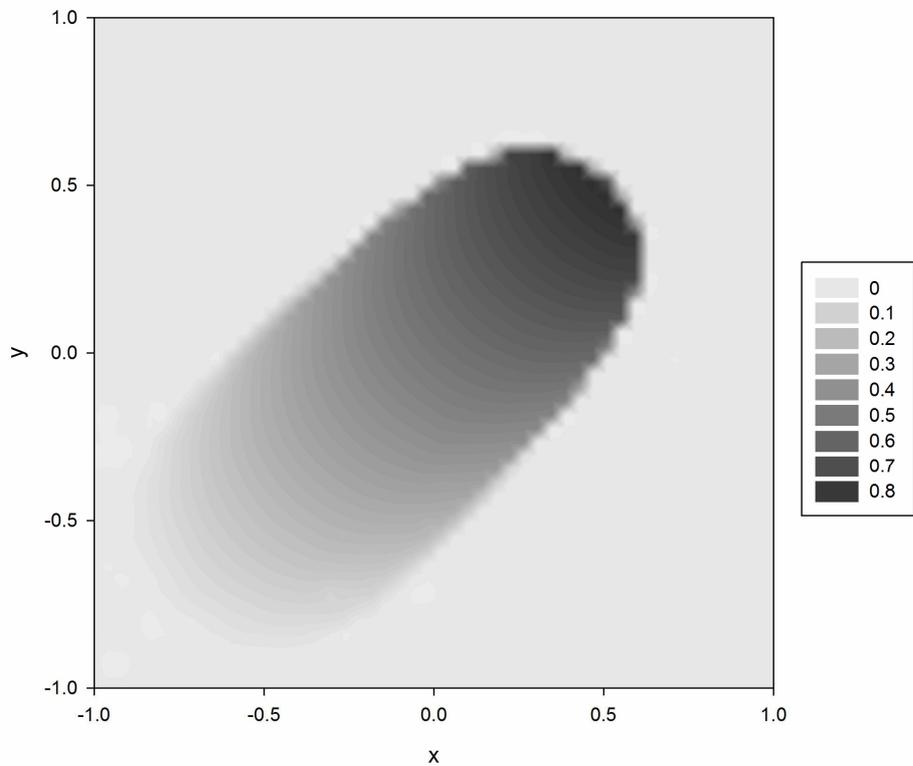


Figura 5.29 Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 1.5$) do modelo invíscido de Burgers 2D (discretização NVSF com limitador SMART e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

No caso presente, o pulso é deslocado na direcção positiva de ambas as direcções. No entanto, a velocidade de propagação é estabelecida pelo próprio valor da solução em posição do domínio. Assim, formam-se duas frentes que se movimentam com velocidades diferentes. A secção nula a montante do pulso mantém-se inamovível e a frente abrupta anterior movimenta-se com uma velocidade igual à amplitude do pulso ($u = 1$). Desta forma forma-se uma rampa de declive decrescente e largura crescente, gerada pelo movimento da frente anterior. Por outro lado, a frente posterior é bloqueada pela secção nula situada à direita do pulso. Assim, esta frente desloca-se com uma velocidade definida por $(1 + 0)/2 = 0.5$ e mantém-se completamente inalterada, ou seja, não sofre qualquer suavização com o avanço da integração.

A evolução da solução do modelo 5.7 a 5.9 é resumida nas Figuras 5.26 a 5.29, para o limitador SMART. As características da solução referidas acima são perfeitamente visíveis através da análise dos resultados numéricos disponíveis. O deslocamento do pulso com a consequente suavização a montante e a manutenção do perfil abrupto a jusante, é notório nos perfis de contorno apresentados nas Figuras 5.27 e 5.29. Por outro lado, o algoritmo de geração de malha revela-se eficiente no acompanhamento das características da solução, promovendo a concentração de nodos nos contornos da frente evolutiva (vd. Figuras 5.26 e 5.28).

A utilização do critério de colocação alternativo C2 e do limitador MINMOD proporciona resultados análogos (não apresentados neste relatório) aos discutidos anteriormente. De facto, a implementação dos limitadores testados revela-se perfeitamente equivalente, como se confirma pela observação da Figura 5.30, em que a evolução da dimensão das malhas dos ensaios C1σ é muito semelhante. Por outro lado, a implementação do critério de colocação C2 nas mesmas condições é notoriamente mais sensível, conduzindo à geração de malhas relativamente mais densas.

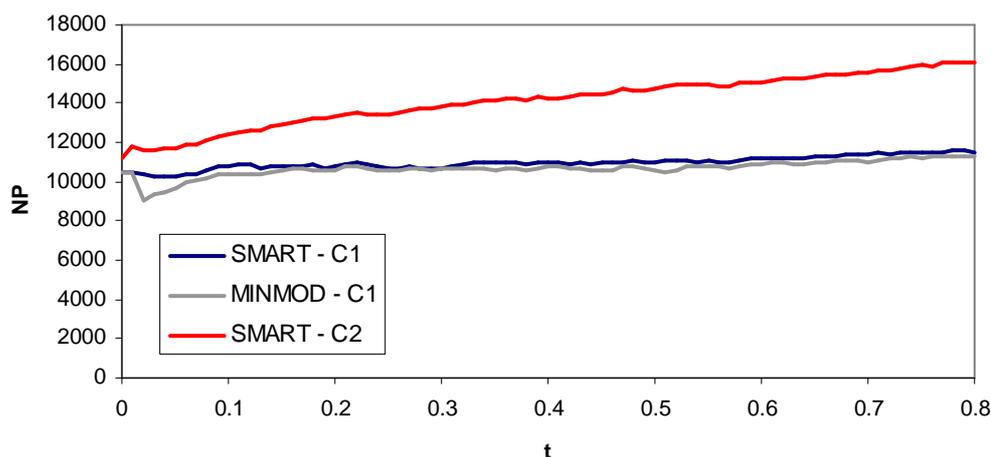


Figura 5.30 Evolução da dimensão das malhas adaptativas para a implementação do modelo invíscido de Burgers 2D.

5.2.2 EQUAÇÃO DE BUCKLEY-LEVERETT BIDIMENSIONAL

A equação de Buckley-Leverett (BL) é um exemplo clássico que resulta da aplicação de um balanço material a um sistema de dois fluidos imiscíveis, em que um dos fluidos é

deslocado pelo outro num meio poroso[6]. A versão 2D do modelo sem gradientes de pressão assume uma forma equivalente à do modelo de Burgers 2D não difusivo, ou seja a equação 5.7, mas agora com uma função $f(u)$ diferente, por exemplo,

$$f(u) = u^2 / (u^2 + (1 - u)^2), \tag{5.10}$$

com $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$, $0 \leq t \leq 0.5$; as condições fronteira (se se considerar a possível introdução de um termo difusivo estabilizador),

$$u(0,0,t) = 1, \frac{\partial u}{\partial x}(0,y,t) = \frac{\partial u}{\partial y}(x,0,t) = 0, \tag{5.11}$$

e a condição inicial,

$$u(x,y,0) = 0. \tag{5.12}$$

O modelo BL puramente advectivo é resolvido com os dados presentes na Tabela 5.7. Neste caso, a solução consiste numa frente propagada nas duas direcções coordenadas, introduzida na posição [0,0] através de um degrau representado pela condição fronteira de Dirichlet definida nessa posição. À medida que a frente avança a sua amplitude decresce. No entanto, o seu declive mantém-se significativamente acentuado, já que não é suavizado pela influência estabilizadora de um termo difusivo.

Tabela 5.7 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação BL 2D.

Colocação nodal	• Critério 2D	C52	
	• Critério 1D	C1σ; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.1	0.1
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		4	8
		M_y	N_y
		4	8
		FD centradas; 5 pontos uniforme	
Discretização espacial	• Aproximações	HRS – NVSF/MINMOD; SMART	
	• diferenciação ($n > 1$)	NA	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-5}	1×10^{-5}

A malha inicial obtida por um duplo varrimento C52m e C52i é apresentada na Figura 5.31. Como a perturbação é introduzida na fronteira, o suporte para características abruptas do modelo não é assegurado pela simples geração com suporte analítico.

Assim, um duplo varrimento C1σ proporciona uma malha inicial de arranque mais densa e mais adequada às particularidades posteriores da solução (vd. Figura 5.31), possibilitando uma densificação prévia das regiões do domínio inicialmente percorridas pela onda de propagação abrupta introduzida na posição [0,0].

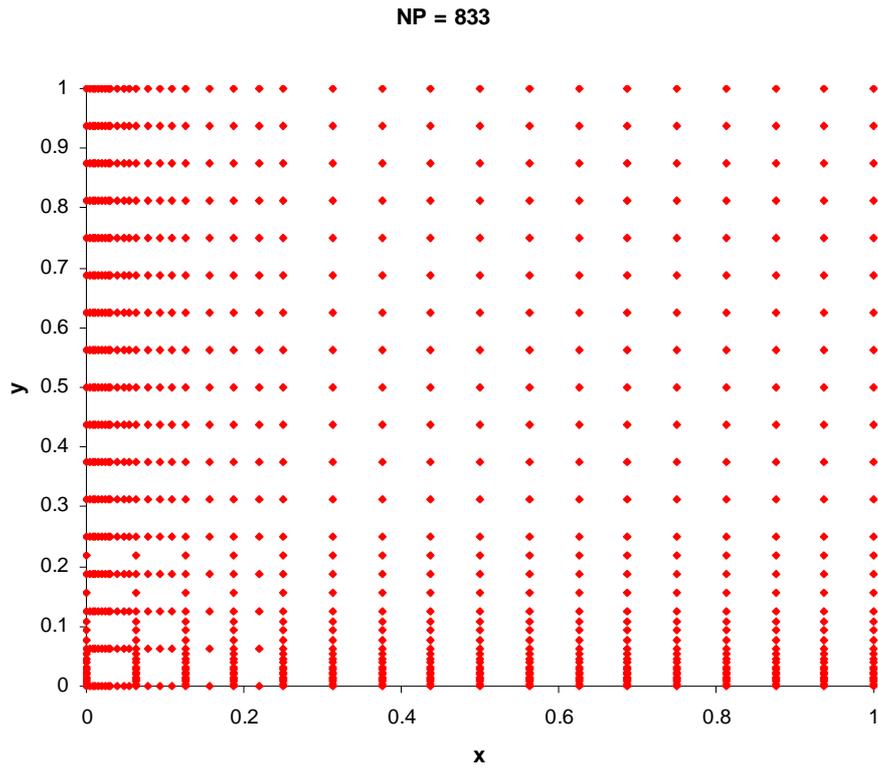


Figura 5.31 Malha inicial gerada para o modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

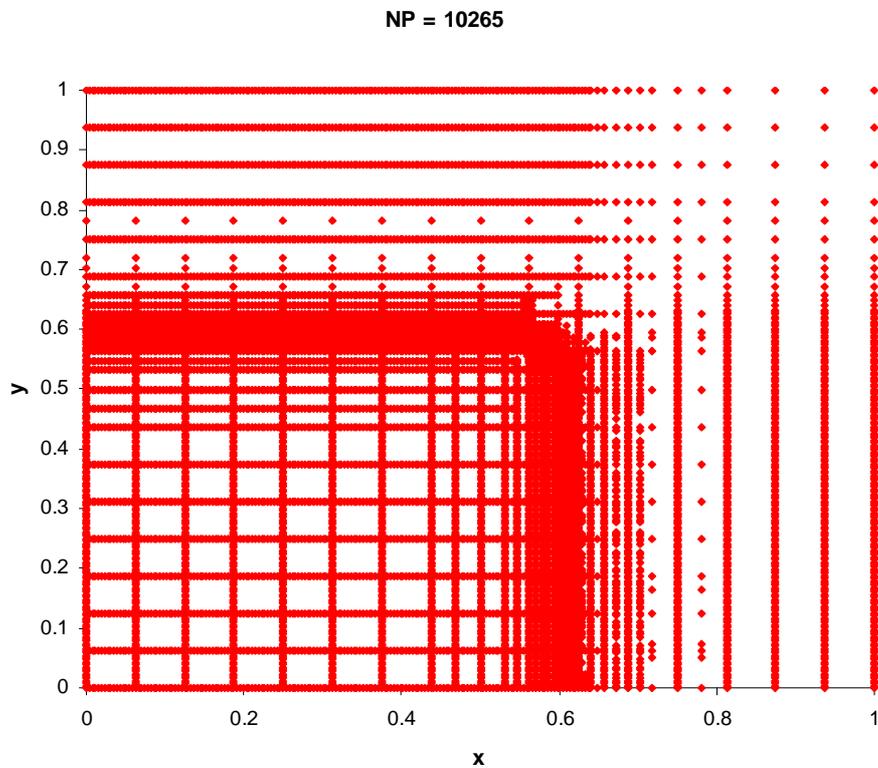


Figura 5.32 Malha gerada ($t = 0.5$) para o modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

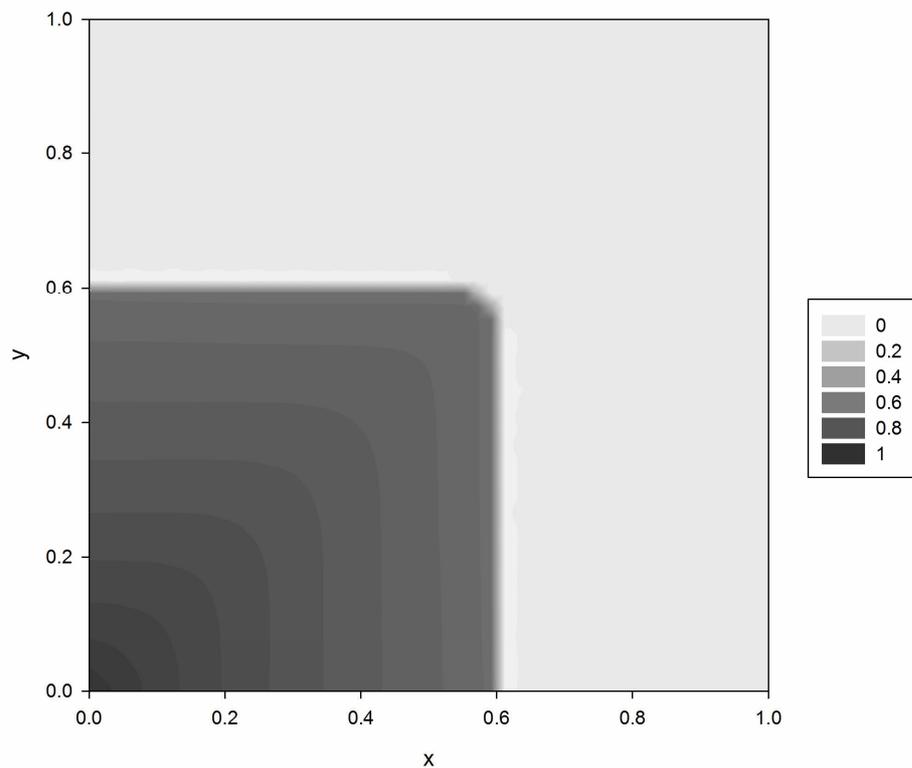


Figura 5.33 Perfis de contorno para a solução numérica ($t = 0.5$) do modelo BL 2D (discretização NVSF com limitador MINMOD e critério de colocação 1D $C1\sigma$).

A adequação da estratégia de adaptação associada ao limitador MINMOD é ilustrada pelos resultados numéricos resumidos nas Figuras 5.32 e 5.33. Assim, verifica-se a capacidade do algoritmo de geração de malha na representação da frente abrupta e do seu movimento através da análise da malha gerada (vd. Figura 5.32) e dos perfis de contorno (vd. Figura 5.33) para o instante $t = 0.5$.

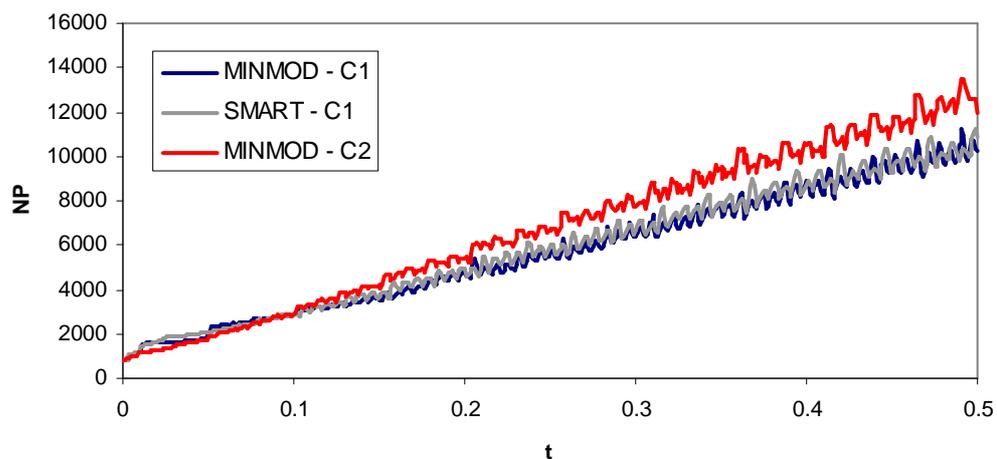


Figura 5.34 Evolução da dimensão das malhas adaptativas para a implementação do modelo BL 2D.

Os testes adicionais do limitador SMART e do algoritmo de colocação nodal C2 permite a obtenção de resultados análogos (não apresentados no presente relatório) com

desempenhos semelhantes (vd. Figura 5.34). Novamente se verifica a relativa maior sensibilidade do critério C2 em relação ao C1 σ para níveis de detecção equivalentes. Até ao tempo final fixado ($t = 0.5$) constata-se um incremento notório na dimensão das malhas geradas, consistente com o avanço da frente abrupta. No entanto, esta dimensão não se revela demasiado excessiva, levando a implementações computacionais com tempos de processamento razoáveis ($t_{cpu} = 360-460$ s).

Deste modo, os resultados apresentados nesta secção permitem a confirmação da capacidade dos algoritmos de colocação nodal 2D de gerarem malhas flexíveis e adequadas no contexto da resolução numérica de modelos 2D caracterizadas por soluções problemáticas.

REFERÊNCIAS

1. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.
2. L.R. Petzold (1982) *A description of DASSL: a differential/algebraic system solver*, Sandia Tech. Rep. - **8637**.
3. L. Shampine, H. Watts, S. Davenport (1976) "Solving non-stiff ordinary differential equations - The state of the art", *SIAM Rev.*, **18** (3), pp. 376-411.
4. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/rkf45/rkf45.html (consulta em 1/02/2010).
5. E. Fehlberg (1969) *Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control*, NASA Tech. Rep. **R-315**.
6. J.C. Santos, P. Cruz, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "2-D Wavelet-based adaptive-grid method for the resolution of PDEs", *AIChE J.*, **49** (3), pp. 706-717.

6. SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Neste capítulo apresentam-se os resultados numéricos obtidos pela aplicação dos algoritmos numéricos descritos no Capítulo 3 na resolução de modelos diferenciais parciais evolutivos, definidos sobre domínios espaciais de dimensão arbitrária, que representem a simulação de problemas típicos no âmbito da modelação de processos químicos, exibindo soluções com características problemáticas e desafiantes.

Todas as simulações apresentadas neste capítulo foram realizadas num computador pessoal com um processador Intel Core®2 Duo CPU T9300 de 2.50 GHz, uma memória RAM de 4.00 GB e um sistema operativo de 32 bits.

6.1 MODELO DE DIFUSÃO, CONVECÇÃO E REACÇÃO NUMA PARTÍCULA PLANA (DIFPLANA)

A análise é iniciada através da consideração de um modelo relativamente simples deduzido num domínio espacial 1D. Apesar do problema ser unidimensional, este é integrado através do recurso ao programa INTEGR2D, para o teste da implementação 1D como caso particular de uma aplicação 2D.

O modelo[1-2] seleccionado descreve o estabelecimento de um perfil de concentrações numa partícula plana em condições reaccionais isotérmicas. Para tal, admitindo-se um catalisador poroso, onde ocorre uma reacção catalítica $A \rightarrow P$, e os respectivos mecanismos de transporte de massa por difusão e convecção, obtém-se o balanço mássico transiente normalizado seguinte,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \lambda_m \frac{\partial u}{\partial x} - \phi^2 u, \quad (6.1)$$

em que:

- $u = C/C_0$, concentração adimensional de A , referida à corrente de alimentação.
 - C , concentração de A .
 - C_0 , concentração de A na corrente de alimentação.
- $t = \theta/\tau_D$, variável temporal adimensional.
 - θ , variável temporal.
 - $\tau_D = \varepsilon_p \ell^2 / D_{eff}$, constante de tempo de difusão.
 - ε_p , porosidade da partícula.
 - ℓ , semi-espessura da partícula.
 - D_{eff} , difusividade efectiva do reagente no leito.
- x , variável espacial adimensional.
- $\lambda_m = v_0 \ell / D_{eff}$, número de Peclet mássico intraparticular.
 - v_0 , velocidade do fluido no interior da partícula em relação à área de secção normal do escoamento.

- $\phi = \ell \sqrt{k/D_{eff}}$, módulo de Thiele.
 - k , constante de reacção.

O modelo é definido nos domínios: $x \in [0,2]$, $t \in [0,0.5]$; e completado pelas condições fronteira:

$$u(0,t)=1, u(2,t)=1, \quad (6.2)$$

e a condição inicial,

$$u(x,0)=0. \quad (6.3)$$

Fixe-se então, $\lambda_m = 10$ e $\phi = 2$. Como $\lambda_m \neq 0$, o efeito convectivo não é desprezável e os perfis de solução não são simétricos, tendo-se que considerar o domínio espacial adimensional total, $x \in [0,2]$, já que a condição de simetria não é válida nestas condições.

O arranque do processo é efectuado através da introdução de perturbações em degrau em ambas as fronteiras do domínio, correspondentes (em termos físicos) ao início da alimentação de reagente.

Assim, procede-se ao teste da performance dos critérios C42 e C52 associados aos critérios de colocação nodal C1 σ e C2. A fase crítica da implementação relaciona-se fundamentalmente com o arranque do processo e a representação dos perfis abruptos gerados junto às extremidades do domínio pela introdução das perturbações nas fronteiras. Estas perturbações propagam-se progressivamente para o interior da partícula induzindo uma suavização dos perfis até à sua estabilização completa correspondente a um regime final estacionário assimétrico.

Os parâmetros adoptados nas implementações numéricas referentes ao modelo em estudo são resumidos na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação DifPlana.

Colocação nodal	• Critério 2D	C42 ou C52	
	• Critério 1D	C1 σ ; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	5×10^{-2}	5×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		4	10
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

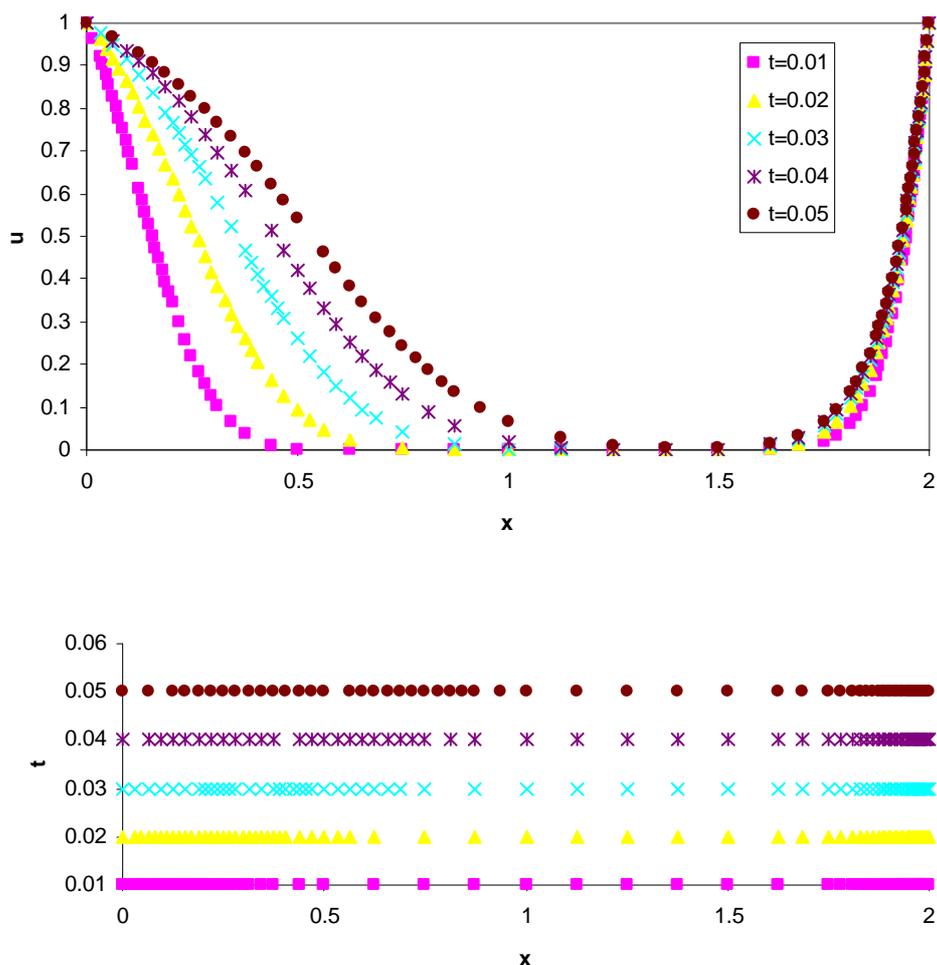


Figura 6.1 Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério $C52/C1\sigma - t = 0.05$).

Por outro lado, os resultados numéricos obtidos no contexto da aplicação do critério $C52$ nas condições de colocação 1D definidas por $C1\sigma$, são apresentados nas Figuras 6.1 e 6.2. A fixação das tolerâncias de colocação nodal no valor de 5×10^{-2} para aproximações FD a derivadas de primeira ordem, possibilita a obtenção de resultados numéricos bastante satisfatórios. A análise da Figura 6.1 demonstra a capacidade do algoritmo de colocação nodal $C1\sigma$ de concentrar inicialmente a densidade da malha adaptativa nas regiões adjacentes às fronteiras (vd. Figura 6.1) de forma a possibilitar a simulação correcta das perturbações em degrau introduzidas através das condições fronteira do problema (vd. equações 6.2). Posteriormente o esforço de refinamento propaga-se ao longo do domínio à medida que as perturbações se movimentam para o interior da partícula, num sentido predominante da esquerda para a direita, devido à consideração de fenómenos de transporte do tipo convectivo. É notório que o esbatimento progressivo das duas frentes móveis promove uma significativa diminuição no esforço de refinamento necessário a uma definição correcta dos perfis espaciais.

Para tempos de integração mais tardios (vd. Figura 6.2), a relativa suavidade dos perfis assimétricos centrados em torno da posição $x \approx 1.7$ induz a geração de malhas de dimensão relativamente baixa. Agora, o esforço de refinamento centra-se

essencialmente na vizinhança da fronteira direita do domínio, onde o declive do perfil ainda se mantém algo acentuado.

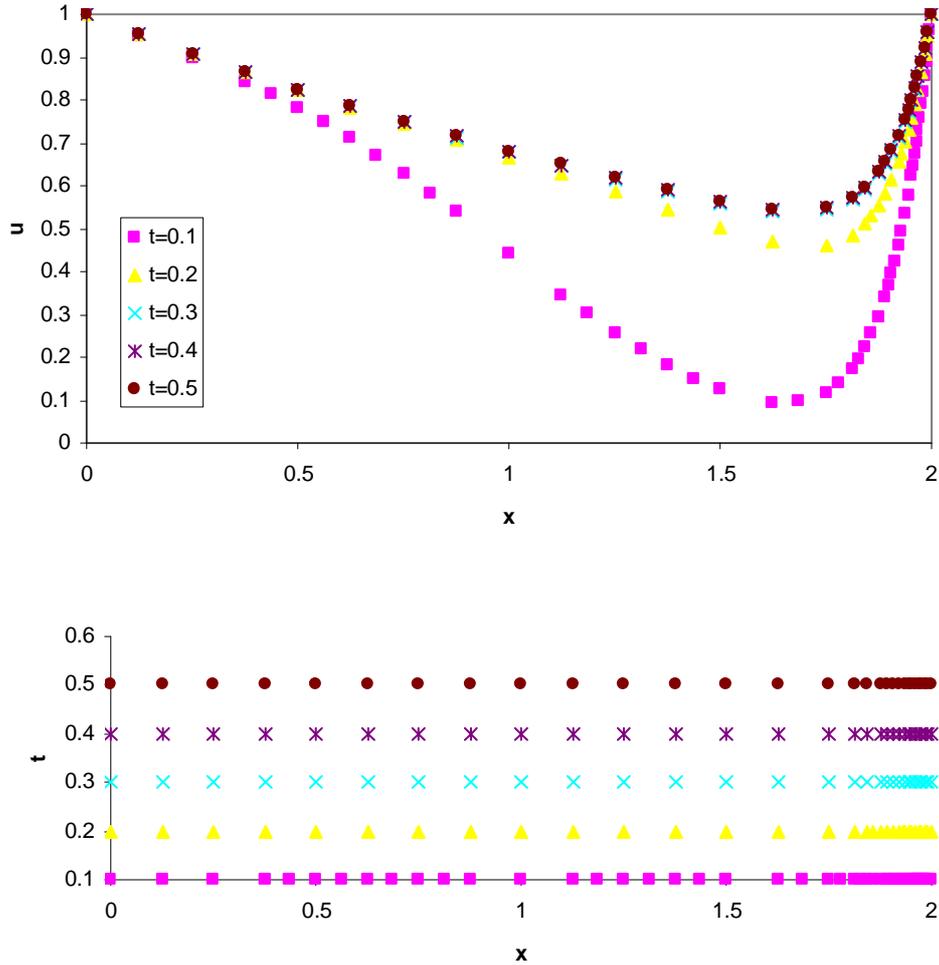


Figura 6.2 Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério $C52/C1\sigma - t = 0.5$).

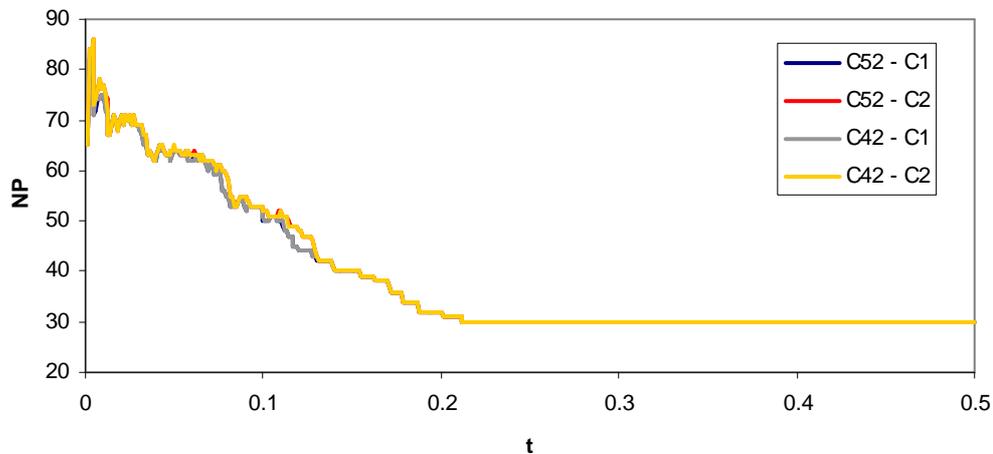


Figura 6.3 Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação DifPlana.

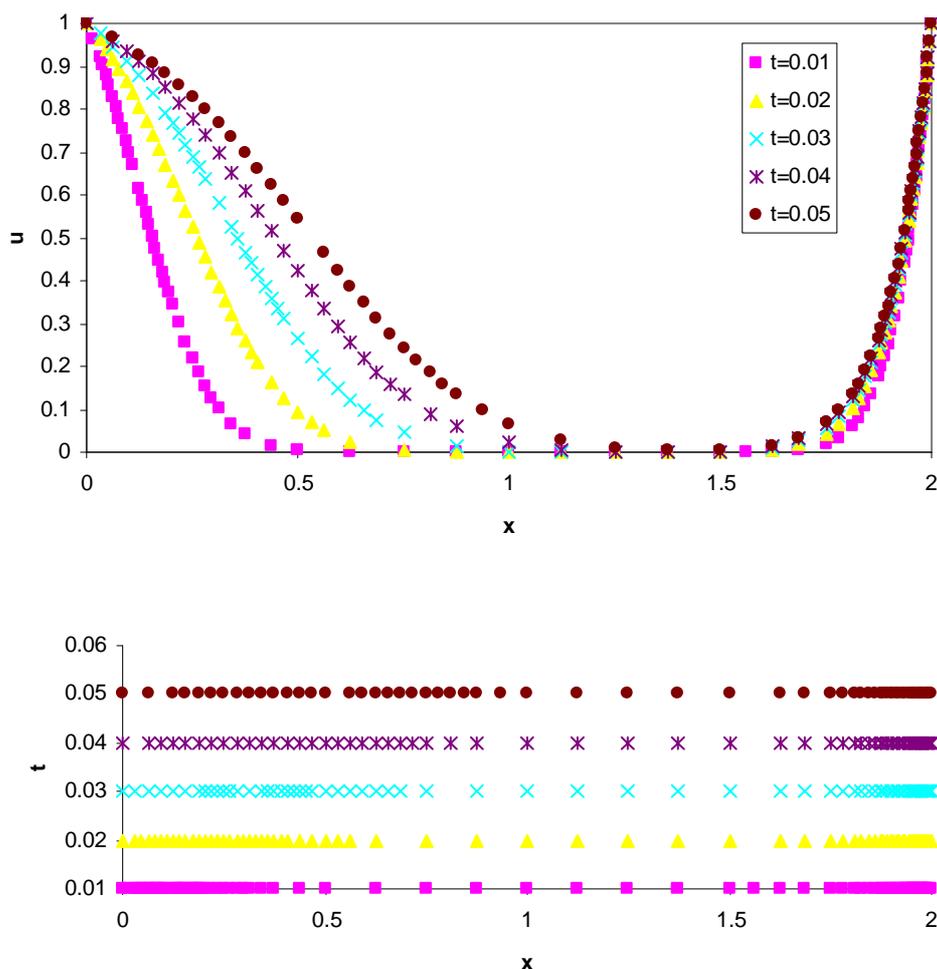


Figura 6.4 Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C52/C2 - $t = 0.05$).

Na Figura 6.3 apresenta-se a evolução da dimensão das malhas ao longo do tempo de integração, para todas as implementações referentes à aplicação dos critérios C41 e C51 nas condições constantes na Tabela 6.1.

Nas Figuras 6.4 e 6.5 resumem-se os resultados numéricos obtidos através da aplicação do critério C52 agora acoplado ao procedimento de colocação C2. As conclusões colhidas pela análise destas figuras são equivalentes às referidas anteriormente para o caso prévio correspondente ao critério de colocação C1 σ . Por outro lado, os perfis numéricos respeitantes às execuções C42 não são apresentados na secção presente já que se mostram muito semelhantes aos obtidos com a implementação do critério C52. Deste modo, a sua representação gráfica particular revela-se assaz redundante.

De facto, as quatro execuções numéricas definidas nas mesmas condições são visivelmente idênticas, o que é confirmado pela observação da Figura 6.3, onde se torna óbvia uma evolução perfeitamente equivalente da dimensão das malhas adaptativas respectivas. Ambos os critérios promovem a geração de malhas consideravelmente mais densas apenas na fase de arranque do processo, mas que estabilizam com o decorrer da integração numérica. Assim, a evolução das malhas é notoriamente estável, verificando-se apenas um paulatino decréscimo da sua

dimensão à medida que os perfis de solução se revelam menos exigentes do ponto de vista adaptativo. Todas as implementações tendem à formação eventual de malhas simples com dimensões semelhantes entre si ($NP \approx 30$), consentâneas com as características suaves dos perfis estacionários da solução (vd. Figura 6.3).

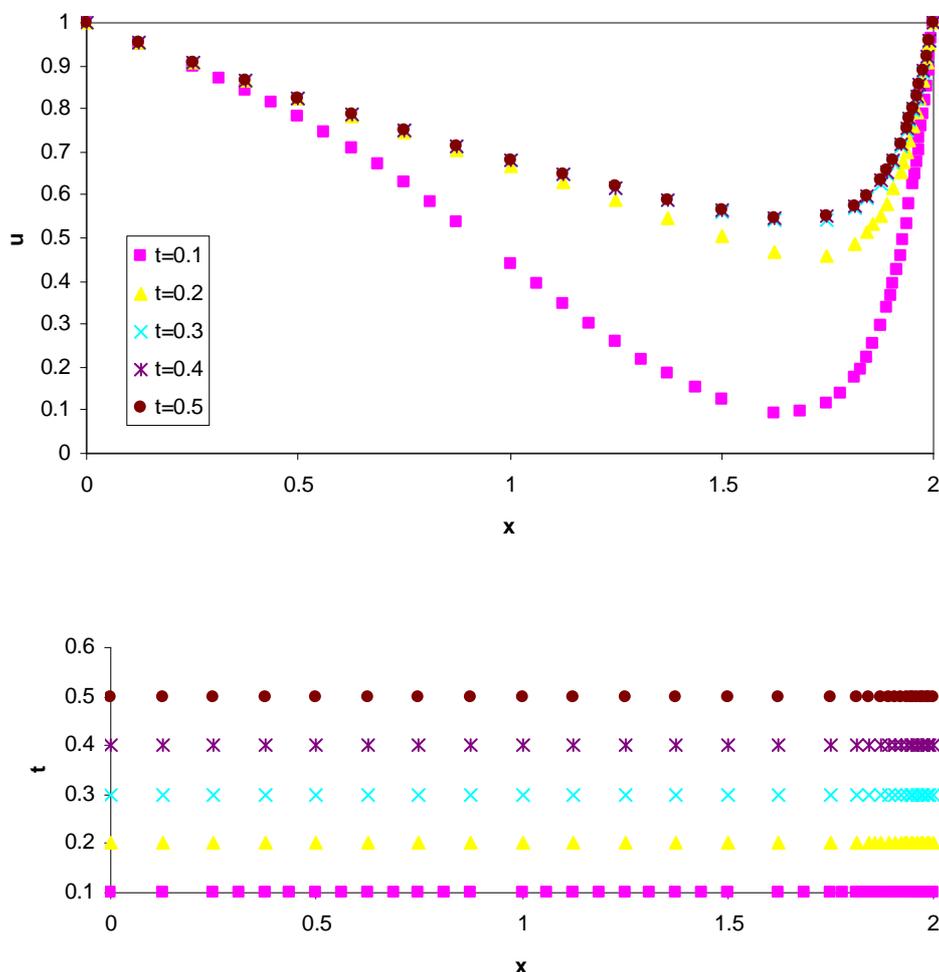


Figura 6.5 Implementação numérica para o caso da equação DifPlana (critério C52/C2 - $t = 0.5$).

