



Universidade do Estado do Rio de Janeiro  
Instituto Politécnico

## **PROBLEMAS INVERSOS SOBRE A ESFERA**

**FÁBIO FREITAS FERREIRA**

Nova Friburgo, RJ, Brasil

2008

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

# PROBLEMAS INVERSOS SOBRE A ESFERA

**FÁBIO FREITAS FERREIRA**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador:

Francisco Duarte Moura Neto

Nova Friburgo, RJ, Brasil

2008

*À minha família (o alicerce da vida).*

# Agradecimentos

Agradeço às seguintes pessoas e instituições que proporcionaram o suporte necessário para que esta tese fosse realizada:

Aos meus familiares, que sempre estiveram ao meu lado para que tudo fosse possível.

Ao meu orientador, Dr. Francisco Duarte Moura Neto, que exerceu seu trabalho de forma esplendida durante estes sete anos.

À Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ, que me acolheu durante doze anos e meio.

Ao Instituto Politécnico, IPRJ, onde concluí meus trabalhos de mestrado e doutorado.

À todos os amigos, principalmente aqueles que estiveram ao meu lado durante esta jornada, fazendo com que as minhas baterias fossem recarregadas a cada dia.

À três amigos em especial que me deram muita força e contribuição durante o curso: Fábio Gonçalves, Antônio Espósito e Gustavo Baldi.

À todos os professores e funcionários técnico-administrativo do IPRJ.

Aos meus alunos da FACNEC que acompanharam o meu último ano de curso, e me compreenderam em alguns momentos de ausência.

*“Panta tà gignoskómena arithmòn exonti - Todas as coisas se tornam conhecidas pelos números.”*

(Frag. 3 de Filolau, cit. por Diels)

# Resumo

O objetivo desta tese é o desenvolvimento de algoritmos para determinar as soluções, e para determinação de fontes, das equações de Poisson e da condução de calor definidas em uma esfera. Determinamos as formas das equações de Poisson e de calor sobre a esfera, e desenvolvemos métodos iterativos, baseados em uma malha icosaedral e sua respectiva malha dual, para obter as soluções das mesmas. Mostramos que os métodos iterativos convergem para as soluções das equações discretizadas. Empregamos o método de regularização iterada de Alifanov para resolver o problema inverso, de determinação de fonte, definido na esfera.

**Palavras-chave:** Malha icosaedral, Problema inverso, Métodos numéricos, Equação de Poisson, Equação de calor

# Abstract

The objective of this thesis is the development of algorithms to determine the solutions, and for determination of sources of, the equations of Poisson and heat conduction for a sphere. We establish the form of equations of Poisson and heat on the sphere, and developed iterative methods, based on a icosaedral mesh and it's dual mesh, to obtain the solutions for them. It is shown that the iterative methods converge to the solutions of the equations discretizadas. It employed the method of settlement of Alifanov iterated to solve the inverse problem, determination of source, set in the sphere.

**Keywords:** Icosaedral grid, Inverse problem, Numerical methods, Poisson equation's, Heat equation's

# Lista de Figuras

2.1	Coordenadas esféricas . . . . .	7
2.2	Parametrização da superfícies $S: f = (f_1, f_2, f_3)$ ; $F$ é uma função escalar e $G = F \circ f$ . Os vetores $\vec{t}_1$ e $\vec{t}_2$ são tangentes a $S$ em $P$ . . . . .	8
3.1	Icosaedro regular inscrito na esfera . . . . .	25
3.2	Icosaedro regular de Platão dividido em três partes: pirâmide superior, pirâmide inferior e troço prismático. A altura da face, que é um triângulo equilátero, é representada, por $h_2$ . . . . .	26
3.3	Projeção ortogonal da base e do topo do troço do icosaedro no plano $xy$ . . . . .	28
3.4	Uma representação da esfera circunscrita ao icosaedro. . . . .	29
3.5	(a) Triângulo da malha de nível $n$ ; (b) refinamento diádico de nível $n + 1$ . . . . .	32
3.6	Refinamento diádico da malha icosaedral desde o nível 0 até o nível 6. . . . .	35
3.7	Malha dual de nível 0: dodecaedro. . . . .	36
3.8	(a) Elementos necessários para determinar o vértice da malha dual; (b) face da malha dual em função das faces adjacentes da malha icosaedral. . . . .	37
3.9	Malha icosaedral e dual de níveis (a) 1 e (b) 2. . . . .	38
3.10	Malha dual do refinamento diádico da malha icosaedral desde o nível 0 até o nível 6. . . . .	42

4.1	Representação de uma célula obtida pela interseção da malha icosaedra e da malha dual, em torno de um vértice da malha icosaedra: (a) Face da malha dual: potencial central, fluxos e potenciais nos bissetores; (b) área da face, fonte no vértice central, e comprimento das arestas. . . . .	44
4.2	Fluxos dados em $F'$ e $\tilde{F}'$ . . . . .	47
4.3	(a) Construção da rede a partir da malha icosaedra, com a condutância definida com a intervenção da malha dual; (b) $w_i = -\tilde{w}_i$ . A quantidade $d_j + \tilde{d}_j$ é uma aproximação da distância entre os nós da malha icosaedra. . . . .	52
4.4	Representação da matriz do sistema, $-A^T GA$ . São indicadas as posições não nulas nos níveis: (a) 0; (b) 1; (c) 2. . . . .	54
5.1	Fluxograma do algoritmo iterativo. . . . .	60
6.1	Células computacionais. A área é denotada por $A_i$ e a fonte no centro da célula por $f_i$ : (a) célula hexagonal - o numerador local $j$ varia de 1 a $m_i = 6$ ; (b) célula pentagonal - o numerador local varia de 1 a $m_i = 5$ . . . . .	64
7.1	Solução com o termo fonte nulo na malha de nível 3. . . . .	74
7.2	Relação entre o nível da malha icosaedra e o parâmetro $\beta$ . . . . .	82
7.3	Relação entre o nível da malha icosaedra e a quantidade de iterações do algoritmo. . . . .	83
7.4	$\log \mathcal{E}_n \times \log \mathcal{V}_n$ . . . . .	84
7.5	(a) Comportamento da convergência numérica do método para a malha de nível 4; (b) Zoom entre a interação 50 e 60. . . . .	84
7.6	(a) Erro cometido para várias tolerâncias do critério de parada; (b) As melhores tolerâncias obtidas. . . . .	85
7.7	Erro entre as soluções obtidas com a variação do parâmetro $k$ e a solução analítica do problema. . . . .	85
7.8	Erros $q_1$ , $q_2$ e $q_\infty$ dos erros nos níveis de 0 a 6 na solução numérica. . . . .	86

7.9	Nível 0: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	87
7.10	Nível 1: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	88
7.11	Nível 2: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	89
7.12	Nível 3: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	90
7.13	Nível 4: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	91
7.14	Nível 5: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de $90^0$ em torno do eixo $z$ . . . . .	92
9.1	(a) Termo fonte do problema direto; (b) Termo fonte do problema direto - translação de $180^0$ . . . . .	103

9.2	(a) Termo fonte estimado com apenas dois sensores: um no polo norte e outro no polo sul da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com apenas dois sensores: um no polo norte e outro no polo sul da esfera - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.	104
9.3	(a) Termo fonte estimado com seis sensores: três no polo norte e outros três no polo sul da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com seis sensores: três no polo norte e outros três no polo sul da esfera - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	105
9.4	(a) Termo fonte estimado com doze sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com doze sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	106
9.5	(a) Termo fonte do problema direto; (b) Termo fonte do problema direto - translação de $180^0$ . . . . .	107
9.6	(a) Termo fonte estimado com 136 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 136 sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	108
9.7	(a) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 162 sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	109
9.8	(a) Termo fonte estimado com apenas dois sensores posicionados no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com apenas dois sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	110

9.9	(a) Termo fonte estimado com seis sensores posicionados um no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com seis sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	111
9.10	(a) Termo fonte estimado com doze sensores, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com doze sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	112
9.11	(a) Termo fonte estimado com 54 sensores posicionados no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 54 sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	113
9.12	(a) Termo fonte estimado com 108 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 108 sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	114
9.13	(a) Termo fonte estimado com 135 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 135 sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	115
9.14	(a) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 162 sensores - rotação de $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original. . . . .	116

9.15	(a) Termo fonte estimado - 162 sensores - dados experimentais: solução analítica do problema direto; (b) dados experimentais: solução numérica do problema direto; (c) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados da solução analítica do problema direto; - rotação de $180^0$ ; (d) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados da solução numérica do problema direto; - rotação de $180^0$ ; (e) erro absoluto entre a fonte estimada, dados experimentais da solução analítica, e a fonte original; (f) erro absoluto entre a fonte estimada, dados experimentais da solução numérica, e fonte original. . . . .	117
10.1	Representação da malha na semi-discretização temporal. . . . .	119
12.1	Condição inicial da equação do calor. . . . .	135
12.2	Solução numérica da equação do calor: (a) Condição inicial; (b) primeiro instante de tempo após a condição inicial. . . . .	136
12.3	Solução numérica da equação do calor: (a) para o instante de tempo 1; (b) para o instante de tempo 2. . . . .	136
12.4	Solução numérica da equação do calor: (a) para o instante de tempo 3; (b) para o instante de tempo 4. . . . .	137
12.5	$\int_{S^2} u dS(x)$ : (a) no tempo inicial $t = 0$ ; (b) no tempo final $t = 4$ . . . . .	137
12.6	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 0; (b) malha de nível 1. . . . .	139
12.7	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 2; (b) malha de nível 3. . . . .	139
12.8	Norma da diferença das soluções numéricas entre dois níveis consecutivos da malha. . . . .	140
12.9	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) $\Delta t = 1$ ; (b) $\Delta t = 0, 1$ ; (c) $\Delta t = 0, 01$ . . . . .	140
12.10	Termo fonte utilizado para aquecer a esfera constantemente. . . . .	141

12.11	Solução numérica da equação do calor: (a) Condição inicial; (b) primeiro instante de tempo, $t = 0, 1$ , após a condição inicial. . . . .	142
12.12	Solução numérica da equação do calor: (a) instante de tempo 1; (b) instante de tempo 2. . . . .	142
12.13	Solução numérica da equação do calor: (a) instante de tempo 3; (b) instante de tempo 4. . . . .	143
12.14	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 0; (b) malha de nível 1. . . . .	143
12.15	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 2; (b) malha de nível 3. . . . .	144
12.16	Norma 1 da diferença entre as soluções numéricas de dois níveis consecutivos da malha. . . . .	144
12.17	Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) $\Delta t = 1$ ; (b) $\Delta t = 0, 1$ ; (c) $\Delta t = 0, 01$ . . . . .	145

## Lista de Tabelas

3.1	Quantidades referentes às malhas obtidas através do refinamento diádico.	34
3.2	Regularidade da malha icosaedra. . . . .	34
7.1	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 0 da malha. . . . .	76
7.2	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 1 da malha. . . . .	76
7.3	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 2 da malha. . . . .	77
7.4	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 3 da malha. . . . .	77
7.5	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 4 da malha. . . . .	78
7.6	Busca do parâmetro $\beta$ mais eficiente para o nível 5 da malha. . . . .	78
7.7	Resumo dos melhores valores para $\beta$ . . . . .	79
12.1	$\int_{S^2} u dS(x)$ . . . . .	138
12.2	$\int_{S^2} u dS(x)$ da solução obtida com o nível 3 da malha. . . . .	138

# Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xvii
<b>1</b> Introdução	<b>1</b>
<b>2</b> O problema de Poisson e a equação de condução de calor na esfera	<b>5</b>
2.1 Introdução . . . . .	6
2.2 Coordenadas esféricas . . . . .	6
2.3 Parametrização de uma superfície e a matriz da métrica . . . . .	7
2.4 O operador gradiente na esfera . . . . .	11
2.4.1 O operador gradiente em uma superfície . . . . .	11
2.4.2 O gradiente na esfera . . . . .	13
2.5 O operador divergente na esfera . . . . .	15
2.5.1 Relação entre o gradiente e o divergente em $\mathbb{R}^3$ . . . . .	15
2.5.2 O divergente em uma superfície . . . . .	17
2.5.3 O divergente na esfera . . . . .	19
2.6 O operador Laplaciano na esfera . . . . .	20

2.7	A equação de Poisson e o sistema de Poisson de 1 <sup>a</sup> ordem . . . . .	21
2.8	A equação de condução do calor . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Malhas duais na esfera</b>	<b>24</b>
3.1	A malha icosaedral . . . . .	25
3.2	Refinamento diádico . . . . .	31
3.3	Malha dual . . . . .	36
<b>4</b>	<b>Discretização do problema de Poisson</b>	<b>43</b>
4.1	Equações discretizadas . . . . .	43
4.2	Condições de interface . . . . .	46
4.3	Mudança de variável . . . . .	47
4.4	Representação matricial do sistema de Poisson . . . . .	49
4.5	Existência e unicidade . . . . .	53
4.5.1	Unicidade . . . . .	53
4.5.2	Existência . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Método iterativo</b>	<b>56</b>
5.1	Introdução . . . . .	56
5.2	Algoritmo iterativo . . . . .	58
5.3	Autovalores de Steklov . . . . .	60
<b>6</b>	<b>Estudo analítico da convergência do método iterativo</b>	<b>63</b>
6.1	Formulação do problema de convergência . . . . .	63
6.2	Demonstração da convergência do método iterativo . . . . .	65

<b>7</b>	<b>Solução numérica do problema de Poisson</b>	<b>72</b>
7.1	Erros . . . . .	72
7.2	Termo fonte nulo . . . . .	73
7.3	Solução particular . . . . .	73
7.4	Parâmetro $\beta$ . . . . .	74
7.5	Taxa de convergência . . . . .	79
7.6	Tolerância para o critério de parada . . . . .	79
7.7	Termo fonte transladado . . . . .	80
7.8	Comparação das soluções . . . . .	81
<b>8</b>	<b>Problema estacionário de estimação de fonte na esfera</b>	<b>93</b>
8.1	Problema de Poisson e formulação do problema inverso . . . . .	93
8.2	Procedimento de minimização - gradiente conjugado . . . . .	94
8.3	Problema de sensibilidade . . . . .	95
8.4	Problema adjunto . . . . .	96
8.5	Tamanho do passo de busca . . . . .	100
8.6	Algoritmo iterativo . . . . .	101
<b>9</b>	<b>Resultados numéricos do problema estacionário de estimação de fonte sobre a esfera</b>	<b>102</b>
9.1	Resultados numéricos . . . . .	102
9.1.1	Sensores de temperatura posicionados no polo norte e no polo sul da esfera . . . . .	103
9.1.2	Sensores de temperatura posicionados no polo norte . . . . .	103
9.1.3	Fonte de dados diferentes . . . . .	105

<b>10 Equação de condução de calor sobre a esfera</b>	<b>118</b>
10.1 Equação do calor . . . . .	118
10.2 Equações discretizadas . . . . .	119
10.2.1 Semi-discretização temporal . . . . .	119
10.2.2 Discretização espacial . . . . .	120
10.2.3 Condições de interface . . . . .	122
10.2.4 Mudança de variável . . . . .	122
10.3 Representação matricial, existência e unicidade . . . . .	124
10.4 Método iterativo . . . . .	125
<b>11 Análise da convergência do método iterativo para a equação do calor</b>	<b>128</b>
11.1 Formulação do problema de convergência . . . . .	128
11.2 Demonstração da convergência do método iterativo . . . . .	129
<b>12 Solução numérica da equação de condução do calor</b>	<b>134</b>
12.1 Caso 1 . . . . .	135
12.2 Caso 2 . . . . .	140
<b>13 Problema inverso para a equação de condução de calor</b>	<b>146</b>
13.1 Problema de condução de calor . . . . .	146
13.2 Formulação matemática . . . . .	147
13.3 Problema de sensibilidade . . . . .	147
13.4 Problema adjunto e determinação do gradiente . . . . .	148
13.5 Tamanho do passo de busca . . . . .	152
13.6 Algoritmo iterativo . . . . .	153

14 Conclusão

154

Referências Bibliográficas

156

# Capítulo 1

## Introdução

Este trabalho contempla o estudo da equação do calor na superfície esférica. São consideradas as situações estacionárias, através da equação de Poisson, e as situações transientes.

A equação do calor e a de difusão de massa em uma região têm a mesma forma matemática, sendo a interpretação dos termos diversa dependendo da aplicação que se tem em mente.

A equação de difusão de massa na esfera é utilizada no estudo de substâncias em películas. A atividade de exploração de petróleo envolve a produção de misturas de óleo, gás e água, além de eventuais sólidos, a partir das rochas reservatório no subsolo até as instalações de processamento primário, onde ocorre a separação destas fases para posterior encaminhamento aos respectivos destinos, já como fluidos monofásicos.

Durante este percurso, os fluidos que inicialmente se encontravam segregados, sofrem cisalhamentos mais ou menos intensos e se misturam, assumindo a conformação de uma fase descontínua, na forma de gotículas ou bolhas, no seio de outra fase, dita contínua.

Imediatamente após a formação destas misturas, substâncias tensoativas presentes tendem a migrar para a região de interface entre as fases, e, uma vez na interface, espalham-se por toda a superfície, num processo de difusão.

Esta difusão acarreta o que se denomina o envelhecimento da mistura ou emulsão,

que tende a estabilizá-la dificultando os processos subseqüentes de separação das fases. A avaliação dos tempos necessários a este envelhecimento é um dado bastante importante no dimensionamento das instalações de processamento primário, bem como um indicador das dificuldades a serem esperadas nos processos de separação.

Consideramos, neste trabalho, o problema de difusão de massa sobre a esfera. A equação de difusão de massa também se aplica a problemas na atmosfera que envolve a Terra. Outras equações, como as equações de águas rasas (EAR), também são estudadas sobre uma superfície esférica. No caso das EAR, trata-se de estudar efeitos de circulação atmosférica.

O objetivo desta tese é o desenvolvimento de algoritmos para resolver as equações de Poisson e de condução de calor (ou difusão de massa) definidas em uma esfera, bem como para determinar os termos de fonte na equação de Poisson.

No capítulo 2 apresentamos as equações de Poisson e de calor sobre a esfera. Para tanto, primeiramente, determinamos a forma dos operadores gradiente e divergente sobre uma superfície qualquer, através de uma parametrização, e particularizando em seguida para o caso de uma esfera, de raio 1. Obtemos então o operador Laplaciano sobre a mesma.

Para a resolução dos problemas de Poisson e de calor sobre esfera, necessitamos de uma malha sobre a mesma. Existem vários tipos de malha sobre a esfera. Se observarmos a malha definida pela projeção de Mercator para mapa mundi, por exemplo, verificamos que a malha sobre o globo terrestre acumula uma quantidade de pontos muito grande nos polos norte e sul, ao passo que há uma rarefação de pontos na linha do equador. Também poderíamos trabalhar com uma malha de Voronoi-Delaunay obtida a partir de uma triangulação arbitrária de Delaunay, da esfera. No entanto não obteríamos a quase regularidade que a malha escolhida proporciona. Desta forma, no capítulo 3 construímos uma malha baseada num icosaedro, chamada de malha icosaedral, apresentada por Baumgardner e Frederickson [1], assim como uma seqüência de malhas icosaedrais com refinamento diádico e as suas respectivas malhas duais sobre a esfera. Como o refinamento diádico é feito determinando o ponto médio de cada aresta, e projetando-os sobre a esfera, mantemos a quase regularidade. Esta malha icosaedral e sua respectiva malha dual tem um caráter Voronoi-Delaunay, [2] e [3]. Em outros problemas de resoluções de equações sobre a esfera também utiliza-se este tipo

malha. Podemos verificar nos trabalhos de Stuhne e Peltier [7], [8] e [9], a construção de malhas icosaedrais para obter uma discretização das equações de águas rasas sobre a esfera. Heikes e Randall, [22] e [23], apresentam uma discretização das equações de águas rasas sobre a esfera, utilizando uma malha icosaedral e sua respectiva malha dual modificada, com o objetivo de melhorar a solução das mesmas.

Após a construção da malha icosaedral e sua respectiva malha dual, discretizamos as equações de Poisson, capítulo 4, e de calor, capítulo 10, sobre a esfera. Esta discretização proposta é baseada no trabalho de Nicolaidis [12], que resolve o problema de divergente e rotacional envolvendo malhas duais sobre a esfera, e no trabalho de Gonçalves e Moura Neto [14] que fazem uma discussão aprofundada da discretização das equações de equilíbrio no plano, utilizando malhas duais. Aqui, as equações de Poisson e da condução do calor são reescritas como sistemas de equações de primeira ordem, onde uma equação é resolvida sobre a malha icosaedral, e a outra equação é resolvida sobre a malha dual, e através de condições de interface adequadas, elas trocam informações.

Nos capítulos 5 e 10, apresentamos dois métodos iterativos, baseados na equações discretizadas de Poisson e de calor, respectivamente, para determinar as suas soluções. Os algoritmos de resolução são obtidos fazendo troca de informações entre células computacionais vizinhas através de condições de interface. Nos capítulos 4 e 10, provamos a unicidade das equações discretizadas, impondo algumas restrições para garantir a existência da solução, quando necessário.

Mostramos, nos capítulos 6 e 11, baseado no trabalho desenvolvido por Douglas Jr. et al. [38], que os métodos iterativos convergem para as respectivas equações discretizadas. No capítulo 7 apresentamos os resultados numéricos obtidos para a equação de Poisson, e no capítulo 12 apresentamos os resultados da solução numérica para a equação do calor.

Após o trabalho desenvolvido para obter as soluções das equações discretizadas, dos problemas diretos, empregamos o método de regularização iterada de Alifanov, [36], [13], para resolver o problema inverso definido na esfera. Nos capítulos 8 e 13 são apresentadas as formulações para os problemas de determinação de fonte para as equações de Poisson e de calor, respectivamente. No capítulo 9 apresentamos os resultados numéricos obtidos para o problema de determinação de fonte da equação

de Poisson.

## Capítulo 2

# O problema de Poisson e a equação de condução de calor na esfera

O objetivo deste capítulo é determinar a forma da equação de Poisson e da equação de condução de calor ou difusão de massa na esfera  $S^2 \subset \mathbb{R}^3$ , de centro na origem e raio 1.

Começamos por definir os operadores gradiente, divergente e Laplaciano na esfera. Isto é necessário tanto para descrevermos o problema de Poisson e o da condução de calor em termos do operador Laplaciano na esfera como para apresentá-los, de forma alternativa e equivalente, em termos de operadores de primeira ordem.

Este capítulo é organizado da seguinte forma: Na primeira seção apresentamos, sem detalhes, o problema de Poisson e a equação de condução térmica na esfera. Na seção 2.2 estabelecemos a notação utilizada nas coordenadas esféricas. A seção seguinte discute a definição do gradiente em uma superfície qualquer e em seguida particularizamos para o caso da esfera. Segue-se então, na seção 2.5, uma apresentação do operador divergente em uma superfície, em especial na esfera. A partir do gradiente e do divergente em uma superfície obtemos o operador Laplaciano em uma superfície qualquer em termos de sua parametrização e o Laplaciano na esfera em termos das coordenadas esféricas. Finalmente, as duas últimas seções apresentam as equações de Poisson e de condução de calor.

## 2.1 Introdução

A equação de Poisson na esfera  $S^2$  é dada por

$$-\Delta_s u(x) = f(x) \ , \quad x \in S^2 \tag{2.1}$$

e a equação de condução térmica é

$$\begin{cases} u_t(x, t) = k\Delta_s u(x, t) + f(x) \ , \quad x \in S^2, t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) \ , \quad x \in S^2 \end{cases} \tag{2.2}$$

onde, em ambas as equações,  $u$  representa a distribuição de temperatura,  $f$  é um termo de fonte, e  $\Delta_s$  é o operador Laplaciano na esfera, enquanto que, na equação de condução térmica,  $k$  é condutividade térmica e  $u_0$  é a condição inicial (distribuição inicial de temperatura).

Se denotarmos os operadores  $\nabla_s$  e  $\text{div}_s$ , como sendo, respectivamente, o gradiente e o divergente na esfera, o Laplaciano é dado por

$$\Delta_s = \text{div}_s \nabla_s \ . \tag{2.3}$$

## 2.2 Coordenadas esféricas

Nesta seção estabelecemos a notação referente às coordenadas esféricas. Seja  $S^2(R)$  a esfera de raio  $R$  e centro na origem, isto é,

$$S^2(R) = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x^2 + y^2 + z^2 = R^2\} \ .$$

A esfera de raio 1,  $S^2(1)$ , é denotada simplesmente por  $S^2$ .

Do triângulo  $OPC$ , na figura 2.1, e dos triângulos retângulos,  $OAP'$ ,  $OBP'$  e  $OP'P$

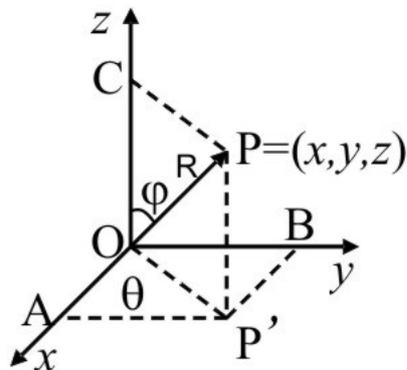


Figura 2.1: Coordenadas esféricas

obtemos,

$$z = R \cos \varphi , \quad (2.4)$$

$$x = R \operatorname{sen} \varphi \cos \theta , \text{ e} \quad (2.5)$$

$$y = R \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \theta , \quad (2.6)$$

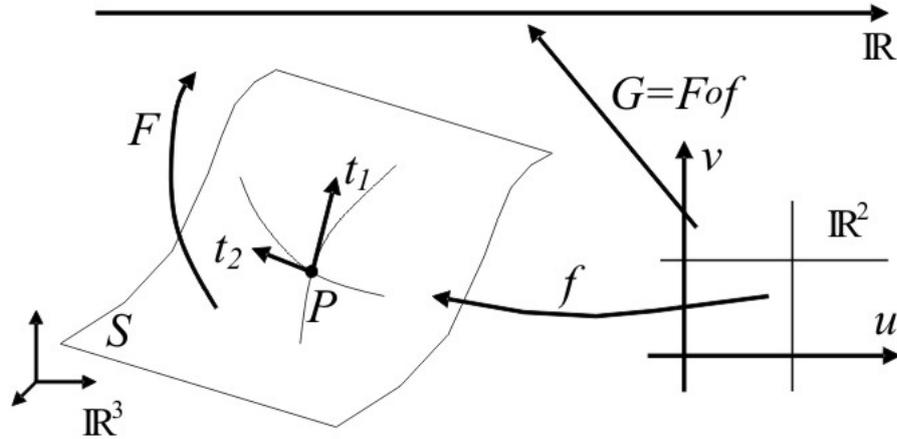
onde  $0 \leq \theta < 2\pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq \pi$  e  $R$  denota o comprimento do segmento  $\overline{OP}$ . Resumindo temos a relação entre as coordenadas ortogonais e as esféricas é dada por:

$$(x, y, z) = R (\operatorname{sen} \varphi \cos \theta, \operatorname{sen} \varphi \operatorname{sen} \theta, \cos \varphi) . \quad (2.7)$$

### 2.3 Parametrização de uma superfície e a matriz da métrica

Dada uma superfície  $S \subset \mathbb{R}^3$  qualquer, figura 2.2, considere uma parametrização definida pela função  $f$ ,

$$\mathbb{R}^2 \supset \mathcal{D} \ni (u, v) \xrightarrow{f} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(u, v) \\ f_2(u, v) \\ f_3(u, v) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 . \quad (2.8)$$



**Figura 2.2:** Parametrização da superfícies  $S$ :  $f = (f_1, f_2, f_3)$ ;  $F$  é uma função escalar e  $G = F \circ f$ . Os vetores  $\vec{t}_1$  e  $\vec{t}_2$  são tangentes a  $S$  em  $P$ .

Obtemos a seguir condições para que a parametrização seja conveniente para nosso uso.

Seja  $P = (x, y, z)$  um ponto da superfície  $S$ ,  $P \in S$ , então

$$P = (x, y, z) = (f_1(u, v), f_2(u, v), f_3(u, v)) \tag{2.9}$$

para um determinado valor dos parâmetros  $u$  e  $v$ . Obtemos uma base para o plano tangente,  $T_P S$ , à superfície  $S$  no ponto  $P$ ,

$$T_P S = \text{span}\{(x_u, y_u, z_u), (x_v, y_v, z_v)\} = \text{span}\{\vec{t}_1, \vec{t}_2\}$$

onde

$$\vec{t}_1 = (x_u, y_u, z_u) , \tag{2.10a}$$

$$\vec{t}_2 = (x_v, y_v, z_v) . \tag{2.10b}$$

Aqui  $\text{span}\{\vec{a}, \vec{b}\}$  denota o espaço vetorial gerado pelos vetores  $\vec{a}$  e  $\vec{b}$ , e, por exemplo,  $z_u$  denota a derivada parcial de  $z = f_3(u, v)$  em relação a  $u$ . Chamamos de  $\beta = \{\vec{t}_1, \vec{t}_2\}$  a base de  $T_P S$  obtida através da parametrização.

Seja  $\vec{w} \in T_P S \subset \mathbb{R}^3$ ,  $\vec{w} = (w_1, w_2, w_3)$ . Então  $\vec{w}$  pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos da base  $\beta$ , isto é,

$$\begin{aligned} \vec{w} &= w^1 \cdot (x_u, y_u, z_u) + w^2 \cdot (x_v, y_v, z_v) \\ &= w^1 \vec{t}_1 + w^2 \vec{t}_2 \\ &= (w^1, w^2)_\beta . \end{aligned} \tag{2.11}$$

Além de  $\vec{w}$ , seja também  $\vec{q} \in T_P S$ ,  $\vec{q} = (q^1, q^2)_\beta$ . Denote por  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  o produto interno em  $\mathbb{R}^3$ . Então

$$\begin{aligned} \langle \vec{w}, \vec{q} \rangle &= \langle w^1 \vec{t}_1 + w^2 \vec{t}_2, q^1 \vec{t}_1 + q^2 \vec{t}_2 \rangle \\ &= w^1 q^1 \langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle + w^1 q^2 \langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle + w^2 q^1 \langle \vec{t}_2, \vec{t}_1 \rangle + w^2 q^2 \langle \vec{t}_2, \vec{t}_2 \rangle \\ &= (w^1, w^2) \underbrace{\begin{pmatrix} \langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle & \langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle \\ \langle \vec{t}_2, \vec{t}_1 \rangle & \langle \vec{t}_2, \vec{t}_2 \rangle \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} q^1 \\ q^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.12}$$

Portanto, temos que, para vetores em  $T_P S$ , podemos representar o produto interno em termos das coordenadas relativas à base  $\beta$ . Para tanto é necessário a introdução da matriz  $M$ , a *matriz da métrica* ou *matriz do produto interno* em  $T_P S$ , em relação à base  $\beta$ , ou associada à parametrização dada pelas equações em (2.8),

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} \langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle & \langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle \\ \langle \vec{t}_2, \vec{t}_1 \rangle & \langle \vec{t}_2, \vec{t}_2 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle (x_u, y_u, z_u), (x_u, y_u, z_u) \rangle & \langle (x_u, y_u, z_u), (x_v, y_v, z_v) \rangle \\ \langle (x_v, y_v, z_v), (x_u, y_u, z_u) \rangle & \langle (x_v, y_v, z_v), (x_v, y_v, z_v) \rangle \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{2.13}$$

Para que uma matriz corresponda a uma métrica, ou produto interno, é necessário que ela seja uma matriz simétrica positiva definida. Pela estrutura de  $M$  dada na equação (2.13), sabemos que  $M$  é uma matriz simétrica; falta então verificar se também é positiva definida. Utilizaremos o critério de Sylvester para verificar esta condição.

Pelo critério de Sylvester, uma matriz é positiva definida se e somente se todos

os subdeterminantes crescentes, ao longo da diagonal principal, são positivos. Isto também acarreta em todos os autovalores serem positivos (de fato é equivalente).

Note que

$$\langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle > 0, \tag{2.14}$$

pois é assumido que, em todos os pontos da parametrização da superfície  $S$ , os vetores  $\vec{t}_1$  e  $\vec{t}_2$  formam uma base para o plano tangente,  $T_p S$ , à superfície  $S$ . Continuando com o critério de Sylvester, devemos ter que

$$\langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle \cdot \langle \vec{t}_2, \vec{t}_2 \rangle - \langle \vec{t}_2, \vec{t}_1 \rangle \cdot \langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle > 0,$$

ou seja,

$$|\langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle| < \|\vec{t}_1\| \cdot \|\vec{t}_2\| .$$

onde  $\|\vec{t}_1\| = (\langle \vec{t}_1, \vec{t}_1 \rangle)^{1/2}$ . Mas como, pela desigualdade de Schwartz, o ângulo  $\theta$  entre  $\vec{t}_1$  e  $\vec{t}_2$  é definido por

$$\cos \theta = \frac{|\langle \vec{t}_1, \vec{t}_2 \rangle|}{\|\vec{t}_1\| \cdot \|\vec{t}_2\|} , \text{ com } 0 \leq \theta \leq \pi ,$$

basta que

$$|\cos \theta| < 1, \tag{2.15}$$

condição que é assumida para a parametrização, uma vez que  $\vec{t}_1$  não é paralelo a  $\vec{t}_2$  (não é um múltiplo de  $\vec{t}_2$ ) pois formam uma base. As equações (2.14) e (2.15) são assumidas para quaisquer parametrizações de uma superfície.

Seja  $G = F \circ f$ , veja figura 2.2. Pela parametrização, temos

$$G(u, v) = F(x(u, v), y(u, v), z(u, v)) ,$$

e derivando  $G$  em relação a  $u$  e a  $v$  obtemos, pela regra da cadeia, que

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial u} &= \frac{\partial F}{\partial x} \cdot x_u + \frac{\partial F}{\partial y} \cdot y_u + \frac{\partial F}{\partial z} \cdot z_u \\ &= \left( \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right) \cdot (x_u, y_u, z_u), \end{aligned} \tag{2.16a}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial v} &= \frac{\partial F}{\partial x} \cdot x_v + \frac{\partial F}{\partial y} \cdot y_v + \frac{\partial F}{\partial z} \cdot z_v \\ &= \left( \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right) \cdot (x_v, y_v, z_v). \end{aligned} \tag{2.16b}$$

Aqui, por exemplo,  $\frac{\partial F}{\partial y}$  denota a derivada parcial de  $F$  em relação a  $y$ . Assim, as derivadas parciais de  $G$  são obtidas das derivadas parciais de  $F$  e da base de  $T_P S$ .

## 2.4 O operador gradiente na esfera

Nesta seção, obtemos a forma do operador gradiente,  $\nabla_S$ , sobre uma esfera, em função de uma parametrização. Inicialmente consideramos o problema para uma superfície  $S$  qualquer, e depois restringimos ao caso de  $S^2$ .

### 2.4.1 O operador gradiente em uma superfície

Agora que temos essas informações, vamos focar diretamente no operador gradiente em uma superfície.

Seja  $F : S \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ , uma função escalar definida na superfície  $S$ . A derivada direcional de  $F$  no ponto  $P$  na direção do vetor  $\vec{w} \in T_P S \subset \mathbb{R}^3$ , é, por definição,

$$\begin{aligned} dF_P(\vec{w}) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{F(P + h\vec{w}) - F(P)}{h} \\ &= \frac{\partial F}{\partial x} w_1 + \frac{\partial F}{\partial y} w_2 + \frac{\partial F}{\partial z} w_3 \\ &= \left\langle \left( \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right), (w_1, w_2, w_3) \right\rangle. \end{aligned} \tag{2.17}$$

Aqui,  $dF_P$  representa a derivada da função  $F$  no ponto  $P$ .

Por definição, o gradiente é o vetor que representa a derivada direcional em relação ao produto interno. Denotamos por  $\nabla_S F$  o gradiente de  $F$  na superfície  $S$ . Então, a equação (2.17) pode ser reescrita como

$$dF_P(\vec{w}) = \langle \nabla_S F, \vec{w} \rangle . \quad (2.18)$$

Escrevendo  $\nabla_S F$  na base  $\beta$

$$\nabla_S F = (H^1, H^2)_\beta = H^1 \vec{t}_1 + H^2 \vec{t}_2 ,$$

e usando, da equação (2.11), que  $\vec{w} = (w^1, w^2)_\beta$  temos, pela equação (2.12), que

$$\langle \nabla_S F, \vec{w} \rangle = (H^1, H^2) M \begin{pmatrix} w^1 \\ w^2 \end{pmatrix} . \quad (2.19)$$

Iremos agora obter uma expressão para  $H^1$  e  $H^2$ . Pelas equações (2.17), (2.18) e (2.19), temos que

$$\frac{\partial F}{\partial x} w_1 + \frac{\partial F}{\partial y} w_2 + \frac{\partial F}{\partial z} w_3 = (H^1, H^2) M \begin{pmatrix} w^1 \\ w^2 \end{pmatrix}$$

ou

$$\langle \nabla F, \vec{w} \rangle = (w^1 \ w^2) M \begin{pmatrix} H^1 \\ H^2 \end{pmatrix} , \quad (2.20)$$

onde

$$\nabla F = \left( \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z} \right)^t$$

e, recordamos

$$\vec{w} = (w_1, w_2, w_3) = w^1 \vec{t}_1 + w^2 \vec{t}_2 . \quad (2.21)$$

Então,

$$\begin{aligned}
 \langle \nabla F, \vec{w} \rangle &= \langle \nabla F, w^1 \vec{t}_1 + w^2 \vec{t}_2 \rangle \\
 &= w^1 \langle \nabla F, \vec{t}_1 \rangle + w^2 \langle \nabla F, \vec{t}_2 \rangle \\
 &= (w^1 \ w^2) \begin{pmatrix} \langle \nabla F, \vec{t}_1 \rangle \\ \langle \nabla F, \vec{t}_2 \rangle \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

De (2.20) e (2.22), que são válidas para todo  $(w^1, w^2)$ , concluímos que

$$M \begin{pmatrix} H^1 \\ H^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \vec{t}_1, \nabla F \rangle \\ \langle \vec{t}_2, \nabla F \rangle \end{pmatrix}, \tag{2.23}$$

donde

$$\begin{pmatrix} H^1 \\ H^2 \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} \langle \vec{t}_1, \nabla F \rangle \\ \langle \vec{t}_2, \nabla F \rangle \end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

Assim obtemos as coordenadas do gradiente superficial de  $F$  com relação à base  $\beta = \{\vec{t}_1, \vec{t}_2\}$ ,

$$\nabla_s F = (H^1, H^2)_\beta. \tag{2.25}$$

Finalmente observamos que, se considerarmos a composição de  $F$  com a parametrização, veja equação (2.16), pode-se escrever

$$\begin{pmatrix} H^1 \\ H^2 \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial G}{\partial u} \\ \frac{\partial G}{\partial v} \end{pmatrix}. \tag{2.26}$$

### 2.4.2 O gradiente na esfera

Vamos considerar, neste momento, a esfera conforme descrita na seção 2.2. Neste caso, das equações (2.7) e (2.10), a base  $\beta$ , com relação às coordenadas esféricas  $(\varphi, \theta)$ , é

dada da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \vec{t}_1 &= \left( \frac{\partial x}{\partial \varphi}, \frac{\partial y}{\partial \varphi}, \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) \\ &= R (\cos \varphi \cos \theta, \cos \varphi \sin \theta, -\sin \varphi) \end{aligned} \quad (2.27a)$$

$$\begin{aligned} \vec{t}_2 &= \left( \frac{\partial x}{\partial \theta}, \frac{\partial y}{\partial \theta}, \frac{\partial z}{\partial \theta} \right) \\ &= R (-\sin \varphi \sin \theta, \sin \varphi \cos \theta, 0) . \end{aligned} \quad (2.27b)$$

Conseqüentemente, pelas equações (2.13) e (2.27), a matriz da métrica,  $M$ , na esfera é

$$M = \begin{pmatrix} R^2 & 0 \\ 0 & R^2 \sin^2 \varphi \end{pmatrix} .$$

A sua inversa é dada por

$$M^{-1} = \frac{1}{R^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sin^2 \varphi} \end{pmatrix} . \quad (2.28)$$

Assim, pelas equações (2.26) e (2.28), as coordenadas, do operador gradiente, na superfície esférica em relação à base definida pela parametrização das coordenadas esféricas são dadas por,

$$\begin{pmatrix} H^1 \\ H^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{R^2} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \\ \frac{1}{R^2 \sin^2 \varphi} \frac{\partial F}{\partial \theta} \end{pmatrix} . \quad (2.29)$$

Abusa-se aqui da notação, usando  $F$  diretamente como função de  $\varphi$  e  $\theta$ .

Portanto, pelas equações (2.25), (2.26) e (2.29), o operador gradiente na esfera dado em coordenadas esféricas é

$$\nabla_s F = \frac{1}{R^2} \left( \frac{\partial F}{\partial \varphi}, \frac{1}{\sin^2 \varphi} \frac{\partial F}{\partial \theta} \right)_\beta = \frac{1}{R^2} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \vec{t}_1 + \frac{1}{R^2} \frac{1}{\sin^2 \varphi} \frac{\partial F}{\partial \theta} \vec{t}_2 . \quad (2.30)$$

## 2.5 O operador divergente na esfera

Queremos, agora, determinar o operador divergente na superfície  $S$  em termos de uma parametrização. Para tanto, usamos o fato que o divergente é definido como o negativo do operador adjunto do gradiente, em relação ao produto interno de funções,

$$\operatorname{div}_S = -(\nabla_S)^* ,$$

onde  $*$  denota o operador adjunto. Vamos inicialmente verificar este resultado em  $\mathbb{R}^3$ .

### 2.5.1 Relação entre o gradiente e o divergente em $\mathbb{R}^3$

Dado um subconjunto aberto  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ , sejam  $u_1$  e  $u_2$  duas funções escalares,  $u_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $i = 1, 2$ , e  $\vec{q}_1$  e  $\vec{q}_2$  dois campos de vetores em  $\Omega$ ,  $\vec{q}_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $i = 1, 2$ . Definimos os produtos internos

$$\langle u_1, u_2 \rangle = \int_{\Omega} u_1(x) u_2(x) dV(x) . \quad (2.31)$$

e

$$\langle \vec{q}_1, \vec{q}_2 \rangle = \int_{\Omega} \vec{q}_1(x) \cdot \vec{q}_2(x) dV(x) . \quad (2.32)$$

Seja  $p$  um campo escalar e  $\vec{g}$  um campo vetorial. Pela fórmula de Leibnitz, sabemos que

$$\operatorname{div}(p\vec{g}) = \nabla p \cdot \vec{g} + p \operatorname{div} \vec{g}$$

donde

$$\nabla p \cdot \vec{g} = \operatorname{div}(p\vec{g}) - p \operatorname{div} \vec{g} \quad (2.33)$$

Assim, pelas equações (2.32) e (2.33), temos

$$\langle \nabla p, \vec{g} \rangle = \int_{\Omega} \nabla p \cdot \vec{g} dV = \int_{\Omega} (\operatorname{div}(p\vec{g}) - p \operatorname{div} \vec{g}) dV . \quad (2.34)$$

Pelo teorema da divergência,

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(p \vec{g}) \, dV = \int_{\partial\Omega} p \vec{g} \cdot \hat{n} \, dV .$$

onde  $\hat{n}$  é o vetor normal unitário externo à fronteira de  $\Omega$ ,  $\partial\Omega$ . Quando

$$p|_{\partial\Omega} = 0 \text{ ou } \vec{g} \cdot \hat{n}|_{\partial\Omega} = 0 , \tag{2.35}$$

temos que

$$\int_{\partial\Omega} p \vec{g} \cdot \hat{n} \, dS = 0 ,$$

logo

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(p \vec{g}) \, dV = 0 . \tag{2.36}$$

Portanto, neste caso, concluímos que a equação (2.34) reduz-se a

$$\int_{\Omega} \nabla p \cdot \vec{g} \, dV = - \int_{\Omega} p \operatorname{div} \vec{g} \, dV .$$

Assim, quando alguma das condições dadas na equação (2.35) forem satisfeitas, temos que

$$\langle \nabla p, \vec{g} \rangle = \int_{\Omega} \nabla p \cdot \vec{g} \, dV = - \int_{\Omega} p \operatorname{div} \vec{g} \, dV = - \langle p, \operatorname{div} \vec{g} \rangle ,$$

ou, mais simplesmente,

$$\langle \nabla p, \vec{g} \rangle = - \langle p, \operatorname{div} \vec{g} \rangle . \tag{2.37}$$

Mas, por definição, o adjunto  $\nabla^*$  do operador  $\nabla$  é o operador que comuta no produto interno, isto é, tal que

$$\langle \nabla p, \vec{g} \rangle = \langle p, \nabla^* \vec{g} \rangle . \tag{2.38}$$

Assim, de (2.37) e (2.38) conclui-se, neste caso, que

$$\nabla^* = -\text{div} .$$

### 2.5.2 O divergente em uma superfície

Obtemos aqui uma expressão para o operador divergente numa superfície  $S$  em termos de uma parametrização da mesma, a partir da definição do divergente como o negativo do operador adjunto do gradiente, em símbolos,

$$\text{div}_S = -(\nabla_S)^* . \tag{2.39}$$

Mais detalhadamente, sejam  $u_1$  e  $u_2$  duas funções escalares definidas em uma superfície  $S$ ,  $u_i : S \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $i = 1, 2$ , e  $\vec{v}_1$  e  $\vec{v}_2$  dois campos vetoriais tangentes à superfície  $S$ ,  $\vec{v}_i : S \rightarrow \mathbb{R}^3$ , com  $\vec{v}_i(x) \in T_x S$ ,  $i = 1, 2$ . Definimos, respectivamente, os produtos internos

$$\langle u_1, u_2 \rangle = \int_S u_1(x) u_2(x) dS(x) \text{ e} \tag{2.40}$$

$$\langle \vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \int_S \vec{v}_1(x) \cdot \vec{v}_2(x) dS(x) . \tag{2.41}$$

O operador adjunto de  $\nabla_S$ , denotado por  $\nabla_S^*$ , é o operador que comuta com o gradiente no produto interno,

$$\langle \nabla_S u, \vec{v} \rangle = \langle u, \nabla_S^* \vec{v} \rangle$$

e o  $\text{div}_S$  é o negativo do adjunto,  $\text{div}_S = -\nabla_S^*$ , isto é, tal que

$$\langle \nabla_S u, \vec{v} \rangle = \langle u, -\text{div}_S \vec{v} \rangle \tag{2.42}$$

para toda a função escalar diferenciável  $u : S \rightarrow \mathbb{R}$  e todo o campo de vetores tangentes, diferenciável,  $\vec{v} : S \rightarrow \mathbb{R}^3$ , com  $\vec{v}(x) \in T_x S$ , para todo  $x \in S$ .

Seja  $\vec{g}$  um campo de vetores tangentes à superfície  $S$ ,  $\vec{g} = (g^1, g^2)_\beta = g^1 \vec{t}_1 + g^2 \vec{t}_2$ .

