

Emmanuel Felix Yarleque Medina

**Método do Fator de Integração Implícito para Problemas 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 grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Prof. D.Sc. Luis Paulo da Silva Barra

Juiz de Fora

2016

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Yarleque Medina, Emmanuel Felix.

Método do Fator de Integração Implícito para Problemas de Reação-Difusão / Emmanuel Felix Yarleque Medina. -- 2016.  
78 p.

Orientador: Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Luis Paulo da Silva Barra

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia. Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, 2016.

1. Método do fator de integração. 2. Método das diferenças finitas. 3. Problemas de Reação-Difusão. I. Magalhães Toledo, Elson , orient. II. da Silva Barra, Luis Paulo, coorient. III. Título.

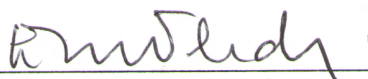
Emmanuel Felix Yarleque Medina

Método do Fator de Integração Implícito para Problemas de Reação-Difusão

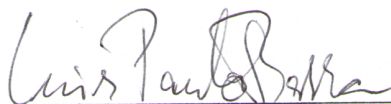
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 14 de Setembro de 2016.

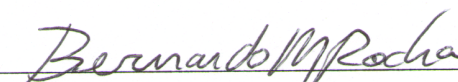
BANCA EXAMINADORA



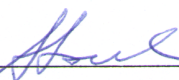
Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo - Orientador  
LNCC / Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. D.Sc. Luis Paulo da Silva Barra - Coorientador  
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. D.Sc. Bernardo Martins Rocha  
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. D.Sc. Abimael Fernando Dourado Loula  
LNCC

*Dedico este trabalho a minha  
mãe e a todos que direta ou  
indiretamente contribuíram para  
sua realização.*



## AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, à Deus por sempre me dar forças para lutar por meus objetivos e nunca me abandonar; à minha mãe, meu pai e toda minha família que sempre me encorajaram em tudo. Aos amigos do Programa da Modelagem Computacional pela convivência, à Y.G. por ser minha inspiração, ao meu orientador professor Dr. Elson Magalhães Toledo, que é quase como um pai para mim e sem o qual esse trabalho seria inimaginável e ao meu co-orientador o professor Dr. Luis Paulo da Silva Barra, que me ajudou na realização do código e de vários apertos durante essa empreitada.

À CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, e CNPq pelo apoio financeiro

*‘Deus não nos fez perfeitos e não  
escolhe os capacitados, capacita  
os escolhidos.’  
Albert Einstein*

## RESUMO

Problemas de Reação-Difusão são modelos matemáticos que descrevem fenômenos observados em diversas aplicações da Física, Química, Ciência dos Materiais e Biologia. Nesses casos, podemos utilizar o método do fator de integração implícito (IIF) que desacopla os termos de difusão e de reação para assim calcular explicitamente os termos difusivos e tratar de forma implícita os termos reativos. O custo computacional do IIF (armazenamento e processamento) torna este método não muito atrativo e, uma das abordagens para contornar este problema, é empregar estratégias em aproximações utilizando o subespaço de Krylov para reduzir as operações aritméticas para a avaliação da exponencial da matriz envolvida neste processo. Outra abordagem consiste em trabalhar com a representação compacta da discretização espacial e, assim, obter o método do fator de integração implícita compacto, com menores custos de armazenamento e processamento do àqueles do método IIF. No presente trabalho, apresentamos este procedimento junto com experimentos computacionais em domínios bi e tridimensionais para diferentes equações com o objetivo de testar a eficiência de cada um dos métodos. Os exemplos de aplicação do procedimento são problemas de reação-difusão linear, de Allen-Cahn, de Ginzburg Landau, de Schnackenberg e de FitzHugh-Nagumo discutidos com o objetivo de demonstrar a aplicabilidade do método.

**Palavras-chave:** Fator de Integração Implícito. Fator de Integração Implícito de Krylov. Fator de Integração Implícito Compacto. Reação-Difusão.

## ABSTRACT

Reaction-Diffusion problems are mathematical models that describe phenomena observed in various applications of Physics, Chemistry, Materials Science and Biology. In such cases, we can use the method of implicit integration factor (IIF), which decouples the terms of diffusion and reaction in order to calculate explicitly the diffusive terms and treat implicitly reactive terms. The computational cost of the IIF (storage and processing) makes this method not very attractive and one of the approaches to work around this problem is to employ strategies approaches using the Krylov subspace approximations to reduce arithmetic operations for the evaluation of the exponential matrix involved in this process. Another approach is to work with the compact representation of the spatial discretization to obtain the compact implicit integration factor method, with reduced costs of storage and processing than those of IIF method. In this paper, we present this procedure along with computational experiments in two and three dimensional domains for different equations in order to test the effectiveness of each method. Application examples of the procedure are linear reaction-diffusion problems, Allen-Cahn, Ginzburg Landau Schnackenberg FitzHugh-Nagumo and discussed in order to demonstrate the applicability of the method.

**Keywords:** Implicit Integration Factor. Krylov Implicit Integration Factor. Implicit Integration Factor Compact. Reaction-Diffusion.

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	10
1.1	Objetivos .....	11
1.2	Organização do trabalho .....	12
2	MÉTODO DO FATOR DE INTEGRAÇÃO .....	13
2.1	Introdução .....	13
2.1.1	<i>Discretização Espacial</i> .....	13
2.2	Método de Fator de Integração Implícito - IIF .....	16
2.3	Método do Fator de Integração Implícito de Krylov - KIIF .....	21
2.4	Método do Fator de Integração Implícito Compacto - CIIF .....	23
2.5	Fator de Integração Implícito Tridimensional .....	25
2.6	Implementação Computacional .....	28
3	EXEMPLOS NUMÉRICOS .....	31
3.1	Introdução .....	31
3.2	Modelo de Reação-Difusão Linear .....	31
3.3	Modelo de Allen-Cahn .....	34
3.4	Modelo de Ginzburg-Landau .....	36
3.5	Modelo de FitzHugh-Nagumo .....	43
3.6	Modelo de Schnakenberg .....	46
3.6.1	<i>Estudo de Turing para o modelo de Schnakenberg</i> .....	48
3.7	Modelo Tridimensional .....	51
4	CONCLUSÕES .....	53
4.1	Trabalhos Futuros .....	54
	APÊNDICES .....	54
	REFERÊNCIAS .....	75

# 1 INTRODUÇÃO

São denominados sistemas de reação-difusão sistemas que contemplam a difusão, associada a dispersão das substâncias, e o termo de reação que descreve as interações de uma espécie, consigo mesma ou com outras espécies [1], [2].

Sistemas de equações de reação-difusão são utilizados para modelar diversos fenômenos, dentre eles os biológicos que envolvem a dispersão e a interação entre indivíduos, células ou espécies químicas em uma determinada região [3], [4].

A formação de padrões é um fenômeno observado em muitos campos da física, química, ciência dos materiais, assim como na biologia, e o estudo da evolução espontânea e do surgimento de padrões tem sido foco de pesquisa em várias áreas há muitas décadas. Os padrões aqui referidos são os que ocorrem no espaço-tempo numa escala macroscópica. A formação de tais padrões espaço-temporais e a decorrente quebra de simetrias espaciais observadas na natureza, pode ser considerada como resultado de instabilidades causadas por processos não-lineares em condições de não-equilíbrio (Instabilidade de Turing [5]).

No estudo da Instabilidade de Turing trabalhos relacionados foram feitos por Vanegas et al. [6] e Rodrigues et al. [7] nos quais foram analisadas as condições necessárias para se ter diferentes padrões através de uma perturbação nos pontos de equilíbrio para os modelos Schnakenberg, Coagulação e Glicolise, fazendo uso de diferentes estratégias para a solução dos problemas de reação-difusão. O trabalho de Vanegas et al. [6] utiliza uma discretização espacial por elementos finitos clássicos e o método de Euler implícito para evoluir o problema de valor inicial (PVI) resultante. Por outro lado Rodrigues et al. [7] empregaram uma discretização espacial por diferenças centradas de segunda ordem e resolvem o PVI através da versão em Python (Scipy) da rotina LSODE do pacote ODEPACK que utiliza uma estratégia adaptativa envolvendo os métodos BDF, Adams-Bashforth e Adams-Moulton.

No presente trabalho tratamos de uma família de métodos que utilizam o conceito de fator de integração, comumente utilizado na solução de equações diferenciais ordinárias. Assim, apresentamos aqui a utilização deste método, com vistas a obtenção de procedimentos numéricos que tratam os termos difusivos explicitamente e os termos de reação não-lineares implicitamente, com essas duas aproximações desacopladas. Desta

forma, obtemos o método de fator de integração implícito (IIF), o método de fator de integração implícito de Krylov (KIIF) e o método de fator de integração implícito compacto (CIIF).

Na atualidade são utilizados pacotes de tratamentos para a solução de problemas de valor inicial tais como SUNDIALS [8], ROWMAP [9] entre outros. Estes pacotes resolvem as equações diferenciais por diversos métodos, dentre eles o método implícito de Runge-Kutta, método Predictor-Corretor e método Exponencial-Krylov. Em particular o pacote ROWMAP utiliza os métodos Exponencial-Krylov baseado no método de integração Exponencial-W (cujos detalhamentos podem ser encontrados na referência [10]) para a resolução eficiente das equações diferenciais ordinárias de grande porte.

Os modelos de Allen-Cahn, Ginzburg-Landau, FitzHugh-Nagumo e Schnakenberg, governados por equações do tipo reação-difusão são abordados como exemplos de aplicação. O modelo de Schnakenberg [11] que apresenta a instabilidade de Turing, é utilizado para modelar reações químicas denominadas autocatalíticas, enquanto o modelo de Allen-Cahn é muito utilizado em processamento de imagens [12], [13] e o modelo de Ginzburg-Landau é utilizado para descrever ou tratar de problemas envolvendo supercondução [14], e entendimento de fibras óticas [15]. Finalmente, simulamos o modelo de FitzHugh-Nagumo muito empregado para modelar a propagação da corrente elétrica no coração e nas células neurais [16].

## 1.1 Objetivos

O objetivo do presente trabalho é apresentar uma abordagem numérica para problemas clássicos de reação-difusão, ilustrando algum dos mais diversos tipos de padrões apresentados na literatura, bem como discutindo aspectos da precisão, da ordem de convergência e do custo computacional para cada método tratado.

A estratégia numérica aqui adotada utiliza o método de diferenças finitas centrais de segunda ordem para a discretização espacial do problema e para a solução do PVI resultante serão considerados três métodos da família de fator de integração IIF, KIIF e CIIF. Estes métodos foram implementados através da utilização do pacote *ExpM* escrito em Matlab para determinar as exponenciais das matrizes geradas pela discretização do operador Laplaciano. O pacote *Expokit* [17], desenvolvido nas linguagens Fortran e

Matlab, é empregado na implementação do método do subespaço de Krylov para reduzir a dimensão da matriz da discretização espacial.

Serão analisadas as condições para ocorrência da instabilidade de Turing no modelo de Schnakenberg conforme apresentado em Rodrigues et al. [7] e Vanegas et al [6].

Os modelos apresentados neste trabalho são utilizados para verificar a implementação numérica e os resultados aqui obtidos são comparados com aqueles encontrados na literatura.

## 1.2 Organização do trabalho

Esta dissertação encontra-se organizada em quatro capítulos, onde além do presente capítulo, encontram-se outros três, conforme descreve-se seguir. No Capítulo 2 abordam-se os métodos de fator de integração para o caso bidimensional e tridimensional para a solução do problema de reação-difusão. Ainda neste capítulo é apresentado o tratamento computacional para a resolução do PVI resultante. No Capítulo 3 são apresentados uma breve introdução aos problemas modelos a serem resolvidos e a parte numérica da implementação dos métodos aqui tratados, comparando resultados aqui obtidos com resultados da literatura, assim como precisão, ordem de convergência e custo computacional. Finalmente, no Capítulo 4 são discutidos os resultados obtidos apresentando algumas conclusões e abordando-se algumas perspectivas de trabalhos futuros dando continuidade ao que foi realizado até o momento. Além disso, como complemento aos demais capítulos incluímos um apêndice A no qual mostra-se a obtenção da equação geral de reação-difusão, as equações de Euler-Lagrange para o modelo de Allen-Cahn, a teoria do método do subespaço de Krylov e a conceituação geral com exemplos de aplicabilidade da Lei de Ação das Massas e Lei de Conservação.