Os tempos de cpu já referidos acima, associados às diversas execuções do algoritmo de integração numérica, são resumidos na Tabela 6.2. Verifica-se que as execuções referidas implicam níveis equivalentes de esforço computacional, localizados no intervalo de 18-20 s. No entanto, estas diferenças são pouco significativas, já que se situam na ordem de grandeza do próprio intervalo de incerteza associado à variabilidade do processamento computacional. No entanto, conclui-se que o grau de esforço computacional exigido não é excessivo.

Tabela 6.2 Tempos de execução para o caso da equação DifPlana.

Execução	Tempo de cpu (s)
C42/C1 σ	18.1
C42/C2	18.1
C52/C1 σ	17.4
C52/C2	20.0

6.2 MODELOS 1D DE COMBUSTÃO

Considera-se agora, um modelo que simula a dinâmica de uma chama[1-4]. Deste modo, a temperatura (de um reagente num sistema químico) aumenta gradualmente até à formação de um ponto quente na posição, $x = 0$. Num determinado instante, ocorre a ignição e a temperatura no ponto quente aumenta rapidamente, até atingir o valor normalizado de $1+\alpha$. Nessa altura, forma-se uma frente de carácter abrupto que se propaga com velocidade, $e^{ad}/2(1+a)$, até colidir com a fronteira direita ($x = 1$). A evolução da velocidade da frente é do tipo exponencial, já que o valor de d é normalmente elevado e o correspondente a a situa-se próximo da unidade.

Assim, o modelo é representado pela PDE,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + D(1+a-u)e^{-d/u}, \quad (6.4)$$

com:

- $u = T/T_0$, temperatura normalizada da chama.
 - T , temperatura da chama.
 - T_0 , temperatura inicial da chama.
- t , variável temporal.
- x , variável espacial.
- $D = Re^d/ad$
 - R, d, a , constantes.

O problema é resolvido nos domínios: $x \in [0,1]$, $t \in [0,0.29]$; sendo completado pelas condições fronteira:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \quad u(1,t) = 1, \quad (6.5)$$

e a condição inicial,

$$u(x,0) = 1. \quad (6.6)$$

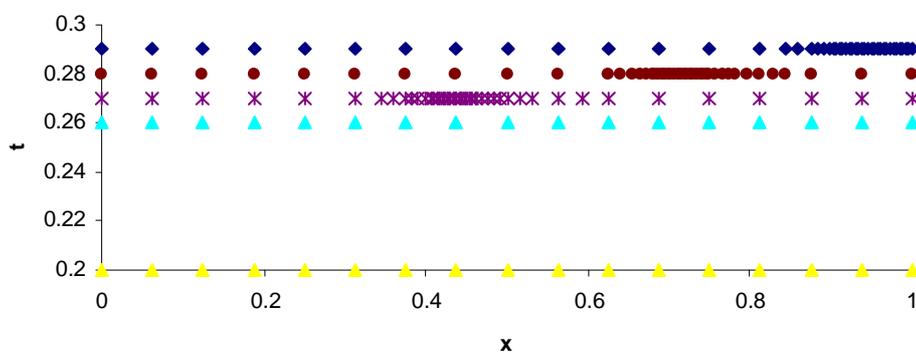
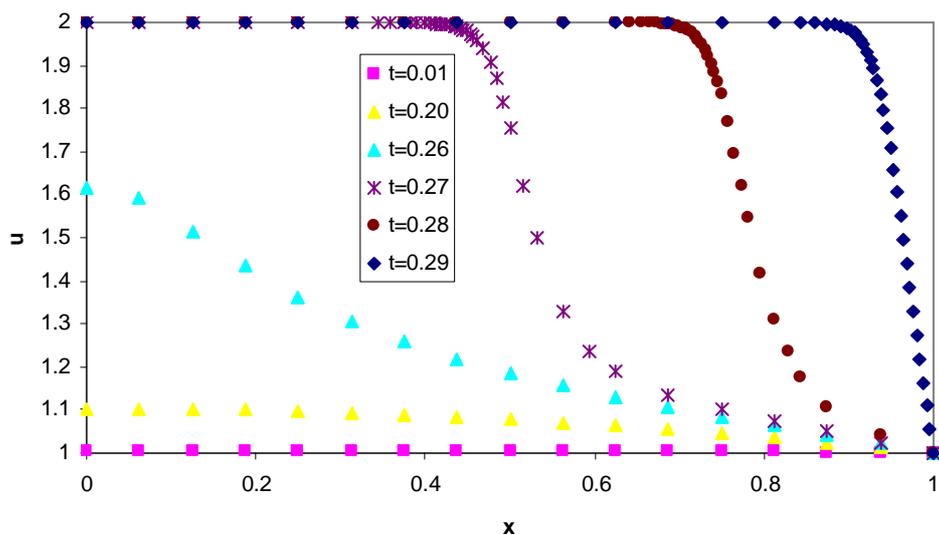
Testa-se então o caso em que: $a = 1$, $d = 20$ e $R = 5$.

Aplica-se novamente o algoritmo INTEGR2D numa execução particular do tipo 1D. Os parâmetros utilizados são os constantes na Tabela 6.3. A solução do modelo 6.4 a 6.6 arranca a partir de um perfil em plateau unitário perturbado pela introdução da condição fronteira de Neumann na extremidade esquerda do domínio espacial (que simula a ignição do sistema) e que se propaga ao longo do espaço no sentido da esquerda para direita, tornando-se progressivamente mais abrupta.

Na Figura 6.6 resumem-se os perfis numéricos obtidos através da aplicação do critério de colocação 1D C1 σ (no contexto da estratégia de geração de malha C52). Verifica-se que o procedimento lida com relativa facilidade com a evolução das características dos perfis espaciais. De facto, verifica-se que a solução se mantém suave ao longo de quase todo o procedimento de avanço temporal, referente à formação inicial da frente de propagação.

Tabela 6.3 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de chama.

Colocação nodal	• Critério 2D	C52	
	• Critério 1D	C1 σ ; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	5×10^{-2}	5×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		4	10
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	2.5×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

Figura 6.6 Implementação numérica para o caso da equação de chama (critério C52/C1 σ).

Deste modo, não exige qualquer acção de refinamento, já que a malha base de arranque se revela suficiente para representar discretamente as características gerais da solução de forma satisfatória (vd. Figura 6.6).

Somente para tempos mais avançados ($t > 0.26$), correspondentes à evolução da frente de chama propriamente dita, é observada uma necessidade de adaptação da malha, de modo a promover uma representação correcta da frente e da curvatura das suas extremidades superior e inferior.

No entanto, o desempenho do algoritmo de colocação $C1\sigma$, aplicado no âmbito da estratégia C52 na abordagem ao presente problema revela-se bastante apropriado, proporcionando resultados numéricos adequados, através da construção de malhas adaptativas relativamente leves que acompanham de forma expedita a evolução da solução.

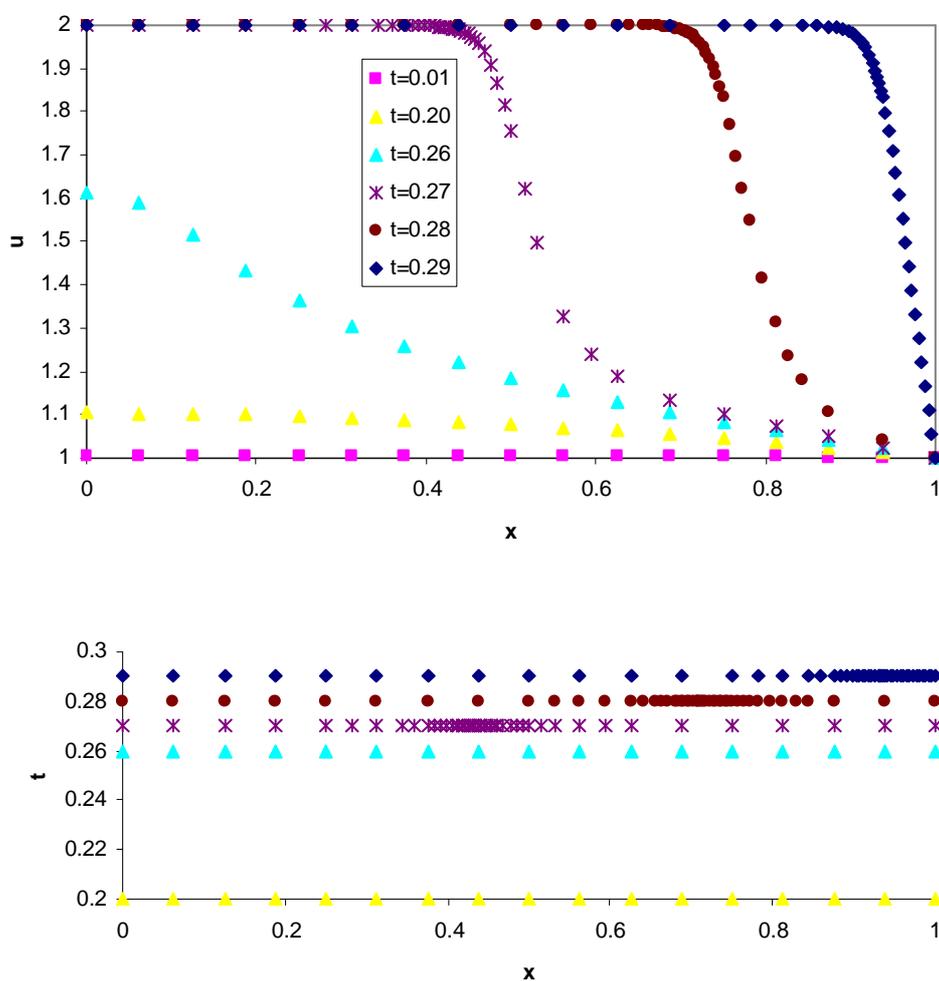


Figura 6.7 Implementação numérica para o caso da equação de chama (critério C52/C2).

Resultados perfeitamente equivalentes aos discutidos acima são obtidos através da utilização do critério de colocação 1D C2 (vd. Figura 6.7) em condições semelhantes. Verifica-se novamente uma notória capacidade do algoritmo de detectar e acompanhar a movimentação das características abruptas da solução quando que tal se demonstra necessário.

Por outro lado, o comportamento idêntico e relativamente trivial de ambos os critérios é demonstrado pela análise da evolução da dimensão das malhas respectivas ao longo do processo de integração numérica (vd. Figura 6.8). Mais uma vez se constata a ocorrência de operações de refinamento apenas para tempos manifestamente tardios e um aumento brusco mas não demasiado acentuado da actividade adaptativa de modo a lidar com o acompanhamento da propagação da chama. É notório que nestas condições o critério C2 se revela mais sensível do que o critério C1 σ , apesar das diferenças observadas não serem significativas.

A facilidade de implementação do algoritmo testado ao exemplo em estudo é também comprovada pelo facto das execuções computacionais envolverem tempos de processamento da ordem de 3 s.

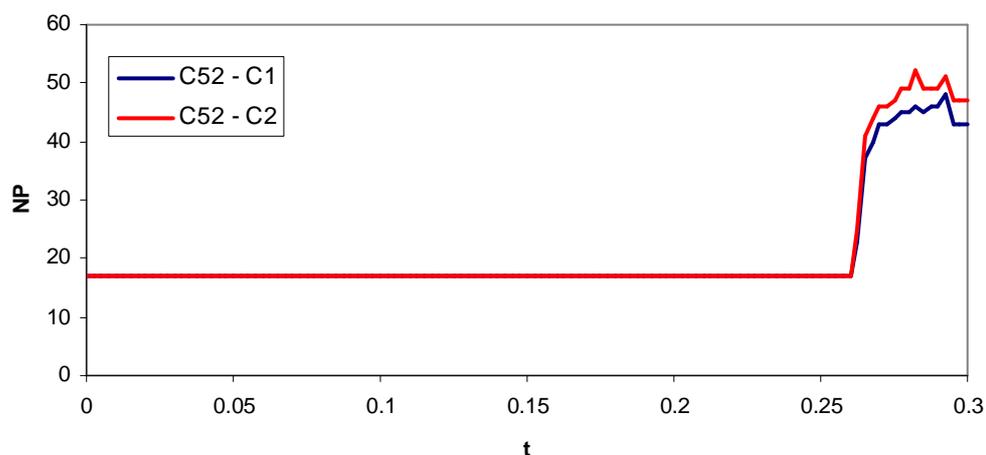


Figura 6.8 Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso da equação de chama.

O modelo[1-2,4-5] testado seguinte é numericamente mais exigente e representa a dinâmica de propagação de uma chama, considerando a temperatura e a massa do respectivo combustível. O problema caracteriza-se pela definição, nos tempos iniciais, de uma condição fronteira à direita, dependente do tempo e em forma de rampa. Esta condição pretende descrever a evolução da temperatura desde a ignição até ao alcance do valor máximo. A solução resultante apresenta a forma de duas ondas abruptas que se propagam muito rapidamente no mesmo sentido (neste caso, na direcção negativa de x), devido à relação directa que é estabelecida entre o consumo de combustível e o aumento de temperatura, originado pela libertação de calor que daí advém. Assim, o processo é simulado pelo sistema de PDE's unidimensionais evolutivas:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \alpha u e^{-\beta/v}, \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \alpha u e^{-\beta/v}, \quad (6.8)$$

com,

- u , massa de combustível.

- v , temperatura da chama.
- x , variável espacial.
- t , variável temporal.

Adicionalmente, assumem-se os domínios: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 0.006$; as condições fronteira de Neumann:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0, \quad (6.9)$$

a condição fronteira em rampa temporal que simula o processo de ignição do combustível,

$$v(1,t) = \begin{cases} 0.2 + t/0.0002, & t < 0.0002 \\ 1.2, & t \geq 0.0002 \end{cases} \quad (6.10)$$

e as condições iniciais,

$$u(x,0) = 1 \text{ e } v(x,0) = 0.2. \quad (6.11)$$

Fixa-se então os parâmetros do modelo como, $\alpha = 3.52 \times 10^6$ e $\beta = 4$.

Novamente o modelo que simula uma combustão é constituído por equações de difusão/reacção. De facto, o termo mais frequentemente associado ao desenvolvimento de frentes abruptas móveis e que, conseqüentemente gera maiores dificuldades de integração através de métodos numéricos idealizados numa perspectiva Euleriana é o termo advectivo/convectivo. Deste modo, parece contraditório apresentar exemplos de teste para métodos adaptativos que não exibem uma contribuição predominante de advecção. Na verdade nos casos seleccionados e analisados na secção presente, esta contribuição apresenta-se de todo ausente. Porém, a modelação de fenómenos de combustão frequentemente dispensa a consideração de mecanismos convectivos de transporte, já que a velocidade de propagação das ondas depende de um aumento brusco de elevada amplitude da temperatura do sistema, alimentado por reacções de combustão caracterizadas por velocidades de conversão extremamente altas. Deste modo, a geração de ondas abruptas propagadas a velocidades elevadas é devida essencialmente à contribuição de cinéticas reaccionais particularmente extremas, ou seja a termos geracionais de reacção de valor elevado, associados a mecanismos de transporte baseados em difusão e radiação[6-8]. Assim, torna-se possível testar soluções caracterizadas pela propagação de ondas e frentes abruptas de tipo não convectivo.

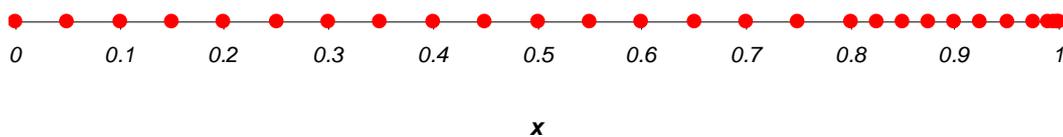


Figura 6.9 Malha base não uniforme de nível 0, usada nas implementações do modelo de propagação de chama.

Tabela 6.4 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de propagação de chama.

Colocação nodal	• Critério 2D	NA	
	• Critério 1D	C1; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.01; 0.1	0.01; 0.1
Malhas	• não diádicas ($M=0$)	M_x	N_x
		0	6
		M_y	N_y
		NA	NA
		não uniforme 27 ints – Figura 6.9	
Discretização espacial	• aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n>1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-4}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

Neste caso particular, opta-se por avaliar a performance do algoritmo 1D STAT02 associado à rotina de colocação nodal *gridgen11* implementada com os critérios 1D C1 e C2, e os parâmetros definidos na Tabela 6.4.

A consideração de condições fronteira de Neumann em ambas as extremidades do domínio espacial conjugada com um mecanismo em rampa de temperatura para simulação do processo de ignição introduz algumas perturbações na definição dos perfis na vizinhança de $x = 1$. Deste modo, impõe-se neste caso uma malha base estrutural não diádica e não uniforme de 27 intervalos, que concentra nodos preferencialmente na região referida (vd. Figura 6.9). Esta malha convencionalizada como de nível 0, constitui o suporte para possíveis operações de refinamento posteriores que podem atingir um nível máximo de 6. O estabelecimento de uma malha base não diádica não retira generalidade aos procedimentos descritos no Capítulo 3, já que a relação entre malhas de níveis consecutivos se mantém inalterável, continuando a depender de factores baseados em potências de 2 (agora afectados pelo número de intervalos, Nl , definido para a malha de nível 0; vd. Anexo B).

Os resultados numéricos obtidos através da aplicação do critério de colocação nodal C1 são apresentados na Figura 6.10. A análise dos perfis permite concluir que o algoritmo demonstra capacidade de representar e acompanhar de um modo satisfatório o movimento da frente abrupta de chama ao longo do domínio espacial. Conclusões semelhantes são obtidas no caso do teste do critério C2. No entanto, verifica-se que para se atingirem perfis de qualidade semelhante é necessário aumentar o grau de exigência do critério C1 em relação a C2, baixando o valor das tolerâncias de colocação na implementação do primeiro caso em relação ao segundo (vd. Tabela 6.4). Assim, é expectável que as malhas C1 geradas apresentem uma dimensão notoriamente superior às malhas C2 correspondentes de forma a proporcionarem perfis de qualidade equivalente.

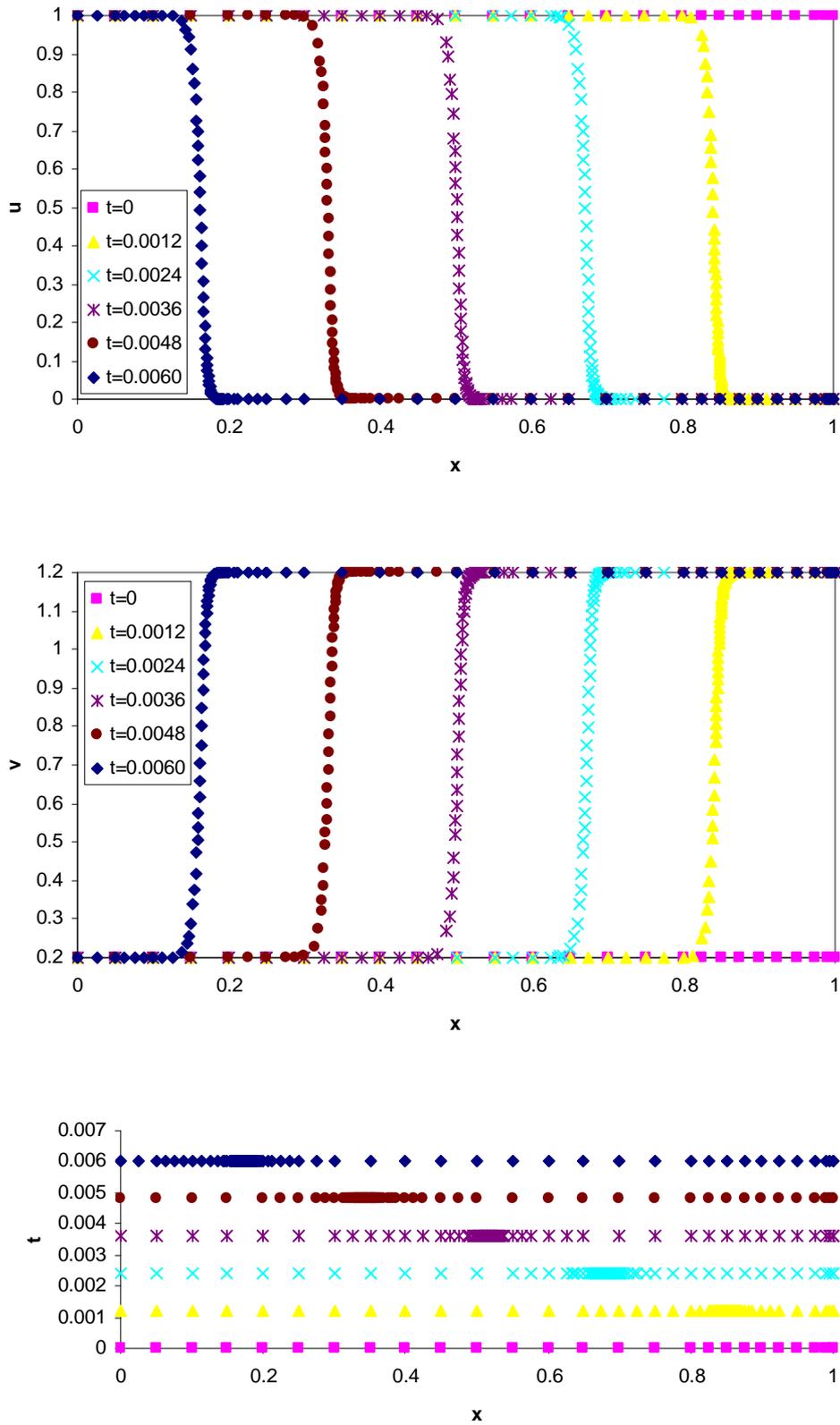


Figura 6.10 Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama (gridgen11/critério C1).

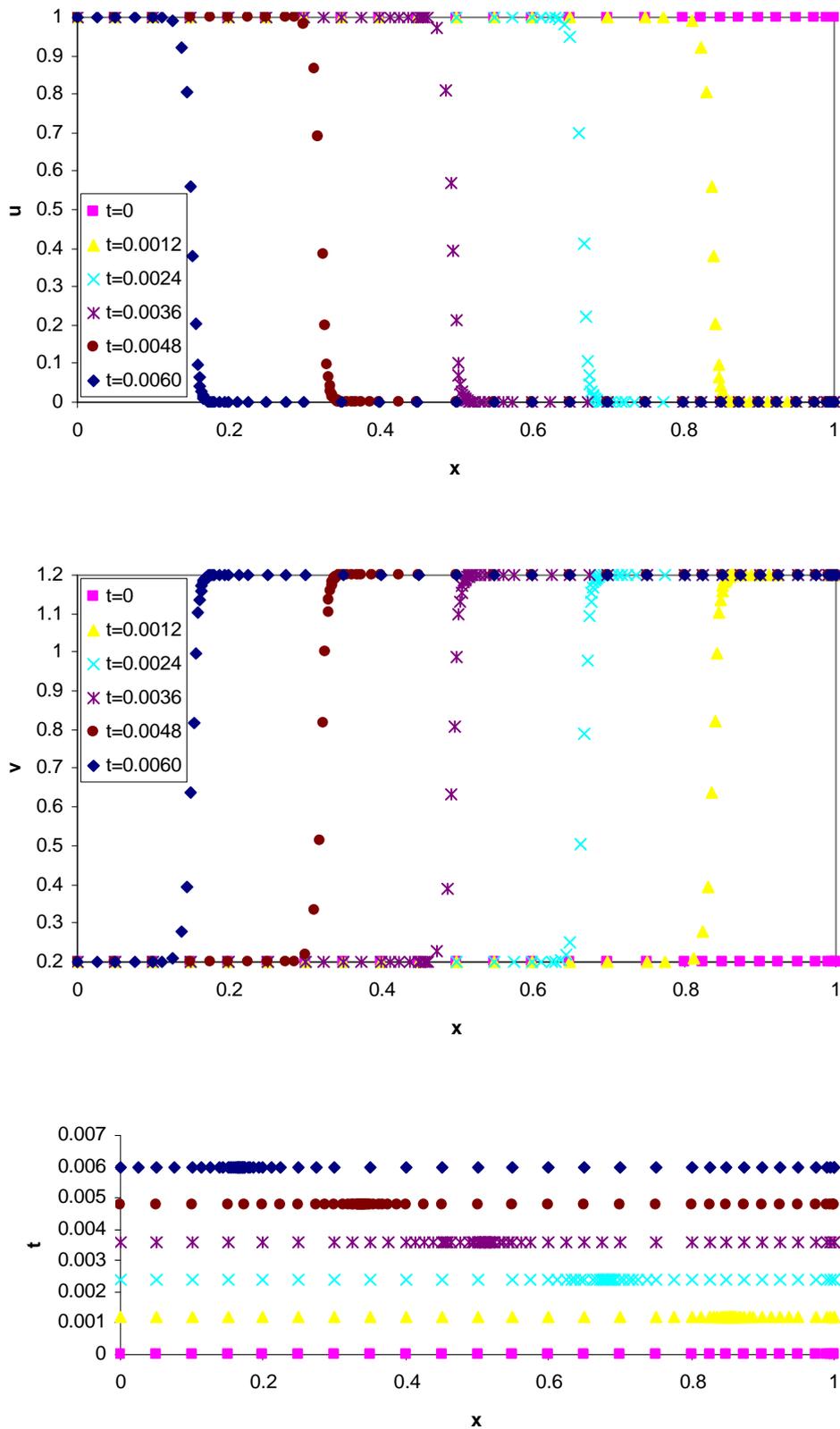


Figura 6.11 Implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama (gridgen11/critério C2).

Este facto é corroborado pela análise da evolução da dimensão das malhas ao longo da integração numérica temporal (vd. Figura 6.12). A aplicação do critério C2 nas condições da Tabela 6.4 conduz a um esforço de refinamento inicial elevado consentâneo com a abordagem ao mecanismo de ignição, mas que tende posteriormente para valores de NP relativamente modestos. Por outro lado, a utilização do critério C1 associado a tolerâncias mais restritas não implica uma imposição tão intensa de operações de refinamento inicial, mas leva à estabilização da dimensão das malhas no decorrer da integração temporal, em valores consideravelmente mais elevados. Este facto pode ser facilmente explicado pela maior exigência do procedimento de colocação nodal C1 que, no entanto, se revela essencial na representação numérica das frentes de um modo equivalente à do critério C2.

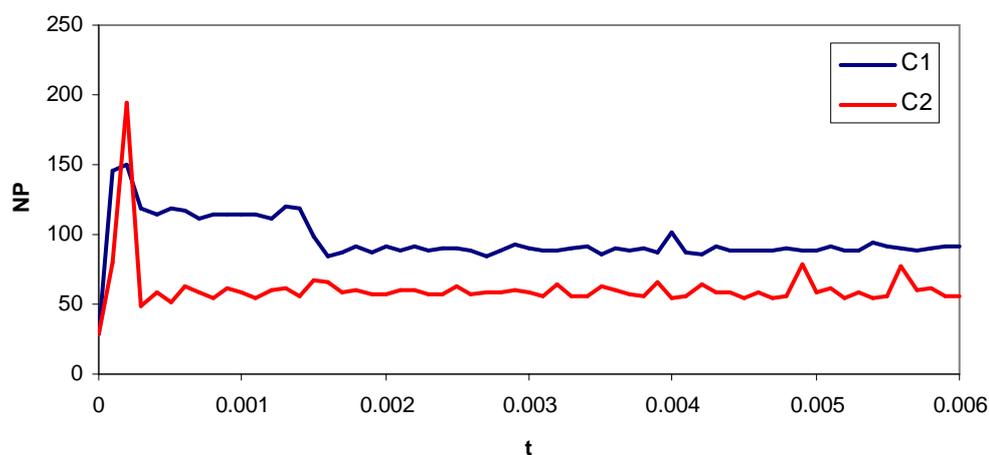


Figura 6.12 Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de propagação de chama.

No entanto, a análise dos resultados dos modelos de combustão permite discutir duas desvantagens dos procedimentos adaptativos idealizados neste trabalho baseados em critérios de colocação nodal dependentes somente de propriedades espaciais dos perfis da solução. De facto, estas desvantagens constatadas correspondem a:

1. Incapacidade de prever perturbações abruptas introduzidas por condições fronteira, nomeadamente de Neumann. Qualquer acção provocada pela acção das condições fronteira é teoricamente indetectável pelo algoritmo de adaptação aquando da geração da malha inicial baseada apenas na análise da condição inicial. Deste modo, se esta se revelar à partida suave, a malha inicial gerada pode revelar-se inadequada para o tratamento de condições fronteira que introduzam perfis abruptos no problema. Quando a condição fronteira é do tipo Dirichlet, a sua acção pode ser interpretada como a inserção de uma perturbação em degrau, sendo facilmente tratada através de uma antecipação do efeito da condição fronteira na condição inicial do problema. Infelizmente, no caso de condições fronteira de primeira ordem, esta estratégia não é aplicável. No entanto, para exemplos em que o efeito destas condições fronteira seja suficientemente abrupto, torna-se possível aproximar a sua acção à correspondente a uma perturbação em degrau associada a uma condição

fronteira de Dirichlet fictícia adequada, ultrapassando assim a desvantagem enunciada acima.

2. Natureza estática do algoritmo adaptativa que não considera a movimentação das características da solução ao longo de cada integração temporal intermédia. Este fenómeno é facilmente visível pela análise dos resultados das Figuras 6.10 e 6.11 onde é notória uma maior concentração de nodos a montante da frente em relação à curvatura correspondente a jusante, resultante da própria movimentação da frente. Tal deve-se ao facto da malha adaptativa associada a cada instante temporal final de cada integração (t_k) ser realmente gerada nas condições do perfil da solução no instante inicial da integração (t_{k-1}) e deste modo, não considerar as alterações na solução no intervalo entre t_{k-1} e t_k . Assim, cada passo temporal tem de ser sintonizado para que o seu valor seja apropriado à verificação de um avanço sustentável da integração com uma malha que satisfaça simultaneamente as propriedades da solução numérica em t_{k-1} e t_k . Este desiderato pode ser alcançado através da colocação de nodos adicionais durante o processo de geração de malha, relacionados com a projecção do movimento da solução para um determinado passo temporal especificado.

6.3 MODELOS 1D DE DIFUSÃO-CONVECÇÃO-GERAÇÃO

Testa-se agora um modelo[1-2] que descreve a adsorção de um único componente num leito fixo, operando em condições isotérmicas. O equilíbrio entre o soluto e a fase sólida é considerado instantâneo e admite-se que o escoamento é do tipo pistão. Deste modo tem-se a PDE,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{Pe[1 + \xi g'(u)]} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{1 + \xi g'(u)} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.12)$$

com,

- $u = C/C_0$, concentração adimensional do componente adsorvido em relação à concentração de entrada.
 - C , concentração do componente adsorvido no seio do fluido.
 - C_0 , concentração do componente adsorvido na corrente de alimentação.
- $t = \theta/\tau$, tempo adimensional, normalizado em relação ao tempo de passagem.
 - θ , variável temporal.
 - $\tau = \ell/u_0$, tempo de passagem de um elemento de fluido no leito.
 - ℓ , comprimento do leito.
 - u_0 , velocidade do fluido no leito.
- x , variável espacial.
- $\xi = \frac{1 - \varepsilon q_0}{\varepsilon C_0}$, factor de capacidade do leito.

- ε , porosidade do leito.
- q_0 , concentração do componente adsorvido no sólido, em equilíbrio com C_0 .
- $g(u)$, isotérmica de equilíbrio.
- $Pe = u_0 \ell / D_{eff}$, número de Peclet mássico.
 - D_{eff} , difusividade efectiva do componente adsorvido no leito.

Como isotérmica de equilíbrio, considera-se a lei de acção de massas, ou seja:

$$g(u) = \frac{ku}{1 + (k-1)u} \quad (6.13)$$

em que, k é a constante de equilíbrio.

Finalmente, consideram-se os domínios: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1.9$; as condições fronteira de Neumann:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = Pe(u-1), \quad \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0, \quad (6.14)$$

e a condição inicial:

$$u(x,0) = 0. \quad (6.15)$$

Fixa-se $Pe = 10^4$, $\xi = 1$ e $k = 1$ para o teste do desempenho do algoritmo 1D STAT02.

A solução do modelo 6.12 a 6.15 nestas condições que favorecem o processo de adsorção, consiste na propagação de uma onda abrupta de altura constante ao longo do domínio espacial, representativa do enchimento da coluna de adsorção.

Os parâmetros usados são resumidos na Tabela 6.5 e os resultados obtidos através da aplicação do critério de colocação C2 no contexto da rotina de geração de malha `gridgen11` são apresentados na Figura 6.13.

Tabela 6.5 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo de adsorção.

Colocação nodal	• Critério 2D	NA	
	• Critério 1D	C1; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
		ε_1	ε_2
	• tolerâncias	5×10^{-2}	5×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		5	11
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD biased upwind; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	5×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

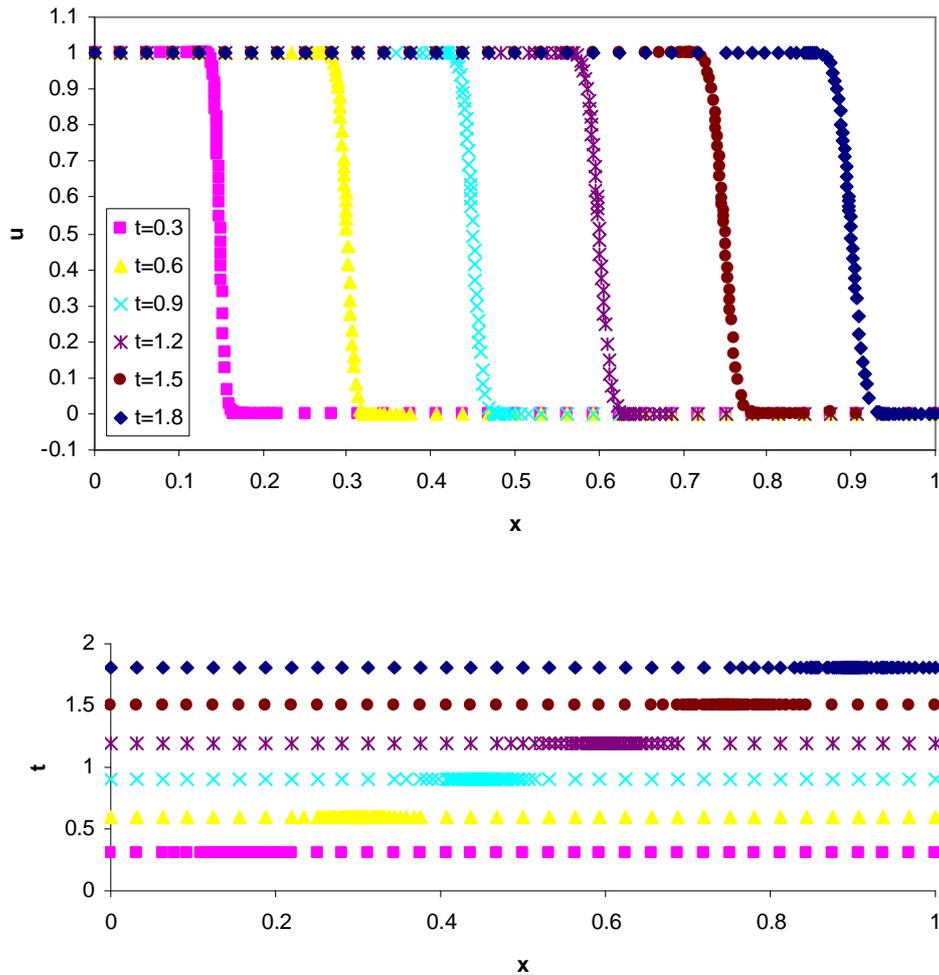


Figura 6.13 Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C2).

Verifica-se pela análise da Figura 6.13 que o algoritmo adaptativo não revela quaisquer dificuldades na detecção, representação e movimentação da onda de propagação introduzida pela perturbação simulada pela condição fronteira da esquerda ($x = 0$). No entanto, é importante salientar que a condição fronteira efectivamente usada consiste num degrau de $u = 0$ para $u = 1$ (em $t = 0$), que é posteriormente mantido em $u = 1$ ($t > 0$). Esta condição de Dirichlet corresponde a uma aproximação da condição de Neumann 6.14, sendo bastante satisfatória para valores de Peclet elevados (o que é o caso). Por outro lado, a substituição possibilita a detecção da perturbação introduzida já no perfil inicial, evitando as desvantagens já referidas anteriormente, características de estratégias adaptativas estáticas. Por esse motivo, recorre-se a este procedimento em todos os modelos testados que apresentem condições fronteira do tipo 6.14.

Assim, conclui-se que a aplicação do critério de colocação nodal C2 manifesta uma notória capacidade de representação numérica da solução do problema 6.12 a 6.15.

A Figura 6.14 possibilita uma visualização mais detalhada de um perfil de solução seleccionado ($t = 0.9$). Através da figura referida, é possível verificar a distribuição do esforço de refinamento para a representação satisfatória da frente abrupta sem o desenvolvimento de dissipação ou dispersão numéricas notórias, e dos respectivos patamares adjacentes.