Seja  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$ , o conjunto dos valores dos parâmetros  $(u, v)$ , de tal forma a percorrer <sup>1</sup>  $S$ ,

$$\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2 \xrightarrow{f} S$$

$$(u, v) \longmapsto \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(u, v) \\ f_2(u, v) \\ f_3(u, v) \end{pmatrix} .$$

Das equações (2.19) e (2.26) temos na superfície  $S$  que

$$\langle \nabla_s F, \vec{g} \rangle = \iint_{\mathcal{D}} \left\{ \left( g^1 \frac{\partial F}{\partial u} + g^2 \frac{\partial F}{\partial v} \right) \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right\} du dv \quad (2.43)$$

onde, por abuso de notação usa-se, por exemplo,  $\frac{\partial F}{\partial u}$  no lugar de  $\frac{\partial G}{\partial u}$ .

Então, pela regra de Leibnitz, temos

$$\begin{aligned} \langle \nabla_s F, \vec{g} \rangle &= \iint_{\mathcal{D}} \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left( g^1 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| F \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( g^2 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| F \right) + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial u} \left( g^1 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) F - \frac{\partial}{\partial v} \left( g^2 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) F \right\} du dv \\ &= - \iint_{\mathcal{D}} \frac{1}{\|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\|} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( g^1 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial v} \left( g^2 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) \right] \cdot F \cdot \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| du dv \\ &= - \langle \operatorname{div}_s \vec{g}, F \rangle . \end{aligned}$$

O termo

$$\iint_{\mathcal{D}} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( g^1 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| F \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( g^2 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| F \right) \right] du dv$$

é nulo pois é um termo de derivada integrado na superfície toda. Portanto,

$$\operatorname{div}_s \vec{g} = \frac{1}{\|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\|} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( g^1 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( g^2 \|\vec{t}_1 \times \vec{t}_2\| \right) \right] . \quad (2.44)$$

---

<sup>1</sup>A menos, possivelmente, de um conjunto de medida nula, o que não afeta os resultados porque todas as funções envolvidas são contínuas em  $S$ .

### 2.5.3 O divergente na esfera

Para obtermos o divergente na esfera calculamos, inicialmente,  $\left\| \vec{t}_1 \times \vec{t}_2 \right\|$  em termos das coordenadas esféricas  $(\varphi, \theta)$ . Neste caso, da equação (2.27) obtemos

$$\begin{aligned} \vec{t}_1 \times \vec{t}_2 &= \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ R \cos \varphi \cos \theta & R \cos \varphi \sin \theta & -R \sin \varphi \\ -R \sin \varphi \sin \theta & R \sin \varphi \cos \theta & 0 \end{vmatrix} \\ &= R^2 \cos \theta \sin^2 \varphi \vec{i} + R^2 \sin \theta \sin^2 \varphi \vec{j} + \\ &\quad + R^2 (\cos^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi + \sin^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi) \vec{k} \\ &= R^2 (\cos \theta \sin^2 \varphi, \sin \theta \sin^2 \varphi, (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \sin \varphi \cos \varphi) \\ &= R^2 (\cos \theta \sin^2 \varphi, \sin \theta \sin^2 \varphi, \sin \varphi \cos \varphi) \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \left\| \vec{t}_1 \times \vec{t}_2 \right\| &= R^2 \sqrt{\cos^2 \theta \sin^4 \varphi + \sin^2 \theta \sin^4 \varphi + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi} \\ &= R^2 \sqrt{\sin^4 \varphi (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi} \\ &= R^2 \sqrt{\sin^2 \varphi (\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi)} \\ &= R^2 \sqrt{\sin^2 \varphi} \\ &= R^2 |\sin \varphi| . \end{aligned}$$

Mas como  $0 \leq \varphi \leq \pi$ ,  $\sin \varphi \geq 0$ , logo,  $|\sin \varphi| = \sin \varphi$  e então

$$\left\| \vec{t}_1 \times \vec{t}_2 \right\| = R^2 \sin \varphi . \tag{2.45}$$

Portanto, pelas equações (2.44) e (2.45), o divergente na esfera é dado por

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_s \vec{g} &= \frac{1}{R^2 \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (g^1 \sin \varphi R^2) + \frac{1}{R^2 \sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} (g^2 \sin \varphi R^2) \\ &= \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} (g^1 \sin \varphi) + \frac{\partial g^2}{\partial \theta} . \end{aligned} \tag{2.46}$$

## 2.6 O operador Laplaciano na esfera

Por definição, o operador Laplaciano na superfície  $S$  é dado por

$$\Delta_S = \operatorname{div}_S \nabla_S. \quad (2.47)$$

Assim, para a esfera, com a parametrização dada pelas coordenadas  $(\varphi, \theta)$ , obtém-se das equações (2.30) e (2.46) a expressão do Laplaciano:

$$\begin{aligned} \Delta_S F &= \operatorname{div}_S \nabla_S F \\ &= \frac{1}{\operatorname{sen} \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{1}{R^2} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \operatorname{sen} \varphi \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{R^2} \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \varphi} \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) \\ &= \frac{1}{R^2 \operatorname{sen} \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \operatorname{sen} \varphi \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right) + \frac{1}{R^2 \operatorname{sen}^2 \varphi} \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Antes de prosseguirmos, vamos destacar uma propriedade do Laplaciano na esfera que é utilizada mais adiante.

Usando sucessivamente as equações (2.47), (2.39), e a equação (2.38) e vice-versa, obtemos

$$\begin{aligned} \langle u, \Delta_S v \rangle &= \langle u, \operatorname{div}_S \nabla_S v \rangle \\ &= \langle u, -\nabla_S^* \nabla_S v \rangle \\ &= \langle \nabla_S u, -\nabla_S v \rangle \\ &= \langle \nabla_S^* \nabla_S u, -v \rangle \\ &= \langle -\operatorname{div}_S \nabla_S u, -v \rangle \\ &= \langle \Delta_S u, v \rangle. \end{aligned}$$

Em resumo,

$$\langle u, \Delta_S v \rangle = \langle \Delta_S u, v \rangle. \quad (2.49)$$

## 2.7 A equação de Poisson e o sistema de Poisson de 1ª ordem

O problema de Poisson na esfera consiste em, dado um termo fonte  $f$ , definido na esfera, determinar uma função  $u$ , também definida na esfera, de forma a satisfazer a seguinte equação diferencial parcial,

$$-\Delta_s u(x) = f(x), \quad x \in S^2, \quad (2.50)$$

onde  $\Delta_s$  é o operador Laplaciano na esfera, introduzido na seção 2.6.

Considerando o problema de Poisson sobre a esfera, equação (2.50), seja  $\vec{v}$  o campo vetorial definido pelo negativo do gradiente da função  $u$ ,

$$\vec{v} = -\nabla_s u.$$

Então formulamos o problema de Poisson em termos de operadores de primeira ordem,

$$\begin{cases} \operatorname{div}_s \vec{v}(x) = f(x), & x \in S^2, \\ -\nabla_s u(x) = \vec{v}, & x \in S^2. \end{cases} \quad (2.51)$$

Aqui  $\vec{v}$  e  $u$ , chamados de fluxo e de potencial, respectivamente, são incógnitas e  $f$ , uma fonte definida sobre  $S^2$ , é o dado do problema.

Notamos que o problema não tem solução única pois que se o par  $(u, \vec{v})$  é solução do sistema de equações (2.51), também  $(u + c, \vec{v})$ , onde  $c$  é uma constante arbitrária, o será.

Pode-se então escolher uma solução única impondo-se que

$$\int_{S^2} u \, dS = 0. \quad (2.52)$$

Além disso, pelo teorema da divergência de campos vetoriais definidos em su-

perfícies,

$$\int_{S^2} f(x) \, dS(x) = \int_{S^2} \operatorname{div}_S \vec{v} \, dS(x) = \int_{\partial S^2 = \emptyset} \vec{v} \cdot \hat{n} \, dS(x) = 0 \quad (2.53)$$

uma vez que a fronteira de  $S^2$  é vazia. Conclui-se então que uma condição necessária para o sistema de equações (2.51) ter solução é que a fonte tenha média nula sobre a esfera,

$$\int_{S^2} f(x) \, dS(x) = 0. \quad (2.54)$$

Para referência futura, dada a função  $f$  satisfazendo a condição (2.54), o problema de Poisson consiste na resolução para  $u : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$  de

$$\begin{cases} -\Delta_S u = f & , \quad x \in S^2 \\ \int_{S^2} u(x) \, dS(x) = 0 \end{cases} . \quad (2.55)$$

Já o sistema de Poisson de primeira ordem consiste na determinação  $u$  e  $\vec{v}$  tais que

$$\begin{cases} \operatorname{div}_S \vec{v}(x) = f(x) & , \quad x \in S^2 , \\ -\nabla_S u(x) = \vec{v} & , \quad x \in S^2 \\ \int_{S^2} u(x) \, dS(x) = 0 \end{cases} . \quad (2.56)$$

## 2.8 A equação de condução do calor

O problema de condução do calor (ou difusão de massa) na esfera consiste em determinar uma função  $u$ , definida na esfera, de forma a satisfazer a seguinte equação diferencial parcial (EDP) e condição inicial

$$\begin{cases} u_t(x, t) - \Delta_S u(x, t) = 0 & , \quad \forall x \in S^2, t > 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) & , \quad \forall x \in S^2 . \end{cases} \quad (2.57)$$

Aqui  $\Delta_s$  é o operador Laplaciano na esfera, introduzido na seção 2.6.

No caso não homogêneo, dada uma fonte  $f$ , definida na esfera, queremos determinar uma função  $u$ , também definida na esfera, de forma a satisfazer a seguinte EDP,

$$\begin{cases} u_t(x, t) - \Delta_s u(x, t) = f(x) , & \forall x \in S^2, t > 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) , & \forall x \in S^2 . \end{cases} \quad (2.58)$$

## Capítulo 3

### Malhas duais na esfera

Dedicamos este capítulo à construção de uma seqüência de malhas icosaedrais com refinamento diádico e as respectivas malhas duais sobre a esfera, conforme descrito nas próximas seções, para aplicarmos na discretização espacial do problema de Poisson e na equação de condução do calor sobre a esfera.

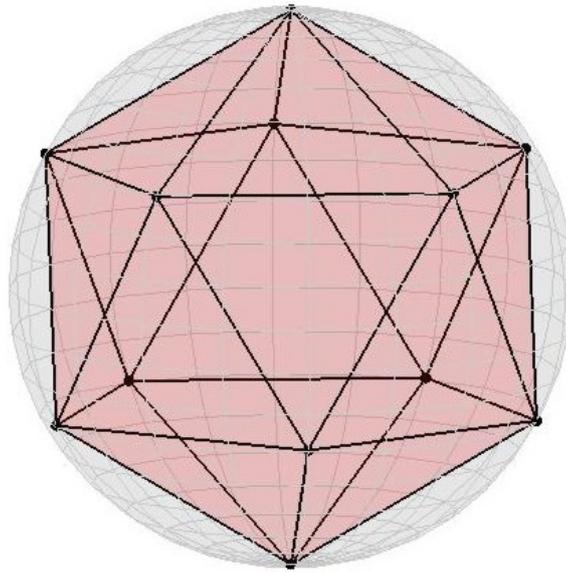
Alguns problemas sobre a esfera são discretizados utilizando malhas duais. Podemos citar Nicolaidis, [12], por ter resolvido o problema de divergente e rotacional, além de Sthune e Peltier, [7]-[9], que resolvem problema relacionados a equação de águas rasas sobre a esfera.

O que nos motiva a trabalhar com essa estrutura de malha é o fato da sua quase regularidade, o que pode ser verificado na tabela 3.2. Além desta propriedade, esta malha tem o caráter Voronoi-Delaunay. Augenbaum e Peskin [2] apresentam um algoritmo de construção de uma malha Voronoi sobre a esfera. Nos trabalhos de Renka [3]-[6] também é apresentada uma malha Voronoi sobre a esfera, mas esta foi construída a partir de uma triangulação Delaunay.

Baumgardner e Frederickson [1] apresentam de forma substancial os procedimentos para a construção de uma malha icosaedral e o seu refinamento diádico na esfera. Dedicamos as duas próximas seções a essa construção.

### 3.1 A malha icosaedral

Nesta seção definimos a estrutura de uma malha triangular definida na esfera, chamada aqui de malha icosaedral, e em seguida obtemos as coordenadas, dos doze vértices de um icosaedro regular inscrito na esfera de raio  $R$  e centro na origem, necessárias para especificar a malha icosaedral; veja figura 3.1.



**Figura 3.1:** Icosaedro regular inscrito na esfera

A estrutura da *malha icosaedral* é definida em termos de três conjuntos:

(1) o **conjunto de vértices**, formado por pontos  $P_i^0 \in \mathbb{R}^3$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_0$ , pertencentes à esfera, onde  $\mathcal{V}_0 = 12$  é a quantidade de pontos;

(2) o **conjunto de arestas**, formado por segmentos de reta  $A_{i,j}^0$ , conectando pares de pontos distintos  $P_i^0$  e  $P_j^0$ , com  $\mathcal{A}_0 = 30$  arestas; e

(3) o **conjunto de faces** formado por triângulos,  $F_{ijk}^0$ , com vértices nos pontos  $P_i^0$ ,  $P_j^0$  e  $P_k^0$ , delimitados pelas arestas  $A_{i,j}^0$ ,  $A_{i,k}^0$  e  $A_{j,k}^0$ , num total de  $\mathcal{F}_0 = 20$  faces.

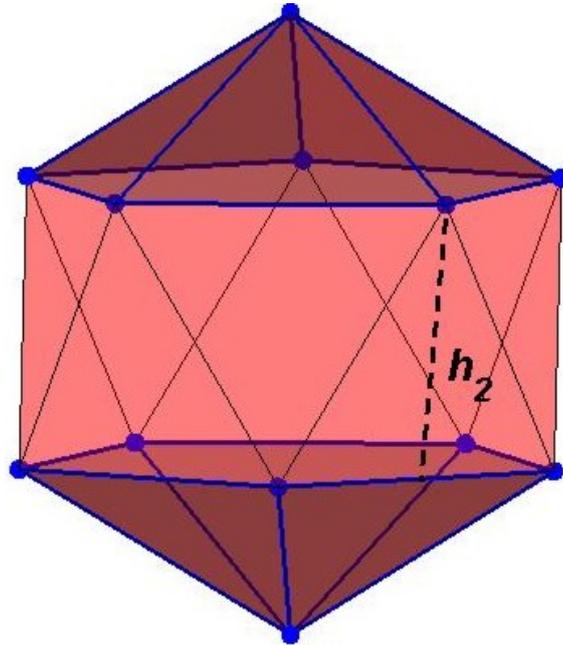
Note que, para obtermos as medidas de todos os elementos da malha icosaedral (comprimentos das arestas e áreas das faces), assim como construirmos um refinamento diádico da malha (que é feito na seção 3.2), é necessário determinar as coordenadas

de todos os vértices do icosaedro inscrito na esfera. Por isso, o restante desta seção é destinado a determinar esses vértices.

Vamos considerar que o icosaedro regular inscrito na esfera está posicionado de tal forma que dois vértices opostos estão localizados no pólo norte e no pólo sul da esfera, portanto com coordenadas

$$\begin{cases} (0, 0, R) \\ (0, 0, -R) \end{cases} \quad (3.1)$$

Obtemos as coordenadas que faltam a partir da seguinte observação geométrica: neste icosaedro há duas pirâmides, uma cujo ápice se encontra no pólo norte e outra no pólo sul da esfera, e elas estão conectadas por um troço tipo prismático generalizado com bases, inferior e superior, na forma de pentágonos, e lateral formada por dez triângulos equiláteros, veja figura 3.2.



**Figura 3.2:** Icosaedro regular de Platão dividido em três partes: pirâmide superior, pirâmide inferior e tronco prismático. A altura da face, que é um triângulo equilátero, é representada, por  $h_2$ .

Na figura 3.3 podemos observar a projeção ortogonal das bases do troço prismático do icosaedro sobre o plano  $xy$ . Denote por  $r$  o raio da circunferência circunscrita aos pentágonos que formam a base e o topo do troço prismático. Fazendo com que as coordenadas da projeção no plano  $xy$  de um dos vértices de um dos pentágonos (digamos o que corresponde à projeção do topo do troço) seja

$$(r, 0) ,$$

temos, como conseqüência, que as coordenadas de todos os vértices dos pentágonos projetados do topo e da base do troço podem ser representadas, respectivamente, por

$$r \left( \cos \frac{2\pi}{5} j, \operatorname{sen} \frac{2\pi}{5} j \right) ,$$

e

$$r \left( \cos \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right), \operatorname{sen} \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right) \right) ,$$

com  $j = 0, 1, 2, 3, 4$ .

Denotamos por  $h$  a altura do troço, ou, o que é o mesmo, a distância entre os centros das duas circunferências circunscritas aos pentágonos pertencentes a planos paralelos ao plano  $xy$ , veja figura 3.4. Tem-se então que as coordenadas, em  $\mathbb{R}^3$ , dos vértices não polares do icosaedro são:

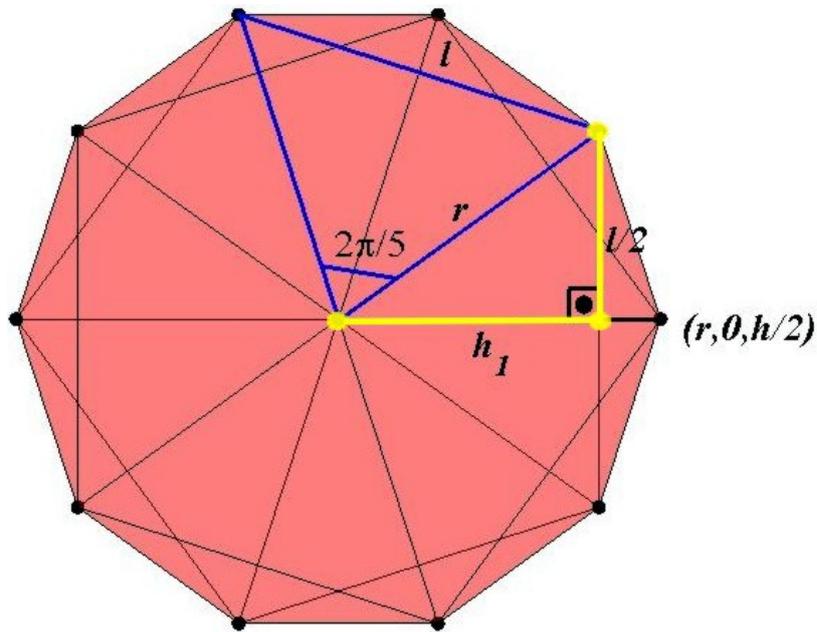
$$\left\{ \begin{array}{l} \left( r \cos \frac{2\pi}{5} j, r \operatorname{sen} \frac{2\pi}{5} j, \frac{h}{2} \right) \\ \left( r \cos \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right), r \operatorname{sen} \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right), -\frac{h}{2} \right) \end{array} \right. , j = 0, 1, 2, 3, 4 \quad (3.2)$$

Agora, obtemos a dependência de  $r$  e  $h$  em função do raio da esfera,  $R$ . Duas relações diretas, veja figura 3.3, são

$$r = \frac{l}{2} \frac{1}{s_*} \quad (3.3)$$

e

$$h_1^2 + \frac{l^2}{4} = r^2 , \quad (3.4)$$



**Figura 3.3:** Projeção ortogonal da base e do topo do troço do icosaedro no plano  $xy$ .

onde  $l$  é o comprimento dos lados dos pentágonos e arestas do icosaedro,  $h_1$  é a distância entre o centro e o lado do pentágono e, para simplificar a expressão, utilizamos a notação

$$s_* = \text{sen } \pi/5 . \tag{3.5}$$

Observando o troço prismático do icosaedro, figuras 3.2 e 3.4, obtemos

$$h^2 + (r - h_1)^2 = h_2^2 \tag{3.6}$$

onde denotamos por  $h_2$  a altura da face do icosaedro. Além disso, como a face do icosaedro é um triângulo equilátero de lado  $l$ , temos

$$h_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} l . \tag{3.7}$$

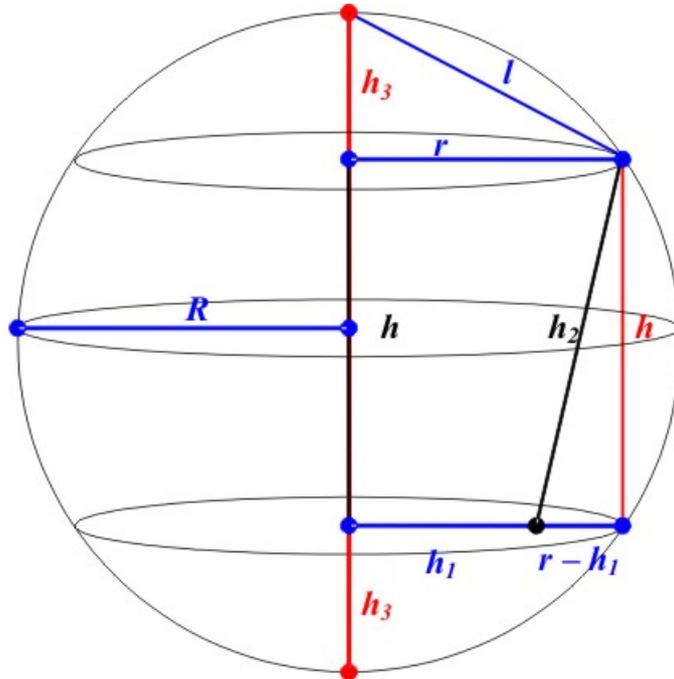
Observando a figura 3.4, obtemos mais duas relações

$$l^2 = h_3^2 + r^2, \tag{3.8}$$

e

$$h + 2h_3 = 2R. \tag{3.9}$$

Note então que temos 6 incógnitas,  $r$ ,  $l$ ,  $h$ ,  $h_1$ ,  $h_2$  e  $h_3$ , e seis equações, (3.3), (3.4) e (3.6) a (3.9), em função de  $R$ . Assim, em princípio, é possível determinar as incógnitas em função de  $R$ , o que é feito no restante desta seção.



**Figura 3.4:** Uma representação da esfera circunscrita ao icosaedro.

Substituindo  $r$ , dado na equação (3.3), na equação (3.4), obtemos

$$h_1 = \frac{l}{2} \left( \frac{1}{s_*^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.10}$$

Substituindo  $h$  dado na equação (3.6) e  $h_3$  dado na (3.8) na equação (3.9), temos

$$\sqrt{h_2^2 - (r - h_1)^2} + 2\sqrt{l^2 - r^2} = 2R . \quad (3.11)$$

Substituindo  $r$ , dado na equação (3.3),  $h_2$ , dado na equação (3.7), e  $h_1$ , dado na equação (3.10), na equação (3.11), e manipulando a expressão resultante temos que

$$\frac{l}{s_*} \left( \sqrt{\frac{2s_*^2 - 1 + c_*}{2}} + \sqrt{4s_*^2 - 1} \right) = 2R .$$

Analogamente, ao que foi feito com o seno, para simplificar a expressão, utilizamos a notação  $c_* = \cos \pi/5$ .

Assim, definindo

$$C_1 = \left( \sqrt{\frac{2s_*^2 - 1 + c_*}{2}} + \sqrt{4s_*^2 - 1} \right)^{-1} \quad (3.12)$$

temos que

$$l = 2 s_* C_1 R . \quad (3.13)$$

Substituindo  $l$ , obtido na equação (3.3), na equação (3.13), temos que

$$r = C_1 R . \quad (3.14)$$

Substituindo  $h_1$ , dado na equação (3.4), e  $h_2$ , dado na equação (3.7), na equação (3.6), temos que

$$h = \sqrt{l^2 - 2 r^2 + r\sqrt{4 r^2 - l^2}} . \quad (3.15)$$

Substituindo  $l$  e  $r$ , dados nas equações (3.13) e (3.14), na equação (3.15) e reorganizando, obtemos

$$h = C_1 \sqrt{4s_*^2 - 2 + 2c_*} R . \quad (3.16)$$

Finalmente, dado o raio da esfera,  $R$ , pelas equações (3.14) e (3.16), levando em consideração o valor de  $C_1$  definido em (3.12), obtemos os valores de  $r$  e  $h$ , determinando então todas as coordenadas dos vértices do icosaedro regular,

$$\left\{ \begin{array}{l} (0, 0, R) \\ \left( r \cos \frac{2\pi}{5} j, r \sin \frac{2\pi}{5} j, \frac{h}{2} \right) \\ \left( r \cos \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right), r \sin \left( \frac{2\pi}{10} + \frac{2\pi}{5} j \right), -\frac{h}{2} \right) \\ (0, 0, -R) \end{array} \right. \quad (3.17)$$

onde  $j = 0, 1, 2, 3, 4$ .

Na próxima seção veremos como refinar esta malha icosaedral mantendo razoavelmente a sua regularidade.

## 3.2 Refinamento diádico

Nesta seção, temos como objetivo refinar a malha icosaedral construída a partir de um icosaedro regular inscrito na esfera de raio  $R$  e centro na origem, descrita na seção 3.1. Denotamos por  $T_0$ , a malha icosaedral de nível 0, para uma esfera de raio  $R = 1$ .

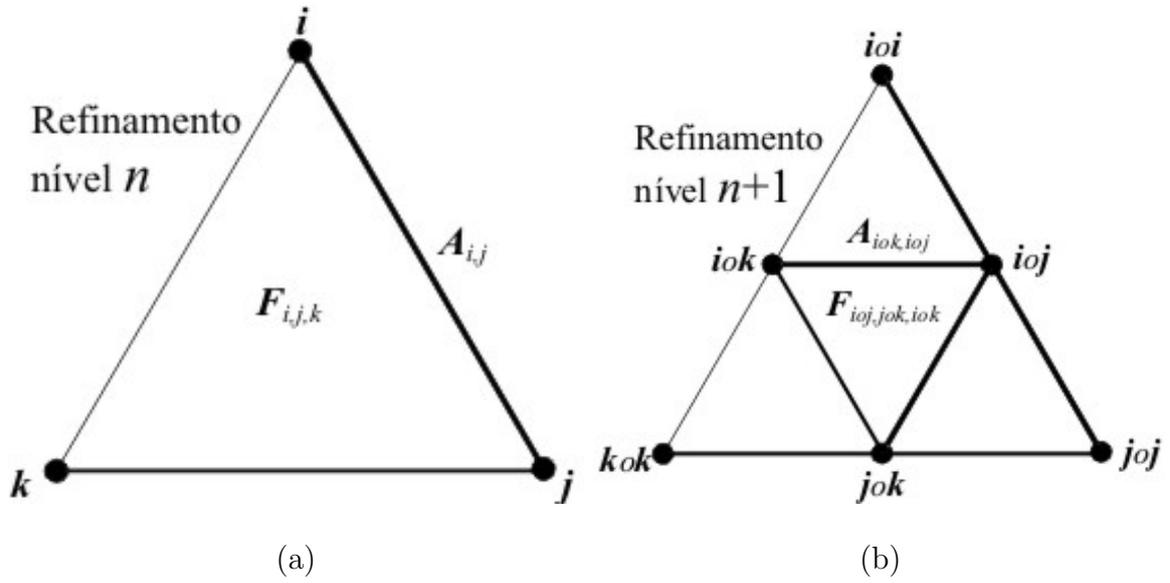
Denotamos por  $T_n$  a malha obtida através de um refinamento diádico de nível  $n$ , que se constitui também em uma malha formada por triângulos, chamada de malha icosaedral de nível  $n$ . O primeiro passo deste procedimento, o refinamento diádico, se faz subdividindo-se cada face triangular em 4 novas faces triangulares, ligando-se os pontos médios das arestas de cada triângulo do icosaedro inicial obtendo-se novos vértices (são mantidos os vértices originais e é criado um novo vértice em cada aresta inicial), novas arestas (3 arestas iniciais são descartadas e transformadas em 6 arestas, e mais 3 novas arestas são adicionadas associadas a cada face inicial), e novas faces triangulares (cada face inicial é transformada em 4 faces), determinando-se assim  $T_1$ ; veja as figuras 3.5 e 3.6. Repetindo-se este procedimento a  $T_1$  obtém-se  $T_2$  e assim sucessivamente.

Após definir a malha icosaedral de nível 0,  $T_0$ , os sucessivos refinamentos diádicos

são obtidos através do cálculo do bissetor das arestas levado até a esfera de raio 1,

$$P_{ioj}^{n+1} = \frac{P_i^n + P_j^n}{\|P_i^n + P_j^n\|}, \quad (3.18)$$

para cada par de vértices em todos os triângulos de cada nível  $n$ ; veja figuras 3.5 e 3.6. Aqui a notação  $(\circ)$  é usada para denotar a conexão da malha de nível  $n + 1$  com a malha de nível  $n$ .



**Figura 3.5:** (a) Triângulo da malha de nível  $n$ ; (b) refinamento diádico de nível  $n + 1$ .

Assim, de cada triângulo no nível  $n$ , definido pelos pontos  $P_i^n$ ,  $P_j^n$  e  $P_k^n$ , são gerados, para o nível  $n + 1$ , mais três pontos,

$$P_{ioj}^{n+1}, P_{iok}^{n+1} \text{ e } P_{jok}^{n+1},$$

além dos pontos originais que são renomeados,

$$P_{ioi}^{n+1} = P_i^n, P_{joj}^{n+1} = P_j^n \text{ e } P_{kok}^{n+1} = P_k^n,$$

nove novas arestas,

$$A_{iok,ioj}^{n+1}, A_{ioj,jok}^{n+1}, A_{iok,jok}^{n+1}, A_{ioi,ioj}^{n+1}, A_{ioj,joj}^{n+1}, A_{joj,jok}^{n+1}, A_{jok,kok}^{n+1}, A_{kok,iok}^{n+1} \text{ e } A_{iok,ioi}^{n+1},$$

conectando os pontos, onde, por exemplo, a aresta  $A_{ioj,jok}^{n+1}$  liga os pontos  $P_{ioj}^{n+1}$  e  $P_{jok}^{n+1}$ , e quatro novos triângulos,

$$F_{ioj,iok,jok}^{n+1}, F_{ioi,iok,ioj}^{n+1}, F_{ioj,jok,joj}^{n+1} \text{ e } F_{iok,kok,jok}^{n+1},$$

delimitados pelos novos pontos, cabendo à face  $F_{ioj,jok,iok}^{n+1}$  ser definida pelos pontos  $P_{ioj}^{n+1}$ ,  $P_{jok}^{n+1}$  e  $P_{iok}^{n+1}$ , conforme ilustrado na figura 3.5.

Desta forma, se definirmos  $\mathcal{F}$  como o número de faces (triângulos),  $\mathcal{A}$  como o número de arestas (segmentos de reta), e  $\mathcal{V}$  como o número de vértices (pontos), usando ainda um subscrito para denotar o nível, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{n+1} &= 4\mathcal{F}_n, \\ \mathcal{A}_{n+1} &= \left(3 + \frac{3}{2}\right) \mathcal{F}_n + \mathcal{A}_n, \\ \mathcal{V}_{n+1} &= \mathcal{V}_n + \frac{3}{2}\mathcal{F}_n. \end{aligned}$$

Resolvendo recursivamente as equações dadas anteriormente, chegamos a

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_n &= 4^n \mathcal{F}_0, \\ \mathcal{A}_n &= \frac{3}{2}(4^n - 1) \mathcal{F}_0 + \mathcal{A}_0, \\ \mathcal{V}_n &= \mathcal{V}_0 + \frac{1}{2}\mathcal{F}_0(4^n - 1). \end{aligned}$$

onde, observamos,  $\mathcal{V}_0$ ,  $\mathcal{A}_0$  e  $\mathcal{F}_0$  são, respectivamente, o número de vértices, arestas e faces triangulares da malha icosaedral de nível 0.

Usando os valores iniciais  $\mathcal{V}_0 = 12$ ,  $\mathcal{A}_0 = 30$  e  $\mathcal{F}_0 = 20$ , temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_n &= 20p^2 \\ \mathcal{A}_n &= 30p^2 \\ \mathcal{V}_n &= 10p^2 + 2 \end{aligned}$$

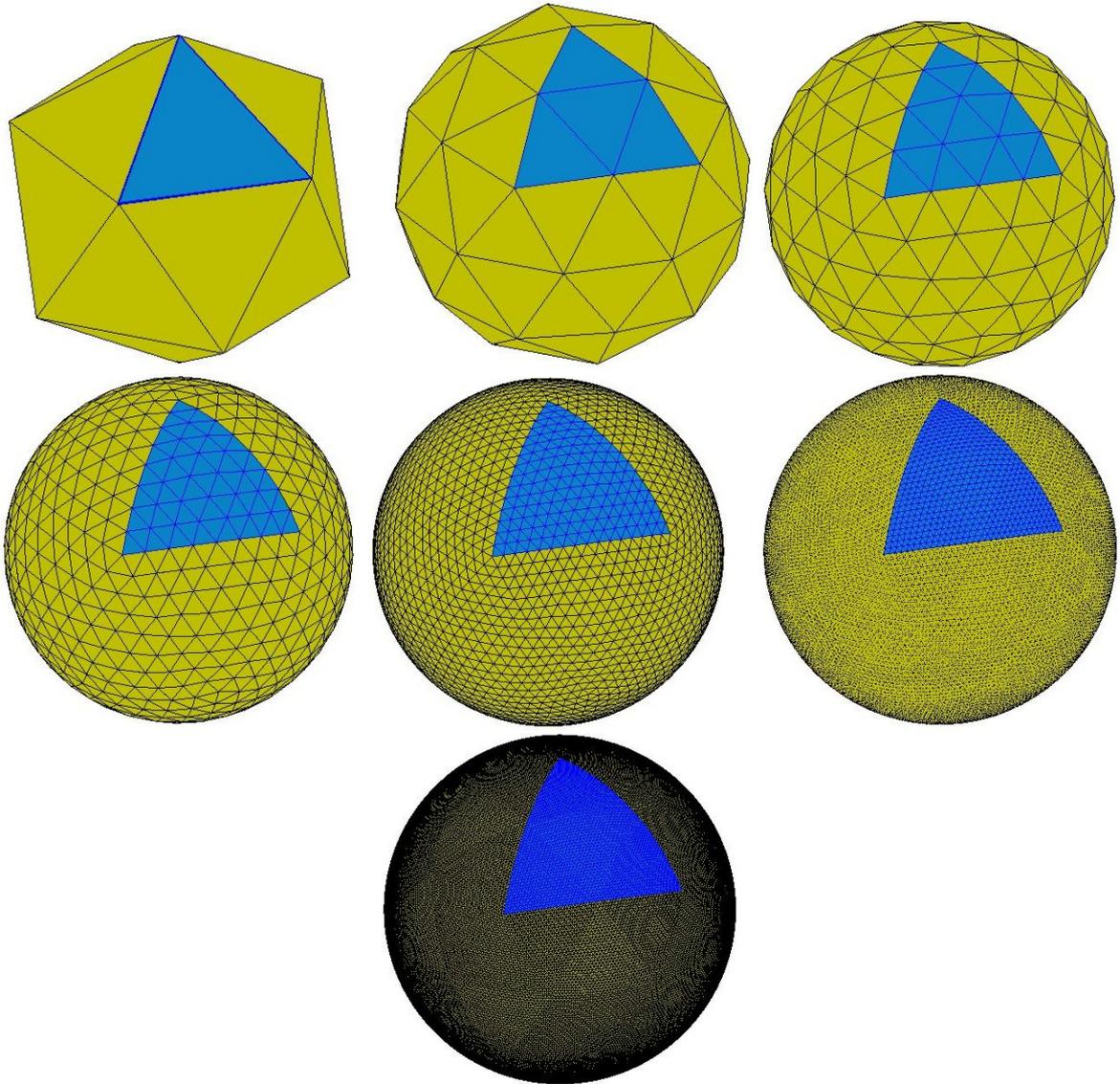
onde  $p = 2^n$  e  $n$  é o nível do refinamento da malha. A tabela 3.1 mostra as quantidades, e a figura 3.6 apresenta representações gráficas das malhas sujeitas ao refinamento diádico até o nível 6. A relação,  $\min(l)/\max(l)$ , onde  $l$  representa o comprimento da aresta da malha em cada nível e  $\min(l)$  e  $\max(l)$  representam, respectivamente os comprimentos da menor e da maior aresta estão representados na tabela 3.1. Na mesma tabela também se comparam as áreas da menor face e da maior. Os resultados nos mostram a regularidade da malha icosaedral.

**Tabela 3.1:** Quantidades referentes às malhas obtidas através do refinamento diádico.

$n$	$p = 2^n$	$\mathcal{F}_n$	$\mathcal{A}_n$	$\mathcal{V}_n$
0	1	20	30	12
1	4	80	120	42
2	16	320	480	162
3	64	1.280	1.920	642
4	256	5.120	7.680	2.562
5	1024	20.480	30.720	10.242
6	4096	81.920	122.880	40.962

**Tabela 3.2:** Regularidade da malha icosaedral.

$n$	$\min(l)$	$\max(l)$	$\min(l)/\max(l)$	$\min(\text{area})$	$\max(\text{area})$	$\min(\text{area})/\max(\text{area})$
0	1,0515	1,0516	1,000	0,4787	0,4788	1,000
1	0,5465	0,6181	0,970	0,1393	0,1654	0,983
2	0,2759	0,3250	0,962	0,0360	0,0457	0,982
3	0,1383	0,1647	0,960	0,0091	0,0117	0,981
4	0,0692	0,0826	0,959	0,0023	0,0030	0,981
5	0,0346	0,0413	0,959	0,0006	0,0007	0,981
6	0,0173	0,0207	0,959	0,0001	0,0002	0,981



**Figura 3.6:** Refinamento diádico da malha icosaedral desde o nível 0 até o nível 6.

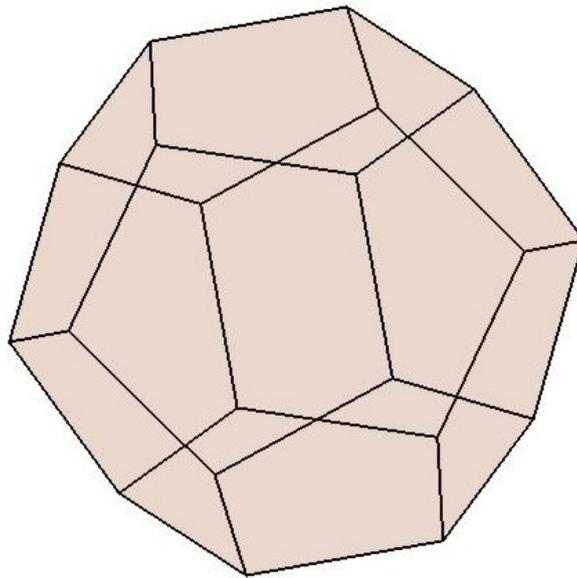
### 3.3 Malha dual

Nesta seção, definimos uma malha dita dual à malha icosaedral e ao seu refinamento  $T_n$ , a qual denotamos por  $T'_n$ .

Para cada face triangular  $F_m$  da malha icosaedral de nível  $n$ , com  $m = 1, \dots, \mathcal{F}_n$ , definimos um vértice,  $P'_m$ , da malha dual, correspondendo ao circuncentro desse triângulo. Neste parágrafo, como no restante desta seção, para simplificar a notação, omitiremos o sobrescrito  $(^n)$ , que indica o nível da malha icosaedral, nos elementos geométricos que definem a malha (vértices, arestas e faces).

As arestas da malha dual são construídas conectando-se os circuncentros de triângulos adjacentes da malha icosaedral, veja figura 3.8. Do que foi dito conclui-se que a malha dual tem tantos vértices quantas as faces da malha icosaedral, tantas arestas quantas as da malha icosaedral e tem tantas faces quantos os vértices da malha icosaedral.

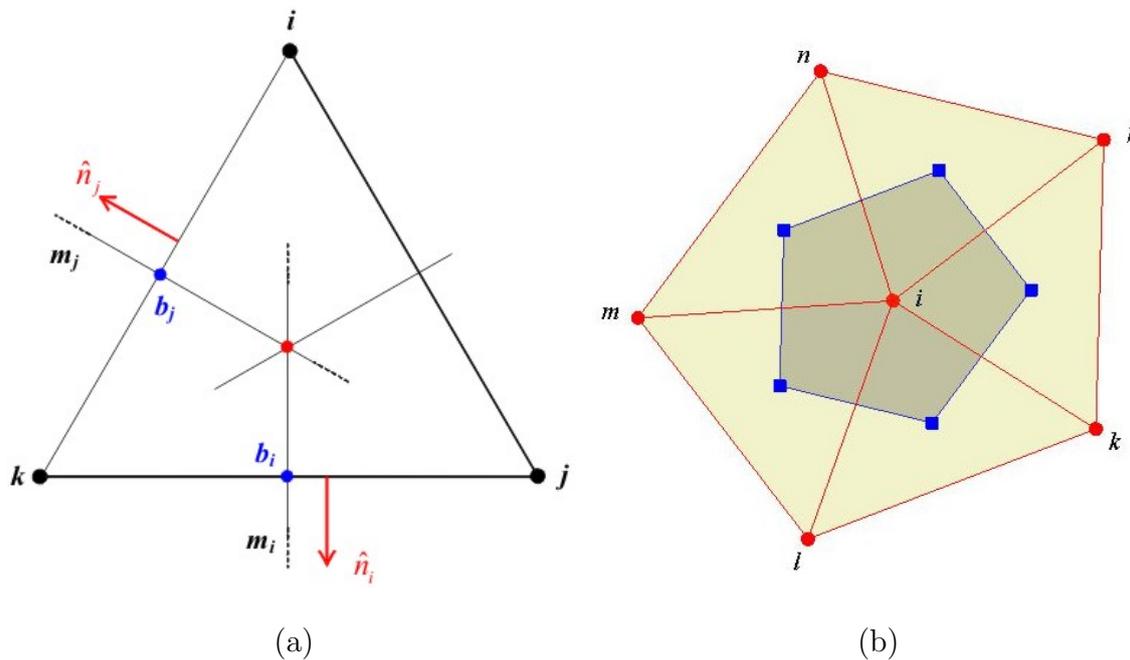
Ressaltamos, como pode ser observado na figura 3.7, que a malha dual correspondente à malha icosaedral de nível 0 é o dodecaedro.



**Figura 3.7:** Malha dual de nível 0: dodecaedro.

No nível 0, as faces da malha dual são pentagonais. Após o refinamento de nível 1, as faces são pentágonos ou hexágonos. O primeiro caso ocorre quando a face contém como ponto interno, um vértice da malha icosaedral de nível 0, caso contrário, a face é hexagonal. A figura 3.9 apresenta conjuntamente a malha icosaedral e dual, nos níveis 1 e 2. As malhas duais de nível 0 a 6 são representadas graficamente na figura 3.10.

As faces da malha dual são denotadas por  $F'_m$ ,  $m = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ , onde  $\mathcal{V}_n$  é a quantidade de vértices da malha icosaedral.

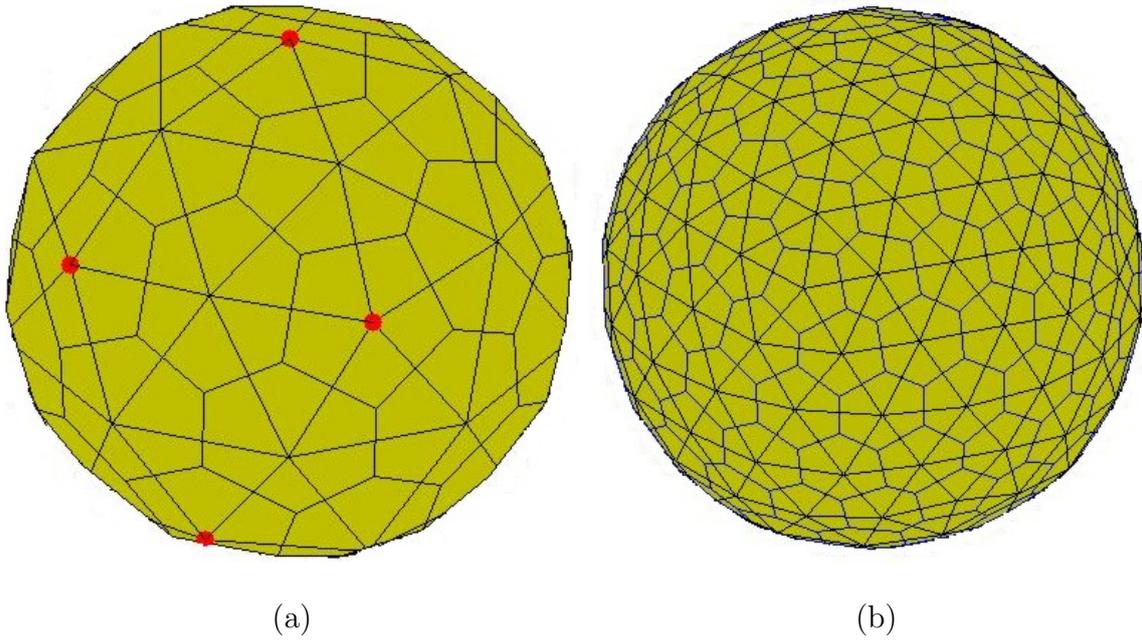


**Figura 3.8:** (a) Elementos necessários para determinar o vértice da malha dual; (b) face da malha dual em função das faces adjacentes da malha icosaedral.

Denotamos por  $A'_{i,j}$  as arestas da malha dual que têm extremidades nos vértices  $P'_i$  e  $P'_j$ .

A partir de agora, obtemos os circuncentros dos triângulos da malha icosaedral, isto é, os vértices da malha dual.

Sejam  $P_i$ ,  $P_j$  e  $P_k$ , vértices do triângulo  $F_{i,j,k}$  da malha icosaedral. Obtemos o centro da circunferência circunscrita ao triângulo  $F_{i,j,k}$  da malha icosaedral, isto é, o circuncentro, intersectando duas das três mediatrizes de seus lados (arestas).



**Figura 3.9:** Malha icosaedral e dual de níveis (a) 1 e (b) 2.

Denotamos por  $b_i$  e  $b_j$  os bissetores (isto é, os pontos médios dos lados do triângulo), e por  $m_i$  e  $m_j$  as retas mediatrizes (retas no plano do triângulo que passam pelos bissetores e são perpendiculares aos lados), das arestas correspondentes aos lados opostos aos pontos  $P_i$  e  $P_j$ .

Então as retas mediatrizes são dadas por

$$\begin{aligned} \mathbb{R} \ni s &\longmapsto m_i(s) = b_i + s \vec{n}_i \in \mathbb{R}^3 \\ \mathbb{R} \ni t &\longmapsto m_j(t) = b_j + t \vec{n}_j \in \mathbb{R}^3 . \end{aligned}$$

onde  $\vec{n}_i$  e  $\vec{n}_j$  são, respectivamente, vetores normais aos lados opostos aos pontos  $P_i$  e  $P_j$ .

