

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

Emerson Joarez da Silva

**Métodos de elementos finitos híbridos aplicados na solução de equações
transientes de reação-difusão**

Juiz de Fora

2021

Emerson Joarez da Silva

Métodos de elementos finitos híbridos aplicados na solução de equações
transientes de reação-difusão

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

Orientador: Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha

Coorientador: Prof. Dr. Iury Higor Aguiar da Igreja

Juiz de Fora

2021

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Silva, Emerson Joarez da.

Métodos de elementos finitos híbridos aplicados na solução de equações transientes de reação-difusão / Emerson Joarez da Silva. – 2021.

57 f. : il.

Orientador: Bernardo Martins Rocha

Coorientador: Iury Higor Aguiar da Igreja

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas / Faculdade de Engenharia. Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, 2021.

1. Modelos de reação-difusão. 2. Método híbrido de elementos finitos. 3. Métodos semi-implícitos. I. Rocha, Bernardo Martins, orient. II. Métodos de elementos finitos híbridos aplicados na solução de equações transientes de reação-difusão.

Emerson Joarez da Silva

Métodos de elementos finitos híbridos aplicados na solução de equações transientes de reação-difusão

Dissertação
apresentada ao
Programa de Pós-
Graduação em
Modelagem
Computacional da Universidade
Federal de Juiz de
Fora como requisito
parcial à obtenção do
título de Mestre em
Modelagem
Computacional. Área
de concentração:
Modelagem
Computacional.

Aprovada em 16 de dezembro de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof.Dr. Bernardo Martins Rocha - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof.Dr. Iury Higor Aguiar da Igreja - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof.Dr. Abimael Fernando Dourado Loula
Laboratório Nacional de Computação Científica

Prof.Dr. Rafael Alves Bonfim de Queiroz
Universidade Federal de Ouro Preto

Juiz de Fora, 02/12/2021.



Documento assinado eletronicamente por **Abimael Fernando Dourado Loula**,



Usuário Externo, em 17/12/2021, às 05:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Bernardo Martins Rocha, Professor(a)**, em 17/12/2021, às 08:30, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rafael Alves Bonfim de Queiroz, Usuário Externo**, em 17/12/2021, às 08:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Iury Higor Aguiar da Igreja, Professor(a)**, em 17/12/2021, às 10:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **0601413** e o código CRC **AC85C583**.

Dedico este trabalho aos meus pais, à Andréia, aos meus orientadores e ao professor Rafael Bonfim.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, por todo esforço e incentivo concedido a mim para que esta etapa se realizasse.

À minha noiva Andréia por todo apoio e constante presença ao meu lado, potencializando as alegrias e suavizando as dificuldades.

Aos meus orientadores Bernardo Martins Rocha e Iury Higor Aguiar da Igreja, pela oportunidade, paciência e excelente orientação que proporcionou valiosos ensinamentos.

Gostaria de agradecer também ao professor Rafael Alves Bonfim de Queiroz, por despertar e intensificar meu interesse no meio científico.

Aos professores da UFJF e PPGMC por toda dedicação e suporte.

Aos amigos e colegas pela ajuda e por grandes momentos de convivência.

Finalmente à CAPES, pelo suporte financeiro.

The good thing about Science is that it's true, whether or not you believe in it. (Neil deGrasse Tyson)

RESUMO

Sistemas de equações diferenciais parciais de reação-difusão são caracterizados pela capacidade de produzir uma grande variedade de padrões espaciais complexos. Além disso, os modelos são frequentemente aplicados em diferentes áreas do conhecimento, tais como química, física, biologia, entre outras. Devido à não linearidade do problema presente na maioria das aplicações, os modelos de reação-difusão têm sido frequentemente estudados em termos numéricos e computacionais. Neste contexto, o presente trabalho visa a aplicação de métodos híbridos de elementos finitos para aproximação espacial em conjunto com os métodos SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formulas*) para discretização temporal com o intuito de construir aproximações numéricas para problemas de reação-difusão. Os métodos híbridos caracterizam-se pela imposição da continuidade através do multiplicador de Lagrange e com isso, o tratamento de aproximações numéricas de alta ordem se tornam menos complexas e são computacionalmente eficientes. Já os métodos SBDF apresentam alternativas de alta ordem para a integração temporal e permitem tratar o termo de reação não-linear de forma explícita. Experimentos numéricos com a formulação proposta foram realizados comprovando a taxa de convergência ótima no espaço e no tempo. Além disso, simulações em modelos de eletrofisiologia cardíaca e no modelo de Gray-Scott foram realizadas de forma satisfatória com a metodologia proposta.

Palavras-chave: Modelos de reação-difusão. Método híbrido de elementos finitos. Métodos semi-implícitos

ABSTRACT

Systems of reaction-diffusion partial differential equations are characterized by the ability to produce a wide variety of complex spatial patterns. The models are often applied in different areas of knowledge such as chemistry, physics, biology, among others. Due to the nonlinearity of the problem present in most applications, reaction-diffusion models have often been studied in numerical and computational terms. In this context, the present work aims at the application of hybrid finite element methods for the spatial approximation combined with SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formulas*) methods for the time discretization to build numerical approximations for reaction-diffusion problems. Hybrid methods are characterized by imposing continuity through the use of a Lagrange multiplier. In this approach the treatment of high-order numerical approximations becomes less complex and computationally efficient. SBDF methods, on the other hand, are high-order alternatives for time integration and allow treating the non-linear reaction term explicitly. Numerical experiments with the proposed formulation were carried out to show the optimal convergence rates in space and time. In addition, simulations of cardiac electrophysiology models and of the Gray-Scott model were performed satisfactorily with the proposed methodology.

Keywords: Reaction-diffusion models. Hybrid finite element method. semi-implicit methods

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Alguns exemplos de formação de padrões encontrados na natureza, embriologia humana e eletrofisiologia cardíaca.	15
Figura 2 – Exemplos de padrões obtidos através do modelo de Gray-Scott. Figura adaptada de Pearson (1993).	25
Figura 3 – Mapa para a geração dos padrões da Figura 2. Além dos padrões representados por letras gregas, têm-se R e B denotando as soluções estacionárias <i>red state</i> e <i>blue state</i> , respectivamente. Adaptado de Pearson (1993).	26
Figura 4 – Representação do potencial de ação dado pela despolarização e repolarização em uma célula excitável após a aplicação de um estímulo elétrico no instante $t = 10$. Adaptado de Pereira (2019).	26
Figura 5 – Exemplo de onda espiral em um modelo ventricular 2D. Figura adaptada de Rocha et al. (2020).	28
Figura 6 – Exemplo de onda espiral em um modelo 3D bi-ventricular do coração. Adaptado de Göktepe et al. (2010).	28
Figura 7 – Representação dos graus de liberdade de elementos bilineares utilizando multiplicadores lineares com (a) aproximação contínua e (b) descontínua. Figura adaptada de Igreja (2015).	29
Figura 8 – Taxas de convergência no espaço para o método híbrido de elementos finitos com aproximação contínua (ϕ_C) e descontínua (ϕ_D) para o multiplicador de Lagrange usando diferentes ordens polinomiais $k = \{1, 2, 3, 4\}$. 34	34
Figura 9 – Decaimento do erro em função do número de graus de liberdade do sistema global para o método híbrido de elementos finitos, utilizando aproximação contínua e descontínua para o multiplicador de Lagrange com diferentes ordens polinomiais $k = \{1, 2, 3, 4\}$	35
Figura 10 – Erro de aproximação para $k = 1$ em função do parâmetro de estabilização β_0 para o multiplicador de Lagrange com aproximação contínua e descontínua.	36
Figura 11 – Exemplo de padrões formados com o modelo de Gray-Scott. As figuras apresentam as concentrações da variável u em diferentes domínios (quadrado e círculo) para diferentes conjuntos de parâmetros.	48
Figura 12 – Evolução temporal do padrão obtido com $F = 0,04$ e $\bar{k} = 0,06$. Para cada item de (a) até (f), são exibidos os valores das concentrações das variáveis u (esquerda) e w (direita), respectivamente.	49
Figura 13 – Evolução temporal do padrão obtido com $F = 0,026$ e $\bar{k} = 0,061$. Para cada item, são exibidos os valores das concentrações das variáveis u e w , respectivamente.	50

Figura 14 – Evolução temporal do padrão de Turing obtido com $F = 0,06$ e $\bar{k} = 0,0620$. Para cada item, são exibidos os valores das concentrações das variáveis u e w , respectivamente. 50

Figura 15 – Evolução temporal de simulação realizada com modelo bidimensional do monodomínio. O mapa de cores indica o valor do potencial transmembrânico u , variando de azul para $u \approx -1,2$ até vermelho com $u \approx 2$ 52

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	–	Número de graus de liberdade do sistema global (referente ao esqueleto da malha) e local (para cada elemento) para diferentes refinamentos de malha e aproximação polinomial em um domínio 2D.	30
Tabela 2	–	Erros e taxa de convergência para a FHCD1 ($\Delta t = h^2$).	45
Tabela 3	–	Erros e taxa de convergência para a FHCD2 ($\Delta t = h$).	45
Tabela 4	–	Erros e taxa de convergência para a FHCD3 ($\Delta t = h$).	45
Tabela 5	–	Erros e taxa de convergência para a FHCD4 ($\Delta t = h$).	45
Tabela 6	–	Erro e taxa de convergência para a FHCD1 com malha fixa de 512×512 elementos.	46
Tabela 7	–	Erro e taxa de convergência para a FHCD2 com malha fixa de 512×512 elementos.	46
Tabela 8	–	Erro e taxa de convergência para a FHCD3 com malha fixa de 512×512 elementos.	46
Tabela 9	–	Erro e taxa de convergência para a FHCD4 com malha fixa de 512×512 elementos.	47

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADI	<i>Alternating Direction Implicit</i>
CNLF	<i>Crank-Nicolson Leapfrog</i>
EDP	Equação Diferencial Parcial
FHN	FitzHugh-Nagumo
FVH	Formulação Variacional Híbrida
FHCD1	Formulação Híbrida Completamente Discreta 1
FHCD2	Formulação Híbrida Completamente Discreta 2
FHCD3	Formulação Híbrida Completamente Discreta 3
FHCD4	Formulação Híbrida Completamente Discreta 4
GD	Galerkin descontínuo
IMEX	<i>Implícito-Explícito</i>
MEF	Método dos Elementos Finitos
MGS	Modelo de Gray-Scott
RD	Reação-Difusão
SBDF	<i>Semi-Implicit Backward Differentiation Formula</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Motivação e contexto	15
1.2	Revisão da literatura	16
1.3	Objetivo geral e objetivos específicos	18
1.4	Organização do texto	18
2	MODELOS MATEMÁTICOS	20
2.1	MODELOS DE REAÇÃO-DIFUSÃO	20
2.1.1	Condições Gerais para Formação de Padrões de Turing	20
2.2	MODELO DE GRAY-SCOTT	23
2.2.1	Geração de Padrões	24
2.3	MODELOS DA ELETROFISIOLOGIA CARDÍACA	24
2.3.1	Modelo de Fitz-Hugh-Nagumo	25
2.3.2	Modelo do Monodomínio	27
2.3.3	Formação de espirais	27
3	MÉTODOS NUMÉRICOS	29
3.1	DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL	29
3.1.1	Método Híbrido de Elementos Finitos	29
3.1.2	Taxas de Convergência no Espaço	33
3.1.3	Efeito do parâmetro de estabilização	35
3.2	INTEGRAÇÃO TEMPORAL	36
3.2.1	Método de Euler	36
3.2.2	Métodos SBDF	37
3.2.2.1	Métodos Semi-Implicitos de Primeira Ordem	38
3.2.2.2	Métodos Semi-Implicitos de Segunda Ordem	38
3.2.2.3	Métodos Semi-Implicitos de Terceira Ordem	39
3.2.2.4	Métodos Semi-Implicitos de Quarta Ordem	39
3.2.3	Inicialização dos métodos	40
3.3	FORMULAÇÕES COMPLETAMENTE DISCRETAS	40
3.4	METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO	41
3.5	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	42
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	44
4.1	Estudos de Convergência	44
4.2	Aplicação em Formação de Padrões	47
4.3	Aplicação em formação de padrão de Turing	48
4.4	Aplicação em eletrofisiologia cardíaca	51
4.5	Discussão sobre os métodos	52
5	CONCLUSÃO	53

REFERÊNCIAS	55
-----------------------	----

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação e contexto

Em 1952, o matemático e cientista da computação Alan Turing descobriu que um sistema com apenas duas moléculas seria capaz de gerar uma variedade de padrões complexos se elas se difundissem e interagissem quimicamente de maneira adequada (Turing, 1952). Seu modelo matemático de reação-difusão demonstra que, partindo de uma distribuição homogênea, as moléculas poderiam auto-organizar suas concentrações formando um padrão espacial. Devido a essas características e motivados pelo trabalho pioneiro de Turing, modelos de reação-difusão começaram a ocupar espaço na literatura com aplicações em diferentes ramos da ciência.

Padrões biológicos podem ser facilmente encontrados na natureza sob diversas formas, tais como na formação estrutural de plantas, na coloração da pele ou dos pêlos de animais, dentre outras. Na embriologia, os mecanismos de Turing descrevem, por exemplo, o desenvolvimento dos dedos das mãos e dos pés (Raspopovic et al., 2014). Outro exemplo relevante de aplicação encontra-se na área da eletrofisiologia cardíaca, a qual estuda a geração do potencial de ação nas células cardíacas e a sua propagação na forma de ondas. Em situações diversas, usualmente associadas com patologias, a propagação dessas ondas pode formar padrões complexos como espirais (Beaumont et al., 1998). A Figura 1 ilustra alguns exemplos de padrões presentes nesses fenômenos mencionados anteriormente.

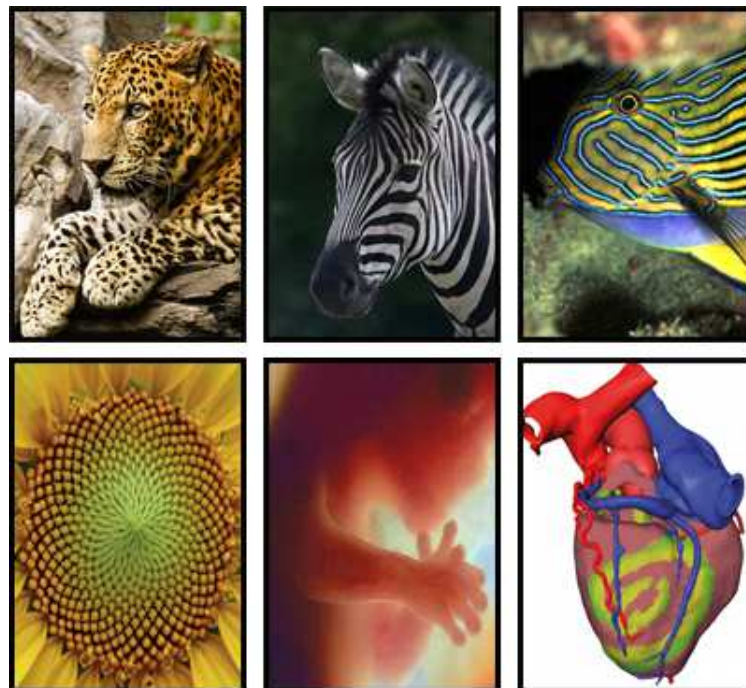


Figura 1 – Alguns exemplos de formação de padrões encontrados na natureza, embriologia humana e eletrofisiologia cardíaca.

Os modelos de reação-difusão (RD) são compostos por equações diferenciais parciais

(EDPs) que podem ser representadas na seguinte forma geral:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au + R(u), \quad (1.1)$$

onde u é a variável de interesse, A é um operador linear que representa a difusão e R é um operador, em geral, não-linear que representa as reações. Em diversas aplicações práticas é comum os modelos serem governados por sistemas de EDPs com duas ou mais variáveis de interesse.

1.2 Revisão da literatura

Devido à não linearidade do termo de reação presente na maioria dos modelos, a equação (1.1) agrega desafios matemáticos e computacionais. Em termos matemáticos, os sistemas dificilmente apresentam soluções na forma fechada e explícita e, por isso, são geralmente resolvidos computacionalmente. Sob o ponto de vista computacional, diferentes métodos podem ser aplicados com o objetivo de construir aproximações numéricas para essa classe de problemas. Na literatura, métodos numéricos de diferenças finitas tais como Crank-Nicolson e ADI (*Alternating-Direction Implicit*) são frequentemente utilizados (Hasnain et al., 2018; Pereira, 2019). Em casos onde o termo reativo é linear, o método ADI produz sistemas de equações lineares cuja matriz é tridiagonal, fato este que pode reduzir consideravelmente o custo computacional envolvido na solução numérica. Entretanto, na presença de termos de reação não-lineares, torna-se necessário utilizar um esquema de resolução de sistemas não lineares (como o método de Newton) em cada passo de tempo (Hasnain et al., 2018) e, portanto, demandam grande esforço computacional. Para contornar esse problema, a busca por métodos numéricos eficientes e precisos é fundamental para resolver os modelos de maneira viável. Nesse contexto, é bastante comum o uso de esquemas semi-implícitos (que será discutido adiante) ou de técnicas de decomposição de operadores (Strang, 1968).