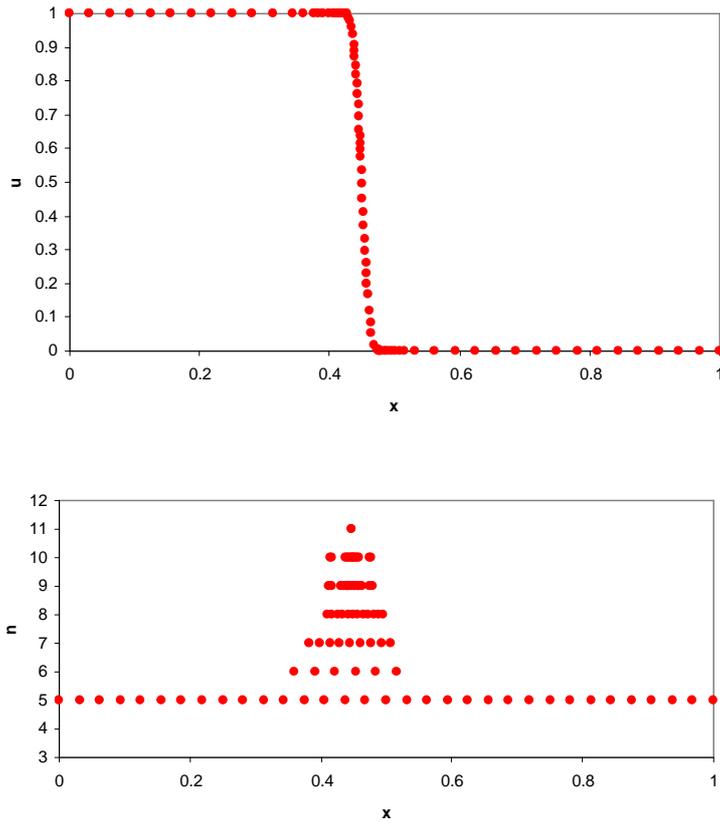


Figura 6.14 Malha gerada para $t = 0.9$ (modelo de adsorção – gridgen11/critério C2).

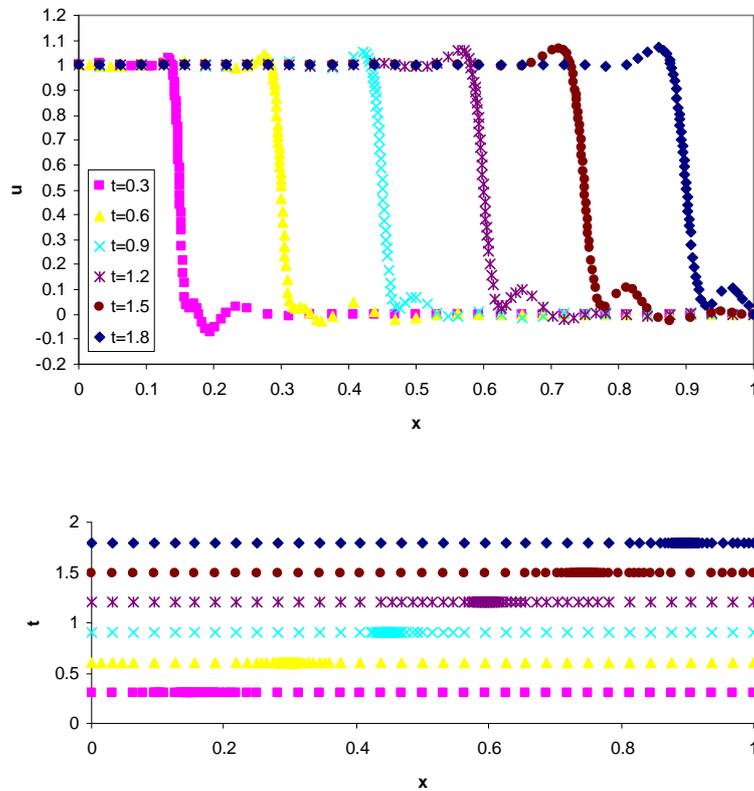


Figura 6.15 Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C1).

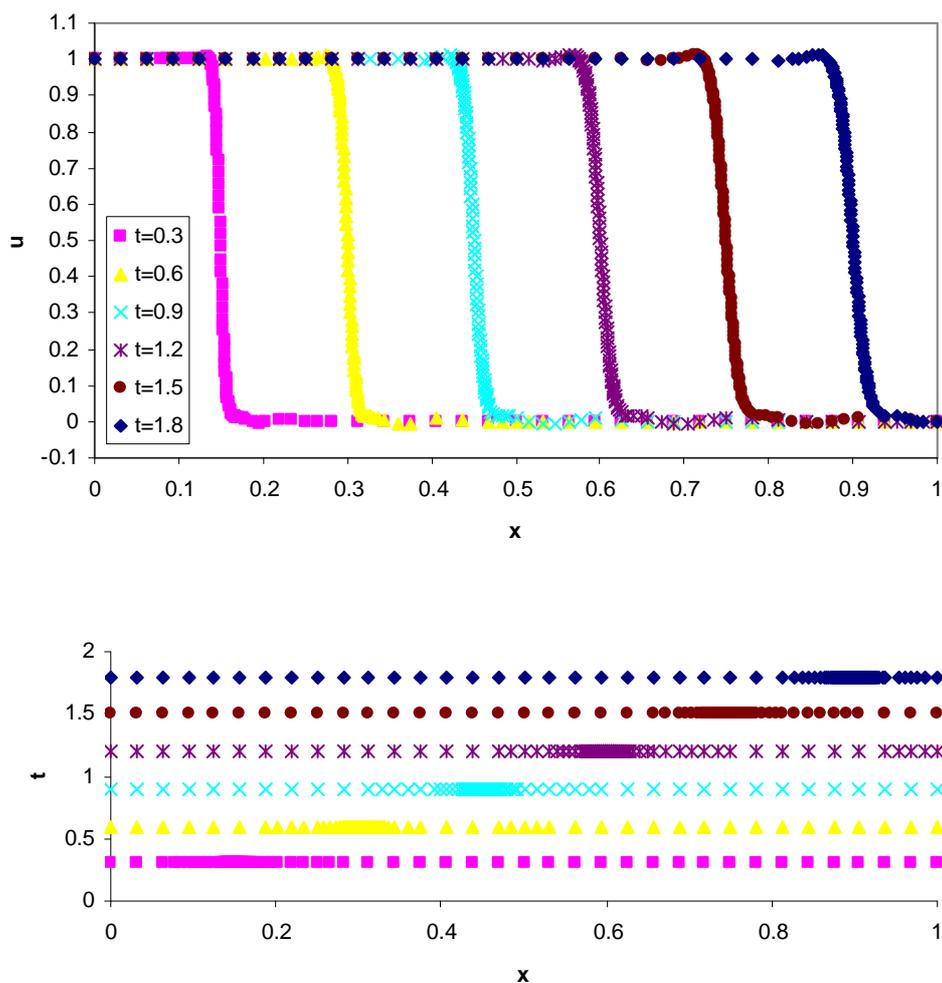


Figura 6.16 Implementação numérica para o caso do modelo de adsorção (gridgen11/critério C1) – segundo run.

A malha C2 gerada, associada a aproximações de FD enviesadas a montante (biased upwind) revela-se extremamente eficiente no acompanhamento do movimento da frente abrupta, com um esforço computacional aceitável ($t_{\text{cpu}} = 66.1$ s).

Por outro lado, os resultados obtidos com o teste da performance do critério de colocação nodal C1 são apresentados nas Figuras 6.15 e 6.16. A manutenção de tolerâncias equivalentes à do ensaio para o critério C2 (vd. Tabela 6.5) demonstra-se insatisfatória, já que o método numérico revela notórias dificuldades na formação das curvaturas a montante e jusante da frente de propagação. De facto, a amplitude das oscilações desenvolvidas aumenta ao longo do processo de integração temporal. Conclui-se assim que o critério C1 implica a imposição de condições de geração de malha mais exigentes, por exemplo, tolerâncias $5\times$ mais baixas ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1 \times 10^{-2}$). Neste caso observa-se uma estabilização considerável dos perfis numéricos, apesar de ainda se constatar o desenvolvimento de leves perturbações nas regiões das extremidades da onda abrupta que se propagam com o avanço temporal (vd. Figura 6.16).

No entanto, o aumento da sensibilidade do procedimento de colocação nodal implica a construção de malhas relativamente mais complexas e de dimensão elevada, que induzem um maior esforço computacional no processo (vd. Figura 6.17) – $t_{\text{cpu}} = 320$ s.

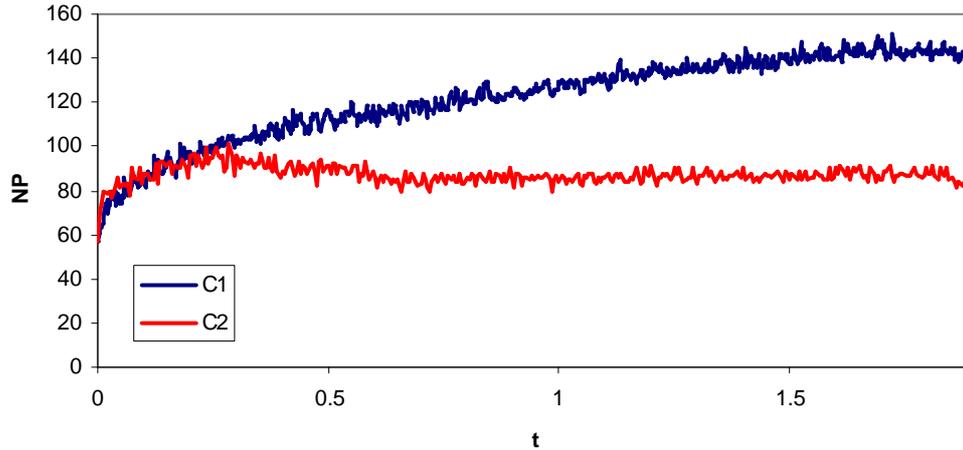


Figura 6.17 Evolução do número de nós da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de adsorção.

O exemplo[1-2] seguinte descreve um reactor tubular isotérmico, ao qual é aplicado o modelo pistão difusional (pistdif). De forma a se estudar o efeito conjugado de termos difusivos, convectivos e reaccionais, introduz-se um termo de difusão axial no modelo, ao mesmo tempo que se admite a ocorrência de uma reacção homogénea de primeira ordem $A \rightarrow B$, no interior do reactor. Assim,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial x} - Da u, \quad (6.16)$$

- u , concentração normalizada da espécie A.
- x , variável espacial normalizada.
- $t = \theta/\tau$, tempo adimensional, normalizado em relação ao tempo de passagem.
 - θ , variável temporal.
 - $\tau = \ell/u_0$, tempo de passagem de um elemento de fluido no leito.
 - ℓ , comprimento do leito.
 - u_0 , velocidade do fluido no leito.
- $Da = k\ell/u_0$, número de Damkhöler.
 - k , constante de velocidade da reacção.
- $Pe = u_0\ell/D_{ax}$, número de Peclet axial.
 - D_{ax} , difusividade axial da espécie A.

Nos domínios: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 1.1$; definem-se as condições fronteira de Neumann:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = Pe(u-1), \quad \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0, \quad (6.17)$$

e a condição inicial:

$$u(x,0) = 0. \quad (6.18)$$

Com os parâmetros $Pe = 10^4$ e $Da = 1$, executou-se a aplicação STAT02 nas condições descritas na Tabela 6.6.

Tabela 6.6 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo pistdif.

Colocação nodal	• Critério 2D	NA	
	• Critério 1D	C1; C2	
	• ordem da derivada	1; 1	
	• tolerâncias	ϵ_1 0.01; 0.05	ϵ_2 0.01; 0.05
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		5	11
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD biased upwind; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	5×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

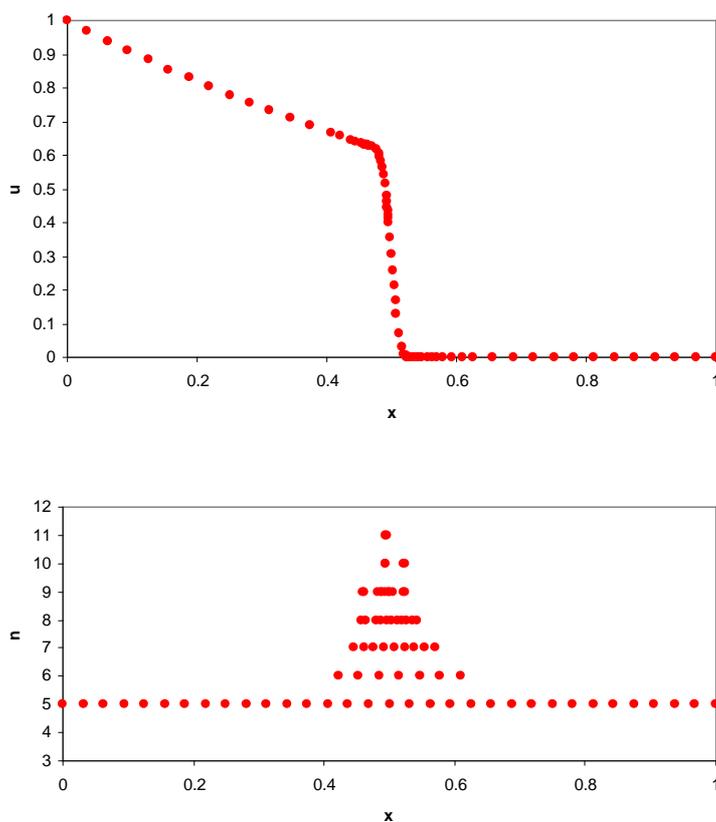


Figura 6.18 Malha gerada para $t = 0.5$ (modelo pistdif – gridgen11/critério C2).

Agora, a solução do problema seleccionado consiste na propagação de uma onda abrupta de altura decrescente ao longo do domínio espacial. Deste modo, opta-se por

utilizar condições de execução semelhantes às adoptadas para o exemplo anterior para o caso específico da simulação C2. Deste modo, observa-se que a qualidade dos resultados numéricos obtidos é perfeitamente comparável com a correspondente ao problema referido (vd. Figura 6.19). Novamente se verifica uma capacidade satisfatória de detecção, reprodução e acompanhamento das particularidades abruptas da solução, demonstrada por uma adequada distribuição nodal consentânea com a representação simultânea das características abruptas e suaves da solução em cada posição temporal (vd. Figura 6.18 para o caso particular de $t = 0.5$)

A existência de um termo estabilizador difusivo de influência reduzida ($Pe = 10^4$) induz uma ligeira suavização das frentes de propagação ao longo da integração temporal que é visível através da análise dos resultados da Figura 6.19.

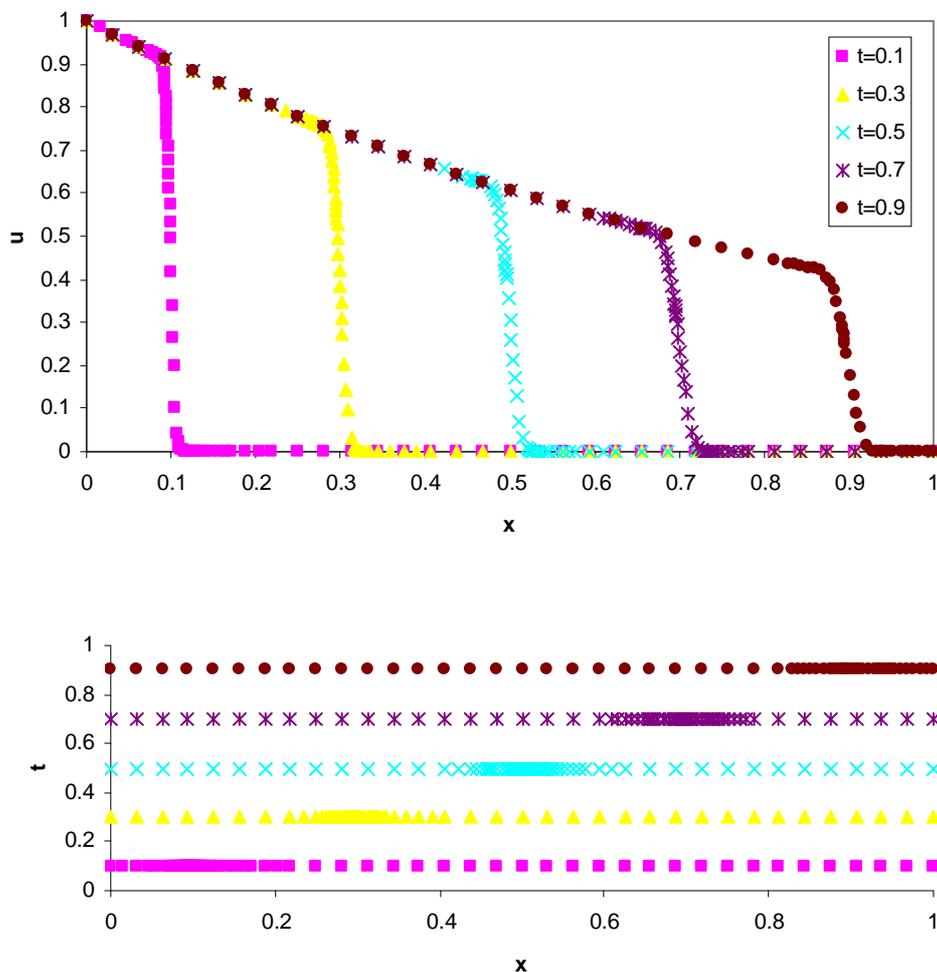


Figura 6.19 Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (gridgen11/critério C2).

Para além disso, o teste da performance do critério de colocação C2 em condições equivalentes às referidas para o caso C1 (vd. Tabela 6.6) revela problemas semelhantes aos discutidos no contexto do problema precedente. Então, mais uma vez se recorre a um reforço da sensibilidade da estratégia C1, pela redução das tolerâncias de colocação, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1 \times 10^{-2}$. Estas condições possibilitam resultados relativamente satisfatórios (vd. Figura 6.20), mas demonstram igualmente o desenvolvimento de

características oscilatórias não físicas de amplitude baixa, na extremidade jusante da frente.

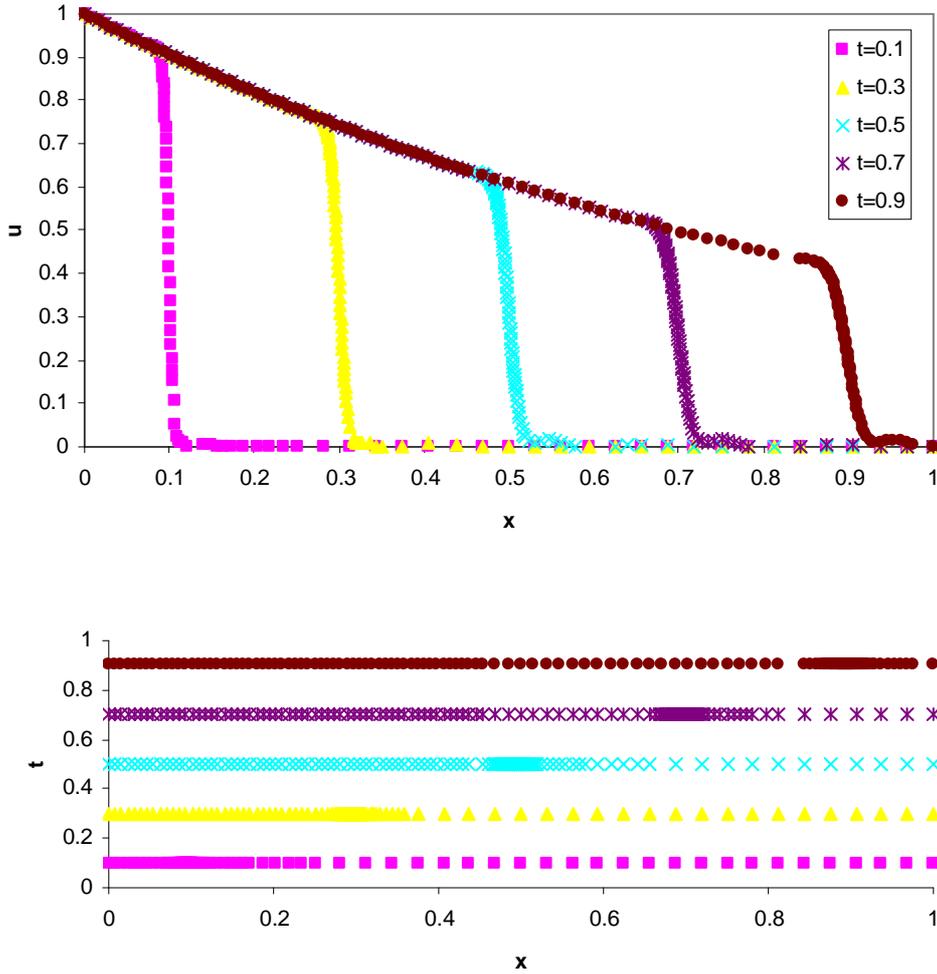


Figura 6.20 Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (gridgen11/critério C1).

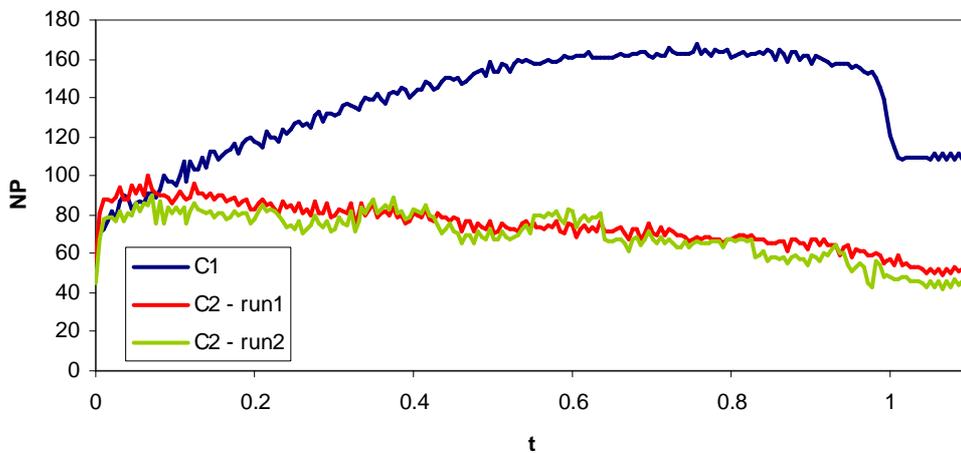


Figura 6.21 Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo pistdif.

No entanto, este aumento da sensibilidade do método de colocação nodal implica consequentemente um correspondente acréscimo do esforço computacional para a implementação do algoritmo de integração numérica, claramente visível pela aumento da complexidade e dimensão das malhas adaptativas geradas em relação aos ensaios referentes ao critério C2 (vd. Figura 6.21). Assim, o tempo de processamento para a execução C1 é 92.7 s, enquanto que as implementações C2 testadas apresentam valores de 27.7 s e 33.7 s, para os ensaios 1 (nas condições da Tabela 6.6 com a rotina de colocação *gridgen11*) e 2 (condições semelhantes às da Tabela 6.6, com a rotina de colocação *gridgen21* e $M = 4$), respectivamente. A qualidade dos resultados obtidos através da execução do ensaio 2 do critério C2 é muito semelhante à discutida anteriormente para o caso do ensaio 1 (vd. Figura 6.22). Por outro lado, a própria evolução temporal da dimensão das malhas adaptativas referentes a estes dois casos é igualmente análoga, como seria de esperar.

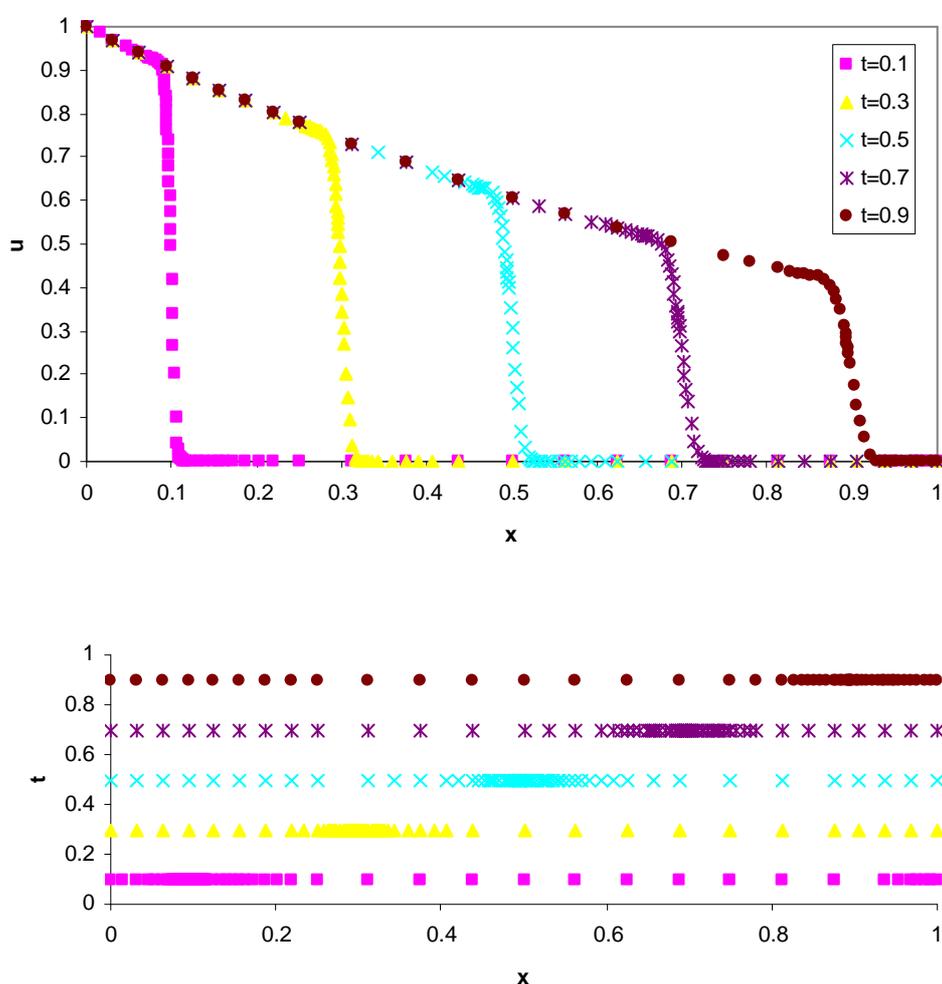


Figura 6.22 Implementação numérica para o caso do modelo pistdif (*gridgen21*/critério C2).

Atente-se agora para um exemplo[9] mais complexo do que o anterior, descrevendo o comportamento de um reactor tubular catalítico não isotérmico (*catn_isot*). O modelo considerado designa-se por pseudo-homogéneo unidimensional, onde os balanços mássicos e energéticos consideram simultaneamente as fases sólida e fluida do reactor. No reactor ocorre uma reacção de primeira ordem $A \rightarrow B$. Tem-se então:

$$\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} + Da u \exp\{R^E(1-1/v)\}, \quad (6.19)$$

$$\frac{1}{Pe_H} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial x} + R^H \frac{\partial v}{\partial t} + N_w(v-1) - \beta u \exp\{R^E(1-1/v)\}, \quad (6.20)$$

onde,

- $u = C/C_0$, concentração normalizada em relação à concentração da alimentação.
 - C , concentração do componente A.
 - C_0 , concentração de referência do componente A.
- $v = T/T_0$, temperatura normalizada em relação à temperatura de entrada.
 - T , temperatura da mistura reaccional.
 - T_0 , temperatura de referência.
- $x = \xi/\ell$, variável espacial normalizada em relação ao comprimento do reactor.
 - ξ , variável espacial.
 - ℓ , comprimento do reactor.
- $t = \theta/\tau$, tempo adimensional, normalizado em relação ao tempo de passagem.
 - θ , variável temporal.
 - $\tau = \ell/\phi$, tempo de passagem de um elemento de fluido no leito.
 - ϕ , velocidade do fluxo.
- $Da = k(T_0)\tau/\varepsilon$, número de Damkhöler.
 - $k(T_0)$, constante de velocidade da reacção nas condições de referência.
 - ε , porosidade do leito.
- $Pe = \phi \ell / D_{ax}$, número de Peclet axial.
 - D_{ax} , difusividade axial da espécie A.
- $Pe_H = \phi \ell \rho C_p / k_{ax}$, número de Peclet térmico.
 - ρ , densidade do fluido.
 - C_p , calor específico do fluido.
 - k_{ax} , condutividade térmica axial.
- $R^E = E/RT_0$, número de Arrhenius.
 - E , energia de activação da reacção.
 - R , constante dos gases perfeitos.
- $R^H = \frac{\varepsilon C_p \rho + (1-\varepsilon)C_{ps}\rho_s}{\varepsilon C_p \rho}$, tempo de passagem da onda térmica.

- ρ_s , densidade do sólido.
- C_{ps} , calor específico do sólido.
- $\beta = \frac{(-\Delta H)k(T_0)\tau C_0}{\varepsilon \rho C_p T_0}$, parâmetro adimensional.
 - $(-\Delta H)$, entalpia da reação.
- $N_w = \frac{2U\tau}{\varepsilon R_0 \rho C_p}$, número de unidades de transferência de calor na parede.
 - U , coeficiente de transferência de calor entre a parede e o fluido reaccional.
 - R_0 , raio do reactor.

Considerando os domínios: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 900$; completa-se o modelo com as condições fronteira:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = Pe(u-1), \frac{\partial v(0,t)}{\partial x} = Pe_H(v-1), \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0, \frac{\partial v(1,t)}{\partial x} = 0 \quad (6.21)$$

e as condições iniciais:

$$u(x,0) = 0, v(x,0) = 1. \quad (6.22)$$

Pretende-se resolver o modelo anterior com os parâmetros $Pe = Pe_H = 10^4$, $R^E = 20$, $R^H = 5000$, $\beta = 1$, $Da = 1$ e $N_w = 30$. Deste modo, adoptam-se as condições descritas na Tabela 6.7 para a avaliação da performance do algoritmo adaptativo STAT02.

Tabela 6.7 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo `catn_isot`.

Colocação nodal	• Critério 2D	NA	
	• Critério 1D	C2	
	• ordem da derivada	1	
		ε_1	ε_2
	• tolerâncias	5×10^{-2}	5×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		5	11
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD biased upwind; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	0.01 para $t \leq 2$	
		1 para $t > 2$	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

Na Figura 6.23 apresentam-se os perfis numéricos associados às variáveis do problema 6.19 a 6.22 obtidos para o tempo $t = 0.5$. Como a velocidade de propagação da onda mássica é unitária, este instante temporal ainda está situado no intervalo inicial $[0,1]$ correspondente à evolução inicial do choque introduzido em $x = 0$ (vd. equação 6.21)

através do reactor de comprimento adimensional também unitário. Dada a reduzida influência do termo difusivo ($Pe = 10^4$), é expectável obter um perfil mássico caracterizado por uma frente abrupta centrada na posição média do domínio espacial, ladeada por uma secção decrescente a montante (devida ao carácter reaccional do sistema, definido pelo termo geracional de 6.19) e uma secção praticamente nula a jusante (representando uma região não afectada pela influência da perturbação, controlada predominantemente por fenómenos de transporte convectivos). Estas características são claramente visíveis no perfil mássico apresentado na Figura 6.23.

Por outro lado, como não é introduzida no sistema qualquer perturbação térmica, o efeito da passagem da onda mássica praticamente não afecta a evolução do perfil térmico nesta escala temporal.

No entanto, a necessidade de uma representação adequada da frente mássica abrupta obriga a um esforço de refinamento que ascende a valor máximo de resolução admitido ($N = 11$).

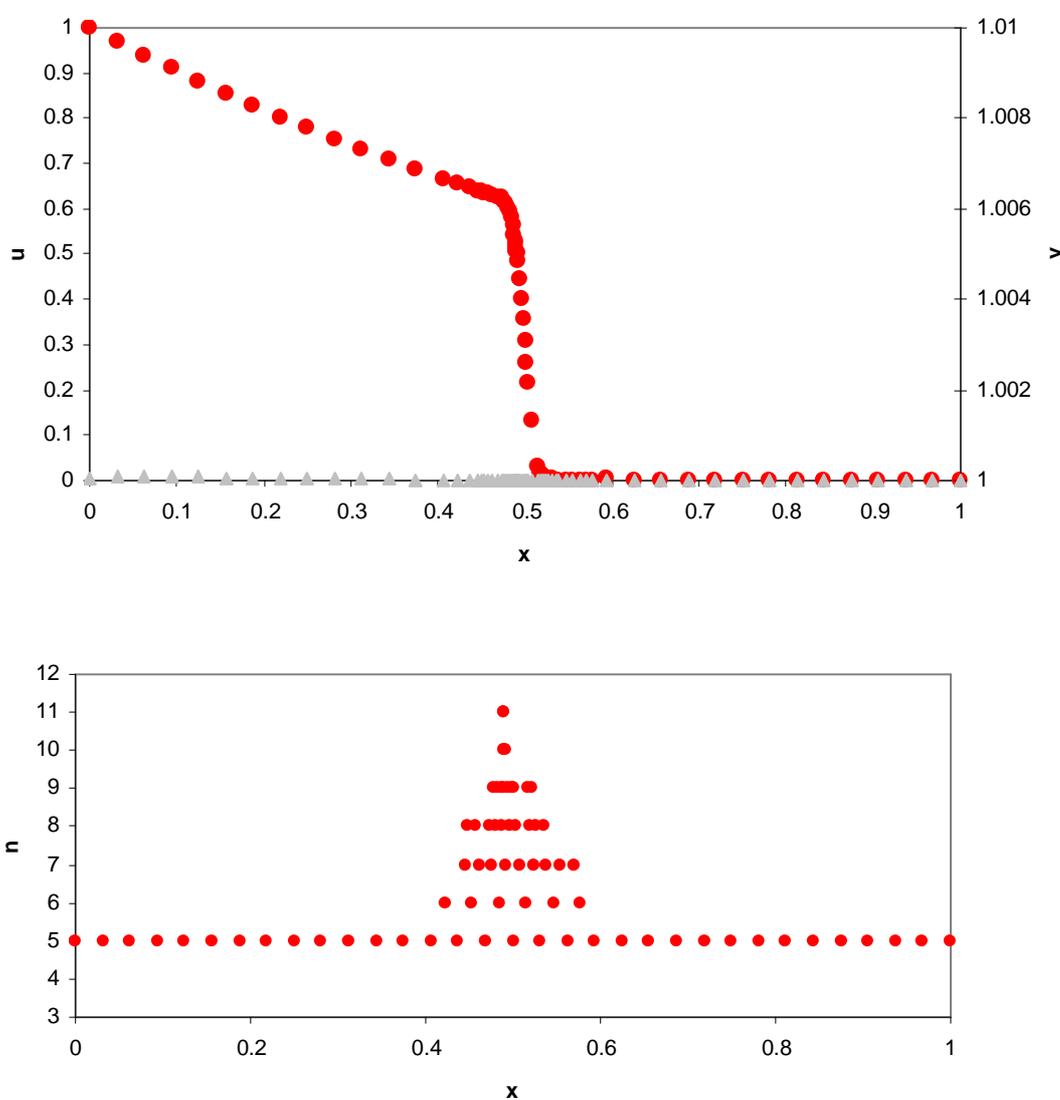


Figura 6.23 Malha gerada para $t = 0.5$ (modelo `catn_isot` – `gridgen11`/critério C2).

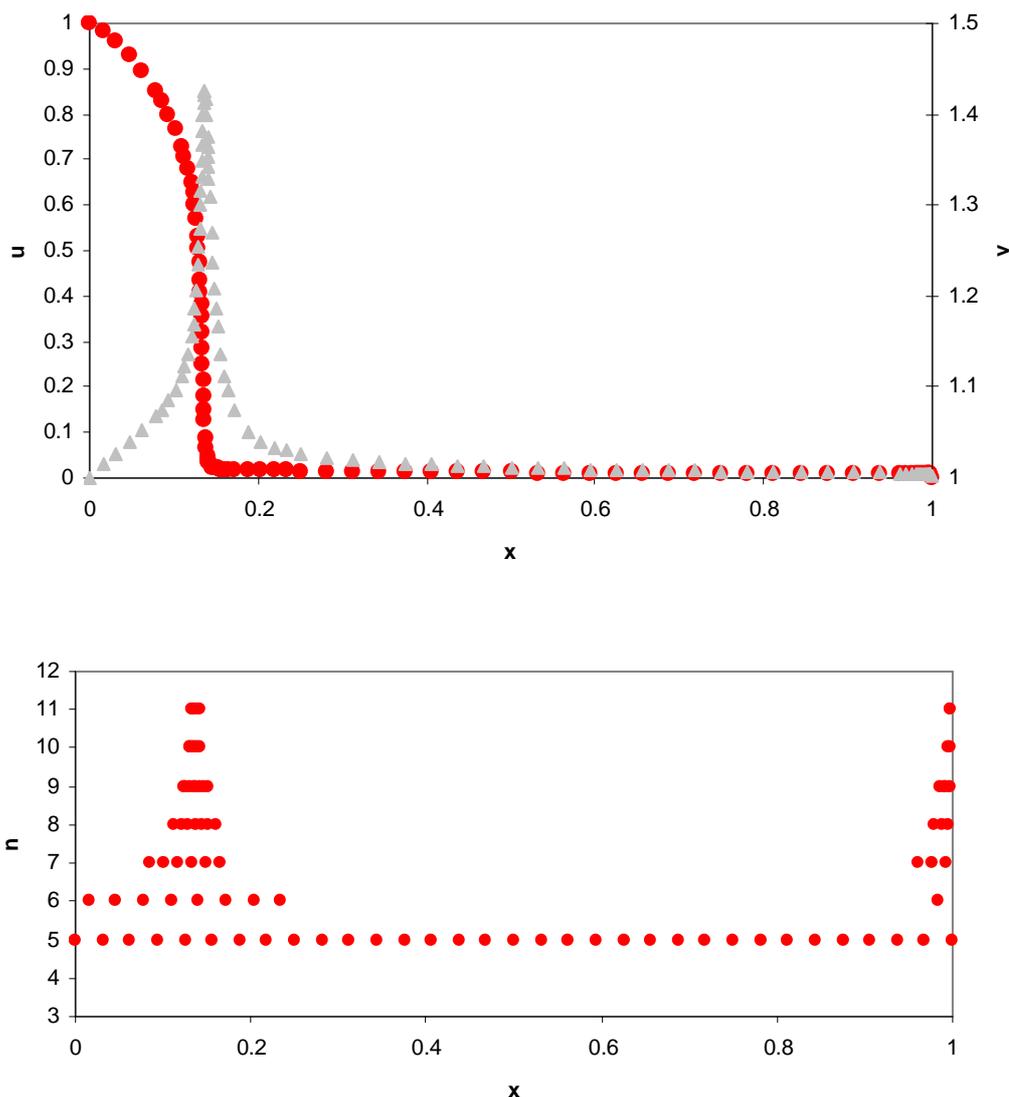


Figura 6.24 Malha gerada para $t = 800$ (modelo `catn_isot` – `gridgen11/critério C2`).