O ponto de encontro das mediatrizes define o circuncentro. Assim, procuramos  $s_*$  e  $t_*$  tais que

$$m_i(s_*) = m_j(t_*) .$$

Para tanto, é necessário que

$$b_i + s_* \vec{n}_i = b_j + t_* \vec{n}_j .$$

ou

$$s_* \vec{n}_i - t_* \vec{n}_j = b_j - b_i .$$

Fazemos o produto interno da equação vetorial anterior com  $\vec{n}_i$  e com  $-\vec{n}_j$ , obtendo:

$$\begin{aligned} s_* \langle \vec{n}_i, \vec{n}_i \rangle - t_* \langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle &= \langle \vec{n}_i, b_j - b_i \rangle , \\ -s_* \langle \vec{n}_j, \vec{n}_i \rangle + t_* \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle &= \langle \vec{n}_j, b_i - b_j \rangle . \end{aligned}$$

ou, matricialmente,

$$\begin{pmatrix} \langle \vec{n}_i, \vec{n}_i \rangle & -\langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle \\ -\langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle & \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_* \\ t_* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \vec{n}_i, b_j - b_i \rangle \\ \langle \vec{n}_j, b_i - b_j \rangle \end{pmatrix} . \quad (3.19)$$

Seja

$$A = \begin{pmatrix} \langle \vec{n}_i, \vec{n}_i \rangle & -\langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle \\ -\langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle & \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle \end{pmatrix} , \quad (3.20)$$

e  $A_s$  a matriz que se obtém substituindo a primeira coluna da matriz  $A$  pelo lado direito da equação (3.19),

$$A_s = \begin{pmatrix} \langle \vec{n}_i, b_j - b_i \rangle & -\langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle \\ \langle \vec{n}_j, b_i - b_j \rangle & \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle \end{pmatrix} . \quad (3.21)$$

Aplicando a regra de Cramer obtemos

$$\begin{aligned} s_* &= \frac{\det A_s}{\det A} \\ &= \frac{\langle \vec{n}_i, b_j - b_i \rangle \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle + \langle \vec{n}_j, b_i - b_j \rangle \langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle}{\langle \vec{n}_i, \vec{n}_i \rangle \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle - \langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle^2} \end{aligned}$$

e concluímos que o circuncentro é dado por:

$$m_i(s_*) = b_i + \frac{\langle \vec{n}_i, b_j - b_i \rangle \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle + \langle \vec{n}_j, b_i - b_j \rangle \langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle}{\langle \vec{n}_i, \vec{n}_i \rangle \langle \vec{n}_j, \vec{n}_j \rangle - \langle \vec{n}_i, \vec{n}_j \rangle^2} \vec{n}_i . \quad (3.22)$$

Falta agora explicitar  $b_i$ ,  $b_j$ ,  $\vec{n}_i$  e  $\vec{n}_j$  em termos dos vértices  $P_i^n$ ,  $P_j^n$ ,  $P_k^n$  do triângulo. Por simplicidade de notação, omitiremos o índice  $n$  correspondente ao nível da malha. É imediato que os bissetores são:

$$b_i = \frac{P_j + P_k}{2} \quad \text{e} \quad b_j = \frac{P_i + P_k}{2} . \quad (3.23)$$

Para determinar  $\vec{n}_i$ , notamos que  $\vec{n}_i \in [P_i - P_k, P_i - P_j]$ , e que  $\vec{n}_i \perp (P_j - P_k)$ . Desta forma, escrevemos  $\vec{n}_i$  como uma combinação linear de  $P_i - P_k$  e  $P_i - P_j$ ,

$$\vec{n}_i = \alpha_1 (P_i - P_k) + \alpha_2 (P_i - P_j) ,$$

e, pela condição de ortogonalidade, temos

$$\alpha_1 \underbrace{\langle P_i - P_k, P_j - P_k \rangle}_{\gamma_1} + \alpha_2 \underbrace{\langle P_i - P_j, P_j - P_k \rangle}_{\gamma_2} = 0 .$$

Neste caso é possível escolher-se

$$(\alpha_1, \alpha_2) = (\gamma_2, -\gamma_1) ,$$

donde,

$$\vec{n}_i = \langle P_i - P_j, P_j - P_k \rangle (P_i - P_k) - \langle P_i - P_k, P_j - P_k \rangle (P_i - P_j) . \quad (3.24)$$

De forma similar obtemos  $\vec{n}_j$ . Como  $\vec{n}_j \in [P_j - P_i, P_j - P_k]$  e  $\vec{n}_j \perp (P_i - P_k)$ , tem-se que

$$\vec{n}_j = \beta_1 (P_j - P_i) + \beta_2 (P_j - P_k)$$

e pela condição de ortogonalidade, temos que

$$\beta_1 \underbrace{\langle P_j - P_i, P_i - P_k \rangle}_{\delta_1} + \beta_2 \underbrace{\langle P_j - P_k, P_i - P_k \rangle}_{\delta_2} = 0 .$$

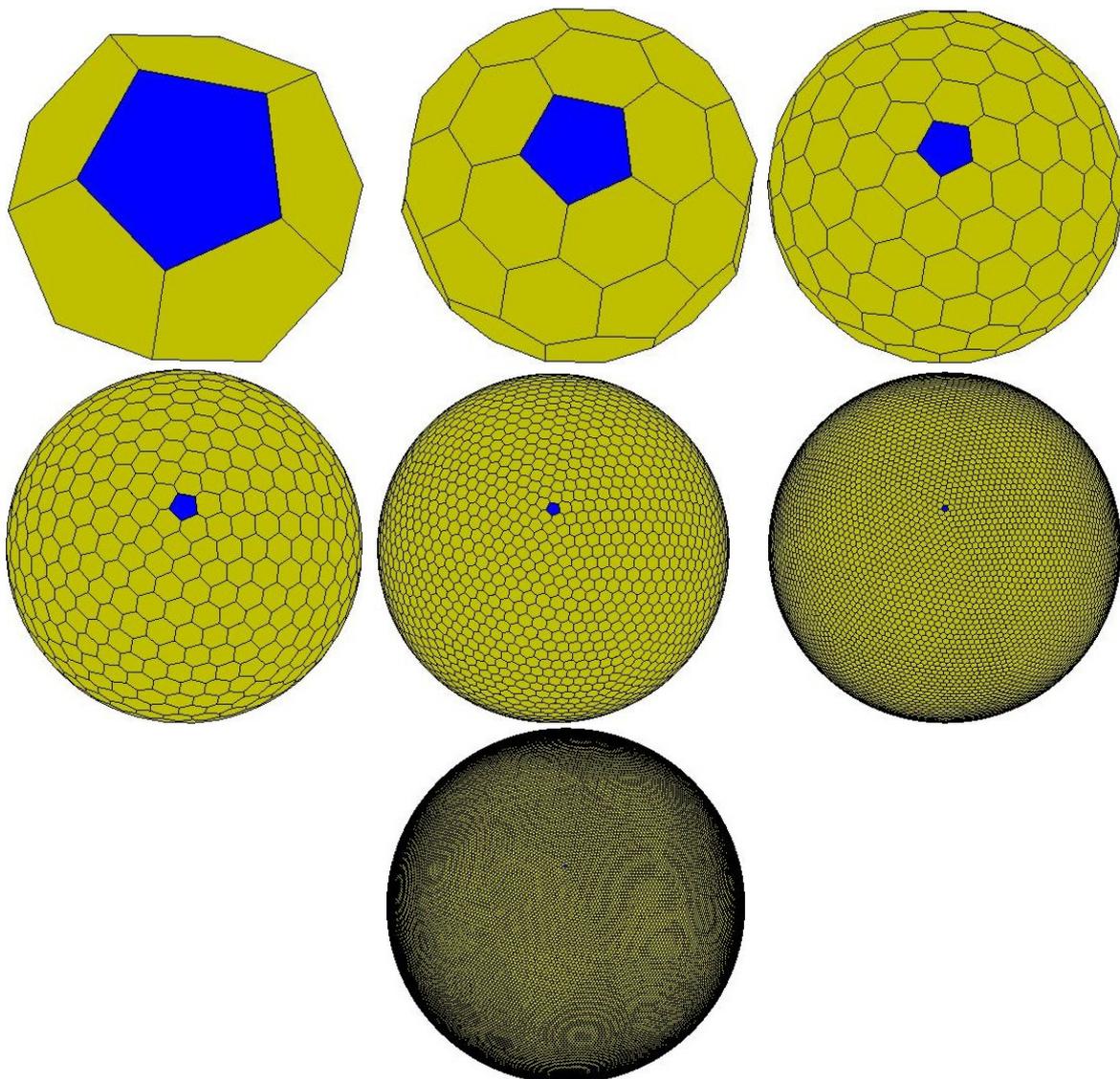
Tomamos

$$(\beta_1, \beta_2) = (\delta_2, -\delta_1) .$$

donde,

$$\vec{n}_j = \langle P_j - P_k, P_i - P_k \rangle (P_j - P_i) - \langle P_j - P_i, P_i - P_k \rangle (P_j - P_k) . \quad (3.25)$$

Finalmente, substituindo os valores de  $b_i$ ,  $b_j$ ,  $\vec{n}_i$ ,  $\vec{n}_j$  obtidos nas equações (3.23), (3.24) e (3.25), na equação (3.22), obtemos a expressão do circuncentro do triângulo determinado pelos pontos  $P_i$ ,  $P_j$ ,  $P_k$ , em função das coordenadas dos pontos.



**Figura 3.10:** Malha dual do refinamento diádico da malha icosaedral desde o nível 0 até o nível 6.

## Capítulo 4

# Discretização do problema de Poisson

Neste capítulo, consideramos a discretização do problema de Poisson a partir da sua formulação como um sistema de equações de primeira ordem. Em seguida apresentamos uma formulação matricial da discretização, determinando condições necessárias e suficientes para garantir a existência e a unicidade da solução do problema discretizado.

### 4.1 Equações discretizadas

Com o objetivo de discretizar o sistema de equações (2.51), restringimo-lo a uma face da malha dual,  $F'$ . Integrando ambos os lados da primeira equação dada em (2.51) na face  $F'$ , e aplicando o teorema da divergência, obtemos

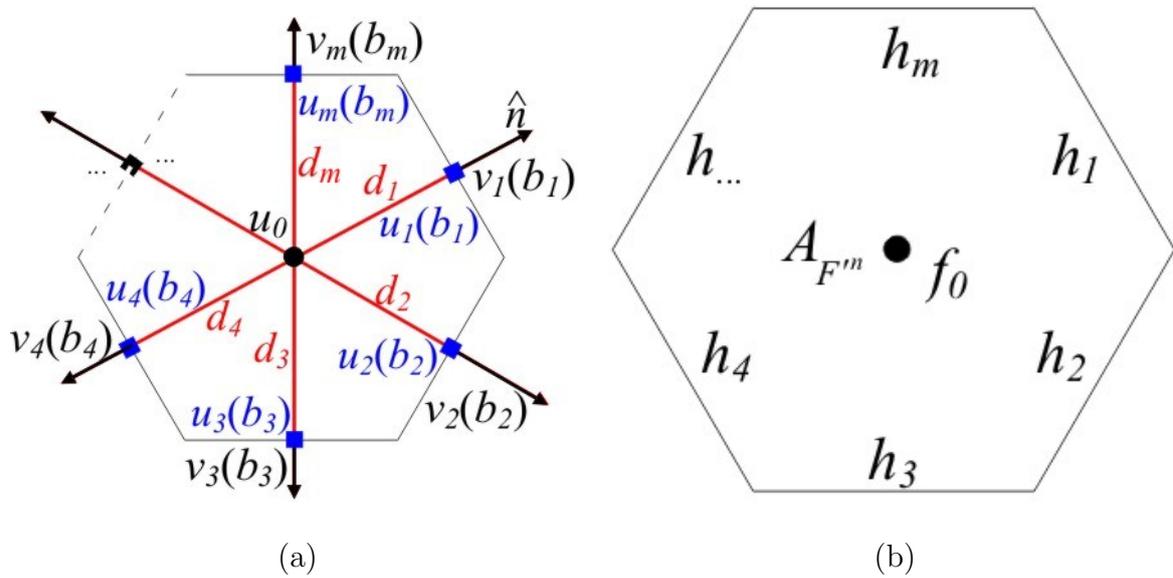
$$\int_{\partial F'} \vec{v}(x) \cdot \hat{n} dl(x) = \int_{F'} \operatorname{div}_S \vec{v}(x) dS(x) = \int_{F'} f(x) dS(x), \quad x \in S^2, \quad (4.1)$$

onde  $\hat{n}$  é o vetor normal unitário exterior ao contorno de  $F'$ ,  $\partial F'$ .

Denotamos por  $\underline{v}_j$ , o fluxo exterior ao contorno, veja figura 4.1a, avaliado no bissetor de cada aresta de  $F'$ , ou seja,

$$\underline{v}_j = \vec{v}(b_j) \cdot \hat{n},$$

onde  $b_j$  é o bissetor da aresta  $j$ ,  $j = 1, \dots, m$ . Aqui usamos subíndices,  $j = 1, \dots, m$ , com  $m$  podendo assumir o valor de 5 ou de 6, porque, como explicado na página 37,



**Figura 4.1:** Representação de uma célula obtida pela interseção da malha icosaedral e da malha dual, em torno de um vértice da malha icosaedral: (a) Face da malha dual: potencial central, fluxos e potenciais nos bissetores; (b) área da face, fonte no vértice central, e comprimento das arestas.

seção 3.3, as faces são pentágonos ou hexágonos, para servir de numeração local, das arestas quer da malha icosaedral quer da malha dual (que se cruzam ortogonalmente), em torno de um vértice da malha icosaedral. A esse arranjo damos o nome de célula (ou célula computacional), veja figura 4.1.

Desta forma, boas aproximações para cada um dos lados extremos da equação (4.1), na célula computacional, são dadas respectivamente por

$$\int_{\partial F'} \vec{v}(x) \cdot \hat{n} \, dl(x) \approx \sum_{l=1}^m h_l \underline{v}_l, \quad (4.2a)$$

$$\int_{F'} f(x) \, dS(x) \approx f_0 A_{F'}, \quad (4.2b)$$

donde se obtém a seguinte equação aproximada,

$$\sum_{l=1}^m h_l \underline{v}_l \approx f_0 A_{F'}, \quad (4.2c)$$

onde  $h_l$  é o comprimento da  $l$ -ésima aresta de  $F'$ ,  $f_0$  é o valor do termo fonte,  $f$ , avaliado no ponto central de  $F'$ , e  $A_{F'}$  é a área de  $F'$ , veja figura 4.1b.

Assim, as aproximações dadas na equação (4.2c) motivam a definição da equação discreta dada por

$$\sum_{l=1}^m h_l v_l = f_0 A_{F'}. \quad (4.3)$$

Aqui,  $h_l$ ,  $l = 1, \dots, m$ ,  $f_0$  e  $A_{F'}$  são dados do problema definidos no capítulo 3, e  $v_l$ ,  $l = 1, \dots, m$ , são as incógnitas.

Sejam  $\underline{u}_j = u(b_j)$ ,  $j = 1, \dots, m$ , os valores da solução  $u$ , chamada de potencial, dados nos bissetores,  $b_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , das arestas da face da malha dual, veja figura 4.1. Denotamos por  $\underline{u}_0$  o potencial dado no centro da face da malha dual, isto é, no vértice da malha icosaedral que pertence a esta face da malha dual.

Multiplicando ambos os lados da segunda equação no sistema (2.51) por  $\hat{n}$ , obtemos

$$\hat{n} \cdot \vec{v}(x) = -\hat{n} \cdot \nabla_S u(x), \quad x \in S^2.$$

Avaliando esta equação nos bissetores das arestas da malha dual, e usando uma aproximação de diferenças recuada no lado direito desta nova equação, obtemos uma aproximação para o fluxo  $v$ , avaliado em  $b_j$ , dada por

$$\underline{v}_j \approx -\frac{\underline{u}_j - \underline{u}_0}{d_j}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (4.4)$$

onde  $d_j$  é a distância entre o bissetor da  $j$ -ésima aresta de  $F'$ , e o vértice da malha icosaedral que pertence a  $F'$ , veja figura 4.1. Esta aproximação justifica escolher a equação discretizada

$$v_j = -\frac{u_j - u_0}{d_j}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.5)$$

em que  $d_j$ ,  $j = 1, \dots, m$  são dados do problema e  $u_j$ ,  $j = 0, \dots, m$ , e  $v_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , são as incógnitas.

Espera-se que as soluções  $u_j$ ,  $j = 0, \dots, m$  e  $v_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , das equações (4.3)

e (4.5), sejam boas aproximações, respectivamente, de  $\underline{u}_j$  e  $\underline{v}_j$ , conforme o nível de refinamento da malha aumente, o que representamos como  $\underline{u}_j \approx u_j$  e  $\underline{v}_j \approx v_j$ , quando  $n \rightarrow \infty$ .

Nas equações (4.3) e (4.5), temos  $1 + m$  equações e  $1 + 2m$  incógnitas. Expressando em termos de uma notação matricial, temos que a matriz do sistema tem mais colunas do que linhas, fazendo com que o sistema, se tiver solução, tenha infinitas soluções, uma vez que o núcleo da matriz do sistema é não trivial. Para garantir que o sistema tenha solução única, precisamos, pelo menos, que o número de equações seja maior ou igual ao número de incógnitas.

Observamos, no entanto, que estamos interessados na solução do problema na esfera toda, e que as variáveis discretas que introduzimos foram variáveis correspondentes a apenas uma face da malha dual. Ao considerar as diferentes variáveis discretas de todas as faces duais, haverá condições de se ter um sistema linear com solução única. Para tanto, consideramos condições de interface entre as faces da malha dual.

Reproduzimos, em seguida, as equações (4.3) e (4.5) para referência futura,

$$\sum_{l=1}^m h_l v_l = f_0 A_{F'} , \quad (4.6a)$$

$$v_j = -\frac{u_j - u_0}{d_j}, \quad j = 1, \dots, m . \quad (4.6b)$$

## 4.2 Condições de interface

Ao considerar os sistemas de equações para cada uma das faces da malha dual, lembrando que o total de faces é  $\mathcal{F}$ , obter-se-á  $(m + 1)\mathcal{F}$  equações e  $(2m + 1)\mathcal{F}$  incógnitas.

Motivados pelo fato do sistema discreto ter menos equações do que incógnitas, impomos condições de interface adequadas, através de restrições aos fluxos e aos potenciais dados nos bissetores das arestas de  $F'$ , obtendo como consequência o mesmo número de equações e de incógnitas.

Utilizamos o sobrescrito ( $\tilde{\phantom{x}}$ ) para denotar os valores das variáveis discretas pertencentes a uma face vizinha à face genérica  $F'$ . Inicialmente, definimos uma condição,

semelhante às condições do tipo Dirichlet em equações diferenciais, para o potencial dado na fronteira, expressando a continuidade do potencial através das interfaces. Essa condição é dada por

$$u_j = \tilde{u}_{\tilde{j}}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (4.7a)$$

onde  $\tilde{j}$  é a numeração atribuída à aresta  $j$ , da célula computacional em questão, na célula vizinha.

Em seguida, notamos que  $n = -\tilde{n}$ , veja figura 4.2. Esse fato nos motiva a definir a condição, semelhante às condições do tipo Neumann em equações diferenciais, para o fluxo na interface, impondo a continuidade do fluxo através da interface,

$$v_j = -\tilde{v}_{\tilde{j}}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.7b)$$

Aparentemente obtemos  $2m\mathcal{F}$  novas equações. Só que cada uma delas aparece duas vezes, uma vez numa célula e a outra vez na célula vizinha. Deve-se então desconsiderar metade das equações. Obtemos assim as  $m\mathcal{F}$  novas equações que faltavam.

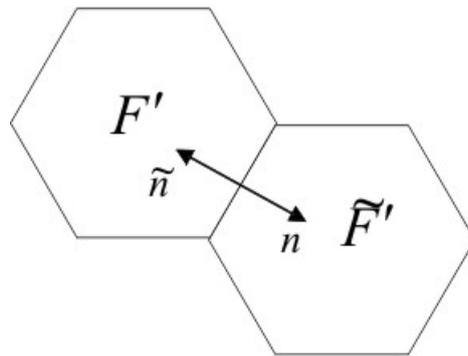


Figura 4.2: Fluxos dados em  $F'$  e  $\tilde{F}'$ .

### 4.3 Mudança de variável

Antes de prosseguirmos com a análise do problema, fazemos uma mudança de variável com o objetivo de agrupar todos os pesos numa única constante.

Para agrupar todos os pesos obtidos nas equações discretas dadas em (4.6), provenientes das integrais dadas na equação (4.1), em um único componente, introduzimos uma mudança de variável, dada por

$$w_j = h_j v_j, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.8)$$

Assim, as equações (4.6) e (4.7), podem ser reescritas como

$$c_j^{-1} w_j + (u_j - u_0) = 0 \quad (4.9a)$$

$$\sum_{l=1}^m w_l = f_0 A_{F'} \quad (4.9b)$$

$$u_j = \tilde{u}_{\tilde{j}} \quad (4.9c)$$

$$w_j = -\tilde{w}_{\tilde{j}} \quad (4.9d)$$

onde  $c_j = h_j/d_j$  e  $j = 1, \dots, m$  e  $\tilde{j}$  é a numeração local, na célula vizinha, da aresta  $j$ .

Seja  $\beta \in \mathbb{R}$ ,  $\beta > 0$  um parâmetro (a motivação para que o parâmetro  $\beta$  seja escolhido positivo é apresentada na seção 5.3). Multiplicando a equação (4.9d) por  $\beta$  e subtraindo-a, termo a termo, da equação (4.9c), obtemos

$$u_j - \beta w_j = \tilde{u}_{\tilde{j}} + \beta \tilde{w}_{\tilde{j}}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.10a)$$

Num processo similar, mas ao invés de subtrair, adicionando, obtemos

$$\tilde{u}_{\tilde{j}} - \beta \tilde{w}_{\tilde{j}} = u_j + \beta w_j, \quad (4.10b)$$

onde  $j = 1, \dots, m$ .

A equação (4.10) é equivalente às equações dadas em (4.9c) e (4.9d), e substituímos esta por aquelas. Para efeito de organização, atribuímos a condição dada em (4.10a) à face  $F'$ , e a condição dada em (4.10b) à face vizinha  $\tilde{F}'$ . Elas são semelhantes às condições de fronteira do tipo Robin em equações diferenciais.

Desta forma, obtemos mais  $m$  equações para a face  $F'$ , totalizando assim  $1 + 2m$  equações e incógnitas, dadas por (4.9a), (4.9b) e (4.10a). Nesta contagem, estamos considerando como incógnitas as variáveis definidas na célula  $F'$  nomeadamente  $u_j$ ,

$j = 0, \dots, m$   $w_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , enquanto que as variáveis definidas nas células vizinhas  $\tilde{u}_j$ ,  $j = 0, \dots, m$ ,  $\tilde{w}_j$ ,  $j = 1, \dots, m$  não estão sendo contadas como incógnitas. Em cada célula computacional, temos,

$$c_j^{-1}w_j + (u_j - u_0) = 0, \quad (4.11a)$$

$$\sum_{l=1}^m w_l = f_0 A_{F'} , \quad (4.11b)$$

$$u_j - \beta w_j = \tilde{u}_j + \beta \tilde{w}_j . \quad (4.11c)$$

para  $j = 1, \dots, m$ .

É claro que esse sistema, alocado à face  $F'$ , não pode ser resolvido por si só, uma vez que, através da equação (4.11c), depende de valores desconhecidos  $\tilde{u}_j$  e  $\tilde{w}_j$ ,  $j = 1, \dots, m$ , referentes aos potenciais e aos fluxos reescalados dados nas interfaces com as  $m$  faces vizinhas. Observamos que as faces podem ser pentágonos e hexágonos, donde  $m$  pode assumir os valores 5 ou 6. Assim, a equação (4.4) representa  $(1 + 2m_i)$  equações, com  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ . Levando-se em consideração todas as faces da malha dual, em número de  $\mathcal{V}_n$ , teremos  $\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} (1 + 2m_i)$  equações e incógnitas. Esse sistema, apesar de ter o mesmo número de equações e incógnitas, nem sempre tem solução, e quando tem não é única. Este assunto tratamos a seguir.

## 4.4 Representação matricial do sistema de Poisson

Nesta seção obtemos a representação matricial do problema de Poisson através da discretização feita nas seções 4.1 a 4.3.

Algumas manipulações nas equações discretizadas são necessárias. Para prosseguirmos no processo que irá finalizar na representação matricial desejada, necessitamos de alguns conceitos adicionais da teoria dos grafos. Assim, os relembramos.

Um **grafo** é um objeto matemático formado por dois conjuntos: *i*) um conjunto de nós (pontos),  $\mathcal{V} = \{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ ; e *ii*) um conjunto de arcos (ligações entre os nós)  $\mathcal{A}$ , representado por um conjunto de subconjuntos de dois elementos de  $\mathcal{V}$ .

Um **grafo orientado** é um grafo cujos arcos são orientados, ou seja, em cada arco

se estabelece qual é o nó inicial e qual o final. Assim, em contraste com o conjunto de arcos, o conjunto de arcos orientados,  $\mathcal{O}$ , é um conjunto formado por pares ordenados, elementos de  $\mathcal{V} \times \mathcal{V}$ , com a propriedade de não reflexividade, isto é, tal que  $(v, v) \notin \mathcal{O}$ , para nenhum  $v \in \mathcal{V}$ , e com a propriedade de anti-simetria, isto é, se  $(v_i, v_j) \in \mathcal{O}$ , então  $(v_j, v_i) \notin \mathcal{O}$ .

Uma *rede* é um grafo orientado que ademais tem, atribuído a cada um dos seus arcos, um número positivo (”condutância”) que nos modelos reflete alguma propriedade ”física” ou ”material” do arco.

Definimos, agora, a *matriz de incidência* de um grafo, a qual denotamos por  $A$ , que codifica a conectividade dos nós através dos arcos orientados do grafo. Cada linha da matriz  $A$  está associada a um arco e cada coluna a um nó. Assim,  $A$  é uma matriz de ordem <sup>1</sup>  $\#(\mathcal{O}) \times \#(\mathcal{V})$ , onde, em cada linha, existem somente dois elementos não nulos, um  $(-1)$  e um  $(+1)$ , nas colunas correspondentes, respectivamente, ao nó de partida (com relação à orientação) e ao nó de chegada do arco associado a esta mesma linha.

Reescrevendo a equação (4.6b) para uma face  $F'$  e as faces vizinhas de  $F'$ , temos

$$d_j v_j = -(u_j - u_0) , j = 1, \dots, m , \text{ e} \quad (4.12a)$$

$$\tilde{d}_j \tilde{v}_j = -(\tilde{u}_j - \tilde{u}_0) , j = 1, \dots, m . \quad (4.12b)$$

Substituindo as condições de interface dadas em (4.7), na equação (4.12b), temos que

$$-\tilde{d}_j v_j = -(u_j - \tilde{u}_0) , j = 1, \dots, m . \quad (4.12c)$$

Logo, subtraindo a equação (4.12c) da equação (4.12a), obtemos

$$v_j = -\frac{\tilde{u}_0 - u_0}{d_j + \tilde{d}_j} , j = 1, \dots, m . \quad (4.12d)$$

---

<sup>1</sup> $\#(\mathcal{O})$  é a cardinalidade, ou número de elementos, do conjunto  $\mathcal{O}$ .

Fazendo a mudança de variável dada em (4.8), na variável  $v_j$  da equação (4.12d),

$$w_j = -\frac{\tilde{u}_0 - u_0}{\frac{d_j + \tilde{d}_j}{h_j}}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.13)$$

Em tempo, reescrevemos a equação (4.9b) a seguir.

$$\sum_{l=1}^m w_l = f_0 A_{F'} , \quad (4.14)$$

onde, como definido na equação (4.8), temos que  $w_l = h_l v_l$ ,  $l = 1, \dots, m$ .

Neste capítulo, conforme dito, utilizamos subscrito  $j = 1, \dots, m$  (com  $m = 5$  ou  $6$ ) para indicar a numeração local numa célula. Por outro lado, utilizamos um sobrescrito para definir a numeração global em objetos associados à malha icosaedraal ou sua dual (em algum nível de refinamento).

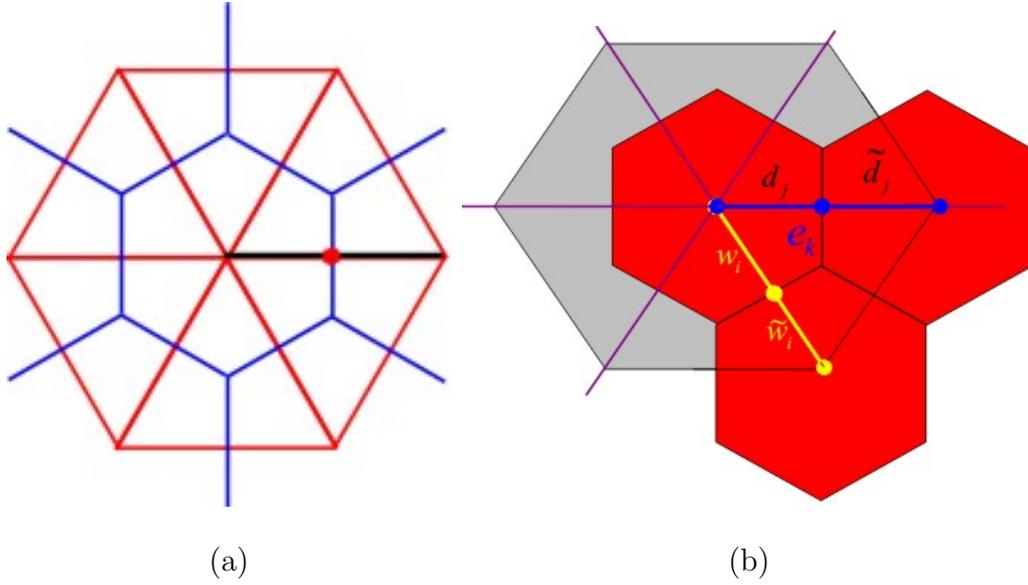
Diante destas definições, consideremos a rede dada pelo grafo constituído pelas arestas e vértices da malha icosaedraal de nível genérico  $n$ , com os nós do grafo sendo os vértices da malha e os arcos sendo as arestas com uma orientação escolhida (e arbitrária) dos arcos, isto é, um dos nós associados a um arco chamamo-lo de nó de partida e o outro nó de chegada, e os pesos,  $G = (g^i)$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{A}_n$ , nos arcos, sendo dados por

$$g^i = \frac{h^i}{d^i + \tilde{d}^i}. \quad (4.15)$$

Assim, a matriz de incidência  $A = (a_{kj})$ ,  $\mathcal{A}_n \times \mathcal{V}_n$ , com  $k = 1, \dots, \mathcal{A}_n$  e  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ , é dada por

$$a_{ki} = \begin{cases} -1 & , \text{ se o vértice } i \text{ for origem da aresta } k, \\ 1 & , \text{ se o vértice } i \text{ for destino da aresta } k, \\ 0 & , \text{ se o vértice } i \text{ não for tocado pela aresta } k. \end{cases} \quad (4.16)$$

Pode-se verificar então que a equação (4.14) (definida para cada nó ou célula com-



**Figura 4.3:** (a) Construção da rede a partir da malha icosaedral, com a condutância definida com a intervenção da malha dual; (b)  $w_i = -\tilde{w}_i$ . A quantidade  $d_j + \tilde{d}_j$  é uma aproximação da distância entre os nós da malha icosaedral.

putacional) em forma matricial e de forma global para o grafo completo pode ser escrita como

$$A^T \mathbf{w} = \bar{\mathbf{f}}, \quad (4.17a)$$

onde  $\bar{f}^j = f^j A_{F^j}$ ,  $j = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $\mathbf{w}$  se refere ao fluxo reescalado em cada aresta da malha icosaedral.

A equação (4.13), também em forma matricial, e representando todas as equações em todos os arcos do grafo, é escrita como

$$-GA\mathbf{u} = \mathbf{w}, \quad (4.17b)$$

onde  $G$  é uma matriz diagonal,  $\mathcal{A}_n \times \mathcal{A}_n$ , cujas entradas na diagonal são dadas na equação (4.15). Aqui  $\mathbf{u}$  se refere aos potenciais em cada nó da malha icosaedral.

O sistema formado pelas equações (4.17a) e (4.17b) para  $\mathbf{u} = (u^j)$ ,  $j = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $\mathbf{w} = (w^i)$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{A}_n$ , é equivalente ao sistema formado pelas equações (4.9) para

$u_j, w_j, j = 1, \dots, m$ , em cada célula computacional.

Dada a solução de (4.17), a construção da solução para (4.9), nos pontos de interseção das malhas é obtido fazendo-se uso da equação (4.12a), definindo-se o potencial na interseção como sendo

$$u_j = u_0 \pm \frac{d_j}{h_j} w_j$$

(sendo  $(-)$  o sinal se a orientação do arco que leva à interseção tiver o nó denotado por  $(0)$  como sendo o de partida, e o sinal  $(+)$  caso contrário).

## 4.5 Existência e unicidade

Nesta seção obtemos condições necessárias e suficientes para garantir a existência e a unicidade da solução do sistema de equações (4.17).

### 4.5.1 Unicidade

Tratamos, inicialmente, da unicidade da solução do sistema de equações (4.9) através da sua formulação equivalente, equação (4.17). Consideramos isoladamente a equação (4.17a),

$$A^T \mathbf{w} = \bar{\mathbf{f}},$$

onde  $A^T$  é uma matriz  $\mathcal{V}_n \times \mathcal{A}_n$  com  $\mathcal{V}_n < \mathcal{A}_n$ .

Se  $\mathcal{N}(A^T)$  representa o núcleo de  $A^T$ ,  $\mathcal{I}m(A^T)$ , a imagem de  $A^T$ , e  $\dim V$  é a dimensão do subespaço  $V$ , pelo teorema do núcleo e da imagem, temos

$$\dim \mathcal{N}(A^T) + \dim \mathcal{I}m(A^T) = \mathcal{A}_n,$$

e como

$$\dim \mathcal{I}m(A^T) \leq \mathcal{V}_n,$$

e

$$\mathcal{V}_n < \mathcal{A}_n,$$

concluimos que

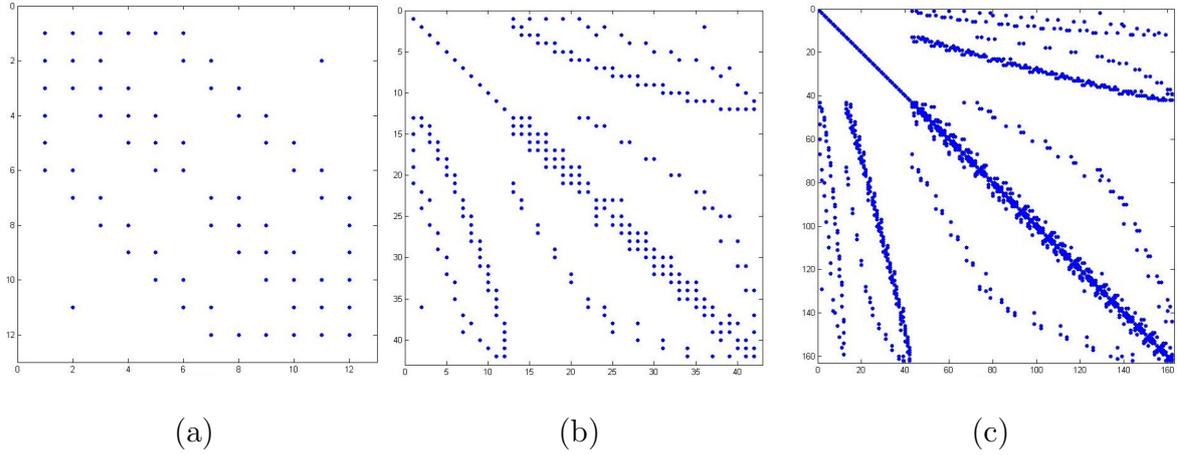
$$\dim \mathcal{N}(A^T) > 0,$$

provocando a não unicidade da solução desta equação.

Assim, buscamos condições que garantam esta unicidade. Para tanto, substituímos  $\mathbf{w}$  dado na equação (4.17b), em (4.17a), obtendo

$$-A^T G A \mathbf{u} = \bar{\mathbf{f}}. \quad (4.18)$$

É fácil verificar que a matriz  $A^T G A$  é automaticamente uma matriz quadrada e simétrica; veja uma representação da matriz na figura 4.4.



**Figura 4.4:** Representação da matriz do sistema,  $-A^T G A$ . São indicadas as posições não nulas nos níveis: (a) 0; (b) 1; (c) 2.

Seja  $\mathbb{1}$  o vetor que tem todas as entradas iguais a 1. Como  $A$  é uma matriz de incidência, é fácil verificar que  $A\mathbb{1} = 0$ , isto é,  $\mathbb{1} \in \mathcal{N}(A)$ . É imediato então que qualquer múltiplo de  $\mathbb{1}$ ,  $\theta\mathbb{1}$ , onde  $\theta \in \mathbb{R}$ , também pertence ao núcleo de  $A$ , ou seja,  $A\theta\mathbb{1} = \theta A\mathbb{1} = 0$ . Mas, pode-se verificar, uma vez que o grafo é conexo, que  $\mathcal{N}(A)$  é gerado por  $\mathbb{1}$ .

Além disso, temos que o núcleo de  $A^T G A$  também é gerado por  $\mathbb{1}$ . De fato, seja  $\mathbf{q} \in \mathcal{N}(A^T G A)$ . Então

$$0 = \mathbf{q}^T A^T G A \mathbf{q} = \mathbf{q}^T A^T G^{1/2} G^{1/2} A \mathbf{q} = \mathbf{q}^T A^T (G^{1/2})^T G^{1/2} A \mathbf{q} = \|G^{1/2} A \mathbf{q}\|^2, \quad (4.19)$$

e, como  $G$  é positiva definida, concluímos que  $A\mathbf{q}$  é nulo, ou seja,  $\mathbf{q}$  pertence ao  $\mathcal{N}(A)$ , logo é um múltiplo de  $\mathbb{1}$ .

Desta forma, se  $\mathbf{u}^*$  é solução de (4.18), então qualquer solução será da forma  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \theta\mathbb{1}$ , para algum valor de  $\theta \in \mathbb{R}$ .

Que  $\mathbf{u}^* + \theta\mathbb{1}$  é solução é imediato pois  $\mathbb{1}$  pertence ao núcleo de  $A$ . Agora, que qualquer solução de (4.18) é dessa forma é porque o  $\mathcal{N}(A^TGA)$  é gerado por  $\mathbb{1}$ .

Para obter uma única solução decidimos então estabelecer uma restrição adicional para eliminar o grau de liberdade representado por  $\theta$ . Para tanto basta impor que

$$\mathbb{1}^T \mathbf{u} = 0 . \quad (4.20)$$

Logo, uma condição necessária e suficiente para garantir a unicidade da solução para a equação (4.18) é adicionar a equação (4.20).

## 4.5.2 Existência

Para garantir a existência da solução da equação (4.18), usamos da álgebra linear resultado que diz que um sistema linear,  $Bx = b$ , tem solução se e somente se  $b^T y = 0$ , para todo  $y$  pertencente ao núcleo de  $B^T$ ,  $B^T y = 0$ . Em outras palavras, o sistema tem solução se e somente se  $b$  é ortogonal ao núcleo de  $B^T$ .

Adaptando ao nosso sistema, temos então que  $-A^TGA\mathbf{u} = \bar{\mathbf{f}}$  tem solução se e somente se  $\bar{\mathbf{f}}$  é ortogonal ao núcleo de  $A^TGA$ , e como  $\mathcal{N}(A^TGA) = \text{span}\{\mathbb{1}\}$ , a condição de existência se traduz em

$$\mathbb{1}^T \bar{\mathbf{f}} = 0 . \quad (4.21)$$

Assim, uma condição necessária e suficiente para garantir a existência da solução é dada por (4.21).

# Capítulo 5

## Método iterativo

Neste capítulo apresentamos um método iterativo para resolver o sistema de equações referente à discretização do problema de Poisson.

O método numérico iterativo, além do índice de iteração, e do parâmetro de discretização do problema de Poisson (nível da malha), depende de um outro parâmetro designado por  $\beta$ , introduzido na seção 4.3. O método iterativo leva à consideração da solução de um problema intermediário, o qual impõe restrições na escolha do parâmetro  $\beta$ . Este é o caso de um problema algébrico, que se assemelha à questão da existência de autovalores de Steklov no caso de equações diferenciais, que apresentamos na seção 5.3.

### 5.1 Introdução

Após obter as condições para garantir a existência e unicidade do sistema discreto (4.17), dadas por (4.20) e (4.21), derivamos um algoritmo iterativo para resolvê-lo numericamente.

Assumimos, a partir de agora, que a condição de existência, (4.21), é satisfeita. Desta forma, o algoritmo iterativo desenvolvido aqui, calcula o potencial para cada uma das faces da malha dual, ou em outras palavras, para cada vértice da malha icosaedral, em cada célula computacional. Calcula ainda potenciais e fluxos, respectivamente, nas e através das arestas da malha dual.

De fato, cada uma das células introduzidas no capítulo anterior, será considerada uma célula computacional que após se comunicar com as células vizinhas, realiza novos cálculos promovendo uma atualização das variáveis.

As manipulações algébricas que se seguem transformam o sistema de equações em outro equivalente em que a interpretação apresentada no parágrafo anterior pode ser entendida.

Em cada célula computacional devem ser satisfeitas as equações

$$c_j^{-1}w_j + (u_j - u_0) = 0, \quad j = 1, \dots, m \quad (5.1a)$$

$$\sum_{l=1}^m w_l = f_0 A_{F'} \quad (5.1b)$$

$$u_j - \beta w_j = \tilde{u}_j + \beta \tilde{w}_j, \quad j = 1, \dots, m \quad (5.1c)$$

que, de qualquer forma, dependem dos valores definidos em células vizinhas (aqui o sobrescrito *til* ( $\tilde{\quad}$ ) representa que o valor da variável se refere à célula vizinha). Relembramos que  $j = 1, \dots, m$  é uma numeração local na célula computacional.

O algoritmo iterativo é obtido da seguinte forma. Seja  $k$  o contador de iterações e coloque-o como sobrescrito nas variáveis a determinar. No cálculo das equações (5.1) em uma dada célula, deseja-se determinar os valores provenientes das variáveis definidas na própria célula, colocando o índice de iteração em  $k+1$ , a partir dos valores das variáveis definidas nas células vizinhas no passo anterior de iteração,  $k$ . Obtém-se então o método iterativo a partir do sistema de equações em cada célula,

$$c_j^{-1}w_j^{k+1} + (u_j^{k+1} - u_0^{k+1}) = 0, \quad j = 1, \dots, m \quad (5.2a)$$

$$\sum_{l=1}^m w_l^{k+1} = f_0 A_{F'} \quad (5.2b)$$

$$u_j^{k+1} - \beta w_j^{k+1} = \tilde{u}_j^k + \beta \tilde{w}_j^k, \quad j = 1, \dots, m. \quad (5.2c)$$

Apresenta-se o método iterativo em um outro formato.

Resolve-se a equação (5.2c) para  $u_j^{k+1}$ ,

$$u_j^{k+1} = \beta w_j^{k+1} + \tilde{u}_j^k + \beta \tilde{w}_j^k, \quad j = 1, \dots, m, \quad (5.3a)$$

substitui-se na equação (5.2a) e resolve-se para  $w_j^{k+1}$  obtendo-se

$$w_j^{k+1} = \xi_j (u_0^{k+1} - \tilde{u}_j^k - \beta \tilde{w}_j^k) , \quad j = 1, \dots, m . \quad (5.3b)$$

Aqui,  $\xi_j = c_j / (1 + c_j \beta)$ .

Substituindo-se  $w_j^{k+1}$  dado na equação (5.3b) no lado esquerdo da equação (5.2b) e resolvendo-se para  $u_0^{k+1}$  chegamos a

$$u_0^{k+1} = \frac{f_0 A_{F'} + \sum_{l=1}^m \xi_l (\tilde{u}_l^k + \beta \tilde{w}_l^k)}{\sum_{l=1}^m \xi_l} , \quad j = 1, \dots, m, \quad (5.3c)$$

em cada uma das  $\mathcal{V}_n$  células computacionais.

Recordamos aqui a equação (4.20), reescrita em notação indicial como

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} u_0^i = 0 , \quad (5.4)$$

onde o sobrescrito  $i$  representa a numeração global dos nós do grafo definido pela malha icosaedral de nível  $n$ .

## 5.2 Algoritmo iterativo

Nesta seção explicitamos os passos do algoritmo iterativo. Ele baseia-se nas equações (5.3) e (5.4), obedecendo a seguinte estrutura:

**Passo 1:** [Inicialização] Inicie as variáveis  $u_0^0$ ,  $u_j^0$ ,  $w_j^0$ , para  $j = 1, \dots, m$  em cada célula computacional (a numeração  $j$  é local).

**Passo 2:** [Atualização dos potenciais e fluxos] Em cada uma das  $\mathcal{V}_n$  células computacionais:

(i) [Atualização dos potenciais dados nos vértices da malha icosaedral]: Baseado na equação (5.3c), utilizam-se os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas

da malha dual, e calcula-se

$$u_0^{k+1} \leftarrow \frac{f_0 A_{F'} + \sum_{l=1}^m \xi_l (\tilde{u}_l^k + \beta \tilde{w}_l^k)}{\sum_{l=1}^m \xi_l}.$$

(ii) [Atualização dos fluxos dados nos bissetores das arestas da malha dual]: Utilizando a equação (5.3b), os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas da malha dual, e o potencial dado nos vértices da malha icosaedral já atualizados, obtém-se

$$w_j^{k+1} \leftarrow \xi_j (u_0^{k+1} - \tilde{u}_j^k - \beta \tilde{w}_j^k), \quad j = 1, \dots, m.$$

(iii) [Atualização dos potenciais dados nos bissetores das arestas da malha dual]: Utilizando a equação (5.3a), os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas da malha dual, e o fluxo dado nos bissetores da malha dual já atualizados, obtém-se

$$u_j^{k+1} \leftarrow \beta w_j^{k+1} + \tilde{u}_j^k + \beta \tilde{w}_j^k, \quad j = 1, \dots, m.$$

**Passo 3:** [Imposição de média nula] A imposição de média nula, basea-se na equação (5.4). Assim, primeiro calcula-se <sup>1</sup>.

$$M \leftarrow \frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} (u_0^i)^{k+1}}{\mathcal{V}_n};$$

(i) Para <sup>2</sup>,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ :

$$(u_0^i)^{k+1} \leftarrow (u_0^i)^{k+1} - M.$$

(ii) Para  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m$ :

$$(u_j^i)^{k+1} \leftarrow (u_j^i)^{k+1} - M;$$

**Passo 4:** [Teste de convergência] Se

$$\max \|u^{k+1} - u^k\| < \epsilon,$$

<sup>1</sup>O subscrito  $i$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ , varre o conjunto das células computacionais, ou os vértices da malha icosaedral de nível  $n$ .