# 2 MÉTODO DO FATOR DE INTEGRAÇÃO

## 2.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos inicialmente alguns aspectos dos problemas a serem tratados envolvendo sua discretização espacial e as diversas estratégias utilizadas nas suas soluções numéricas. Consideremos a seguinte equação geral de reação-difusão:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}(\mathbf{u}), \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{u}$  representa, no caso de reações químicas, as concentrações de  $s$  diferentes substâncias,  $D$  é uma matriz de difusão diagonal constante,  $\nabla^2$  representa o operador de Laplace, ou Laplaciano, associado à difusão das concentrações de cada uma das substâncias, e  $\mathbf{F}(\mathbf{u})$  descreve as relações de interação entre as concentrações dessas substâncias que também são chamadas de reações cinéticas. Para a adequada solução destes problemas são também necessárias condições iniciais e de contorno, que se supõem conhecidas.

### 2.1.1 Discretização Espacial

O primeiro passo para achar a solução numérica da equação 2.1 é reduzir o modelo estudado a um PVI (problema de valor inicial), através da introdução das aproximações para as derivadas espaciais. A discretização espacial considerada no presente trabalho é realizada através da aproximação por diferenças finitas centrais de segunda ordem para o operador de Laplace. Tendo em vista o principal foco do trabalho, só serão aqui abordados problemas descritos em domínios retangulares. Considera-se  $N_x$  como o número de pontos em  $x$ ,  $N_y$  é o número de pontos em  $y$  e que podem incluir ou não os pontos localizados no contorno conforme sejam as condições de contorno do problema.

Usando o operador de Laplace para representar um ponto genérico  $j$  do domínio,

avaliamos este usando a seguinte aproximação:

$$\Delta u(x_j) = \nabla^2 u(x_j) \approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{j+N_x} - 2u_j + u_{j-N_x}}{\Delta y^2}. \quad (2.2)$$

Onde através de um único índice, considerando seu crescimento a numeração dos pontos do domínio retangular discretizado foi feita, da esquerda para direita e de baixo para cima como mostrado na figura.

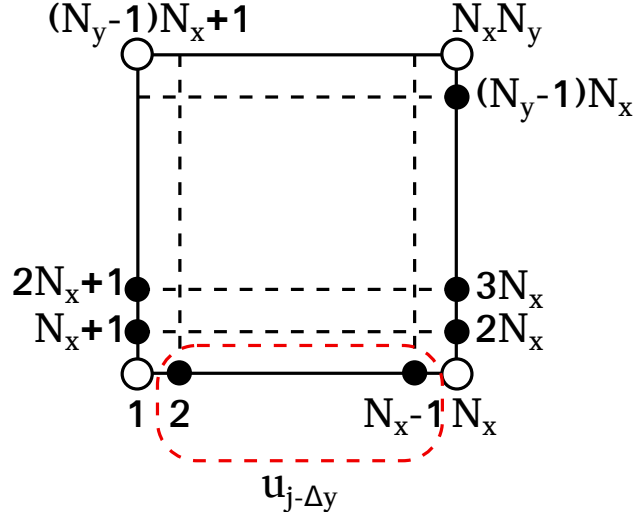


Figura 2.1: Malha retangular regular

A condição de fronteira adotada neste trabalho estabelece que o fluxo deverá ser zero através da fronteira (condição de Neumann).

**Tratamento do Contorno Inferior:** Note que o ponto  $u_{j-\Delta y}$  não pertence ao domínio do problema. Adotando o esquema de diferenças centrais de segunda ordem para discretizar as condições de contorno inferior para  $\frac{\partial u}{\partial y}$ , com  $j = 2, 3, \dots, N_x - 1$ , temos:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_j \approx \frac{u_{j+N_x} - u_{j-\Delta y}}{2\Delta y} = 0 \quad (2.3)$$

$$\Rightarrow u_{j-\Delta y} = u_{j+N_x}. \quad (2.4)$$

Assim, obtém-se

$$\nabla^2 u(x_j) \approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j+N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.5)$$

**Tratamento do Contorno Superior:** Analogamente como no caso anterior, para  $j = (N_y - 1)N_x + 2, \dots, N_x \times N_y - 1$ , obtém-se:

$$\nabla^2 u(x_j) \approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j-N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.6)$$

**Tratamento do Contorno Esquerdo:** Neste caso consideramos  $j = N_x + 1, \dots, (N_y - 2)N_x$ , obtém-se:

$$\nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j+1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{u_{j+N_x} - 2u_j + u_{j-N_x}}{\Delta y^2}. \quad (2.7)$$

**Tratamento do Contorno Direito:** Aqui consideramos  $j = 2N_x, \dots, (N_y - 1)N_x$ , obtém-se:

$$\nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j-1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{u_{j+N_x} - 2u_j + u_{j-N_x}}{\Delta y^2}. \quad (2.8)$$

**Tratamento dos pontos angulosos:** Finalmente para os pontos angulosos na malha temos:

$$j = 1 \Rightarrow \nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j+1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j+N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.9)$$

$$j = N_x \Rightarrow \nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j-1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j+N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.10)$$

$$j = (N_y - 1)N_x + 1 \Rightarrow \nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j+1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j-N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.11)$$

$$j = N_x N_y \Rightarrow \nabla^2 u(x_j) \approx \frac{2u_{j-1} - 2u_j}{\Delta x^2} + \frac{2u_{j-N_x} - 2u_j}{\Delta y^2}. \quad (2.12)$$

Assim, a matriz  $A$  da discretização espacial da equação 2.1 pode ser descrita de forma compacta como se segue:

$$A = \begin{bmatrix} T & 2D & 0 & 0 & \dots & 0 \\ D & T & D & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D & T & D & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2D & T \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} \beta & 2\alpha_x & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_x & \beta & \alpha_x & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_x & \beta & \alpha_x & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2\alpha_x & \beta \end{bmatrix},$$

$$D = \begin{bmatrix} \alpha_y & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_y & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_y & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_y \end{bmatrix},$$

onde  $\alpha_x = \frac{1}{h_x^2}$ ,  $\alpha_y = \frac{1}{h_y^2}$  e  $\beta = 2\left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2}\right)$ . As sub-matrizes  $T$  e  $D$  são da dimensão  $N_x \times N_y$ , assim, a dimensão da matriz  $A$  é  $n = (sN_x^2 \times sN_y^2)$  e o sistema na forma semi-discreta pode ser escrito como se segue:

$$\frac{dU}{dt} = AU + \mathcal{F}(U) \quad t > 0, \quad \text{com} \quad U(0) = U_0, \quad (2.13)$$

$$U(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ u_3(t) \\ \vdots \\ u_{ns}(t) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{F}(U(t)) = \begin{pmatrix} F_1(u_1, \dots, u_s, t) \\ F_2(u_1, \dots, u_s, t) \\ F_3(u_1, \dots, u_s, t) \\ \vdots \\ F_{ns}(u_1, \dots, u_s, t) \end{pmatrix}$$

onde  $ns = s \times n$ .

## 2.2 Método de Fator de Integração Implícito - IIF

O método de IIF é obtido a partir da multiplicação pelo fator de integração  $e^{-At}$ , na equação 2.13 da seguinte forma:

$$e^{-At} \frac{dU}{dt} = e^{-At} AU + e^{-At} \mathcal{F}(U(t)).$$

Tendo em vista que  $\frac{d(e^{-At}U)}{dt} = e^{-At} \frac{dU}{dt} - e^{-At} AU$ , pode-se escrever:

$$\frac{d(e^{-At}U)}{dt} = e^{-At} \mathcal{F}(U(t)).$$

Integrando entre  $t_n$  e  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  em ambos os lados desta equação, obtém-se:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d(e^{-At}U)}{dt} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-At} \mathcal{F}(U(t)) dt.$$

Se uma mudança de variável  $\tau = t - t_n$  for introduzida na integral do lado direito da equação acima, temos:

$$e^{-At}U(t) \Big|_{t_n}^{t_{n+1}} = e^{-At_n} \int_0^{\Delta t} e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau)) d\tau,$$

$$e^{-A(t_n+\Delta t)}U(t_n + \Delta t) - e^{-At_n}U(t_n) = e^{-At_n} \int_0^{\Delta t} e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau)) d\tau. \quad (2.14)$$

Desta forma, multiplicando a equação 2.14 por  $e^{A(t_n+\Delta t)}$ , temos que:

$$U(t_n + \Delta t) - e^{A\Delta t}U(t_n) = e^{A\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau)) d\tau.$$

Então:

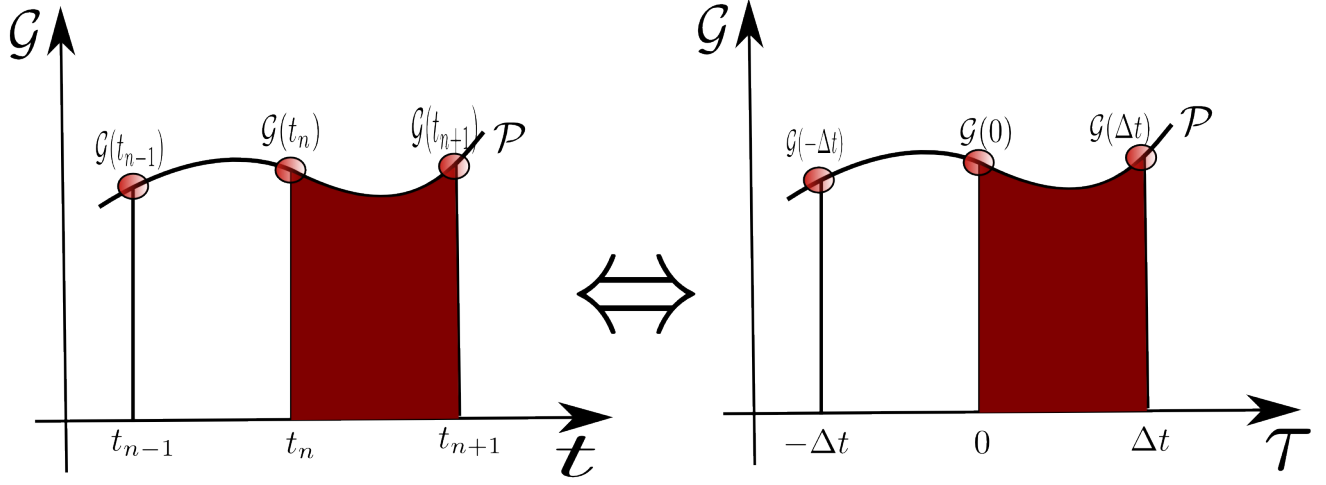
$$U_{n+1} = e^{A\Delta t}U_n + e^{A\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau)) d\tau, \quad (2.15)$$

onde  $U(t_n) = U_n$  é utilizado, usualmente, para aproximação de  $U(t_n)$ . Nosso objetivo é mostrar uma recente abordagem de uma classe de esquema temporal que trate os termos reativos de maneira implícita e integre os termos de difusão explicitamente. Assim, a construção deste esquema baseia-se em aproximar  $e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau))$  através de uma interpolação polinomial que envolve  $t_{n+1}$ .