Com relação à discretização espacial, uma alternativa bastante empregada são os Métodos de Elementos Finitos (MEF) (Hughes, 2012). Dentro dessa classe de métodos, formulações clássicas de Galerkin contínuo são bastante utilizadas em diversas aplicações. Entretanto, quando combinado com métodos de diferenças finitas para a integração temporal podem surgir oscilações nos instantes de tempo iniciais (Harari, 2004). Além dos métodos clássicos de elementos finitos, formulações de Galerkin Descontínuo (GD), como aqueles discutidos por Cockburn et al. (2012), também são utilizadas, pois destacam-se pela robustez, flexibilidade para adoção de estratégias de refinamento espacial e polinomial (adaptatividade) e técnicas de estabilização, além de utilizar espaços de elementos finitos descontínuos por partes. Por outro lado, essa metodologia demanda alto custo computacional devido ao grande número de graus de liberdade (principalmente para aproximações de alta ordem) e possui implementação complexa. Com isso, hibridizações de

métodos elementos finitos foram desenvolvidas com o intuito de preservar as características de robustez e flexibilidade dos métodos de GD, mas com custo computacional reduzido e formulações menos complexas de serem implementadas.

Inicialmente, hibridizações de elementos finitos foram vistas como uma estratégia de implementação com base em uma manipulação algébrica denominada condensação estática, com o propósito de reduzir consideravelmente o número de graus de liberdade do problema (Guyan, 1965; Fraeijs de Veubeke, 1965). No entanto, trabalhos posteriores demonstraram que essa técnica poderia ser reinterpretada como versões discretas de uma caracterização da solução exata, expressa em termos de soluções de problemas de contorno de Dirichlet em cada elemento da malha, corrigidas por condições de transmissão nas interfaces dos elementos (Raviart and Thomas, 1977; Cockburn and Gopalakrishnan, 2005). Dessa forma, os métodos híbridos são caracterizados pela utilização de elementos finitos descontínuos com a imposição de continuidade nas interfaces dos elementos através do uso de multiplicadores de Lagrange. Essa estratégia gera um sistema global envolvendo apenas os graus de liberdade associados ao multiplicador através da eliminação das variáveis de interesse no nível dos elementos (Arruda et al., 2013; Igreja and Loula, 2017), fato que reduz consideravelmente a complexidade e o custo computacional envolvido, principalmente quando são utilizadas aproximações polinomiais de alta ordem.

Com relação à integração temporal, dentre os diversos esquemas numéricos utilizados para aproximar EDPs no tempo, os métodos semi-implícitos destacam-se pela possibilidade de tratar diferentes termos de forma implícita e/ou explícita e apresentar um fácil acoplamento com os métodos numéricos utilizados para a aproximação espacial. Dentro desse contexto, Ascher et al. (1995) apresentaram uma família de esquemas IMEX (*Implicit-Explicit*) para a integração temporal em problemas de advecção-difusão e reação-difusão. Eles também demonstram algumas análises de estabilidade, enquanto (Crouzeix, 1980) apresentam alguns testes de convergência e estabilidade.

No que diz respeito à utilização de métodos híbridos para problemas de reação-difusão, Rocha et al. (2020) apresentou uma formulação numérica com decomposição de operadores para a equação do monodomínio da eletrofisiologia cardíaca. A formulação utiliza um método híbrido primal estabilizado para discretização espacial considerando aproximações contínuas ou descontínuas para o multiplicador de Lagrange. A formulação com multiplicador contínuo trata-se de uma extensão da formulação proposta por Arruda et al. (2013) para problemas elípticos de segunda ordem. Experimentos numéricos mostraram taxas ótimas de convergência e ainda demonstraram que os esquemas apresentados podem ser mais eficientes do que as técnicas comumente usadas neste contexto, quando métodos iterativos pré-condicionados são usados. Outros estudos que aplicam métodos de elementos finitos descontínuos para solução numérica de problema de RD podem ser encontrados nos trabalhos de Zhang et al. (2014) e Zhu et al. (2009).

1.3 Objetivo geral e objetivos específicos

Este trabalho possui como objetivo a construção e implementação de esquemas numéricos compostos por métodos de elementos finitos híbridos combinados com esquemas IMEX, em particular com os métodos SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formula*) para aproximar problemas não-lineares de reação-difusão, visando alta ordem de aproximação com reduzido custo computacional. Dentro desse escopo, pode-se mencionar os seguintes objetivos específicos:

- Estudo, implementação e validação de métodos de elementos finitos híbridos para solução numérica de EDPs de reação-difusão;
- Verificação computacional das taxas de convergências dos métodos e o seu desempenho computacional;
- Aplicação dos métodos híbridos no modelo de Gray-Scott com o intuito de validar numericamente as formulações através de estudos de convergência;
- Aplicação dos métodos híbridos no modelo de Gray-Scott com o objetivo de gerar padrões espaciais, incluindo padrões de Turing;
- Aplicação dos métodos híbridos em modelos da eletrofisiologia cardíaca, em particular no modelo do monodomínio acoplado ao modelo de FitzHugh–Nagumo.

Em síntese, dentre as vantagens que justificam a escolha de métodos híbridos de elementos finitos, destacam-se: robustez, flexibilidade para adaptatividade espacial e polinomial, reduzido custo computacional para gerar aproximações numéricas de alta ordem e menor complexidade de implementação em comparação com métodos de Galerkin descontínuo e eficiência em malhas não uniformes e não estruturadas. Já para a integração temporal, as principais motivações para a utilização dos métodos semi-implícitos SBDF são a possibilidade de gerar aproximações de alta ordem, fácil acoplamento com os métodos utilizados para a discretização espacial e a oportunidade de tratar termos reativos de forma explícita, proporcionando facilidade de implementação e reduzindo o custo computacional envolvido.

1.4 Organização do texto

O presente trabalho integra 5 capítulos e está organizado da seguinte forma: o capítulo 2 são apresentados os diversos modelos matemáticos que serão estudados neste trabalho e suas aplicações; no capítulo 3 são apresentados os métodos numéricos de elementos finitos, as técnicas para integração temporal, a formulação completamente discreta e a estratégia de solução; os resultados de diversos experimentos numéricos são

apresentados no capítulo 4, enquanto no capítulo 5 as conclusões e discussões a respeito de limitações e trabalhos futuros são apresentadas.

2 MODELOS MATEMÁTICOS

Neste capítulo são apresentados os modelos matemáticos de reação-difusão transiente que serão resolvidos numericamente neste trabalho, assim como algumas aplicações e conceitos fundamentais na formação de alguns padrões espaciais.

2.1 MODELOS DE REAÇÃO-DIFUSÃO

Sistemas de reação-difusão envolvem constituintes transformados localmente entre si por reações químicas e transportados no espaço por difusão. Surgem naturalmente na química, mas também servem como referência para o estudo de uma ampla gama de fenômenos de variados ramos da ciência, como aqueles presentes em sistemas biológicos e físicos. Em determinadas situações, esses fenômenos podem apresentar algum tipo de formação de padrão espacial. Estes modelos, em geral, são compostos por sistemas de EDPs não lineares, descritos de forma geral por:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = A\mathbf{u} + R(\mathbf{u}), \quad (2.1)$$

onde \mathbf{u} denota o vetor de variáveis, A é um operador linear que representa a difusão e R um operador, em geral não linear, que representa o termo de reação.

2.1.1 Condições Gerais para Formação de Padrões de Turing

A instabilidade impulsionada pela difusão em sistemas de reação-difusão tem sido proposta como um dos principais mecanismos que justificam a formação de padrões espaciais em diversos contextos e aplicações. Segel and Jackson (1972) foram os primeiros autores a propor essa ideia para explicar a heterogeneidade espacial que ocasionalmente ocorriam em interações presa-predador. Mais tarde, a ideia de que a dispersão poderia provocar instabilidades e conseqüentemente gerar padrões espaciais também foi construída por outros autores, como Okubo et al. (1980).

Também conhecida como instabilidade de Turing, esse comportamento ocorre em um sistema de reação-difusão se o estado estacionário homogêneo for estável a pequenas perturbações na ausência de difusão, mas instável a pequenas perturbações espaciais quando a difusão estiver presente. As condições necessárias para o surgimento de instabilidades de Turing serão apresentadas a seguir e alguns estudos numéricos serão apresentados posteriormente. Um detalhamento mais profundo pode ser encontrado na literatura especializada (Murray, 2001).

Nesta seção, objetiva-se encontrar as condições necessárias e suficientes para a instabilidade de Turing acima mencionada. Visando simplificar a notação nesta seção, considere um problema com duas variáveis u e v , tal que:

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad v_t = \frac{\partial v}{\partial t}, \quad f_u = \frac{\partial f}{\partial u}, \quad f_v = \frac{\partial f}{\partial v}, \quad g_u = \frac{\partial g}{\partial u}, \quad g_v = \frac{\partial g}{\partial v}. \quad (2.2)$$

Dessa forma, define-se o seguinte sistema composto por duas espécies químicas, u e v , definido em um domínio Ω isolado:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \gamma f(u, v), \quad (2.3a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v + \gamma g(u, v), \quad (2.3b)$$

onde d representa o coeficiente de difusão (constante) e Δ representa o operador diferencial do laplaciano, que para u e em duas dimensões é dado por:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \quad (2.4)$$

Para o problema (2.3) considera-se um sistema com condições iniciais conhecidas e condição de contorno do tipo Neumann homogêneo para que o padrão espacial não sofra consequências oriundas do contorno e surja devido à auto-organização nas concentrações das espécies. Como deseja-se apresentar as condições necessárias para a instabilidade impulsionada pela difusão, o interesse é na instabilidade linear do estado estacionário homogêneo (u_0, v_0) que surge da solução positiva de $f(u, v) = 0$ e $g(u, v) = 0$. Portanto, na ausência de variação espacial, o estado estacionário homogêneo será linearmente estável. Tais condições para que isso ocorra são obtidas como segue.

Inicialmente, lineariza-se $u_t = \gamma f(u, v)$ e $v_t = \gamma g(u, v)$ em (u_0, v_0) :

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

o que leva ao sistema linear dado por:

$$\mathbf{w}_t = \gamma A \mathbf{w}, \quad \text{com } A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{u_0, v_0}. \quad (2.6)$$

As soluções desse sistema são proporcionais a $e^{\lambda t}$, com λ denotando o autovalor de γA . Com isso, os autovalores podem ser obtidos a partir da equação característica padrão, dada por:

$$\lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v) - \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) = 0, \quad (2.7)$$

cujas soluções são dadas por:

$$\lambda_1, \lambda_2 = \frac{\gamma}{2} \left((f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)} \right). \quad (2.8)$$

Por fim, para garantir estabilidade linear, a condição $Re(\lambda) < 0$ deve ser satisfeita, o que resulta em:

$$\text{tr}(A) = f_u + g_v < 0, \quad (2.9a)$$

$$\det(A) = f_u g_v - f_v g_u > 0. \quad (2.9b)$$

Para resolver o sistema completo da equação (2.3) sujeita a condições de contorno de Neumann homogêneo, primeiro lineariza-se o sistema sobre (u_0, v_0) , produzindo

$$\mathbf{w}_t = \gamma A \mathbf{w} + D \Delta \mathbf{w}, \quad \text{com } D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Seja $\mathbf{W}(\mathbf{r})$ a solução independente do tempo para o problema de autovalor espacial definido por:

$$\Delta \mathbf{W} + k^2 \mathbf{W} = 0, \quad \nabla \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{para } \mathbf{r} \text{ sobre } \partial\Omega, \quad (2.11)$$

onde k é o autovalor e pode ser visto como o número de onda. Por exemplo, em um domínio fechado unidimensional de $0 \leq x \leq a$, \mathbf{W} é proporcional a $\cos(n\pi x/a)$ (n sendo um valor inteiro) e nesse contexto $k = n\pi/a$ é o número de onda e seu inverso é proporcional ao comprimento de onda.

Seja $\mathbf{W}_k(\mathbf{r})$ a autofunção referente ao número de onda k . Devido à linearidade do problema, o conjunto de soluções do sistema (2.10) apresenta a forma

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{W}_k(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

onde as constantes c_k são oriundas da expansão de Fourier das condições iniciais em termos de $\mathbf{W}_k(\mathbf{r})$. Substituindo esse resultado na equação (2.10) e levando em conta as propriedades de \mathbf{W}_k , obtém-se:

$$\lambda \mathbf{W}_k = \gamma A \mathbf{W}_k + D \Delta \mathbf{W}_k \quad (2.13)$$

$$= \gamma A \mathbf{W}_k - D k^2 \mathbf{W}_k \quad (2.14)$$

$$= (\gamma A - k^2 D) \mathbf{W}_k. \quad (2.15)$$

Com isso, pode-se determinar λ através das raízes do polinômio característico, o que produz:

$$\lambda^2 + \lambda \left[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v) \right] + h(k^2) = 0, \quad (2.16)$$

onde

$$h(k^2) = dk^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2 \det(A). \quad (2.17)$$

As restrições para que o estado estacionário seja estável na ausência de variações espaciais já foram impostas: o estado (u_0, v_0) será linearmente estável se ambas soluções da equação (2.16) satisfizerem à condição $Re(\lambda) < 0$. Dessa forma, para o estado estacionário ser instável a perturbações espaciais, $Re(\lambda) > 0$ deve ocorrer para algum $k \neq 0$, o que leva a duas possibilidades:

- (i) o coeficiente de λ , dado por $k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)$, ser negativo; ou
- (ii) $h(k^2) < 0$ para algum $k \neq 0$.

De acordo com a equação (2.9) e ao fato de $k^2(1+d) > 0$ para todo $k \neq 0$, o coeficiente de λ será positivo e a primeira possibilidade pode ser descartada. Assim, a segunda possibilidade produz diretamente através da solução da equação (2.16) uma restrição adicional às aquelas da equação (2.9). Considerando que a equação (2.9b) determina que $\det(A) > 0$, a única forma de $h < 0$ é dada por:

$$df_u + g_v > 0 \quad \Rightarrow \quad d \neq 1, \quad (2.18)$$

Como pela equação (2.9a), tem-se que $f_u + g_v < 0$, isto implica que $d \neq 1$ e também que f_u e g_v devem ter sinais opostos.

A equação (2.18) representa uma condição necessária mas não suficiente para garantir $Re(\lambda) > 0$. Além dela, é necessário que o mínimo h_{min} seja negativo, ou seja,

$$h_{min} = \gamma^2 \left[\det A - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right], \quad k^2 = k_m^2 = \gamma \frac{df_u + g_v}{2d} < 0. \quad (2.19)$$

que resulta em

$$\frac{(df_u + g_v)^2}{4d} > \det(A) \quad \Rightarrow \quad (df_u + g_v)^2 - 4d \det(A) > 0. \quad (2.20)$$

Portanto, para que o sistema (2.3) apresente instabilidade de Turing, é necessário que satisfaça as condições apresentadas nas equações (2.9), (2.18) e (2.20).

2.2 MODELO DE GRAY-SCOTT

O modelo de Gray and Scott (1983, 1985) (MGS) é composto por um sistema de reação-difusão que envolve duas espécies químicas quaisquer. Essas espécies reagem entre si e se difundem no meio, assim, suas concentrações mudam com o tempo e localização no espaço. Esse comportamento permite que o MGS seja capaz de produzir uma grande variedade de padrões espaciais complexos (Pearson, 1993). Sejam U e W duas espécies químicas genéricas, no MGS as reações químicas são dadas por:



Como a espécie W aparece em ambos os lados da primeira reação, ela atua como um processo autocatalítico onde duas moléculas da espécie W , em interação com uma molécula da espécie U produzem $3W$. Já a segunda reação representa a decomposição de W no produto P .

Considerando a difusão das espécies no meio, as reações acima podem ser descritas por um sistema de EDPs que apresentam termos de reação e difusão, dadas por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \Delta u + F(1-u) - uw^2, \quad (2.23a)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = d_2 \Delta w - (F + \bar{k})w + uw^2, \quad (2.23b)$$

onde u e w representam as concentrações das espécies U e W , respectivamente; d_1 e d_2 são os coeficientes de difusão das espécies U e W , respectivamente; F e \bar{k} são parâmetros que controlam a reação das espécies.

Negligenciando a difusão, os termos reativos do sistema (2.23) levam à existência de uma solução estacionária trivial homogênea denominada *red state*, dada por $(u_R, w_R) = (1, 0)$. Para certos valores de F e \bar{k} que satisfazem a relação $d = 1 - 4(F + \bar{k})^2/F > 0$, o sistema (2.23) apresenta outros dois estados estacionários: *blue state* e *intermediate state*, dados respectivamente por $(u_B, v_B) = (\frac{1}{2}(1 - \sqrt{d}), \frac{1}{2}\alpha(1 + \sqrt{d}))$ e $(u_I, v_I) = (\frac{1}{2}(1 + \sqrt{d}), \frac{1}{2}\alpha(1 - \sqrt{d}))$, onde $\alpha = F/(F + \bar{k})$. Para mais detalhes, veja o trabalho de Mazin et al. (1996).