Após o período de passagem da onda mássica inicial ($t < 1$), a evolução da solução torna-se consideravelmente mais lenta. Deste modo, opta-se neste exemplo pela definição de um passo mais elevado ($\Delta t = 1$), para a execução da integração temporal quando $t > 2$ (vd. Tabela 6.7). Na Figura 6.24, ilustram-se os resultados numéricos obtidos para um instante temporal consideravelmente mais avançado ($t = 800$). Agora, verifica-se um esgotamento progressivo da onda mássica, já que o perfil de concentrações é praticamente nulo numa região extensa do domínio espacial. Esta anulação da onda mássica é explicada pelo crescimento da onda térmica (hot-spot), já claramente visível no primeiro quarto do domínio. A configuração da onda térmica é claramente abrupta nestas condições e a sua posição coincide com a localização da onda mássica de declive igualmente acentuado. Deste modo, é na vizinhança da região do hot-spot que se concentra o maior esforço de refinamento, consentâneo com a necessária representação apropriada dos perfis de solução numéricos. Observação também uma actividade significativa de adaptação de malha na região adjacente à fronteira direita do domínio ($x = 1$), correspondente à verificação das condições fronteira de Neumann estabelecidas nessa posição (vd. equação 6.21).

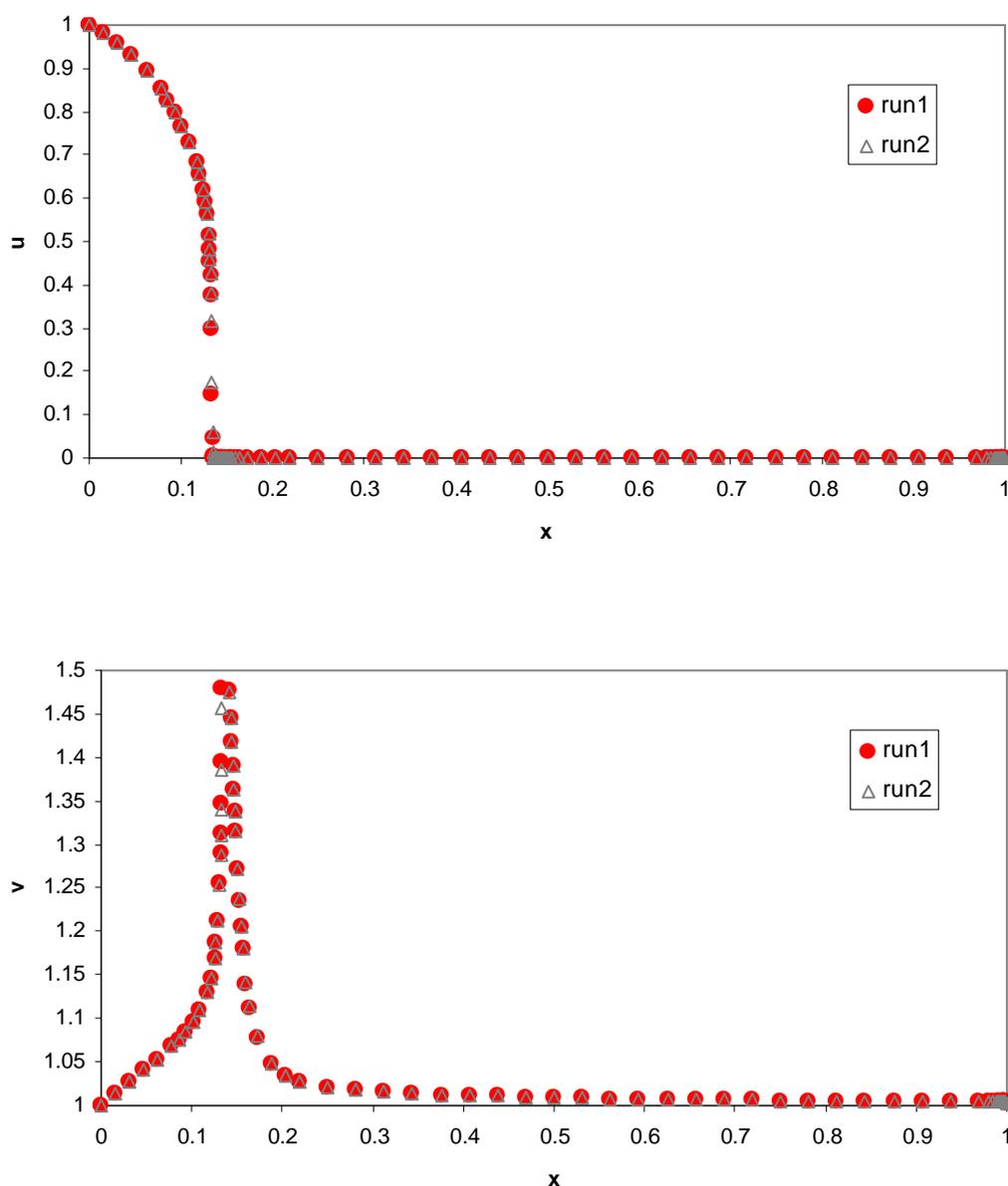


Figura 6.25 Comparação dos perfis para $t = 850$ (modelo `catn_isot` – `gridgen11`/critério C2).

Por outro lado, comparam-se igualmente os perfis numéricos obtidos através da implementação de dois runs definidos em condições semelhantes, mas que diferem apenas no segundo passo de tempo estabelecido para $t > 2$. Assim, se para o caso do run1 este passo temporal é fixado como a unidade, na execução 2 (run2), o passo Δt é duplicado. Tal estratégia permite reduzir o tempo de processamento computacional em aproximadamente 40 %, proporcionando resultados perfeitamente equivalentes (vd. Figura 6.25). De facto, a evolução das malhas adaptativas ao longo da integração temporal revela-se muito semelhante (vd. Figura 6.26), o que indicia que a poupança em termos de esforço de cálculo é realizada ao nível da redução significativa do número de passos temporais realizados pelo algoritmo adaptativo nas condições do run2 em relação às correspondentes ao do run1, sem qualquer sacrifício em termos da qualidade dos resultados.

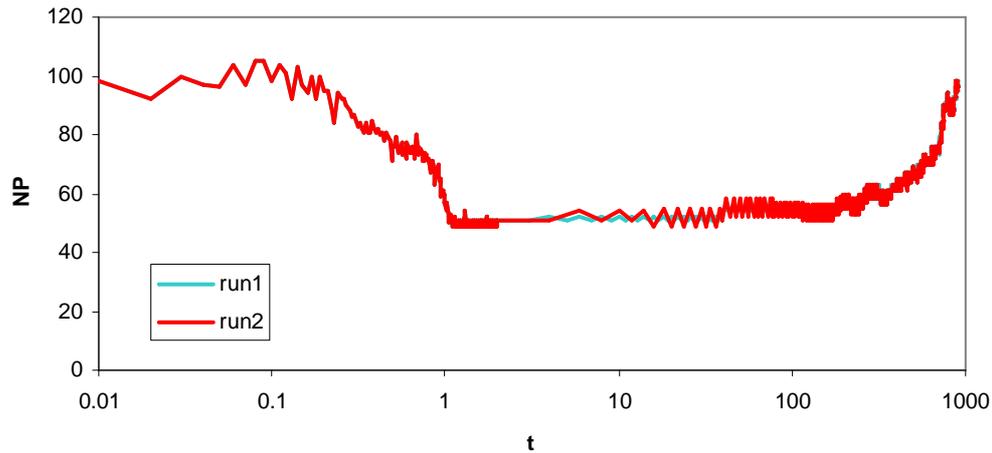


Figura 6.26 Evolução do número de nós da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo `catn_isot`.

6.4 MODELO DE PERMUTADOR DE FLUXO EM CONTRA-CORRENTE

O objectivo consiste em testar um exemplo[10] puramente advectivo, ou seja, que não possua o termo estabilizador difusivo. Assim, considera-se um modelo que simula o arranque de um permutador de calor de fluxo em contra-corrente. Este modelo assume: fluxo pistão, perdas de calor para o exterior desprezáveis, propriedades constantes de ambos os fluidos, e espessura e inércia térmica desprezáveis do tubo que separa os fluidos. Deste modo, escreve-se o modelo na forma adimensional seguinte:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} - H_i(u - v) \quad (6.23)$$

$$r \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x} + H_o(u - v) \quad (6.24)$$

em que,

- $u = (T_i - T_{i,inlet})/T_{i,inlet}$, temperatura normalizada do fluido interno.
 - T_i , temperatura do fluido interno.
 - $T_{i,inlet}$, temperatura de entrada do fluido interno.
- $v = (T_o - T_{i,inlet})/T_{i,inlet}$, temperatura normalizada do fluido externo.
 - T_o , temperatura do fluido externo.
- $x = \xi/\ell$, variável espacial normalizada em relação ao comprimento do permutador.
 - ξ , variável espacial.
 - ℓ , comprimento do permutador.
- $t = \theta/\tau$, tempo adimensional, normalizado em relação ao tempo de passagem.
 - θ , variável temporal.

- $\tau = \ell / \phi_i$, tempo de passagem de um elemento de fluido no leito.
- ϕ_i , velocidade do fluxo do fluido interno.
- $r = \phi_i / \phi_0$, razão de velocidades.
 - ϕ_0 , velocidade do fluxo do fluido externo.
- $H_i = \frac{h_i P_i \ell}{\rho_i C_{p_i} A_i \phi_i}$, parâmetro adimensional referente ao fluido interno.
 - h_i , coeficiente de transferência de calor interno.
 - P_i , perímetro de transferência de calor interno.
 - ρ_i , densidade do fluido interno.
 - C_{p_i} , calor específico do fluido interno.
 - A_i , Área transversal interna.
- $H_0 = \frac{h_0 P_0 \ell}{\rho_0 C_{p_0} A_0 \phi_0}$, parâmetro adimensional referente ao fluido externo.
 - h_0 , coeficiente de transferência de calor externo.
 - P_0 , perímetro de transferência de calor externo.
 - ρ_0 , densidade do fluido externo.
 - C_{p_0} , calor específico do fluido externo.
 - A_0 , Área transversal externa.

Nos domínios: $0 \leq x \leq 1$ e $0 \leq t \leq 0.7$; definem-se as condições fronteira,

$$u(0, t) = 0, v(1, t) = v_{inlet}, \quad (6.25)$$

e as condições iniciais:

$$u(x, 0) = 0, v(x, 0) = 0. \quad (6.26)$$

As implementações numéricas são realizadas com os parâmetros: $H_i = H_0 = r = v_{inlet} = 1$, nas condições descritas na Tabela 6.8.

Neste caso, o método tem de lidar com a propagação de uma perturbação em degrau da temperatura do fluido externo (v) à entrada ($x = 1$), que percorre o reactor sem ser suavizada por qualquer mecanismo de transporte difusivo. Assim, é expectável que a descontinuidade se propague ao longo do permutador, mantendo a sua forma inicial, ou seja, sem a mínima distorção. Obviamente que a evolução desta onda térmica externa afecta os perfis de temperatura do fluido interno (u). No entanto, este fenómeno é relativamente lento não induzindo a formação de perfis problemáticos na variável u .

Deste modo, opta-se por testar o desempenho do critério de colocação C1 no contexto da rotina de geração de *gridgen11*. Da mesma forma do que nos exemplos anteriores, a estratégia de discretização espacial aplica aproximações de diferenças finitas biased upwind para as duas variáveis para a estimativa das derivadas espaciais, de modo se

conseguir um acompanhamento mais eficiente do fluxo associado a cada uma das variáveis. Tal implica que, na prática as aproximações FD referentes à variável u estejam deslocadas para a esquerda (fluxo positivo), enquanto que as aproximações correspondentes a v sejam enviesadas para a esquerda (fluxo negativo).

Tabela 6.8 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução do modelo do permutador.

Colocação nodal	• Critério 2D	NA	
	• Critério 1D	C2	
	• ordem da derivada	1	
		ε_1	ε_2
	• tolerâncias	5×10^{-2}	5×10^{-2}
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		5	11
		M_y	N_y
		NA	NA
		uniforme	
Discretização espacial	• aproximações	FD biased upwind; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	NA	
Interpolação		linear	
Integração temporal	• passo (Δt)	1×10^{-3}	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-6}	1×10^{-6}

Os resultados obtidos nas condições da Tabela 6.8 são resumidos na Figura 6.27. Verifica-se uma relativa incapacidade do procedimento de lidar com o movimento da descontinuidade sem introduzir perturbações sem significado físico nos perfis da variável v . De facto, apesar dos resultados se revelarem satisfatórios em termos da definição da secção superior da frente, observa-se o desenvolvimento de um undershoot de amplitude significativa na representação da onda de propagação térmica v . A dificuldade na representação da curvatura jusante da frente abrupta deve-se essencialmente ao tipo de aproximações FD adoptado, que concentra o seu esforço de representação numérica na região montante relativa ao nodo de avaliação. Assim, é perfeitamente expectável que esta estratégia upwind, que se mostra bastante adequada para mimetizar o movimento de frentes, demonstre um pior desempenho na representação de características situadas na secção jusante das ondas. No entanto, verifica-se igualmente que o fenómeno descrito anteriormente não introduz instabilidade nos perfis numéricos. Pelo contrário, tende a se anular com o decorrer da integração, tornando-se praticamente indistinguível para $t > 0.4$.

O desenvolvimento de oscilações não físicas deve-se à natureza não limitada dos esquemas de aproximação FD, já discutida na secção 3.2, já que é notório que o procedimento de geração de malha adaptativa operou de modo satisfatório na detecção, simulação e deslocação da frente abrupta. Para obviar este tipo de problemas, recorre-se então a esquemas de alta resolução (HRS) para a estimativa dos termos advectivos das equações 6.23 e 6.24. Assim, executa-se uma nova integração do problema em estudo, onde se mantêm as condições gerais de implementação da Tabela 6.8 (com $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1 \times 10^{-2}$, e esquemas de interpolação de splines cúbicas a 7 pontos), associadas a uma estratégia NVSF com limitador de fluxo MINMOD para a

avaliação das primeiras derivadas espaciais. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 6.28.

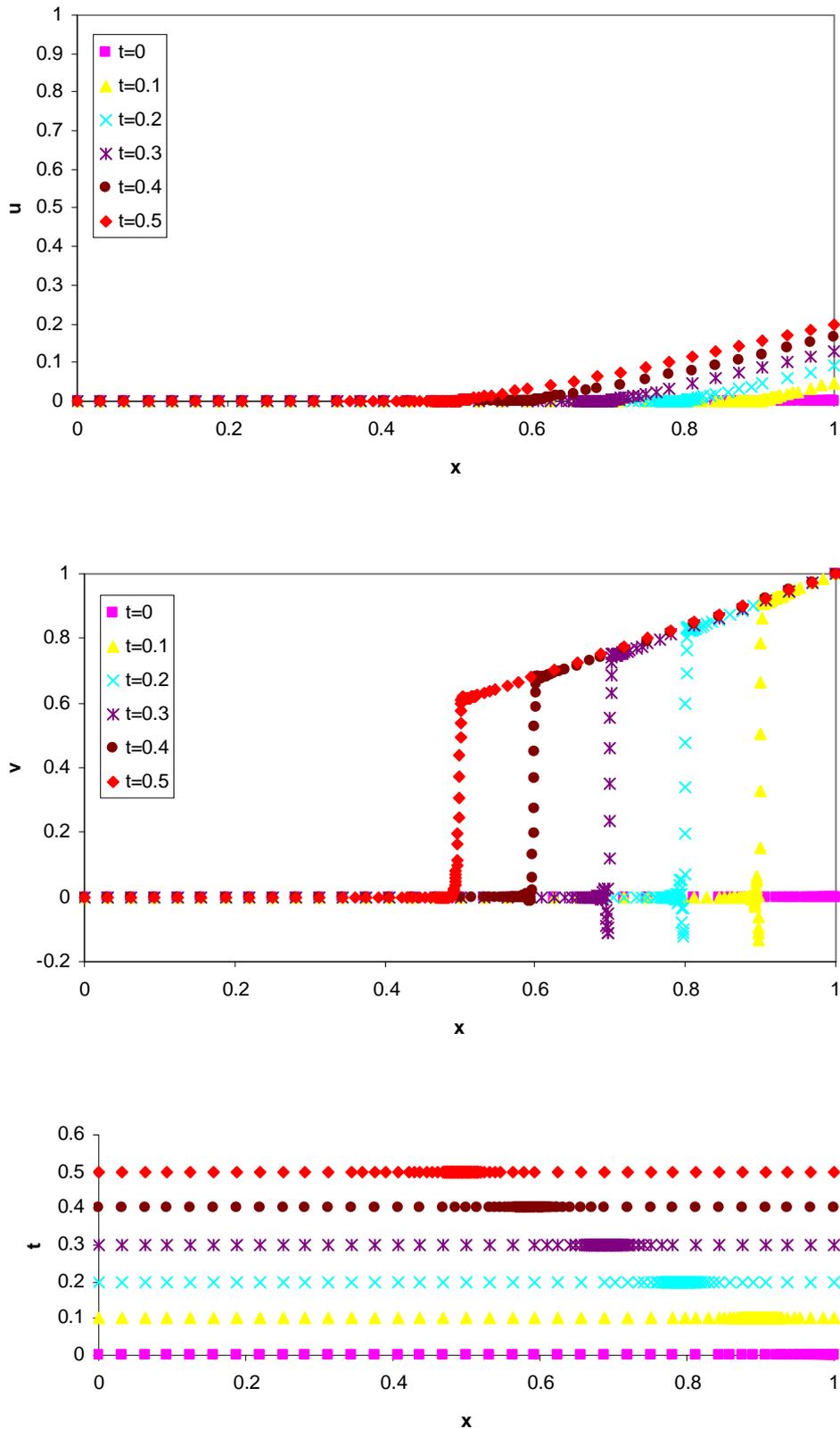


Figura 6.27 Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2).

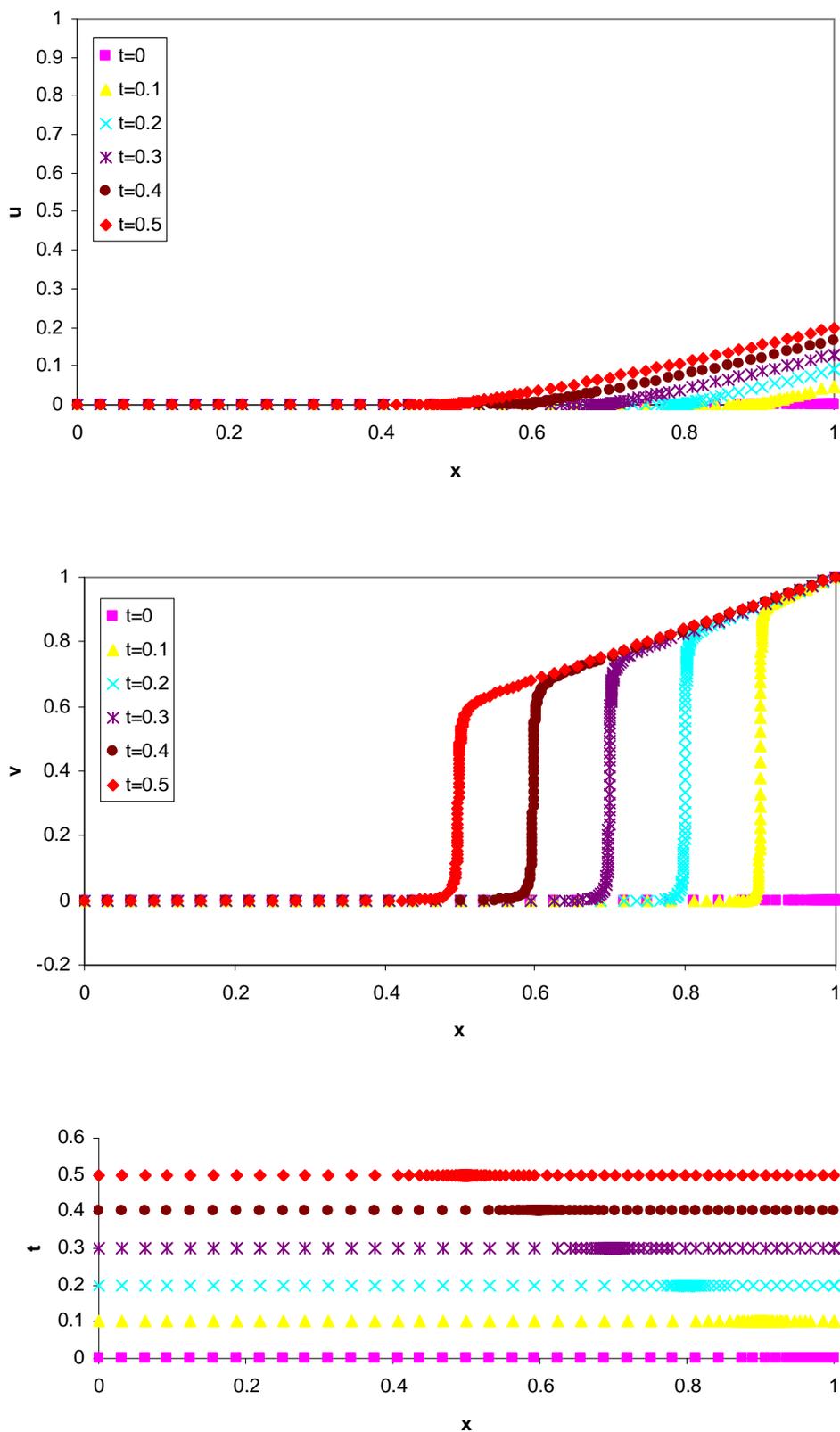


Figura 6.28 Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2); avaliação de derivadas espaciais através de uma estratégia NVSF associada ao limitador de fluxo MINMOD.

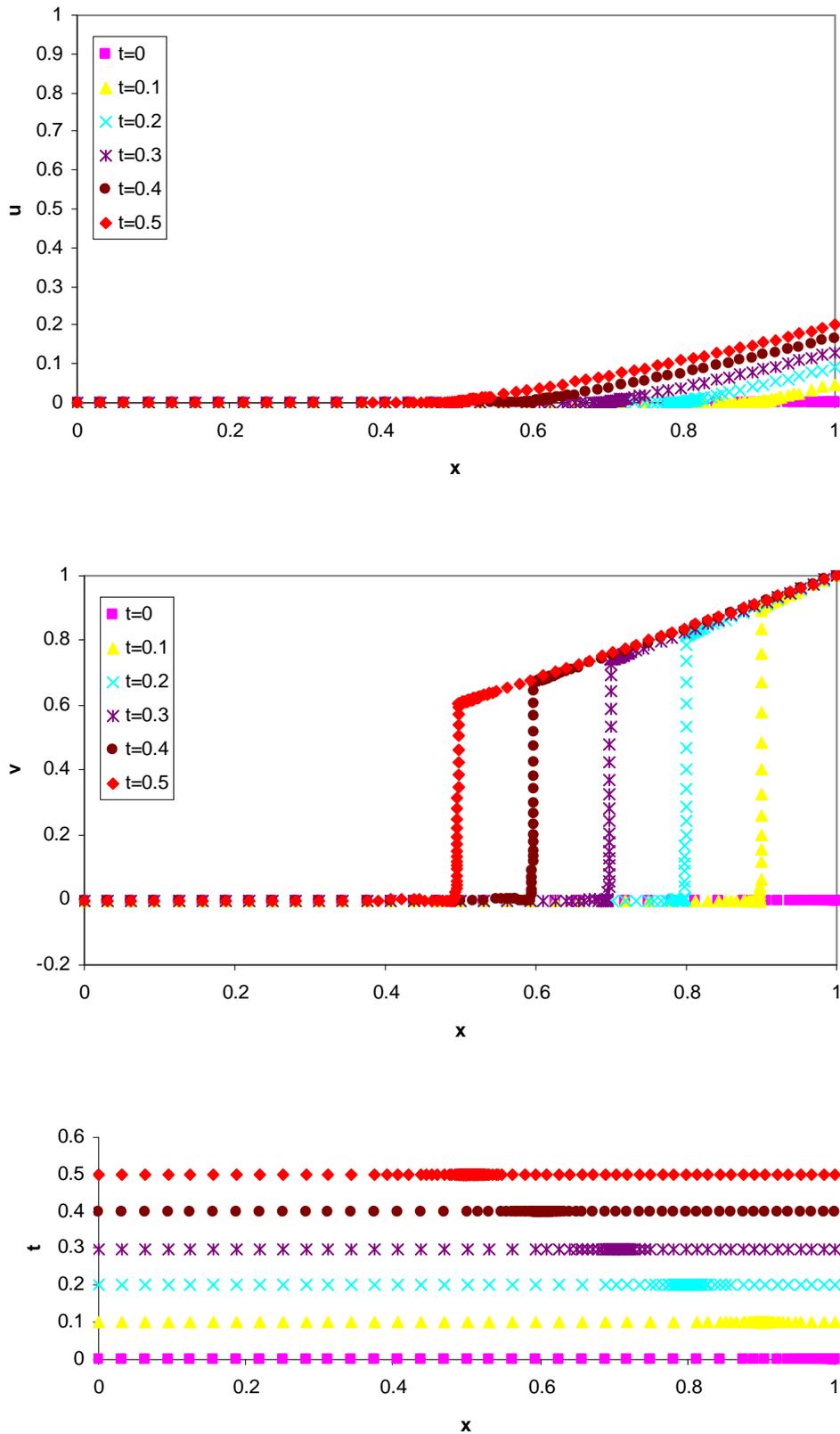


Figura 6.29 Implementação numérica para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2); avaliação de derivadas espaciais através de uma estratégia NVSF associada ao limitador de fluxo SMART.

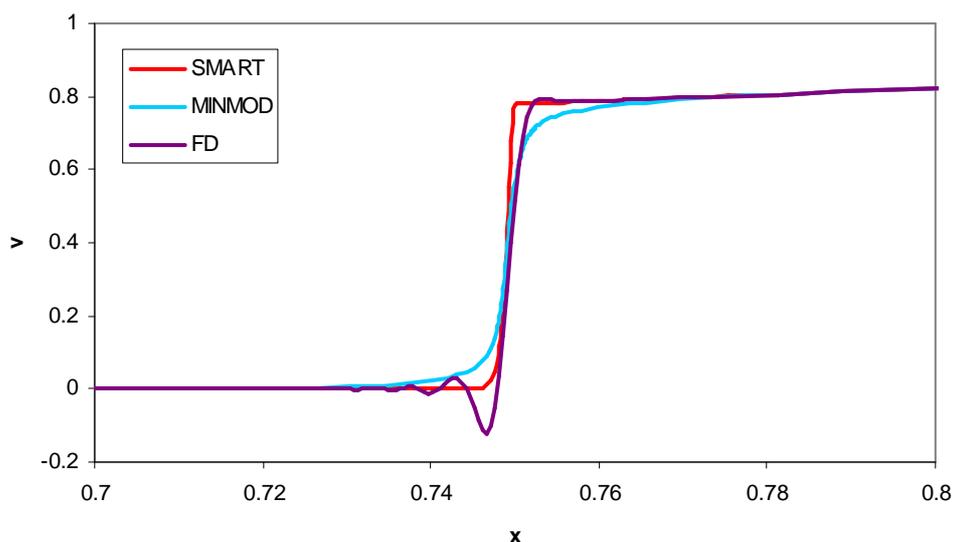


Figura 6.30 Perfis espaciais da variável v para $t = 0.25$ para o caso do modelo do permutador (gridgen11/critério C2).

Verifica-se agora uma visível estabilização dos perfis, sem a ocorrência de fenómenos de dispersão numérica. No entanto, é igualmente notório o desenvolvimento de uma suavização artificial da frente de propagação que se agrava com o avanço da integração temporal. Assim, a eliminação da dispersão numérica foi realizado à custa da introdução de uma dissipação numérica razoável na solução, associada ao próprio esquema MINMOD[10].

De forma a encontrar um melhor equilíbrio entre o balanço das características de dissipação e de difusão da solução numérica, opta-se por testar o comportamento do esquema de limitação SMART em condições equivalentes às referentes ao ensaio MINMOD. Assim, obtêm-se os resultados resumidos na Figura 6.29. Neste caso, nota-se agora uma maior capacidade de representação da descontinuidade sem que se detecte qualquer perturbação importante no perfil (vd. Figura 6.30). A simulação adequada da descontinuidade móvel é mantida sem alterações aparentes ao longo do processo de integração temporal, confirmando a aptidão do esquema SMART de lidar com sucesso com este tipo de problemas[10].

Em todas as implementações se verifica a capacidade do algoritmo de geração de malha de simular adequadamente as características principais dos perfis de solução numérica.

A análise da evolução das malhas adaptativas permite concluir que os esquemas HRS promovem um aumento controlado da dimensão da malha ao longo da integração temporal, enquanto que o esquema FD induz um pico de refinamento inicial que evolui posteriormente de forma decrescente mas estável, até dimensões de malha inferiores às correspondentes aos ensaios HRS. Nestas condições, o ensaio SMART revela-se mais exigente do ponto de vista adaptativo do que a implementação MINMOD, conduzindo a resultados significativamente mais satisfatórios. Porém, a necessidade de construção de malhas mais complexas conduz a um tempo de processamento mais elevado para o caso do ensaio SMART (vd. Tabela 6.9), semelhante ao obtido na implementação FD.

Tabela 6.9 Tempos de execução para o caso do modelo do permutador.

Execução	Tempo de cpu (s)
FD	594.2
SMART	581.2
MINMOD	239.2

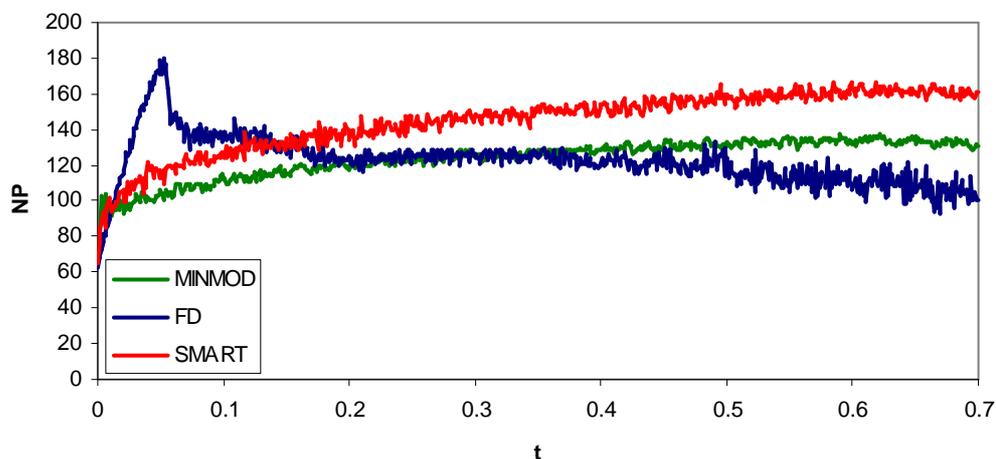


Figura 6.31 Evolução do número de nós da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo do permutador.

6.5 MODELO 2D DE COMBUSTÃO

Nesta secção pretende-se resolver o modelo que representa a extensão a duas dimensões espaciais do problema de combustão apresentado na secção 6.2 (vd. equação 6.4). Este modelo consiste numa equação de difusão-reacção, tipicamente parabólica em que a frente móvel se deve à influência do termo geracional de reacção, geralmente associado a sistemas reaccionais caracterizados por cinéticas extremamente rápidas, ou seja velocidades de conversão muito elevadas, como é o caso dos sistemas de combustão.

Assim, o modelo é representado pela PDE[11-12],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = p \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + D(1 + a - u)e^{-d/u}, \quad (6.27)$$

com:

- $u = T/T_0$, temperatura normalizada da chama.
 - T , temperatura da chama.
 - T_0 , temperatura inicial da chama.
- t , variável temporal.
- x, y , variáveis espaciais.
- p , coeficiente de difusão.

- $D = R e^d / a d$
 - R, d, a , constantes.

O problema é resolvido nos domínios: $x \in [0,1]$, $y \in [0,1]$ $t \in [0,0.3]$; sendo completado pelas condições fronteira:

$$\frac{\partial u(0,y,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u(x,0,t)}{\partial y} = 0, \quad u(x,1,t) = 1, \quad u(1,y,t) = 1 \quad (6.28)$$

e a condição inicial,

$$u(x,y,0) = 1. \quad (6.29)$$

Testa-se novamente o caso equivalente ao modelo 1D com: $a = 1$, $d = 20$ e $R = 5$.

Na equação 6.27 é introduzido um coeficiente de difusão (p) que representa um parâmetro adicional em relação à equação unidimensional correspondente (vd. equação 6.4). No caso 1D, assume-se implicitamente que $p = 1$. A solução deste modelo apresenta um comportamento semelhante à do caso 1D. Assim, esta arranca a partir de um perfil em plateau unitário (vd. equação 6.29) perturbado pela introdução da condição fronteira de Neumann na posição $[0,0]$, que simula a ignição do sistema. A onda 2D eleva-se até uma altura de $1+\alpha$, e propaga-se ao longo das duas direcções do espaço (x e y) com uma velocidade equivalente, no sentido positivo de ambos os eixos coordenados. À medida que avança ao longo do domínio espacial, a onda 2D torna-se progressivamente mais abrupta, até embater nas fronteiras $x = 1$ e $y = 1$, onde as condições fronteira de Dirichlet a sustêm (vd. equação 6.28).

No entanto, é sabido que a transposição do problema para um domínio 2D induz um notório atraso no instante de ignição em condições equivalentes. Assim, enquanto que a ignição 1D ocorre a $t \approx 0.26$ (vd. secção 6.2), o modelo 2D correspondente (com $p = 1$), apresenta uma ignição a $t \approx 0.29$ [12]. Por outro lado, experiências com o algoritmo INTEGR2D (acoplado ao integrador RKF45) cujos resultados não são apresentados, indiciam uma grande instabilidade da solução numérica sempre que o procedimento de refinamento é activado. Tal só pode ser explicável pela introdução de erros de interpolação referentes ao processo de refinamento que (mesmo quando aparentam ser perfeitamente razoáveis) geram forte instabilidade no esquema temporal de Runge-Kutta-Fehlberg adoptado como processo de integração temporal, e que impossibilitam o avanço do algoritmo. No entanto, é igualmente visível que o problema nestas condições não gera perfis especialmente abruptos, já que a influência do termo difusivo é relativamente importante. Deste modo, pode ser resolvido com malhas fixas não demasiado pesadas em tempos de processamento razoáveis.

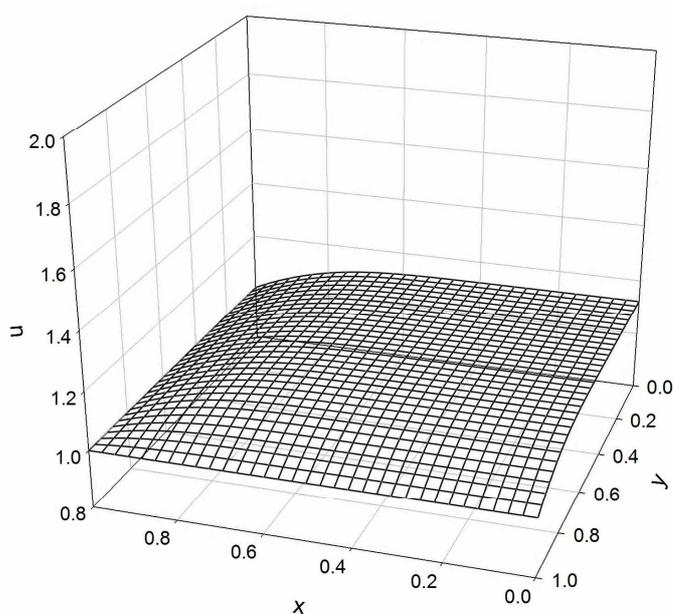
Assim, opta-se por testar o desempenho do algoritmo adaptativo através do aumento da exigência de adaptabilidade do problema pela redução do valor de p , e.g. $p = 0.1$ ou 0.01 , e conseqüentemente do carácter difusivo do problema. Nestes casos, a ignição é antecipada e torna-se mais abrupta.

Para o caso específico $p = 0.1$, o tempo de ignição ocorre a $t \approx 0.24$ [12]. Este exemplo é resolvido pela aplicação do algoritmo bidimensional INTEGR2 com o integrador RKF45 nas condições resumidas na Tabela 6.10. Os resultados obtidos são apresentados no conjunto de Figuras 6.32 a 6.38

Tabela 6.10 Parâmetros numéricos para a implementação da resolução da equação de combustão 2D.