<sup>2</sup>É possível verificar que  $(u_0^i)^{k+1}$ , definido aqui, satisfaz a condição de média nula.

onde  $\epsilon$  é uma tolerância assumida, então pare, caso contrário, faça  $k = k + 1$  e volte ao passo 2.

O fluxograma representando este algoritmo iterativo é dado na figura 5.1.

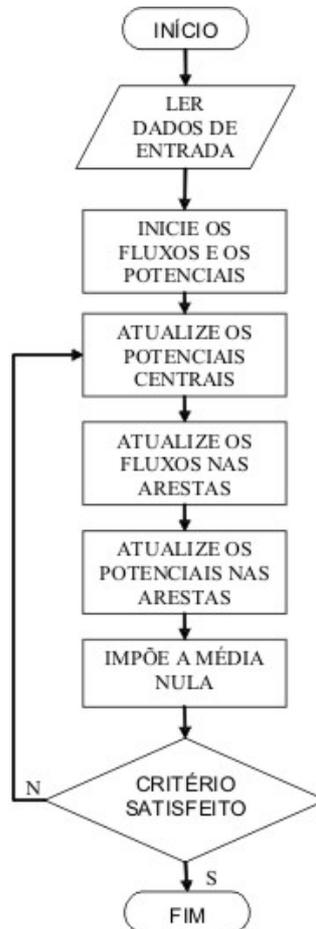


Figura 5.1: Fluxograma do algoritmo iterativo.

### 5.3 Autovalores de Steklov

Nesta seção apresentamos um breve estudo de uma condição necessária sobre o parâmetro  $\beta$ , para que o algoritmo iterativo possa ser executado.

Sejam  $(u^1, w^1)$  e  $(u^2, w^2)$  duas soluções do sistema de equações (5.2), para as

soluções de nível  $k + 1$ . A questão então é saber se é possível resolver unicamente o passo de iteração em cada célula computacional, isto é, se  $u^1 = u^2$  e  $w^1 = w^2$ . Definindo  $\bar{w} = w^1 - w^2$ ,  $\bar{u} = u^1 - u^2$ , e substraindo as equações aplicadas às soluções 1 e 2, temos o problema de autovalores de Steklov, dado por

$$c_j^{-1}\bar{w}_j + (\bar{u}_j - \bar{u}_0) = 0 \quad (5.5a)$$

$$\sum_{l=1}^m \bar{w}_l = 0 \quad (5.5b)$$

$$\bar{u}_j - \beta\bar{w}_j = 0 \quad (5.5c)$$

onde  $j = 1, \dots, m$ , em cada célula computacional.

Substituindo  $\bar{w}_j$  dado na equação (5.5a) em (5.5b), e resolvendo para  $\bar{u}_0$  obtemos

$$\bar{u}_0 = \frac{1}{c_*} \sum_{l=1}^m c_l \bar{u}_l \quad \text{onde } c_* = \sum_{l=1}^m c_l .$$

Substituindo  $\bar{u}_0$  dado na equação anterior, na equação (5.5a), temos que

$$\bar{w}_j = \frac{1}{c_*} \sum_{k=1}^m c_j (c_k - c_* \delta_{jk}) \bar{u}_k \quad (5.6)$$

onde  $\delta_{jk}$  é o delta de Kronecher, isto é,  $\delta_{jk} = 1$  se  $j = k$  e  $\delta_{jk} = 0$  se  $j \neq k$ , com  $j = 1, \dots, m$ ,  $k = 1, \dots, m$ .

Substituindo  $\bar{w}_j$  dado na equação (5.6) em (5.5c), obtemos

$$\sum_{k=1}^m [c_* (1 + c_j \beta) \delta_{jk} - c_j c_k \beta] \bar{u}_k = 0 \quad (5.7)$$

para  $j = 1, \dots, m$ .

Assim, a matriz do sistema para  $\bar{\mathbf{u}}$  é

$$\Lambda = \begin{pmatrix} c_*(1 + c_1\beta) - \beta c_1 c_1 & -\beta c_1 c_2 & \cdots & -\beta c_1 c_m \\ -\beta c_2 c_1 & c_*(1 + c_2\beta) - \beta c_2 c_2 & \cdots & -\beta c_2 c_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\beta c_m c_1 & -\beta c_m c_2 & \cdots & c_*(1 + c_m\beta) - \beta c_m c_m \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

O sistema de equações dado por (5.7) tem solução não trivial para  $\bar{\mathbf{u}}$  quando o determinante de  $\Lambda$  se anular.

O determinante de  $\Lambda$  é dado por

$$\det(\Lambda) = m\beta^{m-1}c_1 \dots c_m + (m-1)\beta^{m-2} \left( \sum_{j=1}^m c_j \dots \check{c}_j \dots c_m \right) + \dots + \beta^0 c_* .$$

O símbolo  $\check{c}_j$  significa que o termo  $c_j$  não está presente no produto.

O  $\det(\Lambda)$  é um polinômio de grau  $m-1$  em  $\beta$ . Assim, há  $m-1$  autovalores de Steklov, correspondendo a  $m-1$  autovetores linearmente independentes. Para o determinante de  $\Lambda$  ser não nulo, como os pesos  $c_i$ 's são todos positivos, basta que  $\beta > 0$ . Pode haver valores de  $\beta < 0$  que façam com que  $\det(\Lambda) = 0$ . Para os valores de  $\beta < 0$  em que  $\det(\Lambda) = 0$ , o algoritmo visto na seção (5.2) não teria solução única. Assim, eliminamos esta possibilidade impondo que  $\beta > 0$ .

## Capítulo 6

# Estudo analítico da convergência do método iterativo

Neste capítulo tratamos da demonstração analítica da convergência do método iterativo. Mostramos que ele é um método iterativo que converge para a solução desejada. Formulamos o problema de convergência e, em seguida, demonstramos a convergência do método iterativo.

### 6.1 Formulação do problema de convergência

Reescrevemos as equações (5.2) e (5.4), usando notação semelhante mas distinta à usada para o método iterativo, sendo a principal mudança com respeito à numeração que aqui introduz uma parte de caráter global, explicada mais adiante, como segue

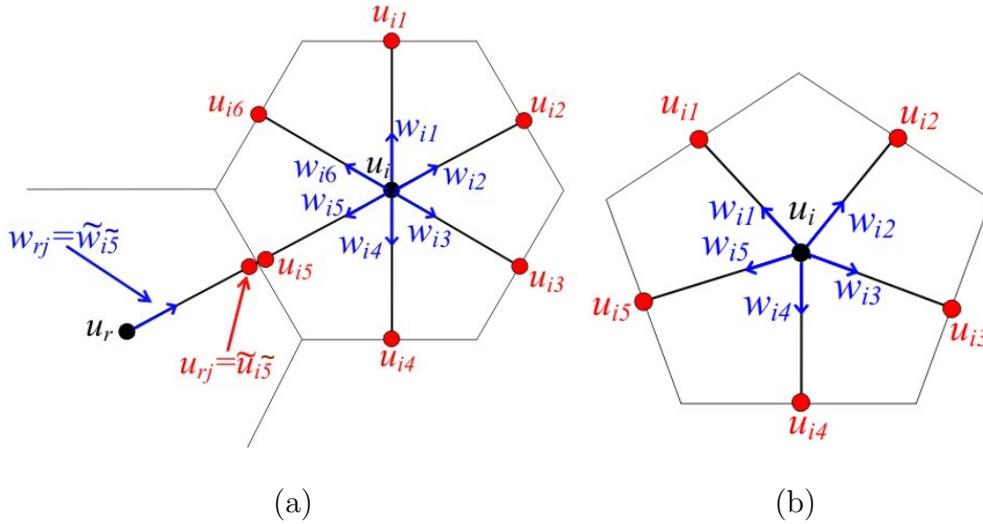
$$c_{ij}^{-1} w_{ij}^{k+1} + (u_{ij}^{k+1} - u_i^{k+1}) = 0 \quad (6.1a)$$

$$\sum_{l=1}^{m_i} w_{il}^{k+1} = f_i A_i \quad (6.1b)$$

$$u_{ij}^{k+1} - \beta w_{ij}^{k+1} = \tilde{u}_{ij}^k + \beta \tilde{w}_{ij}^k \quad (6.1c)$$

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} u_i^{k+1} = 0 \quad (6.1d)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ ,  $j = 1, \dots, m_i$  (onde  $m_i$  pode ser 5 ou 6), e  $k$  é o contador de iterações. Observamos que o índice  $i$  representa uma numeração global enquanto  $j$  representa uma numeração local. Em particular,  $u_i$  é o potencial no centro da célula computacional de índice  $i$  (a que contém o vértice  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  da malha icosaedral de nível  $n$ ),  $u_{ij}$  é o potencial na interface da célula  $i$  numerada localmente por  $j = 1, \dots, m_i$ , e  $w_{ij}$  é o fluxo (para a célula  $i$ ) através da mesma interface. Aqui  $\tilde{i}\tilde{j}$  designa o par de índices (global, local) referente à numeração global da célula vizinha e à numeração local na célula vizinha da interface que para a célula  $i$  é numerada por  $j$ ; veja figura 6.1. O procedimento iterativo começa com valores iniciais dados por  $u_i^0$ ,  $u_{ij}^0$  e  $w_{ij}^0$ , para todo  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ . Esta notação alterada é relevante para se demonstrar a convergência do método iterativo.



**Figura 6.1:** Células computacionais. A área é denotada por  $A_i$  e a fonte no centro da célula por  $f_i$ : (a) célula hexagonal - o numerador local  $j$  varia de 1 a  $m_i = 6$ ; (b) célula pentagonal - o numerador local varia de 1 a  $m_i = 5$ .

Na seção 4.5 mostramos a existência e a unicidade da solução do sistema considerado. A partir deste momento identificamos essa solução pelo sobrescrito (\*). Assim,

$$c_{ij}^{-1} w_{ij}^* + (u_{ij}^* - u_i^*) = 0 \quad (6.2a)$$

$$\sum_{l=1}^{m_i} w_{il}^* = f_i A_i \quad (6.2b)$$

$$u_{ij}^* - \beta w_{ij}^* = \tilde{u}_{\tilde{j}}^* + \beta \tilde{w}_{\tilde{j}}^* \quad (6.2c)$$

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} u_i^* = 0 \quad (6.2d)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Definimos, então, os erros cometidos em cada passo de iteração  $k$  como segue:

$$\psi_i^k = u_i^k - u_i^* \quad (6.3a)$$

$$\varphi_{ij}^k = w_{ij}^k - w_{ij}^* \quad (6.3b)$$

$$v_{ij}^k = u_{ij}^k - u_{ij}^* \quad (6.3c)$$

O método iterativo converge para a solução se  $\psi_i^k$ ,  $\varphi_{ij}^k$ , e  $v_{ij}^k$ , dados em (6.3), convergirem para zero quando  $k \rightarrow +\infty$ .

## 6.2 Demonstração da convergência do método iterativo

Dada a formulação do problema de convergência, fazemos esta demonstração baseados em [14].

Primeiramente, subtraímos do sistema (6.1), o sistema (6.2), e usando a definição

das variáveis erro, dadas na equação (6.3), resulta nas *equações de discrepância*

$$c_{ij}^{-1} \varphi_{ij}^{k+1} + (v_{ij}^{k+1} - \psi_i^{k+1}) = 0 \quad (6.4a)$$

$$\sum_{l=1}^{m_i} \varphi_{il}^{k+1} = 0 \quad (6.4b)$$

$$v_{ij}^{k+1} - \beta \varphi_{ij}^{k+1} = \tilde{v}_{ij}^k + \beta \tilde{\varphi}_{ij}^k \quad (6.4c)$$

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \psi_i^{k+1} = 0 \quad (6.4d)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Multiplicamos a equação (6.4a) por  $\varphi_{ij}^{k+1}$ , e obtemos

$$c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 + \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1} - \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0. \quad (6.5a)$$

Somando (6.5a) em  $j = 1, \dots, m_i$ , temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 + \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1} - \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0. \quad (6.5b)$$

Multiplicamos a equação (6.4b) por  $\psi_i^{k+1}$ , trocamos o índice  $l$  por  $j$  e obtemos

$$\sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0. \quad (6.5c)$$

Somando as equações (6.5b) e (6.5c), temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 = - \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1}. \quad (6.5d)$$

Por outro lado, temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k \pm \beta \varphi_{ij}^k)^2 = \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 \pm 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^k v_{ij}^k. \quad (6.5e)$$

Substituindo a equação (6.5d), com  $k$  no lugar de  $k + 1$ , na equação (6.5e), temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k \pm \beta \varphi_{ij}^k)^2 = \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 \mp 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2. \quad (6.5f)$$

Como  $\beta$  e  $c_{ij}^{-1}$ , onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ , são todos números reais positivos, definimos uma nova seqüência de números reais positivos denotada por  $(E^k)$ , onde

$$E^k = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left[ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 + 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \right], \quad (6.5g)$$

ou de acordo com a equação (6.5f), temos

$$E^k = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k - \beta \varphi_{ij}^k)^2,$$

Por outro lado, pelas equações (6.4c) e (6.5f), temos

$$\begin{aligned} E^{k+1} &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^{k+1} - \beta \varphi_{ij}^{k+1})^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (\tilde{v}_{ij}^k + \beta \tilde{\varphi}_{ij}^k)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k + \beta \varphi_{ij}^k)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left[ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 - 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \right]. \end{aligned}$$

Observamos aqui que a terceira igualdade na equação anterior é válida pois a soma percorre todas as arestas das células computacionais duas vezes e então os termos nas duas somas são iguais mas somados em ordem diferentes. Concluimos que

$$E^{k+1} = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left[ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 - 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \right]$$

Seguindo a expansão da equação anterior, e de acordo com a equação (6.5g), obtemos

$$\begin{aligned}
 E^{k+1} &= \sum_{i=1}^{\nu_n} \left[ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 + 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \right] \\
 &\quad - 4\beta \sum_{i=1}^{\nu_n} \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \\
 &= E^k - 4\beta \sum_{i=1}^{\nu_n} \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 \tag{6.5h}
 \end{aligned}$$

para todo  $k \geq 0$ .

Como  $\beta > 0$ , o segundo termo da equação anterior é não positivo. Isto implica em dizer que  $(E^k)$  é uma seqüência monótona decrescente de números reais limitada inferiormente por zero. Então existe um número real não-negativo  $E^\infty$  tal que  $E^k \searrow E^\infty \geq 0$  quando  $k \rightarrow +\infty$ . Desta forma, passando ao limite quando  $k \rightarrow +\infty$  nos dois lados da equação (6.5h), obtemos

$$E^\infty = E^\infty - 4\beta \sum_{i=1}^{\nu_n} \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2$$

isto é,

$$\sum_{i=1}^{\nu_n} \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 = 0.$$

O somatório anterior, de termos não negativos, sendo nulo, força que cada termo se anule,

$$c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 = 0,$$

ou ainda,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 = 0,$$

para todo  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Pela definição, equação (6.3b), o resultado anterior nos diz que  $w_{ij}^k \rightarrow w_{ij}^*$  quando  $k \rightarrow +\infty$ , para  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Como  $\varphi_{ij}^k \rightarrow 0$  quando  $k \rightarrow +\infty$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ , então, das equações (6.4a) e (6.4c), passando ao limite, obtemos

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (v_{ij}^{k+1} - \psi_i^{k+1}) = 0, \quad (6.6)$$

e

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (v_{ij}^{k+1} - \tilde{v}_{ij}^k) = 0. \quad (6.7)$$

Da equação (6.6), trocando o índice  $k + 1$  por  $k$  obtemos

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (v_{ij}^k - \psi_i^k) = 0 \quad (6.8)$$

onde vendo o resultado a partir da célula vizinha fica,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (\tilde{v}_{ij}^k - \tilde{\psi}_i^k) = 0.$$

Adicionando-a à equação (6.7) obtém-se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (v_{ij}^{k+1} - \tilde{\psi}_i^k) = 0 \quad (6.9)$$

e subtraindo a equação (6.6) deste resultado, obtém-se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (\psi_i^{k+1} - \tilde{\psi}_i^k) = 0. \quad (6.10)$$

Agora, como  $E^k$  converge quando  $k \rightarrow \infty$ ,  $E^k$  é limitada e pela equação (6.5g),  $E^k \geq \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2$ , então também a soma

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2$$

é limitada para todo o  $k$  donde  $v^k = (v_{ij}^k)$  admite uma subsequência convergente. Para não introduzir mais notação, indicamos a subsequência ainda usando o índice  $k$ . Seja  $v_{ij}^*$  esse limite.

Da equação (6.8), podemos então concluir que, da mesma forma,  $\psi_i^k$  converge, digamos a  $\psi_i^*$ . Conclui-se ainda que

$$v_{ij}^* = \psi_i^* \quad (6.11)$$

donde, em particular,  $v_{ij}^*$  não depende de  $j$ .

Das equações (6.10) e (6.11), conclui-se que

$$\psi_i^* = \tilde{\psi}_1^*$$

ou que  $\psi_i^*$  é igual em uma célula e na célula vizinha. Como isso é válido para qualquer célula, e todas estão conectadas umas às outras, conclui-se que  $\psi_i^*$  não depende de  $i$ ,

$$\psi_i^* = \psi^* , \text{ para todo } i , \quad (6.12)$$

para um certo valor  $\psi^*$ .

Passando ao limite na equação (6.4d), e usando a equação (6.12), conclui-se que

$$0 = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \psi_i^* = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \psi^* = \psi^* \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} 1 = \mathcal{V}_n \psi^*$$

donde

$$\psi^* = 0 \quad (6.13)$$

e logo, das equações (6.11), (6.12) e (6.13), conclui-se que

$$v_{ij}^* = 0 \quad (6.14)$$

para todo  $i, j$ .

Assim, das equações (6.3a) e (6.3c) conclui-se que

$$\begin{aligned}u_i^k &\rightarrow u_i^* \\u_{ij}^k &\rightarrow u_{ij}^*\end{aligned}$$

quando  $k \rightarrow +\infty$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ , finalizando a demonstração da convergência do método iterativo.

## Capítulo 7

# Solução numérica do problema de Poisson

Implementamos um código computacional utilizando o pacote MATLAB 7.0, para resolver o algoritmo iterativo. O código foi rodado num computador Acer Aspire 3680-2992 com processador Intel Celeron M processador 440, 1.86 GHz, 533 MHz FSB, 1MB L2 cache, 1GB de memória RAM.

### 7.1 Erros

Para comparar os erros cometidos com o algoritmo numérico são usadas as normas dos erros,  $q_1$ ,  $q_2$  e  $q_\infty$ , baseados nas normas  $l_1$ ,  $l_2$  e  $l_\infty$ .

As normas  $l_1$ ,  $l_2$  e  $l_\infty$  de  $u$ , definido nos vértices da malha icosaedral, são, respectivamente,

$$\begin{aligned}\|u\|_1 &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} |u^i| \cdot \frac{1}{\mathcal{V}_n}, \\ \|u\|_2 &= \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} (u^i)^2}{\mathcal{V}_n}}, \\ \|u\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq \mathcal{V}_n} |u^i|,\end{aligned}\tag{7.1}$$

e as normas dos erros,  $q_1$ ,  $q_2$  e  $q_\infty$ , são, respectivamente,

$$\begin{aligned} q_1 &= \|u_{exa} - u_{num}\|_1 = \frac{1}{\mathcal{V}_n} \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} |u_{exa}^i - u_{num}^i|, \\ q_2 &= \|u_{exa} - u_{num}\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} (u_{exa}^i - u_{num}^i)^2}{\mathcal{V}_n}}, \\ q_\infty &= \|u_{exa} - u_{num}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq \mathcal{V}_n} |u_{exa}^i - u_{num}^i|, \end{aligned}$$

onde  $u_{exa} = (u_{exa}^1, \dots, u_{exa}^{\mathcal{V}_n})$  refere-se à solução exata do problema avaliada nos vértices da malha icosaedral (triangular) de nível  $n$ , e  $u_{num} = (u_{num}^1, \dots, u_{num}^{\mathcal{V}_n})$  refere-se à solução numérica obtida com o algoritmo iterativo.

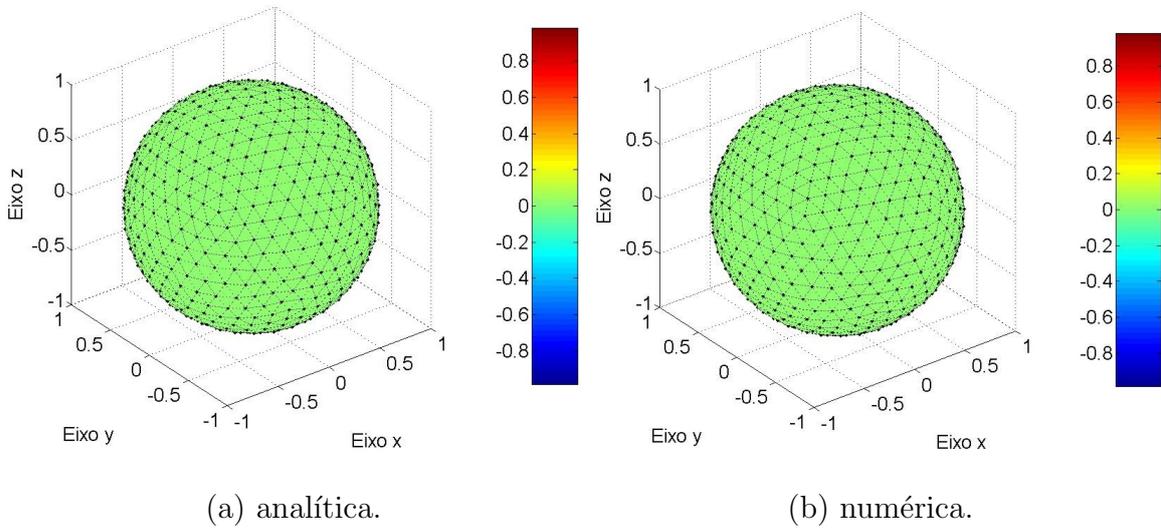
## 7.2 Termo fonte nulo

Antes de mostrarmos a solução numérica do problema de Poisson, no caso uma solução analítica mais complicada apresentada na seção 7.3, o primeiro teste do algoritmo consistiu em verificar a convergência numérica quando o termo fonte é nulo. Neste caso a solução analítica é nula, uma vez que é selecionada a solução com média nula, e tendo que ser uma constante, só pode ser nula. Assim, a solução numérica obtida deverá ser nula também. A figura 7.1 mostra a solução, analítica e numérica, no nível de malha 3. O algoritmo convergiu em apenas 2 iterações para todos os níveis de malha.

## 7.3 Solução particular

A fim de comparar e validar a solução numérica obtida através do algoritmo iterativo, utilizamos uma solução particular do problema dada por

$$u(\theta, \varphi) = \text{sen}^3 \varphi \cos \theta, \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi, \quad (7.2)$$



**Figura 7.1:** Solução com o termo fonte nulo na malha de nível 3.

quando o termo fonte é dado por

$$f(\theta, \varphi) = 4 \operatorname{sen} \varphi \cos \theta (1 - 3 \cos^2 \varphi), \quad 0 \leq \theta < 2\pi, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi. \quad (7.3)$$

De fato, obteve-se a função  $f$  dada em (7.3), substituindo-se  $u$  dada em (7.2) no lugar de  $F$  na equação (2.48) e trocando-se o sinal do resultado para que satisfizesse a equação (2.50).

## 7.4 Parâmetro $\beta$

Antes de obtermos a solução numérica propriamente dita, fizemos uma busca numérica do melhor valor para o parâmetro  $\beta$  introduzido na equação (4.10). As Tabelas 7.1 a 7.5, mostram de maneira clara os erros  $q_1$ ,  $q_2$ , e  $q_\infty$ , e a quantidade de iterações (Iter) que o algoritmo levou para convergir, para vários valores de  $\beta$ , para os níveis da malha icosaedral de 0 a 4.

Não podemos escolher o valor de  $\beta$  avaliando os erros, pois a diferença de um erro obtido com um valor de  $\beta$  para outro erro obtido com outro valor de  $\beta$ , para um mesmo nível da malha, é mínima. Então passamos para a quantidade de iterações que

o algoritmo realiza para convergir. Percebemos na tabela 7.1 que a relação **Nível da malha**  $\times \beta$ , influencia diretamente na quantidade de iterações realizadas pelo método numérico, e que o mesmo não ocorre com relação ao erro obtido.

Quanto mais grossa a malha, menor deve ser o valor  $\beta$ . No caso da malha 0, obtemos 13 iterações para  $\beta = 0,73$  e  $\beta = 0,74$ . Refinamos ainda mais os valores para  $\beta$ . Assumimos  $0,73 \leq \beta \leq 0,74$ . Ainda assim, a quantidade mínima de iterações que o algoritmo realizou para convergir foi igual a 13; veja a tabela 7.1. Fizemos os mesmos testes para a malha de nível 1. Encontramos  $\beta = 1,2$ . Mesmo refinando o valor para  $\beta$ , a quantidade de iterações não diminuiu; veja a tabela 7.2. Como pode ser observado na tabela 7.3, o valor para o parâmetro  $\beta$ , para a malha de nível 3, é igual a 2,4, onde o algoritmo convergiu com 43 iterações. No nível 3 obemos  $\beta = 4,9$  com apenas 78 iterações. Para a malha de nível 4 o algoritmo levou 153 iterações para convergir. Para tanto, temos que  $9,8 \leq \beta \leq 10,0$ .

Na seção 5.3, foi feito o estudo analítico do valor de  $\beta$ , mas limitando-se a determinar qual o intervalo em que ele deve ser escolhido para garantir a possibilidade de execução do algoritmo iterativo. No capítulo 6 verificou-se que  $\beta > 0$  garante a convergência do algoritmo. Nesta seção, fizemos uma busca numérica do melhor valor para  $\beta$  em função da rapidez da convergência. Fica para um trabalho futuro modelar uma função  $\beta$ , ou através de um procedimento numérico de interpolação, ou minimização, ou através de um procedimento analítico.

A tabela 7.7 mostra de forma resumida os melhores valores de  $\beta$  obtidos para cada nível da malha icosaedral.

Na figura 7.2, mostramos a relação entre o nível da malha  $n$  e o valor de  $\beta$  mais eficiente. Já na figura 7.3 apresentamos a relação entre o nível da malha e o número de iterações.

**Tabela 7.1:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 0 da malha.

$\beta$	Nível 0				$\beta$	Nível 0			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
0,1	0,042081	0,052195	0,107139	113	0,72	0,042081	0,052194	0,107130	14
0,2	0,042081	0,052194	0,107133	61	0,73	0,042081	0,052194	0,107130	13
0,3	0,042081	0,052194	0,107132	41	0,74	0,042081	0,052194	0,107130	13
0,4	0,042081	0,052194	0,107131	31	0,75	0,042081	0,052194	0,107130	14
0,5	0,042081	0,052194	0,107130	24	0,76	0,042081	0,052194	0,107130	14
0,6	0,042081	0,052194	0,107130	19	0,77	0,042082	0,052194	0,107131	14
0,7	0,042081	0,052194	0,107130	15	0,78	0,042082	0,052194	0,107131	14
0,8	0,042082	0,052194	0,107132	14	0,79	0,042082	0,052194	0,107131	14
0,9	0,042081	0,052193	0,107129	17	0,80	0,042082	0,052194	0,107132	14
1,0	0,042082	0,052195	0,107133	19	0,81	0,042082	0,052195	0,107132	14

**Tabela 7.2:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 1 da malha.

$\beta$	Nível 1				$\beta$	Nível 1			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
1,1	0,035056	0,047449	0,131033	26	1,16	0,035057	0,047450	0,131033	24
1,2	0,035055	0,047448	0,131030	23	1,17	0,035056	0,047449	0,131032	24
1,3	0,035056	0,047449	0,131033	26	1,18	0,035056	0,047449	0,131032	24
1,4	0,035057	0,047450	0,131033	29	1,19	0,035056	0,047449	0,131031	23
1,5	0,035056	0,047449	0,131031	29	1,20	0,035055	0,047448	0,131030	23
1,6	0,035056	0,047449	0,131032	32	1,21	0,035055	0,047448	0,131029	23
1,7	0,035057	0,047450	0,131034	33	1,22	0,035056	0,047449	0,131031	25
1,8	0,035056	0,047449	0,131033	36	1,23	0,035056	0,047449	0,131031	26
1,9	0,035056	0,047449	0,131031	37	1,24	0,035056	0,047449	0,131032	26
2,0	0,035055	0,047448	0,131030	38	1,25	0,035056	0,047449	0,131032	26

**Tabela 7.3:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 2 da malha.

$\beta$	Nível 2				$\beta$	Nível 2			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
2,1	0,022714	0,030040	0,083851	48	2,35	0,022716	0,030042	0,083853	44
2,2	0,022718	0,030045	0,083858	46	2,36	0,022715	0,030041	0,083852	44
2,3	0,022717	0,030044	0,083856	45	2,37	0,022715	0,030041	0,083851	43
2,4	0,022713	0,030038	0,083848	43	2,38	0,022715	0,030040	0,083850	43
2,5	0,022716	0,030042	0,083853	50	2,39	0,022714	0,030039	0,083849	43
2,6	0,022717	0,030043	0,083855	50	2,40	0,022713	0,030038	0,083848	43
2,7	0,022719	0,030046	0,083859	48	2,41	0,022713	0,030038	0,083847	43
2,8	0,022718	0,030045	0,083857	54	2,42	0,022712	0,030037	0,083845	43
2,9	0,022717	0,030043	0,083856	56	2,43	0,022714	0,030040	0,083850	47
3,0	0,022716	0,030042	0,083854	56	2,44	0,022715	0,030040	0,083851	48

**Tabela 7.4:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 3 da malha.

$\beta$	Nível 3				$\beta$	Nível 3			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
4.1	0.017919	0.022960	0.065813	98	4,89	0,017918	0,022958	0,065810	79
4,2	0,017919	0,022960	0,065814	89	4,90	0,017917	0,022957	0,065810	78
4,3	0,017923	0,022966	0,065825	79	4,91	0,017916	0,022956	0,065808	78
4,4	0,017931	0,022974	0,065841	83	4,92	0,017915	0,022955	0,065806	78
4,5	0,017929	0,022972	0,065836	86	4,93	0,017914	0,022954	0,065804	78
4,6	0,017928	0,022970	0,065833	85	4,94	0,017918	0,022958	0,065808	88
4,7	0,017926	0,022967	0,065827	84	4,95	0,017919	0,022959	0,065810	89
4,8	0,017922	0,022962	0,065817	83	4,96	0,017919	0,022960	0,065812	90
4,9	0,017917	0,022957	0,065810	78	4,97	0,017919	0,022959	0,065812	90
5,0	0,017920	0,022960	0,065814	91	4,98	0,017920	0,022960	0,065814	91

**Tabela 7.5:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 4 da malha.

$\beta$	Nível 4				$\beta$	Nível 4			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
9,2	0,016637	0,020976	0,057430	161	9,72	0,016624	0,020961	0,057401	154
9,3	0,016636	0,020975	0,057427	160	9,73	0,016624	0,020961	0,057399	154
9,4	0,016634	0,020973	0,057423	159	9,74	0,016624	0,020961	0,057401	153
9,5	0,016631	0,020970	0,057417	158	9,75	0,016623	0,020960	0,057399	153
9,6	0,016629	0,020967	0,057411	156	10,00	0,016609	0,020943	0,057369	153
9,7	0,016625	0,020962	0,057403	154	10,01	0,016608	0,020943	0,057367	153
9,8	0,016620	0,020957	0,057393	153	10,02	0,016608	0,020942	0,057366	153
9,9	0,016615	0,020950	0,057381	153	10,03	0,016608	0,020942	0,057364	154
10,0	0,016609	0,020943	0,057369	153	10,04	0,016607	0,020942	0,057363	154
10,1	0,016616	0,020950	0,057374	170	10,05	0,016615	0,020949	0,057373	168

**Tabela 7.6:** Busca do parâmetro  $\beta$  mais eficiente para o nível 5 da malha.

$\beta$	Nível 5				$\beta$	Nível 5			
	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter		$q_1$	$q_2$	$q_\infty$	Iter
3,0	0,016397	0,018954	0,044169	794	18,1	0,015445	0,019511	0,052492	154
4,0	0,009964	0,012120	0,032091	658	18,2	0,015638	0,019728	0,052903	153
5,0	0,008038	0,009706	0,027893	564	18,3	0,015900	0,020045	0,053535	153
6,0	0,007978	0,009577	0,025736	494	18,4	0,016156	0,020355	0,054151	153
7,0	0,008396	0,010299	0,030172	439	18,5	0,016353	0,020576	0,054572	152
8,0	0,009011	0,011260	0,033660	395	18,6	0,016604	0,020879	0,055172	152
9,0	0,009664	0,012192	0,036375	358	18,7	0,016848	0,021176	0,055757	152
10,0	0,010272	0,013023	0,038534	326	18,8	0,017087	0,021465	0,056328	152
18,0	0,015257	0,019296	0,052055	155	18,9	0,017344	0,021799	0,057008	153
19,0	0,017563	0,022067	0,057537	153	19,0	0,017563	0,022067	0,057537	153
20,0	0,019116	0,024112	0,061730	159	19,1	0,017777	0,022327	0,058051	153

**Tabela 7.7:** Resumo dos melhores valores para  $\beta$ .

n	$\beta$	Iter	$q_1$	$q_2$	$q_\infty$
0	0,73	13	0,042081	0,052194	0,107130
1	1,2	23	0,035055	0,047448	0,131030
2	2,4	43	0,022713	0,030038	0,083848
3	4,9	78	0,017917	0,022957	0,065810
4	9,9	153	0,016615	0,020950	0,057381
5	18,6	152	0,016604	0,020879	0,055172

## 7.5 Taxa de convergência

Nesta seção calculamos a taxa de convergência do método numérico entre os níveis da malha. Assumimos que o erro cometido com o algoritmo numérico seja da forma

$$\mathcal{E}_n = e^{\alpha_2} \mathcal{V}_n^{\alpha_1},$$

onde  $\mathcal{V}_n$  é a quantidade de vértices da malha de nível  $n$ ,  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são duas constantes que medem a taxa de convergência.

Desta forma, manipulando esta equação, e substituindo os erros cometidos numericamente, obtemos os valores de  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ , isto é,

$$\mathcal{E}_n \approx e^{-2,4} \mathcal{V}_n^{-0,2}.$$

Na figura 7.4 observamos o gráfico  $\log \mathcal{V}_n \times \log \mathcal{E}_n$ .

## 7.6 Tolerância para o critério de parada

Uma análise numérica para determinar qual a tolerância para o critério de parada é feita nesta seção.

Utilizamos como critério de parada a norma 1. Comparamos a solução obtida em

cada iteração do algoritmo iterativo com a solução obtida na iteração anterior deste mesmo algoritmo. Assim, o critério de parada é que  $E^k = \|u^{k+1} - u^k\|_1$  seja menor que um erro prefixado. Esperamos que esse valor  $E^k = \|u^{k+1} - u^k\|_1$  tenda para 0 quando  $k \rightarrow +\infty$ . Consideramos que a solução obtida com o algoritmo iterativo seja boa quando esse valor seja zero ou quando ele for menor que uma tolerância assumida,  $\epsilon$ , como  $\epsilon = 10^{-6}$  por exemplo. O objetivo desta seção é escolher um valor adequado para esta tolerância.

Fazemos uma análise utilizando o nível 4 da malha. Através da figura 7.5, podemos observar que a discrepância  $E^k = \|u^{k+1} - u^k\|_1$  decai rapidamente para um valor menor do que  $10^{-3}$ . Isto acontece na iteração 56. Em seguida, a discrepância  $E^k$  leva mais 97 iterações, totalizando assim 153 iterações, para ser menor do que a tolerância assumida,  $\epsilon = 10^{-6}$ .

Precisamos verificar se a solução obtida com o algoritmo iterativo com 56 iterações (quando a discrepância  $E^k$  no critério de parada passa a ter um valor menor do que  $\epsilon = 10^{-3}$ ) é a mesma solução obtida com o algoritmo iterativo com 153 iterações (quando a discrepância  $E^k$  no critério de parada passa a ter um valor menor do que  $\epsilon = 10^{-6}$ ). Podemos observar na figura 7.6b que a solução tem um erro bem pequeno. Isto é, comparando as duas soluções numéricas obtemos uma diferença de  $8,922 \cdot 10^{-4}$ .

Desta forma, concluímos que podemos escolher uma tolerância entre  $10^{-3}$  e  $10^{-6}$  para o critério de parada, que o erro cometido será pequeno, mas o ganho com o número de iterações do algoritmo iterativo será grande.

## 7.7 Termo fonte transladado

Um outro teste feito foi introduzir uma translação no termo fonte, isto é, o novo termo fonte passou a ser da forma

$$\bar{f} = f + k, \quad -2 \leq k \leq 2.$$

O objetivo é apenas observar se quando introduzimos perturbações no termo fonte, a solução também é pouco afetada. A figura 7.7 mostra os resultados obtidos.

A conclusão é que quanto mais afastamos, ou em outras palavras, transladamos o termo fonte apropriado, maior é o erro cometido.

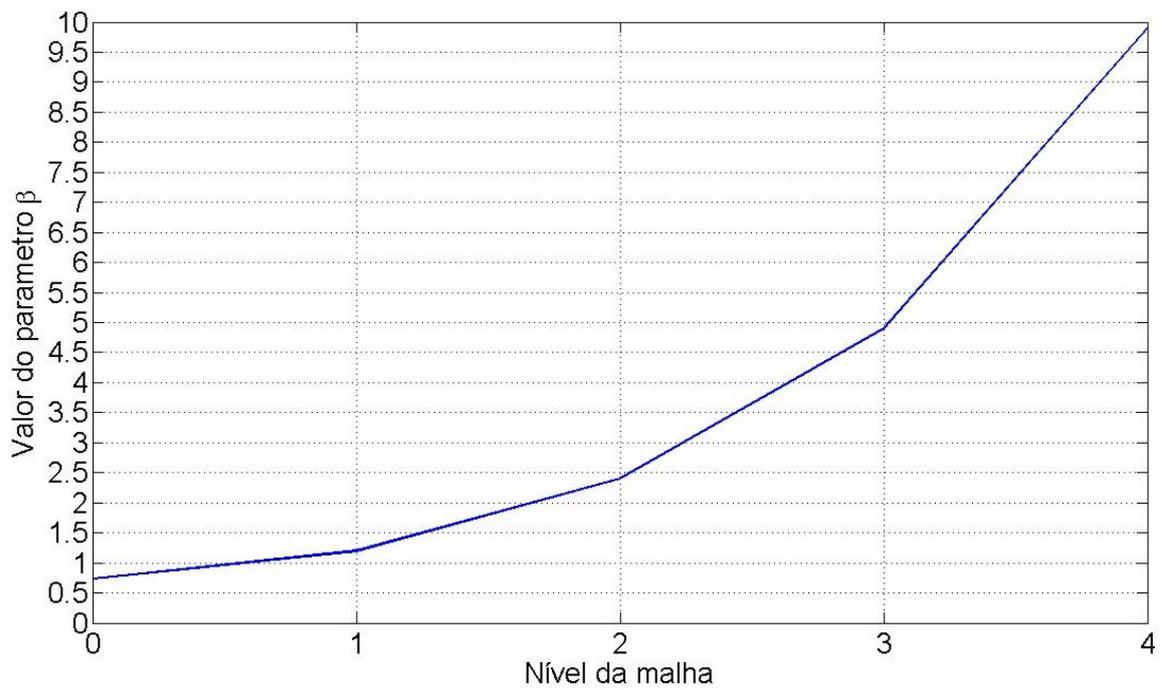
Evidentemente, este tipo de perturbação não é possível de realizar no problema discreto uma vez que isso altera a média do termo fonte que precisa ser nula para o problema ter solução. Não obstante, o algoritmo numérico não sofre esta restrição e é até estável quanto à imprecisão proveniente do termo fonte não ter média nula que é o que acontece quando se altera a constante  $k$ .

## 7.8 Comparação das soluções

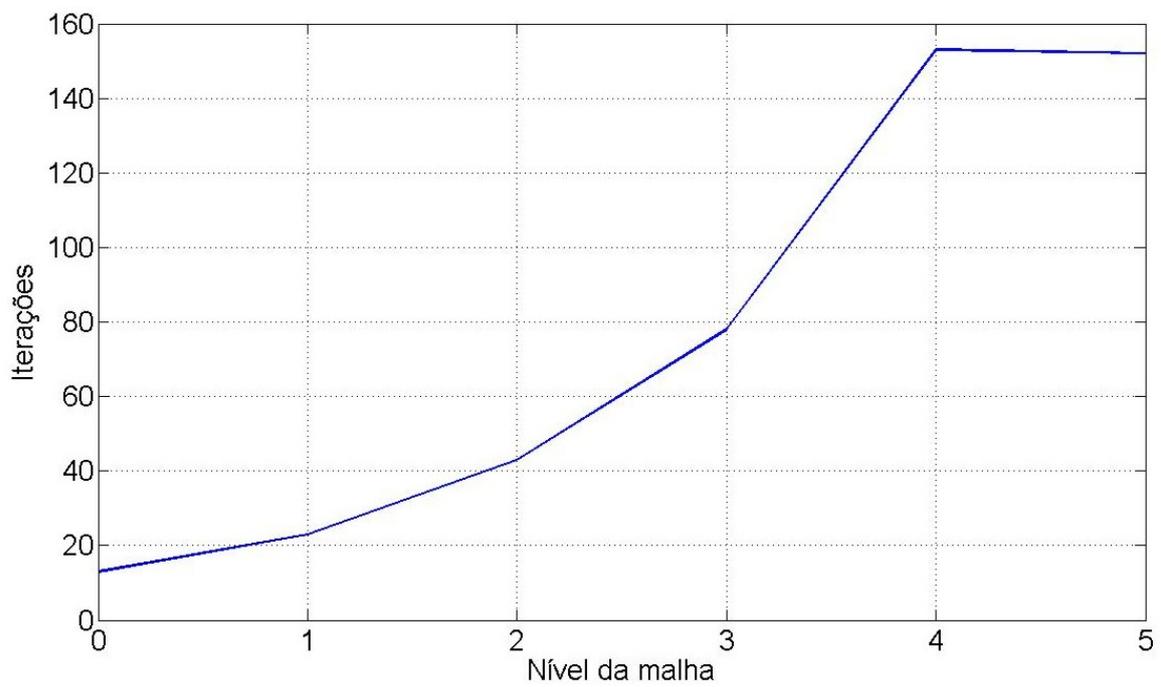
Nesta seção mostramos as soluções numéricas encontradas para o caso particular. Na figura a seguir, observamos os erros cometidos com o algoritmo iterativo.

Podemos observar tanto na figura 7.8, como na tabela 7.7 à página 79, que o erro diminui quando a malha fica mais fina. Estes resultados comprovam numericamente os resultados analíticos obtidos no capítulo 6. O algoritmo converge para a solução desejada.

Após todos os testes, apresentamos as soluções, analítica e numérica, nas figuras 7.9 a 7.14, do nível 0 ao nível 5.



**Figura 7.2:** Relação entre o nível da malha icosaedral e o parâmetro  $\beta$ .



**Figura 7.3:** Relação entre o nível da malha icosaedral e a quantidade de iterações do algoritmo.

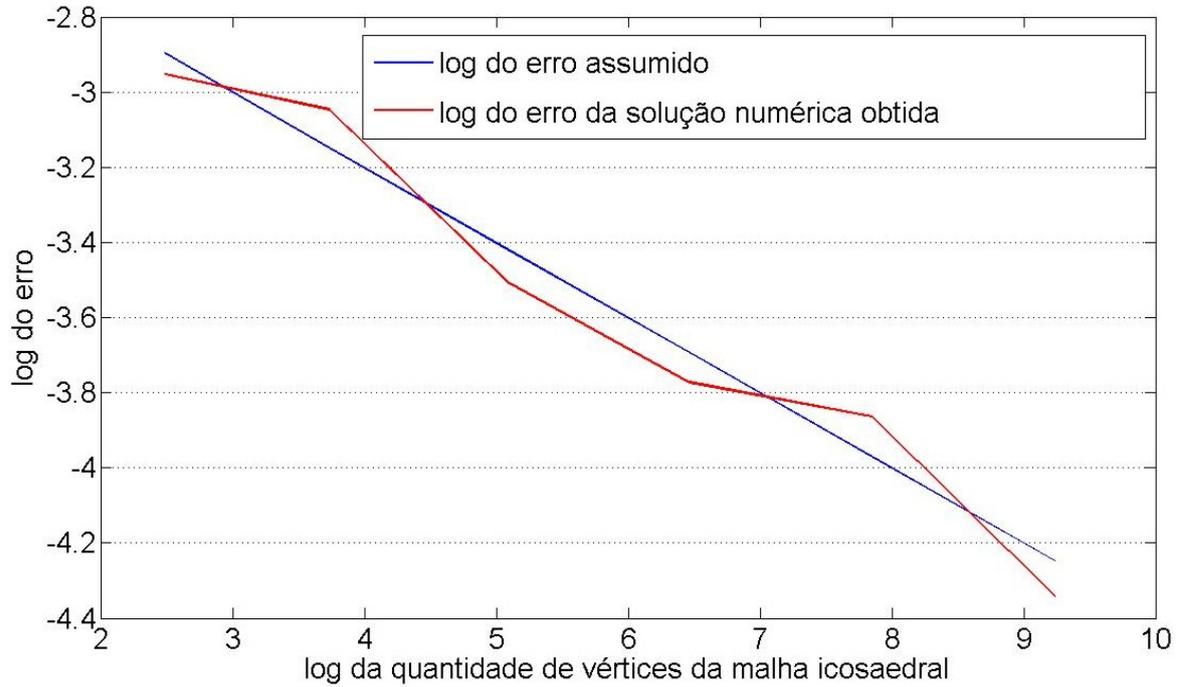


Figura 7.4:  $\log \mathcal{E}_n \times \log \mathcal{V}_n$ .