2.2.1 Geração de Padrões

O sistema da equação (2.23) permite a formação de diversos padrões a partir de diferentes combinações dos parâmetros F e \bar{k} . Com isso, as soluções do MGS são caracterizadas por apresentarem variados arranjos espaciais ao longo do tempo, inclusive partindo de pequenas perturbações de estados homogêneos.

Padrões do MGS podem apresentar diferentes formas e comportamentos. Pearson (1993) classifica 12 tipos de padrões de acordo com suas características, nomeando-os com letras gregas (veja a Figura 2). Como as soluções são extremamente sensíveis aos parâmetros F e \bar{k} , a Figura 3 fornece um mapeamento dos valores de F e \bar{k} necessários para a geração de cada um dos padrões classificados.

Em seu trabalho, Pearson (1993) descreve que todos os 12 padrões foram gerados utilizando condições de contorno periódicas e condições iniciais dada pelo estado trivial homogêneo $(u_R, w_R) = (1, 0)$ (*red state*) acrescido de uma perturbação na região central do domínio. Dessa forma, todos os padrões classificados em Pearson (1993) (alguns deles também reproduzidos neste trabalho) surgiram em resposta às variações de amplitude inseridas na condição inicial. Entretanto, padrões de Turing podem surgir espontaneamente devido aos efeitos da difusão (ver Seção 2.1.1) quando os coeficientes de difusão são diferentes e o sistema parte do estado estacionário *blue state*. Para mais detalhes sobre o espaço de Turing para essa classe de problemas, veja os trabalhos de Mazin et al. (1996) e Pearson (1993).

2.3 MODELOS DA ELETROFISIOLOGIA CARDÍACA

O coração é o órgão responsável pelo processo de bombeamento do sangue para diversas partes do corpo. Esse processo ocorre de forma cíclica: o coração relaxa para receber o sangue e depois contrai para bombeá-lo de suas cavidades. Dessa forma, o sangue não oxigenado é bombeado para os pulmões para ser oxigenado e depois retornar ao coração, que por sua vez irá bombear o sangue para outras partes do corpo, distribuindo

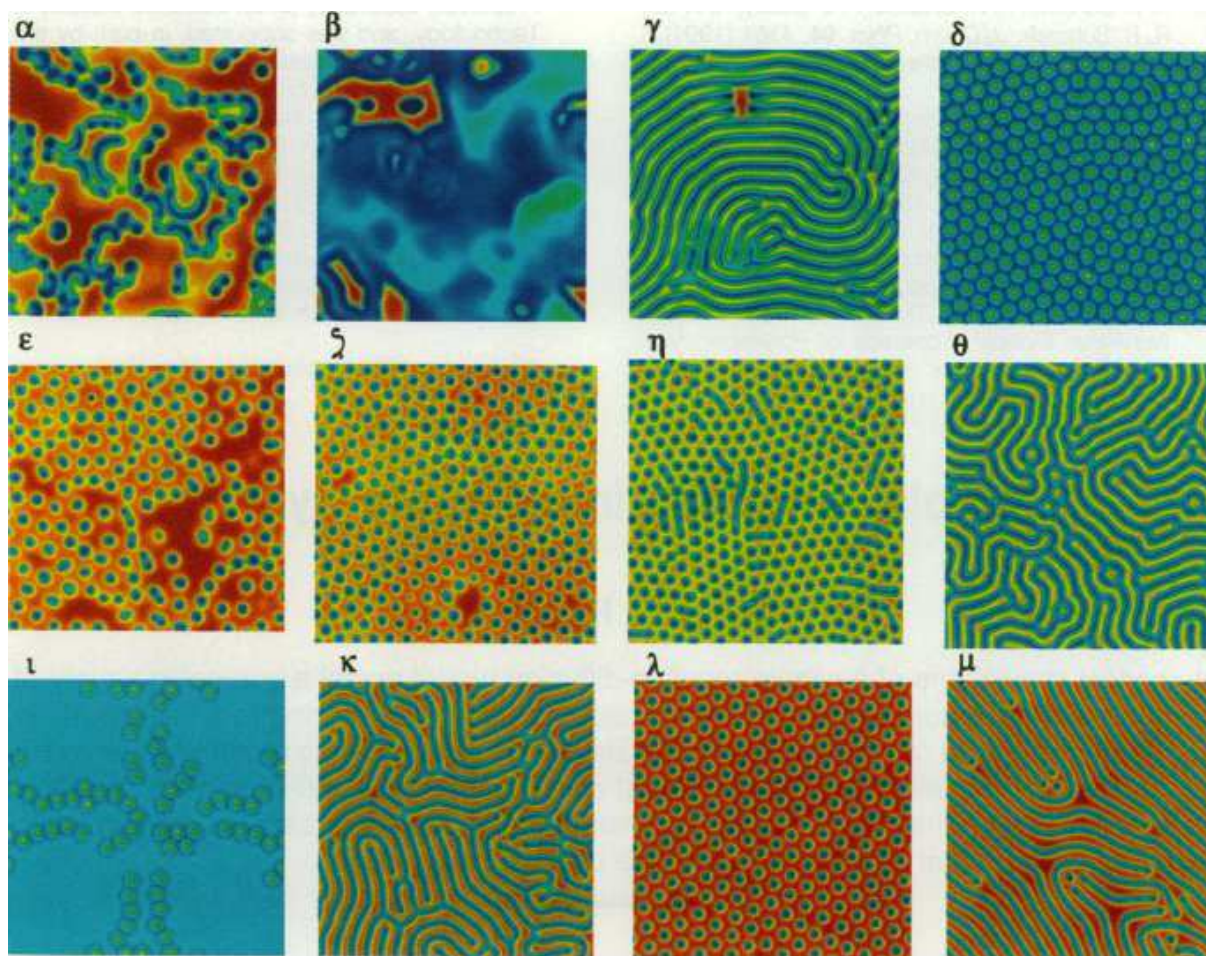


Figura 2 – Exemplos de padrões obtidos através do modelo de Gray-Scott. Figura adaptada de Pearson (1993).

oxigênio e nutrientes através da circulação sanguínea. O ciclo cardíaco inicia-se novamente quando o sangue retornar ao coração após ter viajado pelo corpo.

Esse fenômeno é possível devido à contração do músculo, resultado da capacidade de contração e excitação elétrica das células do coração. No estado de repouso, a diferença de potencial entre o meio intracelular e extracelular das células permanecem estáveis em uma determinada configuração. Quando um estímulo elétrico é aplicado, ocorre uma rápida despolarização da célula cardíaca, que após um intervalo de tempo irá retornar ao seu estado de repouso, como mostra a Figura 4. Esse percurso da diferença de potencial elétrico através da membrana celular é conhecido como potencial de ação.

2.3.1 Modelo de Fitz-Hugh-Nagumo

Dentro desse contexto, o modelo proposto por FitzHugh (1961) e Nagumo et al. (1962), conhecido como modelo FitzHugh-Nagumo (FHN), é caracterizado por descrever a geração do potencial de ação em células excitáveis como, por exemplo, as células do tecido cardíaco. Trata-se de um modelo fenomenológico, uma vez que este não leva

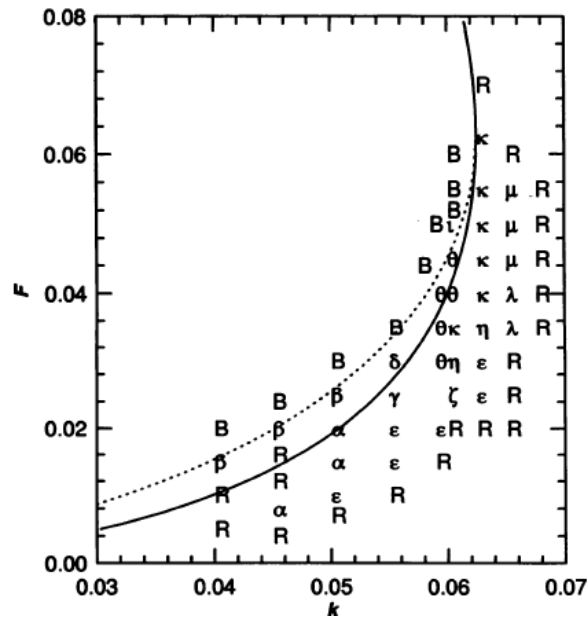


Figura 3 – Mapa para a geração dos padrões da Figura 2. Além dos padrões representados por letras gregas, têm-se R e B denotando as soluções estacionárias *red state* e *blue state*, respectivamente. Adaptado de Pearson (1993).

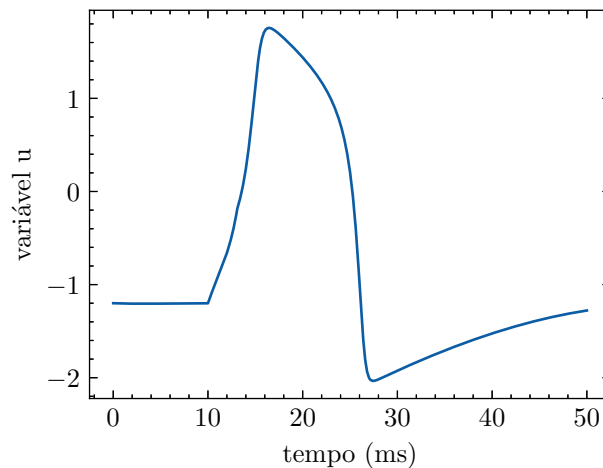


Figura 4 – Representação do potencial de ação dado pela despolarização e repolarização em uma célula excitável após a aplicação de um estímulo elétrico no instante $t = 10$. Adaptado de Pereira (2019).

em consideração detalhes biológicos de forma quantitativa para reproduzir a geração do potencial de ação.

O modelo de FHN é composto por um sistema de equações diferenciais ordinárias, o qual é dado por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u - \frac{1}{3}u^3 - w + I_{app}, \quad (2.24a)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \epsilon(u + a - bw), \quad (2.24b)$$

com condições iniciais dadas por $u(0) = u_0$ e $w(0) = w_0$. Os parâmetros a , b e ϵ permitem

alterar o estado de repouso e a dinâmica do potencial de ação e I_{app} é a função que denota um estímulo elétrico externo aplicado em um intervalo de tempo.

2.3.2 Modelo do Monodomínio

Apesar de descrever a geração do potencial de ação em uma célula excitável, o modelo FHN não é suficiente para descrever a propagação da onda elétrica de excitação no tecido cardíaco. A onda de excitação se espalha através do tecido cardíaco devido ao acoplamento elétrico das células cardíacas e proteínas especiais denominadas junções *gap*.

Para representar o comportamento elétrico do tecido, o modelo de FHN é acoplado a um sistema de reação-difusão, conhecido como modelo monodomínio, o qual é dado por:

$$\chi \left(C_m \frac{\partial u}{\partial t} + I_{ion}(u, \mathcal{S}, t) \right) = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla u), \quad (2.25a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = f(u, \mathcal{S}, t), \quad (2.25b)$$

$$(\mathcal{D} \nabla u) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (2.25c)$$

onde \mathcal{D} denota o tensor de condutividade, C_m a capacitância da membrana celular, χ uma constante utilizada para compatibilizar as unidades (razão superfície-volume), \mathcal{S} um vetor de variáveis de estado ($\mathcal{S} = w$ no modelo de FHN) e I_{ion} é a densidade total da corrente iônica. No caso do modelo FHN, o termo I_{ion} é dado por:

$$I_{ion}(u, \mathcal{S}, t) = u - \frac{1}{3}u^3 - w + I_{app}. \quad (2.26)$$

As condições iniciais são dadas por $u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$ e condições de contorno do tipo fluxo nulo $\mathcal{S}(\mathbf{x}, 0) = \mathcal{S}_0(\mathbf{x})$ são impostas sobre u ao longo de todas as superfícies do miocárdio.

2.3.3 Formação de espirais

Os modelos apresentados nas Seções 2.3.1 e 2.3.2 fazem parte do conjunto de modelos simplificados, que usam um pequeno número de parâmetros, variáveis e equações, desenvolvidos para descrever a eletrofisiologia cardíaca em termos do potencial de ação e outras características importantes. Sob determinadas condições de estímulo elétrico o modelo monodomínio consegue representar a geração de um padrão complexo conhecido como onda de reentrada, ou também onda espiral.

Diversos estudos (Jalife, 2000) indicam que o surgimento dessas ondas de excitação elétrica estão atreladas a situações patológicas que dão origem a distúrbios cardíacos, tais como as arritmias cardíacas. Em síntese, arritmias cardíacas são disfunções do padrão de excitação normal do coração que podem levá-lo à falha no bombeamento do sangue para o corpo e, conseqüentemente, levar à morte súbita.

Os mecanismos que podem dar origem à essas ondas espirais são diversos (Jalife et al., 2011). Uma possibilidade é através de obstáculos funcionais, caracterizados por

regiões onde a condução elétrica sofre uma redução significativa em sua velocidade de propagação ou até mesmo um bloqueio. Outro mecanismo bastante comum é devido a um pulso prematuro espontâneo (Oliveira et al., 2018). De modo geral, pode-se dizer que uma onda espiral ocorre quando a propagação de um impulso não termina de forma normal após a sua ativação e persiste provocando a re-excitação do tecido.

As Figuras 5 e 6 ilustram a atividade elétrica cardíaca na presença e propagação de ondas espirais em simulações computacionais ao longo de diferentes passos de tempo. A Figura 5 ilustra a situação em um modelo bidimensional com um região de heterogeneidade das propriedades de condutividade elétrica (à direita no domínio). A Figura 6 apresenta uma simulação tridimensional utilizando uma geometria bi-ventricular do coração (a faixa de cores indica o valor do potencial de ação, sendo azul $\approx -80mV$ e vermelho $\approx 20mV$).

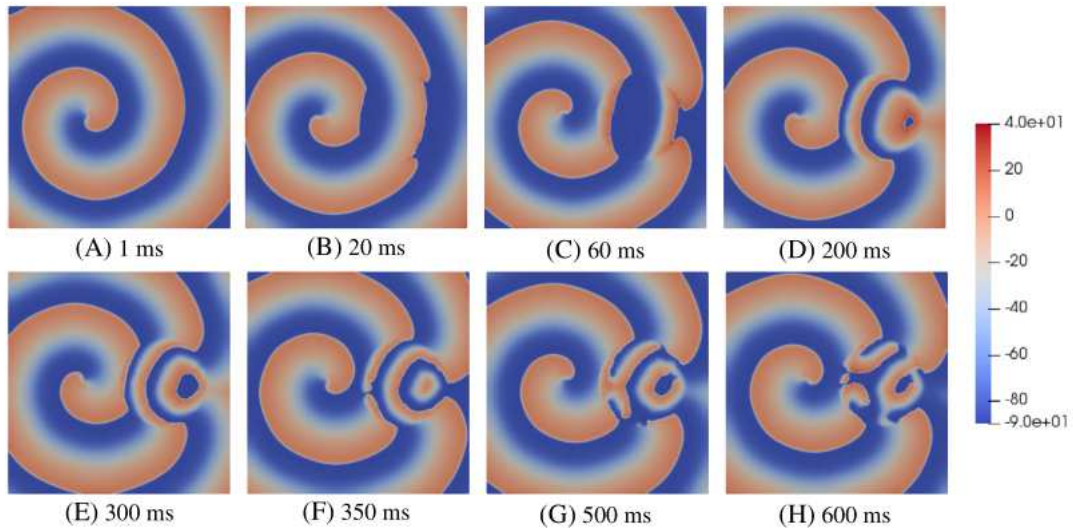


Figura 5 – Exemplo de onda espiral em um modelo ventricular 2D. Figura adaptada de Rocha et al. (2020).

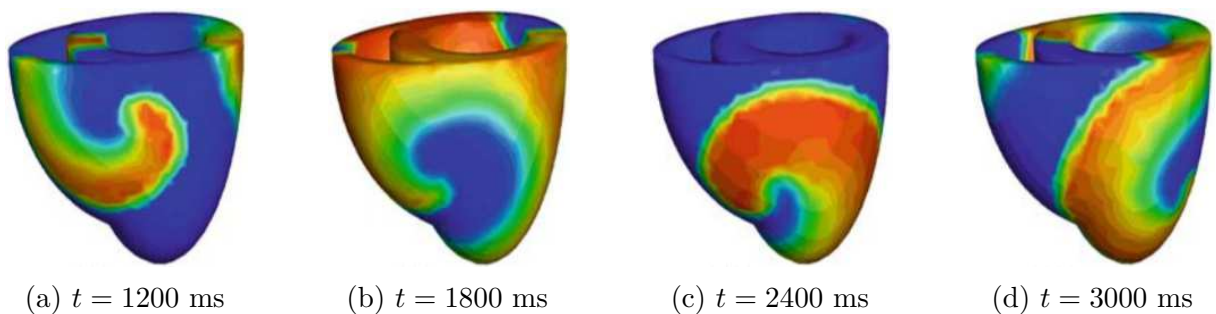


Figura 6 – Exemplo de onda espiral em um modelo 3D bi-ventricular do coração. Adaptado de Göktepe et al. (2010).