Colocação nodal	• Critério 2D	C52	
	• Critério 1D	C1 σ	
	• ordem da derivada	1	
		ϵ_1	ϵ_2
	• tolerâncias	0.25	0.25
Malhas	• diádicas	M_x	N_x
		5	7
		M_y	N_y
		5	7
		FD centradas; 5 pontos	
		uniforme	
Discretização espacial	• Aproximações	FD centradas; 5 pontos	
	• diferenciação ($n > 1$)	sucessiva	
Interpolação		splines cúbicas; 7 pontos	
Integração temporal	• passo (Δt)	0.01 para $t \leq 0.24$ 1×10^{-4} para $t > 0.24$	
		ATOL	RTOL
	• tolerâncias	1×10^{-5}	1×10^{-5}

A integração é realizada em duas fases: a primeira em que ocorre uma elevação lenta de temperatura é realizada com um passo relativamente elevado (0.01). Na vizinhança da ignição ($t = 0.24$), o passo é substancialmente reduzido (0.0001) de forma a lidar com a elevação brusca e posterior propagação da onda que ocorre numa escala de tempo muito mais apertada.

Figura 6.32 Perfis de solução ($t = 0.2$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

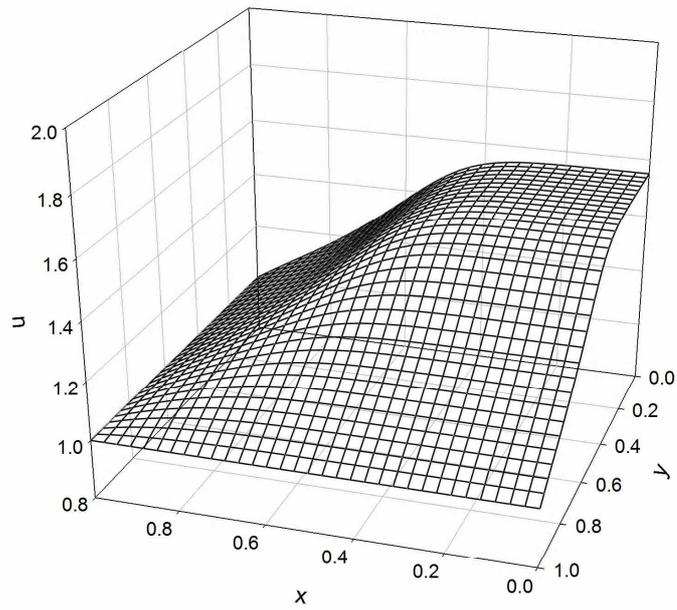


Figura 6.33 Perfis de solução ($t = 0.24$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

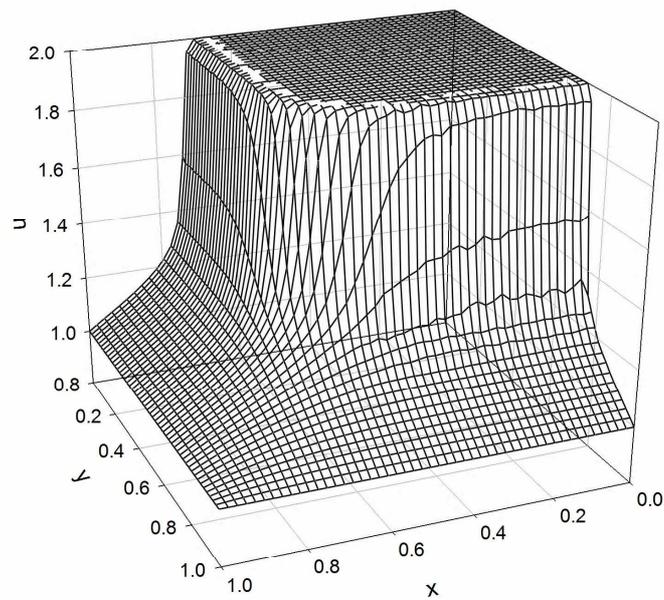


Figura 6.34 Perfis de solução ($t = 0.25$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

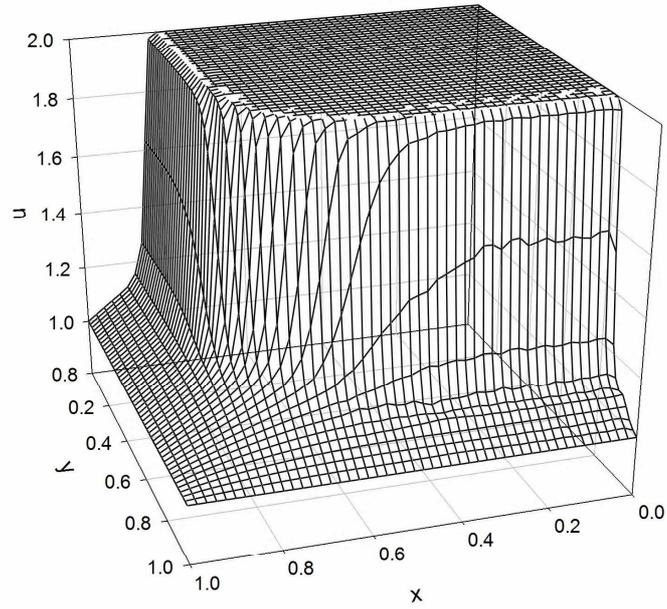


Figura 6.35 Perfis de solução ($t = 0.26$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

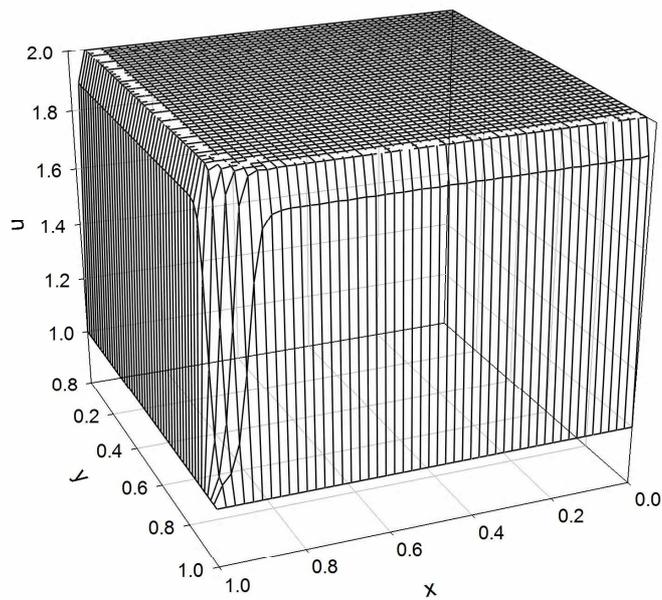


Figura 6.36 Perfis de solução ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

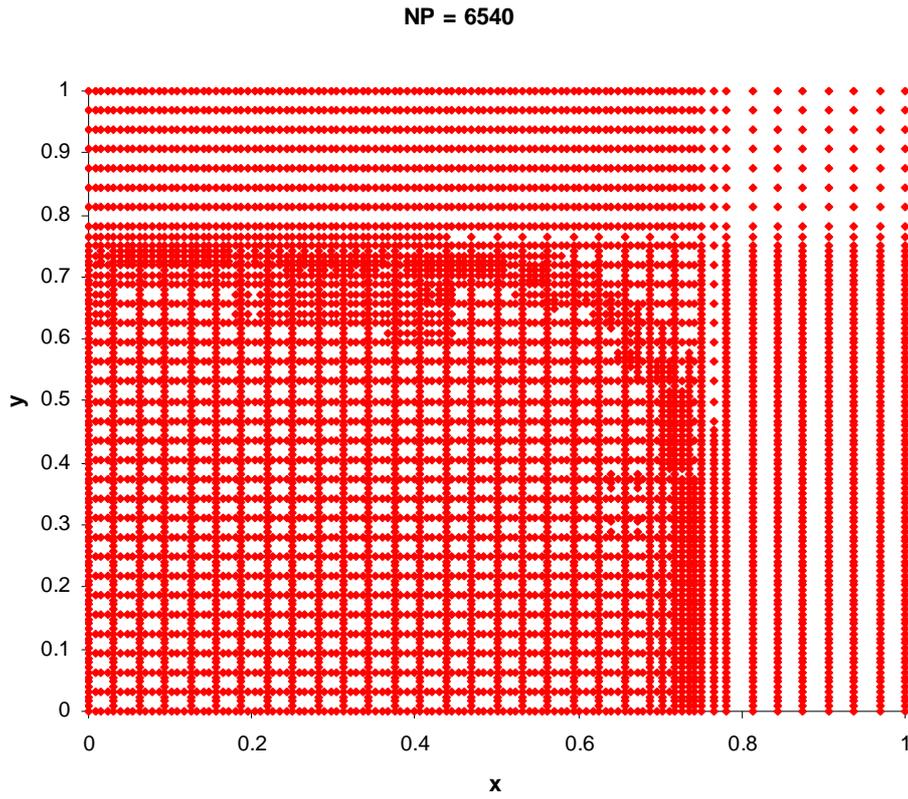


Figura 6.37 Malha gerada ($t = 0.25$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

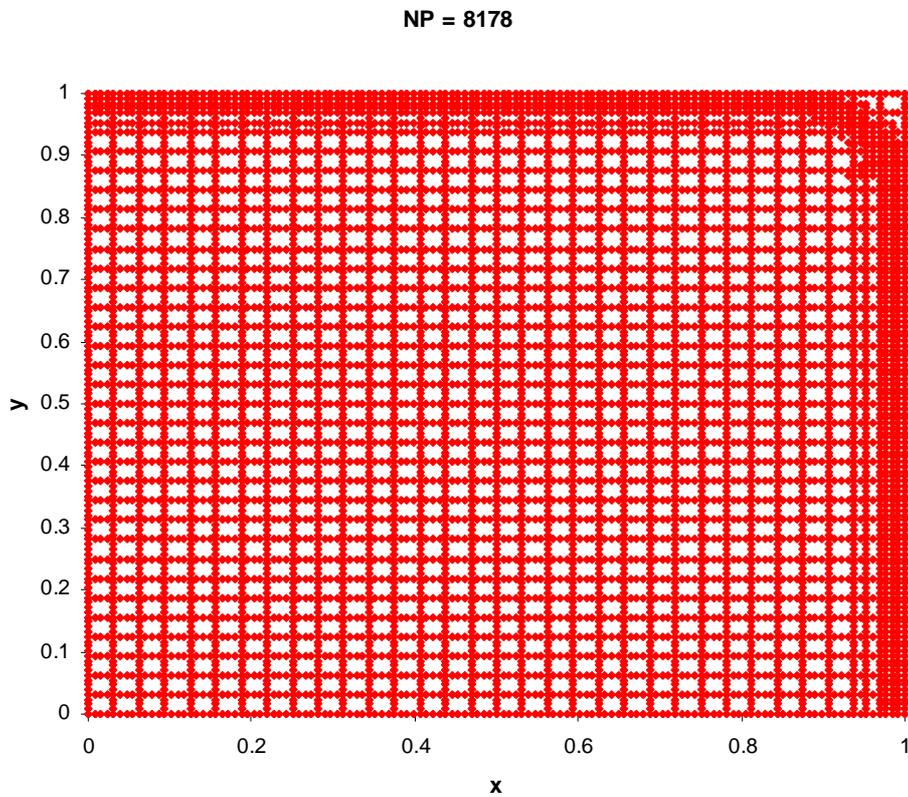


Figura 6.38 Malha gerada ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.1$).

Na Figura 6.32 observa-se um perfil típico inicial relativamente suave e que representa a primeira fase de elevação de temperatura que não exige qualquer operação de refinamento da malha de nível mais reduzido ($M = 5$) nas condições de implementação seleccionadas. Posteriormente (para $t = 0.24$; vd. Figura 6.33) está-se numa situação de pré-ignição onde a elevação de temperatura acelera sensivelmente sem que o perfil gerado apresente ainda uma onda térmica de propagação plenamente definida.

De facto, em $t = 0.25$ (vd. Figura 6.34), é notório que a ignição já ocorreu, observando-se a formação de uma onda abrupta cujo declive se situa na posição espacial ≈ 0.7 em ambas as direcções. A malha gerada para esse instante é apresentada na Figura 6.37. Deste modo, constata-se a visível capacidade do algoritmo de colocação nodal de representação da frente abrupta por uma óbvia concentração de nodos na região de maior actividade da solução.

O avanço progressivo da onda é ilustrado pela representação da solução numérica para $t = 0.26$ (vd. Figura 6.35) onde se verifica o reposicionamento da frente abrupta numa região espacial posterior às abcissas localizadas em 0.8. A curvatura da frente é correctamente representada quer nas secções montante e jusante sem que se observem perturbações significativas nos perfis.

Finalmente, apresenta-se a solução numérica em $t = 0.3$ (vd. Figura 6.36). Constata-se uma simulação correcta da frente já estabelecida junto às fronteiras opostas à ignição, ilustrada igualmente por uma visível concentração nodal na vizinhança dessas fronteiras na malha adaptativa gerada para esse instante temporal.

O patamar 2D que se estende ao longo do tempo (com $u = 2$) mantém-se extremamente estável e a maioria dos nodos colocados são devidos à versão específica da estratégia C52 adoptada, baseada na activação de todos os nodos de nível M de qualquer domínio 1D previamente activado pelo procedimento de refinamento.

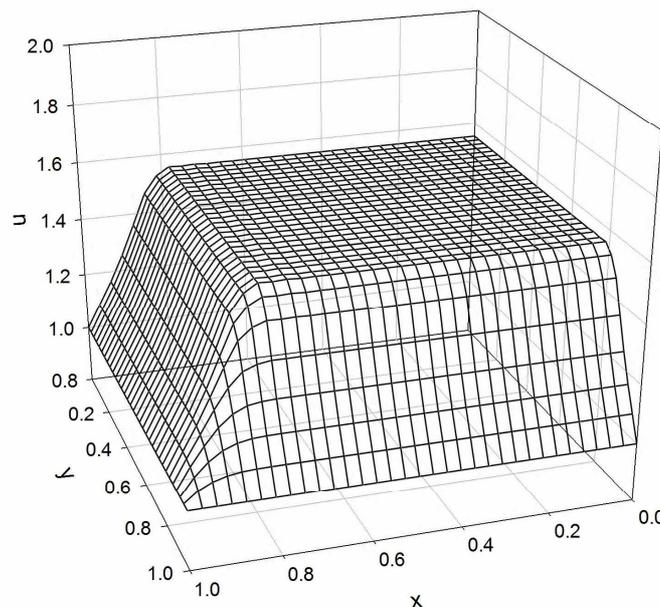


Figura 6.39 Perfis de solução ($t = 0.24$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).

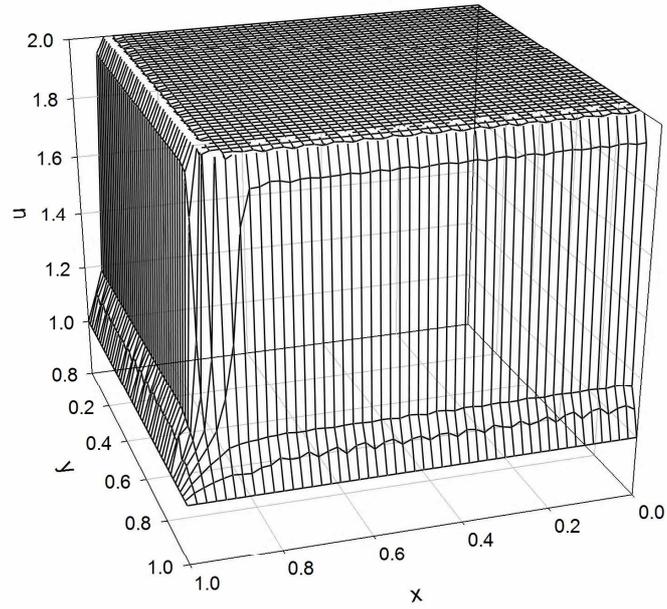


Figura 6.40 Perfis de solução ($t = 0.26$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).

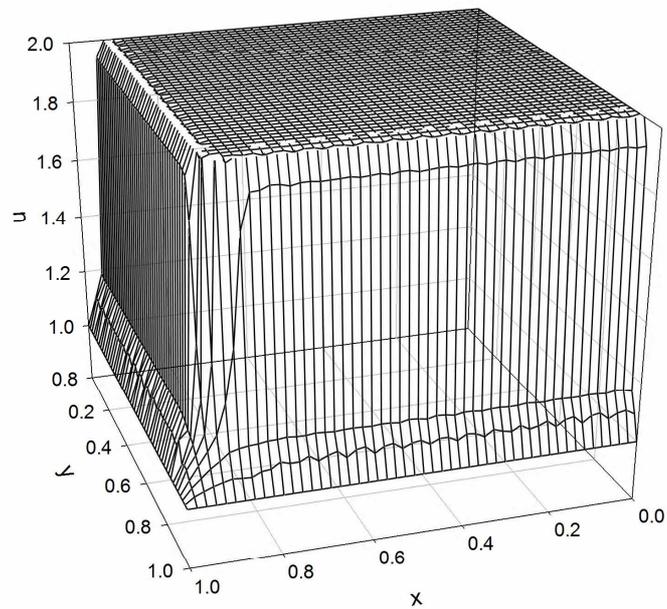


Figura 6.41 Perfis de solução ($t = 0.3$) para o modelo de combustão 2D ($p = 0.01$).

A implementação do modelo com $p = 0.01$ em condições equivalentes (vd. Tabela 6.10) conduz a resultados semelhantes aos do exemplo anteriormente discutido. No entanto, a análise dos perfis numéricos obtidos (vd. Figuras 6.39 a 6.41) permite constatar um considerável aumento da velocidade de propagação da onda térmica que atinge a fronteira oposta num intervalo de tempo muito mais reduzido do que no caso precedente. De facto, mesmo na fase de pré-ignição, a onda já percorre grande parte do domínio, antes de atingir a sua altura máxima (vd. Figura 6.39). Esta propagação súbita é igualmente provada pela elevação abrupta da dimensão da malha adaptativa espoletada pela ignição (vd. Figura 6.42), que é mais acentuada no caso do segundo exemplo. Por outro lado, a convergência para soluções finais semelhantes é consistente com a geração de malhas finais de dimensões igualmente análogas.

De qualquer modo, demonstra-se assim a capacidade do algoritmo de integração de lidar com este tipo de problemas através da representação das estruturas abruptas que caracterizam a sua solução.

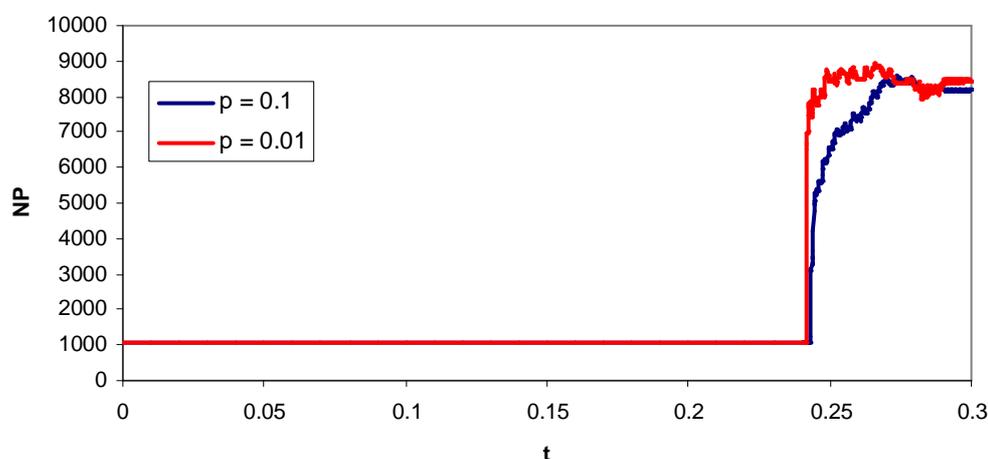


Figura 6.42 Evolução do número de nodos da malha adaptativa gerada na implementação numérica para o caso do modelo de combustão 2D.

REFERÊNCIAS

1. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
2. B.P.M. Duarte (1994) *Método dos Elementos Finitos Móveis Aplicado à Resolução de Modelos de Frente de Reação*, PhD Thesis, FCTUC, Coimbra, Portugal.
3. S. Adjerid, J.E. Flaherty (1986) "A moving finite element method with error estimation and refinement for one-dimensional time dependent partial differential equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, **23** (4), pp. 778-796.
4. J.G. Verwer, J. G. Blom, J. M. Sanz-Serna (1989); "An adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **82** (2), pp. 454-486.
5. L.R. Petzold (1987) "Observations on an adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *Appl. Numer. Math.*, **3** (4), pp. 347-360.
6. P. Brito, L. Durães, J. Campos, A. Portugal (2007) "Simulation of Fe₂O₃/Al combustion: sensitivity analysis", *Chem. Eng. Sci.*, **62** (18-20), pp. 5078-5083.

7. L. Durães, P. Brito, J. Campos, A. Portugal (2006) "Modelling and simulation of Fe₂O₃/aluminum thermite combustion: experimental validation", in *16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering – ESCAPE-16 & PSE-2006* (W. Marquardt, C. Pantelides, eds.), *Computer Aided Chemical Engineering*, **21A**, Elsevier, pp. 365-370.
8. P. Brito, L. Durães, J. Campos, A. Portugal (2005) "Modelling and simulation of Fe₂O₃/aluminum thermite combustion", in *Chempor'2005 - 9th International Chemical Engineering Conference*, Coimbra, Portugal, 21-23 Sept., pp. 157-158 & CD-ROM (6 pp.).
9. P. Cruz, A. Mendes, F.D. Magalhães (2002) "Wavelet-based adaptive grid method for the resolution of nonlinear PDEs", *AIChE J.*, **48** (4), pp. 774-785.
10. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method", *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
11. J.C. Santos, P. Cruz, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "2-D Wavelet-based adaptive-grid method for the resolution of PDEs", *AIChE J.*, **49** (3), pp. 706-717.
12. M.C.C.P. Coimbra (2000) *Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicação a Sistemas de Equações de Derivadas Parciais Bidimensionais*, PhD Thesis, FEUP, Porto.

PÁGINA EM BRANCO

7. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO

7.1 CONCLUSÕES

Uma análise global dos resultados resumidos nos capítulos precedentes (4, 5 e 6) pretendem demonstrar a capacidade dos métodos adaptativos desenvolvidos no presente trabalho (vd. capítulo 3) para integração de modelos diferenciais evolutivos uni- e bidimensionais. A experiência adquirida na utilização dos códigos desenvolvidos em linguagem FORTRAN 77, para implementação dos métodos referidos permite salientar alguns pormenores na sua execução, e destacar conclusões relevantes que possibilitam um remate estruturante do trabalho apresentado no presente relatório. Salienta-se que a opção de programar os algoritmos em linguagem FORTRAN se deve essencialmente à maior experiência do autor na elaboração de códigos deste tipo que, para as aplicações pretendidas, se demonstram perfeitamente adequados, já que esta linguagem se pode considerar como extremamente bem adaptada para o desenvolvimento de ciclos complexos de operações lógicas e/ou algébricas. Por outro lado, o próprio recurso à versão FORTRAN 77 deve-se ao facto desta se revelar suficiente para uma demonstração genérica da capacidade de execução dos algoritmos em condições triviais (ou seja num ambiente de processamento referente a um laptop comercial convencional) sem grandes preocupações de optimização intensiva do esforço computacional. É óbvio que opções alternativas poderiam ter sido tomadas, relacionadas nomeadamente com a transposição dos códigos para plataformas de nível mais elevado¹ (e.g. MATLAB ou OCTAVE) ou suportes computacionais mais sofisticados (processadores paralelos) que são referidas mais pormenorizadamente na próxima secção.

De modo a testar a robustez dos métodos, estes foram sujeitos de forma sistemática a modelos de complexidade crescente, desde meros exercícios de geração de malha, até à integração de problemas de PDE's escalares e sistemas de equações diferenciais (apenas em casos unidimensionais). Os dados disponibilizados permitem uma confirmação genérica da utilidade dos métodos para uma grande variedade de problemas que abrangem diversas áreas importantes da modelação de processos químicos como: combustão, adsorção, reacção química, mecânica de fluidos, etc; comumente caracterizados por exibirem soluções extremas.

Os métodos apresentados são baseados em estratégias de colocação nodal controladas pela detecção de oscilações ou variações bruscas em aproximações numéricas avaliadas por fórmulas de diferenças finitas. Estes denotam uma aptidão geral muito satisfatória para a identificação, localização e acompanhamento de frentes abruptas ou descontinuidades nos perfis de solução. Simultaneamente, os algoritmos permitem o reconhecimento das regiões de menor actividade da solução onde a malha mantém a sua esparsidade apenas limitada pela definição da malha base estabelecida por defeito idealizada como garante de um suporte mínimo para a solução numérica. A escolha de aproximações de diferenças finitas para a definição de critérios de

¹ Linguagens de estrutura mais abstracta ou simbólica que representam uma aproximação a uma linguagem mais acessível ao utilizador menos familiarizado com a estrutura de funcionamento de um sistema computacional, e conseqüentemente mais afastada da linguagem directamente identificável pelo processador.

refinamento de malha deve-se exactamente às suas limitações, ou seja a sua tendência para a introdução de anomalias sem significado físico nas soluções numéricas. Deste modo, a pesquisa desse tipo de anomalias possibilita uma estratégia simples de detecção de regiões de maior actividade da solução e, conseqüentemente, seleccionáveis para refinamento de malhas inicialmente estabelecidas com um nível de resolução mínimo. Assim, a totalidade dos procedimentos de geração de malha 1D e 2D efectuadas neste trabalho foram realizadas com aproximações FD de cinco nodos de quarta ordem. Considerou-se que este número de nodos possibilitaria um maior equilíbrio entre discretizações demasiado simples e excessivamente complexas.

Por outro lado, a estratégia de estimação das derivadas espaciais que gera os sistemas ODE introduzidos na integração MOL recorre a aproximações FD (de ordem equivalente às do procedimento de colocação nodal) ou HRS (através do procedimento NVSF). Opta-se por testar a performance das aproximações FD nos procedimentos de integração MOL de modo a demonstrar a potencialidade de uma estratégia conceptualmente mais simples e directa na abordagem a exemplos claramente problemáticos. Esta análise é complementada com o estudo de uma estratégia de discretização HRS claramente direccionada para lidar com as derivadas espaciais de primeira ordem que genericamente definem a natureza hiperbólica dos problemas diferenciais. Assim, os resultados obtidos são satisfatórios no geral, verificando-se melhores performances dos métodos para diferenças FD descentradas que acompanhem o movimento das ondas em problemas de carácter parabólicos e esquemas NVSF no caso de exemplos essencialmente hiperbólicos.

Deste modo, os algoritmos revelam desempenhos aceitáveis, quer em relação a exactidão dos resultados (avaliada normalmente por comparação visual com resultados apresentados na literatura da especialidade, e.g. [1-9]), como do esforço computacional requerido. Assim, mostram-se bastante eficazes para uma larga gama de equações hiperbólicas e parabólicas e para problemas com condições fronteira de diversos tipos, quer estacionárias como evolutivas.

A performance dos critérios de colocação do tipo C1 e C2 é relativamente equivalente para a generalidade dos exemplos testados. De facto, em muitos dos problemas analisados, a qualidade dos resultados numéricos e a evolução das malhas geradas são similares para parâmetros devidamente sintonizados. No entanto, verifica-se uma tendência para uma maior sensibilidade do critério C1 que necessita tipicamente de condições mais exigentes referentes a uma escala de tolerância mais reduzida em alguns modelos, para além de uma notória propensão para ao desenvolvimento de perturbações nos perfis de solução (nomeadamente em casos de aproximações com diferenças enviesadas a montante) do que o critério C2 que se revela comparativamente mais estável. Por outro lado, o critério do tipo C1 ajusta-se satisfatoriamente à estratégia C52 para a integração de problemas 2D.

Um dos passos críticos dos algoritmos de integração numérica adaptativa consiste na operação de interpolação que executa a passagem da solução suportada numa malha gerada no passo anterior para a solução definida sobre a malha seguinte correspondente ao passo actual. Este procedimento representa de facto a própria movimentação descontínua inerente ao conceito adaptativo associado ao deslocamento das características assinaláveis da própria solução. Por outras palavras personifica a própria adaptação num contexto estático. Deste modo, os passos

interpolativos são inevitáveis neste tipo de estratégias já que se relacionam intrinsecamente com a natureza estática do processo adaptativo seleccionado. Portanto, a qualidade do procedimento de interpolação revela-se essencial ao sucesso do método adaptativo de integração, principalmente no caso de problemas bidimensionais, onde o número de nodos potencialmente activáveis em cada passo é consideravelmente superior aos problemas unidimensionais. Para além disso, nos problemas 2D aumentam consideravelmente as possibilidades geométricas de abordagem ao problema de avaliação aproximada da solução num nodo onde esta é previamente desconhecida a partir das soluções disponíveis nos nodos detectados como adjacentes. Esta questão torna-se especialmente premente em exemplos de maior carácter parabólico, ou seja predominantemente difusivos em que se constata que a sensibilidade do problema numérico a erros de interpolação relativamente reduzidos é muito superior, promovendo a introdução de fenómenos de instabilidade numérica nos perfis de solução, principalmente em modelos 2D integrados com o programa não stiff do tipo Runge-Kutta, RKF45. Ironicamente pode-se concluir que os problemas teoricamente menos problemáticos colocam maiores desafios de desenvolvimento de instabilidade e perturbações numéricas do que os problemas correspondentes de natureza predominantemente hiperbólica. De facto, a aplicação dos algoritmos adaptativos a estes problemas denota uma visível maior eficácia e robustez.

Uma vantagem notória dos algoritmos propostos consiste no facto destes serem controlados por um conjunto limitado de apenas dois parâmetros, que estabelecem a sensibilidade do método à detecção de características problemáticas da solução. Estas constantes genericamente designadas por tolerâncias não são encaradas como ferramentas de controlo de erro, mas como interruptores de activação de refinamento associados a ordens de grandeza de aproximações diferenciais. Nesse sentido podem assumir valores relativamente elevados (para o que normalmente se define como uma tolerância) que têm de ser encarados no contexto da avaliação das próprias derivadas. Os critérios de paragem do processo de refinamento são igualmente controlados pela especificação dos respectivos níveis máximos de resolução admissíveis.

É importante salientar que a estratégia usada para a interacção entre diferentes variáveis (limitada por agora a problemas 1D) se baseia num conceito de malha única que concentra todas as informações referentes ao conjunto de soluções do sistema em apenas uma malha. Tal pode representar um factor de ineficiência já que promove esforços de refinamento desnecessários. De facto, o algoritmo de geração de malha constrói regiões de alta resolução mesmo em relação a variáveis que exibam actividade reduzida nessas zonas espaciais. A alternativa seria o desenvolvimento de um procedimento dito multi-malha que recorra a um processo de separação de diversas malhas, associadas respectivamente a cada variável do problema e às características particulares de cada perfil. Obviamente que este tipo de estratégia apresenta a desvantagem de exigir o recurso a operações intensivas de interpolação de modo a estabelecer a comunicação entre as diversas variáveis durante o procedimento de integração temporal. Este processo constitui-se então como uma nova fonte de introdução de erros no algoritmo numérico. No entanto, o ganho potencial em eficiência para problemas de elevada dimensão pode revelar-se compensador.

A utilização de uma estratégia adaptativa estática do tipo h-refinement permite a constatação de algumas questões como:

- Incapacidade de prever perturbações abruptas introduzidas por condições fronteira, nomeadamente de Neumann. Assim, qualquer acção provocada pela acção das condições fronteira é indetectável pelo algoritmo de adaptação aquando da geração da malha inicial baseada apenas na análise da condição inicial, não providenciando a activação adequada do processo de refinamento de malha. Deste modo, em problemas em que tal se revela factível, procede-se a uma aproximação da acção destas condições fronteira a perturbações em degrau associadas a condições de Dirichlet fictícias adequadas. Em casos 2D recorre-se a gerações de malha inicial baseadas em duplos varrimentos do tipo m e i associados a estratégias de activação de malha base em todos os domínios 1D em que pelo menos um nodo tenha sido colocado (em ambas as direcções do domínio).
- Natureza estática do algoritmo adaptativa que não considera a movimentação das características da solução ao longo de cada integração temporal intermédia. Tal deve-se ao facto da malha adaptativa referente a cada instante temporal final de cada integração (t_k) ser gerada nas condições do perfil da solução no instante inicial da integração (t_{k-1}) e não considerar as alterações na solução no intervalo entre t_{k-1} e t_k . Assim, o passo temporal tem de ser especificado de modo a que o seu valor seja apropriado à verificação de um avanço sustentável da integração com uma malha que satisfaça simultaneamente as propriedades da solução numérica em t_{k-1} e t_k .

Estes problemas característicos da natureza estática do procedimento são satisfatoriamente minimizados ou mesmo ultrapassados por uma correcta sintonização dos parâmetros dos algoritmos.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO

O trabalho realizado na presente tese centra-se na construção de códigos gerais para aplicação dos algoritmos apresentados e o consequente teste das suas potencialidades na resolução de exemplos diferenciais parciais já sobejamente estudados e considerados como de difícil resolução.

Os assuntos de investigação a ser abordados como continuação do trabalho realizado poderão passar pela exploração de diversas opções interessantes como: o estudo de estratégias alternativas para a resolução de alguns problemas focados, assim como a generalização dos algoritmos e dos códigos para modelos ainda não considerados.

Alguns dos temas de estudo possíveis são enunciados em seguida, de uma forma mais específica e detalhada:

- Extensão dos algoritmos a modelos tridimensionais. A generalização conceptual das estratégias de refinamento a problemas tridimensionais é praticamente directa, mas pode conduzir a questões importantes ao nível da implementação prática devido ao previsível aumento drástico da dimensão do problema numérico e do esforço computacional associado, que deverá exigir o

desenvolvimento de alternativas, nomeadamente em termos de estratégias de programação paralela.

- Teste de opções já disponíveis em cada código que não foram exploradas neste trabalho, tais como: a análise sistemática da influência da pesquisa de derivadas de ordem arbitrária ou múltiplas análises no contexto dos algoritmos de colocação nodal; a sensibilidade da performance dos algoritmos em relação ao valor dos parâmetros de geração de malha tomados até ao momento como equivalentes; estudo do desempenho de critérios 2D ainda não testados no âmbito da resolução de modelos diferenciais
- Introdução de opções de geração de malha do tipo multi-malha, que permitam a separação de malhas referentes a cada variável. Esta alternativa é facilmente adaptável à estrutura actual das rotinas de geração de malha idealizadas como aplicáveis de um modo completamente autónomo através de um processo de múltiplos varrimentos de dimensão arbitrária que podem ser associados a cada variável de forma trivial.
- Generalização dos algoritmos para opções alternativas de integração temporal, ou seja, teste de integradores mais simples que possibilitem implementações menos exigentes do ponto de vista computacional, nomeadamente em termos de armazenamento de dados.
- Extensão da aplicabilidade do código 2D a sistemas de equações diferenciais e problemas mistos algébricos. Estas alterações são relativamente simples de efectuar, devido à forma como a presente estrutura do código foi concebida.
- Desenvolvimento e teste de estratégias alternativas de construção de malha baseadas em critérios de colocação análogos operados sobre malhas auto-construídas ao longo do processo de geração, que não dependem à partida de conjuntos pré-definidos de malhas diádicas ou não diádicas.
- Programação em plataformas alternativas nomeadamente referentes a aplicações definidas por linguagens de nível superior (e.g. MATLAB), que possibilite uma comparação de desempenho entre diferentes abordagens de programação dos algoritmos numéricos de integração.

REFERÊNCIAS

1. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
2. B.P.M. Duarte (1994) *Método dos Elementos Finitos Móveis Aplicado à Resolução de Modelos de Frente de Reacção*, PhD Thesis, FCTUC, Coimbra, Portugal.
3. M.C.C.P. Coimbra (2000) *Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicação a Sistemas de Equações de Derivadas Parciais Bidimensionais*, PhD Thesis, FEUP, Porto.
4. C.A. Sereno (1989) *Método dos Elementos Finitos Móveis: Aplicações em Engenharia Química*, PhD Thesis, FEUP, Porto.
5. J.G. Verwer, J. G. Blom, J. M. Sanz-Serna (1989); "An adaptive moving grid method for one-dimensional systems of partial differential equations", *J. Comput. Phys.*, **82** (2), pp. 454-486.

6. A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W. Schiesser (2001) "Chapter 2 – Application of the adaptive method of lines to nonlinear wave propagation problems", in *Adaptive Method of Lines*, (A. Vande Wouwer, Ph. Saucez, W.E. Schiesser, eds.), Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, pp. 39-64.
7. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.
8. P. Cruz, M.A. Alves, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "Solution of hyperbolic PDEs using a stable adaptive multiresolution method", *Chem. Eng. Sci.*, **58** (9), pp. 1777-1792.
9. J.C. Santos, P. Cruz, F.D. Magalhães, A. Mendes (2003) "2-D Wavelet-based adaptive-grid method for the resolution of PDEs", *AIChE J.*, **49** (3), pp. 706-717.

ANEXO A

**ESTRATÉGIAS PARA A DETERMINAÇÃO DE PESOS
ASSOCIADAS A ESTRATÉGIAS BASEADAS EM
DIFERENÇAS FINITAS**

A.1 MÉTODO SISTEMATIZADO PARA A ESTIMATIVA DE DERIVADAS DE ORDEM ARBITRÁRIA SOBRE MALHAS UNIDIMENSIONAIS NÃO UNIFORMES

A.1.1 INTRODUÇÃO

Os métodos de integração de sistemas de parâmetros distribuídos, baseados no MOL, tornam necessária a utilização de um procedimento de estimativa numérica do valor de uma ou várias derivadas espaciais (para modelos uni- ou multidimensionais, respectivamente). Essa estimativa é geralmente efectuada através de aproximações polinomiais. Deste modo, considera-se, para uma dimensão (sendo extensível a PDE's multidimensionais), a variação da variável dependente $u(x)$ em relação à variável independente x :

$$u(x) = a_0 + a_1(x - x_i) + a_2(x - x_i)^2 + a_3(x - x_i)^3 + \dots \quad (\text{A.1})$$

em que: x_i – valor de x a especificar; e $a_0, a_1, a_2, a_3, \dots$ – constantes a calcular.