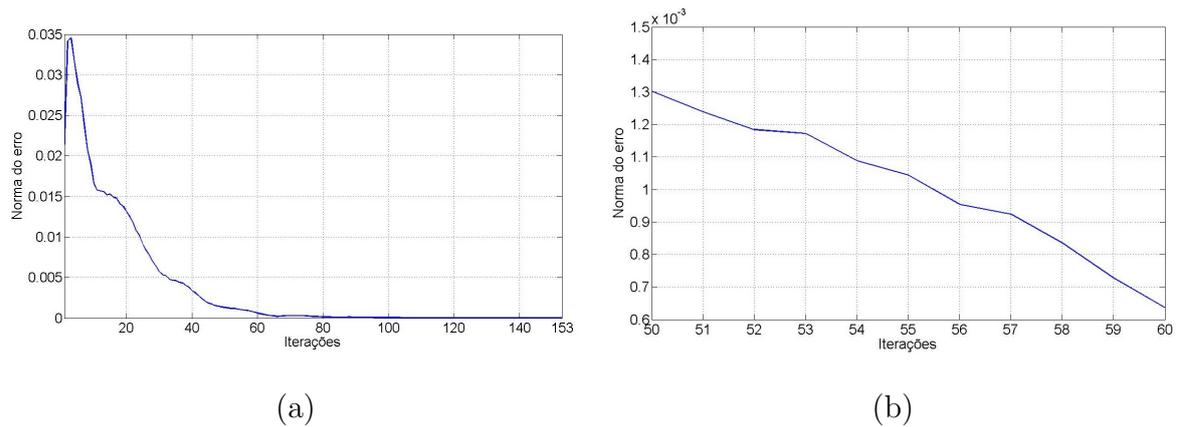
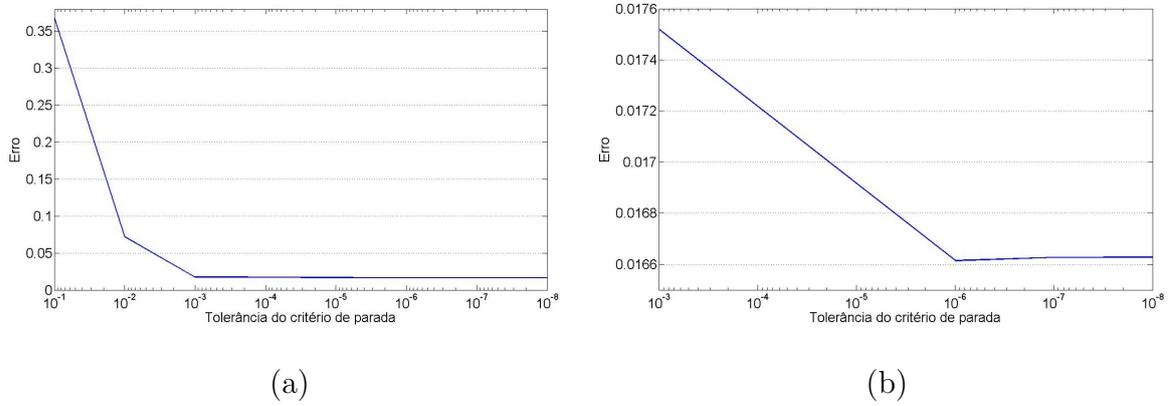
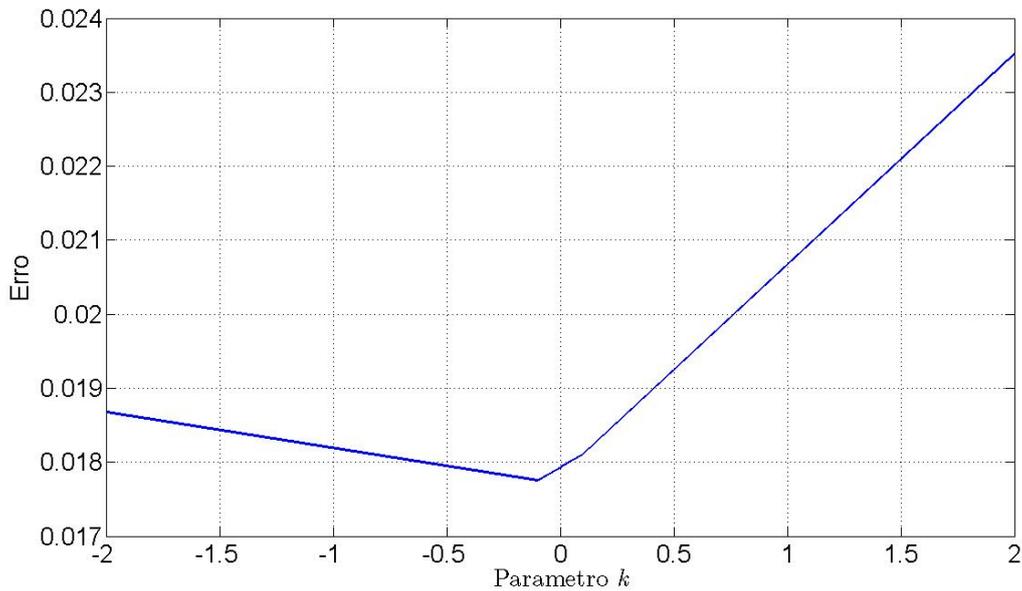


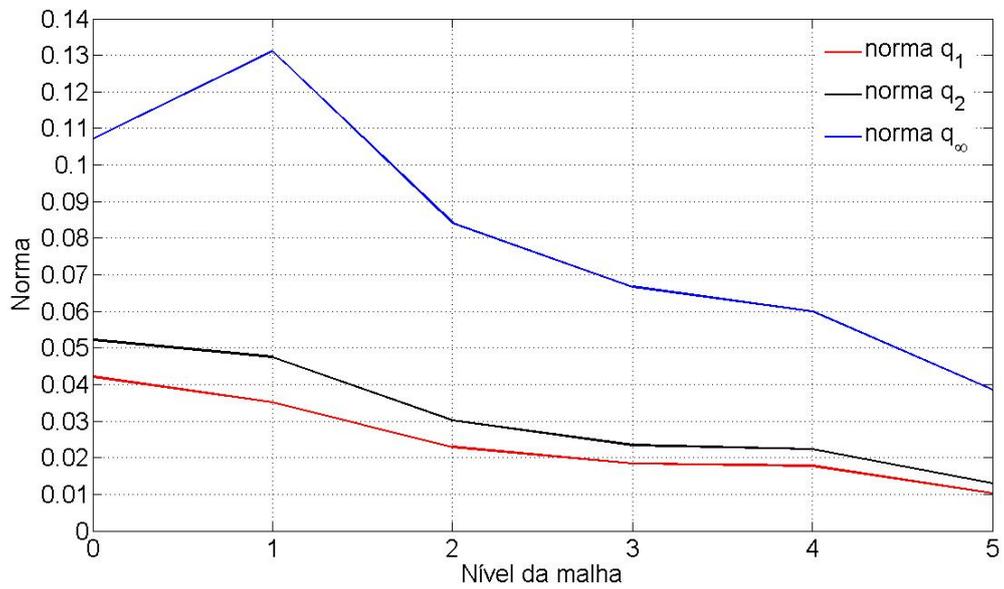
Figura 7.5: (a) Comportamento da convergência numérica do método para a malha de nível 4; (b) Zoom entre a interação 50 e 60.



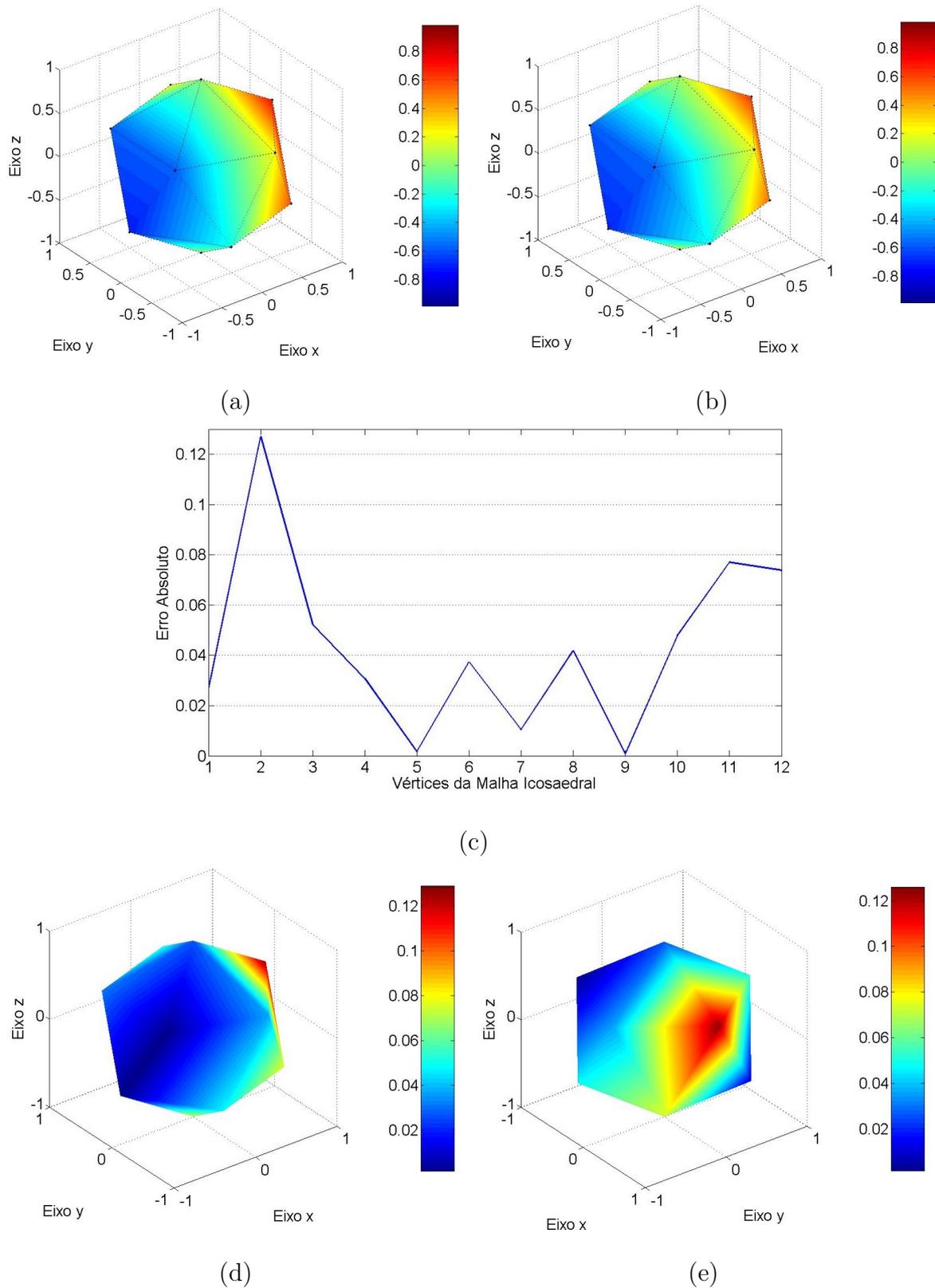
**Figura 7.6:** (a) Erro cometido para várias tolerâncias do critério de parada; (b) As melhores tolerâncias obtidas.



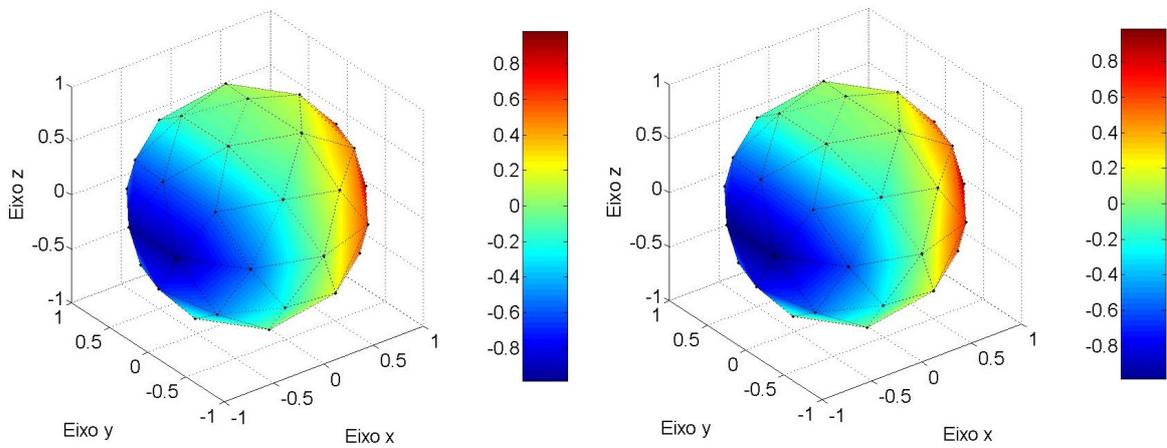
**Figura 7.7:** Erro entre as soluções obtidas com a variação do parâmetro  $k$  e a solução analítica do problema.



**Figura 7.8:** Erros  $q_1$ ,  $q_2$  e  $q_\infty$  dos erros nos níveis de 0 a 6 na solução numérica.

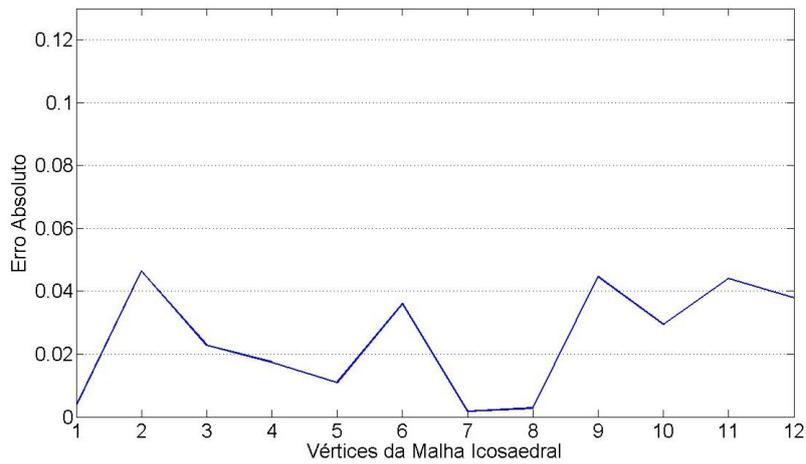


**Figura 7.9:** Nível 0: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^\circ$  em torno do eixo  $z$ .

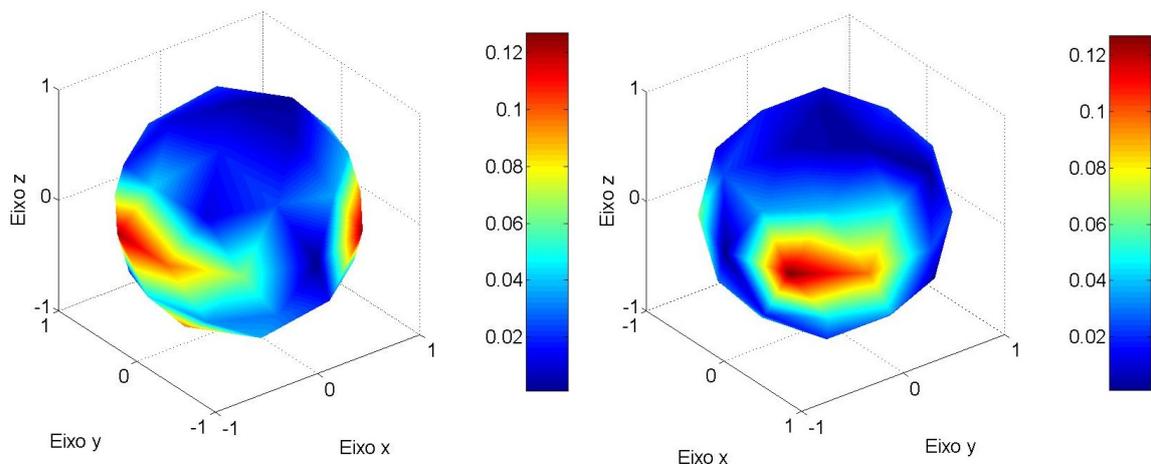


(a)

(b)



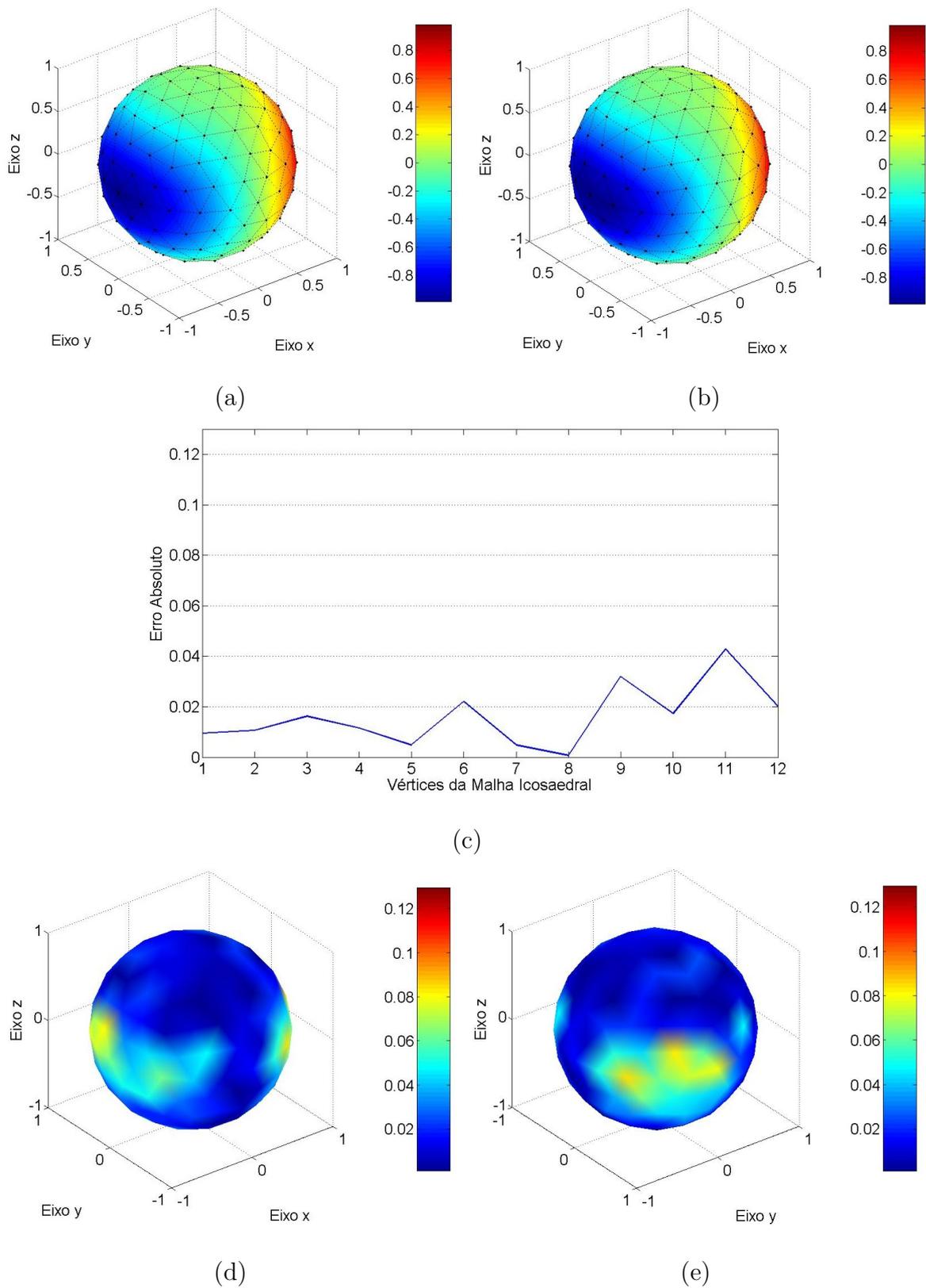
(c)



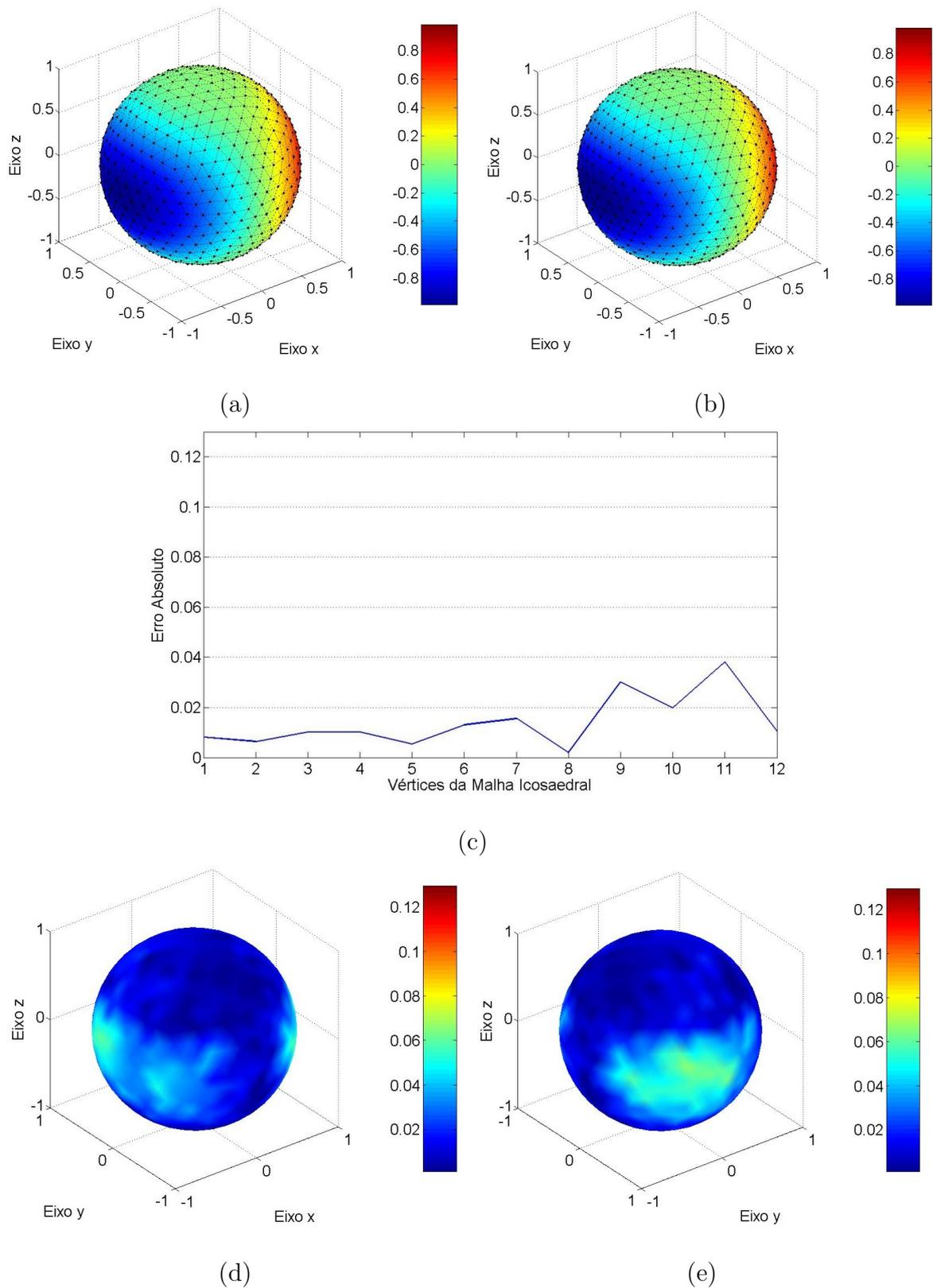
(d)

(e)

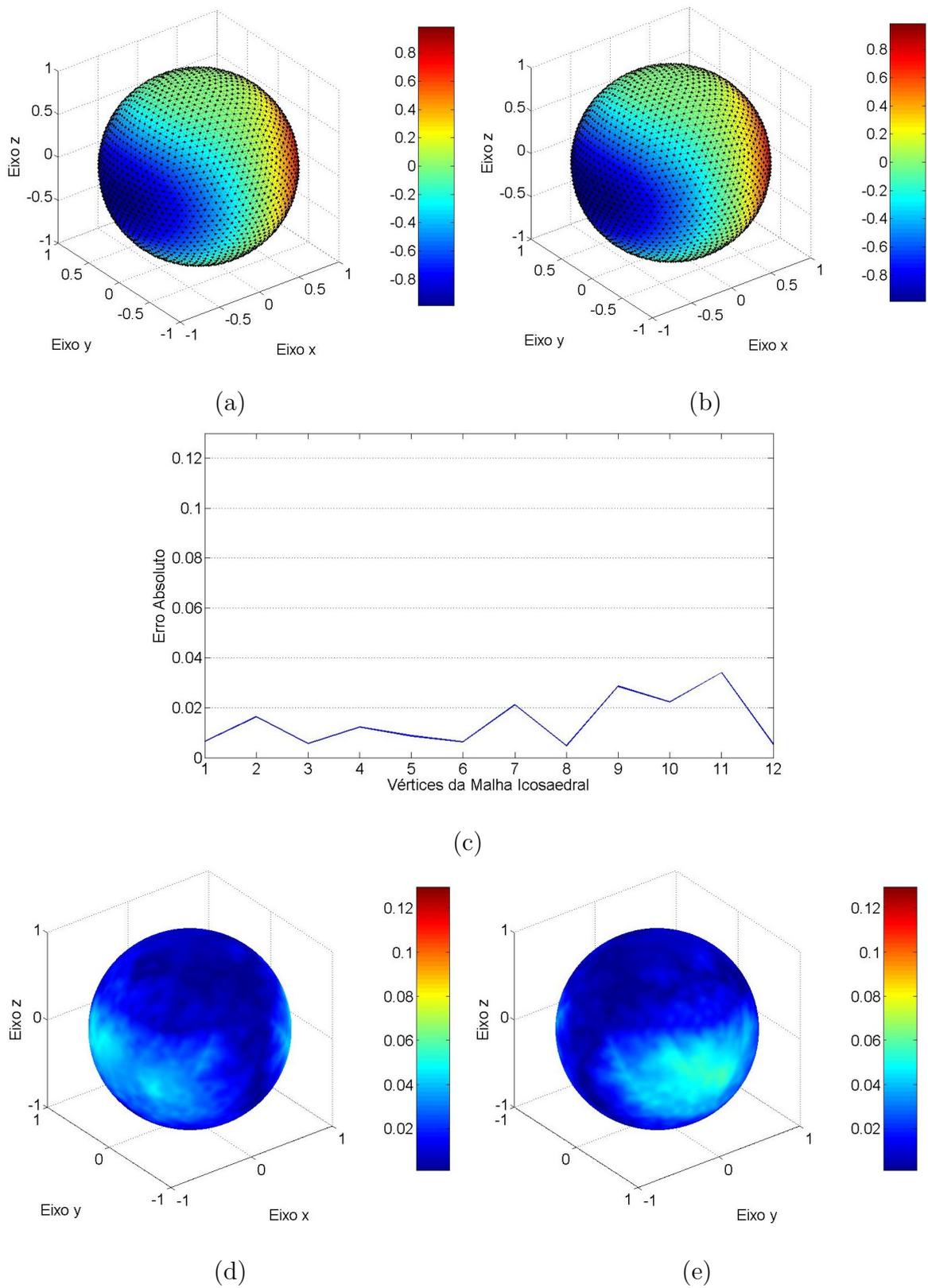
**Figura 7.10:** Nível 1: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^\circ$  em torno do eixo  $z$ .



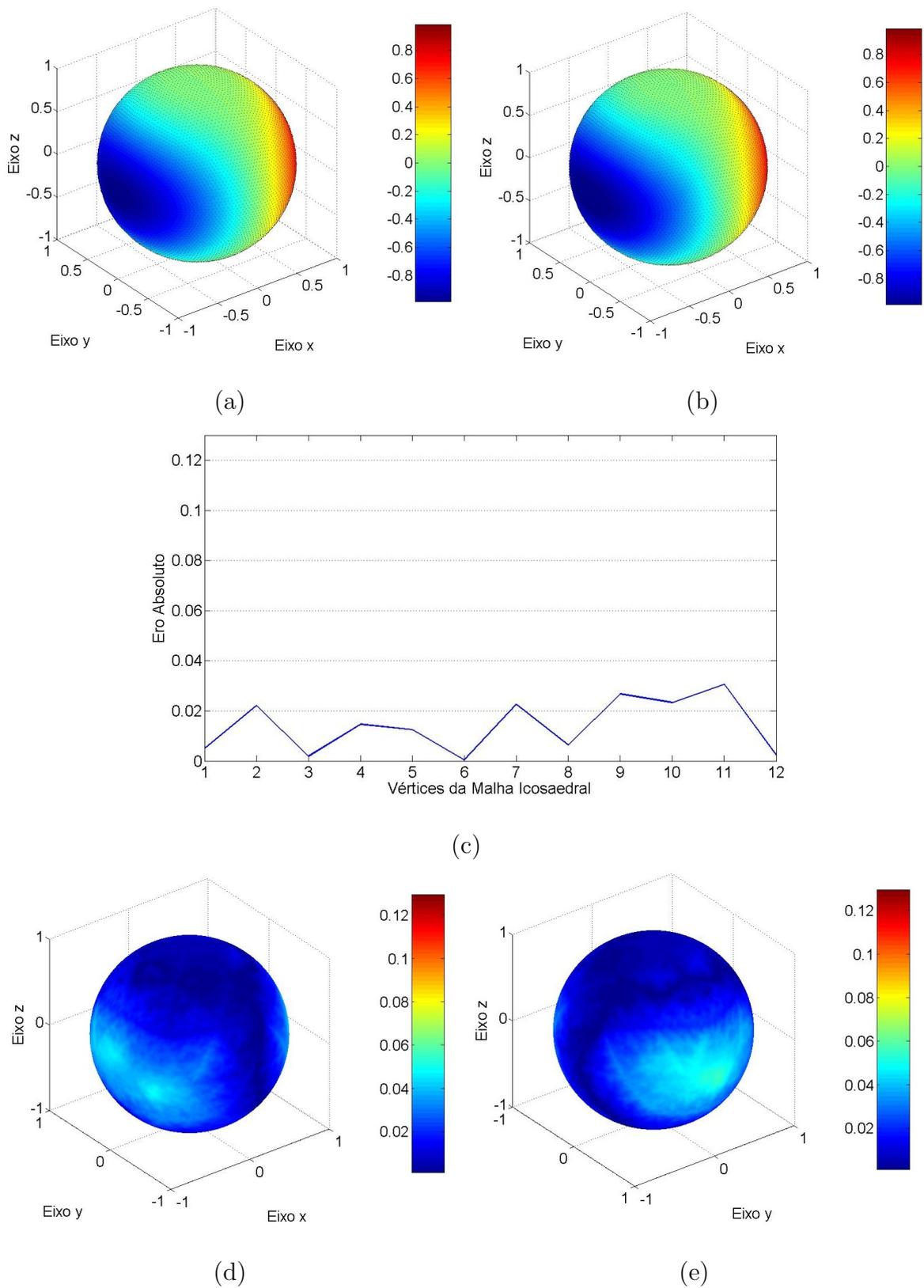
**Figura 7.11:** Nível 2: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^\circ$  em torno do eixo  $z$ .



**Figura 7.12:** Nível 3: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^\circ$  em torno do eixo  $z$ .



**Figura 7.13:** Nível 4: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^\circ$  em torno do eixo  $z$ .



**Figura 7.14:** Nível 5: (a) Solução analítica; (b) solução numérica; (c) erro absoluto avaliado nos vértices originais da malha; (d) erro distribuído sobre a esfera; (e) erro distribuído sobre a esfera com uma rotação de  $90^0$  em torno do eixo  $z$ .

## Capítulo 8

# Problema estacionário de estimação de fonte na esfera

Neste capítulo estamos interessados em obter estimativas de fontes de calor com dependência espacial, a partir de medidas experimentais simuladas da distribuição de temperatura na esfera.

Para tanto, empregamos o método de regularização iterada de Alifanov, [36], [13], para resolver o problema de Poisson inverso definido na esfera.

### 8.1 Problema de Poisson e formulação do problema inverso

Considere o problema de Poisson (2.55), rerepresentado neste momento,

$$\begin{cases} -\Delta_S u(x) = f(x) , & x \in S^2 , \\ \int_{S^2} u(x) dS(x) = 0 . \end{cases} \quad (8.1)$$

Denote por  $u[f]$  a solução, explicitando a dependência desta no termo fonte.

O problema inverso associado à equação de Poisson consiste na estimação da fonte, conhecendo a formulação do problema e as medidas experimentais. Isto é, queremos determinar  $f(x)$ ,  $x \in S^2$ , a partir de medidas experimentais,  $u_m$ , da temperatura

nas posições prescritas  $x_m \in S^2$  com  $m = 1, \dots, M$ . Note que  $x_m$ ,  $m = 1, \dots, M$  representa a posição dos sensores de temperatura.

Resolvemos este problema inverso através de uma otimização, minimizando o funcional quadrático dos resíduos

$$J[f] = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\}^2 . \quad (8.2)$$

Aqui  $f$  é a função a ser estimada,  $f : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u_m$  é a grandeza medida, e  $u[f]$  é a grandeza calculada devido à fonte  $f$ ,  $u[f] : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ , isto é,  $u[f]$  é a solução da equação (8.1) com  $f$  dado. Notamos que,  $u[f](x_m)$  e  $u_m$ , com  $m = 1, \dots, M$ , estão definidos em vértices da malha icosaedral, e  $M \leq \mathcal{V}_n$ , onde, lembramos,  $\mathcal{V}_n$  é o número de vértices da malha e  $n$  é o nível de refinamento da mesma. Observamos que se trata de um problema de otimização em espaço de dimensão infinita.

## 8.2 Procedimento de minimização - gradiente conjugado

Para estimar a fonte  $f$ , utilizamos o método do gradiente conjugado que considera diretamente o problema de minimização do funcional, construindo uma seqüência minimizante. Então seja

$$f^{k+1} = f^k - \beta P^k , \quad (8.3)$$

onde  $k = 0, 1, 2, \dots$ , é o contador de iterações,  $\beta$  especifica o tamanho do passo a ser dado na direção de busca,  $P^k$ , sendo que

$$P^k = J'_{f^k} + \gamma^k P^{k-1} , \quad (8.4)$$

com  $\gamma^0 = 0$ . Aqui  $\gamma^k$  é o chamado coeficiente conjugado, e  $J'_{f^k}$  é o gradiente do funcional  $J$  no ponto (função)  $f$ . É relevante observar que tanto o gradiente,  $J'_f$ , quanto a direção do passo de busca são funções escalares definidas em  $S^2$ . Mais adiante discutimos como obter  $J'_f$ .

Determinamos o tamanho do passo de busca,  $\beta$ , minimizando o funcional  $J [f^{k+1}] = J [f^k - \gamma P^k]$  em relação a  $\gamma$ , isto é,

$$J [f^k - \beta P^k] = \min_{\gamma} [f^k - \gamma P^k] = \min_{\gamma} \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u [f^k - \gamma P^k] (x_m) - u_m \right\}^2 . \quad (8.5)$$

Como é mostrado na seção 8.5,  $\beta$  é dado por

$$\beta = \frac{\sum_{m=1}^M \{ u [f^k] (x_m) - u_m \} \Delta u [P^k] (x_m)}{\sum_{m=1}^M \{ \Delta u [P^k] (x_m) \}^2} , \quad (8.6)$$

onde  $\Delta u = \Delta u [P]$  representa a solução do problema de sensibilidade com dado de entrada  $P$ . O problema de sensibilidade é considerado na próxima seção.

O coeficiente conjugado,  $\gamma^k$ , pode ser escolhido fazendo-se

$$\gamma^k = \int_{S^2} [J'_{f^k} (x)]^2 dS (x) \Big/ \int_{S^2} [J'_{f^{k-1}} (x)]^2 dS (x) , \quad (8.7)$$

onde o gradiente,  $J'_f$ , é obtido através da resolução da equação adjunta, apresentada em seção próxima.

### 8.3 Problema de sensibilidade

A um problema que varia em função de um dado  $f$ , podemos associar o problema de sensibilidade. Ao introduzirmos uma perturbação,  $\Delta f$ , no dado (termo fonte),

$$f \rightarrow f + \Delta f ,$$

obtemos uma variação na solução do problema (função incógnita),

$$u \rightarrow u + \Delta u .$$

O problema de sensibilidade é, por definição, o problema que  $\Delta u$  satisfaz.

Desta forma, a primeira equação dada em (8.1) para a fonte  $f + \Delta f$  pode ser

reescrita como

$$-\Delta_s [u(x) + \Delta u(x)] = f(x) + \Delta f(x) , \quad x \in S^2 . \quad (8.8)$$

Subtraindo a equação (8.1) da equação (8.8), obtemos a equação que  $\Delta u$  satisfaz, o *problema de sensibilidade*, dada por

$$-\Delta_s [\Delta u(x)] = \Delta f(x) , \quad x \in S^2 . \quad (8.9)$$

A dependência de  $\Delta u(x)$  na fonte  $\Delta f$  é escrita como  $\Delta u[\Delta f](x)$ . Observamos que, neste caso, o problema de sensibilidade é idêntico ao problema original, primeira equação em (8.1), só variando o termo fonte.

## 8.4 Problema adjunto

Para obter o problema adjunto de um problema linear, é conveniente montar a função Lagrangiana. Seja então

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f] &= J[f] + \int_{S^2} \lambda(x) [\Delta_s u(x) + f(x)] dS(x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\}^2 \\ &\quad + \int_{S^2} \lambda(x) \left[ \Delta_s u(x) + f(x) \right] dS(x) \end{aligned} \quad (8.10)$$

onde  $\lambda(x)$  é chamada de função adjunta (ou multiplicador de Lagrange).

Queremos determinar a derivada de  $\mathcal{L}$  em  $f$ ,  $d\mathcal{L}_f$ . Calculamos então o valor de  $\mathcal{L}$  no dado perturbado,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f + \Delta f] &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) + \Delta u[\Delta f](x_m) - u_m \right\}^2 \\ &\quad + \int_{S^2} \lambda(x) \left\{ \Delta_s [u(x) + \Delta u(x)] + f(x) + \Delta f(x) \right\} dS(x) \end{aligned} \quad (8.11)$$

Rearrmando temos que

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}[f + \Delta f] &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\}^2 \\
 &+ \int_{S^2} \lambda(x) \left[ \Delta_S u(x) + f(x) \right] dS(x) \\
 &+ \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \Delta u[\Delta f](x_m) \\
 &+ \int_{S^2} \lambda(x) \left[ \Delta_S (\Delta u(x)) + \Delta f(x) \right] dS(x) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ \Delta u[\Delta f](x_m) \right\}^2. \tag{8.12}
 \end{aligned}$$

A soma dos dois primeiros termos do lado direito da equação (8.12) correspondem a  $\mathcal{L}[f]$ , dado na equação (8.10). Assim,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}[f + \Delta f] - \mathcal{L}[f] &= \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \Delta u[\Delta f](x_m) \\
 &+ \int_{S^2} \lambda(x) \left[ \Delta_S (\Delta u(x)) + \Delta f(x) \right] dS(x) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ \Delta u[\Delta f](x_m) \right\}^2. \tag{8.13}
 \end{aligned}$$

A derivada de  $\mathcal{L}$  em  $f$ , aplicada em  $\Delta f$ ,  $d\mathcal{L}_f[\Delta f]$ , é obtida da equação (8.13) desconsiderando-se os termos de segunda ordem em  $\Delta f$  (apenas o último termo do lado direito da equação (8.13)). Portanto,

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{L}_f[\Delta f] &= \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \Delta u[\Delta f](x_m) \\
 &+ \int_{S^2} \lambda(x) \Delta_S (\Delta u(x)) dS(x) \\
 &+ \int_{S^2} \lambda(x) \Delta f(x) dS(x). \tag{8.14}
 \end{aligned}$$

Usando o produto interno e a propriedade de comutação do Laplaciano no produto

interno, equação (2.49), tem-se que

$$\int_{S^2} \lambda(x) \Delta_S (\Delta u(x)) dS(x) = \langle \lambda, \Delta_S (\Delta u) \rangle = \langle \Delta_S \lambda, \Delta u \rangle = \int_{S^2} [\Delta_S \lambda(x)] \Delta u(x) dS(x)$$

donde,

$$\begin{aligned} d\mathcal{L}_f [\Delta f] &= \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \Delta u [\Delta f](x_m) \\ &+ \int_{S^2} \left[ \Delta_S \lambda(x) \right] \Delta u(x) dS(x) \\ &+ \int_{S^2} \lambda(x) \Delta f(x) dS(x) . \end{aligned} \quad (8.15)$$

Note que

$$\begin{aligned} &\sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \Delta u [\Delta f](x_m) = \\ &\int_{S^2} \left\{ \sum_{m=1}^M \left[ u[f](x_m) - u_m \right] \Delta u [\Delta f](x_m) \delta_{x_m}(x) \right\} dS(x) , \end{aligned} \quad (8.16)$$

onde  $\delta = \delta_{x_m}(x)$  representa a função  $\delta$  de Dirac centrada em  $x_m$ .

Assim, substituindo (8.16) em (8.15), temos

$$\begin{aligned} d\mathcal{L}_f [\Delta f] &= \int_{S^2} \left\{ \sum_{m=1}^M \left[ u[f](x_m) - u_m \right] \delta_{x_m}(x) \right. \\ &\left. + \Delta_S \lambda(x) \right\} \Delta u [\Delta f](x) dS(x) \\ &+ \int_{S^2} \lambda(x) \Delta f(x) dS(x) . \end{aligned} \quad (8.17)$$

Escolhemos uma função  $\lambda$  de forma a anular o primeiro termo do lado direito da equação (8.17), para qualquer  $\Delta f$  ou para qualquer  $\Delta u$ . Basta então que  $\lambda$  satisfaça

a seguinte equação:

$$-\Delta_S \lambda(x) = \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m \right\} \delta_{x_m}(x) , \quad x \in S^2 . \quad (8.18)$$

Desta forma,

$$d\mathcal{L}_f[\Delta f] = \int_{S^2} \lambda(x) \Delta f(x) dS(x) . \quad (8.19)$$

Escrevendo em notação de produto interno,

$$\int_{S^2} \lambda(x) \Delta f(x) dS(x) = \langle \lambda, \Delta f \rangle , \quad (8.20)$$

temos que

$$d\mathcal{L}_f[\Delta f] = \langle \lambda, \Delta f \rangle . \quad (8.21)$$

Mas, o gradiente,  $\mathcal{L}'_f$ , por definição, é a função que representa a derivada com relação ao produto interno, isto é,

$$d\mathcal{L}_f[\Delta f] = \langle \mathcal{L}'_f, \Delta f \rangle \quad (8.22)$$

donde, comparando a equação (8.21) e a equação (8.22), obtemos

$$\mathcal{L}'_f = \lambda . \quad (8.23)$$

Pela primeira equação dada em (8.1), o termo que multiplica  $\lambda$  em  $\mathcal{L}$  na equação (8.10), é nulo, donde temos que  $J[f] = \mathcal{L}[f, \lambda]$ . Logo, as derivadas são iguais,  $dJ_f = d\mathcal{L}_f$ , e os gradientes também,  $J'_f = \mathcal{L}'_f$ . Daí, concluímos que

$$J'_f = \lambda(x) ,$$

é a solução do problema adjunto, e a equação (8.18) é o *problema adjunto*. O problema adjunto, neste caso, é de mesma natureza que o problema original, primeira equação

em (8.1), sendo que o termo fonte reflete a forma do funcional  $J$ , equação (8.2).

## 8.5 Tamanho do passo de busca

Para obtermos o tamanho do passo de busca do algoritmo iterativo para este problema específico, fazemos o cálculo do ponto crítico de

$$J[f - \gamma P] = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m - \gamma \Delta u[P](x_m) \right\}^2 .$$

Logo, podemos calcular a derivada do funcional em relação a  $\gamma$ , dada por

$$\frac{d}{d\gamma} J[f - \gamma P] = \sum_{m=1}^M \left\{ u[f](x_m) - u_m - \gamma \Delta u[P](x_m) \right\} \Delta u[P](x_m) .$$

Substituindo na expressão anterior da derivada,  $\gamma$  por  $\beta$ ,  $f$  por  $f^k$  e  $P$  por  $P^k$ , e escrevendo a correspondente equação de ponto crítico, temos que

$$\sum_{m=1}^M \left\{ u[f^k](x_m) - u_m - \beta \Delta u[P^k](x_m) \right\} \Delta u[P^k](x_m) = 0 ,$$

isto é,

$$\sum_{m=1}^M \left\{ u[f^k](x_m) - u_m \right\} \Delta u[P^k](x_m) - \beta \sum_{m=1}^M \left\{ \Delta u[P^k](x_m) \right\}^2 = 0 .$$

Resolvendo a equação de ponto crítico em relação a  $\beta$  obtemos

$$\beta = \frac{\sum_{m=1}^M \left\{ u[f^k](x_m) - u_m \right\} \Delta u[P^k](x_m)}{\sum_{m=1}^M \left\{ \Delta u[P^k](x_m) \right\}^2} .$$

## 8.6 Algoritmo iterativo

A seguir apresentamos o algoritmo iterativo para obter a solução desejada.

**PASSO 1:** Faça  $k = 0$  e inicialize  $f^0$  com uma estimativa inicial.

**PASSO 2:** Resolva o problema direto, com o termo fonte  $f^k$ ,  $u[f^k]$ , devido a estimativa  $f^k$ .

**PASSO 3:** Conhecendo  $u[f^k]$  que foi calculado, e as medidas experimentais  $u_m$ ,  $m = 1, \dots, M$ , determine  $J'_{f^k} = \lambda$  através do problema adjunto; equação (8.18).

**PASSO 4:** Calcule o coeficiente conjugado,  $\gamma^k$ , utilizando a equação (8.7).

**PASSO 5:** Calcule o passo de busca,  $P^k$ , utilizando a equação (8.4).

**PASSO 6:** Faça  $\Delta f^k = P^k$  e resolva o problema de sensibilidade obtendo  $\Delta u[P^k]$ .

**PASSO 7:** Calcule o tamanho do passo de busca,  $\beta$ , utilizando a equação (8.6).

**PASSO 8:** Calcule a nova estimativa  $f^{k+1}$  utilizando a equação (8.3).

**PASSO 9:** Pare, se o critério de parada for satisfeito. Caso contrário, faça  $k = k + 1$  e volte ao passo 2.

## Capítulo 9

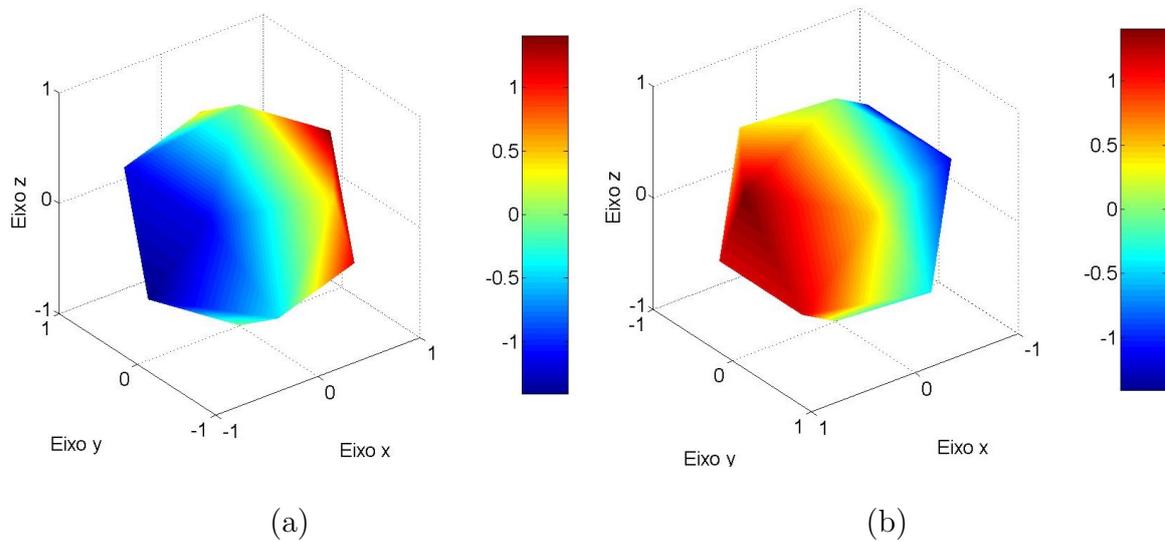
# Resultados numéricos do problema estacionário de estimação de fonte sobre a esfera

Apresentamos neste capítulo os resultados numéricos obtidos com o método numérico para resolver o problema inverso.