3 MÉTODOS NUMÉRICOS

Este capítulo contempla a descrição dos métodos numéricos utilizados para resolver os modelos de reação-difusão apresentados no capítulo anterior. Em particular, serão apresentadas formulações híbridas de elementos finitos em conjunto com métodos semi-implícitos para a integração do termo transiente.

3.1 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

3.1.1 Método Híbrido de Elementos Finitos

Os métodos híbridos de elementos finitos utilizam elementos descontínuos e são caracterizados pela montagem de um sistema global, definido em todo o domínio, formado pela condensação dos graus de liberdade dos problemas locais definidos em cada elemento da malha. A continuidade dos elementos e conseqüentemente a equivalência entre os problemas locais e o problema global são impostas de forma fraca através dos multiplicadores de Lagrange, definidos sobre as interfaces dos elementos, isto é, sobre o esqueleto da malha.

As condições de interface dos elementos podem ser impostas via multiplicador de Lagrange empregando funções de interpolação contínuas ou descontínuas (Igreja, 2015), conforme ilustrado na Figura 7. Computacionalmente, multiplicadores contínuos são mais atraentes por produzirem sistemas globais com um menor número de graus de liberdade em relação aos multiplicadores descontínuos. Por outro lado, os multiplicadores descontínuos podem preservar a propriedade de conservação local e são mais indicados para problemas que apresentam descontinuidades.

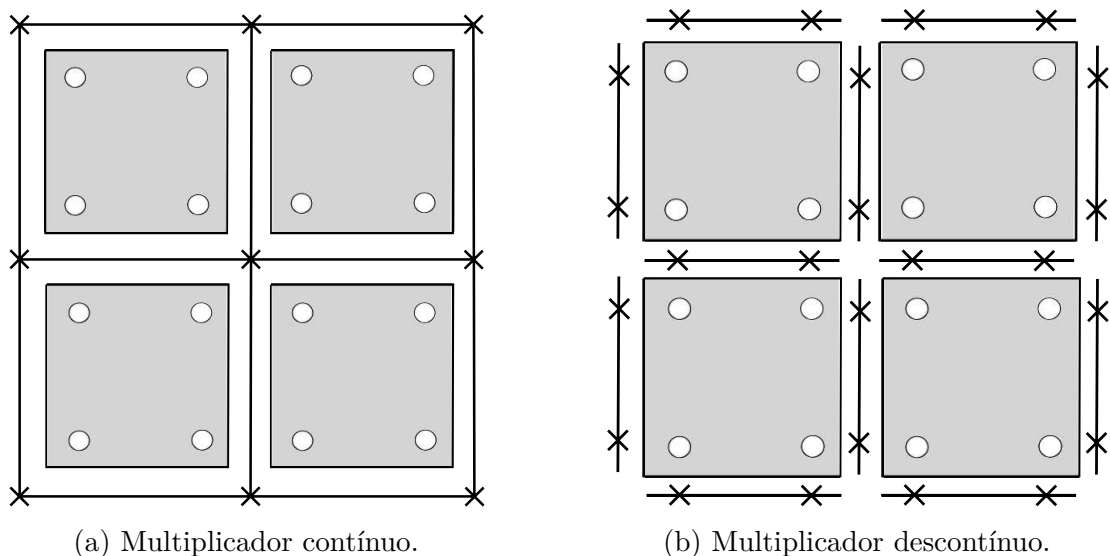


Figura 7 – Representação dos graus de liberdade de elementos bilineares utilizando multiplicadores lineares com (a) aproximação contínua e (b) descontínua. Figura adaptada de Igreja (2015).

Nesse contexto, através da condensação estática, que trata-se de uma forma de resolução via complemento de Schur (Igreja, 2015), que será detalhada mais adiante no texto, a dimensão do sistema global irá contemplar somente os graus de liberdade do multiplicador de Lagrange. Com isso, o custo computacional para resolução do sistema de equações lineares envolvido é reduzido, principalmente quando aproximações de alta ordem são utilizadas, e o tempo necessário para a resolução dos problemas locais, principalmente em uma e duas dimensões, é desprezível em relação ao tempo de resolução do problema global. Para fins de comparação entre as abordagens usadas para o multiplicador de Lagrange, a Tabela 1 apresenta o número de graus de liberdade do sistema global e local, ambos gerados por multiplicadores contínuos e descontínuos, para diferentes ordens de aproximação polinomial em domínios bidimensionais formados por malhas uniformes de elementos quadrilaterais. Destaca-se que para domínios tridimensionais, a discrepância no número de graus de liberdade do sistema global seria ainda maior (Rocha et al., 2020).

Tabela 1 – Número de graus de liberdade do sistema global (referente ao esqueleto da malha) e local (para cada elemento) para diferentes refinamentos de malha e aproximação polinomial em um domínio 2D.

Grau	Malha	Multiplicador contínuo		Multiplicador descontínuo	
		Sistema global	Sistema local	Sistema global	Sistema local
1	8×8	81	4	288	4
1	16×16	289	4	1088	4
1	32×32	1089	4	4224	4
1	64×64	4225	4	16640	4
2	8×8	225	9	432	9
2	16×16	833	9	1632	9
2	32×32	3201	9	6336	9
2	64×64	12545	9	24960	9
3	8×8	369	16	576	16
3	16×16	1377	16	2176	16
3	32×32	5313	16	8448	16
3	64×64	20865	16	33280	16
4	8×8	513	25	720	25
4	16×16	1921	25	2720	25
4	32×32	7425	25	10560	25
4	64×64	29185	25	41600	25

A seguir são introduzidas formulações híbridas de elementos finitos para o problema transiente de reação-difusão (1.1). Assim, considerando o problema modelo definido em um domínio espacial $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ e em um intervalo de tempo $[0, T]$, temos

Problema modelo: Encontrar $u : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u - R(u) = f(x, y, t) \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (3.1a)$$

$$u(x, y, t) = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times [0, T], \quad (3.1b)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) \quad \text{em } \Omega, \quad (3.1c)$$

onde f e u_0 são funções conhecidas e suficientemente regulares. Para descrever a formulação do problema definido por (3.1) através do método de elementos finitos híbrido, será necessário introduzir a notação essencial para sua descrição. Considere uma malha \mathcal{T}_h formada pela união de todos os elementos K e para as arestas e dos elementos, definem-se os seguintes conjuntos:

$$\mathcal{E}_h = \{e; e \text{ é uma aresta de } K, K \in \mathcal{T}_h\}, \quad (3.2)$$

o qual denota o conjunto de todas as arestas de todos os elementos de \mathcal{T}_h ,

$$\mathcal{E}_h^0 = \{e \in \mathcal{E}_h; e \text{ é uma aresta interior}\} \quad (3.3)$$

que representa o conjunto das arestas interiores e

$$\mathcal{E}_h^\partial = \{e \in \mathcal{E}_h; e \subset \partial\Omega\} \quad (3.4)$$

que representa o conjunto das arestas pertencentes ao contorno $\partial\Omega$ do domínio Ω . Além disso, para cada elemento, associa-se um vetor unitário normal \mathbf{n}_K . Com isso, pode-se definir o problema local, no nível de cada elemento K como segue:

Problema no nível do elemento: Para cada $t \in (0, T]$, encontrar u tal que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u - R(u) = f(x, y), \quad \text{em } K, \quad (3.5a)$$

$$[[\nabla u]]_e = 0, \quad \forall e \in \mathcal{E}_h, \quad (3.5b)$$

$$[[u]]_e = 0, \quad \forall e \in \mathcal{E}_h^0, \quad (3.5c)$$

$$u(x, y, t) = 0, \quad \text{sobre } \mathcal{E}_h^\partial, \quad (3.5d)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \quad \text{em } K, \quad (3.5e)$$

onde o operador de salto $[[\cdot]]_e$, definido como $[[\nabla u]]_e = \nabla u^+ \cdot \mathbf{n}_{K^+} + \nabla u^- \cdot \mathbf{n}_{K^-}$ e $[[u]]_e = u^+ \mathbf{n}_{K^+} + u^- \mathbf{n}_{K^-}$, corresponde a imposição das condições de transmissão nas interfaces dos elementos, com K^+ e K^- denotando dois elementos vizinhos que dividem uma mesma aresta $e \in \mathcal{E}_h^0$.

Seja o seguinte espaço quebrado (Igreja, 2015) de dimensão finita para aproximação da variável primal do problema:

$$\mathcal{V}_h^k = \left\{ v_h \in L^2(\Omega); v_h|_K \in \mathbb{P}_k(K), \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (3.6)$$

$$(3.7)$$

onde $\mathbb{P}_k(\cdot)$ denota o espaço das funções polinomiais de grau k associado aos elementos ou arestas, respectivamente.

Para os multiplicadores de Lagrange, consideram-se as seguintes possibilidades de aproximação:

$$\mathcal{M}_h^{k,d} = \left\{ \mu_h \in L^2(\mathcal{E}_h); \mu_h|_e \in \mathbb{P}_k(e), \forall e \in \mathcal{E}_h \right\}, \quad (3.8)$$

$$\mathcal{M}_h^{k,c} = \left\{ \mu_h \in C^0(\mathcal{E}_h); \mu_h|_e \in \mathbb{P}_k(e), \forall e \in \mathcal{E}_h \right\}, \quad (3.9)$$

onde $\mathcal{M}_h^{k,d}$ e $\mathcal{M}_h^{k,c}$ denotam espaços de aproximação descontínuos e contínuos, respectivamente. No contexto deste trabalho, destaca-se a utilização de multiplicadores de Lagrange contínuos (conforme definido o espaço $\mathcal{M}_h^{k,c}$) para essa classe de problemas, a qual justifica-se pela redução do número de graus de liberdade em relação aos multiplicadores de Lagrange descontínuos. Por simplicidade, a seguir será utilizada a notação \mathcal{M}_h^k para denotar o espaço de aproximação do multiplicador de Lagrange.

Assim, para obter uma formulação variacional híbrida deve-se: (i) multiplicar a equação (3.5a) por uma função peso $v_h \in \mathcal{V}_h^k$ e (ii) integrar por partes o termo de difusão no domínio K . Assim, chega-se na forma fraca local, a qual é dada por:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right)_K + (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - (R(u_h), v_h)_K = (f, v_h)_K, \quad (3.10)$$

onde $(\cdot, \cdot)_K$ denota o produto interno L^2 no elemento K .

A integração por partes do termo difusivo produz um termo no contorno ∂K do elemento K que garante a consistência do método. Para garantir as propriedades de consistência adjunta e estabilidade, adiciona-se na equação (3.10) um termo de simetrização e um termo de estabilização (Arruda et al., 2013), respectivamente, o que produz:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right)_K + (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - (R(u_h), v_h)_K \\ & - \int_{\partial K} (u_h - \lambda_h) \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K ds + \int_{\partial K} \beta (u_h - \lambda_h) v_h ds = (f, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k, \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde λ é o multiplicador de Lagrange associado ao traço da variável u nas arestas e β é um parâmetro de estabilização. O parâmetro de estabilização é definido da seguinte forma

$$\beta = \frac{\beta_0 k^2}{h}, \quad (3.12)$$

onde $\beta_0 > 0$ denota um parâmetro independente da malha, k o grau do polinômio e h um parâmetro relacionado a dimensão do elemento. É importante ressaltar que os termos adicionados no sistema (3.11), relacionados ao multiplicador de Lagrange, não ferem a consistência do método, já que, por definição, $\lambda = u|_e$ para todo $e \in \mathcal{E}_h$.

Com a inclusão do multiplicador de Lagrange, o problema definido na equação (3.11) contém duas incógnitas (u e λ) para somente uma equação. Por essa razão, torna-se

necessário a inclusão de mais uma equação ao problema, para que o mesmo seja bem posto. A nova equação é dada por:

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta(\lambda_h - u_h) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k, \quad (3.13)$$

a qual impõe de forma fraca as condições de transmissão $[[u]]_e = \mathbf{0}$ e $[[\nabla u]]_e = 0$ entre os elementos.

Por fim, chega-se na seguinte formulação híbrida semi-discreta associada ao problema modelo (3.1a)-(3.1c):

Formulação Variacional Híbrida (FVH): Para cada $t \in (0, T]$, encontrar $u_h \in \mathcal{V}_h^k$ e $\lambda_h \in \mathcal{M}_h^k$ tais que

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right)_K + (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - (R(u_h), v_h)_K \\ - \int_{\partial K} (u_h - \lambda_h) \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K ds \\ + \int_{\partial K} \beta(u_h - \lambda_h) v_h ds = (f, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k, \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta(\lambda_h - u_h) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (3.15)$$

3.1.2 Taxas de Convergência no Espaço

Para demonstrar as taxas de convergência do método híbrido no espaço, apresenta-se a seguir um estudo de convergência para um problema modelo simplificado de reação-difusão com termo de reação linear e cuja solução não depende do tempo. O problema modelo é dado por:

$$-\Delta u - u = f(x, y), \quad \text{em } \Omega, \quad (3.16)$$

$$u(x, y) = u_e, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (3.17)$$

onde u_e denota a solução exata utilizada para fins de teste de convergência, a qual neste caso é dada por $u_e = -4 \sin(\pi x) \cos(4\pi y)$.

As simulações foram realizadas empregando a formulação híbrida descrita acima, considerando as seguintes definições: (i) sequência de malhas uniformes formadas por $\{8 \times 8; 16 \times 16; 32 \times 32; 64 \times 64\}$ elementos quadrilaterais distribuídos no domínio $\Omega = [0, 1]^2$; (ii) termo de estabilização $\beta_0 = 10$ e (iii) ordens de aproximação polinomial $k = [1, 2, 3, 4]$. Os resultados foram agrupados e exibidos na Figura 8 através de gráficos que demonstram o erro em função do parâmetro de malha h_{mesh} e na Figura 9 por meio de gráficos que demonstram o erro em função do número de graus de liberdade (ndofs).

A taxa de convergência denotada por ϕ_D , para multiplicador descontínuo, e ϕ_C , para multiplicador contínuo, pode ser obtida através do cálculo do coeficiente angular

da reta. Com isso, nota-se que os resultados obtidos estão de acordo com as taxas de convergência esperadas $O(h^{k+1})$ para esse método. Destaca-se também o decaimento do erro conforme ocorrem os refinamentos de malha e ordem de aproximação polinomial. Também conforme esperado, nota-se que não há diferenças significativas entre a utilização de multiplicadores descontínuos e contínuos para este problema em termos de precisão da solução aproximada e convergência dos métodos.

Entretanto, pode-se perceber que o erro obtido para multiplicadores contínuos é menor que o erro obtido para multiplicadores descontínuos quando comparados com o mesmo número de graus de liberdade, conforme exibido na Figura 9. Por esse motivo, todas as simulações realizadas nas seções seguintes deste trabalho adotarão multiplicadores contínuos, uma vez que são mais eficientes computacionalmente devido ao baixo número de graus de liberdade gerados pelos sistemas globais, conforme visto anteriormente na Tabela 1.

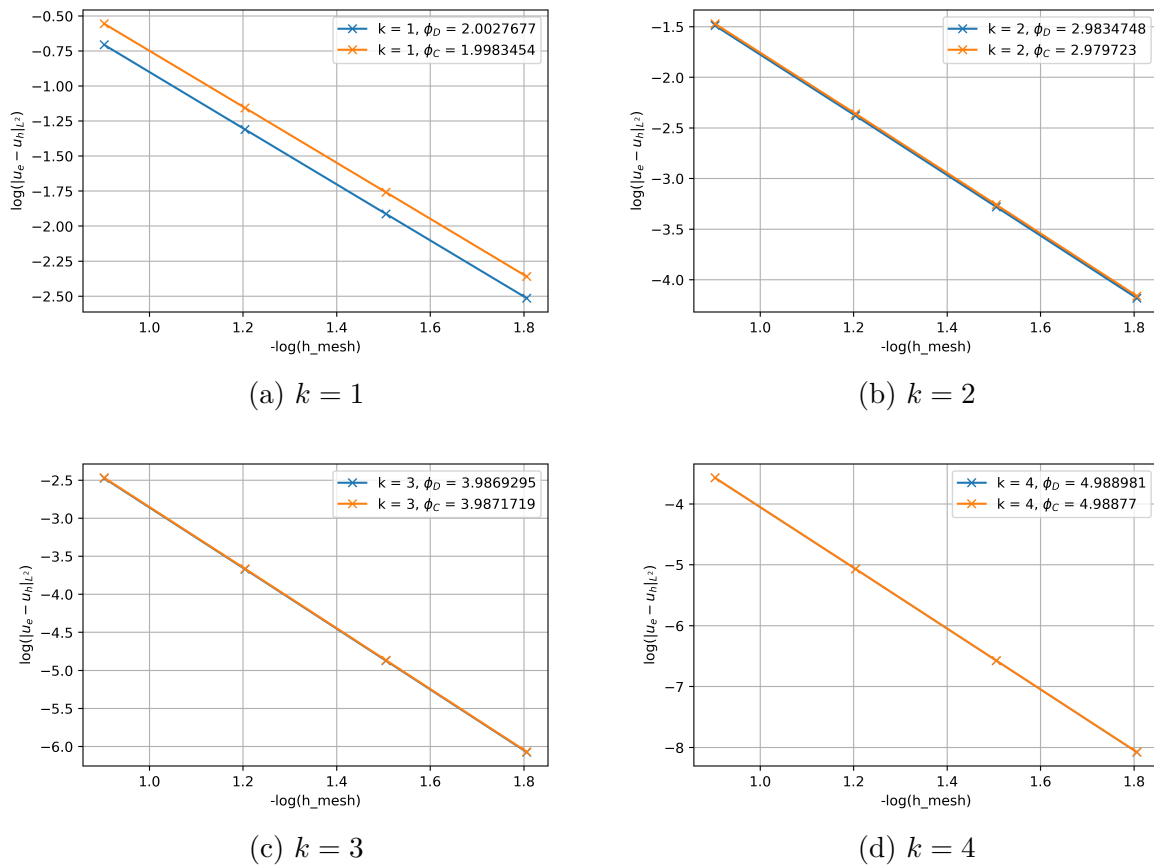


Figura 8 – Taxas de convergência no espaço para o método híbrido de elementos finitos com aproximação contínua (ϕ_C) e descontínua (ϕ_D) para o multiplicador de Lagrange usando diferentes ordens polinomiais $k = \{1, 2, 3, 4\}$.