De forma a determinar o valor da primeira constante faz-se $x = x_i$, obtendo-se imediatamente: $a_0 = u(x_i)$. Em seguida, diferencia-se a equação A.1 em relação a x , obtendo-se a expressão:

$$\frac{d u(x)}{d x} = a_1 + 2a_2(x - x_i) + 3a_3(x - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.2})$$

a partir da qual, para $x = x_i$, se obtém $a_1 = \frac{d u(x_i)}{d x}$. Deste modo, diferenciações sucessivas de A.1, seguidas da atribuição $x = x_i$, conduzem à relação geral:

$$a_n = \left(\frac{1}{n!} \right) \frac{d^n u(x_i)}{d x^n} \quad (\text{A.3})$$

A substituição das expressões A.3 em A.1 para $n \rightarrow \infty$, conduz à equação,

$$u(x) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} (x - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (x - x_i)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 u(x_i)}{d x^3} (x - x_i)^3 + \dots \quad (\text{A.4})$$

correspondente à bem conhecida Série de Taylor, que se constitui como a base matemática para muitas aproximações em análise numérica. Neste trabalho, é utilizada na avaliação de expressões algébricas para estimativa de derivadas espaciais de ordem variável em malhas de espaçamento arbitrário.

A.1.2 APLICAÇÃO DAS SÉRIES DE TAYLOR PARA A ESTIMATIVA DE DERIVADAS

- ***Malhas Uniformes[1-2] – Exemplo da dedução das fórmulas para o cálculo de primeiras derivadas através de diferenças finitas centradas***

A partir das expansões em série de Taylor, é possível proceder à dedução de fórmulas algébricas para a aproximação de derivadas em pontos discretos, o que constitui a base das estratégias aproximadas de diferenciação de diferenças finitas (FD).

Como forma de ilustrar essa possibilidade, descreve-se de seguida, o desenvolvimento de uma expressão simples para a estimativa da derivada de primeira ordem $\frac{d u(x_i)}{d x} = u_x(x_i)$ utilizando a solução discreta num conjunto de três pontos centrados em relação ao ponto de interesse i : x_{i-1} , x_i , x_{i+1} (vd. Figura A.1).

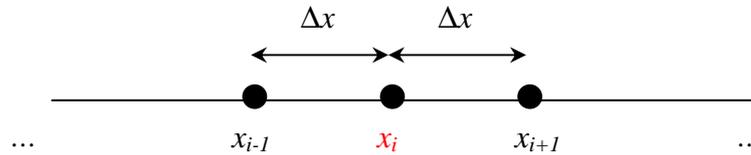


Figura A.1 Stencil para a aproximação FD centrada de segunda ordem.

As expansões de Taylor definidas em torno de x_i , para x_{i-1} , x_{i+1} assumem a forma,

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(x_{i-1} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.5})$$

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.6})$$

No caso particular de uma malha uniforme, o espaçamento entre nodos consecutivos $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, ou seja, o tamanho da malha, é constante. Deste modo, as expressões anteriores podem ser escritas como

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(-\Delta x) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(-\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.7})$$

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}\Delta x^2 + \dots \quad (\text{A.8})$$

Agora, o objectivo consiste na dedução de uma expressão para $u_x(x_i)$ através do estabelecimento de uma combinação linear entre as equações A.7 e A.8 que possibilite a anulação da derivada de maior ordem possível. Assim, multiplica-se ambas as equações por dois parâmetros, a e b , respectivamente,

$$\left[u(x_{i-1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(-\Delta x) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(-\Delta x)^2 + \dots \right] \times a \quad (\text{A.9})$$

$$\left[u(x_{i+1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}\Delta x^2 + \dots \right] \times b \quad (\text{A.10})$$

e soma-se as duas equações obtidas, isolando o termo dependente de $u_x(x_i)$ no membro esquerdo da equação. Tem-se então que,

$$(-a + b)\Delta x \frac{du(x_i)}{dx} = au(x_{i-1}) + bu(x_{i+1}) + (a + b)u(x_i) + \frac{1}{2} \Delta x^2 (a + b) \frac{d^2u(x_i)}{dx^2} + \dots \quad (\text{A.11})$$

No caso presente apenas se consideram dois pontos (para além do ponto i) como suporte para a construção da aproximação. Assim, para se obter uma aproximação a

$u_x(x_i)$ a partir de A.11, é necessário reter o seu membro esquerdo e eliminar o termo de segunda ordem, descartando todos os termos de ordem superior a dois no membro direito da equação. Para tal, calculam-se os valores de a e b de modo a que,

$$\begin{cases} -a + b = 1 \\ a + b = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a = -1/2 \\ b = 1/2 \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Substituem-se estes valores na equação A.11 truncada, obtendo-se,

$$\frac{du(x_i)}{dx} \approx \frac{-1/2u(x_{i-1}) + 1/2u(x_{i+1}) + 0u(x_i)}{\Delta x} \quad (\text{A.13})$$

ou seja,

$$\frac{du(x_i)}{dx} \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2\Delta x} \quad (\text{A.14})$$

Deste modo, desenvolveu-se um procedimento que possibilita a dedução de uma equação algébrica que relaciona apenas valores discretos da solução e permite a estimativa da primeira derivada de u em x_i , usando a solução num conjunto de três pontos: x_{i-1} , x_i , x_{i+1} . A geometria específica adoptada determina o tipo de aproximação FD construída (neste caso, centrada com 2 pontos) e a ordem máxima do termo anulado (que depende da dimensão do stencil adoptado) define a ordem da aproximação deduzida (neste caso, segunda ordem) relacionada com o erro cometido através da truncatura nas expansões consideradas dos termos de ordem mais elevada.

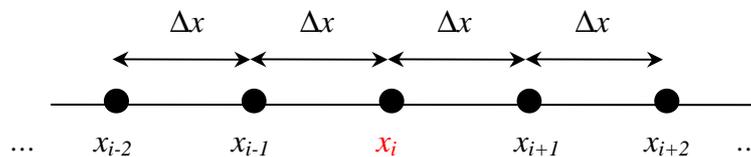


Figura A.2 Stencil para a aproximação FD centrada de quarta ordem.

De seguida, procede-se ao desenvolvimento de uma expressão mais complexa e de ordem superior para a estimativa da derivada de primeira ordem $\frac{du(x_i)}{dx} = u_x(x_i)$,

utilizando agora os valores discretos da solução nos pontos x_{i-2} , x_{i-1} , x_i , x_{i+1} e x_{i+2} de uma malha uniforme (vd. Figura A.2). Assim, as aproximações de Taylor em cada um desses pontos realizadas em torno de x_i , têm a forma:

$$u(x_{i-2}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(x_{i-2} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(x_{i-2} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.15})$$

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(x_{i-1} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.16})$$

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \frac{du(x_i)}{dx}(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.17})$$

$$u(x_{i+2}) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} (x_{i+2} - x_i) + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (x_{i+2} - x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.18})$$

Considerando novamente um espaçamento constante entre nodos consecutivos $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, as expressões anteriores podem ser escritas como:

$$u(x_{i-2}) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} (-2\Delta x) + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (-2\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.19})$$

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} (-\Delta x) + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (-\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.20})$$

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} \Delta x^2 + \dots \quad (\text{A.21})$$

$$u(x_{i+2}) = u(x_i) + \frac{d u(x_i)}{d x} 2\Delta x + \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (2\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.22})$$

Pretende-se, então, deduzir uma expressão para $u_x(x_i)$, através do estabelecimento de uma combinação linear entre as equações anteriores que permita a anulação da derivada de maior ordem possível. Neste caso, devido à utilização de quatro pontos, torna-se possível eliminar todos os termos correspondentes às derivadas até à quarta ordem. Assim, multiplica-se cada uma das expressões por uma constante (a , b , c ou d), cujos valores são calculados de forma a satisfazer os requisitos pretendidos. De seguida, adicionam-se todas as expressões entre si de modo a se obter uma única equação. Portanto, para manter o termo da primeira derivada impõe-se a condição:

$$-2a - b + c + 2d = 1 \quad (\text{A.23})$$

Por outro lado, para eliminar os termos referentes às derivadas de segunda, terceira e quarta ordem, é necessário que se verifiquem as relações seguintes:

$$4a + b + c + 4d = 0 \quad (\text{A.24})$$

$$-8a - b + c + 8d = 0 \quad (\text{A.25})$$

$$16a + b + c + 16d = 0 \quad (\text{A.26})$$

A resolução deste sistema de equações lineares conduz à respectiva solução:

$$a = \frac{2}{4!}; \quad b = -\frac{16}{4!}; \quad c = \frac{16}{4!}; \quad d = -\frac{2}{4!}$$

Substituindo estes valores na expressão soma referida anteriormente, obtém-se uma equação geral centrada de aproximação de 4.ª ordem para a derivada de interesse u_x no ponto discreto x_i :

$$\frac{d u(x_i)}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} (2u(x_{i-2}) - 16u(x_{i-1}) + 0u(x_i) + 16u(x_{i+1}) - 2u(x_{i+2})) + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.27})$$

O coeficiente correspondente a $u(x_i)$ equivale ao simétrico da soma de todos os outros coeficientes. No entanto, esta fórmula é impossível de utilizar para os pontos das extremidades do domínio, sem a criação de pontos fictícios. Assim, para se obter a

aproximação de $u_x(x_1)$, utilizam-se as expansões de Taylor da solução nos pontos x_2 , x_3 , x_4 e x_5 (vd. Figura A.3):

$$au(x_2) = au(x_1) + a \frac{d u(x_1)}{d x} \Delta x + a \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_1)}{d x^2} \Delta x^2 + \dots \quad (\text{A.28})$$

$$bu(x_3) = bu(x_1) + b \frac{d u(x_1)}{d x} 2\Delta x + b \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_1)}{d x^2} (2\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.29})$$

$$cu(x_4) = cu(x_1) + c \frac{d u(x_1)}{d x} 3\Delta x + c \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_1)}{d x^2} (3\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.30})$$

$$du(x_5) = du(x_1) + d \frac{d u(x_1)}{d x} 4\Delta x + d \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_1)}{d x^2} (4\Delta x)^2 + \dots \quad (\text{A.31})$$

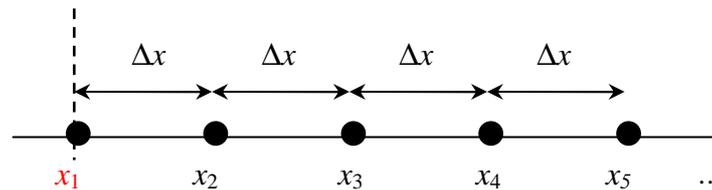


Figura A.3 Stencil para a aproximação FD de quarta ordem para o ponto fronteira, x_1 .

Como anteriormente, é necessário impor a condição A.32 de forma a reter a primeira derivada:

$$a + 2b + 3c + 4d = 1 \quad (\text{A.32})$$

Para anular as segunda, terceira e quarta derivadas, as constantes têm de verificar as restrições seguintes:

$$a + 4b + 9c + 16d = 0 \quad (\text{A.33})$$

$$a + 8b + 27c + 64d = 0 \quad (\text{A.34})$$

$$a + 16b + 81c + 256d = 0 \quad (\text{A.35})$$

A solução deste sistema é: $a = \frac{96}{4!}$; $b = -\frac{72}{4!}$; $c = \frac{32}{4!}$; $d = -\frac{6}{4!}$ obtendo-se a expressão algébrica para $u_x(x_1)$,

$$\frac{d u(x_1)}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} (-50u(x_1) + 96u(x_2) - 72u(x_3) + 32u(x_4) - 6u(x_5)) + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.36})$$

Para a obtenção da aproximação para $u_x(x_2)$ (vd. Figura A.4), procede-se de modo similar, utilizando-se as quatro séries de Taylor referentes a $u(x_1)$, $u(x_3)$, $u(x_4)$ e $u(x_5)$. O sistema de equações algébricas correspondente é:

$$-a + b + 2c + 3d = 1 \quad (\text{A.37})$$

$$a + b + 4c + 9d = 0 \quad (\text{A.38})$$

$$-a + b + 8c + 27d = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$a + b + 16c + 81d = 0 \quad (\text{A.40})$$

A resolução deste sistema permite a dedução da fórmula de diferenciação:

$$\frac{d u(x_2)}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} (-6u(x_1) - 20u(x_2) + 36u(x_3) - 12u(x_4) + 2u(x_5)) + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.41})$$

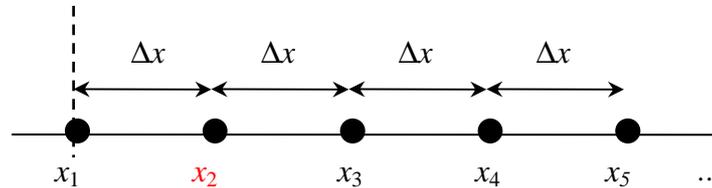


Figura A.4 Stencil para a aproximação FD de quarta ordem para o ponto adjacente à fronteira, x_2 .

Procedendo-se a operações análogas para as aproximações de $u_x(x_{N-1})$ e $u_x(x_N)$, chega-se às respectivas fórmulas:

$$\frac{d u(x_{N-1})}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} (-2u(x_{N-4}) + 12u(x_{N-3}) - 36u(x_{N-2}) + 20u(x_{N-1}) + 6u(x_N)) + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{d u(x_N)}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} (6u(x_{N-4}) - 32u(x_{N-3}) + 72u(x_{N-2}) - 96u(x_{N-1}) + 50u(x_N)) + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.43})$$

Finalmente, sumaria-se todas as expressões apresentadas anteriormente numa matriz de diferenciação, válida para todos os pontos do domínio,

$$\frac{d \mathbf{u}}{d x} = \frac{1}{4! \Delta x} \begin{bmatrix} -50 & 96 & -72 & 32 & -6 \\ -6 & -20 & 36 & -12 & 2 \\ 2 & -16 & 0 & 16 & -2 \\ -2 & 12 & -36 & 20 & 6 \\ 6 & -32 & 72 & -96 & 50 \end{bmatrix} \mathbf{u} + O(\Delta x^4) \quad (\text{A.44})$$

A equação A.44 corresponde à fórmula de aproximação por diferenças finitas centradas de quarta ordem para primeiras derivadas, sendo aplicável em toda a extensão do domínio espacial.

A aplicação de procedimentos semelhantes possibilita o cálculo de fórmulas correspondentes a derivadas de diferentes ordens e, através da utilização de variados números de pontos e de diversas disposições destes. Os tipos de diferenças finitas são distinguidos pelas diferentes disposições dos nodos indicadas na Tabela A.1.

Deste modo, uma discretização do tipo descentrado upwind com cinco pontos utilizará os quatro pontos imediatamente à esquerda do nodo de interesse, enquanto que uma fórmula do tipo biased downwind com cinco pontos aplicará o ponto adjacente da esquerda e os três pontos vizinhos à direita do nodo de interesse.

Dependendo do número de pontos usado e do tipo de diferenças finitas aplicado, é também necessário calcular separadamente as fórmulas, para os pontos situados na

vizinhança de uma ou de ambas as extremidades do domínio espacial, de uma forma análoga à apresentada anteriormente.

Tabela A.1 Diferentes tipos de geometria das aproximações FD.

☞ Diferenças Centradas	⇒ O conjunto de pontos considerado contém igual número de pontos em ambas as direcções a partir do nodo de interesse.
☞ Diferenças Descentradas	⇒ O conjunto de pontos considerado situa-se em apenas uma das direcções a partir do nodo de interesse: Backward ou Upwind – Direcção negativa da abcissa x . Forward ou Downwind – Direcção positiva da abcissa x .
☞ Diferenças Desc. Biased	⇒ O conjunto de pontos considerado apresenta uma direcção dominante a partir do nodo de interesse, na qual se utilizam mais pontos: Backward ou Upwind – Direcção negativa dominante. Forward ou Downwind – Direcção positiva dominante.

Caso particular de fluxo positivo, ou seja, propagado na direcção positiva do eixo das abcissas x , convencionada como apontando da esquerda para a direita.

▪ **Generalização para Malhas Não Uniformes – Diferenças finitas centradas de quarta ordem para primeiras derivadas**

O método anterior aplica-se de uma forma simples em malhas uniformes porque, neste caso, é possível pôr em evidência a variável Δx (passo espacial) em cada expansão, já que este se mantém constante ao longo da malha. No entanto, no caso de malhas não uniformes, nas quais o espaçamento entre os pontos não é necessariamente constante na extensão de toda a malha, a manipulação das expansões de Taylor torna-se necessariamente mais complexa. Deste modo, estas expressões tomam, para um ponto genérico i situado no interior da malha, a seguinte forma (considerando a dedução equivalente à fórmula de diferenças centradas de quarta ordem anterior):

$$au(x_{i-2}) = au(x_i) + a \frac{d u(x_i)}{d x} (-\Delta x_{i-1} - \Delta x_i) + a \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (-\Delta x_{i-1} - \Delta x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.45})$$

$$bu(x_{i-1}) = bu(x_i) + b \frac{d u(x_i)}{d x} (-\Delta x_i) + b \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (-\Delta x_i)^2 + \dots \quad (\text{A.46})$$

$$cu(x_{i+1}) = cu(x_i) + c \frac{d u(x_i)}{d x} \Delta x_{i+1} + c \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} \Delta x_{i+1}^2 + \dots \quad (\text{C.47})$$

$$du(x_{i+2}) = du(x_i) + d \frac{d u(x_i)}{d x} (\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}) + d \frac{1}{2} \frac{d^2 u(x_i)}{d x^2} (\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2})^2 + \dots \quad (\text{A.48})$$

onde: $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 2, \dots, N$.

Procedendo como anteriormente, verifica-se que para se manter a primeira e anular as segunda, terceira e quarta derivadas, as constantes a , b , c e d têm obrigatoriamente de verificar as condições seguintes:

$$aA + bB + cC + dD = 1 \quad (\text{A.49})$$

$$aA^2 + bB^2 + cC^2 + dD^2 = 0 \quad (\text{A.50})$$

$$aA^3 + bB^3 + cC^3 + dD^3 = 0 \quad (\text{A.51})$$

$$aA^4 + bB^4 + cC^4 + dD^4 = 0 \quad (\text{A.52})$$

em que:

$$\begin{aligned} A[\Rightarrow x_{i-2}] &= -(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i); & B[\Rightarrow x_{i-1}] &= -\Delta x_i; \\ C[\Rightarrow x_{i+1}] &= \Delta x_{i+1}; & D[\Rightarrow x_{i+2}] &= (\Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}) \end{aligned}$$

Cada uma das constantes A , B , C e D está relacionada com um dos pontos da discretização (neste caso, x_{i-2} , x_{i-1} , x_{i+1} e x_{i+2} , respectivamente).

Seria possível resolver o sistema anterior e deduzir as funções que relacionam as constantes $[a, b, c, d]$ com $[A, B, C, D]$ e, conseqüentemente com $[\Delta x_{i-1}, \Delta x_i, \Delta x_{i+1}, \Delta x_{i+2}]$. No entanto, essas relações são demasiado complexas para que a sua utilização possa ser viável. Assim, resta seguir uma alternativa melhor aplicável, sem que seja necessário recorrer à dedução e aplicação de quatro funções bastante complicadas. Deste modo, opta-se por executar a resolução do sistema apresentado, em cada avaliação da estimativa da derivada num ponto discreto da malha (na qual todas as posições nodais são perfeitamente conhecidas à partida), considerando os espaçamentos entre os pontos adjacentes. Portanto, para cada ponto onde se pretenda estimar a correspondente derivada, substitui-se no sistema os valores dos espaçamentos entre os pontos vizinhos $[\Delta x_{i-1}, \Delta x_i, \Delta x_{i+1}, \Delta x_{i+2}]$. De seguida, calculam-se os valores do vector de constantes $[a, b, c, d]$ para esse ponto, por resolução do sistema de equações algébricas assim obtido. Agora, está-se em condições de calcular o valor da estimativa da derivada de primeira ordem através do somatório das expressões A.45 a A.48, obtendo-se a respectiva fórmula geral:

$$\frac{d u(x_i)}{d x} = a u(x_{i-2}) + b u(x_{i-1}) - (a + b + c + d) u(x_i) + c u(x_{i+1}) + d u(x_{i+2}) \quad (\text{A.53})$$

Por outro lado, esta estratégia obriga à resolução de um sistema de equações lineares 4×4 , para cada avaliação da derivada, o que constitui a sua maior desvantagem, já que obriga a um número considerável de operações algébricas.

Como anteriormente, o procedimento para os pontos junto às fronteiras é ligeiramente diferente, já que nesses pontos é impossível utilizar uma disposição dos nodos equivalente ao caso geral, sem se recorrer à introdução de pontos fictícios adicionais e exteriores à malha global. No entanto, neste caso, não é necessário deduzir uma nova expressão para o sistema a resolver em cada ponto, para a avaliação dos pesos. A forma geral deste sistema é utilizável em todos os pontos do domínio. O que difere é a definição das constantes $[A, B, C, D]$. Assim, em cada ponto, estas são definidas por:

$$\begin{aligned} x_1: & \quad A[\Rightarrow x_2] = \Delta x_2; & \quad B[\Rightarrow x_3] = (\Delta x_2 + \Delta x_3); \\ & \quad C[\Rightarrow x_4] = (\Delta x_2 + \Delta x_3 + \Delta x_4); & \quad D[\Rightarrow x_5] = (\Delta x_2 + \Delta x_3 + \Delta x_4 + \Delta x_5) \\ x_2: & \quad A[\Rightarrow x_1] = -\Delta x_2; & \quad B[\Rightarrow x_3] = \Delta x_3; \\ & \quad C[\Rightarrow x_4] = (\Delta x_3 + \Delta x_4); & \quad D[\Rightarrow x_5] = (\Delta x_3 + \Delta x_4 + \Delta x_5) \end{aligned}$$

$$\begin{array}{l}
x_{N-1}: \quad A[\Rightarrow x_{N-4}] = -(\Delta x_{N-3} + \Delta x_{N-2} + \Delta x_{N-1}); \quad B[\Rightarrow x_{N-3}] = -(\Delta x_{N-2} + \Delta x_{N-1}); \\
\quad \quad C[\Rightarrow x_{N-2}] = -\Delta x_{N-1}; \quad \quad \quad D[\Rightarrow x_N] = \Delta x_N \\
x_N: \quad A[\Rightarrow x_{N-4}] = -(\Delta x_{N-3} + \Delta x_{N-2} + \Delta x_{N-1} + \Delta x_N); \quad B[\Rightarrow x_{N-3}] = -(\Delta x_{N-2} + \Delta x_{N-1} + \Delta x_N); \\
\quad \quad C[\Rightarrow x_{N-2}] = -(\Delta x_{N-1} + \Delta x_N); \quad \quad \quad D[\Rightarrow x_{N-1}] = -\Delta x_N
\end{array}$$

Usando as constantes definidas desta forma, procede-se à estimativa da primeira derivada pela aproximação de quarta ordem, nesses pontos pelo procedimento descrito anteriormente, obtendo-se em cada caso, expressões semelhantes à equação A.53. É igualmente possível a utilização deste método para avaliar derivadas de ordens diferentes, com a aplicação de diferenças finitas de tipos variados, em malhas não uniformes.

▪ **Caso Particular – Estimativa da segunda derivada, em pontos fronteira descritos por condições de Neumann, através de fórmulas de quarta ordem**

Nesta secção procede-se à descrição da estratégia (baseada no método anterior), adaptada para a estimativa da segunda derivada nos pontos fronteira (x_1 e/ou x_N), através da utilização dos valores da solução nos pontos adjacentes e da primeira derivada no próprio ponto fronteira. Este procedimento é necessário no caso do modelo ser sujeito a condições de Neumann num ou em ambos os pontos fronteira. Neste caso, utiliza-se um conjunto de cinco pontos, obtendo-se, deste modo, aproximações de quarta ordem.

Para x_1 , parte-se das expressões de Taylor referentes aos pontos vizinhos x_2 , x_3 , x_4 e x_5 . Para estimar a segunda derivada, multiplica-se cada uma dessas equações pelas constantes a , b , c e d , que serão associadas a cada uma dos pontos referidos acima. Agora, pretende-se encontrar uma combinação entre cada série em que se retenha o termo referente às segundas derivadas e se anulem os termos correspondentes às primeira, terceira, quarta e quinta derivadas. Neste exemplo, é necessário recorrer aos termos de quinta ordem, já que é introduzida uma nova constante e , relacionada com a primeira derivada em x_1 . Assim, obtém-se o sistema de equações lineares seguinte:

$$aA + bB + cC + dD + e = 0 \quad (\text{A.54})$$

$$aA^2 + bB^2 + cC^2 + dD^2 = 2 \quad (\text{A.55})$$

$$aA^3 + bB^3 + cC^3 + dD^3 = 0 \quad (\text{A.56})$$

$$aA^4 + bB^4 + cC^4 + dD^4 = 0 \quad (\text{A.57})$$

$$aA^5 + bB^5 + cC^5 + dD^5 = 0 \quad (\text{A.58})$$

onde A , B , C e D são definidos de forma equivalente à apresentada na secção anterior para o ponto fronteira x_1 .

Desse modo, dependendo das posições relativas entre os pontos, calculam-se os valores de cada constante, através da resolução do sistema. É fácil verificar então, que a estimativa da segunda derivada em x_1 pode ser calculada por:

$$\frac{d^2 u(x_1)}{d x^2} = -(a + b + c + d)u(x_1) + au(x_2) + bu(x_3) + cu(x_4) + du(x_5) + e \frac{d u(x_1)}{d x} \quad (\text{A.59})$$

Através de um procedimento semelhante, pode-se avaliar a segunda derivada no outro ponto fronteira x_N , utilizando, igualmente, a solução discreta nos pontos adjacentes e o valor da primeira derivada em x_N .

REFERÊNCIAS

1. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
2. W.E. Schiesser (1991) *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*, Academic Press, San Diego.

A.2 MÉTODO RECURSIVO DE FORNBERG

Na presente secção, procede-se à descrição de um método mais simples e expedito para a geração de fórmulas de diferenças finitas, desenvolvido por Fornberg[1-2]. Este método utiliza um esquema recursivo que permite o cálculo dos pesos para qualquer ordem de derivada (incluindo a ordem zero, correspondente à interpolação), aproximados a qualquer grau de precisão, numa malha arbitrária unidimensional[3]. Cada avaliação apenas necessita de quatro operações aritméticas, sendo bastante adequada a sua aplicação a malhas dinâmicas e, conseqüentemente, não uniformes.

Portanto, sendo $M \geq 0$, a ordem mais elevada da derivada que se pretende aproximar, a partir de um conjunto de $N+1$ pontos da malha (de coordenadas x : $\alpha_0, \dots, \alpha_N$; $N \geq 0$), o problema consiste em calcular os pesos, de modo que as aproximações,

$$\left. \frac{\delta^m}{\delta x^m} \right|_{x=x_0} \approx \sum_{v=0}^n \delta_{n,v}^m f(\alpha_v); \quad m=0,1,\dots,M; \quad n=m,m+1,\dots,N \quad (\text{A.60})$$

sejam caracterizadas pelo grau de exactidão óptimo (geralmente $n-m+1$, embora possa ser mais elevado para casos particulares).

▪ Derivação do algoritmo

Por uma questão de simplicidade, considera-se a aproximação das derivadas no ponto $x_0 = 0$. Então, sendo $\{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ números reais e distintos,

$$\omega_n(x) = \prod_{k=0}^n (x - \alpha_k) \quad (\text{A.61})$$

e o polinómio:

$$F_{n,v}(x) = \frac{\omega_n(x)}{\omega_n'(\alpha_v)(x - \alpha_v)} \quad (\text{A.62})$$

é o de menor grau que assume o valor unitário para $x = \alpha_v$, anulando-se em $x = \alpha_k$, $0 \leq k \leq n$, $k \neq v$. Para uma função arbitrária $f(x)$ e os nodos $x = \alpha_v$, a interpolação polinomial de Lagrange toma a forma:

$$p(x) = \sum_{v=0}^n F_{n,v}(x) f(\alpha_v) \quad (\text{A.63})$$

Os pesos desejados exprimem a forma como os valores de $\left[\frac{\partial^m p(x)}{\partial x^m} \right]_{x=0}$ variam com as alterações em $f(\alpha_v)$. Como só um dos termos de $p(x)$ depende da variação em cada $f(\alpha_v)$, verifica-se então que:

$$\delta_{n,v}^m = \left[\frac{d^m}{d x^m} F_{n,v}(x) \right]_{x=0} \quad (\text{A.64})$$

Assim, o polinómio de grau n , $F_{n,v}$, pode ser escrito da forma:

$$F_{n,v}(x) = \sum_{m=0}^n \frac{\delta_{n,v}^m}{m!} x^m \quad (\text{A.65})$$

A partir de A.62, e sabendo que: $\begin{cases} \omega(x) = (x - \alpha_n)\omega_{n-1}(x) \\ \omega'_n(x) = (x - \alpha_n)\omega'_{n-1}(x) + \omega_{n-1}(x) \end{cases}$, obtém-se,

$$F_{n,v}(x) = \frac{x - \alpha_n}{\alpha_v - \alpha_n} F_{n-1,v}(x) \quad (\text{A.66})$$

e

$$F_{n,n}(x) = \frac{\omega_{n-1}(x)}{\omega_{n-1}(\alpha_n)} = \frac{\omega_{n-2}(\alpha_{n-1})}{\omega_{n-1}(\alpha_n)} (x - \alpha_{n-1}) F_{n-1,n-1}(x) \quad (n > 1) \quad (\text{A.67})$$

Substituindo a expressão A.65 em A.66 e A.67, e equacionando as potências de x , deduz-se as relações de recursão entre os pesos:

$$\delta_{n,0}^m = \frac{1}{\alpha_n - \alpha_v} (\alpha_n \delta_{n-1,0}^m - m \delta_{n-1,0}^{m-1}) \quad (\text{A.68})$$

e

$$\delta_{n,n}^m = \frac{\omega_{n-2}(\alpha_{n-1})}{\omega_{n-1}(\alpha_n)} (m \delta_{n-1,n-1}^{m-1} - \alpha_{n-1} \delta_{n-1,n-1}^m) \quad (\text{A.69})$$

A aplicação destas expressões conduz ao desenvolvimento de um algoritmo relativamente simples para o cálculo dos pesos $\delta_{n,v}^m$, correspondentes ao cálculo de aproximações a derivadas de ordem m , num ponto x_0 , e utilizando $n+1$ pontos de abcissas $\{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ pertencentes a uma malha arbitrariamente espaçada.

REFERÊNCIAS

1. B. Fornberg (1988) "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids", *Math. Comput.*, **51** (184), pp. 699-706.
2. B. Fornberg (1992) "Fast generation of weights in finite difference formulas", in *Recent Developments in Numerical Methods and Software for ODEs/DAEs/PDEs*, (G.D. Byrne, W.E. Schiesser, eds.), World Scientific, Singapore, pp. 97-124.
3. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.

PÁGINA EM BRANCO

ANEXO B

ALGORITMOS ADAPTATIVOS DE INTEGRAÇÃO

B.1 MALHAS UNIDIMENSIONAIS

B.1.1 ESTRUTURA DA APLICAÇÃO 1D

O código STAT02 é desenvolvido para a aplicação do algoritmo adaptativo de integração numérica a sistemas algébrico-diferenciais unidimensionais que podem ser generalizados da seguinte forma:

$$\mathbf{u}_t = F(\mathbf{u}, \mathbf{u}_x, \mathbf{u}_{xx}, \dots), \quad (\text{B.1})$$

com as condições fronteira:

$$G^L(\mathbf{u}, \mathbf{u}_x, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad x = x^L \quad (\text{B.2})$$

$$G^R(\mathbf{u}, \mathbf{u}_x, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad x = x^R \quad (\text{B.3})$$

e a condição inicial:

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}^0(x); \quad x \in [x^L, x^R] \quad (\text{B.4})$$

Desse modo foi elaborado um programa em FORTRAN, cuja estrutura geral é esquematizada na Figura B.1. Cada uma das caixas pequenas corresponde a uma subrotina ou função, enquanto que as duas caixas maiores dizem respeito ao programa principal do código (STAT02) e ao conjunto de subrotinas que constituem o integrador DDASSL (o primeiro D do acrónimo significa que o programa utilizado corresponde à versão de dupla precisão)[1]. As setas do esquema representam as interligações entre as subrotinas do código. Assim, uma seta significa que a subrotina ou o programa donde parte chama a subrotina, a função ou o conjunto de rotinas para onde se dirige.

No programa principal STAT02, que constitui o núcleo central do algoritmo, são efectuadas algumas operações gerais que podem ser descritas resumidamente da seguinte forma:

1. Determinação do tempo de computação, através da chamada da subrotina CPUT_TIME no início e no final da execução do programa. Considera-se o tempo de cpu como a diferença entre os dois tempos obtidos nesses dois instantes.
2. Introdução dos dados (leitura do ficheiro DATA) e escrita dos resultados, efectuados directamente no próprio código sem o recurso a subrotinas externas.
3. Construção da malha básica construída pela junção de diversas malhas de diferentes níveis de resolução. Operação efectuada através da definição de malhas uniformes ou da leitura das posições de malha de nível mais baixo a partir de um ficheiro pré-definido (POSITION).
4. Geração da matriz de activação inicial em que todos os nodos pertencentes à malha base de nível de resolução mais reduzido são activados por defeito.
5. Inicialização da integração efectuada pela chamada da subrotina INIT. Esta rotina procede a avaliação dos perfis iniciais, pela utilização das respectivas expressões analíticas.

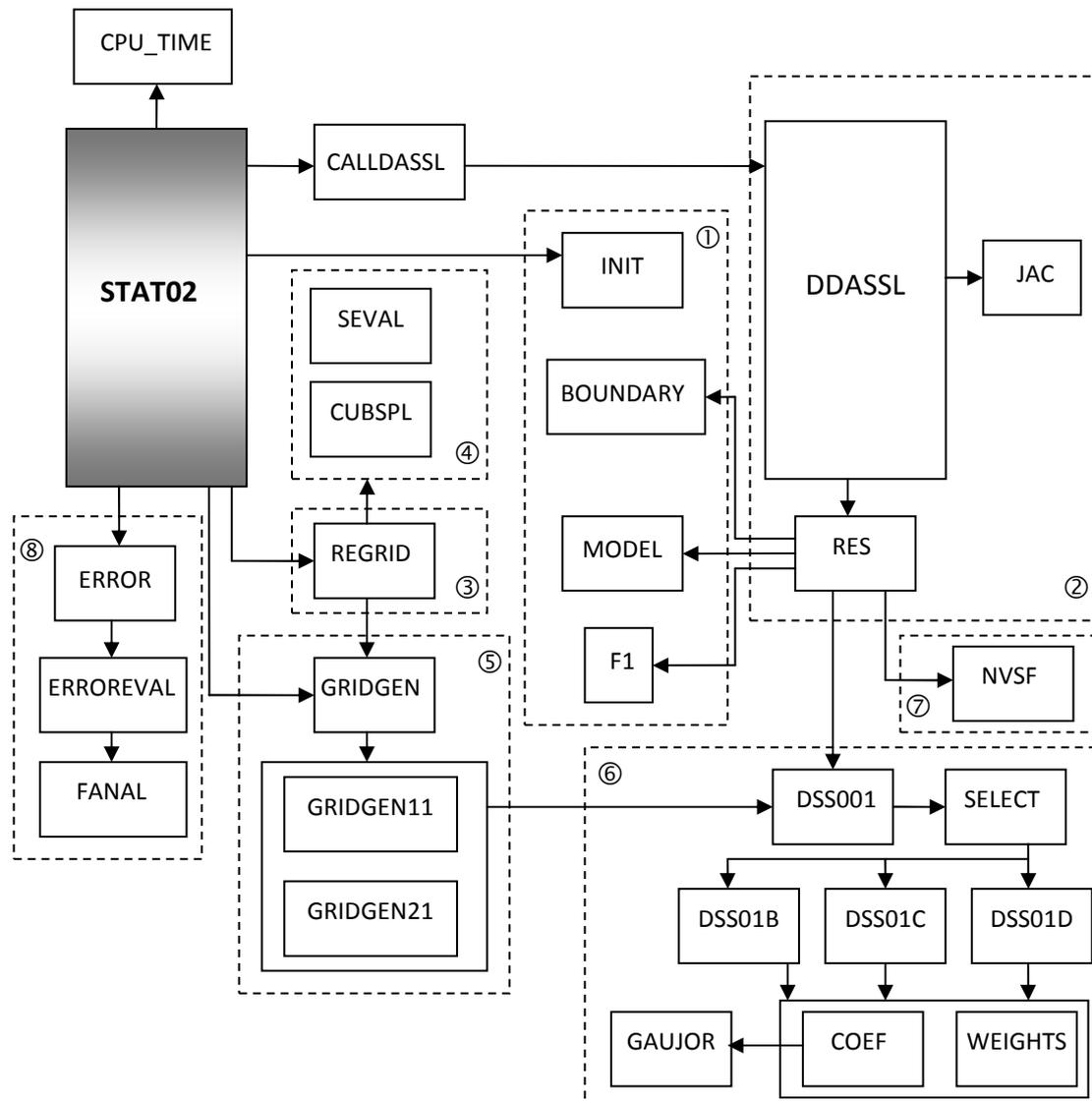


Figura B.1 Esquema simplificado da estrutura do código STAT02.

6. Geração da malha adaptativa inicial através da chamada da rotina GRIDGEN com a sequência de pesquisas previamente definida, executada sequencialmente para cada perfil de solução inicial.
7. Implementação do ciclo de integração temporal deste o tempo inicial TIN até ao tempo final TOUT = TIME(NTIMES-1).
8. Chamada da rotina CALLDASSL que estabelece as condições de integração específicas ao integrador DDASSL. Esta rotina pode ser facilmente adaptada para outros integradores.
9. Escrita do conjunto de resultados seleccionado para tempos controlados pelo intervalo de impressão DTPRESS.
10. Redefinição da malha referente ao tempo seguinte pela chamada da subrotina de geração de malha GRIDGEN.