Definindo:

$$\mathcal{G}(\tau) = e^{-A\tau} \mathcal{F}(U(t_n + \tau)). \quad (2.16)$$

Assim, para construir um esquema de integração de ordem  $r$  de erro de truncamento, aproximamos  $\mathcal{G}(\tau)$  por um polinômio de Lagrange de ordem  $(r - 1)$ , com pontos de interpolação  $t_{n+1}, t_n, \dots, t_{n+2-r}$ :



Na mudança de variáveis trabalhamos com os pontos de interpolação  $\Delta t, 0, -\Delta t, \dots, (2-r)\Delta t$ :

$$\mathcal{P}(\tau) = \sum_{i=1}^r L_{r,i}(\tau) \mathcal{G}((2-i)\Delta t) = \sum_{i=-1}^{r-2} L_{r,i}(\tau) \mathcal{G}((-i)\Delta t), \quad (2.17)$$

onde  $L_{r,i}$  são os polinômios de Lagrange:

$$L_{r,i}(\tau) = \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{r-2} \frac{\tau - (-j\Delta t)}{(-i\Delta t - (-j\Delta t))} = \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{r-2} \frac{\tau + j\Delta t}{(j-i)\Delta t} \quad (2.18)$$

Considerando em particular  $r = 3$  temos que:

$$\mathcal{P}(\tau) = \sum_{i=-1}^1 L_{3,i}(\tau) \mathcal{G}((-i)\Delta t) = L_{3,-1}(\tau) \mathcal{G}(\Delta t) + L_{3,0}(\tau) \mathcal{G}(0) + L_{3,1}(\tau) \mathcal{G}(-\Delta t),$$

onde

$$\begin{cases} \mathcal{G}(\Delta t) = e^{-A\Delta t} \mathcal{F}(U(\Delta t + t_n)) = e^{-A\Delta t} \mathcal{F}(U(t_{n+1})) = e^{-A\Delta t} \mathcal{F}(U_{n+1}) \\ \mathcal{G}(0) = \mathcal{F}(U(t_n)) = \mathcal{F}(U_n) \\ \mathcal{G}(-\Delta t) = e^{A\Delta t} \mathcal{F}(U(t_n - \Delta t)) = e^{A\Delta t} \mathcal{F}(U(t_{n-1})) = e^{A\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-1}) \end{cases}$$

Assim, para o esquema de ordem  $r$ , temos:

$$\mathcal{P}(\tau) = \sum_{i=-1}^{r-2} e^{iA\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-i}) L_{r,i}(\tau)$$

ou

$$\mathcal{P}(\tau) = \sum_{i=-1}^{r-2} e^{iA\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-i}) \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{r-2} \frac{\tau + j\Delta t}{(j-i)\Delta t}; \quad 0 \leq \tau \leq \Delta t. \quad (2.19)$$

Portanto, da equação 2.15, tem-se que:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t} U_n + e^{A\Delta t} \int_0^{\Delta t} \sum_{i=-1}^{r-2} e^{iA\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-i}) \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{r-2} \frac{\tau + j\Delta t}{(j-i)\Delta t}; \quad 0 \leq \tau \leq \Delta t$$

$$\Rightarrow U_{n+1} = e^{A\Delta t} U_n + \sum_{i=-1}^{r-2} e^{(i+1)A\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-i}) \int_0^{\Delta t} \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{r-2} \frac{\tau + j\Delta t}{(j-i)\Delta t}; \quad 0 \leq \tau \leq \Delta t.$$

Desta forma, obtemos o esquema do método IIF geral, tal como descrito em [18], [19]:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t} U_n + \Delta t \left( \alpha_{n+1} \mathcal{F}(U_{n+1}) + \sum_{i=0}^{r-2} \alpha_{n-i} \mathcal{F}(U_{n-i}) \right),$$

onde:

$$\alpha_{n-i} = \frac{e^{(i+1)A\Delta t}}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{r-2} \frac{\tau + k\Delta t}{(k-i)\Delta t} d\tau; \quad -1 \leq i \leq r-2.$$

Assim, para o método de segunda ordem temos  $\alpha_{n+1} = \frac{1}{2}$  e  $\alpha_n = \frac{e^{A\Delta t}}{2}$ , resultando em:

$$U_{n+1} = \underbrace{e^{A\Delta t} \left( U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n) \right)}_{\text{Termo Explícito}} + \underbrace{\frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_{n+1})}_{\text{Termo Implícito}}. \quad (2.20)$$

Para o método de terceira ordem temos os valores de  $\alpha_{n+1} = \frac{5}{12}$ ,  $\alpha_n = \frac{2e^{A\Delta t}}{3}$  e  $\alpha_{n-1} = -\frac{e^{2A\Delta t}}{12}$ , resultando em:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t} U_n + \Delta t \left( \frac{5}{12} \mathcal{F}(U_{n+1}) + \frac{2}{3} e^{A\Delta t} \mathcal{F}(U_n) - \frac{1}{12} e^{2A\Delta t} \mathcal{F}(U_{n-1}) \right), \quad (2.21)$$

e, para o método de quarta ordem temos  $\alpha_{n+1} = \frac{9}{24}$ ,  $\alpha_n = \frac{19e^{A\Delta t}}{24}$ ,  $\alpha_{n-1} = -\frac{5e^{2A\Delta t}}{24}$  e  $\alpha_{n-2} = \frac{e^{3A\Delta t}}{24}$ , resultando em:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t}U_n + \Delta t \left( \frac{9}{24}\mathcal{F}(U_{n+1}) + \frac{19}{24}e^{A\Delta t}\mathcal{F}(U_n) - \frac{5}{24}e^{2A\Delta t}\mathcal{F}(U_{n-1}) + \frac{1}{12}e^{3A\Delta t}\mathcal{F}(U_{n-2}) \right). \quad (2.22)$$

Observação:

Note que a desvantagem na implementação do método IIF para os problemas de alta dimensão é que este requer um armazenamento e um cálculo das exponenciais da matriz  $e^{A\Delta t}$ , que é computacionalmente caro. Apesar da matriz da discretização ser esparsa, sua matriz exponencial é densa, não sendo prático o cálculo e o armazenamento direto da exponencial da matriz. Mostraremos em seguida as aproximações da exponencial da matriz realizadas pelos métodos clássicos:

- Aproximação pela série de Taylor:

$$e^{A\Delta t} \approx I + A\Delta t + \frac{1}{2!}(A\Delta t)^2 + \frac{1}{3!}(A\Delta t)^3 + \dots \quad (2.23)$$

- Aproximação pela decomposição espectral da matriz  $A$ , isto é, consideremos que  $A$  é uma matriz diagonalizável, então existe uma matriz  $P$  dos autovetores da matriz  $A$ , inversível, tal que:

$$A = P\Lambda P^{-1}, \quad (2.24)$$

onde  $\Lambda$  é uma matriz diagonal com os autovalores da matriz  $A$ . Logo, em vez de determinar  $e^{A\Delta t}$ , avaliamos  $Pe^\Lambda P^{-1}$ , que ainda é, computacionalmente custosa, já que isto requer determinar todos os autovetores da matriz  $A$  de grande porte para construir a matriz  $P$  e, em seguida, determinar sua inversa. Sendo assim, tratamos este problema com uso da aproximação do subespaço de Krylov, aproximando diretamente o produto da exponencial da matriz  $A$  por um vetor, sem a necessidade do cálculo explícito da exponencial da matriz.



## 2.3 Método do Fator de Integração Implícito de Krylov - KIIF

O princípio fundamental do método de fator de integração implícito de Krylov, é aproximar o produto  $\mathbf{w} = e^{\mathbf{A}\Delta t}\mathbf{v}$  presente no primeiro termo do lado direito da equação (2.9), por um vetor do subespaço de Krylov  $\mathbf{K}_m(\mathbf{A}\Delta t, \mathbf{v}) = \text{span}\{\mathbf{v}, (\mathbf{A}\Delta t)\mathbf{v}, \dots, (\mathbf{A}\Delta t)^{m-1}\mathbf{v}\}$ . A dimensão do subespaço de Krylov é  $m \ll n$  (dimensão da matriz esparsa  $\mathbf{A}$ ), ver [20]. A aproximação a ser utilizada é:

$$e^{\mathbf{A}\Delta t}\mathbf{v} \approx \beta \mathbf{V}_{m+1} e^{\mathbf{H}_{m+1}\Delta t} \mathbf{e}_1, \quad (2.25)$$

na qual  $\mathbf{e}_1$  é o primeiro vetor da base canônica de dimensão  $m$ ,  $\beta = \|\mathbf{v}\|_2$ ,  $\mathbf{V}_{m+1} = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{m+1})$  e  $\mathbf{H}_{m+1} = [h_{ij}]$  são, respectivamente, a base ortonormal e a matriz de Hessenberg obtidas por intermédio do algoritmo de Arnoldi, satisfazendo as equações:

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_{m+1}\mathbf{H}_{m+1} = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m + h_{m+1,m}\mathbf{v}_{m+1}\mathbf{e}_m^T,$$

e

$$\mathbf{V}_m^T \mathbf{A} \mathbf{V}_m = \mathbf{H}_m,$$

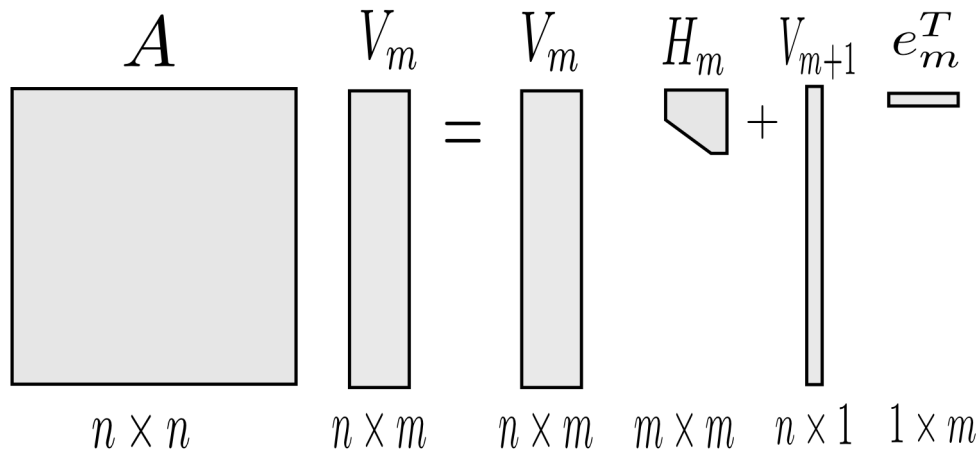


Figura 2.2: Aproximação de Krylov da matriz  $\mathbf{A}$

onde  $\mathbf{H}_m$  representa a projeção do operador  $\mathbf{A}$  sobre o subespaço de Krylov com relação à base  $\mathbf{V}_m$  e tem a seguinte forma:

$$\mathbf{H}_{m+1} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ 0 & h_{32} & \dots & h_{3,m-1} & h_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & h_{m+1,m} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H}_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ 0 & h_{32} & \dots & h_{3,m-1} & h_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{bmatrix}.$$

Logo, considerando o esquema do método IIF de segunda ordem conforme a expressão 2.20

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t} \left( U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n) \right) + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_{n+1}),$$

e utilizando a aproximação 2.25, temos o esquema KIIF de segunda ordem:

$$U_{n+1} = \beta_n \mathbf{V}_{m+1}^n e^{\mathbf{H}_{m+1}^n} + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_{n+1}), \quad (2.26)$$

onde  $\beta_n = \|U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n)\|_2$ ,  $\mathbf{V}_{m+1}^n$  e  $\mathbf{H}_{m+1}^n$  são gerados pelo algoritmo de Arnoldi com vetor inicial dado por  $(U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n))$ .

## 2.4 Método do Fator de Integração Implícito Compacto - CIIF

Considerando o caso do problema 2.1, e usando novamente a discretização de diferenças centradas de segunda ordem na discretização do Laplaciano com índices  $i, j$  para representar os pontos nodais do domínio, obtemos:

$$\frac{du_{i,j}}{dt} = D \left( \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h_y^2} \right) + F(u_{i,j}). \quad (2.27)$$

O método CIIF, se baseia no armazenamento dos valores das concentrações em uma matriz,  $U$ , e na representação da discretização de duas multiplicações matriciais. Serão analisados dois casos de condição de contorno: Neumann homogênea e Periódica. Portanto, vejamos o primeiro caso com condições de fronteira de Neumann homogênea ou fluxo nulo.