### 9.1 Resultados numéricos

Foram feitas algumas adaptações para obter a solução numérica dos problemas diretos envolvidos no algoritmo de resolução do problema inverso. Foram obtidas estimativas do termo fonte com vários sensores de medições, com vários níveis de discretização da malha. As medidas experimentais são dadas ora através da solução analítica do problema direto, e ora com a solução numérica do mesmo, com o objetivo de verificar como as perturbações nos dados experimentais podem influenciar na solução do problema inverso.

Observamos na figura 9.1, o termo fonte do problema original, na malha de nível 0.



**Figura 9.1:** (a) Termo fonte do problema direto; (b) Termo fonte do problema direto - translação de  $180^\circ$ .

### 9.1.1 Sensores de temperatura posicionados no polo norte e no polo sul da esfera

Nesta simulação, posicionamos todos os sensores nos polos norte e sul da esfera.

Nas figuras 9.2 a 9.4 mostramos os resultados numéricos obtidos para a malha de nível 0, com 2, 6 e 12 sensores, respectivamente.

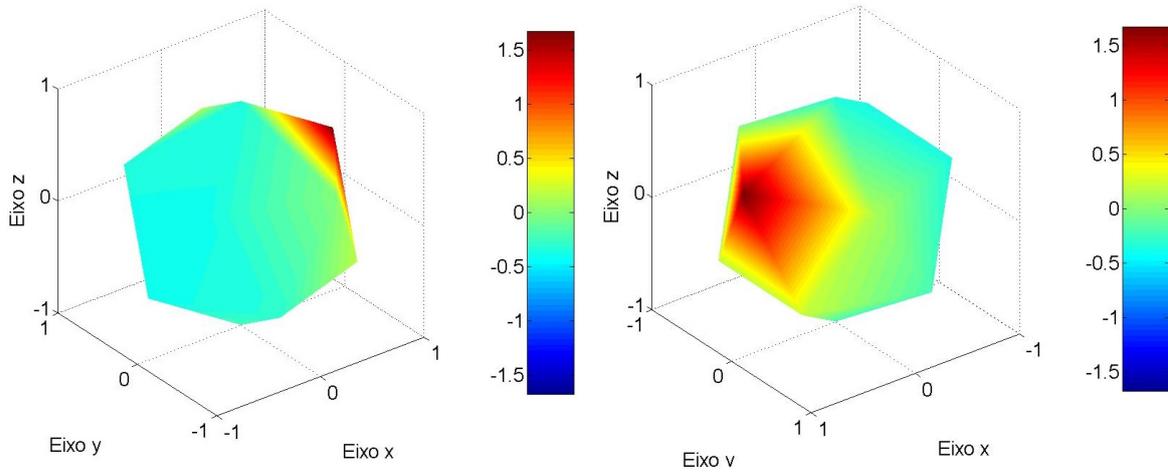
Observamos na figura 9.5, o termo fonte do problema original, na malha de nível 2.

Nas figuras 9.6 e 9.7, apresentamos os resultados obtidos com o nível 2 da malha.

### 9.1.2 Sensores de temperatura posicionados no polo norte

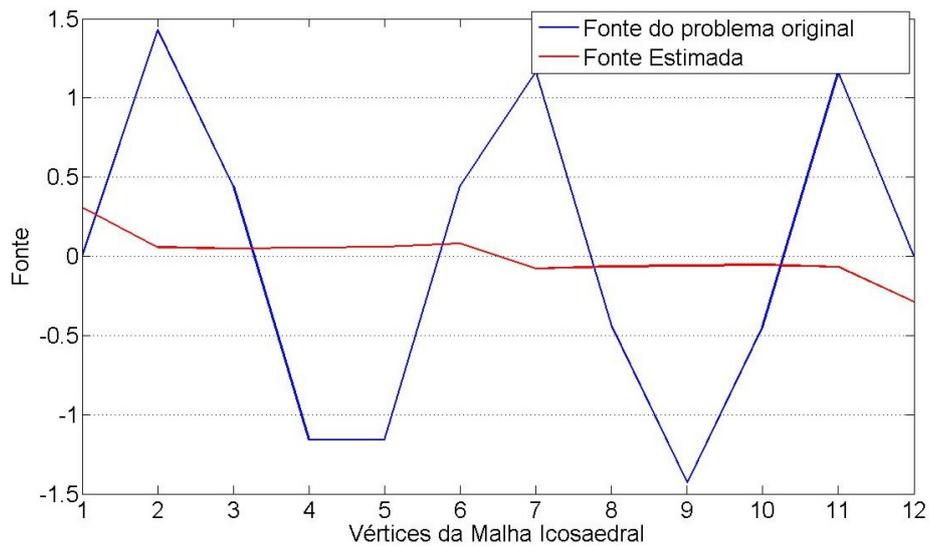
Os sensores de temperatura nesta simulação foram todos posicionados no polo norte da esfera.

Nas figuras 9.11 à 9.14 observamos os resultados numéricos gerados com a malha



(a)

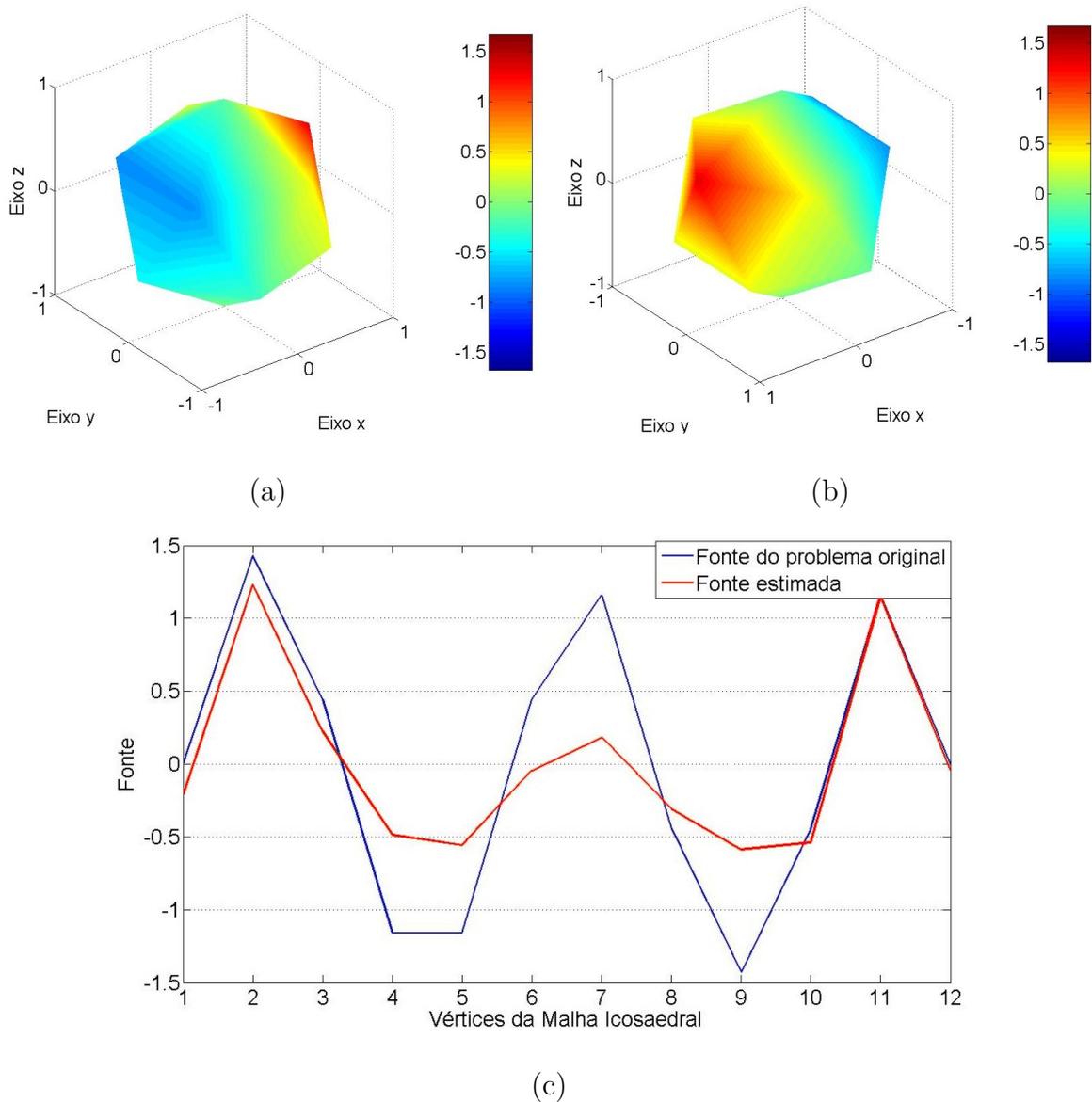
(b)



(c)

**Figura 9.2:** (a) Termo fonte estimado com apenas dois sensores: um no polo norte e outro no polo sul da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com apenas dois sensores: um no polo norte e outro no polo sul da esfera - rotação de  $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.

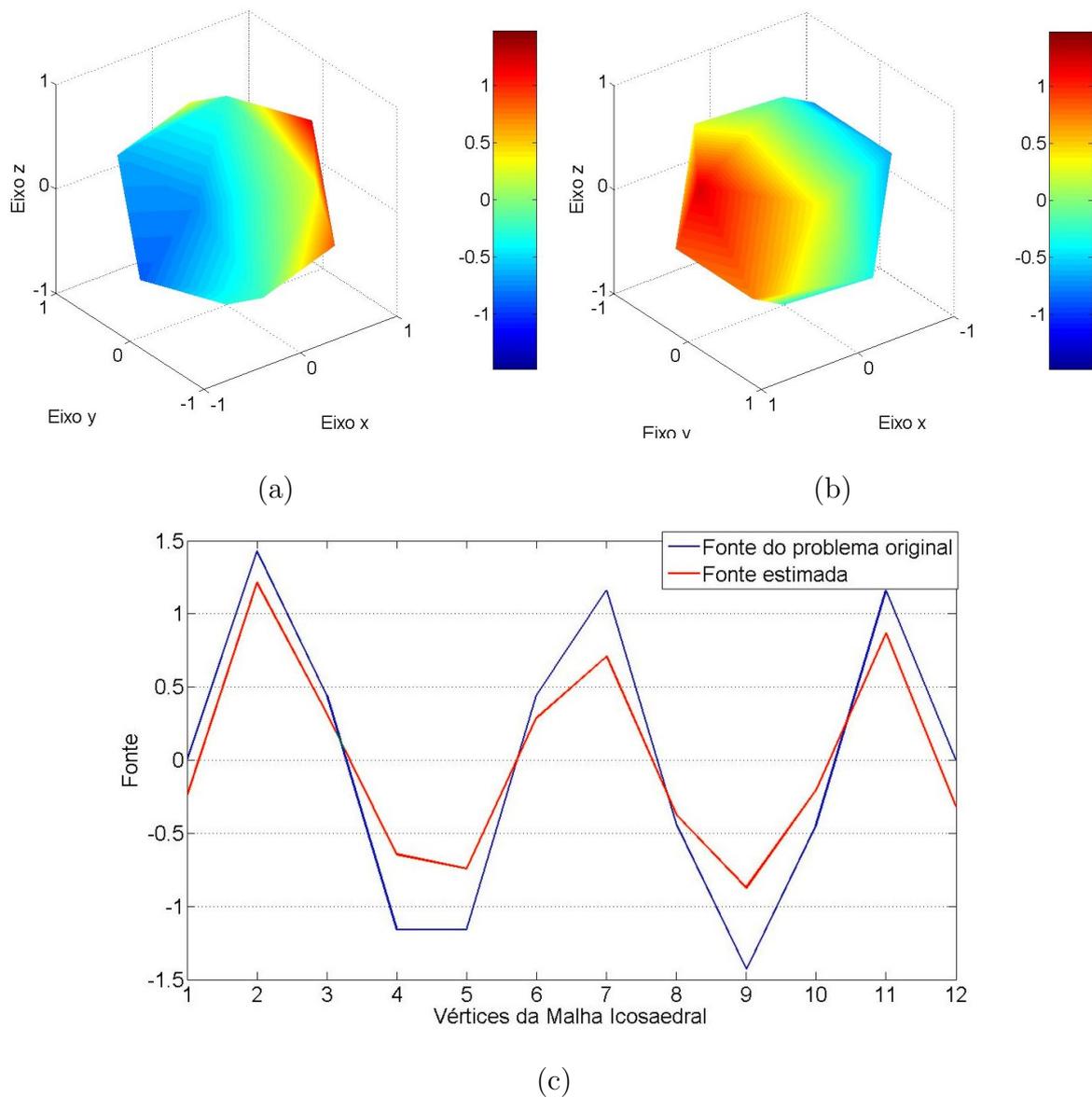
de nível 2.



**Figura 9.3:** (a) Termo fonte estimado com seis sensores: três no polo norte e outros três no polo sul da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com seis sensores: três no polo norte e outros três no polo sul da esfera - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.

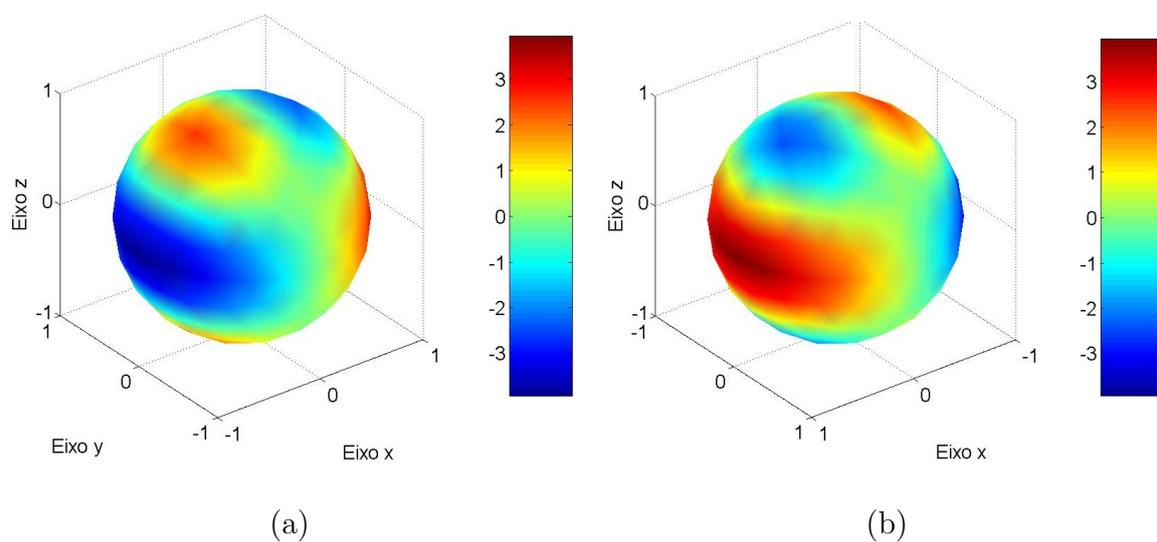
### 9.1.3 Fonte de dados diferentes

Na figura 9.15 observamos os resultados obtidos, lado a lado, usando como medida experimental a solução analítica e a solução numérica do problema direto.

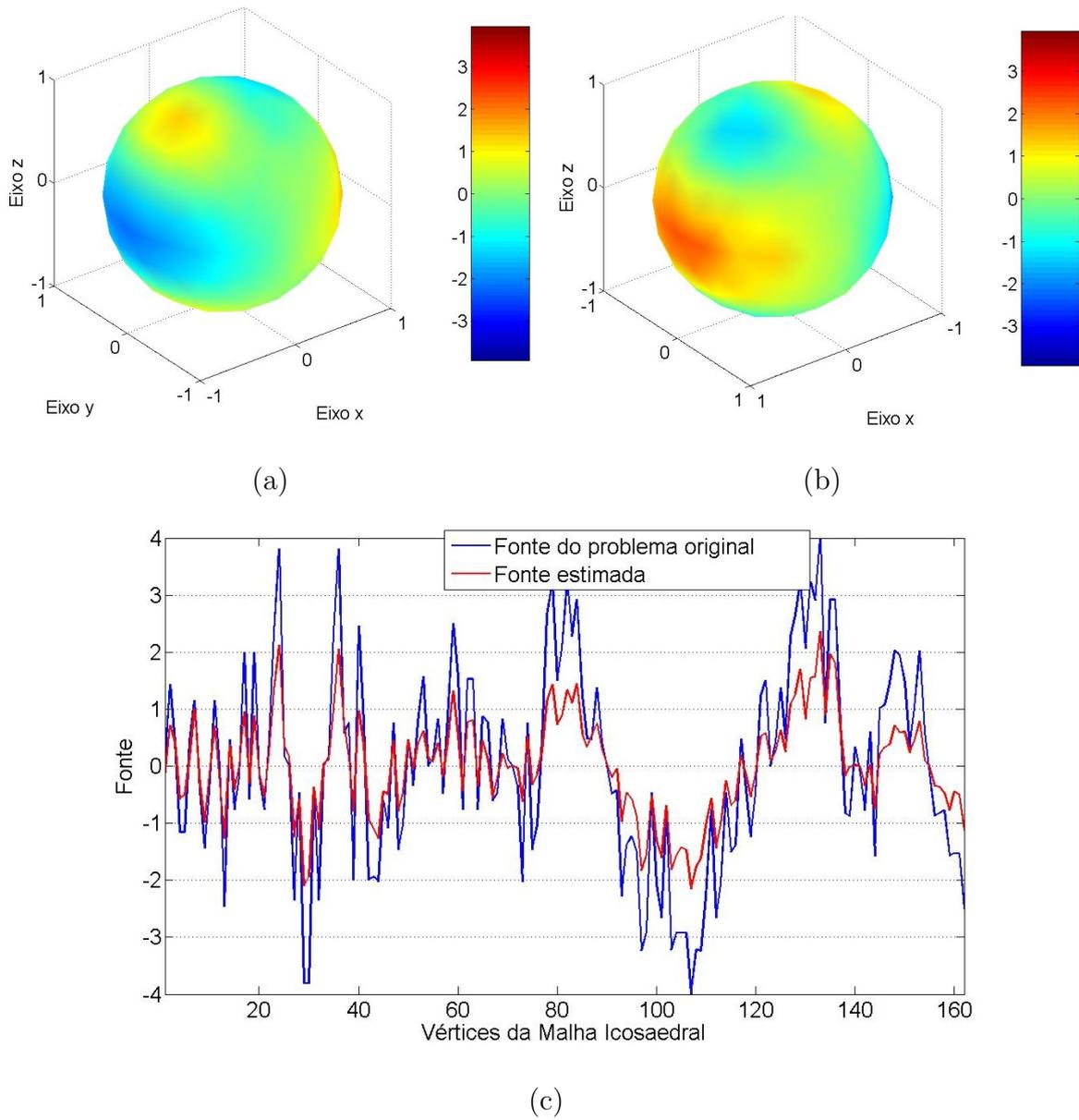


**Figura 9.4:** (a) Termo fonte estimado com doze sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com doze sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.

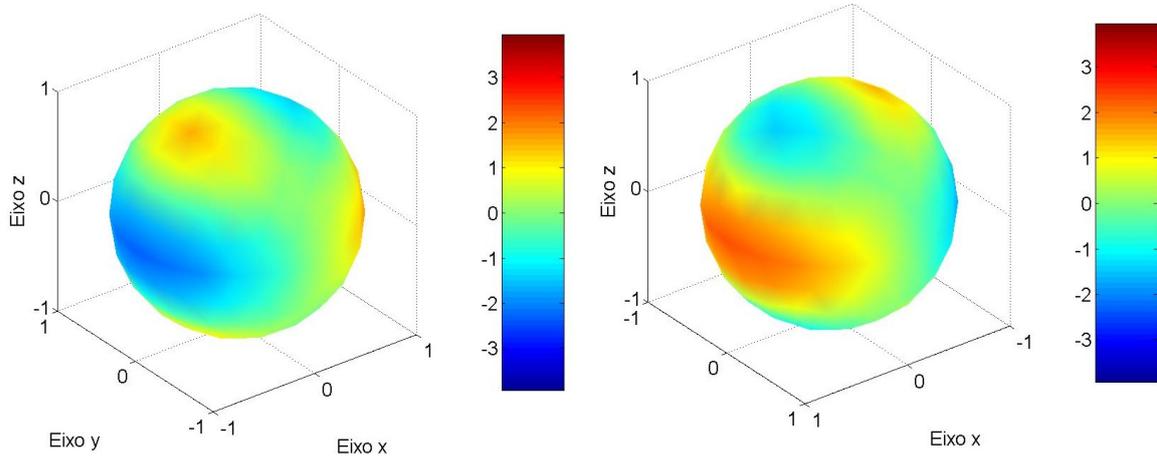
Apesar da fonte estimada ter o mesmo comportamento da fonte original, em alguns vértices da malha o erro foi quase 2. Não houve grande diferença entre medidas experimentais retiradas da solução numérica ou da solução analítica do problema direto.



**Figura 9.5:** (a) Termo fonte do problema direto; (b) Termo fonte do problema direto - translação de  $180^\circ$ .

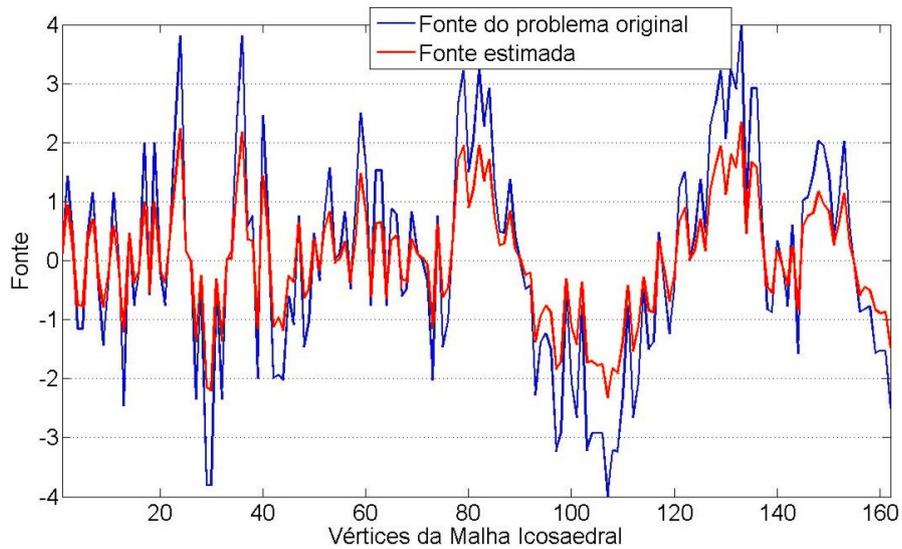


**Figura 9.6:** (a) Termo fonte estimado com 136 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 136 sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



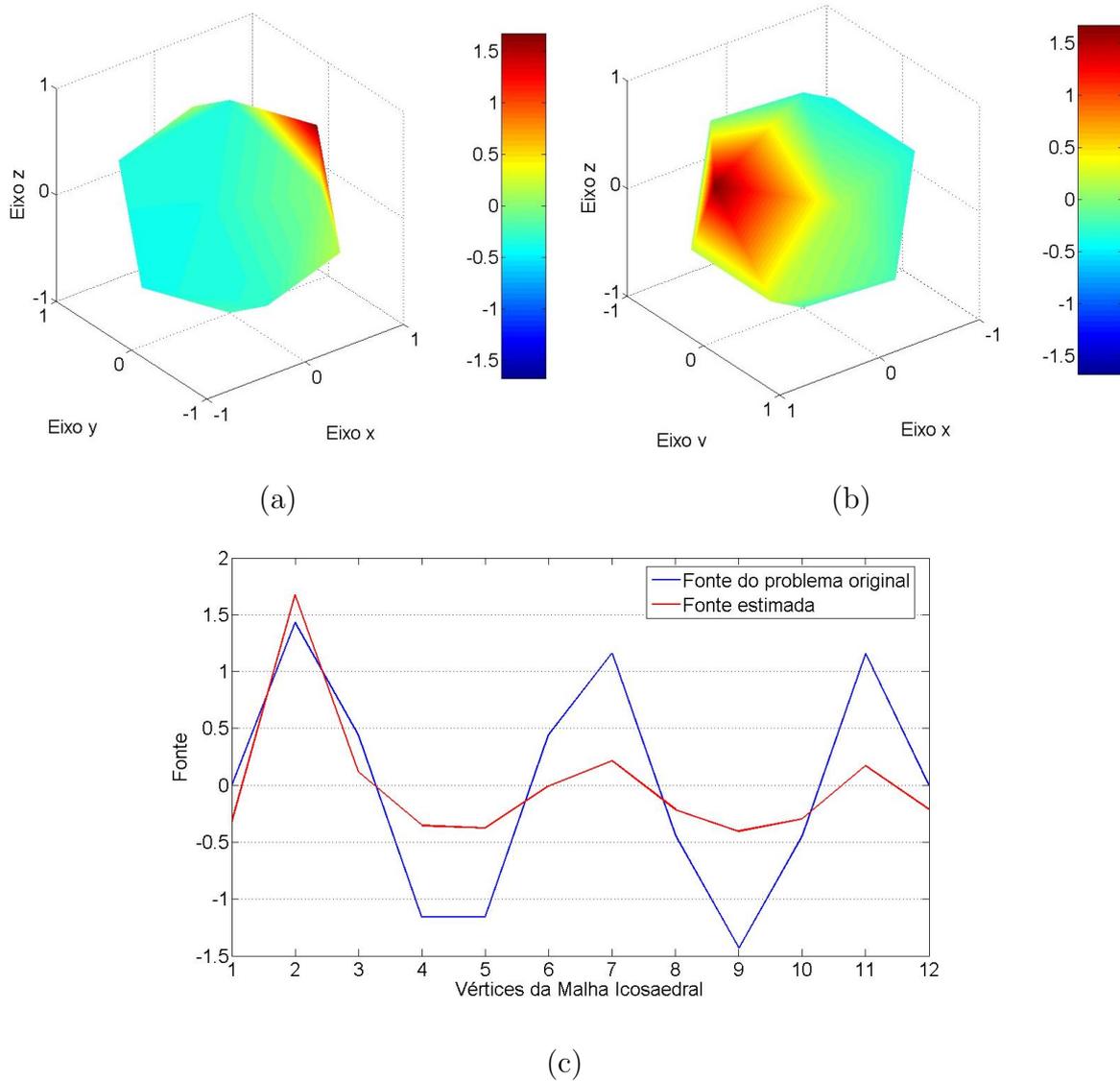
(a)

(b)

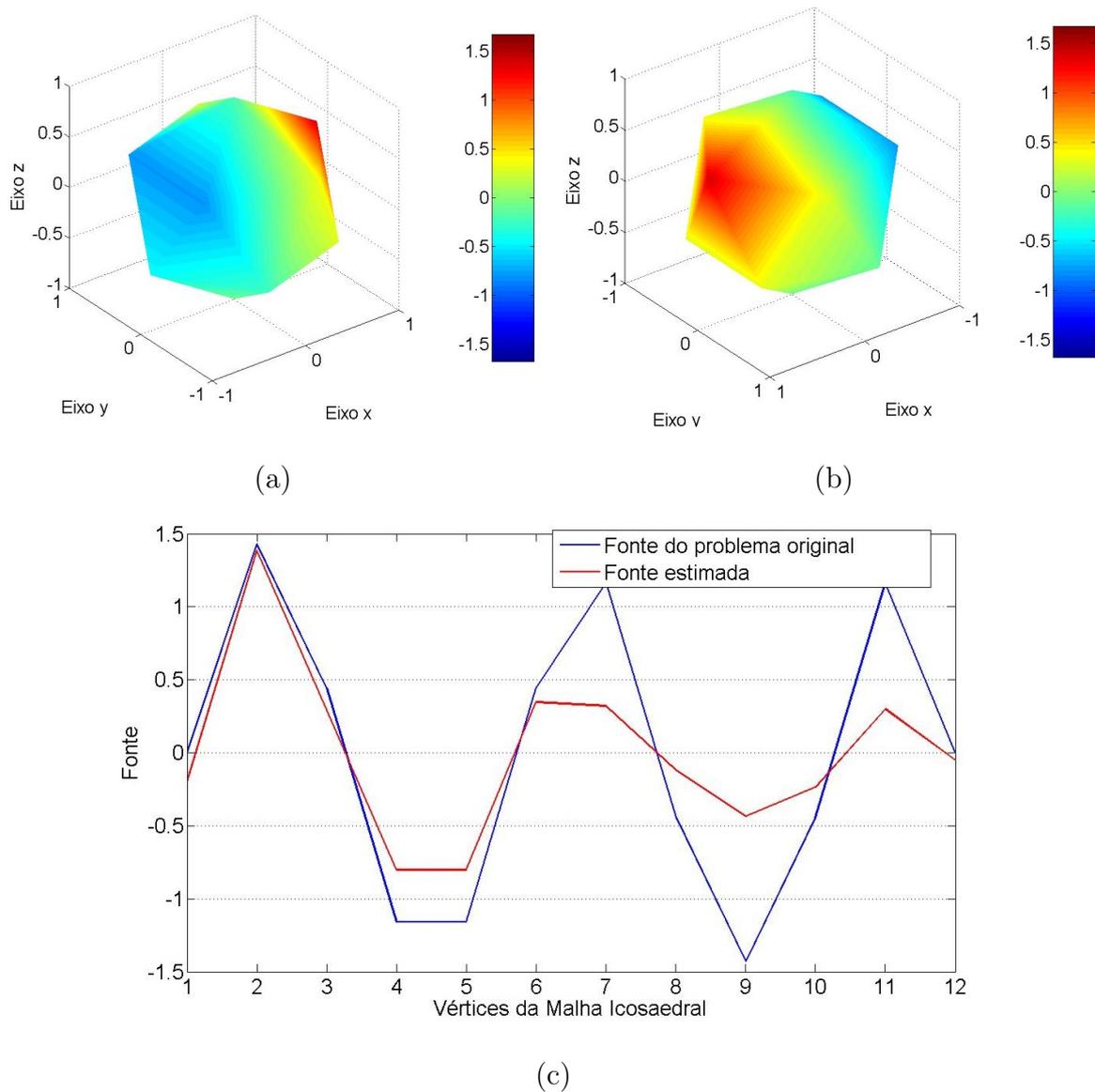


(c)

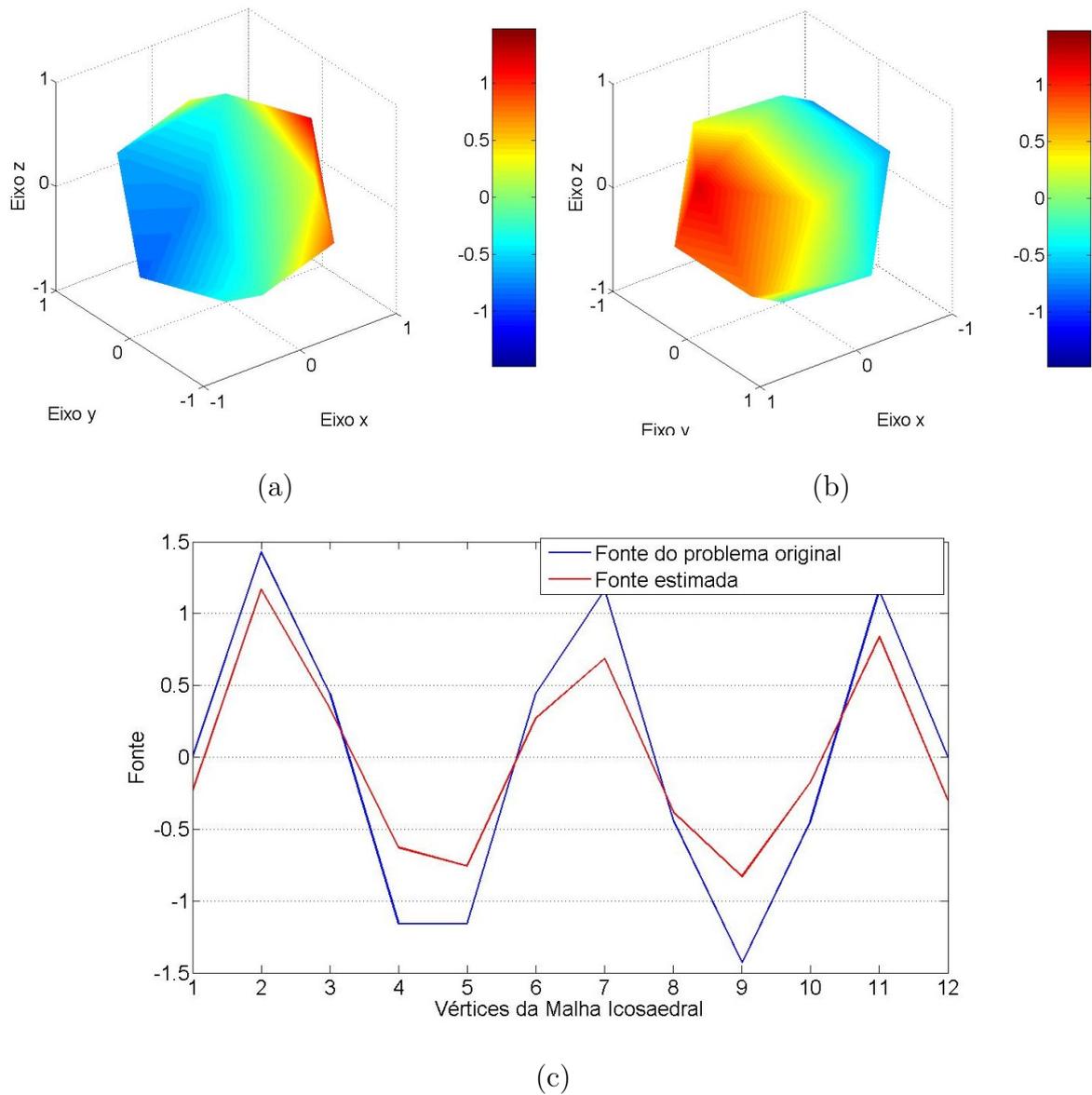
**Figura 9.7:** (a) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 162 sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



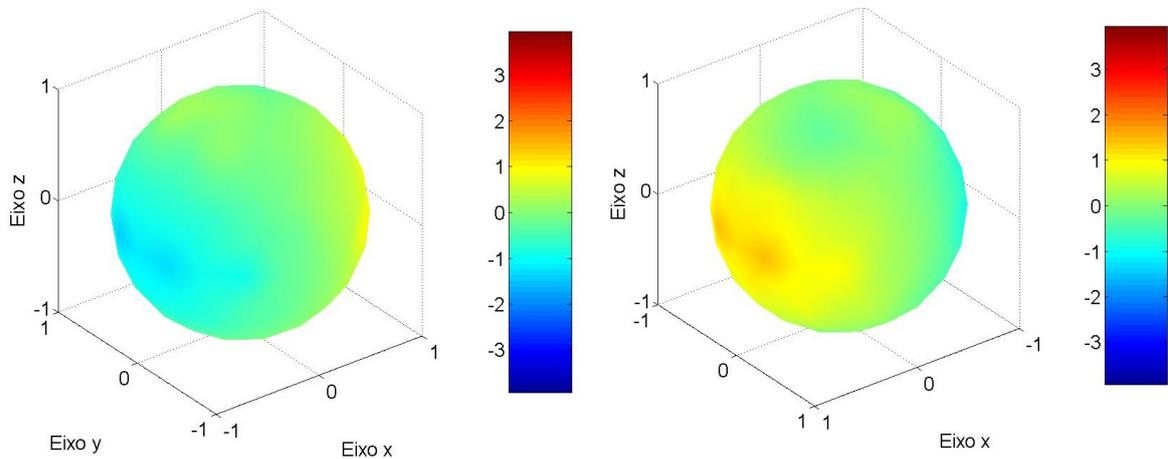
**Figura 9.8:** (a) Termo fonte estimado com apenas dois sensores posicionados no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com apenas dois sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de  $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



**Figura 9.9:** (a) Termo fonte estimado com seis sensores posicionados um no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com seis sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de  $180^{\circ}$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.

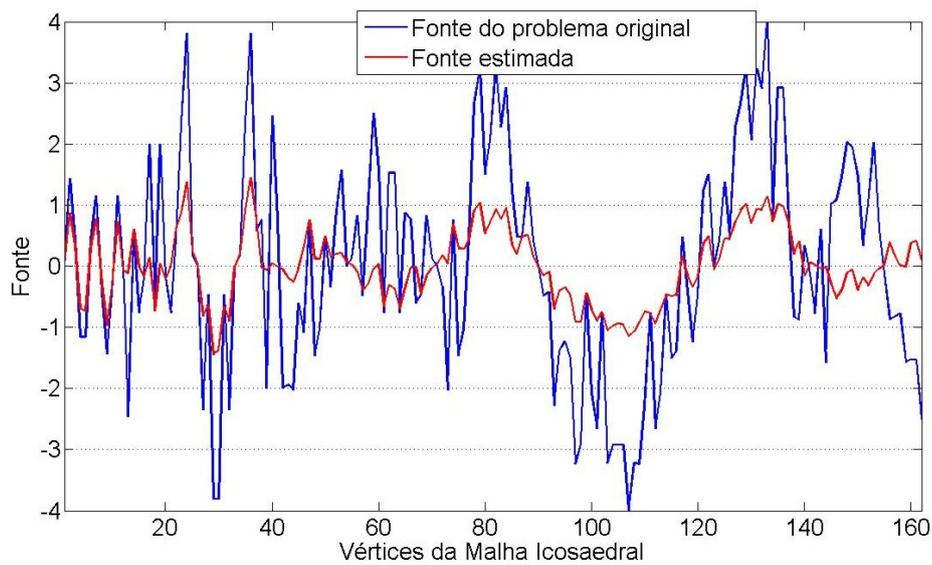


**Figura 9.10:** (a) Termo fonte estimado com doze sensores, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com doze sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



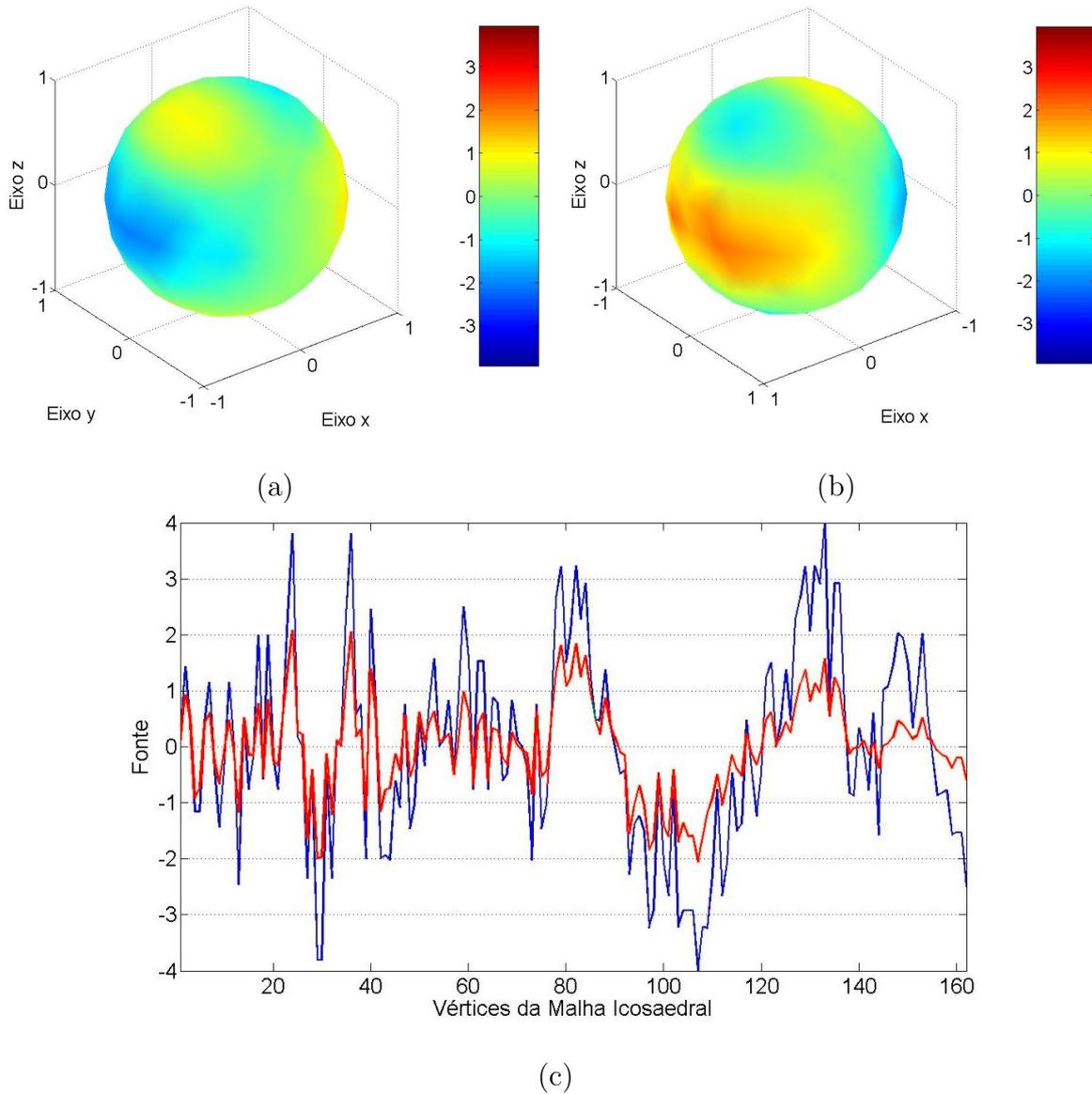
(a)

(b)

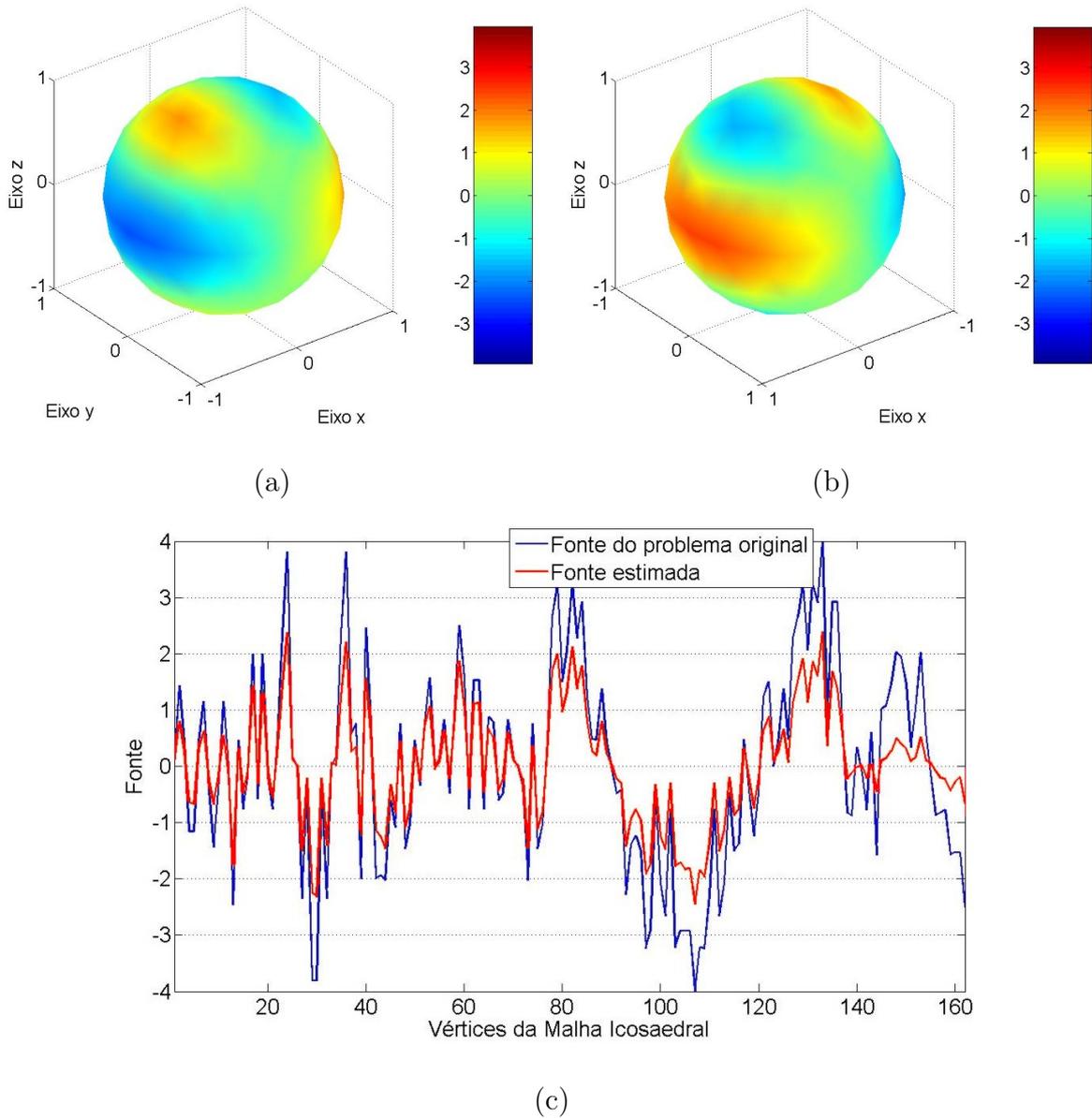


(c)

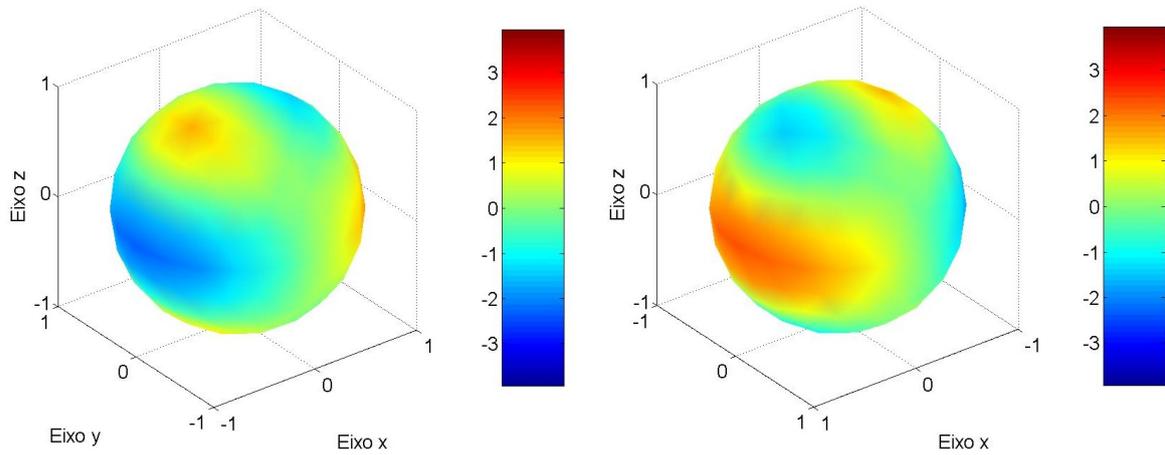
**Figura 9.11:** (a) Termo fonte estimado com 54 sensores posicionados no polo norte da esfera, com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 54 sensores posicionados no polo norte da esfera - rotação de  $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



**Figura 9.12:** (a) Termo fonte estimado com 108 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 108 sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.