Tabela B.1 Resumo das variáveis de entrada do programa STAT02 fornecidas pelo ficheiro DATA.

Nome da Variável	Tipo de Variável	Valores que Assume	Significado	Observações
NEQDIF	Escalar Inteira		Nº de equações diferenciais	
NEQALG			Nº de equações algébricas	
ZE	Escalar Dupla Precisão		Posição da fronteira esquerda	
ZD			Posição da fronteira direita	
TIN			Instante de tempo inicial	
NTIMES	Escalar Inteira		Nº de subintervalos temporais	
TIME(I)	Vector Dupla Precisão		Tempo final de cada intervalo	I = 0, ..., NTIMES-1; Tempo final da integração = TIME(NTIMES-1)
DT(I)			Passo de integração temporal	I = 1, ..., NTIMES
DTPRESS(I)			Passo temporal de impressão de resultados	I = 1, ..., NTIMES
NVARDIF	Escalar Inteira		Nº de variáveis diferenciadas	
IVARDIF(I)	Vector Inteiro	0	Localização das variáveis diferenciadas;	Variável não diferenciada
		1	I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG	Variável diferenciada
NDERV	Escalar Inteira	0	Parâmetro que define a forma como é calculada a 2ª derivada	Por diferenciação directa da solução
		1		Por diferenciação sucessiva a partir da derivada de ordem anterior
NDER(I)	Vector Inteiro		Se NDERV = 0; número de derivadas a calcular Se NDERV = 1; ordem máxima da derivada	I = 1, ..., NVARDIF
IDER(I,J)	Matriz Inteira		Ordem das derivadas calculadas; Apenas necessário se NDERV = 0	I = 1, ..., NVARDIF J = 1, ..., NDER(I)
ND(I)	Vector Inteiro		Nº de pontos de aproximação FD; I = 1, ..., NVARDIF	Referente ao tipo de diferenças finitas escolhido
TIPO(I)	Vector Caracter	CENTRAIS	Tipo de diferenças finitas; I = 1, ..., NVARDIF	Diferenças centradas
		NCENTRAL		Diferenças descentradas
		NCBIASED		Diferenças descentradas <i>biased</i>
TIPO1(I)		UP	Orientação predominante das diferenças finitas;	Diferenças <i>Upwind</i>
		DOWN	I = 1, ..., NVARDIF	Diferenças <i>Downwind</i>
NINTP	Escalar Inteira	0	Parâmetro que controla o tipo de interpolação	Interpolações lineares
		1		Interpolações de <i>Splines</i> cúbicas com NPINT pontos
NPINT			Nº de pontos de interpolação	Apenas necessário se NINTP = 1
ATOL	Escalar Dupla Precisão		Tolerância absoluta	Referente ao integrador seleccionado
RTOL			Tolerância relativa	
NPASS	Escalar Inteira	0	Nº de passagens do procedimento de colocação nodal	
NCRT(I)	Vector Inteiro	1	Parâmetro que define a rotina de colocação escolhida	Rotina gridgen11
		2		Rotina gridgen21
		4		Rotina gridgen41
KC(I)			Ordem da derivada analisada	I = 1, ..., NPASS
LC(I)		1	Parâmetro que define o critério 1D seleccionado; I = 1, ..., NPASS	Critério do tipo C1
		2		Critério do tipo C2
GTOL(I)	Vector Dupla Precisão	0	Tolerâncias referentes ao integrador	I = 1, 2
NI		1	Tipo de malha de nível mínimo	Malha diádica
M		> 1		Malha não diádica com NI intervalos
N			Nível de resolução mínimo	NI x 2 ^M intervalos; se NI > 1 ⇒ M = 0
NREAD	Escalar Inteira	0	Parâmetro que controla a forma como é introduzida a malha base	Malha de nível mínimo uniforme
		1		Malha de nível mínimo introduzida como dado externo
NERROR		0	Parâmetro que define a avaliação de erros	Não é calculado qualquer erro
		1		É calculado o erro associado a pelo menos uma variável
IVARERR(I)	Vector Inteiro	0	Localização das variáveis cujo erro é avaliado; I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG	Erro não avaliado
		1	Apenas necessário se NERROR = 1	Erro avaliado
NDISC		0	Parâmetro que define o tipo de discretização escolhido	Diferenças finitas (FD)
		1		Esquemas de alta resolução (NVSF)
NSCHEME	Escalar Inteira	1	Parâmetro que define o limitador de fluxo escolhido; Apenas necessário se NDISC = 1	Limitador MINMOD
		2		Limitador SMART
		3		Limitador CLAM
		4		Limitador WACEB
		5		Limitador CUBISTA

O ficheiro de dados, denominado por DATA, é construído pelo utilizador e define todos os parâmetros que estabelecem a execução. Assim, os ditos parâmetros possíveis de especificar pelo utilizador no ficheiro DATA são resumidos na Tabela B.1, juntamente com a sua finalidade na evolução da execução.

Por outro lado, no que diz respeito à escrita de resultados, o programa imprime os diversos resultados em ficheiros denominados por “fort.n”, onde **n** corresponde a:

- n = 10 + i** ⇒ Perfil de solução numérica e malha adaptativa gerada, referente à variável **i**, nos instantes temporais definidos pelo parâmetro DTPRESS (Programa STAT02);
- n = 20 + i** ⇒ Perfil da solução numérica reconstruída e malha adaptativa gerada, referente à variável **i** em todos os instantes temporais intermédios disponíveis (Subrotina REGRID);
- n = 95** ⇒ Perfil da evolução temporal do número de nodos da malha; tempo de cpu (Programa STAT02).
- n = 69** ⇒ Último perfil disponível da solução associada a uma mensagem de integração mal sucedida activada pelo integrador temporal (Subrotina CALLDASSL).

No programa não é estabelecido qualquer parâmetro que possibilite a definição de diversos cenários possíveis de disponibilização do output. Assim, todos os perfis referidos acima são postos à disposição do utilizador, nos ficheiros referidos, para os instantes temporais correspondentes.

As restantes subrotinas que constituem o código são agrupadas em oito blocos (vd. Figura B.1), consoante a função atribuída a cada conjunto de programas, correspondente a uma operação essencial à execução do algoritmo. Considerando, assim, cada bloco separadamente, tem-se que:

Bloco ①. Subrotinas fornecidas pelo utilizador.

As subrotinas que constituem o bloco ① são fornecidas pelo utilizador, possibilitando uma definição o mais possível completa das características do modelo a resolver. Desse modo, o utilizador necessita de construir três subrotinas e uma função, que são introduzidas no código global e se relacionam com:

- Subrotina INIT ⇒ Fornece a condição inicial analítica do problema (função u^0), quando esta é requerida;
CALL INIT(Z,U,NINT)
- Subrotina BOUNDARY ⇒ Fornece as condições fronteira (funções G) e as suas características em ambas as extremidades do domínio espacial;
CALL BOUNDARY(KI,T,K,LE,LD,Y,YB)
- Subrotina MODEL ⇒ Fornece a funções F do modelo diferencial ou algébrico diferencial;

CALL MODEL(T,U,Z,DUDZ,DU DT)

Função F1 ⇒ Função que define possíveis funções a ser diferenciadas directamente;

CALL F1(K,U)

As diversas variáveis a definir em cada uma dessas subrotinas são resumidas na tabela B.2.

Tabela B.2 Resumo das variáveis presentes nas subrotinas definidas pelo utilizador para a execução do programa STAT02.

Subrotina	Nome das Variáveis	Tipo de Variável	Valores que Assume	Significado	Observações
INIT	Z(I)	Vector Dupla Precisão		Posições da malha inicial	I = 0, ..., NINT
	U(I,J)	Matriz Dupla Precisão		Solução no instante inicial	I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG J = 0, ..., NINT
	NINT	Escalar Inteira		Número de intervalos da malha	
BOUNDARY	KI	Escalar Inteira	0	Parâmetro que define a especificação nas fronteiras	Define-se uma variação temporal da solução
			1		Definem-se as informações referentes às condições fronteira
	K		Contador de variáveis do modelo		
	T	Escalar Dupla Precisão		Tempo de integração	
	LE	Escalar Inteira	0	Tipo de Fronteira	Não há restrições
			1	Esquerda	Restrição definida em YB
	LD	Escalar Inteira	0	Tipo de Fronteira	Não há restrições
			1	Direita	Restrição definida em YB
Y(I)	Vector Dupla Precisão		Solução nas fronteiras	I = 1, 2; I = 1, Fronteira Esquerda; I = 2, Fronteira Direita	
YB(I)			1ª derivada em cada fronteira (Condições de Neumann)	I = 1, 2; I = 1, Fronteira Esquerda; I = 2, Fronteira Direita	
MODEL	T	Escalar Dupla Precisão		Tempo de integração	
	U(I,J)	Matriz Dupla Precisão		Solução	I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG J = 1, ..., NINT+1
	Z(I)	Vector Dupla Precisão		Posições da malha	I = 1, ..., NINT+1
	DUDZ(I,J,K)	Tensor Dupla Precisão		Derivadas espaciais	I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG J = 1, ..., NDER(I) K = 1, ..., NINT+1
	DU DT(I,J)	Matriz Dupla Precisão		Função F	I = 1, ..., NEQDIF+NEQALG J = 1, ..., NINT+1
	NINT	Escalar Inteira		Número de intervalos da malha	
	ZE	Escalar Dupla Precisão		Posição da fronteira esquerda	
	ZD		Posição da fronteira direita		
F1	K	Escalar Inteira		Contador de variáveis do modelo	
	U	Escalar Dupla Precisão		Solução	

Para a ordenação dos componentes da solução nos respectivos vectores, é necessário ter em conta que, os primeiros elementos têm que ser associados às variáveis diferenciadas no tempo (I = 1, ..., NEQDIF). As variáveis restantes são consideradas nas posições seguintes (I = NEQDIF+1, ..., NEQDIF+NEQALG). Assim, na construção da subrotina MODELO, atribuem-se aos primeiros NEQDIF índices I, a funções

relacionadas com as equações diferenciais, enquanto que os restantes são associados às expressões algébricas.

Bloco ②. Subrotinas referentes à integração temporal.

O núcleo do bloco ②, referente à integração temporal, consiste na package DDASSL[1] que engloba as subrotinas que executam o avanço do algoritmo no tempo (vd. Anexo C). Este integrador implícito necessita da definição de duas subrotinas adicionais: a subrotina JAC, onde se processa o cálculo analítico dos componentes da matriz jacobiana de cada modelo a integrar (como neste caso, o jacobiano é estimado por diferenças finitas, esta rotina é definida como dummy); a subrotina RES que, em cada instante temporal, fornece os resíduos relacionados com as equações do modelo. Assim, esta subrotina é bastante mais complexa, não se limitando apenas a calcular os resíduos (pela chamada da subrotina MODEL), como a definir as características fronteira de cada problema integrado (através da chamada da subrotina BOUNDARY) e a proceder ao cálculo das estimativas para as derivadas espaciais (recorrendo às rotinas DSS001 ou NVSF).

Bloco ③. Subrotina referente ao processo de reconstrução de perfis discretos.

Para uma aplicação efectiva dos processos de geração de malha é essencial que as rotinas de colocação nodal tenham acesso ao perfil discreto de solução no grau de refinamento máximo permitido. Assim, em cada tempo intermédio é necessário que o algoritmo reconstrua o perfil da solução através da estimativa por interpolação da solução nas posições não activadas do conjunto de malhas seleccionado, usando como suporte a solução disponível nesse instante, definida sobre a malha adaptativa efectivamente activa gerada no passo temporal anterior. Este procedimento é realizado pela execução da rotina REGRID que recorre ao bloco de rotinas ④ para a implementação das operações de interpolação que possibilitam a reconstrução do perfil, posteriormente utilizado na geração da nova malha adaptativa através da chamada da subrotina GRIDGEN. Esta malha é então utilizada no passo de integração temporal seguinte.

Bloco ④. Subrotinas que implementam as operações de interpolação.

Neste bloco agrupam-se as rotinas referentes à avaliação da solução interpolada nos perfis espaciais para tempos intermédios, de forma a reconstruir a solução numérica discreta a partir do perfil disponível obtido no passo de integração precedente. Este processo é gerido pela rotina REGRID referida acima que especifica o procedimento de interpolação a adoptar consoante o valor do parâmetro NINTP escolhido pelo utilizador. No caso de $NINTP = 1$, selecciona-se a dimensão do vector de pontos de interpolação (definida pelo parâmetro ND) usado como suporte da interpolação não linear, e utiliza-se a subrotina CUBSPL para o cálculo dos pesos correspondentes a cada nodo, através da utilização de splines cúbicas. Em seguida, recorre-se a esses pesos e à função SEVAL, para a estimativa da solução interpolada nas abcissas pretendidas não activadas. No caso de se fixar $NINTP = 0$, todas as interpolações são efectuadas pela aproximação linear da solução, entre os pontos da malha disponível que enquadrem a posição espacial de interesse.

Bloco ⑤. Subrotinas que implementam a estratégia de geração de malha.

O bloco ⑤ abrange todas as subrotinas relacionadas com a implementação do algoritmo de geração de malha. Assim, este processo é controlado pela subrotina GRIDGEN que define as chamadas das rotinas de colocação nodal que implementam os critérios C1 e C2 (e o critério adicional baseado numa adaptação da estratégia RBF de Driscoll e Heryudono, 2007[2] a conjuntos de malhas pré-definidas de nível de resolução crescente; este procedimento é implementado pela rotina GRIDGEN41, que não é testada neste trabalho, mas que se adapta perfeitamente à estrutura do algoritmo STAT02). Os critérios de colocação nodal C1 e C2 são executados através das subrotinas GRIDGEN11 e GRIDGEN21 para análise total ou parcial de malhas, respectivamente (vd. secção 3.5.1, página 135).

Bloco ⑥. Subrotinas para a estimativa das derivadas espaciais(FD).

O bloco ⑥ engloba todas as subrotinas utilizadas na estimativa do valor das derivadas espaciais através de aproximações de diferenças finitas. Deste modo, a subrotina DSS001 consiste no programa geral que define a direcção espacial em que a diferenciação é realizada. Esta rotina está preparada para lidar com problemas de qualquer dimensão até um máximo de três coordenadas espaciais. A selecção do tipo de diferenças finitas a realizar é realizada pela subrotina SELECT, que dependendo do valor definido para o parâmetro TIPO, chama as seguintes subrotinas[3]:

- Subrotina DSS01B ⇒ **TIPO** = NCBIASED; Diferenças finitas descentradas *biased* de **ND** pontos, com direcção preferencial **TIPO1**.
- Subrotina DSS01C ⇒ **TIPO** = CENTRAIS; Diferenças finitas centradas de **ND** pontos.
- Subrotina DSS01D ⇒ **TIPO** = NCENTRAL; Diferenças finitas descentradas de **ND** pontos, com direcção preferencial **TIPO1**.

Os pesos correspondentes a cada ponto do vector básico de dimensão ND, são calculadas através do método recursivo de Fornberg[4-5], pela subrotina WEIGHTS. Apenas num caso especial se utiliza o método de resolução de sistemas de equações lineares (vd. Anexo A), para a avaliação desses coeficientes. Esse caso corresponde à estimativa da segunda derivada em pontos fronteira sujeitos a condições de Neumann, onde se adiciona a contribuição do valor fixo da primeira derivada no ponto fronteira, à fórmula de estimativa geral. O cálculo dos coeficientes correspondentes é efectuado pela subrotina COEF, que utiliza a rotina GAUJOR para a resolução de cada sistema linear, pelo método de eliminação de Gauss-Jordan.

Bloco ⑦. Subrotinas para a estimativa das derivadas espaciais(HRS).

O recurso à estimativa de derivadas através de esquemas de alta resolução (HRS) é realizada pela chamada da subrotina NVSF que implementa a estratégia Normalised Variable and Space Formulation[6], desenvolvida para malhas não uniformes. Assim, de modo a ilustrar esta potencialidade, apresenta-se o bloco ⑦ de uma forma mais detalhada na Figura B.2. No caso de recorrer a esta estratégia, o utilizador necessita fornecer uma subrotina adicional (dFdU) que possibilite o cálculo da derivada da

variável fluxo em relação à solução e, conseqüentemente, permite a definição do sentido do fluxo e do sentido upwind em cada nodo.

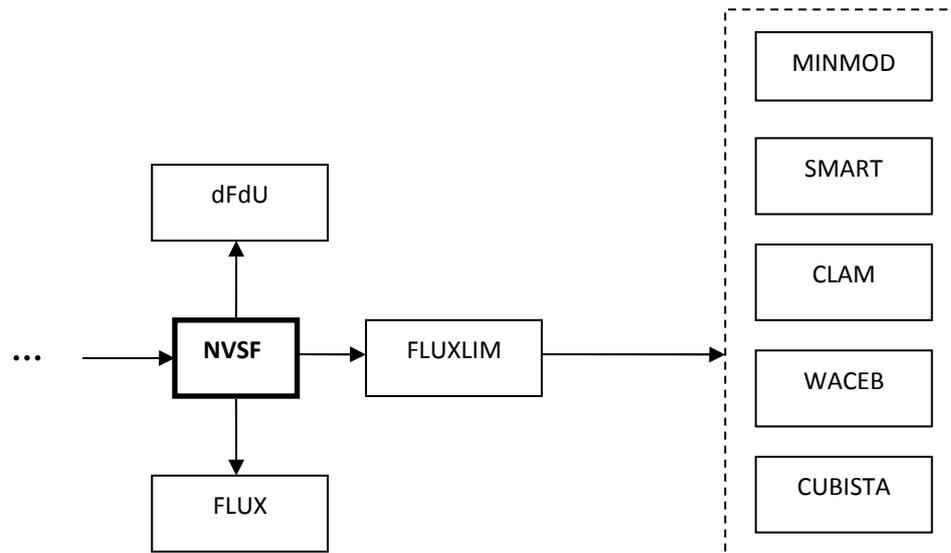


Figura B.2 Esquema pormenorizado da estrutura da rotina NVSF.

Por outro lado, a subrotina FLUX que deveria explicitar os valores da função fluxo em termos da solução, pode ser considerada como uma rotina dummy, já que a sua função é substituída pela acção da rotina F1 referida anteriormente. Finalmente, a rotina NVSF utiliza um conjunto de limitadores de fluxo que proporcionam as características de limitação de solução do próprio procedimento NVSF. A selecção do limitador escolhido é executada pela subrotina FLUXLIM, consoante o valor do parâmetro de controlo NSHEME, que possibilita a utilização de cinco limitadores distintos (vd. Figura B.2).

Bloco ③. Subrotinas para a avaliação de erros calculados a partir de soluções analíticas.

O algoritmo possibilita igualmente a avaliação do erro médio associado à solução numérica, na condição de que uma solução analítica do problema seja fornecida. Assim, para cada perfil de solução numérica disponível, o programa principal STAT02 chama a rotina que gere o processo (denominada por ERROR), que por sua vez activa a rotina de avaliação dos erros referentes a cada posição nodal (ERROREVAL) e calcula o erro médio do perfil numérico de solução. As avaliações do erro são realizadas relativamente a uma solução analítica obtida através da função FANAL.

A forma como o código é, de momento, definido, implica a verificação de algumas limitações que podem ser resumidas da forma seguinte:

Número máximo de equações do modelo (NEQDIF+NEQALG)	⇒ 5
Nível máximo de resolução de uma malha diádica (N)	⇒ 15
Número máximo de subintervalos no domínio temporal (NTIMES)	⇒ 5
Número máximo de derivadas diferentes para cada variável (NDER)	⇒ 5

Número máximo de nodos da malha adaptativa gerada (variável interna)	⇒ 1000
Número máximo de variáveis do problema a integrar (variável interna)	⇒ 10000
Dimensão máxima do vector de nodos de interpolação (NPINT)	⇒ 10
Dimensão máxima do vector de nodos de discretização FD (ND)	⇒ 15

Assim, o número de intervalos máximo admissível corresponde aos de uma malha diádica de nível 15. Deste modo, a escolha de um conjunto de malha não diádicas implica que o nível máximo (N) seja definido de forma a verificar a relação seguinte:

$$NI \times 2^N \leq 2^{15} \quad (\text{B.5})$$

Por exemplo, se se pretender uma malha base de nível base com NI = 27 intervalos, o valor máximo definido para N terá de ser necessariamente 10. Por outro lado, se NI = 41, o nível máximo de refinamento será 9.

Estes valores máximos podem ser alterados por manipulação das dimensões dos vectores ou matrizes adequados. No entanto, um aumento excessivo do valor desses parâmetros poderá originar problemas na execução do código, conduzindo a exigências de memória inoportáveis, além de poder afectar negativamente os tempos de computação.

B.1.2 DESCRIÇÃO DE UM EXEMPLO 1D

Nesta secção procede-se à apresentação e análise dos dados a fornecer pelo utilizador para uma hipotética execução de um exemplo estudado neste trabalho. O problema seleccionado refere-se ao modelo diferencial que simula o comportamento de um sistema de propagação de chama (vd. secção 6.2; equações 6.7 e 6.8). As condições da execução apresentadas em seguida correspondem às utilizadas no run correspondente à análise do critério de colocação 1D C2, e pretendem ilustrar a aplicação de uma vasta gama de opções postas à disposição pelo código. Nem todas as potencialidades deste foram convenientemente testadas no decurso do presente trabalho.

Assim, considera-se na Figura B.3, o ficheiro DATA, que define um conjunto possível de parâmetros de execução do algoritmo de refinamento, para o modelo em questão.

2,0	n. eq diferenciais, n. eq algebraicas
0.D0,1.0D0	posicao front esq/front dir
0.D0	tempo inicial
1	n int tempo
6.D-3,1.D-4,1.2D-3	tempo final, passo, passo imp
2,1,1	n. vars diferenciadas, pos vars dif
1	tipo de dif: 0 - directa; 1 - sucessiva
2	n. derivadas, indice(i),i=1,...nder
5,CENTRAIS,UP	n. ptos disc, tipo discret
1	
2	
5,CENTRAIS,UP	
1,7	tipo de intpl, n. ptos de intpl
1.D-6,1.D-6	tol abs e rel (DASSL)
1	n. passagens
1,1,2	rotina gridgen; derivada; crit coloc
1.D-1,1.D-1	tol geracao da malha (max,min)
27	n. int malha n diadica; m diad = 1
0,6	malha diad de < e > nivel; mnd < = 0
1	0 - m unif; 1 - m lida
0	0 - n calc erro; 1 - calc erro
0,1	0 - DSS; 1 - NVSF, tipo esq HRS

Figura B.3 Exemplo de um ficheiro DATA referente ao modelo de propagação de chama.

Pela análise do ficheiro de dados anterior, verifica-se que o problema é constituído por duas equações: duas diferenciais e nenhuma algébrica (NEQDIF = 2 e NEQALG = 2). O domínio espacial corresponde ao intervalo [0,1] (ZE = 0.0 e ZD = 1.0), enquanto que a integração temporal se desenrola num único intervalo (NTIMES = 1) entre os instantes $t = 0$ e $t = 0.006$ (TIN = 0.0 e TIME(0) = 6×10^{-3}). O passo de integração é fixado em 0.0001 (DT(1) = 1×10^{-4}) com um intervalo de impressão de resultados igual a 0.0012 (DTPRESS(1) = 1.2×10^{-3}). Torna-se necessário especificar a discretização relativamente às duas variáveis, já que ambas envolvem diferenciações espaciais. Assim, o número de variáveis diferenciada é 2 (NWARDIF = 2) e as duas variáveis são activadas para diferenciação (IVARDIF(1) = 1 e IVARDIF(2) = 1). O tipo de diferenciação para ambas as variáveis é especificado como sucessivo (NDERV = 1) e assim, a geração de malha (e possivelmente a discretização espacial) é realizada através de fórmulas de diferenças finitas com cinco pontos (ND(1) = ND(2) = 5), do tipo centrado (TIPO(1) = TIPO(2) = CENTRAIS; as variáveis TIPO1 não são relevantes neste caso). As operações de interpolação são realizadas por splines cúbicas (NINTP = 1), com sete pontos (NPINT = 7). Por outro lado, as tolerâncias absoluta e relativa referente ao esquema de integração temporal são fixadas em 1×10^{-6} (ATOL = RTOL = 1×10^{-6}). O procedimento de geração de malha adaptativa é executado com uma passagem (NPASS = 1), recorrendo à rotina GRIDGEN11 (NCRT = 1) com análise da aproximação FD da primeira derivada espacial da solução (KC = 1), e posterior aplicação do critério de colocação 1D C2 (LC = 2). As tolerâncias associadas ao procedimento de geração de malha são fixadas em 0.1 (GTOL(1) = GTOL(2) = 1×10^{-1}). Opta-se por definir um conjunto de malhas não diádicas (NI \neq 1) em que a malha de nível de resolução mais reduzido possui 27 intervalos (NI = 27). Esta malha é especificada com o nível 0 (M = 0; necessário para o caso de malhas não diádicas), e o nível máximo de refinamento admissível é fixado em 6 (N = 6). A malha de nível 0 é lida a partir de um ficheiro pré-construído (NREAD = 1), designado por POSITION onde todas as posições espaciais são definidas (vd. Figura B.4).

```

0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0.5
0.55
0.6
0.65
0.7
0.75
0.8
0.825
0.85
0.875
0.9
0.925
0.95
0.975
0.99
0.995
0.999
1

```

Figura B.4 Ficheiro POSITION para definição das posições da malha não diádica não uniforme de nível 0 (modelo de propagação de chama).

Neste caso específico, o estabelecimento de uma malha não gerada internamente pelo sistema permite a utilização de um conjunto de malhas não uniforme (vd. Figura 6.9; página 221). Não se definem quaisquer operações de avaliação de erros (NERROR = 0), já que não se disponibiliza uma solução analítica do problema. Finalmente, o algoritmo utiliza avaliações das derivadas espaciais efectuadas por aproximações de diferenças finitas (NDISC = 0). Assim o valor do parâmetro NSCHEME referente à definição do limitador de fluxo associado a aproximações NVSF, torna-se irrelevante. No entanto, é necessário realizar a respectiva especificação de NSCHEME, assumido como dummy.

Deste modo, todas as informações referentes às condições pretendidas para a execução são introduzidas no código. Falta ainda definir as características específicas do modelo em si. Estas são associadas ao programa através da construção de três subrotinas e uma função adicionais. As subrotinas correspondentes à definição do modelo de propagação de chama referido acima são apresentadas na Figura B.5.

```

SUBROUTINE INIT(Z,U,NINT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DOUBLE PRECISION U(5,0:NINT),Z(0:NINT)

DO I=0,NINT
U(1,I)=1.D0
U(2,I)=0.2D0
END DO

RETURN

END

C *****

SUBROUTINE BOUNDARY(KI,K,T,LE,LD,Y,YB)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
DIMENSION Y(2),YB(2)

IF(KI.EQ.0)THEN

IF(K.EQ.2)THEN

LE=0
LD=1

IF(T.LE.2.D-4)THEN
YB(2)=0.2D0+1.D0/2.D-4*T
ELSE
YB(2)=1.2D0
ENDIF

ENDIF

RETURN

ENDIF

IF(K.EQ.1)THEN

LE=1
LD=1

YB(1)=0.D0
YB(2)=0.D0

ELSE

LE=1
LD=0

YB(1)=0.D0

```

```

ENDIF

RETURN

END

C *****

SUBROUTINE MODEL(T,U,Z,DUDZ,DU DT)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION DU DT(5,1000)
DIMENSION DUDZ(5,5,1000),U(5,1000),Z(1000)

COMMON/GSIZE/NINT
COMMON/FRNTR/ZE,ZD

h = 3.52D6
h2 = 4.D0

DO I=1,NINT+1

IF(DABS(Z(I)-ZE).LT.1.D-10)THEN

C *****
C          FRONTEIRA ESQUERDA
C *****

DU DT(1,I)=DUDZ(1,2,I)-h*U(1,I)*DEXP(-h2/U(2,I))
DU DT(2,I)=DUDZ(2,2,I)+h*U(1,I)*DEXP(-h2/U(2,I))

C *****
C          FRONTEIRA DIREITA
C *****
C

ELSEIF(DABS(Z(I)-ZD).LT.1.D-10)THEN

DU DT(1,I)=DUDZ(1,2,I)-h*U(1,I)*DEXP(-h2/U(2,I))
IF(T.LE.2.D-4)THEN
DU DT(2,I)=1.D0/2.D-4
ELSE
DU DT(2,I)=0.D0
ENDIF

ELSE

C *****
C          PONTO INTERNO
C *****

DU DT(1,I)=DUDZ(1,2,I)-h*U(1,I)*DEXP(-h2/U(2,I))
DU DT(2,I)=DUDZ(2,2,I)+h*U(1,I)*DEXP(-h2/U(2,I))

ENDIF

END DO

RETURN

END

C *****

DOUBLE PRECISION FUNCTION F1(K,U)
DOUBLE PRECISION U
INTEGER K

F1=U

END

```

Figura B.5 Exemplo do conjunto de subrotinas fornecidas pelo utilizador (modelo de propagação de chama).

Na subrotina INIT são introduzidas as expressões analíticas para as soluções iniciais referentes a cada variável. Neste caso, verifica-se que a primeira variável ($U(1,I)$) tem um perfil inicial constante unitário, enquanto que a segunda variável ($U(2,I)$) apresenta um perfil igualmente constante e igual a 0.2.

Por outro lado, a subrotina BOUNDARY informa o código sobre as características gerais definidas para as fronteiras a que o modelo está sujeito. No caso de $KI = 0$, definem-se evoluções temporais pré-especificadas de qualquer variável sobre as fronteiras, ou seja são fornecidas informações sobre o comportamento temporal da solução em cada fronteira. Neste caso, verifica-se que na fronteira da direita ($LD = 1$), a segunda variável ($YB(2)$ para $K = 2$) é definida por uma função rampa temporal de declive $1/(2 \times 10^{-4})$ a partir de 0.2 até $T = 2 \times 10^{-4}$, a partir do qual se mantém em 1.2. Esta condição fronteira pretende simular o efeito da ignição do sistema. Neste caso, a evolução da variável 1 não é especificada, assim como o comportamento da variável na fronteira esquerda ($LE = 0$). Porém, no caso de $KI = 1$ introduzem-se possíveis condições de primeira ordem. Assim, para a primeira variável ($K = 1$) definem-se duas condições de Neumann nulas em ambas as fronteiras ($LE = LD = 1$ com $YB(1) = YB(2) = 0$), enquanto que para a variável 2 especifica-se outra condição de Neumann nula na fronteira esquerda ($LE = 1$ e $YB(1) = 0$). Como a evolução na fronteira da direita já foi definida anteriormente, torna-se desnecessária qualquer especificação adicional e então $LD = 0$). No caso de alguma das fronteiras ser fixa (condição de Dirichlet), o valor dos parâmetros (LE para a fronteira esquerda e LD para a direita) deve ser nulo.

Na subrotina MODEL são introduzidas as expressões referentes à função F do modelo (correspondente ao modelo geral – vd. equação B.1). O valor dessas funções é definido na variável DUDT, para cada posição nodal I . É essencial referir que, na construção desta subrotina, é obrigatório considerar inicialmente as funções relacionadas com as equações diferenciais e só depois se introduzem as expressões algébricas. No entanto, este problema específico não considera equações algébricas, sendo constituído exclusivamente por equações diferenciais. Deste modo, estabelecem-se as equações referentes à fronteira esquerda ($Z(I) = ZE$) que correspondem a uma evolução normal especificada pelas funções generalizadas do modelo, já que nesta fronteira são apenas definidas condições de Neumann. No caso da fronteira direita ($Z(I) = ZD$) aplica-se uma atribuição equivalente para a variável 1, enquanto que a evolução da variável 2 é especificada como a derivada da condição fronteira em rampa introduzida na rotina BOUNDARY e já referida anteriormente. Para a aplicação das diversas funções necessárias à implementação do modelo, é forçoso definir os valores de dois parâmetros, ou seja $h = 3.52 \times 10^6$ e $h2 = 4$.

Finalmente, na função F1 são especificadas possíveis funções dependentes da solução que devem ser diferenciadas directamente. O presente problema não apresenta este tipo de funções e, deste modo, a função F1 é definida como a própria solução.

REFERÊNCIAS

1. L.R. Petzold (1982) *A description of DASSL: a differential/algebraic system solver*, Sandia Tech. Rep. **82-8637**.
2. T.A. Driscoll, A.R.H. Heryudono (2007) "Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems", *Comput. Math. Appl.*, **53** (6), pp. 927-939.

3. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
4. B. Fornberg (1988) "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids", *Math. Comput.*, **51** (184), pp. 699-706.
5. B. Fornberg (1992) "Fast generation of weights in finite difference formulas", in *Recent Developments in Numerical Methods and Software for ODEs/DAEs/PDEs*, (G.D. Byrne, W.E. Schiesser, eds.), World Scientific, Singapore, pp. 97-124.
6. M.S. Darwish, F. Moukalled (1994) "Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes", *Numer. Heat Transfer, Part B*, **26** (1), pp. 79-96.

B.2 MALHAS BIDIMENSIONAIS

B.2.1 ESTRUTURA DA APLICAÇÃO 2D

O código INTEGR2D apresenta uma estrutura semelhante à do programa STAT02, analisado na secção anterior, procedendo à execução do algoritmo de malha móvel adaptativa em problemas diferenciais, explícitos em relação às derivadas temporais, com a seguinte forma geral:

$$u_t = F(u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{yy}, u_{xy}, \dots) \quad (\text{B.6})$$

Condições fronteira:

$$G_x^L(u, u_x, u_y, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad x = x^L \quad (\text{B.7})$$

$$G_x^R(u, u_x, u_y, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad x = x^R \quad (\text{B.8})$$

$$G_y^L(u, u_x, u_y, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad y = y^L \quad (\text{B.9})$$

$$G_y^R(u, u_x, u_y, \dots) = 0 \quad \text{em} \quad y = y^R \quad (\text{B.10})$$

Condição inicial:

$$u(x, y, 0) = u^0(x, y); \quad x \in [x^L, x^R]; \quad y \in [y^L, y^R] \quad (\text{B.11})$$

em que $u(z, t)$ é o vector solução definido da mesma forma como anteriormente.

Para o efeito, foi elaborado um programa em FORTRAN, cuja estrutura geral é resumida na Figura B.6, para uma melhor visualização das diferentes rotinas que constituem o código global.

O núcleo principal do código consiste no programa principal INTEGR2D, concebido como uma extensão do programa STAT02 a problemas bidimensionais, onde se executam as seguintes operações gerais:

1. Determinação do tempo de computação, através da chamada da subrotina CPUT_TIME, exactamente da mesma forma como na execução do programa anterior.
2. Introdução dos dados efectuada pela chamada da subrotina READER que executa a leitura dos dados armazenados no ficheiro pré-definido DADOS.
3. Construção da malha básica construída pela junção de diversas malhas 2D de diferentes níveis de resolução. Operação efectuada através da definição de malhas uniformes ou da leitura das posições de malha de nível mais baixo (em x e y) a partir de um ficheiro pré-definido (POSITION).
4. Geração da matriz de activação inicial em que todos os nodos pertencentes à malha base de nível de resolução mais reduzido são activados por defeito, através da chamada rotina MATRIX.
5. Inicialização da integração é efectuada pela chamada da subrotina INIT. Esta rotina procede a avaliação da superfície inicial da solução, pela utilização da respectiva expressão analítica.

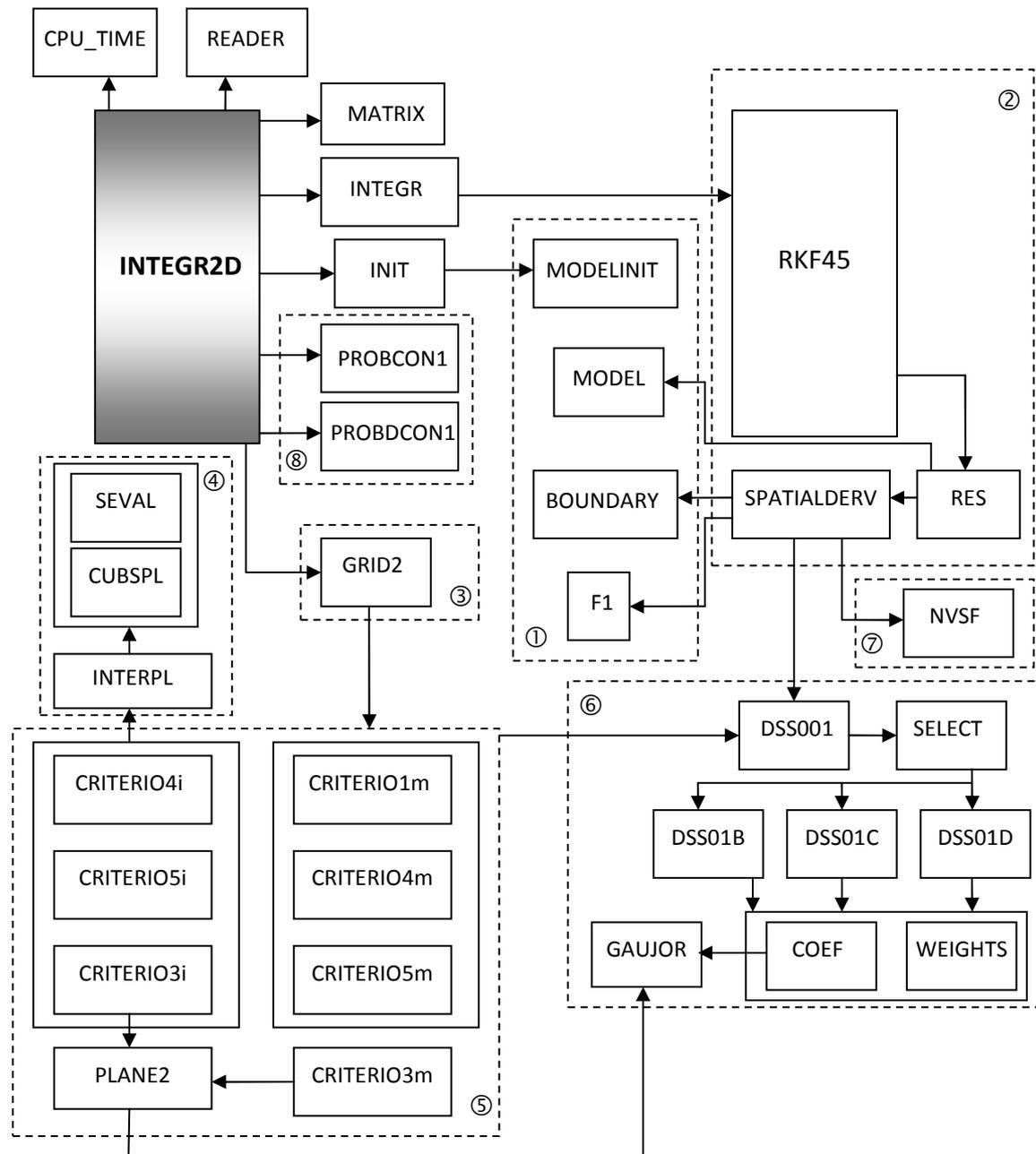


Figura B.6 Esquema simplificado da estrutura do código INTEGR2D.