Desta forma, sejam as seguintes relações entre os nós fantasmas e os nós de fronteira na direção  $x$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=0} = 0 \Rightarrow \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h_x} = 0 \\ \Rightarrow u_{i-1,j} = u_{i+1,j}, \quad \forall j = 0, \dots, N_y, \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=N_x} = 0 \Rightarrow \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h_x} = 0 \\ \Rightarrow u_{i+1,j} = u_{i-1,j}, \quad \forall j = 0, \dots, N_y. \end{array} \right.$$

Analogamente, para o caso na direção  $y$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{j=0} = 0 \Rightarrow \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h_y} = 0 \\ \Rightarrow u_{i,j-1} = u_{i,j+1}, \quad \forall i = 0, \dots, N_x, \\ \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{j=N_y} = 0 \Rightarrow \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h_y} = 0 \\ \Rightarrow u_{i,j+1} = u_{i,j-1}, \quad \forall i = 0, \dots, N_x. \end{array} \right.$$

Considerando  $U_{(N_x+1)(N_y+1)}$ :

$$U = \begin{bmatrix} u_{0,0} & u_{0,1} & \dots & u_{0,N_y} \\ u_{1,0} & u_{1,1} & \dots & u_{1,N_y} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N_x,0} & u_{N_x,1} & \dots & u_{N_x,N_y} \end{bmatrix}_{(N_x+1) \times (N_y+1)}. \quad (2.28)$$

Assim, definimos as matrizes  $A$  e  $B$ , associadas, respectivamente a discretização das derivadas segundas em relação a  $x$  e a  $y$ :

$$\frac{d^2 U}{dx^2} \approx AU, \quad \text{onde} \quad A = \frac{D}{h_x^2} G_{(N_x+1) \times (N_x+1)}.$$

$$\frac{d^2 U}{dy^2} \approx UB, \quad \text{onde} \quad B = \frac{D}{h_y^2} G_{(N_y+1) \times (N_y+1)}.$$

Onde a matriz  $G$  é definida como:

$$G_{p \times p} = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 2 & -2 \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

Para o segundo caso de fronteira periódica temos que:

$$U = \begin{bmatrix} u_{0,0} & u_{0,1} & \dots & u_{0,N_y-1} \\ u_{1,0} & u_{1,1} & \dots & u_{1,N_y-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N_x-1,0} & u_{N_x-1,1} & \dots & u_{N_x-1,N_y-1} \end{bmatrix}_{(N_x) \times (N_y)}.$$

e

$$G_{p \times p} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Desta forma, obtemos a seguinte forma semi-discreta compacta para a difusão para o caso de uma única espécie (pode ser considerada mais de uma espécie):

$$\frac{dU}{dt} = AU + UB + \mathcal{F}(U), \quad (2.30)$$

onde  $\mathcal{F}(U) = f(u_{i,j})$ ,  $0 \leq i \leq N_x$ ,  $0 \leq j \leq N_y$ . Logo, multiplicando a equação acima por  $e^{-At}$  no lado esquerdo e por  $e^{-Bt}$  no lado direito, obtém-se (ver apêndice A):

$$\frac{d(e^{-At}Ue^{-Bt})}{dt} = e^{-At}\mathcal{F}(U)e^{-Bt} \quad (2.31)$$

Sendo assim, integrando no intervalo de tempo de  $t_n$  para  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ , e fazendo a troca de variáveis na integral, temos que:

$$U(t_{n+1}) = e^{A\Delta t}U(t_n)e^{B\Delta t} + e^{A\Delta t}\left(\int_0^{\Delta t} e^{-As}\mathcal{F}(U(t_n+s))e^{-Bs}ds\right)e^{B\Delta t}. \quad (2.32)$$

Analogamente, ao que foi feito no desenvolvimento do método IIF para a equação (2.21), obtemos o esquema CIIF [21] de segunda ordem:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t}\left(U_n + \frac{\Delta t}{2}F(U_n)\right)e^{B\Delta t} + \frac{\Delta t}{2}F(U_{n+1}). \quad (2.33)$$

Onde a dimensão das matrizes  $A$  e  $B$  são  $(sN_x \times sN_x)$  e  $(sN_y \times sN_y)$ , respectivamente as quais são muito menor em comparação à dimensão da matriz no caso IIF. A desvantagem do CIIF é que ele só é aplicável a problemas com difusão constante e malha regular.

## 2.5 Fator de Integração Implícito Tridimensional

Consideremos o caso tridimensional do problema 2.1 e denotemos por  $N_x$ ,  $N_y$ ,  $N_z$  o número de pontos na malha espacial nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente, e  $u_{i,j,k}$  representando a aproximação da solução no ponto  $(x_i, y_j, z_k)$ . Usando a discretização de diferenças finitas centradas de segunda ordem na discretização do Laplaciano, obtemos:

$$\frac{du_{i,j,k}}{dt} = D\left(\frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}}{h_y^2} + \right. \quad (2.34)$$

$$\left. + \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}}{h_z^2}\right) + \mathcal{F}(u_{i,j,k}) \quad (2.35)$$

Definindo-se as matrizes  $A_x$ ,  $A_y$  e  $A_z$  no caso de condição de contorno Neumann homogênea:

$$A_x = \frac{D}{h_x^2} G_{N_x \times N_x}, \quad A_y = \frac{D}{h_y^2} G_{N_y \times N_y}, \quad A_z = \frac{D}{h_z^2} G_{N_z \times N_z},$$

onde:

$$G_{p \times p} = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 2 & -2 \end{bmatrix}.$$

Portanto a equação (2.35) acima tem a seguinte representação compacta:

$$\frac{dU}{dt} = \left( \sum_{l=1}^{N_x} (A_x)_{i,l} u_{l,j,k} + \sum_{l=1}^{N_y} (A_y)_{j,l} u_{i,l,k} + \sum_{l=1}^{N_z} (A_z)_{k,l} u_{i,j,l} \right) + F(U), \quad (2.36)$$

onde  $U = (u_{i,j,k})$  e  $F(U) = \mathcal{F}(u_{i,j,k})$ . Note que, os três termos da somatória da equação (2.36) são similares à multiplicação matriz-vetor no caso bidimensional.

Definindo-se o operador  $\mathcal{L}(t)$ :

$$\mathcal{L}(t)U = \left( \sum_{n=1}^{N_z} \sum_{m=1}^{N_y} \sum_{l=1}^{N_x} (e^{-A_z t})_{k,n} (e^{-A_y t})_{j,m} (e^{-A_x t})_{i,l} u_{l,m,n} \right). \quad (2.37)$$

Derivando a equação (2.37), tem-se:

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{L}(t)U) = \mathcal{L}(t) \left( U_t - \left( \sum_{l=1}^{N_x} (A_x)_{i,l} u_{l,j,k} + \sum_{l=1}^{N_y} (A_y)_{j,l} u_{i,l,k} + \sum_{l=1}^{N_z} (A_z)_{k,l} u_{i,j,l} \right) \right). \quad (2.38)$$

Das equações (2.36) e (2.38), obtém-se:

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{L}(t)U) = \mathcal{L}(t)F(U). \quad (2.39)$$

Integrando a equação (2.39) de  $t_n$  para  $t_{n+1}$  e usando uma transformação  $t = t_n + \tau$  para o integrando, temos:

$$\mathcal{L}(t_{n+1})U_{n+1} = \mathcal{L}(t_n)U_n + \mathcal{L}(t_n) \int_0^{\Delta t} \mathcal{L}(\tau)F(U(t_n + \tau))d\tau. \quad (2.40)$$

Aplicando  $\mathcal{L}(-t_{n+1})$  em ambos os lados da equação (2.40), obtemos:

$$U_{n+1} = \mathcal{L}(-\Delta t)U_n + \mathcal{L}(-\Delta t)\left(\int_0^{\Delta t} \mathcal{G}(\tau)d\tau\right), \quad (2.41)$$

onde  $\mathcal{G} = \mathcal{L}(\tau)F(U(t_n + \tau))$ , e para se obter a equação (2.41) utilizamos duas identidades:

$$\begin{cases} \mathcal{L}(-rt)\mathcal{L}(rt)U = U, & \text{e} \\ \mathcal{L}(-rt)\mathcal{L}(st)U = \mathcal{L}((s-r)t)U, \end{cases}$$

para qualquer escalar  $r$  e  $s$ . Analogamente à construção do sistema bidimensional, aproxima-se  $\mathcal{G}(\tau)$  usando polinômios de Lagrange de ordem  $(r-1)$ , resulta em um esquema com erro de truncamento de ordem  $r$ . Especificamente, a aproximação de segunda ordem é:

$$\int_0^{\Delta t} \mathcal{G}(\tau)d\tau \approx \frac{(F(U_n) + \mathcal{L}(\Delta t)F(U_{n+1}))}{2} \Delta t.$$

Sendo assim, utilizando-se o esquema IIF-3D de segunda ordem, obtém-se:

$$U_{n+1} = \mathcal{L}(-\Delta t)\left(U_n + \frac{\Delta t}{2}F(U_n)\right) + \frac{\Delta t}{2}F(U_{n+1}).$$

Observe que a equação (2.37) pode ser reescrita de maneira mais compacta através da utilização de uma simbologia específica para os produtos tensoriais envolvidos como se segue:

$$U_t = A_x \otimes U + A_y \otimes U + A_z \otimes U + F(U),$$

onde estes produtos são definidos como:

$$(A_x \otimes U)_{i,j,k} = \sum_{l=1}^{N_x} (A_x)_{i,l} u_{l,j,k},$$

$$(A_y \otimes U)_{i,j,k} = \sum_{l=1}^{N_y} (A_y)_{j,l} u_{i,l,k},$$

$$(A_z \otimes U)_{i,j,k} = \sum_{l=1}^{N_z} (A_z)_{k,l} u_{i,j,l},$$

Logo, da equação (2.38) temos que:

$$\mathcal{L}(t)U = e^{A_z \Delta t} \otimes e^{A_y \Delta t} \otimes e^{A_x \Delta t} U.$$

Desta forma, obtém-se o esquema CIIF-3D [21] de segunda ordem:

$$U_{n+1} = e^{A_z \Delta t} \otimes e^{A_y \Delta t} \otimes e^{A_x \Delta t} \left( U_n + \frac{\Delta t}{2} F(U_n) \right) + \frac{\Delta t}{2} F(U_{n+1}). \quad (2.42)$$

Assim como nos casos anteriores, o método se reduz à solução de um sistema de equações algébricas equação(2.42), que é não linear se  $F(U)$  assim o for.

## 2.6 Implementação Computacional

Nesta seção é tratado o problema do valor inicial obtido da equação (2.1), que é resolvido usando os três tipos de método do fator de integração IIF, KIIF e CIIF. Na etapa da simulação computacional foram utilizadas as rotinas do pacote *Expokit* e *Expn* na linguagem Matlab (para mais detalhes ver [17] e [22]). Essas rotinas realizam os cálculos para a determinação da exponencial de qualquer matriz (caso *Expn*) e a determinação da exponencial da matriz aplicado a um vetor (caso *Expokit*), sendo que as rotinas do *Expokit* são também apresentadas na linguagem Fortran que foi utilizada no caso tridimensional, por possuir maior eficiência que o Matlab. Para resolver os problemas discretos não-lineares, implementamos o método do Newton para os métodos IIF e KIIF, sendo que para o caso CIIF foi utilizado o método de Picard ou Ponto Fixo por ser mais simples de trabalhar. Os gráficos aqui apresentados foram todos obtidos usando o *Paraview*.

Podemos notar que para os problemas envolvendo as reações cinéticas, como no modelo estudado, podem dar origem a grandes sistemas de equações diferenciais ordinárias [23]. As constantes de velocidade das reações podem resultar em respostas envolvendo diferentes ordens de magnitude, características das equações *stiff*. Nesse caso procura-se uma solução particular que é suave, variando lentamente em relação ao intervalo de tempo de interesse em um contexto onde as soluções em sua vizinhança variam muito mais rapidamente. Nesses casos, a solução procurada tem uma componente que varia muito rapidamente, mas que contribui minimamente na solução. Esse tipo de componente força



que, com métodos condicionalmente estáveis, o tamanho de passo de integração para garantir a estabilidade deva ser tão pequeno e se torne ineficaz.

Vejam os algoritmos usando os três métodos para resolver o PVI resultante.

Seja o primeiro caso o método IIF de segunda ordem:

$$U_{n+1} = e^{A\Delta t} \left( U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n) \right) + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_{n+1})$$

considerando o vetor

$$Q = e^{A\Delta t} \left( U_n + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_n) \right), \quad (2.43)$$

aqui utilizamos a rotina *Expn* do Matlab para determinar a matriz exponencial  $e^{A\Delta t}$  através da resolução do sistema não-linear:

$$R(U_{n+1}) = U_{n+1} - Q - \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F}(U_{n+1}) = 0. \quad (2.44)$$

Para resolver a equação 2.44 o **Método de Newton** foi empregado. Para isso, mostra-se o seguinte algoritmo do método de Newton:

---

**Algoritmo 1: MÉTODO DE NEWTON**

---

Dado o valor inicial  $U_n$  e calcula  $U_{n+1}$

$k = 0$

1º  $U_{n+1,0} = U_n$

2º Calcular  $R(U_{n+1,0})$

3º **Enquanto**  $|R(U_{n+1,k})| > \epsilon$  **faça**

    Calcular a matriz jacobiana  $J$  de  $R(U_{n+1,k})$  e resolver o sistema algébrico

$$JS^{k+1} = -R(U_{n+1,k});$$

$$U_{n+1,k+1} = U_{n+1,k} + S^{k+1}$$

    Calcule  $R(U_{n+1,k+1})$

$$U_{n+1,k} = U_{n+1,k+1}$$

$$k = k + 1$$

**fim-enquanto**

$$U_{n+1} = U_{n+1,k}$$


---

Utilizamos  $\epsilon = 10^{-13}$  para garantir convergência do método de Newton.