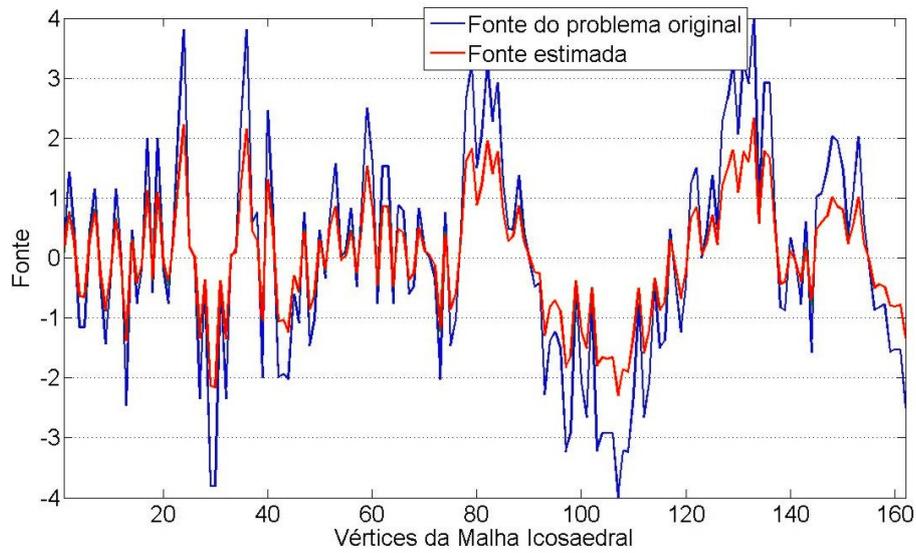


**Figura 9.13:** (a) Termo fonte estimado com 135 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 135 sensores - rotação de  $180^\circ$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



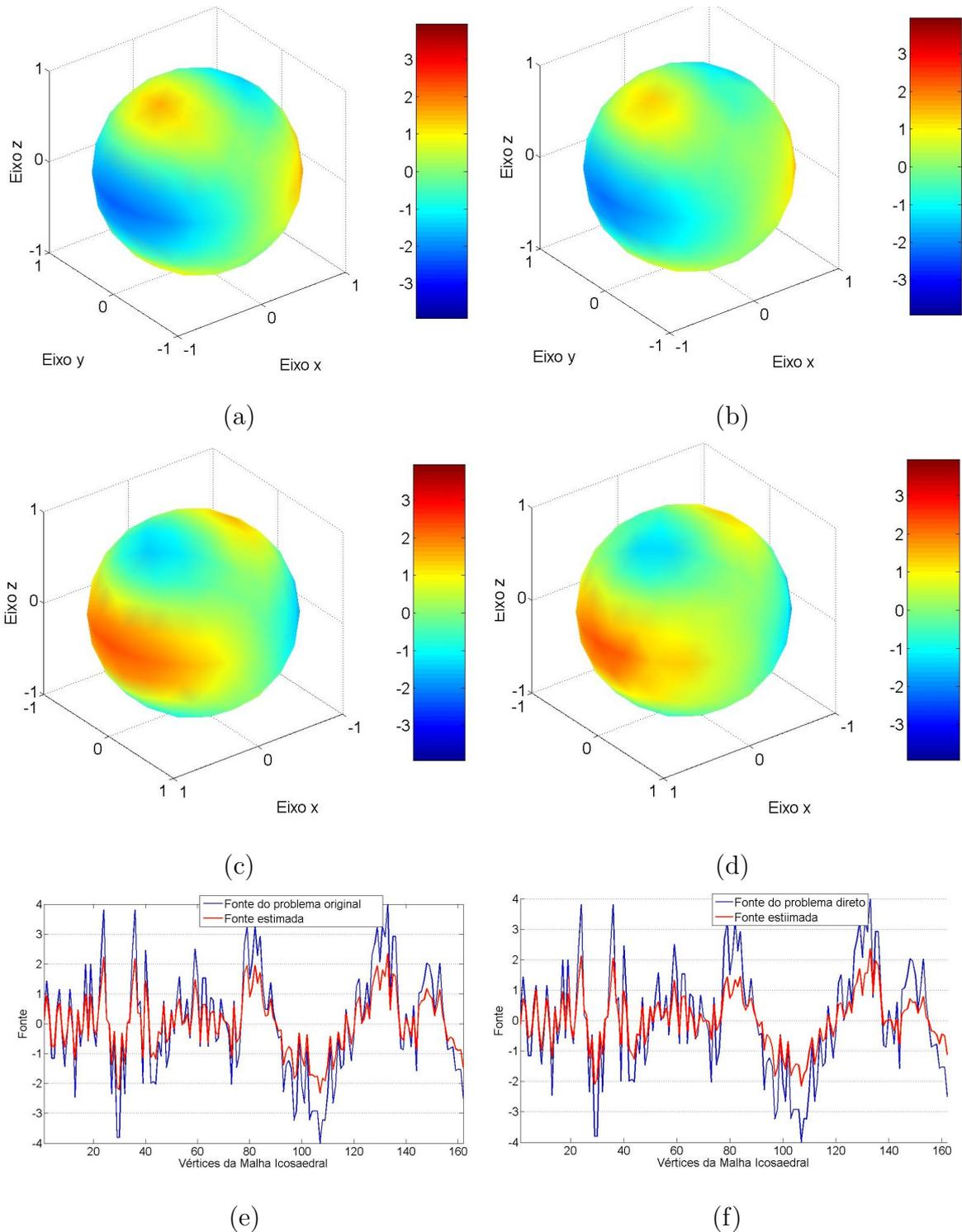
(a)

(b)



(c)

**Figura 9.14:** (a) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados experimentais retirados da solução analítica do problema direto; (b) Termo fonte estimado com 162 sensores - rotação de  $180^0$ ; (c) erro absoluto entre a fonte estimada e fonte original.



**Figura 9.15:** (a) Termo fonte estimado - 162 sensores - dados experimentais: solução analítica do problema direto; (b) dados experimentais: solução numérica do problema direto; (c) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados da solução analítica do problema direto; - rotação de  $180^0$ ; (d) Termo fonte estimado com 162 sensores com dados da solução numérica do problema direto; - rotação de  $180^0$ ; (e) erro absoluto entre a fonte estimada, dados experimentais da solução analítica, e a fonte original; (f) erro absoluto entre a fonte estimada, dados experimentais da solução numérica, e fonte original.

## Capítulo 10

# Equação de condução de calor sobre a esfera

O objetivo deste capítulo é resolver o problema de condução de calor sobre a esfera, utilizando uma semi-discretização temporal, seguida de uma discretização espacial resultando em um método implícito. Para a solução do sistema linear resultante, adaptamos o algoritmo iterativo apresentado no capítulo 5.

### 10.1 Equação do calor

Apresentado no capítulo 2, o problema de condução do calor na esfera, equação (2.2), é reescrito a seguir:

$$\begin{cases} u_t(\mathbf{x}, t) = \Delta_s u(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in S^2, t > 0 \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in S^2, \end{cases} \quad (10.1)$$

onde  $u$  é uma função definida na esfera, a ser determinada, que representa a distribuição de calor,  $u_0(x)$  é a distribuição inicial de calor,  $f$  é um termo de fonte de calor, que varia espacialmente mas não no tempo (nos problemas que consideramos), e  $\Delta_s$  é o operador Laplaciano definido na esfera.

## 10.2 Equações discretizadas

Nesta seção, associamos uma semi-discretização temporal, do tipo Crank-Nicolson, à discretização espacial desenvolvida no capítulo 4 para o problema de Poisson, de forma a obter uma discretização do problema dado na equação (10.1).

### 10.2.1 Semi-discretização temporal

Uma semi-discretização temporal do tipo Crank-Nicolson é desenvolvida utilizando um esquema de diferenças finitas avançadas para a derivada temporal, e avaliando as derivadas espaciais num nível de tempo intermediário; veja a figura 10.1.

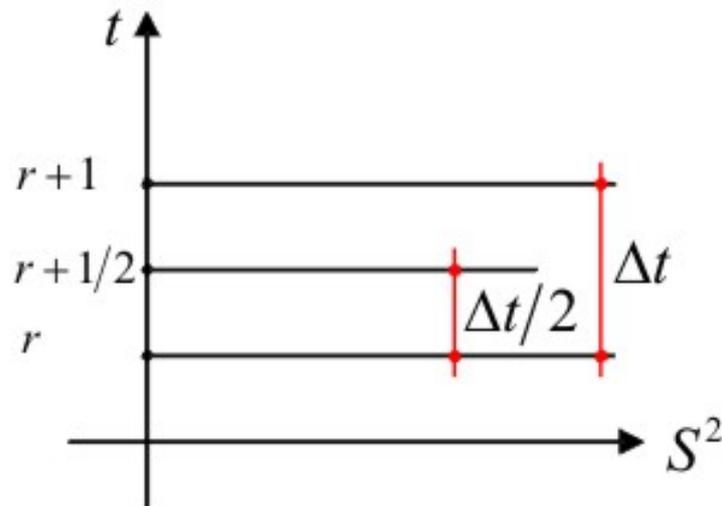


Figura 10.1: Representação da malha na semi-discretização temporal.

Assim, pelo esquema de diferença, uma aproximação para a derivada no tempo é

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \approx \frac{u(\mathbf{x}, (r + 1) \Delta t) - u(\mathbf{x}, r \Delta t)}{\Delta t},$$

onde  $t > 0$ ,  $\mathbf{x} \in S^2$ ,  $\Delta t = t_{r+1} - t_r$  é o intervalo de tempo,  $r$  representa um parâmetro para a variável de tempo,  $t_r = r \cdot \Delta t$ , e  $\Delta t$  representa um intervalo de tempo.

Uma aproximação, no instante de tempo  $t_{r+1/2}$ , para o operador espacial, é dada

pela média do operador nos tempos  $t_r$  e  $t_{r+1}$ .

$$\Delta_s u(\mathbf{x}, (r + 1/2) \Delta t) \approx \frac{1}{2} (\Delta_s u(\mathbf{x}, (r + 1) \Delta t) + \Delta_s u(\mathbf{x}, r \Delta t)) .$$

Desta forma, a equação *semi-discretizada no tempo*, é definida por

$$\begin{cases} \frac{u(\mathbf{x}, (r + 1) \Delta t) - u(\mathbf{x}, r \Delta t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} (\Delta_s u(\mathbf{x}, (r + 1) \Delta t) + \Delta_s u(\mathbf{x}, r \Delta t)) + f(\mathbf{x}) , \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (10.2)$$

onde  $\mathbf{x} \in S^2$ , e  $r$  é inteiro,  $r \geq 0$ .

Utilizamos a mesma notação  $u$  para a solução da equação (10.1) e da equação (10.2), esperando não causar dificuldades na leitura.

## 10.2.2 Discretização espacial

Nesta seção, utilizamos uma discretização espacial, desenvolvida no capítulo 4 para o operador Laplaciano, no problema dado em (10.2). Para tanto, organizamos, primeiramente, esta mesma equação, na forma

$$u^{r+1}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \Delta_s u^{r+1}(\mathbf{x}) = u^r(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \Delta_s u^r(\mathbf{x}) + \Delta t f(\mathbf{x}) , \quad \mathbf{x} \in S^2, \quad (10.3)$$

e onde, para focar a atenção nas variáveis espaciais, utilizamos a notação  $u^r(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}, r \Delta t)$ , com o sobrescrito  $r$  para indicar a variável temporal.

Aplicamos na equação (10.3), idéia semelhante à utilizada para obter a equação (2.51), usando a equação (2.3). Sendo

$$\vec{v}^r = -\nabla_s u^r ,$$

reescrevemos a equação (10.3) como um sistema de equações de primeira ordem, dado

por

$$\begin{cases} u^{r+1}(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \operatorname{div}_S \vec{v}^{r+1} = u^r(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \operatorname{div}_S \vec{v}^r + \Delta t f(\mathbf{x}) , \\ \vec{v}^{r+1}(\mathbf{x}) = -\nabla_S u^{r+1}(\mathbf{x}) , \\ u^0(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) , \quad \vec{v}^0(\mathbf{x}) = \vec{v}_0(\mathbf{x}) = -\nabla_S u^0(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (10.4)$$

onde  $\mathbf{x} \in S^2$ ,  $r \geq 0$  inteiro.

Restringimos, a partir de agora, o sistema dado em (10.4) a uma face  $\hat{F}$  da malha dual (de um nível arbitrário). Assim, de forma similar ao que foi feito no capítulo 4, integramos ambos os lados da primeira equação dada em (10.4), e obtemos

$$\begin{aligned} \int_{\hat{F}} u^{r+1}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \int_{\hat{F}} \operatorname{div}_S \vec{v}^{r+1} dS(\mathbf{x}) = \\ \int_{\hat{F}} u^r(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \int_{\hat{F}} \operatorname{div}_S \vec{v}^r dS(\mathbf{x}) + \Delta t \int_{\hat{F}} f(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) . \end{aligned} \quad (10.5a)$$

Aplicando o teorema da divergência aos segundos termos de ambos os lados da equação (10.5a), temos que

$$\begin{aligned} \int_{\hat{F}} u^{r+1}(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} \int_{\partial \hat{F}} \vec{v}^{r+1} \cdot \hat{n} dl(\mathbf{x}) = \\ \int_{\hat{F}} u^r(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2} \int_{\partial \hat{F}} \vec{v}^r \cdot \hat{n} dl(\mathbf{x}) + \Delta t \int_{\hat{F}} f(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) , \end{aligned} \quad (10.5b)$$

onde  $\hat{n}$  é o vetor normal unitário exterior ao contorno de  $\hat{F}$ ,  $\partial \hat{F}$ .

Utilizamos aproximações como as dadas em (4.2). Além disso, analogamente, temos que

$$\int_{\hat{F}} u(\mathbf{x}) dS(\mathbf{x}) \approx u_0 A_{\hat{F}} . \quad (10.6)$$

Aqui,  $u_0$  está denotando o valor de  $u$  no vértice central da malha dual contido na face  $\hat{F}$ , distinguindo-se portanto do uso semelhante na equação (10.1). Motivados por estas

aproximações, definimos a *equação discreta*,

$$u_0^{r+1}A_{\hat{F}} + \frac{\Delta t}{2} \sum_{l=1}^{m_i} h_l v_l^{r+1} = u_0^r A_{\hat{F}} - \frac{\Delta t}{2} \sum_{l=1}^{m_i} h_l v_l^r + \Delta t f_0 A_{\hat{F}}. \quad (10.7a)$$

Usamos a equação (4.5) para obter uma aproximação para a segunda equação dada em (10.4), isto é,

$$v_j^{r+1} = -\frac{u_j^{r+1} - u_0^{r+1}}{d_j} \quad j = 1, \dots, m_i, \quad (10.7b)$$

Dado o valor de  $u_j^r$ ,  $j = 0, \dots, m_i$ , calcula-se  $v_j^r$  pela equação (10.7b), e especificada a fonte, a equação (10.7) tem por incógnitas o potencial  $u_j^{r+1}$ ,  $j = 0, \dots, m_i$ , e o fluxo  $v_j^{r+1}$ ,  $j = 1, \dots, m_i$ .

De forma similar ao problema apresentado no capítulo 4, a equação (10.7), para o nível de tempo  $r + 1$ , tem  $1 + m$  equações e  $1 + 2m$  incógnitas, em cada face, o que nos motiva a tratar das condições de interface.

### 10.2.3 Condições de interface

Devido ao fato do sistema de equações (10.7) ter menos equações do que incógnitas, e portanto ser impossível determinar unicamente os valores do potencial e do fluxo levando em conta apenas uma face, impomos condições de interface, similares às condições de interface apresentadas pelas equações dadas em (4.7), e obtemos uma formulação adequada para o problema discreto.

### 10.2.4 Mudança de variável

Com a introdução do termo transiente no problema de Poisson, também introduzimos novos pesos nas equações discretizadas. Assim, uma nova mudança de variável, dada por

$$w_j = \frac{h_j \Delta t}{2} v_j, \quad j = 1, \dots, m_i. \quad (10.8)$$

é conveniente para simplificar as equações.

Desta forma, as condições de interface, e as equações (10.7a) e (10.7b), podem ser reescritas como

$$c_j^{-1} w_j^{r+1} + (u_j^{r+1} - u_0^{r+1}) = 0 \quad (10.9a)$$

$$A_{\hat{F}} u_0^{r+1} + \sum_{l=1}^{m_i} w_l^{r+1} = \bar{f}^r \quad (10.9b)$$

$$u_j^{r+1} = \tilde{u}_j^{r+1} \quad (10.9c)$$

$$w_j^{r+1} = -\tilde{w}_j^{r+1} \quad (10.9d)$$

onde  $c_j = h_j \Delta t / 2d_j$ ,  $\bar{f}^r = A_{\hat{F}} (u_0^r + \Delta t f_0) - \sum_{l=1}^{m_i} w_l^r$ , e  $j = 1, \dots, m_i$ . Usamos, ainda, o sobrescrito *til* ( $\tilde{\phantom{x}}$ ) para denotar valores de variáveis na célula vizinha,  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{w}$  e  $\tilde{j}$  (para a numeração local na célula vizinha).

O sistema resultante (10.9) é similar ao sistema obtido para resolver o problema de Poisson. As diferenças são: a introdução de um novo termo,  $A_{\hat{F}} u_0^{r+1}$ , na segunda equação; o termo fonte,  $\bar{f}^r$ , agrega novos valores provenientes da discretização no tempo (referentes ao nível de tempo  $r$ ); e  $c_j$  recebe novos pesos, também referentes à discretização no tempo. Portanto, o algoritmo iterativo para determinar a solução do problema a ser apresentado em seção posterior tem que exibir diferenças com relação ao algoritmo iterativo apresentado no capítulo 5.

O sistema formado pelas duas primeiras equações dadas em (10.9) e pela equação de interface (semelhante à equação (4.10a), baseada nas equações (10.9c) e (10.9d)),

$$u_j^{r+1} - \beta w_j^{r+1} = \tilde{u}_j^{r+1} + \beta \tilde{w}_j^{r+1}, \quad (10.10)$$

para a face  $\hat{F}$  no nível de tempo  $r + 1$ , totaliza  $1 + 2m$  incógnitas e equações (para as variáveis  $u_j$ ,  $w_j$  definidas na face  $\hat{F}$ , assumido conhecidos os restantes parâmetros, como, por exemplo, os valores das variáveis em células vizinhas,  $\tilde{u}_j^{r+1}$  e  $\tilde{w}_j^{r+1}$ ).

### 10.3 Representação matricial, existência e unicidade

O objetivo desta seção é mostrar a existência e a unicidade da solução do sistema de equações obtido através da discretização da equação de condução de calor. Para tanto, representamos através de uma notação matricial a discretização da equação de condução de calor dada em (10.9).

De forma similar ao trabalho desenvolvido na seção 4.4, podemos reescrever a equação (10.9a), em notação matricial, como

$$-GA\mathbf{u} = \mathbf{w} , \quad (10.11)$$

onde  $G$  é uma matriz diagonal  $\mathcal{A}_n \times \mathcal{A}_n$ , cujas entradas, na diagonal principal, são  $g^i = (h^i \Delta t)/(d^i + \tilde{d}^i)$ , e  $A$  é a matriz de incidência definida na página 50. Para simplicidade de notação, excluímos os sobrescritos  $r$  e  $r + 1$  nesta e nas próximas equações.

Pode-se verificar então que a equação (10.9b), definida para cada nó, em forma matricial e de forma global para o grafo completo, pode ser escrita como

$$D\mathbf{u} - A^T \mathbf{w} = \bar{\mathbf{f}} , \quad (10.12)$$

onde  $D$  é uma matriz  $\mathcal{V}_n \times \mathcal{V}_n$ , diagonal, cujos elementos na diagonal principal são  $A_{\hat{f}^i}$ , as áreas de cada uma das células computacionais.

Resumidamente, a classe de problemas que estamos considerando é dada por

$$\begin{cases} -GA\mathbf{u} = \mathbf{w} \\ D\mathbf{u} - A^T \mathbf{w} = \bar{\mathbf{f}} \end{cases} \quad (10.13)$$

Substituindo  $\mathbf{w}$  dado na equação (10.11), na equação (10.12), obtemos

$$\left( D + A^T GA \right) \mathbf{u} = \bar{\mathbf{f}} . \quad (10.14)$$

A matriz  $D + A^T GA$  é real e simétrica. Logo pode ser diagonalizada, os seus autovalores são reais e os autovetores podem ser escolhidos ortogonais.

Sejam então  $\lambda$  e  $\mathbf{v}$ , um par de autovalor e respectivo autovetor. Assim, temos que

$$\mathbf{v}^T (D + A^T G A) \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}^T \mathbf{v}, \quad (10.15)$$

ou,

$$\|D^{1/2} \mathbf{v}\|^2 + \|G^{1/2} A \mathbf{v}\|^2 = \lambda \mathbf{v}^T \mathbf{v}. \quad (10.16)$$

Assim, qualquer autovalor satisfaz

$$\lambda = \frac{\|D^{1/2} \mathbf{v}\|^2 + \|G^{1/2} A \mathbf{v}\|^2}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}}. \quad (10.17)$$

Como  $\|D^{1/2} \mathbf{v}\| > 0$ ,  $\|G^{1/2} A \mathbf{v}\| \geq 0$ , e  $\mathbf{v}^T \mathbf{v} > 0$ , concluímos que todos os autovalores da matriz  $D + A^T G A$  são positivos.

Desta forma,  $\det(D + A^T G A) > 0$ , pois é igual ao produto dos autovalores. Concluímos assim que a matriz  $D + A^T G A$  é inversível e que o sistema de equações obtido através da discretização da equação de condução de calor tem solução e ela é única. Este resultado difere do que foi obtido para a equação de Poisson.

## 10.4 Método iterativo

Para obter um algoritmo iterativo utilizamos as duas primeiras equações dadas em (10.9) e a equação (10.10). Utilizamos o índice  $k$  para representar o contador de iterações. Defasamos, em  $k$ , os fluxos e os potenciais dados nas faces vizinhas da malha dual, a fim de obter o algoritmo iterativo. Desta forma, reescrevemos o sistema de equações com o índice  $k$ , dado por

$$c_j^{-1} w_j^{r+1,k+1} + \left( u_j^{r+1,k+1} - u_0^{r+1,k+1} \right) = 0 \quad (10.18a)$$

$$A_{\hat{F}} u_0^{r+1,k+1} + \sum_{l=1}^{m_i} w_l^{r+1,k+1} = \bar{f}^r \quad (10.18b)$$

$$u_j^{r+1,k+1} - \beta w_j^{r+1,k+1} = \tilde{u}_j^{r+1,k} + \beta \tilde{w}_j^{r+1,k}, \quad (10.18c)$$

Isolamos, primeiramente,  $u_j^{r+1,k+1}$  dado na equação (10.18c), e substituímos na equação (10.18a), obtendo

$$w_j^{r+1,k+1} = \xi_j u_0^{r+1,k+1} - \xi_j \left( \tilde{u}_j^{r+1,k} + \beta \tilde{w}_j^{r+1,k} \right), \quad (10.19)$$

onde  $\xi_j = c_j / (1 + c_j \beta)$ ,  $j = 1, \dots, m_i$ ,  $r \geq 0$  e  $k \geq 0$ .

Substituindo,  $w_j^{r+1,k+1}$  dado na equação (10.19), na equação (10.18b), e resolvendo para  $u_0^{r+1,k+1}$  obtemos

$$u_0^{r+1,k+1} = \frac{\bar{f}^r + \sum_{l=1}^{m_i} \xi_l \left( \tilde{u}_l^{r+1,k} + \beta \tilde{w}_l^{r+1,k} \right)}{A_{\hat{F}} + \sum_{l=1}^{m_i} \xi_l}. \quad (10.20)$$

### Algoritmo iterativo

Agora, de forma similar à obtenção do algoritmo iterativo desenvolvido no capítulo 5, defasamos os fluxos e os potenciais dados nas faces vizinhas da malha dual, a fim de obter o algoritmo iterativo. Ele baseia-se nas equações (10.18c), (10.19) e (10.20). Assim, para cada instante de tempo, aplicamos o algoritmo iterativo para obter a solução desejada.

Neste caso, teremos dois sobrescritos nas variáveis  $u$  e  $w$ , o primeiro referente ao instante de tempo,  $r$ , e o outro referente à iteração,  $k$ , um contador de iterações. Assim,  $u = u_i^{r,k}$ ,  $i = 0, \dots, m$  e  $w = w_i^{r,k}$ ,  $i = 1, \dots, m$ , em cada face da malha dual.

(I) Para  $r \geq 0$  faça:

**Passo 1:** [Inicialização] inicie as variáveis  $u_j^{r,0}$ ,  $u_i^{r,0}$ ,  $w_i^{r,0}$ , para  $i = 1, \dots, m$  e  $j = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ .

**Passo 2:** [Atualização dos potenciais] para  $j = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ :

(i) [Atualização dos potenciais dados nos vértices da malha icosaedral]: Baseado na equação (10.20), e utilizando os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas

da malha dual, temos

$$u_0^{r+1,k+1} \leftarrow \frac{\bar{f}_j^r + \sum_{l=1}^{m_i} \xi_l \left( \tilde{u}_l^{r+1,k} + \beta \tilde{w}_l^{r+1,k} \right)}{A_{\hat{F}} + \sum_{l=1}^{m_i} \xi_l}.$$

(ii) [Atualização dos fluxos dados nos bissetores das arestas da malha dual]: Utilizando a equação (10.19), os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas da malha dual, e o potencial dado nos vértices da malha icosaedral já atualizados, obtemos

$$w_i^{r+1,k+1} \leftarrow \xi_i \left( u_0^{r+1,k+1} - u_i^{r+1,k} - \beta w_i^{r+1,k} \right), \quad i = 1, \dots, m.$$

(iii) [Atualização dos potenciais dados nos bissetores das arestas da malha dual]: Utilizando a equação (10.18c), os valores defasados de  $u$  e  $w$  dados nas faces vizinhas da malha dual, e o fluxo dado nos bissetores da malha dual já atualizados, obtemos

$$u_i^{r+1,k+1} \leftarrow \beta w_i^{r+1,k+1} + \tilde{u}_i^{r+1,k} + \beta \tilde{w}_i^{r+1,k+1}, \quad i = 1, \dots, m.$$

**Passo 3:** [Teste de convergência] Se o critério de convergência for satisfeito, pare, faça  $r = r + 1$  e volte para **(I)**, caso contrário, faça  $k = k + 1$  e volte ao passo 2.

# Capítulo 11

## Análise da convergência do método iterativo para a equação do calor

Neste capítulo tratamos da demonstração analítica da convergência do método iterativo desenvolvido para a equação do calor. Inicialmente formulamos o problema de convergência e em seguida, demonstramos a convergência do método iterativo. Esta demonstração é semelhante à de convergência do método iterativo para a equação de Poisson, apresentando porém simplificações analíticas devido à natureza do problema.

### 11.1 Formulação do problema de convergência

Reescrevemos as equações dadas em (10.18), usando uma notação semelhante à usada para a descrição do método iterativo, definindo no entanto por ser parte de caráter global e parte de caráter local, como segue

$$c_{ij}^{-1} w_{ij}^{k+1} + (u_{ij}^{k+1} - u_i^{k+1}) = 0 \quad (11.1a)$$

$$A_{\hat{F}i} u_i^{k+1} + \sum_{l=1}^{m_i} w_{il}^{k+1} = \bar{f} \quad (11.1b)$$

$$u_{ij}^{k+1} - \beta w_{ij}^{k+1} = \tilde{u}_{ij}^k + \beta \tilde{w}_{ij}^k, \quad (11.1c)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ ,  $j = 1, \dots, m_i$ , (onde  $m_i$  pode assumir os valores de 5 ou 6), e  $k$  é o contador de iterações. O índice  $i$  é de caráter global, ao passo que o índice  $j$  refere-se

a uma numeração local. O procedimento iterativo começa com valores iniciais dados por  $u_i^0$ ,  $u_{ij}^0$  e  $w_{ij}^0$ , para todo  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ . Ressaltamos que estamos omitindo o sobrescrito  $r$ , que representa a variável no tempo, de forma a simplificar a notação, já que o mesmo não irá influenciar neste procedimento.

Na seção 10.3 mostramos a existência e a unicidade da solução do sistema considerado. A partir deste momento identificamos essa solução pelo sobrescrito (\*). Assim,

$$c_{ij}^{-1} w_{ij}^* + (u_{ij}^* - u_i^*) = 0 \quad (11.2a)$$

$$A_{\hat{F}i} u_i^* + \sum_{l=1}^{m_i} w_{il}^* = \bar{f} \quad (11.2b)$$

$$u_{ij}^* - \beta w_{ij}^* = \tilde{u}_{\bar{ij}}^* + \beta \tilde{w}_{\bar{ij}}^*, \quad (11.2c)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ ,  $j = 1, \dots, m_i$ .

Definimos os erros cometidos em cada passo de iteração  $k$  por

$$\psi_i^k = u_i^k - u_i^* \quad (11.3a)$$

$$\varphi_{ij}^k = w_{ij}^k - w_{ij}^* \quad (11.3b)$$

$$v_{ij}^k = u_{ij}^k - u_{ij}^* \quad (11.3c)$$

O método iterativo converge para a solução se  $\psi_i^k$ ,  $\varphi_{ij}^k$ , e  $v_{ij}^k$ , dados em (11.3), convergem para zero quando  $k \rightarrow +\infty$ .

## 11.2 Demonstração da convergência do método iterativo

Nesta seção, após a formulação do problema de convergência, estendemos a demonstração da convergência do método iterativo apresentada no capítulo 6, ao método iterativo apropriado para resolver um sistema da forma (10.13).

Primeiramente, subtraímos, equação a equação, o sistema (11.2) do sistema (11.1),

resultando nas *equações de discrepância*

$$c_{ij}^{-1} \varphi_{ij}^{k+1} + (v_{ij}^{k+1} - \psi_i^{k+1}) = 0 \quad (11.4a)$$

$$A_{\hat{F}^i} \psi_i^{k+1} + \sum_{l=1}^{m_i} \varphi_{il}^{k+1} = 0 \quad (11.4b)$$

$$v_{ij}^{k+1} - \beta \varphi_{ij}^{k+1} = \tilde{v}_{ij}^k + \beta \tilde{\varphi}_{ij}^k \quad (11.4c)$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$ ,  $j = 1, \dots, m_i$ .

Multiplicamos a equação (11.4a) por  $\varphi_{ij}^{k+1}$ , e obtemos

$$c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 + \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1} - \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0 . \quad (11.5a)$$

Somando (11.5a) em  $j = 1, \dots, m_i$ , temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 + \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1} - \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0 . \quad (11.5b)$$

Multiplicamos a equação (11.4b) por  $\psi_i^{k+1}$ , trocamos o índice de soma  $l$  por  $j$ , e obtemos

$$A_{\hat{F}^i} (\psi_i^{k+1})^2 + \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} \psi_i^{k+1} = 0 . \quad (11.5c)$$

Somando termo a termo as equações (11.5b) e (11.5c), e reordenando temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^{k+1})^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^{k+1})^2 = - \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^{k+1} v_{ij}^{k+1} . \quad (11.5d)$$

Por outro lado, temos que

$$\sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k \pm \beta \varphi_{ij}^k)^2 = \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 \pm 2\beta \sum_{j=1}^{m_i} \varphi_{ij}^k v_{ij}^k . \quad (11.5e)$$

Substituindo a equação (11.5d), com  $k$  no lugar de  $k + 1$ , na equação (11.5e), temos

que

$$\sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k \pm \beta \varphi_{ij}^k)^2 = \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 \mp 2\beta \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^k)^2 \right]. \quad (11.5f)$$

Como  $\beta$ ,  $c_{ij}^{-1}$  e  $A_{\hat{F}^i}$ , onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ , são todos números reais não-negativos, definimos uma seqüência de números reais não negativos denotada por  $(E^k)$ , onde

$$E^k = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left\{ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 + 2\beta \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^k)^2 \right] \right\}, \quad (11.5g)$$

que de acordo com a equação (11.5f), se iguala a

$$E^k = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k - \beta \varphi_{ij}^k)^2,$$

Das equações (11.4c) e (11.5e), temos

$$\begin{aligned} E^{k+1} &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^{k+1} - \beta \varphi_{ij}^{k+1})^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (\tilde{v}_{ij}^k + \beta \tilde{\varphi}_{ij}^k)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k + \beta \varphi_{ij}^k)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left\{ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 - 2\beta \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^k)^2 \right] \right\}. \end{aligned}$$

A terceira igualdade, na equação anterior, é válida pois a soma percorre todas as arestas das células computacionais duas vezes. Concluimos que

$$E^{k+1} = \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left\{ \beta^2 \sum_{j=1}^{m_i} (\varphi_{ij}^k)^2 + \sum_{j=1}^{m_i} (v_{ij}^k)^2 - 2\beta \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^k)^2 \right] \right\}.$$

Seguindo a expansão da equação anterior, e de acordo com a equação (11.5g), obtemos

$$E^{k+1} = E^k - 4\beta \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} (\psi_i^k)^2 \right]$$

para todo  $k \geq 0$ .

Como  $\beta > 0$ , o segundo termo da equação anterior é não positivo. Isto implica em dizer que  $(E^k)$  é uma seqüência monótona decrescente de números reais não-negativos, limitada inferiormente por zero. Então existe um número real não-negativo  $E^\infty$  tal que  $E^k \rightarrow E^\infty \geq 0$  quando  $k \rightarrow +\infty$ . Desta forma,

$$E^\infty = E^\infty - 4\beta \sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \left[ \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow \infty} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} \lim_{k \rightarrow \infty} (\psi_i^k)^2 \right],$$

isto é,

$$\sum_{i=1}^{\mathcal{V}_n} \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 + A_{\hat{F}^i} \lim_{k \rightarrow \infty} (\psi_i^k)^2 = 0 .$$

O somatório anterior, de termos não negativos, sendo nulo, força que cada termo se anule,

$$c_{ij}^{-1} \lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 = 0 \text{ e } A_{\hat{F}^i} \lim_{k \rightarrow \infty} (\psi_i^k)^2 = 0 ,$$

ou ainda,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} (\varphi_{ij}^k)^2 = 0 \text{ e } \lim_{k \rightarrow \infty} (\psi_i^k)^2 = 0 ,$$

onde  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Pela definição, equações (11.3a) e (11.3b), o resultado anterior nos diz que  $u_i^k \rightarrow u_i^*$  e  $w_{ij}^k \rightarrow w_{ij}^*$  quando  $k \rightarrow +\infty$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ .

Como  $\varphi_{ij}^k \rightarrow 0$  e  $\psi_i^k \rightarrow 0$  quando  $k \rightarrow +\infty$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m_i$ , então da

equação (11.4a), passando ao limite, obtemos

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} v_{ij}^{k+1} = 0, \quad (11.6)$$

concluindo esta demonstração já que  $u_{ij}^k \rightarrow u_{ij}^*$  quando  $k \rightarrow +\infty$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{V}_n$  e  $j = 1, \dots, m$ .

## Capítulo 12

# Solução numérica da equação de condução do calor

O objetivo deste capítulo é apresentar a solução numérica da equação de condução do calor sobre a esfera. O algoritmo numérico foi desenvolvido no capítulo 10. Para gerar as soluções numéricas foram utilizados os recursos computacionais descritos no capítulo 7.

Foram simulados alguns casos, especificando condições iniciais ou termos fontes não triviais para a equação de condução do calor. Esses casos serão mostrados a seguir. As medidas aqui são adimensionais.

Testamos uma função como condição inicial da equação do calor. Ela é uma função que representa que a temperatura na esfera é não nula apenas em um dos hemisférios; veja figura 12.1.

Fazemos uma variação no termo fonte. O primeiro termo fonte é nulo, e assim a equação do calor deverá distribuir o calor inicial disponível inicialmente por sobre toda a esfera, atingindo uma situação estacionária, isto é, uma temperatura constante. O segundo termo fonte é uma função geradora de calor, isto é, ele gera calor constantemente na mesma região em que a condição inicial era não nula.

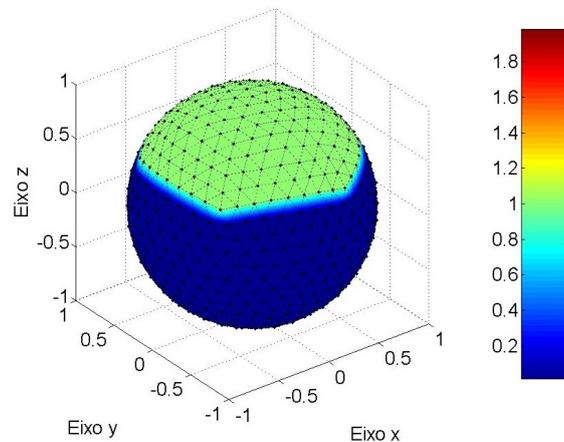


Figura 12.1: Condição inicial da equação do calor.

## 12.1 Caso 1

Nesta seção obtemos a solução numérica da equação do calor com a condição inicial apresentada na figura 12.1, e o termo fonte nulo, isto é, não haverá nenhuma influência externa sobre as temperaturas.

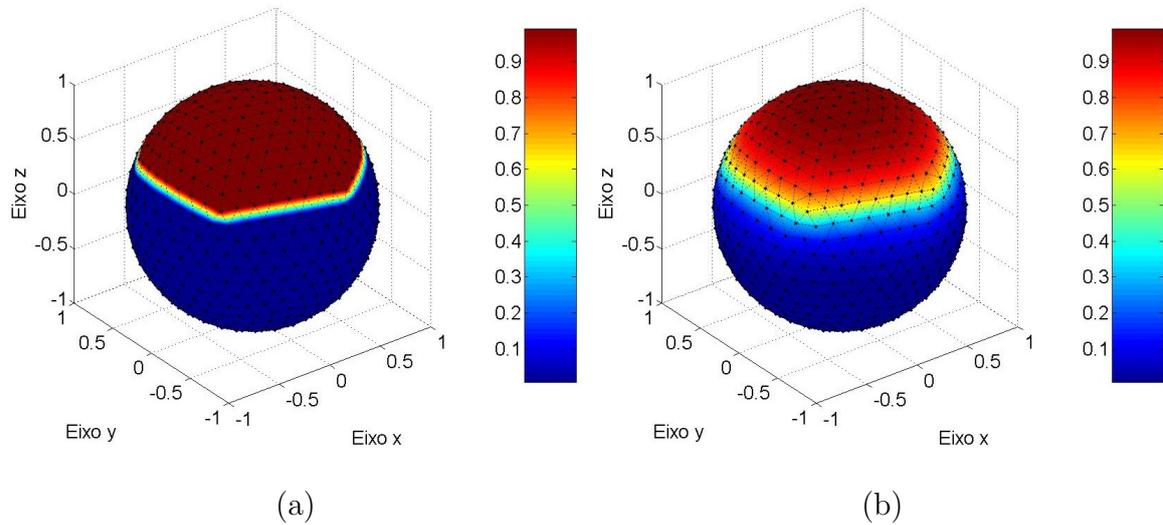
### Solução numérica

Apresentamos nas figuras 12.2, 12.3 e 12.4, a solução da equação do calor, dada a condição inicial apresentada na figura 12.1, e com o termo fonte nulo. Esta solução numérica foi obtida utilizando uma malha de nível 3.

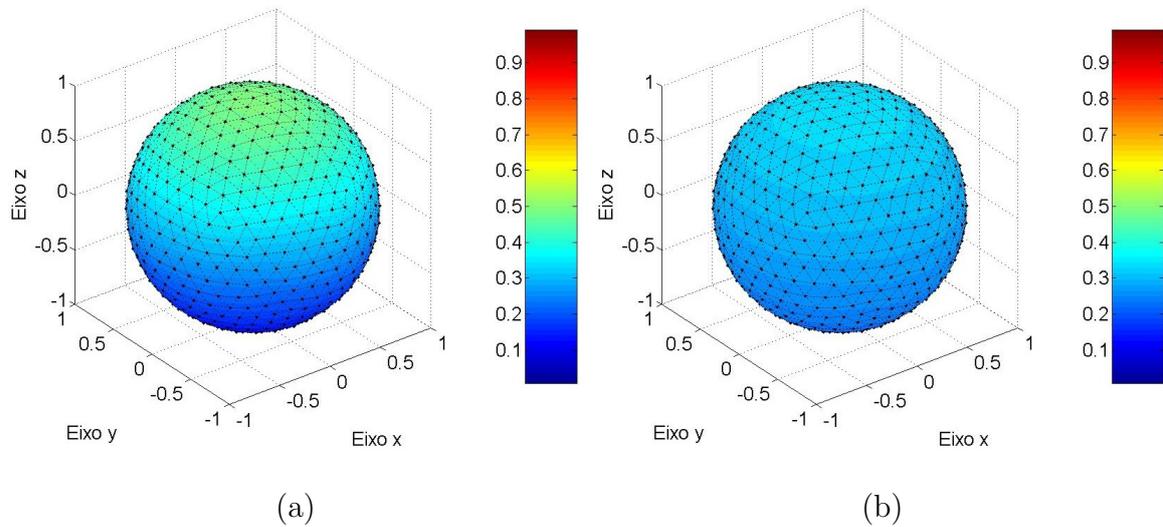
Como podemos observar nas figuras 12.2, 12.3 e 12.4, o calor inicial é distribuído sobre toda a esfera, tendendo a temperatura a um valor constante.

### Conservação da média da temperatura

Uma forma de observar se realmente o método numérico está conservando a média da temperatura sobre a esfera, conforme deve acontecer neste primeiro caso, é calcular a



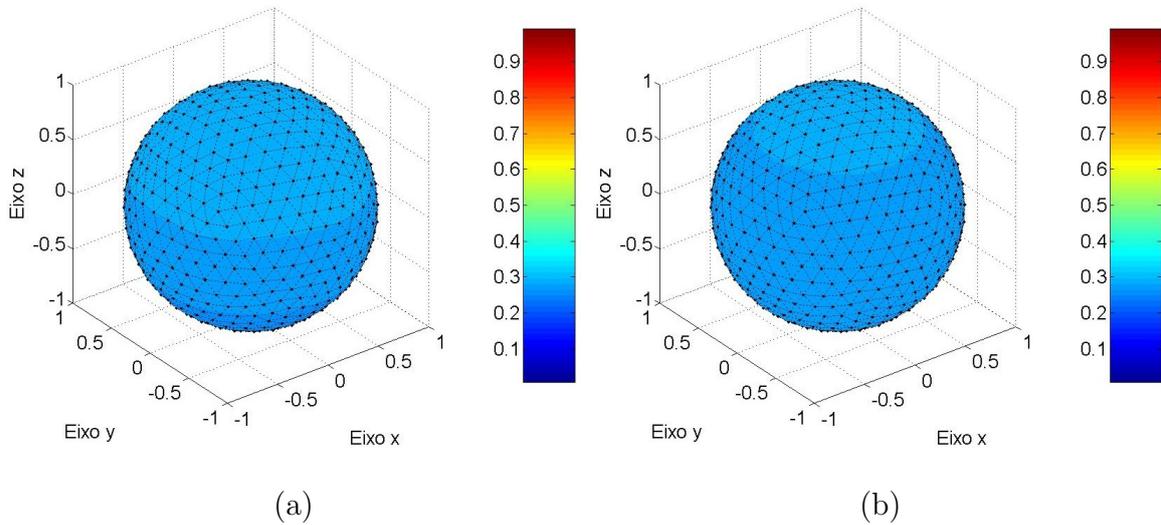
**Figura 12.2:** Solução numérica da equação do calor: (a) Condição inicial; (b) primeiro instante de tempo após a condição inicial.



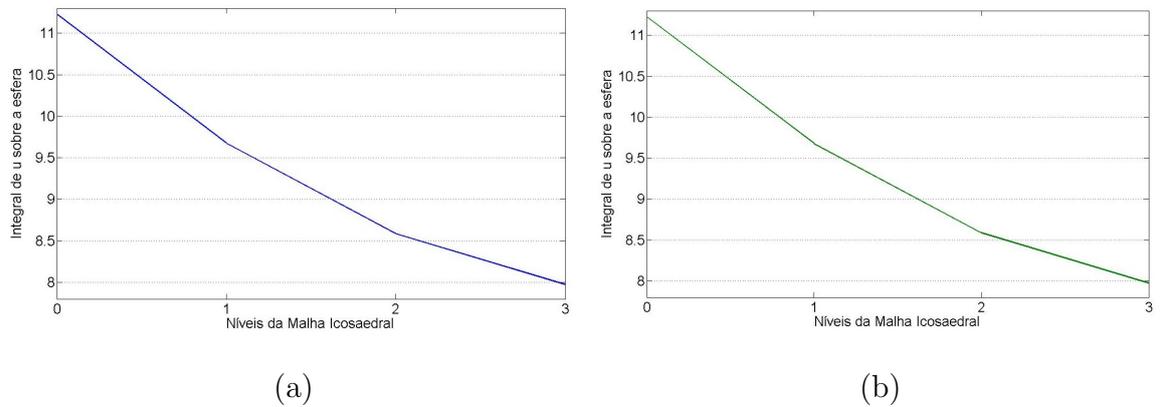
**Figura 12.3:** Solução numérica da equação do calor: (a) para o instante de tempo 1; (b) para o instante de tempo 2.

integral da solução sobre a superfície esférica, isto é,

$$\int_{S^2} u \, dS(x).$$



**Figura 12.4:** Solução numérica da equação do calor: (a) para o instante de tempo 3; (b) para o instante de tempo 4.



**Figura 12.5:**  $\int_{S^2} u dS(x)$ : (a) no tempo inicial  $t = 0$ ; (b) no tempo final  $t = 4$ .

Podemos observar tanto pelos gráficos na figura 12.5, tanto pela tabela 12.1, que o método numérico conserva a média da temperatura sobre a esfera.