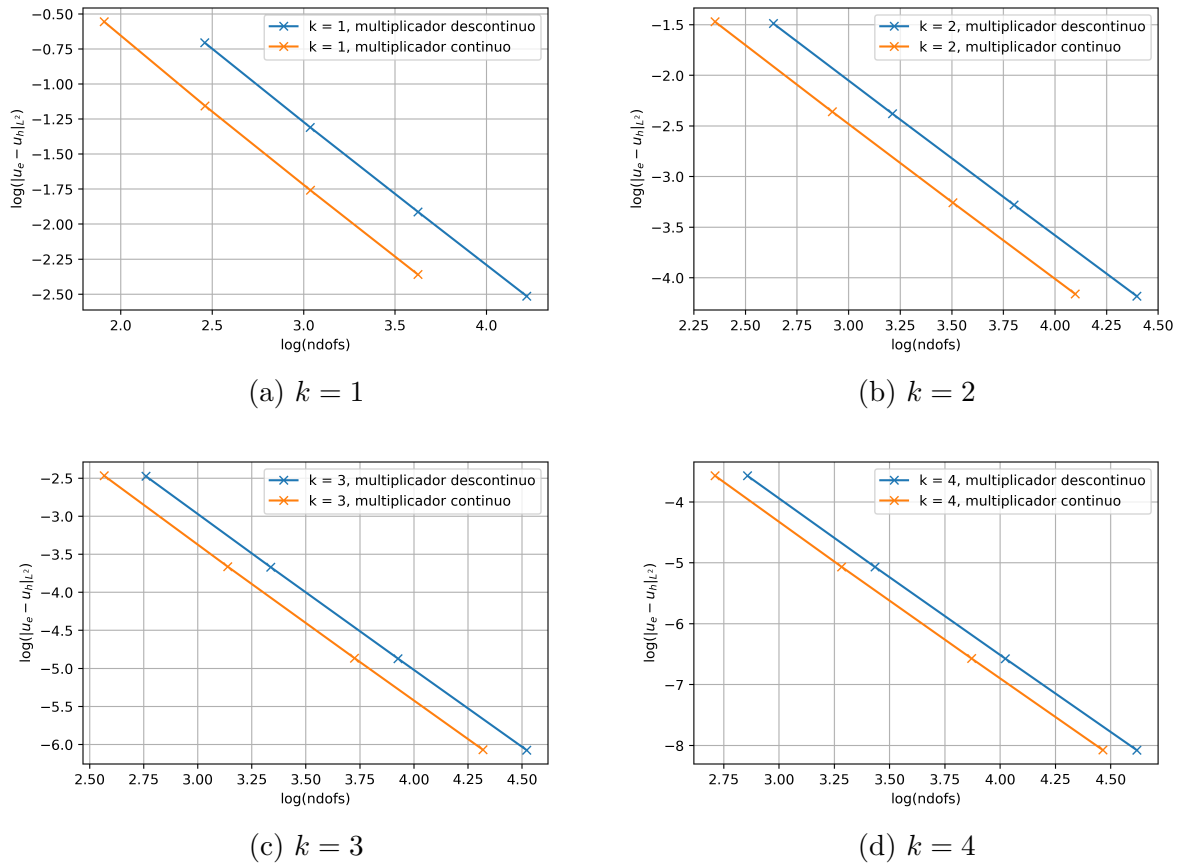


Figura 9 – Decaimento do erro em função do número de graus de liberdade do sistema global para o método híbrido de elementos finitos, utilizando aproximação contínua e descontínua para o multiplicador de Lagrange com diferentes ordens polinomiais $k = \{1, 2, 3, 4\}$.

3.1.3 Efeito do parâmetro de estabilização

A influência do termo de estabilização presente na FVH é controlada a partir do parâmetro β_0 , definido em (3.12). Esse parâmetro controla a imposição da continuidade da solução entre os elementos e, conseqüentemente, pode afetar a precisão das aproximações.

A Figura 10 apresenta o erro obtido nas aproximações geradas com o método híbrido ao empregar diferentes valores para β_0 . As simulações numéricas foram aplicadas ao mesmo problema abordado na Seção 3.1.2 em um domínio $\Omega = [0, 1]^2$ discretizado por uma malha uniforme formada por 64 elementos quadrilaterais uniformes. Nota-se que a precisão da solução aumenta até um certo ponto conforme o valor de β_0 também aumenta, até que chega-se em um valor ótimo para β_0 na qual obtém-se um menor erro da aproximação. A partir desse ponto, o erro da aproximação volta a aumentar até que se estabiliza em uma faixa na qual o aumento do parâmetro de estabilização não gera efeitos significativos na qualidade da solução em termos de precisão.

A Figura 10 indica que o melhor valor de β_0 é aproximadamente 5 para multiplicador contínuo e aproximadamente 7 para multiplicador descontínuo no problema modelo

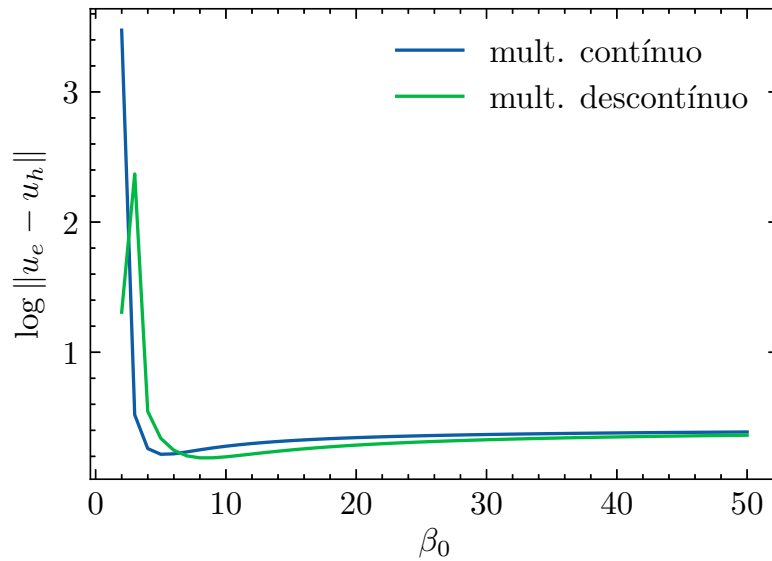


Figura 10 – Erro de aproximação para $k = 1$ em função do parâmetro de estabilização β_0 para o multiplicador de Lagrange com aproximação contínua e descontínua.

estudado para o caso $k = 1$ (linear). Para outros problemas, deve-se realizar um estudo similar para avaliar o efeito do parâmetro de estabilização. Embora essa análise não tenha sido feita nos demais estudos computacionais apresentados neste trabalho, os valores de β_0 escolhidos foram suficientemente grandes e apresentaram resultados satisfatórios.

3.2 INTEGRAÇÃO TEMPORAL

Este trabalho tem por objetivo explorar a utilização de métodos semi-implícitos para aproximar problemas de reação-difusão não lineares. Dessa forma, uma abordagem implícita pode ser usada para parte difusiva e a parte reativa pode ser tratada explicitamente (termo que normalmente apresenta não linearidades). Assim, em cada passo de tempo são resolvidos somente sistemas lineares, reduzindo o custo computacional que seria empregado para linearização dos sistemas. Além disso, esquemas semi-implícitos destacam-se pelo fácil acoplamento com os métodos numéricos utilizados neste trabalho para a discretização espacial. A seguir serão apresentados o método de Euler semi-implícito e a família de métodos semi-implícitos, conhecidos como SBDF, que são adotados neste trabalho.

No decorrer da leitura desta seção, considere uma partição uniforme do intervalo temporal $[0, T]$ dada por $\mathcal{J} = \{t_0 = 0, t_1, \dots, t_N = T\}$, com o tamanho do passo de tempo sendo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$. Considere ainda que a aproximação para a solução $u(t_n)$ será denotada por u^n .

3.2.1 Método de Euler

O método de Euler é uma das abordagens mais populares e simples utilizadas para aproximar problemas transientes. Assim, empregando o método de Euler semi-implícito à

equação (1.1), podemos reescrevê-la como:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = Au^{n+1} + R(u^n). \quad (3.18)$$

Essa discretização produz aproximações de primeira ordem (no tempo) e permite que o termo reativo possa ser calculado no passo de tempo anterior como no método de Euler explícito. Concomitantemente, o termo difusivo é calculado implicitamente, como ocorre no método de Euler implícito. Em problemas de RD onde o termo reativo é não linear, essa abordagem evita a necessidade do tratamento de sistemas não lineares

3.2.2 Métodos SBDF

Conforme apresentado em Ascher et al. (1995), esquemas de múltiplos passos podem ser derivados de forma geral para a equação (1.1) como:

$$\frac{1}{\Delta t}u^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=0}^{s-1} a_j u^{n-j} = \sum_{j=-1}^{s-1} c_j Au^{n-j} + \sum_{j=0}^{s-1} b_j R(u^{n-j}), \quad (3.19)$$

onde $s \geq 1$ e $c_{-1} \neq 0$. O erro de truncamento pode ser obtido através da expansão em série de Taylor, o que produz:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left[1 + \sum_{j=0}^{s-1} a_j \right] u(t_n) + \left[1 - \sum_{j=1}^{s-1} j a_j \right] \frac{\partial u}{\partial t}(t_n) + \dots + \frac{\Delta t^{p-1}}{p!} \left[1 + \sum_{j=1}^{s-1} (-j)^p a_j \right] u^{(p)}(t_n) \\ & - \sum_{j=0}^{s-1} b_j R(u(t_n)) + \Delta t \sum_{j=1}^{s-1} j b_j \frac{\partial R}{\partial t} \Big|_{t=t_n} - \dots - \frac{\Delta t^{p-1}}{(p-1)!} \sum_{j=1}^{s-1} (-j)^{p-1} b_j \frac{\partial^{p-1} R}{\partial t^{p-1}} \Big|_{t=t_n} \\ & - \sum_{j=-1}^{s-1} c_j A(u(t_n)) - \Delta t \left[c_{-1} - \sum_{j=-1}^{s-1} c_j \right] \frac{\partial A}{\partial t} \Big|_{t=t_n} - \dots \\ & - \frac{\Delta t^{p-1}}{(p-1)!} \left[c_{-1} + \sum_{j=1}^{s-1} c_j (-j)^{p-1} \right] \frac{\partial^{p-1} A}{\partial t^{p-1}} \Big|_{t=t_n} + \mathcal{O}(\Delta t^p). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Aplicando a equação (1.1) no erro de truncamento, obtém-se uma família de métodos de ordem p , fornecendo:

$$\begin{aligned} & 1 + \sum_{j=0}^{s-1} a_j = 0, \\ & 1 - \sum_{j=1}^{s-1} j a_j = \sum_{j=0}^{s-1} b_j = \sum_{j=-1}^{s-1} c_j, \\ & \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{j^2}{2} a_j = - \sum_{j=1}^{s-1} j b_j = c_{-1} - \sum_{j=1}^{s-1} j c_j, \\ & \vdots \\ & \frac{1}{p!} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^p}{p!} a_j = \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1} b_j}{(p-1)!} = \frac{c_{-1}}{(p-1)!} + \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(-j)^{p-1} c_j}{(p-1)!}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Ascher et al. (1995) demonstram os seguintes resultados para um método semi-implícito de s -passos, como dado pela equação (3.19):

- (i) as $2p + 1$ restrições do sistema (3.21) são linearmente independentes desde que $p \leq s$;
- (ii) um esquema de s -passos não pode ter ordem de precisão superior a s ; e
- (iii) que essa família de métodos possui s parâmetros.

A seguir os métodos semi-implícitos de primeira, segunda, terceira e quarta ordem usados neste trabalho serão apresentados juntamente com os parâmetros que os definem.

3.2.2.1 Métodos Semi-Implícitos de Primeira Ordem

Uma família de métodos semi-implícitos de primeira ordem ($s = 1$) pode ser obtida através da equação

$$u^{n+1} - u^n = \Delta t \left[(1 - \gamma)Au^n + \gamma Au^{n+1} \right] + \Delta t R(u^n), \quad (3.22)$$

onde o parâmetro γ é restrito a $0 \leq \gamma \leq 1$ para se evitar grandes erros de truncamento (Ascher et al., 1995).

Nota-se que diferentes escolhas do parâmetro γ resultam em diferentes métodos numéricos. Em particular, a escolha $\gamma = 0$ produz o método de Euler explícito, enquanto que $\gamma = \frac{1}{2}$ produz o método de Crank-Nicolson na ausência do termo de reação. Com $\gamma = 1$ chega-se ao método SBDF de primeira ordem, o qual é dado por:

$$u^{n+1} - u^n = \Delta t Au^{n+1} + \Delta t R(u^n). \quad (3.23)$$

Essa escolha $\gamma = 1$ pode ser vista como a aplicação do método de Euler explícito para o termo de reação em conjunto com o método de Euler implícito para o termo difusivo. Essa abordagem denominada SBDF1 ou método semi-implícito BDF (SBDF) de ordem 1.

3.2.2.2 Métodos Semi-Implícitos de Segunda Ordem

Os esquemas semi-implícitos de segunda ordem ($s = 2$) apresentam dois parâmetros (γ, c) e são descritos por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left[\left(\gamma + \frac{1}{2} \right) u^{n+1} - 2\gamma u^n + \left(\gamma - \frac{1}{2} \right) u^{n-1} \right] &= (\gamma + 1)R(u^n) - \gamma R(u^{n-1}) \\ &+ \left[\left(\gamma + \frac{c}{2} \right) Au^{n+1} + (1 - \gamma - c)Au^n + \frac{c}{2}Au^{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Para $(\gamma, c) = (\frac{1}{2}, 0)$, obtém-se um método implícito-explícito que combina o método de Crank-Nicolson para tratamento do termo difusivo e o método Adams-Bashforth para o termo reativo. As melhores propriedades de decaimento assintótico para $\gamma = \frac{1}{2}$ ocorrem quando $c = \frac{1}{8}$. Com $(\gamma, c) = (0, 1)$ chega-se ao método CNLF, composto por algo similar ao Crank-Nicolson para o termo de difusão e *Leap-frog* para a parte reativa (explícita).

Finalmente, a escolha $(\gamma, c) = (1, 0)$ resulta no método conhecido como SBDF2 (Ascher et al., 1995), o qual é dado por:

$$\frac{1}{2\Delta t} [3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}] = Au^{n+1} + 2R(u^n) - R(u^{n-1}). \quad (3.25)$$

Esta abordagem pode ser vista como a aplicação do método BDF de ordem 2 para o operador A , combinada com um tratamento explícito para o termo de reação.

3.2.2.3 Métodos Semi-Implicitos de Terceira Ordem

Uma possibilidade de parametrização dos esquemas com três passos ($s = 3$) e de terceira ordem leva à seguinte família de métodos parametrizada em termos de (γ, θ, c) :

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\left(\frac{1}{2}\gamma^2 + \gamma + \frac{1}{3} + \theta \right) u^{n+1} + \left(-\frac{3}{2}\gamma^2 - 2\gamma + \frac{1}{2} - \theta \right) u^n \right. \quad (3.26)$$

$$\left. + \left(\frac{3}{2}\gamma^2 + \gamma - 1 \right) u^{n-1} + \left(-\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{1}{6} \right) u^{n-2} \right] \quad (3.27)$$

$$= \left(\frac{\gamma^2 + 3\gamma}{2} + 1 + \frac{23}{12}\theta \right) R(u^n) - \left(\gamma^2 + 2\gamma + \frac{4}{3}\theta \right) R(u^{n-1}) \quad (3.28)$$

$$+ \left(\frac{\gamma^2 + \gamma}{2} + \frac{5}{12}\theta \right) R(u^{n-2}) \quad (3.29)$$

$$+ \left[\left(\frac{\gamma^2 + \gamma}{2} + c \right) Au^{n+1} + \left(1 - \gamma^2 - 3c + \frac{23}{12}\theta \right) Au^n \right. \quad (3.30)$$

$$\left. + \left(\frac{\gamma^2 - \gamma}{2} + 3c - \frac{4}{3}\theta \right) Au^{n-1} + \left(\frac{5}{12}\theta - c \right) Au^{n-2} \right]. \quad (3.31)$$

Assim como nos métodos anteriores, deseja-se $0 \leq \gamma \leq 1$ para evitar um aumento do erro de truncamento. Escolhendo $(\gamma, \theta, c) = (1, 0, 0)$ chega-se ao método SBDF3, dado por:

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{11}{6}u^{n+1} - 3u^n + \frac{3}{2}u^{n-1} - \frac{1}{3}u^{n-2} \right) = Au^{n+1} + 3R(u^n) - 3R(u^{n-1}) + R(u^{n-2}). \quad (3.32)$$

Conforme em Ascher et al. (1995), embora aplicações de $\gamma = 1$ com valores diferentes de zero para θ e c permitam a utilização de Δt maiores, degradam o forte decaimento assintótico. Para $\gamma \neq 1$, a escolha de $\theta = c = 0$ não é recomendada.