Para o método KIIF de segunda ordem, utilizamos o pacote *Expokit* para aproximar:

$$Q^n = \beta^n \mathbf{V}_{m+1}^n e^{\mathbf{H}_{m+1}^n \Delta t} \mathbf{e}_1 \quad (2.45)$$

Neste caso utilizamos novamente o sistema (2.44) para resolver o sistema não-linear. Finalmente no caso CIIF de segunda ordem, utilizamos o método de Picard ou ponto fixo definido como se segue:

---

**Algoritmo 2: MÉTODO PICARD**

---

Definir as condições iniciais  $U$  e os termos de reação  $F$

Definir as matrizes  $A$  e  $B$  que dependem da condição de fronteira

Usando a função *Expn* do MATLAB, calcula-se  $e^{A\Delta t}$  e  $e^{B\Delta t}$

**Enquanto** ( $t_{inicial} \leq t_{final}$ ) **faça**

$$T1 = e^{A\Delta t} \left( U + \frac{\Delta t}{2} F(U) \right) e^{B\Delta t}$$

$$T2 = T1 + \frac{\Delta t}{2} F(U)$$

**Enquanto**  $\|T2 - U\| > 1e - 13$  **faça**

$$U = T2$$

$$T2 = T1 + \frac{\Delta t}{2} F(U)$$

**fim-enquanto**

$$U = T2$$

$$t_{inicial} = t_{inicial} + dt$$

**fim-enquanto**

---

## 3 EXEMPLOS NUMÉRICOS

### 3.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos resultados de aplicações dos métodos explicitados anteriormente. Seleccionamos modelos matemáticos tais como o problema de reação-difusão linear [21], Allen-Cahn [24], Ginzburg-Landau [25], FitzHugh-Nagumo [16] e Schnakenberg [26]. Estes experimentos tiveram o intuito de validar a implementação aqui realizada comparando os resultados obtidos com soluções encontradas na literatura. Todos os exemplos foram rodados num computador com processador Intel Core i7, 2.0GHz, 8Gb de memória RAM e sistema operacional Linux. Foi utilizado o Matlab versão R2014b.

### 3.2 Modelo de Reação-Difusão Linear

Consideramos, inicialmente, o seguinte problema modelo de reação-difusão linear no domínio  $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ :

$$\begin{cases} u_t = 0.2\nabla^2 u + 0.1u \\ u(x, y, 0) = \cos(x) + \sin(y), \end{cases} \quad (3.1)$$

onde  $u$  é a concentração de uma substância e o termo da reação cinética é dado por  $0.1u$ . Com condições de contorno periódicas a solução exata é  $u(x, y, t) = e^{-0.1t}(\cos(x) + \sin(y))$ . Nas Tabelas 3.1 a 3.4 são apresentados comparações dos erros de convergência (norma  $L^\infty$ ) entre a solução exata e numérica para diferentes discretizações ( $N = 40, 80, 100, 120$ ), apresentando também seu desempenho, medido aqui em termos de tempo de CPU, dos métodos IIF, KIIF e CIIF quando integramos a equação (3.1), utilizando diferentes quantidades de passo de tempo ( $N_t = 16, 64, 256$ ) com tempo final  $t = 1s$ .

$N \times N \times N_t$	IIF		KIIF		CIIF	
	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)
$40 \times 40 \times 16$	5.6506e-04	9.26	5.4022e-04	1.21	5.6506e-04	0.02
$40 \times 40 \times 64$	5.6459e-04	12.16	5.3974e-04	3.11	5.6459e-04	0.03
$40 \times 40 \times 256$	5.6456e-04	39.08	5.3971e-04	11.26	5.6456e-04	0.09

Tabela 3.1: Resultados com uma malha de 40 pontos em cada direção

$N \times N \times N_t$	IIF		KIIF		CIIF	
	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)
$80 \times 80 \times 16$	1.5601e-04	559.19	1.524e-04	31.56	1.5601e-04	0.04
$80 \times 80 \times 64$	1.5550e-04	591.39	1.5188e-04	91.11	1.5550e-04	0.08
$80 \times 80 \times 256$	1.5546e-04	692.64	1.5085e-04	122.58	1.5546e-04	0.25

Tabela 3.2: Resultados com uma malha de 80 pontos em cada direção

$N \times N \times N_t$	IIF		KIIF		CIIF	
	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)
$100 \times 100 \times 16$	1.0248e-04	3.5480e+03	1.0057e-04	90.17	1.0248e-04	0.05
$100 \times 100 \times 64$	1.0190e-04	3.7881e+03	1.0005e-04	216.17	1.0190e-04	0.13
$100 \times 100 \times 256$	1.0193e-04	3.80918e+03	1.0002e-04	804.07	1.0193e-04	0.39

Tabela 3.3: Resultados com uma malha de 100 pontos em cada direção

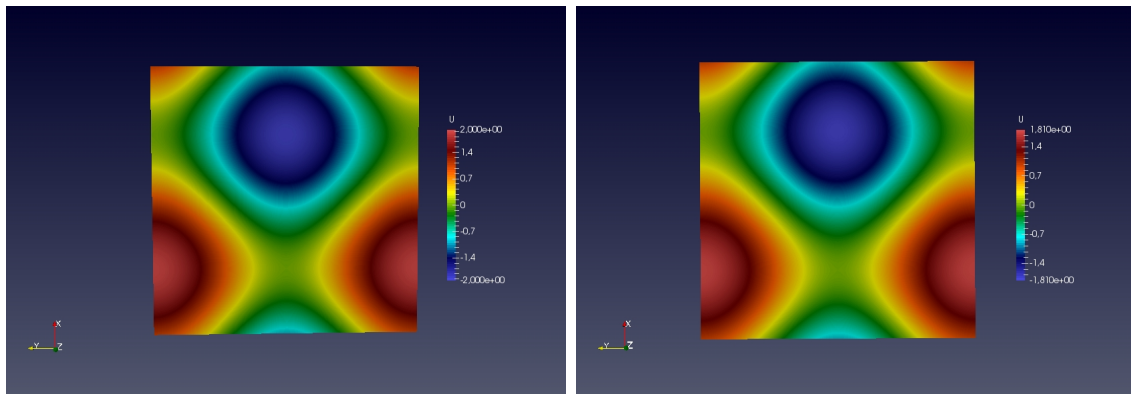
$N \times N \times N_t$	IIF		KIIF		CIIF	
	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)	Erro $L^\infty$	CPU(s)
$120 \times 120 \times 16$	7.2646e-05	6.6178e+03	7.1510e-05	176.13	7.2646e-05	0.08
$120 \times 120 \times 64$	7.2117e-05	6.7978e+03	7.0981e-05	505.66	7.2646e-05	0.17
$120 \times 120 \times 256$	7.2084e-05	6.8602e+03	7.09480e-05	986.18	7.2084e-05	1.59

Tabela 3.4: Resultados com uma malha de 120 pontos em cada direção

RK2			RK2		
$N \times N \times N_t$	Erro $L^\infty$	CPU(s)	$N \times N(\Delta t = h^2)$	Erro $L^\infty$	CPU(s)
$40 \times 40 \times 256$	1.1170e+18	0.02	$40 \times 40$	5.6470e-04	0.04
$80 \times 80 \times 256$	5.7747e+15	0.09	$80 \times 80$	1.5547e-04	0.12
$100 \times 100 \times 256$	1.3565e+14	0.14	$100 \times 100$	1.0193e-04	0.2
$120 \times 120 \times 256$	3.3661e+13	0.34	$120 \times 120$	7.2084e-05	0.57

Tabela 3.5: Resultados com Runge-Kutta de segunda ordem

Nessas tabelas pode-se constatar o ganho de tempo obtido pelo método CIIF em relação aos métodos IIF e KIIF, no caso do método RK2 ele explode para valores de  $\Delta t = 1/256$ , mais para valores de  $\Delta t = h^2$  ele se estabiliza e consegue bons resultados como mostrado na Tabela(3.5). Em seguida, na Figura 3.1 apresenta-se comparações entre a solução exata e a solução aproximada pelo método CIIF no tempo final  $t = 1s$  e a discretização espacial  $N \times N = 120 \times 120$ :

Figura 3.1: Solução Exata e Aproximada usando CIIF para  $t = 1s$ 

É importante ressaltar que neste caso o método IIF não pôde, por problemas de memória, ser executado para malhas com  $N > 120$ .

### 3.3 Modelo de Allen-Cahn

O modelo de Allen-Cahn é uma equação que descreve a evolução dos processos de solidificação que ocorrem em certas ligas binárias e que, em sua forma mais simples, pode ser visto como uma equação de reação-difusão, que modela o processo de separação de fase de ligas de ferro (para mais detalhes sobre a equação de Allen-Cahn, sua derivação e equações relacionadas ver [24], [27], [12]).

Além de sua aplicação a vários problemas de ciência dos materiais, este modelo tem aplicação nas áreas de processamento de imagem ([12], [13]). Em dinâmica de fluidos, é utilizado para resolver o denominado problema de fluxo de curvatura média [28], na biologia, onde a dinâmica das populações é estudada, e, na geologia, é aplicado ao estudo de microestruturas de grão geológico [29]. É bem conhecido que esta equação de Allen-Cahn é um fluxo de gradiente em  $L^2$  do funcional de energia de Ginzburg-Landau dado por:

$$\mathbf{E}(u) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{4\epsilon^2} (u^2 - 1)^2 \right\} d\Omega.$$

No apêndice A apresentamos o desenvolvimento da extremização deste funcional, pelo cálculo variacional, para obter as equações do modelo de Allen-Cahn. Assim, consideramos aqui a equação de Allen-Cahn definida da seguinte forma no domínio  $\Omega = [-0.5, 1.5] \times [-0.5, 1.5]$ :

$$\begin{cases} u_t = \nabla^2 u - \frac{1}{\epsilon^2} (u^3 - u) \\ u(x, y, 0) = \frac{1}{2} (1 - \operatorname{tgh}(\frac{x}{2\sqrt{2}\epsilon})) \\ n \cdot \nabla u = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.2)$$

com a solução exata  $u(x, y, t) = \frac{1}{2} (1 - \operatorname{tgh}(\frac{x - st}{2\sqrt{2}\epsilon}))$ , os parâmetros  $s = \frac{3}{\sqrt{2}\epsilon}$ ,  $\epsilon = 0.015$  e com tempo de execução  $t = [0, 0.75s]$ .

Na Tabela 3.5 apresentamos os resultados da simulação numérica para este problema utilizando o CIIF de segunda ordem, com uma discretização de  $1024 \times 1024$  pontos.

$N \times N \times Nt$	Erro $L^\infty$	Ordem Convergência	CPU(s)
$1024 \times 1024 \times 16$	8.9057e-01	–	1.0423e+03
$1024 \times 1024 \times 32$	2.6730e-01	1.741	1.1675e+03
$1024 \times 1024 \times 64$	6.759e-02	1.982	1.5363e+03
$1024 \times 1024 \times 128$	1.8196e-02	1.891	1.8714e+03

Tabela 3.6: Resultados para uma malha de 1024 pontos em cada direção

Nas Figuras 3.2 e 3.3 são apresentados os valores de  $u$  obtidos em nas simulações realizadas:

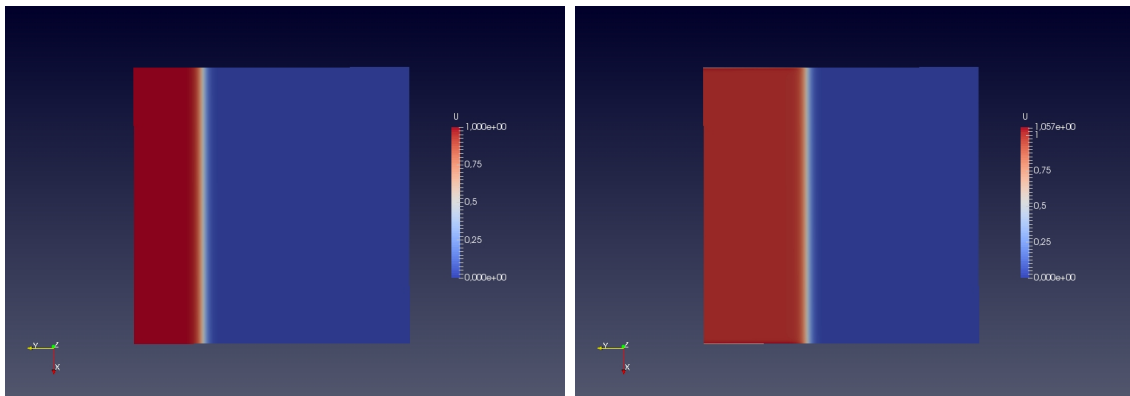


Figura 3.2: Solução para os tempos  $t = 0$  e  $t = 0.125s$

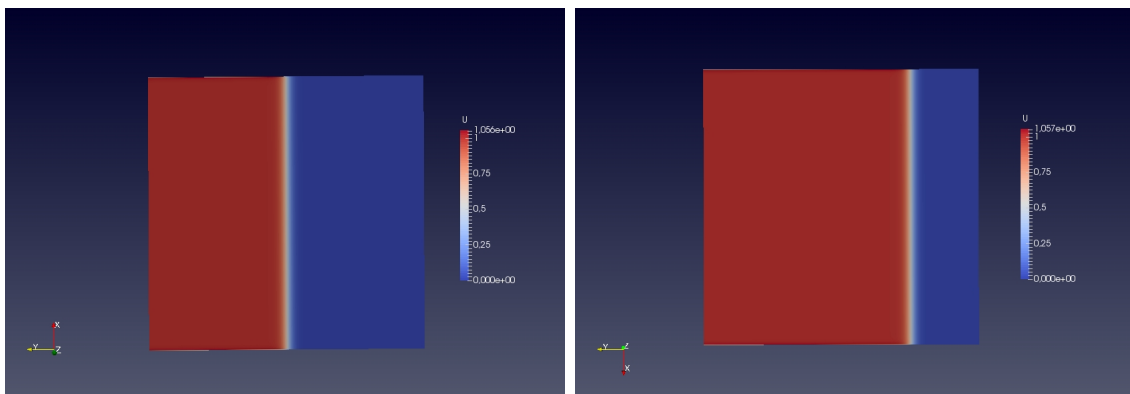


Figura 3.3: Solução para os tempos  $t = 0.375$  e  $t = 0.75s$

### 3.4 Modelo de Ginzburg-Landau

O modelo de Ginzburg-Landau descreve ondas não-lineares sendo muito utilizado no estudo de fibras ópticas [15], supercondutividade como no caso aplicado à construção de trens de levitação magnética. Também podemos citar aplicações medicinais importantes, como a ressonância nuclear magnética e a construção de dispositivos eletrônicos usados para medir campos magnéticos extremamente baixos, como os produzidos pelo coração e o cérebro, conforme descrito em [14]. O modelo descreve a evolução da amplitude para processos exibindo bifurcação [30]. Pode ser visto como uma forma geral para uma grande classe de bifurcações e fenômenos de ondas não-lineares. A equação de Ginzburg-Landau foi estudada no domínio  $\Omega = [-100, 100] \times [-100, 100]$  e é dada por:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \mu(x, y)u + |u|^2 \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \alpha \nabla^2 v - \beta |u|^2. \end{cases} \quad (3.3)$$

Para este problema consideramos condições de contorno periódicas e condições iniciais dadas por uma perturbação na solução estacionária  $(u^*, v^*) = (0, 0)$  de 0.0001%, isto é,  $u(x, y, 0) = u^* + 10^{-6} * rand$  e  $v(x, y, 0) = v^* + 10^{-6} * rand$ , onde *rand* é uma função de geração de números aleatórios do Matlab. Os seguintes parâmetros foram tomados de Shi [25] e Zhou [31]:  $\mu(x, y) = 1 - \frac{1}{2}\gamma^2(x^2 + y^2)$ , onde  $\gamma = 0.01$  é a frequência de Einstein,  $\alpha = 3.5$ ,  $\beta = -0.34$ . A malha foi de 200 pontos em cada direção e a equação foi integrada com  $\Delta t = 0.1$  até o tempo final  $t = 200s$ .

Assim, obtém-se os seguinte resultados da implementação, apresentados nas figuras em seguida:



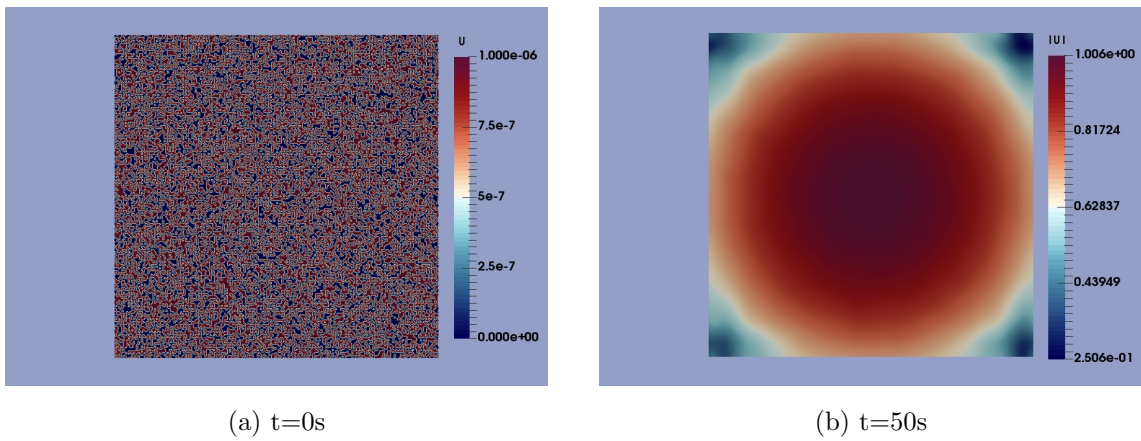


Figura 3.4: Solução Numérica  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$

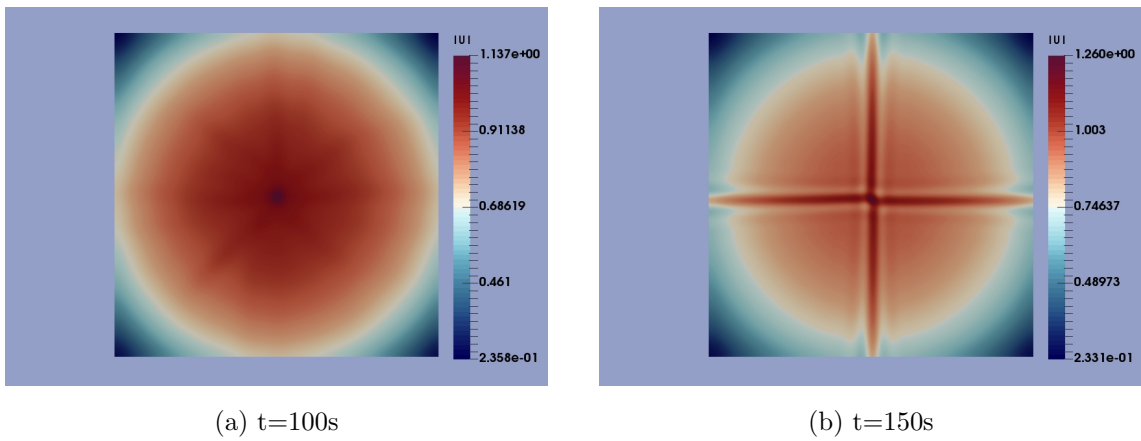


Figura 3.5: Solução Numérica  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$

Na Figura 3.4(a) é apresentada a condição inicial dada para  $u$  e  $v$ , enquanto nas Figuras 3.4(b), 3.5(a) e 3.5(b) são apresentadas as soluções de  $|U|$ , onde  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$ , nos tempos  $t = 50s$ ,  $t = 100s$  e  $t = 150s$ , respectivamente.

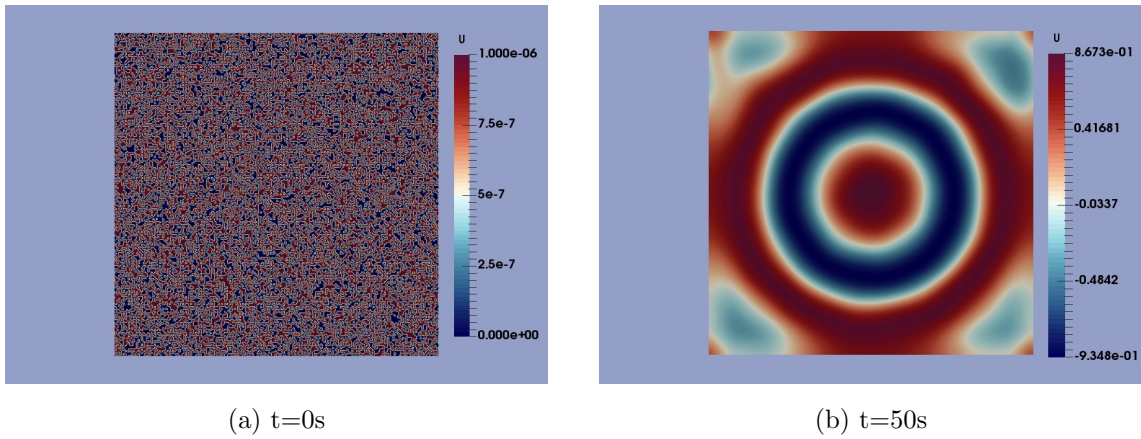


Figura 3.6: Solução para componente  $u$

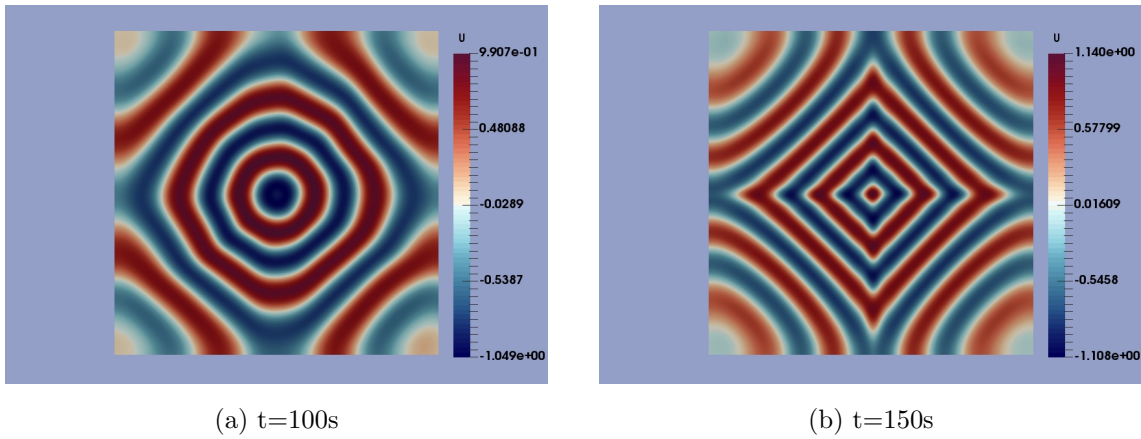


Figura 3.7: Solução para componente  $u$

A Figura 3.6(a) apresenta a condição inicial perturbada para  $u$ , e as Figuras 3.6(b), 3.7(a) e 3.7(b) apresentam as soluções de  $u$  nos tempos  $t = 50s$ ,  $t = 100s$  e  $t = 150s$ , respectivamente. Finalmente dado que o modelo de Ginzburg-Landau não tem solução exata, fazem-se comparações qualitativas, assim, as figuras 3.8(a) e 3.8(b) são comparada os valores de  $|U|$ , os resultados obtidos pelo método aqui implementado e obtido por Shi [25], respectivamente, para o tempo final  $t = 200s$ . Para os valores da componente  $u$  são comparados nas figuras 3.9(a) e 3.9(b) os resultados aqui obtidos com os de Shi [25] para o tempo final  $t = 200s$ .