Na tabela 12.2, comparamos a distribuição de temperatura no tempo 4, no nível 3 da malha, para vários valores de  $\Delta t$ . Observamos, também, que a conservação da média na temperatura é mantida pelo método numérico.

**Tabela 12.1:**  $\int_{S^2} u dS(x)$ .

$n$	$t = 0$	$t = 4$
0	11,2289	11,2260
1	9,6784	9,6788
2	8,5872	8,5882
3	7,9733	7,9735

**Tabela 12.2:**  $\int_{S^2} u dS(x)$  da solução obtida com o nível 3 da malha.

$\Delta t$	$t = 4$
1	7,9733
0,1	7,9735
0,01	7,9766

## Solução numérica em diferentes níveis da malha

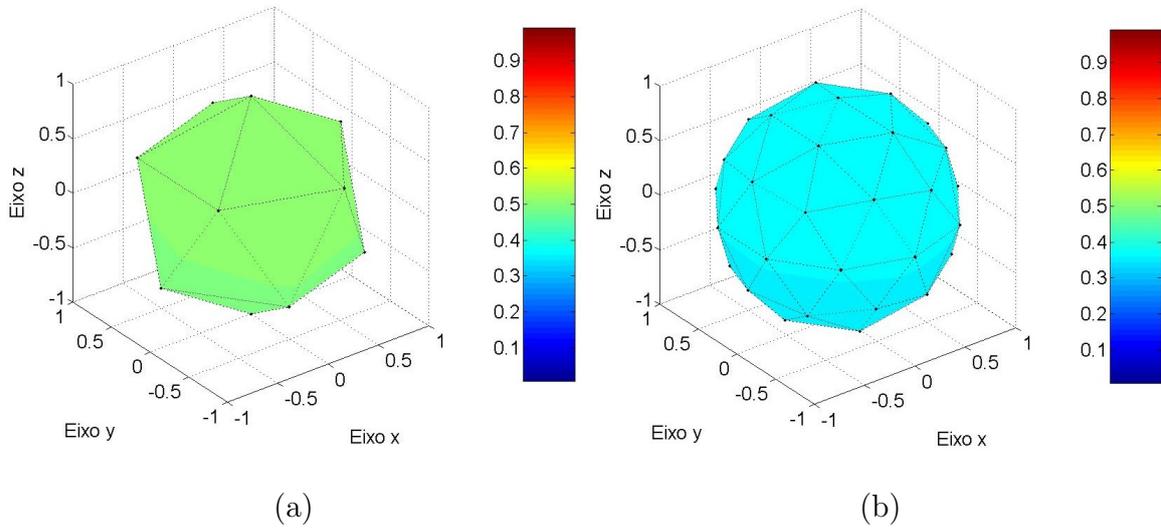
Com o objetivo de observar a influência da malha espacial na solução numérica da equação do calor, mostramos nas figuras 12.6 e 12.7 a solução numérica em diferentes níveis da malha.

Na figura 12.8 observamos que, quanto maior for o nível da malha espacial, menor é norma da diferença entre a solução numérica em dois níveis consecutivos da malha.

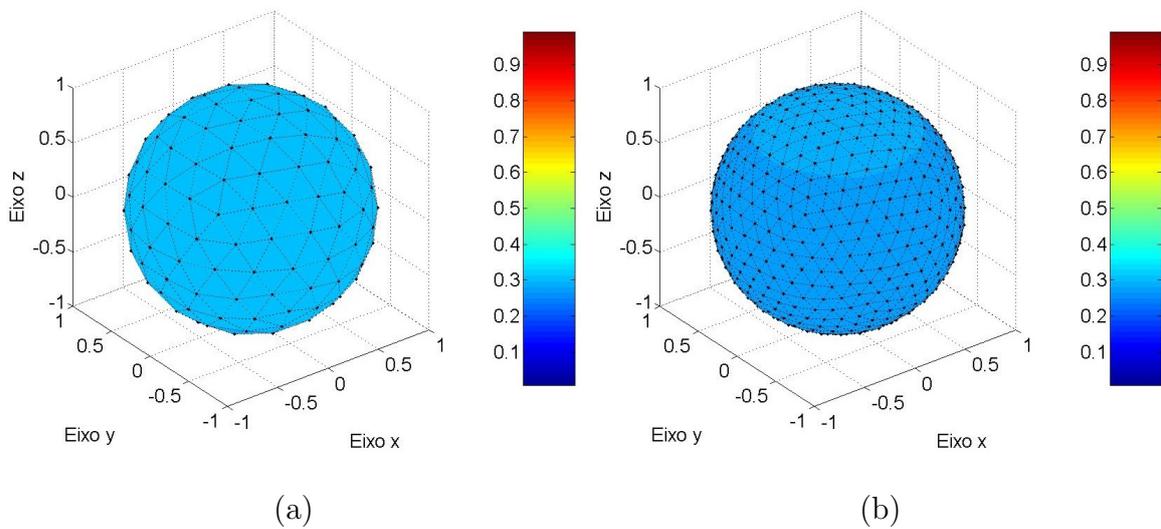
## Solução numérica para diferentes valores para $\Delta t$

Para verificar a influência do tamanho do passo dado no tempo, fizemos uma variação em  $\Delta t$  para observar o comportamento da solução numérica. Observamos na figura 12.9 a solução numérica no tempo  $t = 4$  quando foram usados os valores de  $\Delta t = 1$ ,  $\Delta t = 0,1$  e  $\Delta t = 0,01$ .

Calculamos a norma 1 entre as soluções numéricas obtidas para valores de  $\Delta t$

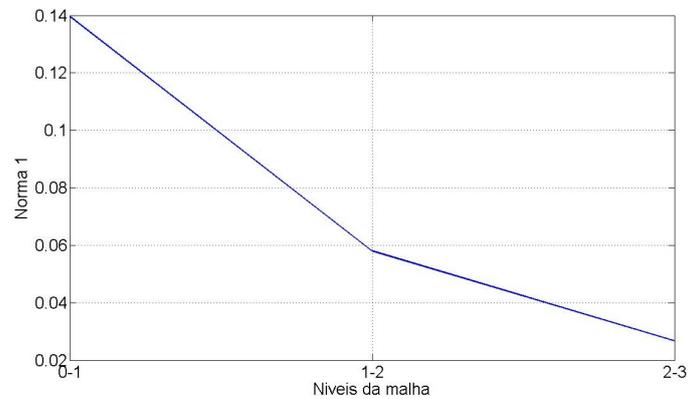


**Figura 12.6:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 0; (b) malha de nível 1.

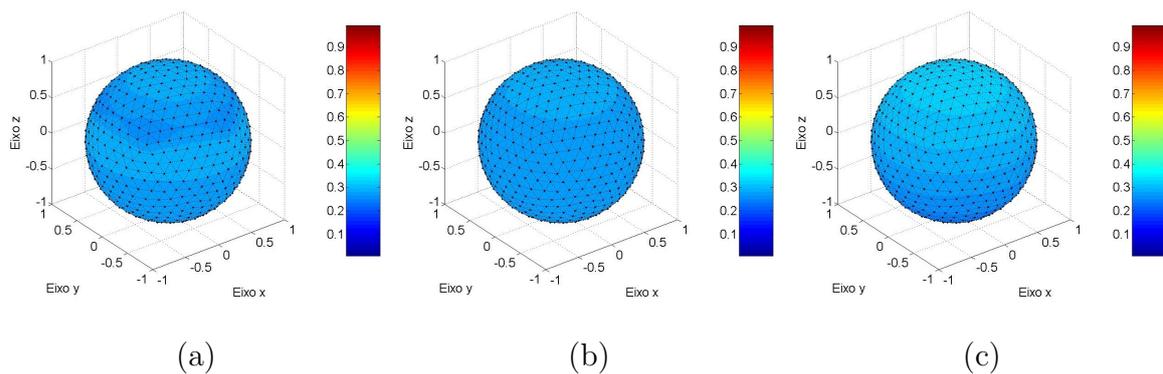


**Figura 12.7:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 2; (b) malha de nível 3.

diferentes. A norma 1 das soluções obtidas entre os dois primeiros valores para  $\Delta t$  é igual a 0,0203, e a norma 1 das soluções obtidas com os dois últimos valores para  $\Delta t$  é igual 0,0068. Este resultado é o esperado, isto é, quanto menor o valor de  $\Delta t$  menos influência ele terá sobre a solução numérica.



**Figura 12.8:** Norma da diferença das soluções numéricas entre dois níveis consecutivos da malha.



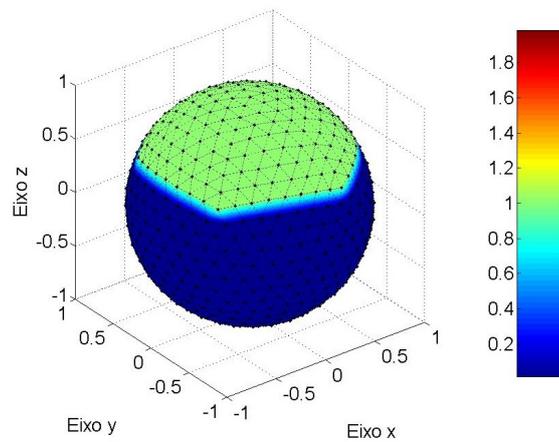
**Figura 12.9:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a)  $\Delta t = 1$ ; (b)  $\Delta t = 0,1$ ; (c)  $\Delta t = 0,01$ .

## 12.2 Caso 2

Neste segundo caso, o termo fonte é uma função geradora de calor. Esta função gera calor constantemente na mesma região onde a condição inicial é não-nula e positiva. Espera-se que a esfera seja aquecida continuamente, isto é, que a temperatura aumente cada vez mais, conforme o tempo vai passando.

## Termo fonte

Para a simulação deste caso, consideramos o tempo  $t = 4$ , com  $\Delta t = 0,1$ . Os resultados mostrados aqui foram gerados com a malha de nível 3. A figura 12.10 apresenta o termo fonte adotado para essa situação. Na mesma região em que a condição inicial é não nula, o termo fonte assume um valor constante igual a 1.



**Figura 12.10:** Termo fonte utilizado para aquecer a esfera constantemente.

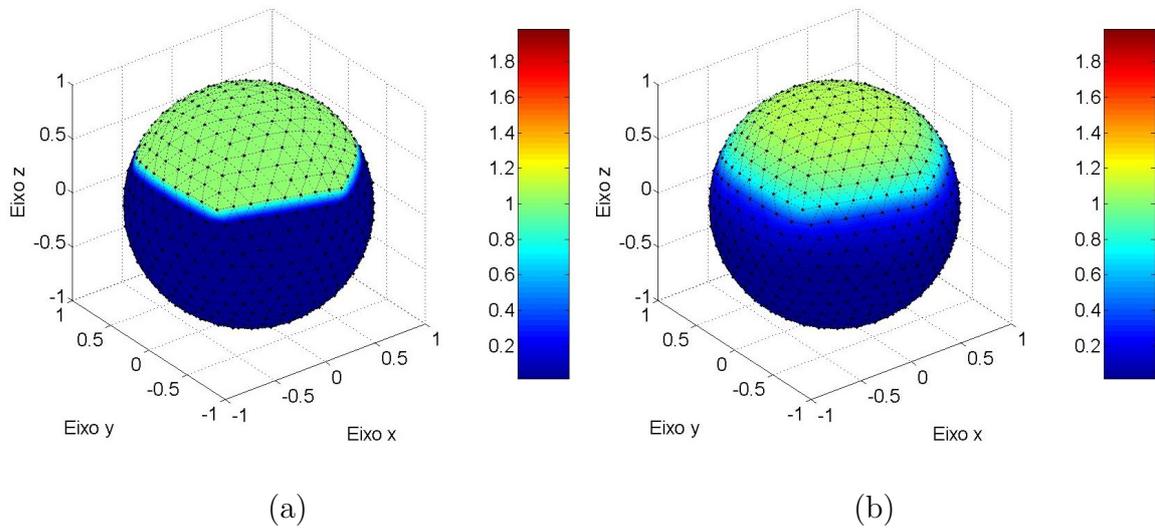
## Solução numérica

A solução da equação do calor, dado a condição inicial na figura 12.1, e o termo fonte apresentado na figura 12.10, é apresentada, para o nível de refinamento da malha igual a 3, nas figuras a seguir.

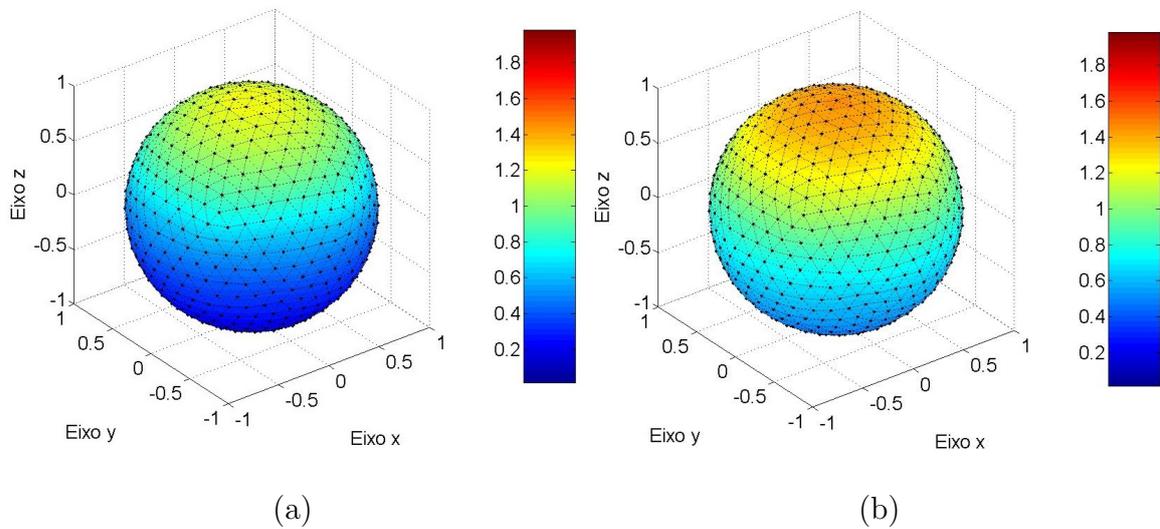
Como podemos observar nas figuras 12.11, 12.12 e 12.13, a esfera é aquecida continuamente, como esperado, fazendo com que a temperatura se eleve ao longo do tempo.

## Dependência da solução numérica no nível da malha

Mostramos nas figuras 12.14 e 12.15 a solução numérica em diferentes níveis da malha.

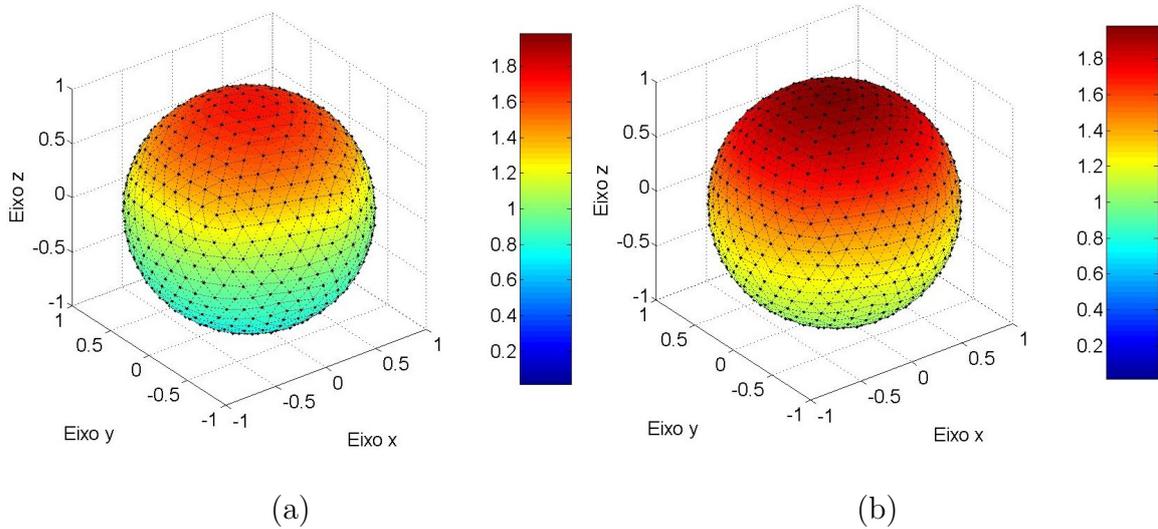


**Figura 12.11:** Solução numérica da equação do calor: (a) Condição inicial; (b) primeiro instante de tempo,  $t = 0,1$ , após a condição inicial.

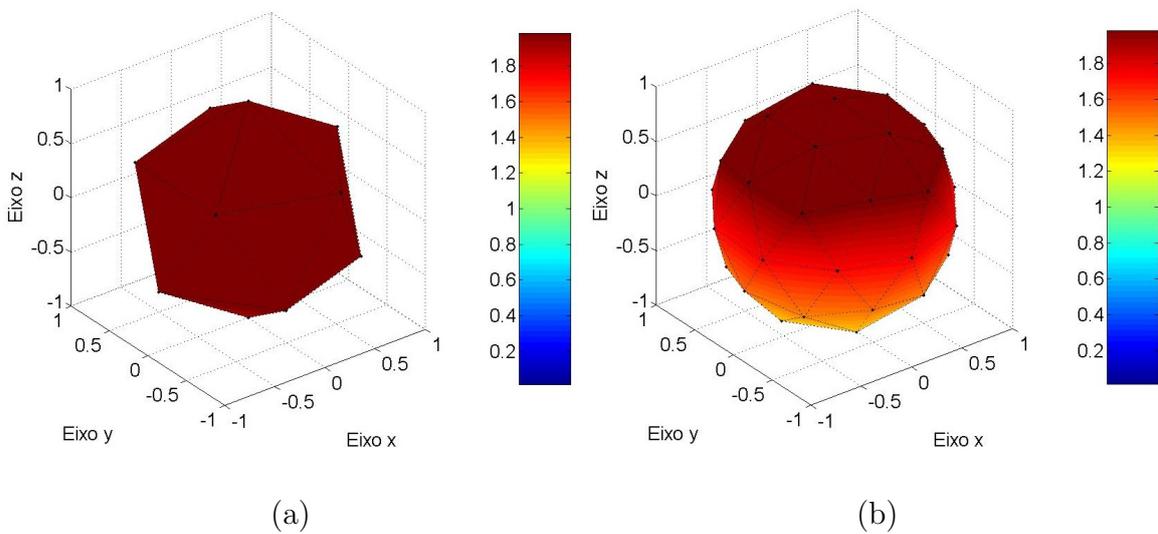


**Figura 12.12:** Solução numérica da equação do calor: (a) instante de tempo 1; (b) instante de tempo 2.

Na figura 12.16 observamos que quanto maior o nível da malha espacial, menor é norma entre a solução numérica em dois níveis consecutivos da malha.



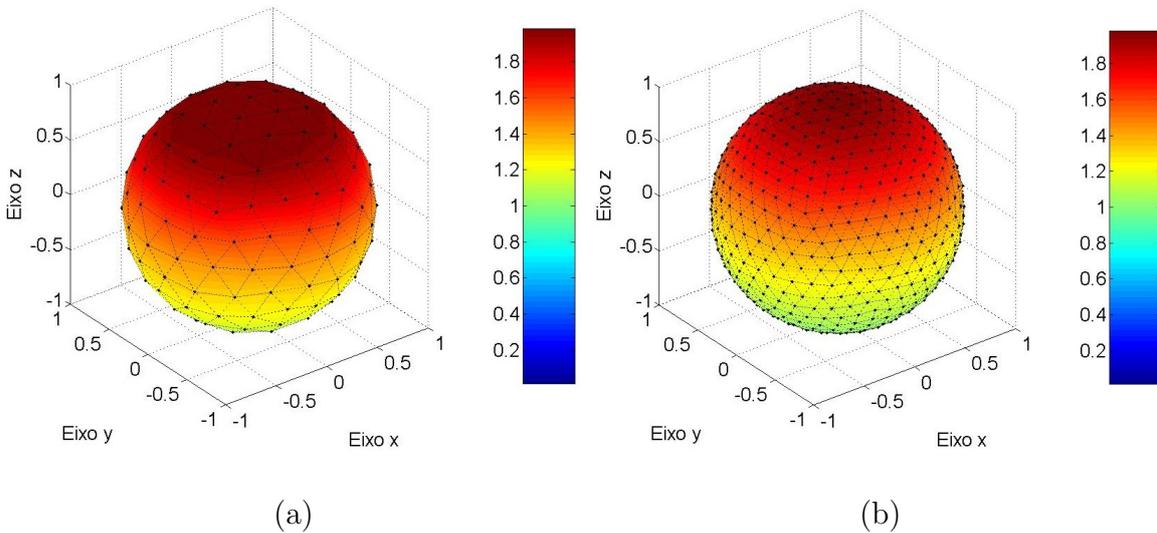
**Figura 12.13:** Solução numérica da equação do calor: (a) instante de tempo 3; (b) instante de tempo 4.



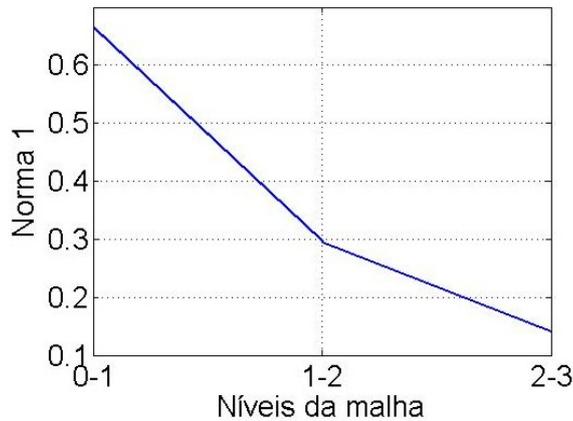
**Figura 12.14:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 0; (b) malha de nível 1.

### Solução numérica para diferentes valores para $\Delta t$

Fizemos uma variação no passo do tempo para observar o comportamento da solução numérica. Mostramos na figura 12.17 a solução numérica para os valores de  $\Delta t = 1$ ,



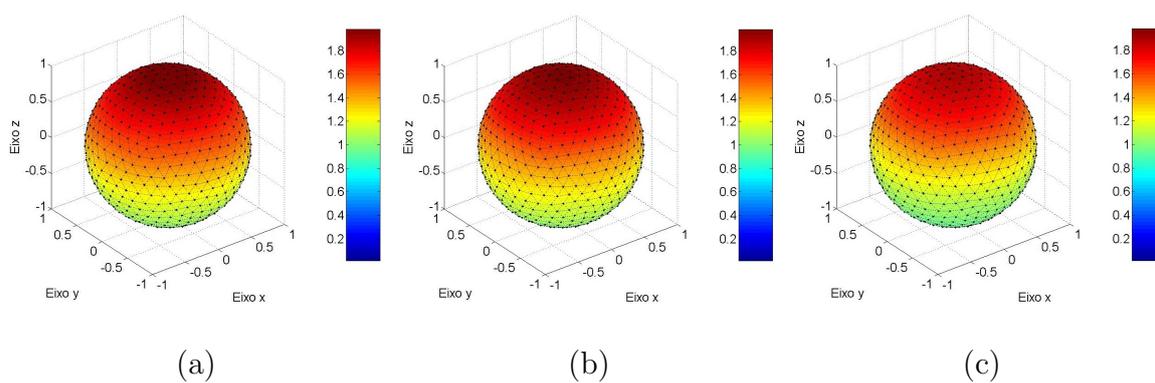
**Figura 12.15:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a) malha de nível 2; (b) malha de nível 3.



**Figura 12.16:** Norma 1 da diferença entre as soluções numéricas de dois níveis consecutivos da malha.

$\Delta t = 0,1$  e  $\Delta t = 0,01$ .

A norma 1 calculada da diferença entre as soluções numéricas, no tempo  $t = 4$ , quando o passo de tempo é  $\Delta t = 1$  e  $\Delta t = 0,1$  é igual a 0,094414, e quando  $\Delta t = 0,1$  e  $\Delta t = 0,01$  a norma da diferença é igual 0,0099632, o que era de esperar, isto é, determinar um valor para  $\Delta t$  que não irá influenciar na solução numérica.



**Figura 12.17:** Solução numérica da equação do calor para o instante de tempo 4: (a)  $\Delta t = 1$ ; (b)  $\Delta t = 0,1$ ; (c)  $\Delta t = 0,01$ .

## Capítulo 13

# Problema inverso para a equação de condução de calor

Neste capítulo queremos estimar uma fonte de calor estacionária no problema de condução de calor transiente na esfera, conhecendo a condição inicial e medidas experimentais de temperatura em pontos pré-fixados.

Os procedimentos desenvolvidos neste capítulo são similares aos desenvolvidos no capítulo 8. Fazemos um pequeno ajuste nas regiões onde está definido o problema, já que se trata de um modelo transiente. A região espacial é a esfera de raio 1,  $S^2$ . As medições da temperatura no tempo são feitas em pontos específicos no intervalo de tempo  $[0, t_f]$ , onde 0 é o tempo inicial e  $t_f$  é o tempo final.

### 13.1 Problema de condução de calor

Considere a equação de condução de calor (2.2), que é reapresentada a seguir,

$$\begin{cases} u_t(x, t) = \Delta_S u(x, t) + f(x) & , x \in S^2, t > 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) & , x \in S^2. \end{cases} \quad (13.1)$$

Neste contexto, o problema inverso é determinar uma função (termo fonte)  $f = f(x)$ ,  $x \in S^2$ , a partir de medições experimentais da temperatura,  $u_m(t)$ , nas posições

$x_m \in S^2$  onde  $m = 1, \dots, M$ , e  $t \in [0, t_f]$ .

## 13.2 Formulação matemática

Queremos determinar uma função  $f$ , conhecendo o modelo, os dados de entrada do problema e as medidas experimentais. Este problema inverso é resolvido minimizando-se o funcional quadrático de resíduos

$$J[f] = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\}^2, \quad (13.2)$$

onde  $f$  é a função a ser estimada,  $f : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u = u_m(t)$  é a grandeza medida, e  $u[f]$  é a grandeza calculada devido à fonte  $f$ ,  $u[f] : S^2 \times [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}$ .

Pela própria formulação, a busca de uma função  $f$  que minimize a função escalar  $J$ , constitui-se em um problema de otimização definido em um espaço de dimensão infinita.

O procedimento de minimização é de mesma natureza que o adotado para resolver o problema estacionário de estimação de fonte na esfera, conforme explicitado na seção 8.2, pelo que não o repetiremos aqui. As alterações se referem aos problemas de sensibilidade e adjunto, bem como o tamanho do passo de busca,  $\beta_n$ , a direção de busca,  $P^n$ , o coeficiente conjugado,  $\gamma^n$ , e o gradiente do funcional,  $J'_{f^n}$ . Aqueles problemas e as expressões para essas quantidades são obtidos nas próximas seções.

## 13.3 Problema de sensibilidade

Para obtermos o problema de sensibilidade, introduzimos uma perturbação,  $\Delta f$ , ainda dependente apenas de  $x$ ,  $\Delta f = \Delta f(x)$ , no termo fonte,  $f \rightarrow f + \Delta f$ , obtendo uma variação na solução  $u$ ,  $u \rightarrow u + \Delta u$ . Recordamos que o problema de sensibilidade é, por definição, o problema que  $\Delta u$  satisfaz. Para efeito de simplicidade, omitiremos as variáveis independentes  $(x, t)$  nesta seção. Desta forma, a equação (13.1) pode ser

reescrita para  $u + \Delta u$  na forma

$$\begin{cases} [u + \Delta u]_t = \Delta_S [u + \Delta u] + [f + \Delta f] , \\ u(x, 0) + \Delta u(x, 0) = u_0(x) , \end{cases} \quad (13.3)$$

onde  $x \in S^2$  e  $t \in [0, t_f]$ .

Subtraindo a equação (13.1) da equação (13.3), obtemos o problema de sensibilidade que  $\Delta u = \Delta u(x, t)$  satisfaz

$$\begin{cases} [\Delta u]_t = \Delta_S [\Delta u] + \Delta f , & x \in S^2 \times [0, t_f] \\ \Delta u(x, 0) = 0, & x \in S^2 \end{cases} . \quad (13.4)$$

Devido à homogeneidade na condição inicial, a solução  $\Delta u$  depende linearmente de  $\Delta f$ , temos um problema linear em  $\Delta f$ .

## 13.4 Problema adjunto e determinação do gradiente

A minimização do funcional dos resíduos,  $J$ , é restringida pela condição de  $u = u[f]$  ser solução da equação (13.2). Por este motivo, introduzimos a função Lagrangiana:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f] = & \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\}^2 dt \\ & + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left[ \Delta_S u(x, t) + f(x) - \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \right] dS(x) dt . \end{aligned} \quad (13.5)$$

Aqui  $\lambda(x, t)$  é uma função auxiliar, chamada de função adjunta e  $x_m$ ,  $m = 1, \dots, M$ , representa a localização dos sensores de temperatura.

Para calcular a derivada de  $\mathcal{L}$  em  $f$ ,  $d\mathcal{L}_f$ , deve-se reter de  $\mathcal{L}[f + \Delta f] - \mathcal{L}[f]$  os

termos de ordem 1 em  $\Delta f$ . Para tanto, inicialmente calculamos  $\mathcal{L}$  em  $f + \Delta f$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f + \Delta f] &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) + \Delta u[\Delta f](x_m, t) - u_m(t) \right\}^2 dt \\ &\quad + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left\{ \Delta_S [u(x, t) + \Delta u(x, t)] + f(x) + \Delta f(x) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial t} [u(x, t) + \Delta u(x, t)] \right\} dS(x) dt \end{aligned} \quad (13.6)$$

Reorganizando as integrais de forma a forçar o aparecimento de  $\mathcal{L}[f]$ , obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f + \Delta f] &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\}^2 dt \\ &\quad + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left[ \Delta_S u(x, t) + f(x) - \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right] dS(x) dt \\ &\quad + \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\} \Delta u[\Delta f](x_m, t) dt + \\ &\quad + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left\{ \Delta_S (\Delta u)(x, t) + \Delta f(x) - \frac{\partial \Delta u(x, t)}{\partial t} \right\} dS(x) dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ \Delta u[\Delta f](x_m, t) \right\}^2 dt. \end{aligned} \quad (13.7)$$

Como a soma dos dois primeiros termos do lado direito da equação (13.7) resultam em  $\mathcal{L}[f]$ , dado na equação (13.5), obtém-se

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f + \Delta f] - \mathcal{L}[f] &= \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\} \Delta u[\Delta f](x_m, t) dt \\ &\quad + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left\{ \Delta_S (\Delta u)(x, t) + \Delta f(x) - \frac{\partial \Delta u(x, t)}{\partial t} \right\} dS(x) dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ \Delta u[\Delta f](x_m, t) \right\}^2 dt. \end{aligned} \quad (13.8)$$

A derivada de  $\mathcal{L}$  em  $f$  aplicada em  $\Delta f$  é obtida da equação (13.8) desconsiderando-se

os termos de segunda ordem em  $\Delta f$ . Portanto,

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{L}_f[\Delta f] &= \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\} \Delta u[\Delta f](x_m, t) dt \\
 &+ \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \left\{ \Delta_S(\Delta u)(x, t) - \frac{\partial \Delta u(x, t)}{\partial t} \right\} dS(x) dt \\
 &+ \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \Delta f(x, t) dS(x) dt. \tag{13.9}
 \end{aligned}$$

Reescrevemos a equação (13.9) de forma equivalente e adequada ao nosso propósito de determinar o gradiente de  $J$ , em particular retirando as derivadas da perturbação.

Inicialmente, observamos que

$$\begin{aligned}
 &\sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) \right\} \Delta u[\Delta f](x_m, t) \\
 &= \int_0^{t_f} \int_{S^2} \left\{ \sum_{m=1}^M [u[f](x_m, t) - u_m(t)] \delta(x - x_m) \right\} \Delta u[\Delta f](x, t) dS(x) dt. \tag{13.10}
 \end{aligned}$$

Em seguida, temos que

$$\begin{aligned}
 &\int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \Delta_S(\Delta u)(x, t) dS(x) dt \\
 &= \int_0^{t_f} \int_{S^2} (\Delta_S \lambda)(x, t) \Delta u(x, t) dS(x) dt. \tag{13.11}
 \end{aligned}$$

Agora, pela regra de Leibnitz,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \lambda \Delta u \right] = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \Delta u + \lambda \frac{\partial}{\partial t} \Delta u, \tag{13.12}$$

integrando em  $t$ , no intervalo  $[0, t_f]$ , integrando em  $x$  sobre  $S^2$ , e trocando-se a ordem

de integração obtém-se

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{t_f} \int_{S^2} -\lambda \frac{\partial \Delta u}{\partial t} dS dt \\
 = & - \int_{S^2} \left[ \lambda(x, t_f) \Delta u(x, t_f) - \lambda(x, 0) \Delta u(x, 0) \right] dS \\
 & + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \frac{\partial \lambda}{\partial t} \Delta u dS dt .
 \end{aligned} \tag{13.13}$$

Finalmente, usando as equações (13.10), (13.11) e (13.13), a equação (13.9) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{L}_f[\Delta f] = & \int_0^{t_f} \int_{S^2} \left\{ \sum_{m=1}^M [u[f](x_m, t) - u_m(t)] \delta_{x_m}(x) \right. \\
 & \left. + (\Delta_s \lambda)(x, t) + \frac{\partial \lambda}{\partial t}(x, t) \right\} \Delta u[\Delta f](x, t) dS(x) dt \\
 & - \int_{S^2} \left[ \lambda(x, t_f) \Delta u(x, t_f) - \lambda(x, 0) \Delta u(x, 0) \right] dS \\
 & + \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \Delta f(x, t) dS(x) dt.
 \end{aligned} \tag{13.14}$$

Pela equação de sensibilidade (13.4),  $\Delta u(x, 0)$  se anula. Escolhemos então, semelhante ao que foi feito no capítulo 8,  $\lambda$  de forma a que  $d\mathcal{L}_f[\Delta f]$  seja igual ao último termo do lado direito da equação (13.14), para todo  $\Delta f$  ou para todo  $\Delta u$ . Isto consegue-se se  $\lambda$  satisfizer o seguinte problema de valor final

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + (\Delta_s \lambda)(x, t) = & - \sum_{m=1}^M [u[f](x_m, t) - u_m(t)] \delta_{x_m}(x) , \\
 \lambda(x, t_f) = & 0 .
 \end{aligned} \tag{13.15}$$

onde  $x \in S^2$  e  $0 < t < t_f$ .

Note que se fizermos a mudança de variável,  $t^* = t_f - t$ ,  $0 < t^* < t_f$ , a condição sobre  $\lambda$  é imposta em  $t^* = 0$  e passamos a ter um problema de valor inicial, uma equação de condução de calor. Assim, após obter um  $\lambda$  que satisfaça esta última

equação, temos que

$$d\mathcal{L}_f[\Delta f] = \int_0^{t_f} \int_{S^2} \lambda(x, t) \Delta f dS(x) dt = \langle \lambda, \Delta f \rangle \quad (13.16)$$

Mas, o gradiente,  $\mathcal{L}'_f$ , por definição, é a função que representa a derivada com relação ao produto interno, isto é,

$$d\mathcal{L}_f[\Delta f] = \langle \mathcal{L}'_f, \Delta f \rangle \quad (13.17)$$

donde

$$\mathcal{L}'_f = \lambda. \quad (13.18)$$

Como o termo que multiplica  $\lambda$  em  $\mathcal{L}$  é nulo, temos que  $J[f] = \mathcal{L}[f, \lambda]$ . Logo, as derivadas são iguais,  $dJ_f = d\mathcal{L}_f$ , e os gradientes também,  $J'_f = \mathcal{L}'_f$ . Daí, concluímos que  $J'_f = \lambda(x)$ , é a solução do problema adjunto, equação (13.15).

## 13.5 Tamanho do passo de busca

O tamanho do passo de busca do algoritmo iterativo é o negativo do ponto crítico de

$$J[f + \gamma P] = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) + \gamma \Delta u[P](x_m, t) \right\}^2 dt ,$$

em relação a  $\gamma$ . Calculamos a derivada de  $J[f + \gamma P]$  em relação a  $\gamma$ , dada por

$$\frac{d}{d\gamma} J[f + \gamma P] = \sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f](x_m, t) - u_m(t) + \gamma \Delta u[P](x_m, t) \right\} \Delta u[P](x_m, t) dt .$$

Substituindo na equação anterior  $\gamma$  por  $-\beta^n$ ,  $f$  por  $f^n$  e  $P$  por  $P^n$ , e igualando-a

zero, temos que

$$\sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f^n](x_m, t) - u_m(t) - \beta^n \Delta u[P^n](x_m, t) \right\} \Delta u[P^n](x_m, t) dt = 0 .$$

Resolvendo para  $\beta^n$  temos que,

$$\beta^n = \frac{\sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ u[f^n](x_m, t) - u_m(t) \right\} \Delta u[P^n](x_m, t) dt}{\sum_{m=1}^M \int_0^{t_f} \left\{ \Delta u[P^n](x_m, t) \right\}^2 dt} .$$

## 13.6 Algoritmo iterativo

A seguir apresentamos o algoritmo iterativo para obter a solução desejada.

**PASSO 1:** Faça  $n = 0$  e inicialize  $f^0$  com uma estimativa inicial.

**PASSO 2:** Resolva o problema direto para  $u[f^n]$ , devido à estimativa  $f^n$ .

**PASSO 3:** Conhecendo  $u[f^n]$ , e as medidas experimentais  $u_m$ ,  $m = 1, \dots, M$ , determine  $J_f^n$  resolvendo o problema adjunto.

**PASSO 4:** Quando  $n = 0$ , faça  $\gamma_0 = 0$ , caso contrário, a partir de  $J'_{f^n}$  e  $J'_{f^{n-1}}$  calcule o coeficiente conjugado,  $\gamma^n$ .

**PASSO 5:** Calcule o passo de busca,  $P^n$ .

**PASSO 6:** Faça  $\Delta f = P^n$  e resolva o problema de sensibilidade obtendo  $\Delta[P^n]$ .

**PASSO 7:** Calcule o tamanho do passo de busca,  $\beta^n$ .

**PASSO 8:** Calcule a nova estimativa  $f^{n+1}$ .

**PASSO 9:** Pare se o critério de parada for satisfeito. Caso contrário, faça  $n = n + 1$  e volte ao passo 2.

# Capítulo 14

## Conclusão

Neste trabalho fizemos uma parametrização de superfície, capítulo 2, com o objeto de trabalhar com a equação do calor, tanto na sua forma estacionária, como na forma transiente, sobre a esfera.

No capítulo 3 implementamos uma malha computacional, icosaedral e sua respectiva dual, sobre esfera. Assim, fizemos a discretização das equações sobre a mesma, obtendo as equações discretizadas, onde, em seguida, propomos um método iterativo para resolvê-las.

Demonstramos que a solução do método iterativo converge para a solução das equações discretizadas.

Implementamos computacionalmente o método iterativo e obtivemos a solução numérica do problema direto.

Após o desenvolvimento do método iterativo para a solução do problema direto, baseado no trabalho de Alifanov, desenvolvemos o método iterativo para determinar a solução do problema inverso.

Implementamos computacionalmente o algoritmo para resolver o problema estacionário.

Como trabalhos futuros, podemos sugerir:  
a implementação computacional do algoritmo para resolver o problema inverso transiente;

a utilização de elementos esféricos na construção da malha icosedral, e sua respectiva malha dual, para melhorar a solução do problema;  
fazer aplicações práticas utilizando o algoritmo proposto e a malha icosaedral.

## Referências Bibliográficas

- [1] J. R. Baumgardner and P. O. Friderickson *Icosahedral Discretization of the two-sphere*, SIAM Journal Numer. Anal., Vol.22, number 6, 1107-1115, 1985.
- [2] J. M. Augebaum *On the construction of the Voronoi mesh on a sphere*, Journal of Computational Physics, 59, p.177-192, 1985.
- [3] R. J. Renka *Algorithm 772: STRIPACK: Delaunay triangulation and Voronoi diagram on the surface of a sphere*, ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 23, n. 3, p. 416-434, 1997.
- [4] R. J. Renka *Interpolation of data on the surface of a sphere*, ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 10, n. 4, p. 417-436, 1984.
- [5] R. J. Renka *Triangulation and interpolation at arbitrarily distributed points in the plane*, ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 10, n. 4, p. 440-442, 1984.
- [6] R. J. Renka *ALGORITHM 623: Interpolation on the surface of a sphere*, ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 10, n. 4, p. 437-439, 1984.
- [7] G. R. Stuhne and W. R. Peltier *New icosahedral grid-point discretizations of the shallow water equations on the sphere*, Journal of Computational Physics, 148, p.23-58, 1999.
- [8] G. R. Stuhne and W. R. Peltier *Vortex erosion and amalgamation in a new model of large scale flow on the sphere*, Journal of Computational Physics, 128, p.58-81, 1996.
- [9] G. R. Stuhne and W. R. Peltier *A robust unstructured grid discretization for 3-dimensional hydrostatic flows in spherical geometry: a new numerical structure for ocean general circulation modeling*, Journal of Computational Physics, 213, p.704-729, 2006.

- [10] S. R. Karpik and W. R. Peltier *Multigrid methods for the solution of Poisson's equation in a thick spherical shell*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol.12, number 3, 681-694, 1991.
- [11] G. Chukkapalli, S. R. Karpik and C. R. Ethier *A scheme for generating unstructured grids on spheres with application to parallel computation*, Journal of Computational Physics, v.149, p.114-127, 1999.
- [12] R. A. Nicolaides *Direct discretization of planar div-curl problems*, SIAM Journal Numer. Anal., Vol.29, number 1, 32-56, 1992.
- [13] A. J. Silva Neto e F. D. Moura Neto *Problemas inversos, conceitos fundamentais e aplicações*, Rio de Janeiro, EdUERJ, 2005.
- [14] F. Gonçalves e F. D. Moura Neto *An iterative parallel algorithm for linear systems defined on graphs*, submetido ao SIAM J. Num. Analysis.
- [15] M. Moura Carmona, F. D. Moura Neto, F. F. Ferreira e M. van Hombeeck *A Semi-Implicit Semi-Lagrangian Finite Difference Method for the Simulation of the Hydrodynamics of a Pollutant in a Shallow Water Regimen*, Journal of Coastal Research, SI 39 (Proceedings of the 8th International Coastal Symposium), 2003.
- [16] F. F. Ferreira, F. P. Ferreira, F. D. M. Moura Neto e M. van Hombeeck *Hybrid Methods for the Simulation of Pollutant Transport in Estuaries*, 17th International Congress of Mechanical Engineering, São Paulo, Brasil, 2003.
- [17] F. D. Moura Neto e F. F. Ferreira *Discretização da equação de Poisson sobre a esfera*, IX Encontro de Modelagem Computacional, Belo Horizonte, MG, 2006.
- [18] F. D. Moura Neto e F. F. Ferreira *Solução numérica da equação de Poisson sobre a esfera - parte I: formulação, existência e unicidade, e convergência do método iterativo*, X Encontro de Modelagem Computacional, Nova Friburgo, RJ, 2007.
- [19] F. D. Moura Neto e F. F. Ferreira *Solução numérica da equação de Poisson sobre a esfera - parte II: resultados numéricos*, X Encontro de Modelagem Computacional, Nova Friburgo, RJ, 2007.
- [20] M. N. Özisik *Heat conduction*, Wiley-Interscience publication, USA, 1980.
- [21] R. Barrett et al. *Templates for the solution of linear system: building blocks for iterative methods*, SIAM, Philadelphia, 1994.
- [22] R. Heikes and D. A. Randall *Numerical integration of the shallow-water equations on a twisted icosahedral grid. Parte I: basic desing and results of tests*, Monthly Weather Review, v. 123, 1995.

- [23] R. Heikes and D. A. Randall *Numerical integration of the shallow-water equations on a twisted icosahedral grid. Parte II: a detailed description of the grid and analysis of numerical accuracy*, Monthly Weather Review, v. 123, 1995.
- [24] D. Lanser, J. G. Blom, and J. G. Verwer *Spatial discretization of the shallow water equations in spherical geometry using osher's scheme*, Journal of Computational Physics, v. 165, p.542-565, 2000.
- [25] M. R. Elsey *Efficient and accurate unstructured mesh generation*,
- [26] D. M. C. Nicholson and W.A. Shelton *Removed sphere method for Poisson's equation*, Journal of Physics: Condensed Matter, v. 14, p.5601-5608, 2002.
- [27] H. Tomita, M. Satoh and K. Goto *An optimization of the icosahedral grid modified by spring dynamics*, Journal of Computational Physics, v.183, p.307-331, 2002.
- [28] N. A. Teanby *An icosahedron-based method for even binning of globally distributed remote sensing data*, Computers & Geosciences, v.32, p.1442-1450, 2006.
- [29] R. Sibson *Locally equiangular triangulations*, The Computer Journal, v.21, n.3,
- [30] S. R. Idelsohn and E. Onate *To mesh or not to mesh. That is the question...*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2006.
- [31] L. Bonaventura *A balanced semi-implicit discretization on icosahedral C-grids for the linear shallow water equations on the sphere*,
- [32] H. Samet *Winged-edge data structure*, notas.
- [33] V. Tulovsky and L. Papiz *Formula for the fundamental solution of the heat equation on the sphere*, Applied Mathematics Letters, .14, p.881-884, 2001.
- [34] P. Omari and F. Zanolin *An elliptic problem with arbitrarily small positive solutions*, Electron. J. Diff. Eqns., Conf. 05, p.301-308, 2000.
- [35] M. C. C. Cunha *Métodos numéricos*, 2ª edição, Campinas, SP. EdUNICAMP, 2000.
- [36] O. M. Alifanov *Solution of an inverse problem of heat conduction by iteration methods*, J. of Engineering Physics, 26:471-476, 1974.
- [37] O. M. Alifanov and V. V. Mikhailov. *Solution of the nonlinear inverse thermal conductivity problem by iteration method*, J. of Engineering Physics, 35:1501-1506, 1978.
- [38] Douglas Jr., J., Paes Leme, P. J., Roberts, J. E. e Wang, J. *A parallel iterative procedure applicable to the approximate solution of second order partial differential equations by mixed finite element methods*, Numer. Math, 65:95-108, 1993.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)