3.2.2.4 Métodos Semi-Implicitos de Quarta Ordem

Assim como ocorre nos métodos anteriores, uma família de métodos de quarta ordem pode ser obtida através da definição de quatro parâmetros. Uma dessas parametrizações leva ao método SBDF4, descrito como segue:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{25}{12}u^{n+1} - 4u^n + 3u^{n-1} - \frac{4}{3}u^{n-2} + \frac{1}{4}u^{n-3} \right) \\ = Au^{n+1} + 4R(u^n) - 6R(u^{n-1}) + 4R(u^{n-2}) - R(u^{n-3}). \end{aligned} \quad (3.33)$$

De maneira similar aos métodos anteriores, este método de quarta ordem pode ser visto como a aplicação do método BDF4 para o termo de difusão em conjunto com o termo de reação sendo aproximado de maneira explícita.

3.2.3 Inicialização dos métodos

Métodos semi-implícitos tornam-se alternativas interessantes capazes de gerar aproximações numéricas para problemas não lineares e com custo computacional reduzido. Em particular, métodos de passos múltiplos, como os métodos da família SBDF, demandam aproximações para os primeiros passos de tempo para se iniciar a integração temporal.

Diante disso, para os experimentos usando os métodos SBDF2, SBDF3 e SBDF4 foi utilizada uma estratégia em “cascata” para gerar aproximações para os passos de tempo iniciais. Por exemplo, para a formulação de mais alta ordem explorada FHCD4 foi utilizada o SBDF1 para gerar u^{n-3} , SBDF2 para gerar u^{n-2} e, finalmente, SBDF3 para obter u^{n-1} . Para os estudos de convergência, observou-se em estudos preliminares que tal estratégia obteve resultado muito próximo da utilização da própria solução exata interpolada para os passos iniciais. Destaca-se também que alguns experimentos com outras soluções exatas necessitaram da utilização de um intervalo de tempo (Δt) menor para os passos iniciais.

3.3 FORMULAÇÕES COMPLETAMENTE DISCRETAS

Nesta seção, a formulação hibridizada de elementos finitos apresentada na Seção 3.1.1 é aplicada em conjunto com os métodos descritos na seção anterior com o objetivo de se obter a formulação completamente discreta do problema.

Assim, definindo as seguintes formas bilineares $a(u_h, v_h)$, $b(\lambda_h, v_h)$, $c(\lambda_h, \mu_h)$ e a forma linear $f(v_h)$ dadas por:

$$a(u_h, v_h) = (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - \int_{\partial K} \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K u_h ds + \int_{\partial K} \beta u_h v_h ds, \quad (3.34)$$

$$b(\lambda_h, v_h) = \int_{\partial K} \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K \lambda_h ds - \int_{\partial K} \beta \lambda_h v_h ds, \quad (3.35)$$

$$c(\lambda_h, \mu_h) = \int_{\partial K} \beta \lambda_h \mu_h ds, \quad (3.36)$$

$$f(v_h) = (f, v_h)_K, \quad (3.37)$$

derivam-se as formulações híbridas completamente discretas (FHCD) as quais são resultado da combinação do método híbrido e dos métodos SBDF de ordem 1 a 4.

Formulação Híbrida Completamente Discreta 1 (FHCD1): Nesta abordagem, a FVH é aplicada com o método SBDF1. Dessa forma, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N - 1$), o problema consiste em: encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que

$$(u_h^{n+1}, v_h)_K + \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda_h^{n+1}, v_h)] = \Delta t f(v_h) + \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K + (u_h^n, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \quad (3.38a)$$

$$\sum_K [b(\mu_h, u_h^{n+1}) + c(\lambda_h^{n+1}, \mu_h)] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (3.38b)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 2 (FHCD2): Nesta abordagem, a FVH é aplicada com o método SBDF2. Assim, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), o problema consiste em: encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda_h^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{2}{3} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda_h^{n+1}, v_h)] &= \frac{2}{3} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{4}{3} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{2}{3} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{4}{3} (u_h^n, v_h)_K - \frac{1}{3} (u_h^{n-1}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (3.39a)$$

$$\sum_K [b(\mu_h, u_h^{n+1}) + c(\lambda_h^{n+1}, \mu_h)] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (3.39b)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 3 (FHCD3): A combinação da FVH com o método SBDF3 produz: para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), o problema consiste em: encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda_h^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{6}{11} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda_h^{n+1}, v_h)] &= \frac{6}{11} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{18}{11} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{18}{11} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{6}{11} \Delta t (R(u_h^{n-2}), v_h)_K \\ + \frac{18}{11} (u_h^n, v_h)_K - \frac{9}{11} (u_h^{n-1}, v_h)_K + \frac{2}{11} (u_h^{n-2}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (3.40a)$$

$$\sum_K [b(\mu_h, u_h^{n+1}) + c(\lambda_h^{n+1}, \mu_h)] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (3.40b)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 4 (FHCD4): De forma similar aos esquemas anteriores, a FVH é aplicada com o método SBDF4. Logo, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), o problema consiste em: encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda_h^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{12}{25} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda_h^{n+1}, v_h)] &= \frac{12}{25} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{48}{25} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{72}{25} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{48}{25} \Delta t (R(u_h^{n-2}), v_h)_K \\ - \frac{12}{25} \Delta t (R(u_h^{n-3}), v_h)_K + \frac{48}{25} (u_h^n, v_h)_K - \frac{36}{25} (u_h^{n-1}, v_h)_K + \frac{16}{25} (u_h^{n-2}, v_h)_K \\ - \frac{3}{25} (u_h^{n-3}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (3.41a)$$

$$\sum_K [b(\mu_h, u_h^{n+1}) + c(\lambda_h^{n+1}, \mu_h)] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (3.41b)$$

3.4 METODOLOGIA DE RESOLUÇÃO

Nesta seção é apresentada a metodologia de resolução usualmente aplicada para o método híbrido, a qual é conhecida como condensação estática. Apresenta-se a seguir,

somente a metodologia aplicada ao esquema FHCD1, uma vez que a aplicação nos esquemas FHCD2, FHCD3 e FHCD4 pode ser feita de forma análoga.

Para cada elemento $K \in \mathcal{T}_h$ e instante de tempo t_n (com $n = 0, \dots, N - 1$), a equação (3.38) pode ser reescrita de forma matricial como segue:

$$\mathbf{M}_K \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} + \mathbf{A}_K \mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda}^{n+1} = \mathbf{F}_K + \mathbf{R}_K, \quad (3.42a)$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T \mathbf{U}^{n+1} + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{C}_K \boldsymbol{\Lambda}^{n+1} = \mathbf{0}. \quad (3.42b)$$

onde \mathbf{U}^{n+1} e $\boldsymbol{\Lambda}^{n+1}$ representam os vetores: solução da variável primal e do multiplicador de Lagrange, respectivamente. As matrizes \mathbf{A}_K , \mathbf{B}_K e \mathbf{C}_K e o vetor \mathbf{F}_K são formados pela contribuição das formas bilineares a , b , c e o funcional linear f definidos em (3.34), (3.35), (3.36) e (3.37), respectivamente. A matriz \mathbf{M}_K corresponde à matriz de massa, enquanto o termo \mathbf{R}_K corresponde à discretização de um termo de reação, de forma similar ao que é feito com \mathbf{F}_K .

Dado que \mathbf{M}_K e \mathbf{A}_K são matrizes positivas definidas, pode-se manipular a equação (3.42a) para se obter

$$\mathbf{U}^{n+1} = (\mathbf{M}_K + \Delta t \mathbf{A}_K)^{-1} \Delta t (\mathbf{F}_K + \mathbf{R}_K - \mathbf{B}_K \boldsymbol{\Lambda}^{n+1}) + \mathbf{M}_K \mathbf{U}^n, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h. \quad (3.43)$$

Substituindo a equação (3.43) na equação (3.42b), obtém-se um sistema global associado somente ao multiplicador $\boldsymbol{\Lambda}$, o qual é dado por:

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left[\mathbf{B}_K^T (\mathbf{M}_K + \Delta t \mathbf{A}_K)^{-1} \Delta t \mathbf{B}_K - \mathbf{C}_K \right] \boldsymbol{\Lambda}^{n+1} = \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \mathbf{B}_K^T (\mathbf{M}_K + \Delta t \mathbf{A}_K)^{-1} [\Delta t (\mathbf{F}_K + \mathbf{R}_K) + \mathbf{M}_K \mathbf{U}^n], \quad \forall K \in \mathcal{T}_h. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Assim, após a resolução do sistema global da equação (3.44), o vetor \mathbf{U}^{n+1} é obtido para cada elemento a partir da equação (3.43) com o multiplicador $\boldsymbol{\Lambda}^{n+1}$ conhecido no passo $n + 1$.

3.5 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Os experimentos numéricos apresentados nesta seção foram obtidos a partir da execução de códigos implementados na linguagem de programação C++ tomando como base a biblioteca de elementos finitos *deal.II* (Bangerth et al., 2007).

Para a resolução dos sistemas de equações lineares gerados para o problema global foi utilizado o método do Gradiente Conjugado juntamente com o condicionador de Jacobi para acelerar a convergência. As implementações do método e do condicionador estão disponíveis na biblioteca *deal.II*. A tolerância relativa para o critério de parada foi de 10^{-12} . Já para os sistemas lineares dos problemas locais foram realizadas operações

algébricas com as matrizes locais, nas quais o método de Gauss-Jordan foi utilizado para a inversão de matrizes.

Destaca-se que as matrizes \mathbf{M}_K , \mathbf{A}_K , \mathbf{B}_K , \mathbf{C}_K oriundas das formas bilineares e consequentemente o termo $(\mathbf{M}_K + \Delta t \mathbf{A}_K)^{-1}$ não precisam ser recalculadas em cada passo de tempo, diminuindo o esforço computacional envolvido.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Este capítulo apresenta resultados numéricos obtidos a partir da solução dos problemas de reação-difusão através dos métodos numéricos descritos anteriormente. Inicialmente, são apresentados estudos de convergência que comprovam as taxas esperadas pelos métodos e, na sequência, são apresentados resultados de aplicações dos modelos de RD que descrevem a formação de padrões espaciais complexos.

Objetivando-se validar as formulações FHCD1, FHCD2, FHCD3 e FHCD4, foram realizadas simulações aplicadas ao MGS definido na equação (2.23), visando obter taxas de convergência ótimas e produzir alguns dos padrões caracterizados por Pearson (1993). Além disso, as formulações foram aplicadas em modelos simplificados de eletrofisiologia cardíaca com o intuito de demonstrar a robustez e eficiência dos métodos estudados quando sujeitos a uma diferente classe de problemas de reação-difusão.

Destaca-se que em todas as simulações usou-se multiplicadores de Lagrange contínuos, visando gerar sistemas com menos graus de liberdade que os obtidos com a utilização de multiplicadores descontínuos.

4.1 Estudos de Convergência

Para os testes de convergência computacionais apresentados a seguir, o modelo de MGS foi modificado considerando a inclusão de termos fontes f_u e f_w , da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \Delta u + F(1 - u) - uw^2 + f_u, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = d_2 \Delta w - (F + \bar{k})w + uw^2 + f_w, \quad (4.2)$$

e assim o modelo foi resolvido adotando-se a seguinte solução exata:

$$\begin{aligned} u_e(x, y, t) &= \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(t), \\ w_e(x, y, t) &= 2 \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(t), \end{aligned} \quad (4.3)$$

sendo que neste caso os termos fonte f_u e f_w são dados por:

$$\begin{aligned} f_u &= 4(\sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y))^3 + \sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) \\ &\quad + 2\pi \sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) \cos(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) - F, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} f_w &= -4(\sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y))^3 + 2 \sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) \\ &\quad + 4\pi \sin(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y) + 2 \cos(t) \cos(\pi x) \cos(\pi y). \end{aligned} \quad (4.5)$$

O problema foi resolvido em um domínio bidimensional $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ discretizado por malhas formadas por elementos quadrilaterais com $N_K \times N_K$ elementos. Os parâmetros do modelo MGS usados neste caso foram: $d_1 = d_2 = F = 1$, $\bar{k} = 0$. Para este estudo

considerou-se um tempo final de $T = 1$ e utilizou-se um espaçamento temporal $\Delta t = h^{\frac{k+1}{\theta}}$, onde θ denota a ordem do método de discretização no tempo. Para o método híbrido o seguinte valor do parâmetro de estabilização foi usado: $\beta_0 = 10$.

O resultados dos testes de convergência para os métodos FHCD1, FHCD2, FHCD3 e FHCD4 são apresentados nas Tabelas 2, 3, 4 e 5, respectivamente.

Tabela 2 – Erros e taxa de convergência para a FHCD1 ($\Delta t = h^2$).

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
1	4×4	1,4132e-02	-	3,4169e-02	-
1	8×8	3,4847e-03	2,02	8,5882e-03	1,99
1	16×16	8,6794e-04	2,01	2,1500e-03	2,00
1	32×32	2,1678e-04	2,00	5,3770e-04	2,00

Tabela 3 – Erros e taxa de convergência para a FHCD2 ($\Delta t = h$).

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
1	8×8	3,6400e-03	-	8,9793e-03	-
1	16×16	9,3498e-04	1,96	2,2053e-03	2,03
1	32×32	2,3815e-04	1,97	5,4522e-04	2,02
1	64×64	6,0160e-05	1,98	1,3551e-04	2,01

Tabela 4 – Erros e taxa de convergência para a FHCD3 ($\Delta t = h$).

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
2	16×16	8,5325e-05	-	8,0193e-05	-
2	32×32	1,1461e-05	2,90	1,1436e-05	2,81
2	64×64	1,4637e-06	2,97	1,4693e-06	2,96
2	128×128	1,8457e-07	2,99	1,8583e-07	2,98

Tabela 5 – Erros e taxa de convergência para a FHCD4 ($\Delta t = h$).

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
3	16×16	3,8143e-05	-	1,8276e-04	-
3	32×32	4,2245e-07	6,5	4,6935e-07	8,61
3	64×64	2,1015e-08	4,33	2,4771e-08	4,24
3	128×128	1,1188e-09	4,23	1,2968e-09	4,26

Nas Tabelas 2, 3, 4 e 5, nota-se o decaimento do erro de acordo com o refinamento da malha e ordem de convergência $O(h^{k+1})$. Esse valor é compatível com a taxa de convergência esperada, pois, os métodos híbridos de elementos finitos que fornecem taxas de convergência espacial de ordem $O(h^{k+1})$ foram combinados com esquemas de integração

temporal SBDF de ordem compatível. Note que, para o FHCD1 utilizou-se $\Delta t = h^2$ e para os demais casos FHCD2, FHCD3 e FHCD4 foi utilizado $\Delta t = h$.

Visando facilitar a comparação entre os métodos em termos de precisão e custo computacional, foram realizados experimentos numéricos com uma malha uniforme e fixa composta por 512×512 elementos quadrilaterais. Os seguintes parâmetros foram utilizados nesse estudo: $d_1 = d_2 = F = 1$, $\bar{k} = 0$, $\beta_0 = 10$, $T = 1$ e dessa vez refinando o passo de tempo Δt . Os resultados dos métodos FHCD1, FHCD2 FHCD3 e FHCD4 são apresentados a seguir nas Tabelas 6, 7, 8 e 9, respectivamente.

Tabela 6 – Erro e taxa de convergência para a FHCD1 com malha fixa de 512×512 elementos.

Δt	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem	CPU (s)
1,2500e-01	1,8184e-03	-	1,6827e-03	-	2,17e+02
6,2500e-02	8,7166e-04	1,0608	7,8598e-04	1,0982	4,32e+02
3,1250e-02	4,2660e-04	1,0309	3,7875e-04	1,0532	8,36e+02
1,5625e-02	2,1068e-04	1,0178	1,8547e-04	1,0301	1,58e+03
7,8125e-03	1,0431e-04	1,0142	9,1387e-05	1,0211	2,69e+03

Tabela 7 – Erro e taxa de convergência para a FHCD2 com malha fixa de 512×512 elementos.