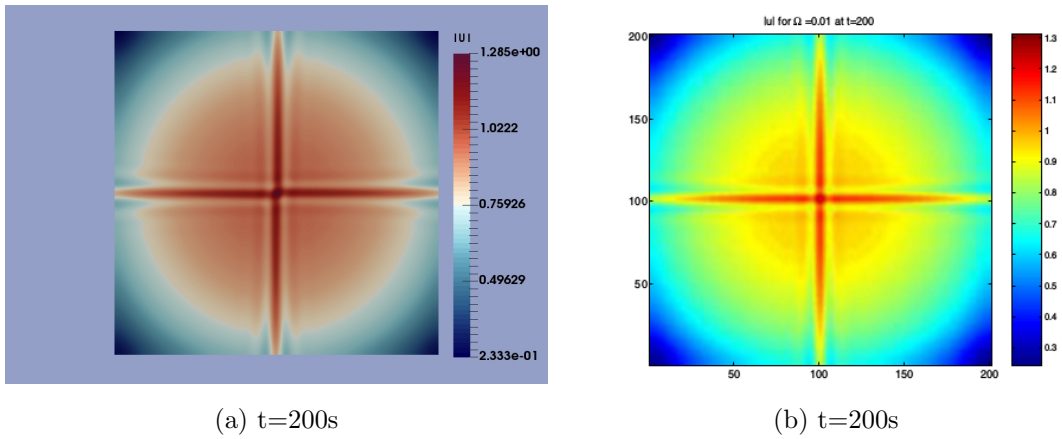


Figura 3.8: Comparação de  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  com os resultados de Shi

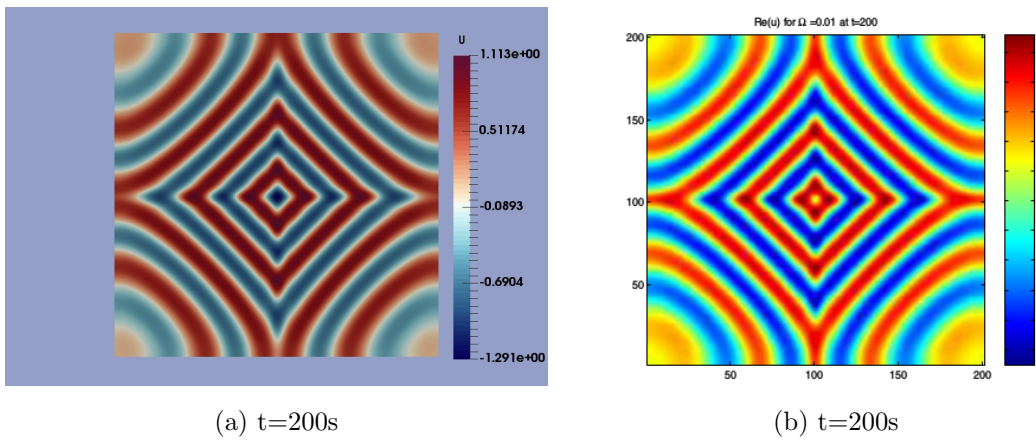


Figura 3.9: Comparação de  $u$  com os resultados de Shi

As Figuras 3.10 e 3.11 apresentam os resultados para  $\gamma = 0.02$ , comparados com os obtidos por Shi [25] e Zhou [31] no lado direito, e pelo método implementado aqui no lado esquerdo para o tempo final  $t = 200s$ :

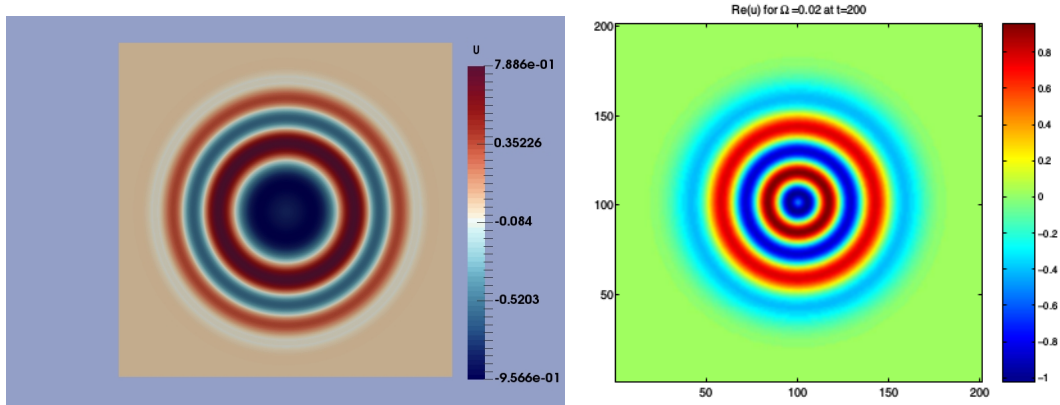


Figura 3.10: Comparação de  $u$  no tempo  $t = 200s$

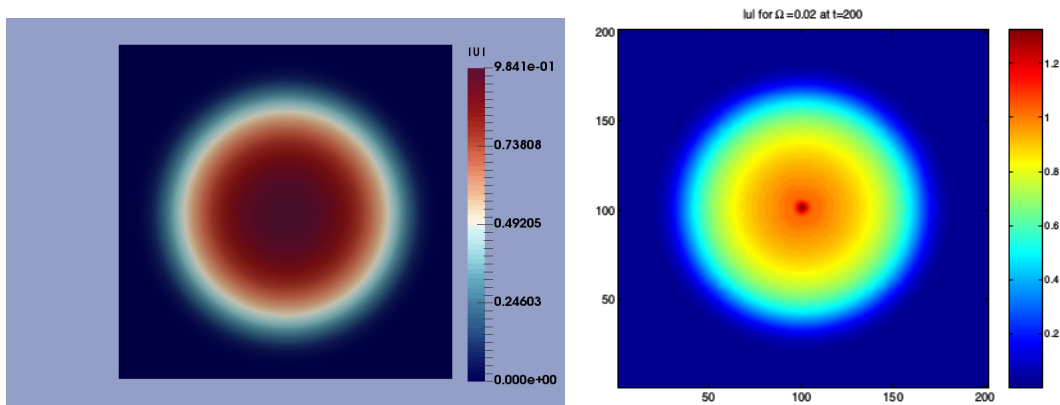


Figura 3.11: Comparação de  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  no tempo  $t = 200s$



Um outro caso de interesse da Equação de Ginzburg-Landau é quando  $\mu = 1$  na equação (3.3), obtendo-se a simplificação:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + u + |u|^2 \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \alpha \nabla^2 v - \beta |u|^2. \end{cases} \quad (3.4)$$

Para este problema consideramos condições de contorno periódicas e condições iniciais dadas por uma perturbação na solução estacionária  $(u^*, v^*) = (0, 0)$  de 0.0001%, isto é,  $u(x, y, 0) = u^* + 10^{-6} * rand$  e  $v(x, y, 0) = v^* + 10^{-6} * rand$ , onde *rand* é uma função de geração de números aleatórios do Matlab. Com parâmetros  $\alpha = 0.0$  e  $\beta = -1.2$ ,  $\alpha = 2.0$  e  $\beta = -0.752$ , com uma malha de  $N \times N = 250 \times 250$  pontos,  $\Delta t = 0.1$  e tempo de execução  $t \in [0, 300]$ .

Apresentamos na Figura 3.12 os resultados para  $u$  com  $\alpha = 0.0$  e  $\beta = -1.2$ , enquanto a Figura 3.13 é mostrada a solução para  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  com  $\alpha = 0.0$  e  $\beta = -1.2$ :

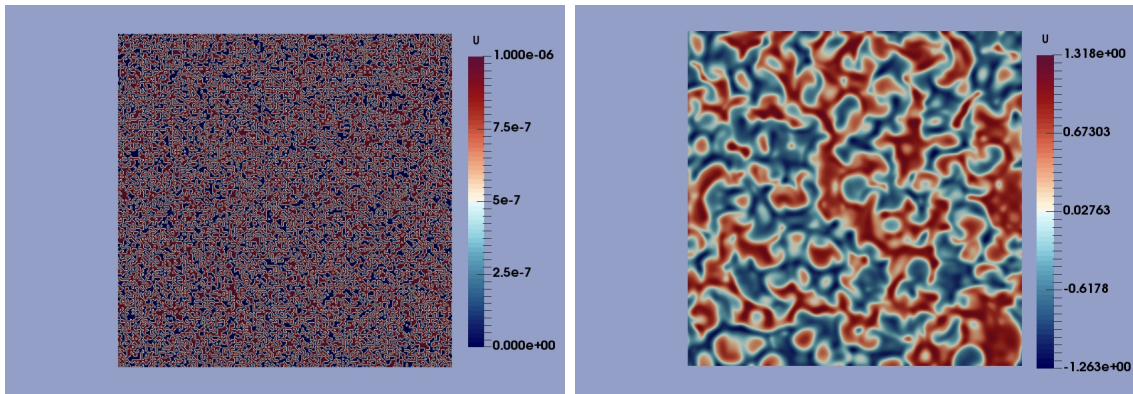


Figura 3.12: Solução Numérica para  $u$  para a condição inicial e  $t = 300s$

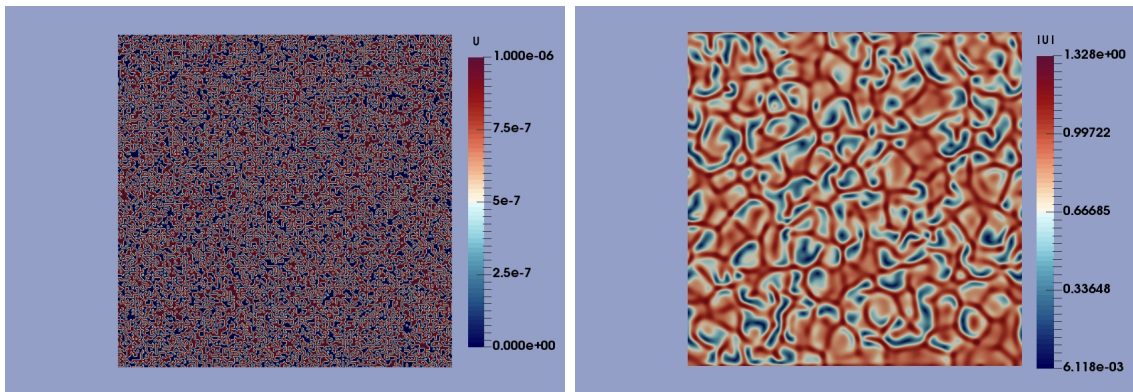


Figura 3.13: Solução Numérica para  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  para a condição inicial e  $t = 300s$

Nas Figuras 3.14 e 3.15 são apresentadas as soluções para  $u$  e  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  com  $\alpha = 2.0$  e  $\beta = -0.752$ , respectivamente, no tempo final  $t = 300s$

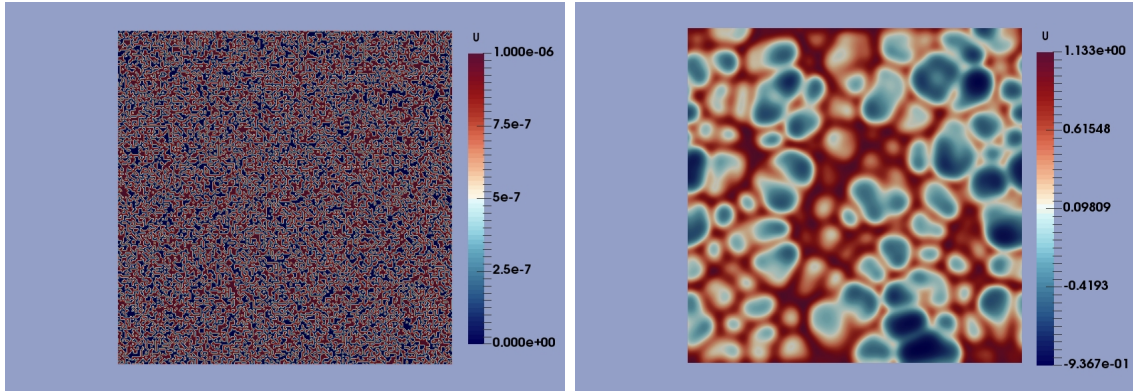


Figura 3.14: Solução Numérica para  $u$  para a condição inicial e  $t = 300s$

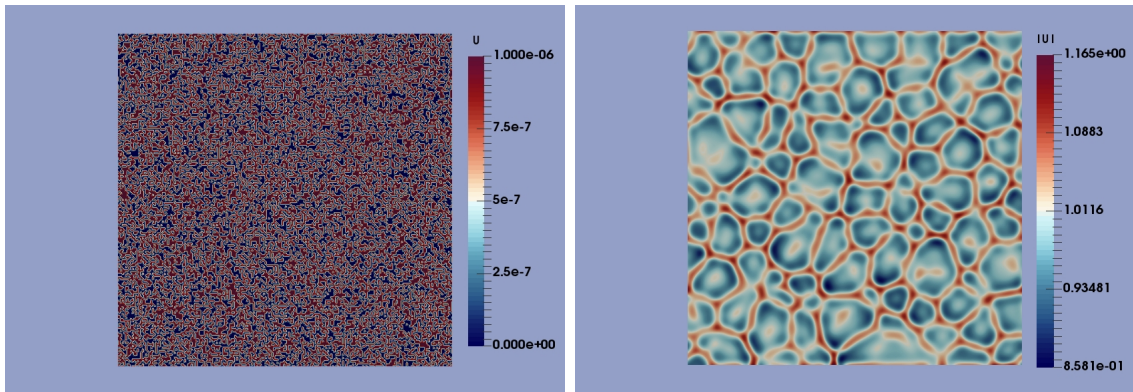


Figura 3.15: Solução Numérica para  $|U| = \sqrt{u^2 + v^2}$  para a condição inicial e  $t = 300s$

### 3.5 Modelo de FitzHugh-Nagumo

O modelo de FitzHugh-Nagumo, derivado do modelo iônico de Hodgkin-Huxley (HH), tem sido um dos mais bem sucedidos modelos para o estudo de células nervosas e/ou células cardíacas.