6. Geração da malha adaptativa inicial através de uma chamada dupla da rotina GRID2, executada como a sequência de um critério do tipo m seguido de um critério do tipo i suportado pela malha gerada na chamada inicial.
7. Implementação do ciclo de integração deste o tempo inicial TIN até ao tempo final TOUT = TIME(NTIMES-1).
8. Construção do problema 1D legível pelo integrador a partir do problema 2D original através da chamada da rotina PROBCON1.
9. Chamada da rotina INTEGR que estabelece as condições de integração e pode ser facilmente readaptada para diferentes integradores.

10. Reconstrução do novo problema 2D (no instante temporal seguinte) a partir da solução de saída do integrador, através da chamada da rotina PROBDON1.
11. Escrita do conjunto de resultados seleccionado para tempos controlados pelo intervalo de impressão DTPRESS.
12. Redefinição da malha referente ao tempo seguinte pela chamada da rotina de geração de malha GRID2.

Tabela B.3 Resumo das variáveis de entrada do programa INTEGR2D fornecidas pelo ficheiro DADOS.

Nome da Variável	Tipo de Variável	Valores que Assume	Significado	Observações
XE	Escalar Dupla Precisão		Posição da fronteira esquerda em x	
XD			Posição da fronteira direita em x	
YE			Posição da fronteira esquerda em y	
YD			Posição da fronteira direita em y	
TIN			Instante de tempo inicial	Tempo inicial da integração
NTIMES	Escalar Inteira		Nº de subintervalos temporais	
TIME(I)	Vector Dupla Precisão		Tempo final de cada intervalo	$I = 0, \dots, \text{NTIMES}-1$; Tempo final da integração = $\text{TIME}(\text{NTIMES}-1)$
DT(I)			Passo de integração temporal	$I = 1, \dots, \text{NTIMES}$
DTPRESS(I)			Passo temporal de impressão de resultados	$I = 1, \dots, \text{NTIMES}$
MX	Escalar Inteira		Nível de resolução mínimo em x	
MY			Nível de resolução mínimo em y	
NX			Nível de resolução máximo em x	
NY			Nível de resolução máximo em y	
NDRV			Número de derivadas	
IDRV(I,J)	Matriz Inteira	1 2	Direcção a derivar; $I = 1, \dots, \text{NDRV}; J = 1, \dots, 5$	Diferenciação em x Diferenciação em y
NPD	Escalar Inteira		Nº de pontos de aproximação FD;	Referente ao tipo de diferenças finitas escolhido
TIPO	Escalar Caracter	CENTRAIS	Tipo de diferenças finitas;	Diferenças centradas
		NCENTRAL		Diferenças descentradas
		NCBIASED		Diferenças descentradas <i>biased</i>
TIPO1		UP	Orientação predominante das diferenças finitas;	Diferenças <i>Upwind</i>
		DOWN		Diferenças <i>Downwind</i>
NINTP	Escalar Inteira	0	Parâmetro que controla o tipo de interpolação	Interpolações lineares
		1		Interpolações de <i>Splines</i> cúbicas com NPINT pontos
NPINT			Nº de pontos de interpolação	Apenas necessário se NINTP = 1
ATOL	Escalar Dupla Precisão		Tolerância absoluta	Referente ao integrador seleccionado
RTOL			Tolerância relativa	
ICRITO		1	Parâmetro que define o critério de colocação 2D do tipo m	Rotina critério1m
		3		Rotina critério3m
		4		Rotina critério4m
		5		Rotina critério5m
ICRIT1	Escalar Inteira	3	Parâmetro que define o critério de colocação 2D do tipo i	Rotina critério3i
		4		Rotina critério4i
		5		Rotina critério5i
K			Ordem da derivada analisada	
L		1	Parâmetro que define o critério 1D seleccionado	Critério do tipo C1
		2		Critério do tipo C2
GTOL(I)	Vector Dupla Precisão		Tolerâncias referentes ao integrador	$I = 1, 2$
NGRID		0	Parâmetro que controla a forma como é introduzida a malha base	Malha de nível mínimo uniforme
		1		Malha de nível mínimo introduzida como dado externo
NDISC		0	Parâmetro que define o tipo de discretização escolhido	Diferenças finitas (FD)
		1		Esquemas de alta resolução (NVSF)
NSCHEME	Escalar Inteira	1	Parâmetro que define o limitador de fluxo escolhido; Apenas necessário se NDISC = 1	Limitador MINMOD
		2		Limitador SMART
		3		Limitador CLAM
		4		Limitador WACEB
		5		Limitador CUBISTA

Assim, a subrotina `READER` procede à leitura dos dados a partir de um ficheiro designado por `DADOS`, previamente construído pelo utilizador, e que define parte da informação necessária para a execução. Porém, os parâmetros possíveis de especificar pelo utilizador no ficheiro `DADOS` são algo diferentes dos correspondentes ao programa 1D. Tal seria de esperar, já que o incremento da dimensão do problema e a sua aplicação a modelos de natureza mais limitada implica a necessidade de um conjunto de dados de essência semelhante mas distinta. De qualquer modo, as estruturas de ambos os ficheiros são muito parecidas, sendo os parâmetros a definir para este caso resumidos na Tabela B.3, juntamente com a sua influência na evolução de cada execução.

No que diz respeito à escrita de resultados, o programa principal imprime resultados seleccionados em ficheiros específicos, denominados por “`fort.n`”, onde **n** corresponde a:

- n = 12** ⇒ Solução organizada numa matriz para o tempo inicial e para tempos seleccionados definidos pelo intervalo de impressão `DTPRESS`;
- n = 13** ⇒ Matriz de activação nodal (**A**, cujos elementos unitários correspondem a nodos activados e os elementos nulos se referem a nodos não activos) para o tempo inicial e para tempos seleccionados definidos pelo intervalo de impressão `DTPRESS`;
- n = 15** ⇒ Perfil inicial da solução organizado em stencils sequenciais de x .
- n = 14** ⇒ Perfis de solução organizados em stencils sequenciais de x , para tempos seleccionados definidos pelo intervalo de impressão `DTPRESS`.
- n = 20** ⇒ Perfil da evolução temporal do número de nodos da malha; tempo de `cpu`.
- n = 69** ⇒ Último perfil disponível da solução associada a uma mensagem de integração mal sucedida activada pelo integrador temporal (Subrotina `INTEGR`).

Novamente, não se recorre a qualquer parâmetro que controle o tipo de resultados que são imprimidos em cada execução. Assim, todos os perfis referidos acima são postos à disposição do utilizador, nos ficheiros correspondentes, para os instantes temporais especificados.

As restantes subrotinas que constituem o código são igualmente agrupadas em oito blocos (vd. Figura B.6), que executam funções equivalentes às descritas na secção anterior, para o algoritmo 1D, verificando-se, mesmo que, alguns dos blocos são perfeitamente coincidentes. Assim, para cada bloco, tem-se que:

Bloco ①. Subrotinas fornecidas pelo utilizador.

As subrotinas que constituem o bloco ① são fornecidas pelo utilizador, sendo muito semelhantes às aplicadas no código unidimensional. Novamente, o utilizador necessita

de construir três subrotinas e uma função, que são chamadas pelo código pré-definido e que representam operações equivalentes às exigidas pelo programa STAT02. Assim, tem-se neste caso:

- Subrotina MODELINIT ⇒ Fornece a condição inicial analítica do problema (função u^0), quando esta é requerida;
CALL MODELINIT(Z,U,NINT)
- Subrotina BOUNDARY ⇒ Fornece as condições fronteira (funções G) e as suas características em ambas as extremidades do domínio espacial;
CALL BOUNDARY(KI,I,J,T,LE,LD,Y,YB)
- Subrotina MODEL ⇒ Fornece a funções F do modelo diferencial;
CALL MODEL(NP,T,Y,DY,F)
- Função F1 ⇒ Função que define possíveis funções a ser diferenciadas directamente;
CALL F1(K,U)

As diversas variáveis a definir em cada uma dessas subrotinas estão resumidas na tabela B.4.

Bloco ②. Subrotinas referentes à integração temporal.

Ao contrário do código anterior, o núcleo central do bloco ② referente à integração, consiste agora no integrador RKF45[1] (vd. Anexo C) que engloba as subrotinas que asseguram a integração temporal do problema original. A subrotina de avaliação de resíduos RES, que processa o cálculo das equações do modelo, é bastante mais simples do que a utilizada no código unidimensional já que delega todas as operações de avaliação das derivadas espaciais na rotina SPATIALDERV. Deste modo, esta rotina define as características fronteira de cada problema integrado (pela chamada da subrotina BOUNDARY) e procede ao cálculo das estimativas para as derivadas espaciais de uma forma sucessiva na direcção (x ou y) seleccionada (processo controlado pela definição da matriz IDR), através do recurso às rotinas DSS001 ou NVSF. Posteriormente, a subrotina RES recorre à subrotina MODEL para a estimativa dos valores da função F do modelo em todos os nodos do problema. Esta solução é então introduzida no procedimento geral do integrador RKF45, que representa a implementação do algoritmo numérico de integração de Runge-Kutta-Fehlberg de quarta e quinta ordem[2].

Bloco ③. Rotina que gere o esquema de geração de malha implementado.

Devido à variedade de critérios de geração de malha disponíveis, na implementação do código INTEGR2D (vd. Figura B.3), optou-se por utilizar uma subrotina específica para a gestão do processo de selecção dos critérios a aplicar quer numa perspectiva m como i . Assim, consoante os valores introduzidos para os parâmetros ICRIT0 e ICRIT1 (vd. Tabela B.3), a rotina GRID2 promove a activação das subrotinas relacionadas com os critérios 2D correspondentes.

Tabela B.4 Resumo das variáveis presentes nas subrotinas definidas pelo utilizador para a execução do programa INTEGR2D.

Subrotina	Nome das Variáveis	Tipo de Variável	Valores que Assume	Significado	Observações
INIT	X	Escalar Dupla Precisão		Posição em x	
	Y			Posição em x	
	U			Solução em [x,y]	
	XE			Posição da fronteira esquerda em x	
	XD			Posição da fronteira direita em x	
	YE			Posição da fronteira esquerda em y	
	YD			Posição da fronteira direita em x	
BOUNDARY	KI	Escalar Inteira	0	Parâmetro que define a especificação nas fronteiras	Define-se uma variação temporal da solução
			1		Definem-se as informações referentes às condições fronteira
	1		Direcção de diferenciação	Diferenciação em x	
	2			Diferenciação em y	
	J		Contador da posição no domínio	Diferenciação em x – domínio y Diferenciação em y – domínio x	
	T	Escalar DP		Tempo de integração	
	LE	Escalar Inteira	0	Tipo de Fronteira Esquerda	Não há restrições
			1		Restrição definida em YB
	0		Tipo de Fronteira Direita	Não há restrições	
	1			Restrição definida em YB	
Y(I)	Vector Dupla Precisão		Solução nas fronteiras	I = 1, 2; I = 1, Fronteira Esquerda; I = 2, Fronteira Direita	
YB(I)		1ª derivada em cada fronteira (Condições de Neumann)	I = 1, 2; I = 1, Fronteira Esquerda; I = 2, Fronteira Direita		
MODEL	T	Escalar Dupla Precisão		Tempo de integração	
	Y(I)	Vector Dupla Precisão		Solução	J = 1, ..., NP
	DY(I,J)	Matriz Dupla Precisão		Derivadas espaciais	I = 1, ..., NP J = 1, ..., NDRV
	F(I)	Vector Dupla Precisão		Função F	I = 1, ..., NP
	NP	Escalar Inteira		Número de nodos da malha 2D	
	XE	Escalar Dupla Precisão		Posição da fronteira esquerda em x	
	XD		Posição da fronteira direita em x		
	YE		Posição da fronteira esquerda em y		
	YD		Posição da fronteira direita em x		
	ZX(I)	Vector Dupla Precisão		Posições da malha em x	I = 1, ..., NP
ZY(I)	Posições da malha em y		I = 1, ..., NP		
F1	K	Escalar Inteira		Contador de variáveis do modelo	
	U	Escalar DP		Solução	

Bloco ④. Subrotinas que implementam as operações de interpolação.

Como as operações de interpolação são agora incorporadas nos próprios procedimentos de geração de malha, revela-se necessário o desenvolvimento de uma subrotina específica que implemente o processo de preparação e execução das

operações de interpolação, quer lineares como não lineares. Esta rotina designada por INTEGR recebe os stencils de interpolação (vectores de posição e de solução) e a posição onde interpolar, selecciona o tipo de operação a realizar (controlada pelo valor do parâmetro NINTP) e executa o próprio processo através da chamada das rotinas adequadas. Da mesma forma do que no caso unidimensional, a interpolação não linear é realizada com splines cúbicas, através do recurso à rotina CUBSPL e à função SEVAL, já descritas anteriormente. No caso de NINTP = 0, todas as interpolações são efectuadas por aproximação linear.

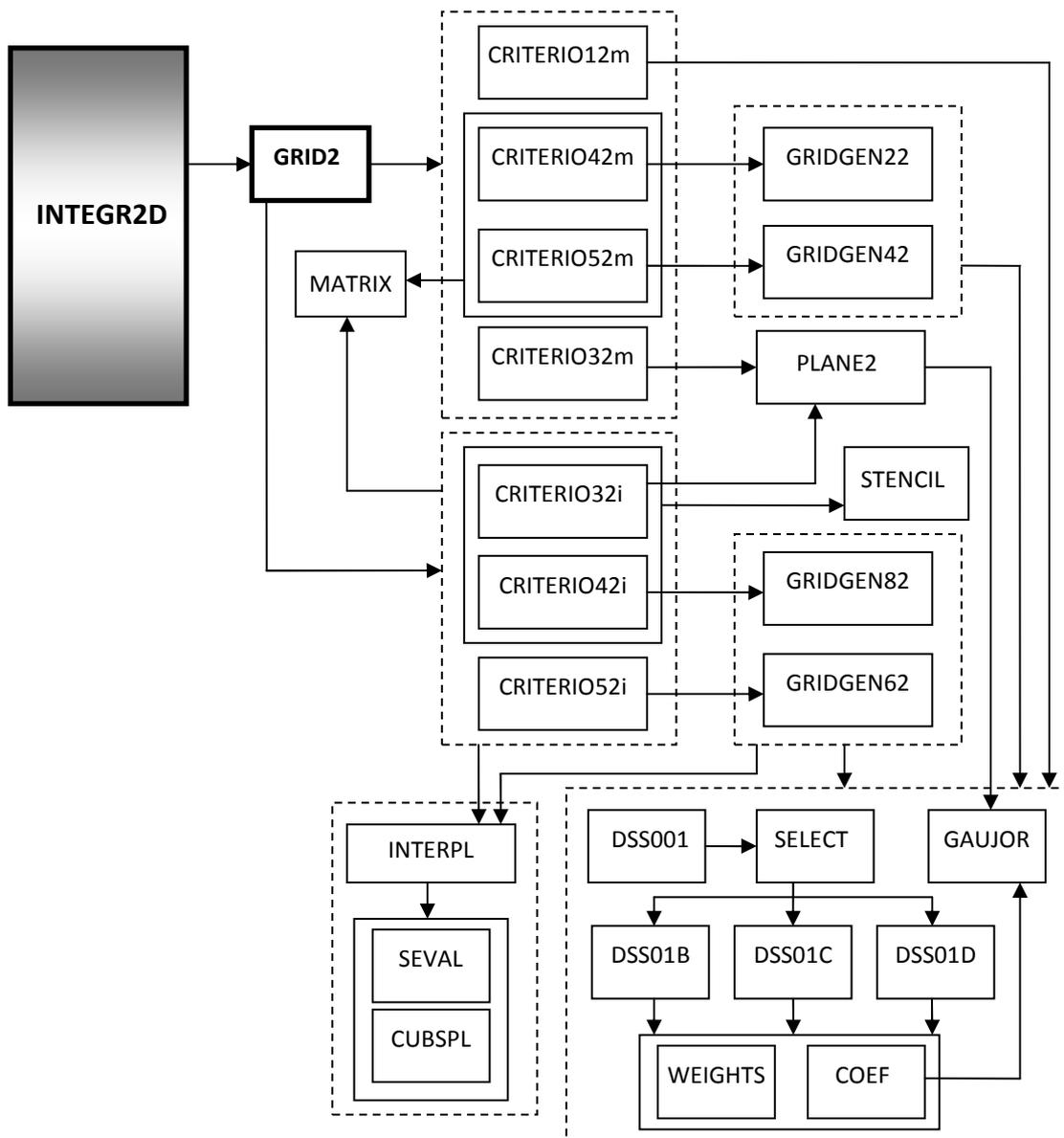


Figura B.7 Esquema do processo de geração de malha adaptativa incluído na estrutura do código INTEGR2D.

Bloco ⑤. Subrotinas que implementam a estratégia de geração de malha.

O bloco ⑤ é constituído por todas as subrotinas relacionadas com a implementação do algoritmo de geração de malha é apresentado com maior pormenor na Figura B.7. O

processo é gerido pela subrotina GRID2 que possibilita a selecção dos critérios 2D específicos a implementar. Deste modo, consoante o valor dos parâmetros ICRI10 (para geração do tipo m) ou ICRI1 (para execuções do tipo i) a rotina GRID2 chama as subrotinas de geração de malha correspondentes.

Os critérios do tipo 32 recorrem à subrotina PLANE2 para o cálculo de declives de planos definidos no espaço tridimensional, avaliados através de um método de eliminação de Gauss-Jordan (rotina GAUJOR). Adicionalmente, todas as outras rotinas estão associadas a subrotinas externas GRIDGEN*2 que executam as operações de pesquisa 1D baseadas nos critérios de colocação C1 σ e C2 (com a óbvia excepção da subrotina CRITERIO12m que inclui este processo na sua estrutura). Estas rotinas utilizam aproximações FD para a avaliação de medidas de erro que controlem o processo de colocação nodal. Deste modo, recorrem à aplicação das rotinas para a estimativa das derivadas espaciais (bloco ⑥), já descrita com algum pormenor na secção anterior.

As rotinas do tipo i recorrem a esquemas de interpolação associados ao conjunto de rotinas do bloco ④, já discutidas acima. Por outro lado, alguns critérios aplicam a subrotina MATRIX para a geração automática da malha base estabelecida por defeito. Finalmente, os critérios C32i e C42i usam uma subrotina designada por STENCIL, que constrói os stencils que suportam as operações de interpolação.

Bloco ⑥. Subrotinas para a estimativa das derivadas espaciais(FD).

O bloco ⑥ engloba todas as subrotinas utilizadas na estimativa do valor das derivadas espaciais através de aproximações de diferenças finitas[3] baseadas no método recursivo de Fornberg[4-5], sendo exactamente igual ao aplicado no código de refinamento, e já descrito com algum pormenor, na secção anterior.

Bloco ⑦. Subrotinas para a estimativa das derivadas espaciais(HRS).

As rotinas de implementação da estratégia HRS para a estimativa de derivadas espaciais são coincidentes com as aplicadas no âmbito do algoritmo STAT02 e já descritas e discutidas na secção anterior.

Bloco ⑧. Subrotinas de interface 1D-2D.

O programa utiliza duas subrotinas que possibilitam a relação entre o carácter bidimensional dos modelos integrados e a natureza unidimensional da solução introduzida no integrador temporal. Assim, a subrotina PROBCON1 executa a construção prévia de um problema 1D legível pelo integrador a partir do problema 2D original, e a rotina PROBDON1 promove a reconstrução do problema 2D a partir da solução do sistema de ODE's 1D obtido após cada passo de integração.

A forma como o código é definido, obriga à verificação de algumas limitações, resumidas da seguinte maneira:

Número máximo de equações do modelo	⇒ 1
Nível máximo de resolução de uma malha diádica (NX ou NY)	⇒ 10

Número máximo de subintervalos no domínio temporal (NTIMES)	⇒ 5
Número máximo de derivadas espaciais (NDRV)	⇒ 5
Número máximo de variáveis do problema a integrar (variável interna)	⇒ 100000
Dimensão máxima do vector de nodos de interpolação (NPINT)	⇒ 10
Dimensão máxima do vector de nodos de discretização FD (NPD)	⇒ 15

Da mesma forma do caso anterior, estes valores máximos podem ser alterados por manipulação das dimensões dos vectores ou matrizes adequados. No entanto, há de ter em conta que estas alterações podem originar problemas como os já anteriormente referidos, relacionados principalmente com limitações de memória.

B.2.2 DESCRIÇÃO DE UM EXEMPLO 2D

Na presente secção, procede-se à apresentação de todos dados que o utilizador necessita de fornecer ao código para a execução de um exemplo estudado neste trabalho. O problema 2D considerado refere-se a modelo diferencial que descreve o comportamento de um sistema de combustão bidimensional (vd. secção 6.5; equação 6.27). Assim, este exemplo pretende ilustrar a aplicação do vasto leque de opções disponíveis.

Deste modo, considera-se na Figura B.8 o seguinte ficheiro DATA, que define um conjunto possível de parâmetros de execução do algoritmo INTEGR2D, para o modelo em questão.

0.D0,1.D0,0.D0,1.0D0	XE, XD, YE, YD
0.D0	TIN
2	NTIMES
0.24D0,1.D-2,1.D-2	TIME(1),DT(1),DTPRESS(1)
0.3D0,1.D-4,1.D-2	
5,5,7,7	MX,MY,NX,NY
2	NDRV
1,1,0,0,0	IDRV(I,J)
2,2,0,0,0	
5,CENTRAIS,UP	NPD,TIPO,TIPO1
1.D-5,1.D-5	ATOL,RTOL
5,5,1,1	ICRIT0,ICRIT1,K,L
0.25D0,0.25D0	GTOL(1),GTOL(2)
7,1	NPINT,NINTP
0,1	NDISC,NSCHEME
0	NGRID

Figura B.8 Exemplo de um ficheiro DADOS referente ao modelo de combustão 2D.

Pela análise do ficheiro de dados anterior, verifica-se que o domínio espacial corresponde ao intervalo $[0,1]^2$ ($XE = YE = 0.0$ e $XD = YD = 1.0$), enquanto que a integração temporal se desenrola em dois subintervalos ($NTIMES = 2$). O primeiro subintervalo corresponde à integração entre os instantes $t = 0$ e $t = 0.24$ ($TIN = 0.0$ e $TIME(0) = 0.24$), enquanto que o segundo subintervalo se refere aos limites $t = 0.24$ e $t = 0.30$ ($TIME(1) = 0.30$). Os passos de integração para cada subintervalo são fixados em 0.01 ($DT(1) = 1 \times 10^{-2}$) com um intervalo de impressão de resultados de 0.01 ($DTPRESS(1) = 1 \times 10^{-2}$), e 0.0001 ($DT(2) = 1 \times 10^{-4}$) e 0.01 ($DTPRESS(2) = 1 \times 10^{-2}$), respectivamente. Define-se um conjunto de malhas diádicas em que o nível varia entre 5 e 7 para as direcções x e y ($MX = MY = 5$ e $NX = NY = 7$). O número de derivadas espaciais presentes no modelo é 2 ($NDRV = 2$), correspondentes a duas variáveis de segunda ordem em x e y, respectivamente ($IDRV(1,1) = IDRV(1,2) = 1$ e $IDRV(2,1) =$

IDRV(2,2) = 2). A geração de malha (e possivelmente a discretização espacial) é realizada através de fórmulas de diferenças finitas com cinco pontos (NPD = 5), do tipo centrado (TIPO = CENTRAIS; a variável TIPO1 não é relevante neste caso). Por outro lado, as tolerâncias absoluta e relativa referentes ao esquema de integração temporal são fixadas em 1×10^{-5} (ATOL = RTOL = 1×10^{-5}). O procedimento de geração de malha adaptativa é executado com uma passagem inicial com o critério 2D C52m (ICRIT0 = 5), seguido de avaliações com o critério C52i (ICRIT1 = 5), com análise da aproximação FD da primeira derivada espacial da solução (K = 1), e aplicação do critério de colocação 1D C1 σ (L = 1). As tolerâncias associadas ao procedimento de geração de malha são fixadas em 0.25 (GTOL(1) = GTOL(2) = 0.25), enquanto que as operações de interpolação são realizadas por splines cúbicas (NINTP = 1), com sete pontos (NPINT = 7). O algoritmo utiliza avaliações das derivadas espaciais efectuadas por aproximações de diferenças finitas (NDISC = 0). Assim o valor do parâmetro NSCHEME referente à definição do limitador de fluxo associado a aproximações NVSF, torna-se irrelevante. No entanto, tal não dispensa a realização da respectiva especificação de NSCHEME, assumido como dummy. Finalmente, a malha de nível de resolução mais reduzido é gerada internamente (NGRID = 0), como uma malha uniforme com 2^{MX} intervalos de tamanho constante em x, e 2^{MY} intervalos do mesmo tipo em y.

Assim, as informações referentes às condições pretendidas para a execução são introduzidas no código. De forma equivalente ao descrito para o caso do programa unidimensional, a definição das características específicas do modelo em si é realizada pela associação ao programa de três subrotinas e uma função adicionais. As rotinas correspondentes à descrição do modelo em estudo são resumidas na Figura B.9.

```

SUBROUTINE MODELINIT(U,X,Y)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

COMMON/SPACE/XE,XD,YE,YD

U=1.D0

RETURN

END

C *****

SUBROUTINE BOUNDARY(KI,I,J,T,LE,LD,Y,YB)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION Y(2),YB(2)

LE=0
LD=0

IF(KI.NE.0)THEN
LE=1
LD=0

YB(1)=0.D0
ENDIF

RETURN

END

C *****

SUBROUTINE MODEL(NP,T,Y,DY,F)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
DIMENSION Y(100000)

```

```

DIMENSION F(100000)
DIMENSION DY(100000,5)
DIMENSION ZX(100000),ZY(100000)

COMMON/SPACE/XE,XD,YE,YD
COMMON/PROBC/ZX,ZY

ALFA=1.D0
DELTA=20.D0
R=5.D0
Da=R*DEXP(DELTA)/(ALFA*DELTA)

DO I=1,NP

IF(ZX(I).EQ.XD.OR.ZY(I).EQ.YD)THEN

F(I)=0.D0

ELSE

F(I)=0.01D0*(DY(I,1)+DY(I,2))+Da*(1.D0+ALFA-Y(I))*
$      DEXP(-DELTA/Y(I))

ENDIF

END DO

RETURN

END

C *****

DOUBLE PRECISION FUNCTION F1(J,Y)
DOUBLE PRECISION Y
INTEGER J

F1=Y

END

```

Figura B.9 Exemplo do conjunto de subrotinas fornecidas pelo utilizador (modelo de combustão 2D).

Na subrotina MODELINIT é introduzida a condição inicial do problema (U) em todas posições X e Y que definem a malha seleccionada. Neste caso, verifica-se que a solução inicial apresenta um perfil inicial constante unitário.

A subrotina BOUNDARY informa o código sobre as características gerais definidas para as fronteiras a que o modelo está sujeito. No caso de $KI = 0$, são disponibilizadas informações sobre o comportamento temporal da solução em cada fronteira. Neste caso, tal não se revela necessário e definem-se apenas os valores por defeito dos parâmetros LE e LD ($LE = LD = 0$). Por outro lado, para $KI = 1$ introduzem-se possíveis condições de primeira ordem estabelecidas pelo problema. Assim, em qualquer stencil de x ou de y definem-se uma condição de Neumann nula à esquerda ($LE = 1$ com $YB(1) = 0$), e uma evolução não especificada à direita ($LD = 0$). Novamente, se alguma das fronteiras for estabelecida como fixa (condição de Dirichlet), o valor dos parâmetros (LE para a fronteira esquerda e LD para a direita) deve ser nulo.

Na subrotina MODEL são introduzidas as expressões referentes à função F do modelo (correspondente ao modelo geral – vd. equação B.6). O valor dessas funções é definido na variável F , para cada nodo I . Assim, estabelecem-se as condições referentes às fronteiras da direita ($ZX(I) = XD$ ou $ZY(I) = YD$) que correspondem a variações temporais nulas ($F(I) = 0$), já que nestas fronteiras são definidas condições de Dirichlet. Nos casos restantes atribui-se a expressão generalizada da função do modelo. Para a aplicação

desta função, é necessário definir os valores de quatro parâmetros, ou seja $ALFA = 1$, $DELTA = 20$ e $R = 5$, enquanto Da é calculado com base nos anteriores.

Finalmente, na função F1 são especificadas possíveis funções dependentes da solução, passíveis de ser diferenciadas directamente. O exemplo descrito não apresenta este tipo de funções e, deste modo, a função F1 é estabelecida como a própria solução.

REFERÊNCIAS

1. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/rkf45/rkf45.html (consulta em 1/02/2010).
2. E. Fehlberg (1969) *Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control*, NASA Tech. Rep. R-315.
3. P.M.P. Brito (1998) *Aplicação de Métodos Numéricos Adaptativos na Integração de Sistemas Algébrico-diferenciais Caracterizados por Frentes Abruptas*, MSc Thesis, DEQ-FCTUC, Coimbra, Portugal.
4. B. Fornberg (1988) "Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids", *Math. Comput.*, **51** (184), pp. 699-706.
5. B. Fornberg (1992) "Fast generation of weights in finite difference formulas", in *Recent Developments in Numerical Methods and Software for ODEs/DAEs/PDEs*, (G.D. Byrne, W.E. Schiesser, eds.), World Scientific, Singapore, pp. 97-124.

PÁGINA EM BRANCO

ANEXO C

INTEGRADORES NUMÉRICOS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

C.1 DASSL – DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC SYSTEM SOLVER

O integrador implícito DASSL – Differential-Algebraic System Solver (Petzold, 1982[1], Brennan et al., 1989[2]) foi desenvolvido para a resolução de sistemas de equações diferenciais ou algébrico-diferenciais de índice inferior a um, da forma:

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{u}', t) = 0, t \in [t_0, T] \quad (\text{C.1})$$

sendo:

$\mathbf{u}(t)$ – vector estado, função da variável independente t (que geralmente, representa o tempo ou uma dimensão espacial; $\mathbf{u}' = \frac{d\mathbf{u}}{dt}$ – primeira derivada de \mathbf{u} em ordem a t).

A DASSL foi especialmente concebida para lidar com sistemas mistos de equações diferenciais e algébricas com características stiff e aplica uma estratégia preditiva-correctiva de ordem e passo variáveis, desenvolvida por Gear, 1971[3]. O vector de derivadas \mathbf{u}'_{n+1} (correspondente ao tempo t_{n+1}) é aproximado, no estágio corrector, por uma fórmula de diferenças finitas backward, sendo o sistema de equações algébricas resultante, resolvido para o vector estado \mathbf{u}_{n+1} , através de um método de Newton modificado. O tamanho do passo e a ordem de integração são ajustados automaticamente, de forma a possibilitar uma melhoria na performance do processo, dentro dos limites determinados pela tolerância definida por parte do utilizador, para o erro admissível em cada passo.

No que concerne aos parâmetros directamente relacionados com o integrador (vd. Anexo B), os códigos desenvolvidos neste trabalho, apenas requerem por parte do utilizador, a definição das respectivas tolerâncias de integração, que de uma forma geral, limitam o erro tolerável máximo na execução de cada passo, da forma:

$$|\text{ErroLocal}| \leq ATOL + RTOL \times |u| \quad (\text{C.2})$$

em que: *ATOL* – tolerância absoluta; *RTOL* – tolerância relativa.

Em cada passo, as chamadas do integrador realizadas a partir do código, são efectuadas na sua forma standard, ou seja, sem que qualquer das opções adicionais possíveis de utilizar, esteja activada ($INFO(i) = 0, i = 1, \dots, 15$). Este facto implica que, entre outras coisas, a matriz jacobiana das derivadas parciais não seja fornecida na sua forma analítica, tendo obrigatoriamente de ser aproximada pelo integrador através de diferenças finitas, para além de outros pormenores que, em casos particulares, poderiam melhorar o desempenho do integrador.

O integrador DASSL está incorporado em numerosas aplicações de nível superior (por exemplo, SCILAB[4] ou OCTAVE[5]), podendo ser acedido de forma directa e estandardizada a partir dessas plataformas.

Neste trabalho, utiliza-se uma rotina fortran definida em dupla precisão do software DASSL, *ddassl.f*. Informações adicionais acerca do software podem ser facilmente obtidas através da consulta das instruções disponíveis na introdução do próprio código fonte[6] ou nos numerosos sítios que possibilitam o download do programa, e.g. [7].

REFERÊNCIAS

1. L.R. Petzold (1982) *A description of DASSL: a differential/algebraic system solver*, Sandia Tech. Rep. **82-8637**.
2. K.E. Brennan, S.L. Campbell, L.R. Petzold (1989) *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, North-Holland, New York.
3. C.W. Gear (1971) "Simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations", *IEEE Trans. Circuit Theory*, **18** (1), pp. 89-95.
4. <http://www.scilab.org/product/man/dassl.html> (consulta em 1/02/2010).
5. http://www.gnu.org/software/octave/doc/interpreter/Differential_002dAlgebraic-Equations.html#Differential_002dAlgebraic-Equations (consulta em 1/02/2010).
6. <http://www.netlib.org/ode/ddassl.f> (consulta em 1/02/2010).
7. <http://pitagora.dm.uniba.it/~testset/solvers/dassl.php> (consulta em 1/02/2010).

C.2 RKF45 – RUNGE-KUTTA-FEHLBERG

O integrador RKF45 foi primordialmente desenvolvido por H.A. Watts e L.F. Shampine[1], para a resolução de sistemas de equações diferenciais explícitos, moderadamente ou não stiff, com o formato genérico:

$$\frac{du_i}{dt} = f(t, u_1, u_2, \dots, u_{neq}) \quad (C.3)$$

em que, neq corresponde à dimensão do vector solução \mathbf{u} disponível para um determinado tempo t .

A rotina RKF45 implementa um método de integração de sistemas de ODE's do tipo Runge-Kutta (RK), apresentado por E. Fehlberg[2] em 1969, e desse modo designado por método de Runge-Kutta-Fehlberg (4,5) ou quarta-quinta ordem. O esquema baseia-se na comparação entre os resultados obtidos pela implementação de dois métodos Runge-Kutta (de quarta e quinta ordem, respectivamente) como forma de realizar a estimativa de uma medida do erro, que possibilite um controlo do passo de integração, ou seja que avalie a adequação do passo utilizado.

Assim, considerem-se os parâmetros seguintes definidos a partir da solução no nível de tempo t_i [3]:

$$k_1 = hf(t_i, u_i), \quad (C.4)$$

$$k_2 = hf\left(t_i + \frac{1}{4}h, u_i + \frac{1}{4}k_1\right), \quad (C.5)$$

$$k_3 = hf\left(t_i + \frac{3}{8}h, u_i + \frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right), \quad (C.6)$$

$$k_4 = hf\left(t_i + \frac{12}{13}h, u_i + \frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right), \quad (C.7)$$

$$k_5 = hf\left(t_i + h, u_i + \frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right), \quad (C.8)$$

$$k_6 = hf\left(t_i + \frac{1}{2}h, u_i - \frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right), \quad (C.9)$$

em que h corresponde ao um passo de integração arbitrário. Para o mesmo h , aplicam-se os parâmetros k_i na avaliação de uma aproximação à solução através de um método RK de quarta ordem[3]:

$$u_{i+1}^4 = u_i + \frac{25}{216}k_1 + \frac{1408}{2565}k_3 + \frac{2197}{4104}k_4 - \frac{1}{5}k_5, \quad (C.10)$$

e de um esquema RK de quinta ordem,

$$u_{i+1}^5 = u_i + \frac{16}{135}k_1 + \frac{6656}{12825}k_3 + \frac{28561}{56430}k_4 - \frac{9}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6. \quad (C.11)$$

Se os dois valores anteriores se compararem num determinado nível de precisão pretendida, a solução obtida é aceite. No entanto, se a diferença calculada não verificar o critério de convergência pré-estabelecido, o passo é diminuído. Finalmente, se a concordância exceder um número de dígitos significativos para além da precisão requerida, o passo de integração é aumentado.

Assim, um passo óptimo sh é determinado a partir do passo actual h , sendo s dado por[3]:

$$s = \left(\frac{\varepsilon h}{2|u_{i+1}^5 - u_{i+1}^4|} \right)^{1/4} \quad (\text{C.12})$$

onde ε corresponde a uma tolerância especificada para controlo do erro.

A versão do programa utilizada RKF45.f no trabalho presente foi obtida através de download a partir de [4].

REFERÊNCIAS

1. L. Shampine, H. Watts, S. Davenport (1976) "Solving non-stiff ordinary differential equations - The state of the art", *SIAM Rev.*, **18** (3), pp. 376-411.
2. E. Fehlberg (1969) *Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control*, NASA Tech. Rep. **R-315**.
3. <http://math.fullerton.edu/mathews/n2003/RungeKuttaFehlbergMod.html>(consulta em 1/02/2010).
4. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/rkf45/rkf45.html (consulta em 1/02/2010).