Δt	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem	CPU (s)
1,2500e-01	3,7990e-04	-	5,0546e-04	-	2,82e+02
6,2500e-02	1,2218e-04	1,6366	1,7283e-04	1,5482	4,44e+02
3,1250e-02	3,8145e-05	1,6794	5,1420e-05	1,7490	7,77e+02
1,5625e-02	1,0956e-05	1,7998	1,4406e-05	1,8357	1,39e+03
7,8125e-03	3,5764e-06	1,6151	4,4967e-06	1,6797	2,24e+03

Tabela 8 – Erro e taxa de convergência para a FHCD3 com malha fixa de 512×512 elementos.

Δt	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem	CPU (s)
1,2500e-01	5,4443e-04	-	5,9977e-04	-	1,10e+03
6,2500e-02	7,8952e-05	2,7857	8,3631e-05	2,8423	1,86e+03
3,1250e-02	8,8139e-06	3,1631	9,2715e-06	3,1732	3,02e+03
1,5625e-02	9,9425e-07	3,1481	1,0422e-06	3,1532	4,52e+03
7,8125e-03	1,1651e-07	3,0932	1,2185e-07	3,0965	6,26e+03

A partir dos resultados anteriores das Tabelas 6, 7, 8 e 9, nota-se que para o mesmo nível de refinamento da malha os resultados demonstram o decaimento do erro de acordo com o refinamento de Δt e a taxa convergindo para o valor esperado, que é a ordem do método utilizado para a integração temporal.

Tabela 9 – Erro e taxa de convergência para a FHCD4 com malha fixa de 512×512 elementos.

Δt	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem	CPU (s)
1,2500e-01	3,9134e-04	-	3,9035e-04	-	2,53e+03
6,2500e-02	4,1792e-06	6,5491	5,3682e-06	6,1842	4,25e+03
3,1250e-02	9,7881e-07	2,0941	1,0307e-06	2,3808	6,86e+03
1,5625e-02	8,3558e-08	3,5502	8,6602e-08	3,5731	9,77e+03
7,8125e-03	5,8761e-09	3,8298	6,0473e-09	3,8400	1,30e+04

Vale observar que o custo computacional do caso FHCD2 é similar ao do caso FHCD1, porém o método obteve um resultado mais preciso. Para os demais casos (FHCD3 e FHCD4), à medida que aumenta-se a ordem do método, um maior tempo de processamento é observado, conforme esperado devido ao maior número de termos a serem calculados (equações (3.40) e (3.41)). Porém, percebe-se também uma melhora na precisão dos métodos de maior ordem em relação aos de menor ordem, uma vez que o erro final obtido é cada vez menor.

4.2 Aplicação em Formação de Padrões

Com o intuito de verificar a aplicabilidade e robustez das formulações apresentadas neste trabalho, realizaram-se simulações em dois domínios bidimensionais: (i) quadrado ($[0; 2, 5] \times [0; 2, 5]$) com uma malha uniforme com total de 65536 elementos quadrilaterais e (ii) circular com 2,5 de diâmetro e uma malha não estruturada formada por 65115 elementos quadrilaterais. Em todas as simulações a FHCD2 que considera o método SBDF2 foi aplicada utilizando elementos com aproximação polinomial bilinear para discretização espacial. Além disso, a seguinte configuração foi adotada nos experimentos: $d_1 = 2 \times 10^{-5}$, $d_2 = 1 \times 10^{-5}$, $\beta_0 = 100$, $\Delta t = 1$ e $T = 200000$.

A Figura 11 ilustra os padrões obtidos para alguns valores de F e \bar{k} . Seguindo o trabalho de Pearson (1993), os modelos da Figura 11 foram gerados a partir de condições iniciais definidas como segue: o sistema foi iniciado com um estado estacionário trivial homogêneo ($u = 1$ e $w = 0$). Em uma área quadrada de $0,2 \times 0,2$ localizada no centro do domínio, os valores foram alterados para $u = 0,5$ e $w = 0,25$ e um ruído aleatório da ordem de 10^{-4} foi adicionado nessa região para quebrar a simetria quadrada.

As Figuras 12 e 13 ilustram a evolução temporal dos padrões 11b e 11d, respectivamente. Assim como observado por Pearson (1993), a configuração espacial do padrão da Figura 12 é dependente do tempo e caracterizada pelo surgimento de faixas (paralelas ou cruzadas) que podem se ramificar e de “ilhas”, regiões estáveis com concentrações mais altas de u cercadas localmente por concentrações mais baixas de u .

Já o padrão da Figura 13 é caracterizado pela formação de regiões circulares com

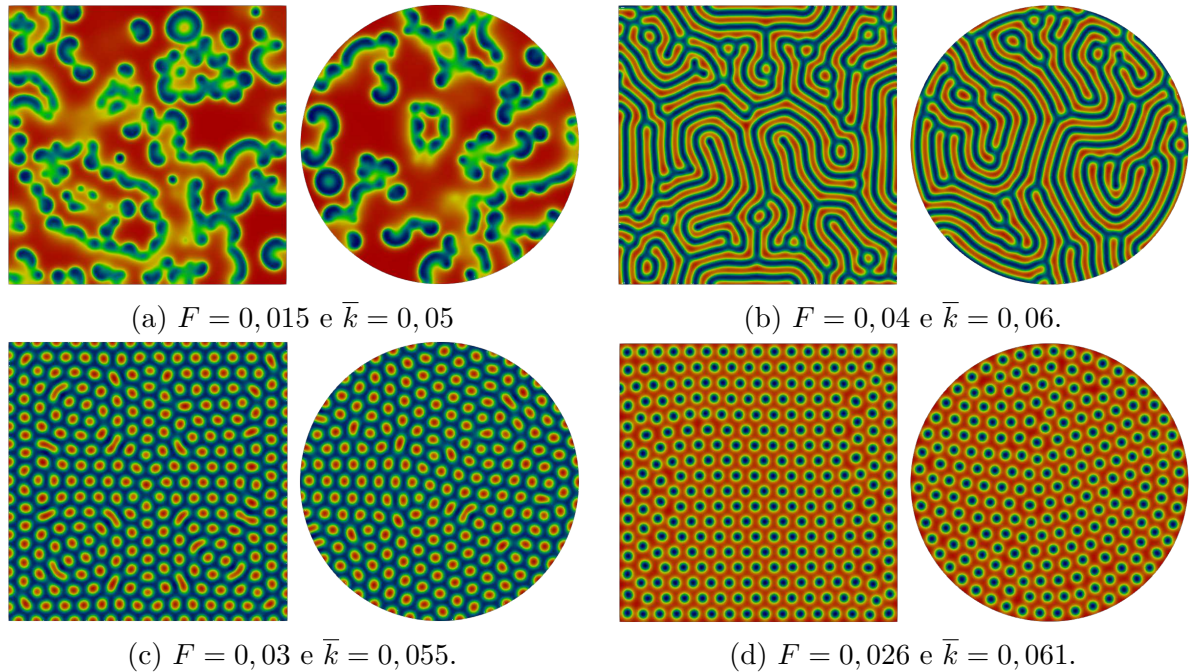


Figura 11 – Exemplo de padrões formados com o modelo de Gray-Scott. As figuras apresentam as concentrações da variável u em diferentes domínios (quadrado e círculo) para diferentes conjuntos de parâmetros.

baixa concentração de u e altas concentrações de v que se expandem até se dividirem. Esse comportamento é repetido até que as regiões circulares se multipliquem o suficiente para ocupar todo o domínio e chegar a um estado estacionário.

4.3 Aplicação em formação de padrão de Turing

Diferente dos padrões anteriores, que foram gerados devido a perturbação de amplitude finita inserida na condição inicial, a Figura 14 exibe um padrão gerado espontaneamente devido ao efeito da difusão. Para este padrão, foram adotadas as mesmas configurações estabelecidas para os padrões anteriores de domínio circular, porém para essa simulação, os valores de F e \bar{k} foram 0,06 e 0,0620 respectivamente e a condição inicial utilizada foi o estado estacionário *blue state* com a inserção de um ruído branco com 10^{-4} de amplitude. A mesma formulação numérica dos exemplos anteriores, a qual é baseada na formulação FHCD2 (SBDF2) com o parâmetro de estabilização $\beta_0 = 100$ foi utilizada para obter os resultados da Figura 14. As faixas de cores indicam os valores das concentrações das variáveis u (esquerda) e w (direita) conforme as escalas de cores ao lado de cada figura.

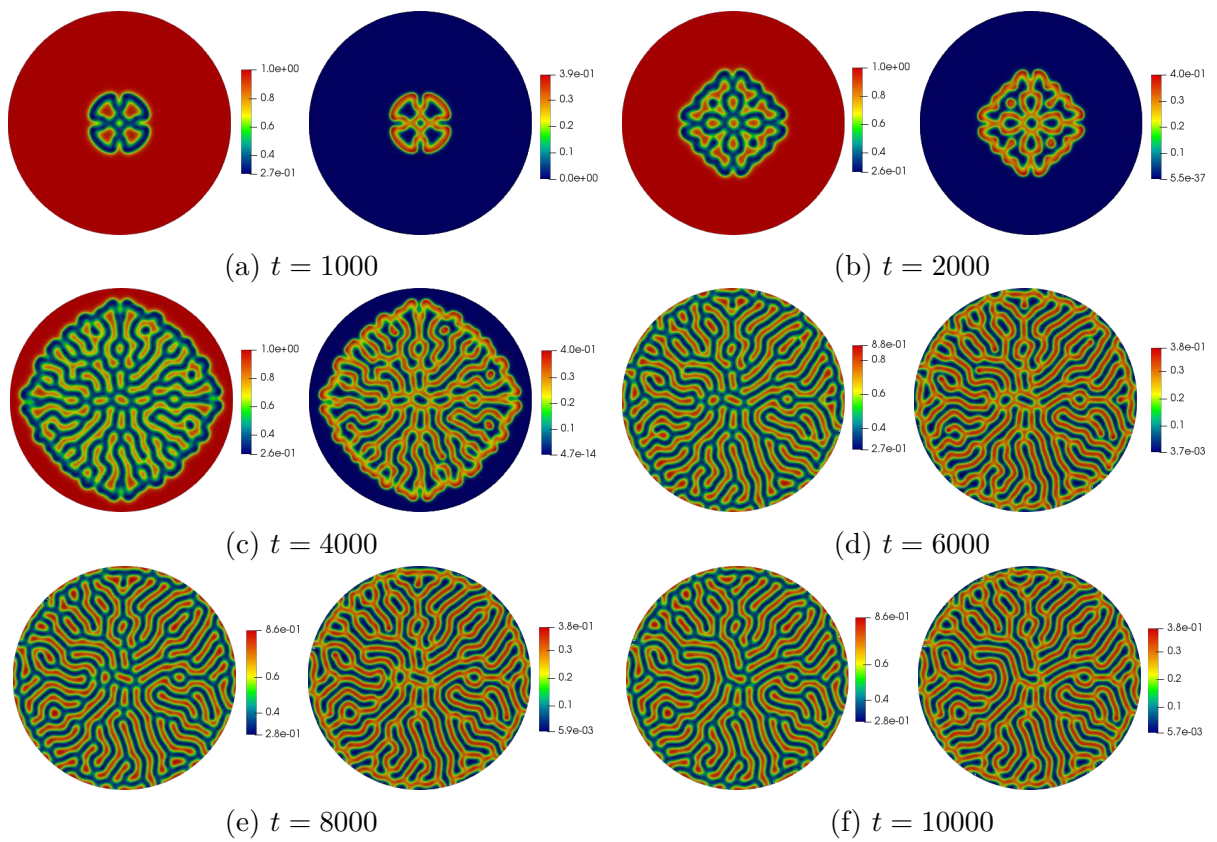


Figura 12 – Evolução temporal do padrão obtido com $F = 0,04$ e $\bar{k} = 0,06$. Para cada item de (a) até (f), são exibidos os valores das concentrações das variáveis u (esquerda) e w (direita), respectivamente.

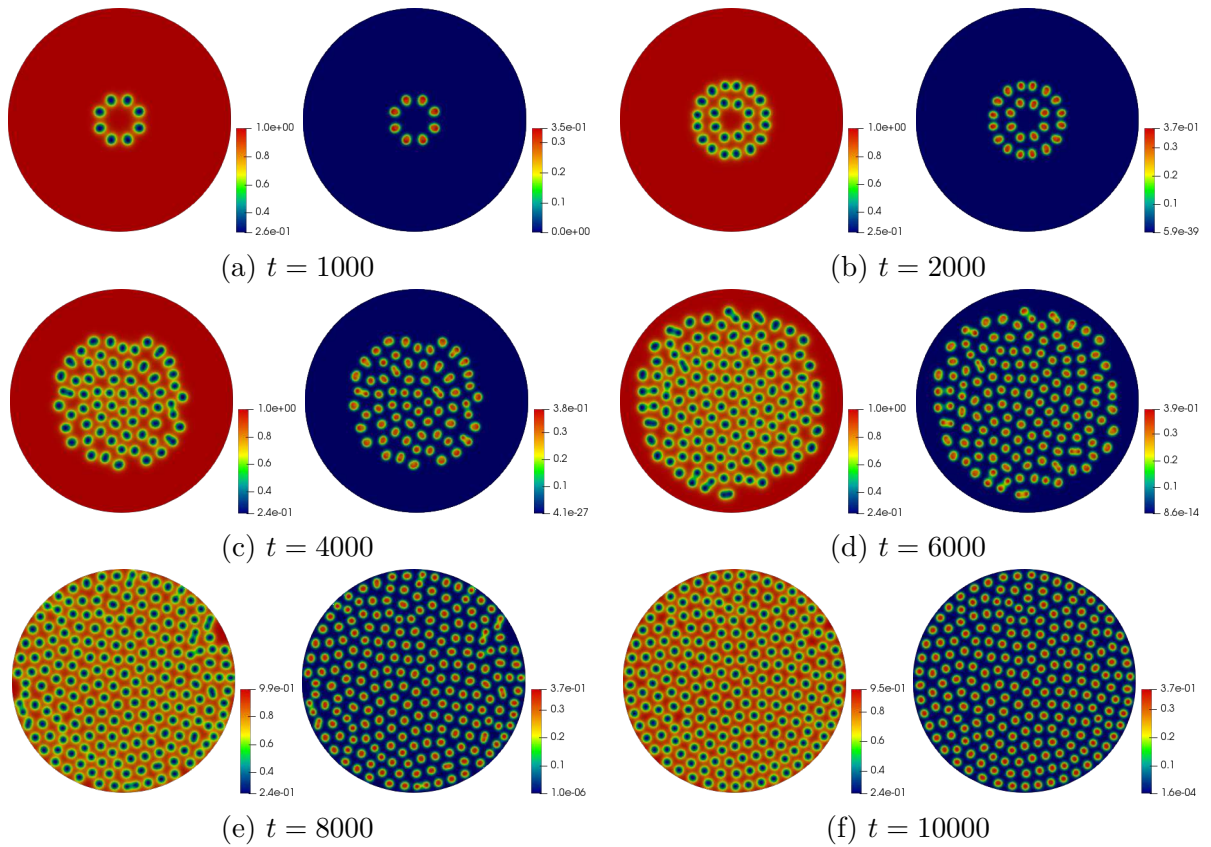


Figura 13 – Evolução temporal do padrão obtido com $F = 0,026$ e $\bar{k} = 0,061$. Para cada item, são exibidos os valores das concentrações das variáveis u e w , respectivamente.

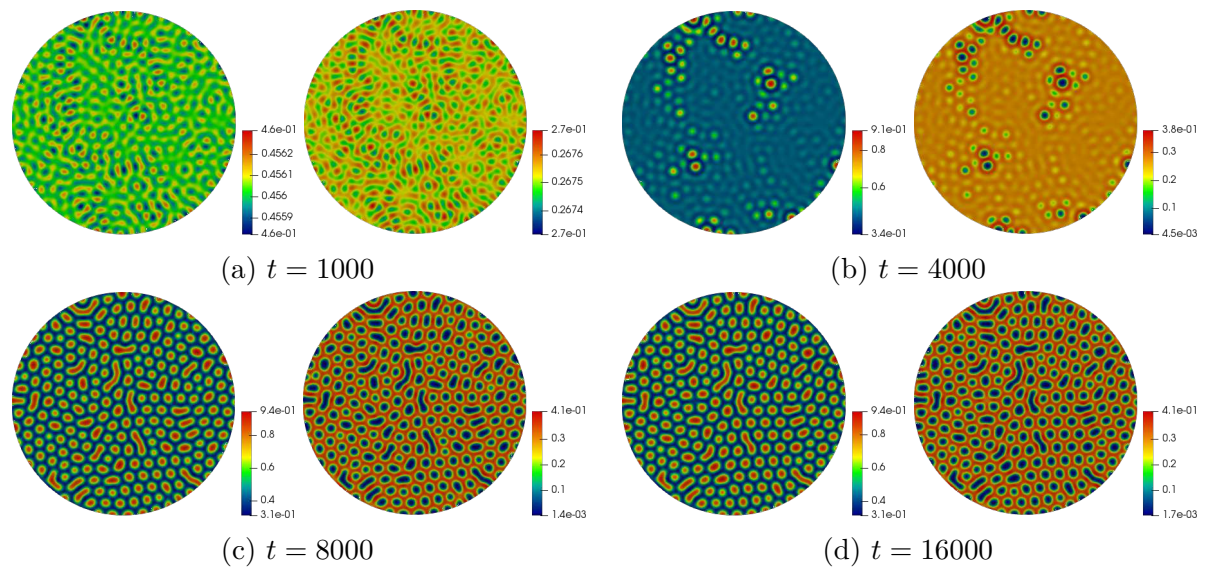


Figura 14 – Evolução temporal do padrão de Turing obtido com $F = 0,06$ e $\bar{k} = 0,0620$. Para cada item, são exibidos os valores das concentrações das variáveis u e w , respectivamente.

4.4 Aplicação em eletrofisiologia cardíaca

Objetivando-se apresentar a flexibilidade, aplicabilidade e robustez das formulações apresentadas neste trabalho, realizaram-se também simulações em um domínio bidimensional com o modelo do monodomínio acoplado ao modelo de FHN ($\mathcal{S} = w$), o que leva ao seguinte sistema oriundo das equações (2.24) e (2.25):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\chi C_m} \Delta u - \frac{1}{C_m} \left(u - \frac{1}{3} u^3 - w + I_{app} \right), \quad (4.6a)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \epsilon (u + a - bw). \quad (4.6b)$$

O experimento foi realizado em uma região quadrada 50×50 formada por uma malha uniforme com 256×256 elementos quadrilaterais. A formulação FHCD2 baseada no método SBD2 com a formulação de elementos finitos híbridos com aproximação polinomial bilinear foi utilizada para a simulação da atividade elétrica cardíaca apresentada neste exemplo. O sistema foi inicializado com a condição inicial $(u_0, w_0) = (-1, 19940803524; -0, 62426004055)$ em todo domínio e foram aplicadas condições de contorno do tipo Neumann homogêneo em todo o contorno. Além disso, adotou-se os seguintes parâmetros: $\chi = \epsilon = 0, 2$; $a = 0, 7$; $b = 0, 8$; $\beta_0 = 100$; tempo final de simulação $T = 50$; e $\Delta t = 0, 1$.

Para estimular o sistema e gerar uma onda de propagação elétrica, foi aplicado um primeiro estímulo elétrico através da atribuição de $u = 2 \in [0; 5] \times [0; 50]$ no intervalo de tempo de $t = 1$ até $t = 1, 3$. Posteriormente, foi aplicado um segundo estímulo através da atribuição de $u = 2 \in [15; 25] \times [15; 35]$ durante o intervalo de tempo de $t = 15$ até $t = 15, 3$. Esse protocolo de estimulação, quando configurado apropriadamente, é capaz de gerar ondas de reentrada (espirais) no tecido cardíaco.

Os resultados obtidos pela simulação são ilustrados na Figura 15, que exibe a formação e propagação da onda em diferentes passos de tempo. Através da mesma figura, observa-se que a aplicação do segundo estímulo elétrico provocou uma alteração no padrão da onda, que antes era plana e se propagava da esquerda para a direita, e que começou a propagar-se na forma de duas espirais (veja a Figura 15g até a Figura 15l).

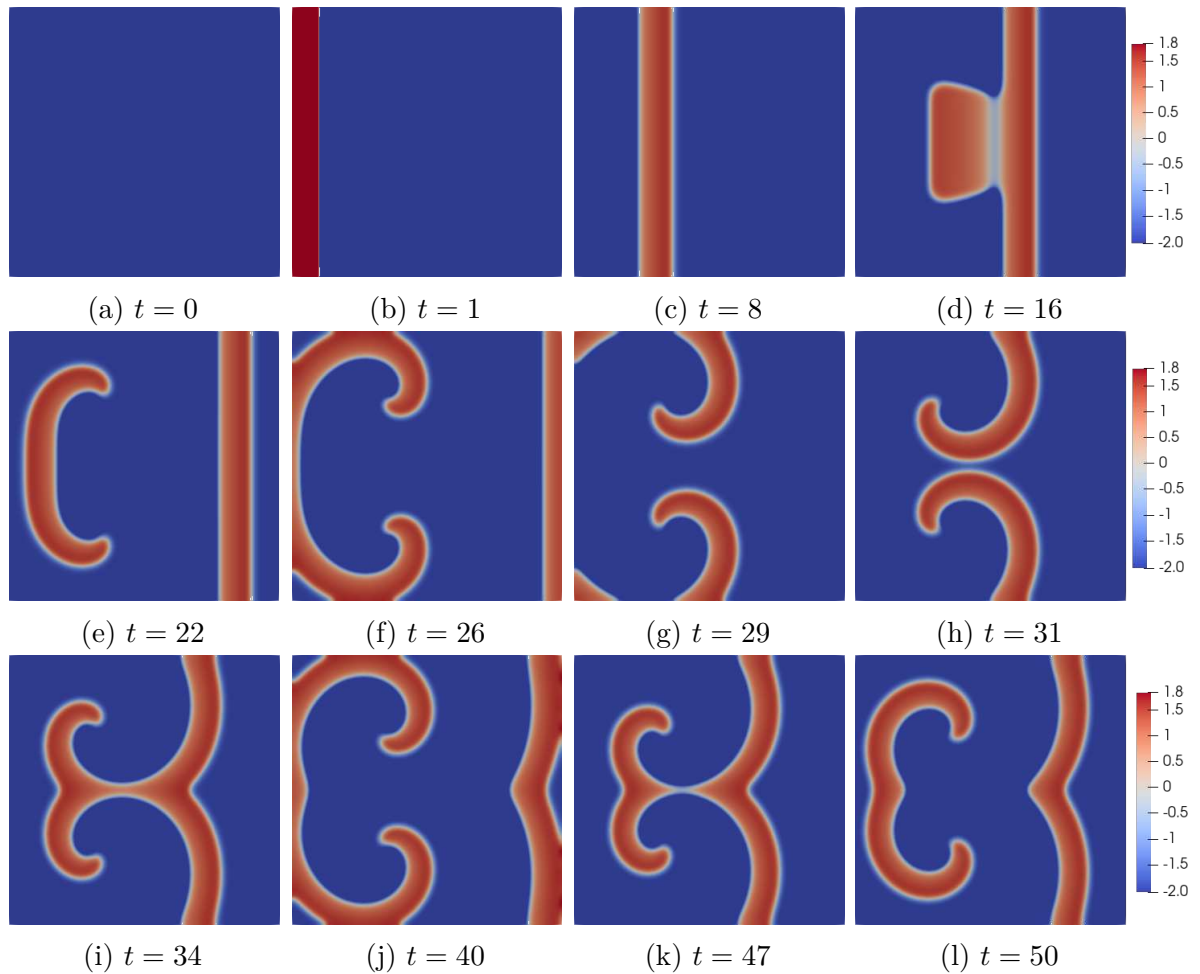


Figura 15 – Evolução temporal de simulação realizada com modelo bidimensional do monodomínio. O mapa de cores indica o valor do potencial transmembrânico u , variando de azul para $u \approx -1,2$ até vermelho com $u \approx 2$.

4.5 Discussão sobre os métodos

As simulações apresentadas anteriormente da formação de padrões espaciais complexos usando o modelo de Gray-Scott e da atividade elétrica cardíaca utilizando o modelo do monodomínio estão de acordo com resultados relatados na literatura especializada (Beaumont et al., 1998; Pearson, 1993; Rocha et al., 2020). Esses resultados corroboram a capacidade dos métodos numéricos baseados na formulação de elementos finitos híbrida combinada com os métodos SBDF, os quais foram apresentados neste trabalho, de gerar aproximações numéricas precisas e robustas para essa classe de problemas.

É importante destacar algumas características interessantes da abordagem utilizada neste trabalho. A solução do modelo de Gray-Scott até o estado estacionário requer a simulação por um grande número de passos de tempo, o que conseqüentemente, resulta em um grande custo computacional. Logo, a utilização de um método de alta ordem, que permite a utilização de passos de tempos maiores, pode ser uma estratégia interessante para se reduzir este custo e alcançar o estado estacionário de forma mais eficiente.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como principal objetivo apresentar formulações híbridas de elementos finitos em combinação com os métodos SBDF para discretização temporal, visando construir aproximações numéricas de alta ordem e com custo computacional reduzido para problemas transientes de reação-difusão. O conceito de métodos híbridos está relacionado à imposição da continuidade na interface dos elementos a partir da adição do multiplicador de Lagrange. Assim, tal abordagem produz problemas locais compostos pelas variáveis de interesse definidos no nível do elemento, que quando eliminados utilizando a estratégia de condensação estática, dá origem a um sistema global que possui somente os graus de liberdade do multiplicador, definido sobre as arestas dos elementos. Para a integração temporal, foi introduzida a família de métodos semi-implícitos denominada SBDF, caracterizada por permitir tratar a parte difusiva implicitamente e a parte reativa, em geral não linear, explicitamente. Dessa forma, em cada passo de tempo são resolvidos apenas sistemas lineares, reduzindo o custo computacional associado a sistemas não lineares. Em seguida, os métodos híbridos de elementos finitos são introduzidos e formulações variacionais híbridas foram apresentadas. Para a discretização temporal, foram apresentados métodos semi-implícitos capazes de aproximar a variável temporal presente na maioria dos fenômenos modelados por equações de reação-difusão. Por fim, são apresentadas as formulações completamente discretas geradas a partir da combinação dos métodos híbridos com os métodos SBDF e uma metodologia de resolução foi proposta.

Todas as formulações híbridas completamente discretas (FHCD1, FHCD2, FHCD3 e FHCD4) foram submetidas às simulações numéricas, objetivando a validação das taxas de convergência propostas na literatura e na aplicação em modelos matemáticos oriundos de fenômenos distintos. Para tanto, o Capítulo 2 descreve, em resumo, o modelo de Gray-Scott e modelos da eletrofisiologia cardíaca através do modelo de Fitz-Hugh-Nagumo e do monodomínio. Os resultados foram destacados no Capítulo 4, primeiramente através de estudos de convergência no espaço e no tempo, que validaram as formulações desenvolvidas apresentando taxas ótimas de convergência, inclusive para aproximações de alta ordem. Em seguida, foram apresentados os resultados obtidos na aplicação em formação de padrões com o MGS. Assim como em Pearson (1993), observou-se a capacidade do MGS em produzir padrões espaciais complexos de diferentes formas e comportamentos a partir da combinação de diferentes valores para os parâmetros F e \bar{k} e condições iniciais. Também observou-se a geração de padrões como efeito da difusão, denominado padrão de Turing. Por fim, as formulações foram submetidas ao modelo do monodomínio acoplado ao MFHN, novamente gerando resultados esperados, como encontrados na literatura (Rocha et al., 2020). Nesse ponto, destaca-se a flexibilidade da metodologia de resolução estudada, através da facilidade de implementação e adaptação dos métodos para fornecer aproximações precisas e de alta ordem para problemas de fenômenos distintos.

Todos os resultados obtidos contribuem para corroborar a capacidade dos métodos numéricos baseados na formulação híbrida de elementos finitos de gerar aproximações numéricas precisas e robustas para problemas de reação-difusão. A partir destes resultados, surgem as seguintes possibilidades de trabalhos futuros:

- Realizar a análise numérica dos métodos propostos;
- Estudar o efeito do parâmetro de estabilização β , em diferentes cenários, buscando estimar valores ótimos;
- Aplicar as formulações propostas em modelos cardíacos de bidomínio;
- Aplicar as formulações propostas para resolver problemas de outros fenômenos complexos.

REFERÊNCIAS

- Natalia CB Arruda, Abimael FD Loula, and Regina C Almeida. Locally discontinuous but globally continuous Galerkin methods for elliptic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255:104–120, 2013.
- Uri M Ascher, Steven J Ruuth, and Brian TR Wetton. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(3):797–823, 1995.
- Wolfgang Bangerth, Ralf Hartmann, and Guido Kanschat. deal.II - a general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(4):24, 2007.
- Jacques Beaumont, Nicolas Davidenko, Jorge M Davidenko, and José Jalife. Spiral waves in two-dimensional models of ventricular muscle: formation of a stationary core. *Biophysical Journal*, 75(1):1–14, 1998.
- Bernardo Cockburn and Jayadeep Gopalakrishnan. New hybridization techniques. *GAMM-Mitteilungen*, 28(2):154–182, 2005.
- Bernardo Cockburn, George E Karniadakis, and Chi-Wang Shu. *Discontinuous Galerkin methods: theory, computation and applications*, volume 11. Springer Science & Business Media, 2012.
- Michel Crouzeix. Une méthode multipas implicite-explicite pour l’approximation des équations d’évolution paraboliques. *Numerische Mathematik*, 35(3):257–276, 1980.
- Richard FitzHugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical journal*, 1(6):445, 1961.
- Baudouin Fraeijns de Veubeke. Displacement and equilibrium models in the finite element method. *Stress analysis*, pages chapter–9, 1965.
- Serdar Göktepe, Jonathan Wong, and Ellen Kuhl. Atrial and ventricular fibrillation: computational simulation of spiral waves in cardiac tissue. *Archive of Applied Mechanics*, 80(5):569–580, 2010.
- P Gray and SK Scott. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: isolas and other forms of multistability. *Chemical Engineering Science*, 38(1):29–43, 1983.
- P Gray and SK Scott. Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, 89(1):22–32, 1985.

- Robert J Guyan. Reduction of stiffness and mass matrices. *AIAA journal*, 3(2), 1965.
- Isaac Harari. Stability of semidiscrete formulations for parabolic problems at small time steps. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(15-16):1491–1516, 2004.
- Shahid Hasnain, Muhammad Saqib, and Nawaf Al-Harbi. Finite difference implicit schemes to coupled two-dimension reaction diffusion system. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 6(04):737, 2018.
- Thomas JR Hughes. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Courier Corporation, 2012.
- Iury Igreja and Abimael FD Loula. Stabilized velocity and pressure mixed hybrid DGFEM for the stokes problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 112(7):603–628, 2017.
- Iury Higor Aguiar Igreja. *Métodos de elementos finitos híbridos estabilizados para escoamentos de Stokes, Darcy e Stokes-Darcy acoplados*. PhD thesis, PhD thesis, Laboratório Nacional de Computacao Científica, Petrópolis, Brasil, 2015.
- José Jalife. Ventricular fibrillation: mechanisms of initiation and maintenance. *Annual review of physiology*, 62(1):25–50, 2000.
- José Jalife, Mario Delmar, Justus Anumonwo, Omer Berenfeld, and Jerome Kalifa. *Basic cardiac electrophysiology for the clinician*. John Wiley & Sons, 2011.
- W Mazin, KE Rasmussen, Erik Mosekilde, Pierre Borckmans, and Guy Dewel. Pattern formation in the bistable Gray-Scott model. *Mathematics and Computers in Simulation*, 40(3-4):371–396, 1996.
- JD Murray. *Mathematical biology II: spatial models and biomedical applications*. Springer New York, 2001.
- Jinichi Nagumo, Suguru Arimoto, and Shuji Yoshizawa. An active pulse transmission line simulating nerve axon. *Proceedings of the IRE*, 50(10):2061–2070, 1962.
- Akira Okubo et al. *Diffusion and ecological problems: mathematical models*. 1980.
- Rafael Sachetto Oliveira, Sergio Alonso, Fernando Otaviano Campos, Bernardo Martins Rocha, João Filipe Fernandes, Titus Kuehne, and Rodrigo Weber Dos Santos. Ectopic beats arise from micro-reentries near infarct regions in simulations of a patient-specific heart model. *Scientific reports*, 8(1):1–14, 2018.
- John E Pearson. Complex patterns in a simple system. *Science*, 261(5118):189–192, 1993.

- Ricardo Reis Pereira. *Métodos de Diferenças Finitas para Problemas de Difusão e Reação Não Lineares*. PhD thesis, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2019.
- Jelena Raspopovic, Luciano Marcon, Laura Russo, and James Sharpe. Digit patterning is controlled by a bmp-sox9-wnt turing network modulated by morphogen gradients. *Science*, 345(6196):566–570, 2014.
- Pierre-Arnaud Raviart and Jean-Marie Thomas. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. In *Mathematical aspects of finite element methods*, pages 292–315. Springer, 1977.
- Bernardo Martins Rocha, Rodrigo Weber Dos Santos, Iury Igreja, and Abimael FD Loula. Stabilized hybrid discontinuous Galerkin finite element method for the cardiac monodomain equation. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 36(7):e3341, 2020.
- Lee A Segel and Julius L Jackson. Dissipative structure: an explanation and an ecological example. *Journal of theoretical biology*, 37(3):545–559, 1972.
- Gilbert Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM journal on numerical analysis*, 5(3):506–517, 1968.
- Alan Mathison Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, 237(641):37–72, 1952.
- Rongpei Zhang, Xijun Yu, Jiang Zhu, and Abimael F. D. Loula. Direct discontinuous Galerkin method for nonlinear reaction–diffusion systems in pattern formation. *Applied Mathematical Modelling*, 38(5-6):1612–1621, 2014.
- Jianfeng Zhu, Yong-Tao Zhang, Stuart A Newman, and Mark Alber. Application of discontinuous Galerkin methods for reaction-diffusion systems in developmental biology. *Journal of Scientific Computing*, 40(1):391–418, 2009.