O sucesso do modelo FHN é devido não só à sua simplicidade matemática e sua riqueza a partir de um ponto de vista do sistema dinâmico, mas também devido à sua correlação com o modelo Hodgkin-Huxley. O modelo HH representa a excitabilidade das células a partir de 4 variáveis:  $V$  é um potencial elétrico e  $m$ ,  $h$  e  $n$  são variáveis limitadas ao intervalo  $[0, 1]$  determinadas para um sistema de equações diferenciais ordinárias e que caracterizam diferentes canais iônicos celulares. O modelo FHN consegue representar qualitativamente o mesmo problema a partir de 2 variáveis:  $v$  e  $w$ . Neste modelo a variável  $v$  está associada à dinâmica rápida da excitabilidade e  $w$  à dinâmica de recuperação. Em consequência, o resultado obtido com o modelo FHN pode ser qualitativamente interpretado como outro modelo iônico. Por isso, o modelo FHN é um dos modelos mais estudados em Neurociência / Electrocardiologia (para mais detalhes ver [16]). Consideramos o seguinte modelo de FitzHugh-Nagumo no domínio  $\Omega = [0, 320] \times [0, 320]$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = \nabla^2 v + \frac{1}{\epsilon}(v - \frac{v^3}{3} - w) \\ \frac{\partial w}{\partial t} = \epsilon(v - \gamma w + \beta) \\ n \cdot \nabla v = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.5)$$

As condições iniciais e os parâmetros utilizados são:

$$\begin{aligned} v(x, y, 0) &= \begin{cases} 2.0; & \text{se } \{155 < x, y < 165\} \\ -1.19940803524373; & \text{caso contrário} \end{cases} \\ w(x, y, 0) &= -0.6242600440546625 \end{aligned}$$

$\epsilon = 0.2$ ,  $\gamma = 0.8$ ,  $\beta = 0.7$ ,  $h_x = h_y = 1$  e  $\Delta t = 0.1$ .

Em seguida são apresentados os resultados gráficos obtidos na malha  $N \times N = 320 \times 320$  e tempo final  $t = 80s$ :

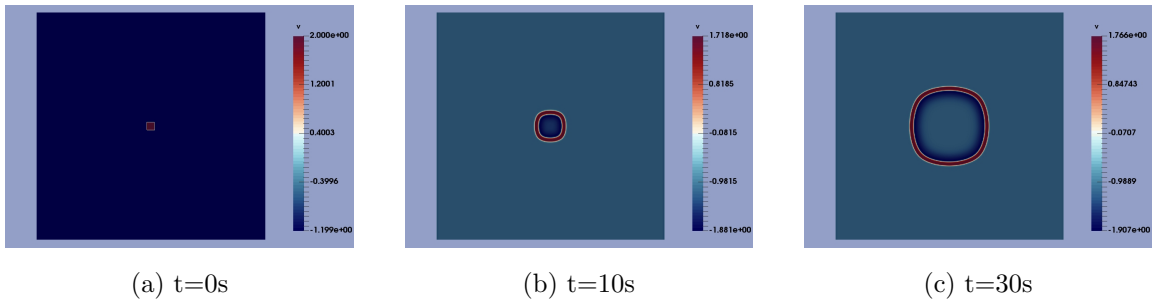


Figura 3.16: Solução de  $V$ , para  $t = 0s$ ,  $t = 10.0s$  e  $t = 30.0s$

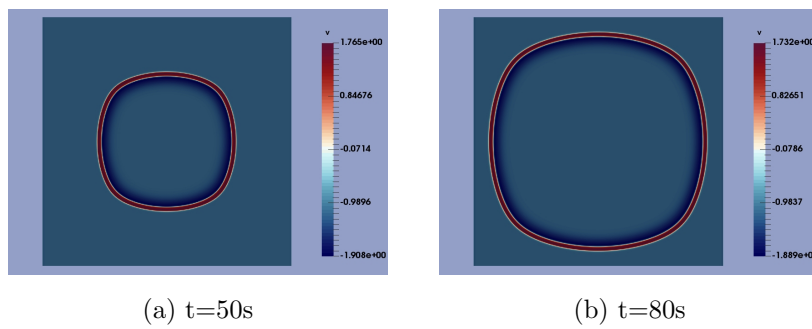


Figura 3.17: Solução de  $V$ , para  $t = 50.0s$  e  $t = 80.0s$



Consideramos uma outra versão da equação modelo de FitzHugh-Nagumo para um domínio  $\Omega = [0, 50] \times [0, 50]$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \frac{1}{\epsilon} u(1-u)(u-u_h) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v \\ n \cdot \nabla u = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.6)$$

com condições iniciais:

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= \begin{cases} 0; & \{x < 25\} \cup \{y > 30\} \\ (1 + \exp(4|x| - c_1))^{-2} - (1 + \exp(4|x| - c_2))^{-2}; & \text{caso contrário} \end{cases} \\ v(x, y, 0) &= \begin{cases} 0.1; & \{x < 25\} \cap \{y < 30\} \\ 0; & \text{caso contrário} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Onde  $u_h = \frac{v+b}{a}$ ,  $\Delta t = 0.01$ ,  $a = 0.36$ ,  $b = 0.001$ ,  $\epsilon = 0.02$ ,  $c_1 = 28$ ,  $c_2 = 25$ . Foi utilizada a malha  $N \times N = 200 \times 200$  e tempo final  $t = [0, 80s]$ , como apresentado por [32].

Na Figura 3.18 apresentamos os resultados da implementação utilizando CIIF de segunda ordem.

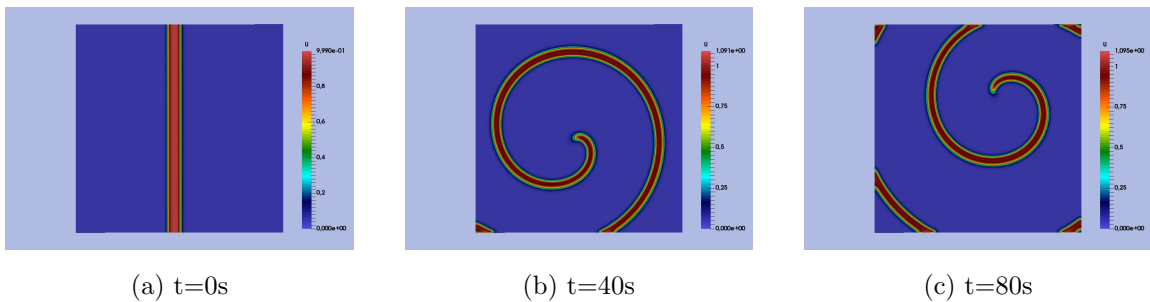


Figura 3.18: Resultados da componente U para os tempos,  $t = 0s$ ,  $t = 40.0s$  e  $t = 80.0s$  que mostram o surgimento das ondas espirais usuais nesta aplicação.

### 3.6 Modelo de Schnakenberg

O modelo de Schnakenberg [11] é um modelo matemático de equações diferenciais parciais que descrevem uma reação química autocatalítica (é um tipo de reação na qual um dos produtos formados atua como catalisador da própria reação, isto é, uma substância que fornece um novo caminho, no qual a energia de ativação da reação diminui e, conseqüentemente, a sua velocidade acelera [33]) com possível comportamento oscilatório. As reações trimoleculares entre dois produtos químicos X, Y e duas fontes químicas A, B são da seguinte forma:



Utilizando a **Lei da Ação das Massas** (ver apêndice A para mais detalhes), as equações diferenciais ordinárias associadas às equações de reação neste caso são:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX}{dt} = k_1 A - k_{-1} X + k_3 X^2 Y \\ \frac{dY}{dt} = k_2 B - k_3 X^2 Y \\ \frac{dA}{dt} = -k_1 A + k_{-1} X \\ \frac{dB}{dt} = -k_2 B \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Considerando aproximadamente A, B como constantes, o sistema reduz-se a um sistema não-linear acoplado para X e Y, em que A e B são constantes positivas. Em seguida, pode-se introduzir uma dependência espacial das concentrações e o movimento dos produtos químicos por adição de difusão. A fazê-lo, a equação resultante pode apresentar, sob certas condições, o que se chama de instabilidade de Turing. Nesta situação uma perturbação em concentrações homogêneas e em equilíbrio no espaço dá origem a uma distribuição, estável, heterogênea no espaço. O sistema de equações diferenciais parciais resultante é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X}{\partial t} = d_X \Delta X + k_1 A - k_{-1} X + k_3 X^2 Y \\ \frac{\partial Y}{\partial t} = d_Y \Delta Y + k_2 B - k_3 X^2 Y \end{array} \right. \quad (3.10)$$

Afim de analisar o modelo, escreve-se a equação (3.10) de forma adimensional considerando os seguintes parâmetros:

$$u = X\sqrt{\frac{a}{b}}, \quad v = Y\sqrt{\frac{k_3}{k_1}}, \quad a = \frac{k_{-1}A}{k_1}\sqrt{\frac{k_3}{k_1}}, \quad b = \frac{k_2B}{k_1}\sqrt{\frac{k_3}{k_1}},$$

$$d = \frac{d_X}{d_Y}, \quad \gamma = \frac{L^2k_1}{d_X}, \quad t^* = \frac{d_X t}{L^2}, \quad x^* = \frac{x}{L}.$$

Desta forma, obtemos um sistema com duas equações de reação-difusão para as concentrações  $u(x, t)$  e  $v(x, t)$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \gamma f(u, v) = \nabla^2 u + \gamma(a - u + u^2 v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \nabla^2 v + \gamma g(u, v) = d\nabla^2 v + \gamma(b - u^2 v) \end{cases} \quad (3.11)$$

Neste sistema (3.11),  $d$  é uma constante de difusão dos produtos químicos X, Y. As constantes  $a$ ,  $b$  são as concentrações de A e de B. Devido à simplicidade algébrica, o modelo de Schnakenberg é muito utilizado para exemplificar a formação de padrões espaço-temporais, ou seja, a instabilidade de Turing [3], [2].

Este modelo representa o comportamento de duas espécies químicas, usualmente referidas como ativador e inibidor. Se  $u$  é o ativador químico, a reação cinética é tal que na equação (3.11) o termo  $u^2 v$  representa a produção de  $u$  na presença de  $v$  e na equação (3.11) o mesmo termo  $u^2 v$  representa o consumo de  $v$  na presença de  $u$ .

### 3.6.1 Estudo de Turing para o modelo de Schnakenberg

Antes de analisar o modelo de Schnakenberg, discorremos sobre as restrições biológicas/químicas apresentadas neste modelo. Uma vez que o modelo tenta descrever a evolução das concentrações de produtos químicos, o que só faz sentido se  $u$  e  $v$  são positivos, os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $d$  devem ser positivos para ter sentido físico. A fim de analisar os modelos de reação-difusão, estes precisam ser fornecidos com condições iniciais e condições de contorno para tornar o problema bem-posto. Nesta parte, trabalhamos com condições de contorno de Neumann homogêneas, que são escolhidas porque estamos interessados em uma auto-organização de padrões (ver Apêndice A). Consideramos a seguinte equação de Schnakenberg no domínio  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + \gamma(a - u + u^2 v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + \gamma(b - u^2 v) \\ n \cdot \nabla u = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \\ n \cdot \nabla v = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.12)$$

com os seguintes condições iniciais e parâmetros para este problema:

$$\begin{cases} u(x, y, 0) = (a + b) + 10^{-3} \exp\left\{-100\left(\left(x - \frac{1}{3}\right)^2 + \left(y - \frac{1}{2}\right)^2\right)\right\} \\ v(x, y, 0) = \frac{b}{(a+b)^2} \end{cases}$$

A solução estável é dada por:  $(u^*, v^*) = (a+b, \frac{b}{(a+b)^2})$ . Os parâmetros  $\gamma = 100$ ,  $a = 0.1305$ ,  $b = 0.7695$ ,  $d = \frac{D_v}{D_u}$ ,  $D_u = 0.05$ ,  $D_v = 1$  e  $\Delta t = 0.25h_x$  foram escolhidos para fornecer a instabilidade de Turing, pois conforme descrito no apêndice A, para que isto aconteça deve-se satisfazer às seguintes desigualdades:

$$\begin{cases} f_{u^*} + g_{v^*} < 0 \\ f_{u^*} g_{v^*} - f_{v^*} g_{u^*} > 0 \\ df_{u^*} + g_{v^*} > 0 \\ (df_{u^*} + g_{v^*})^2 - 4d(f_{u^*} g_{v^*} - f_{v^*} g_{u^*}) > 0 \end{cases}$$

Onde

$$\begin{cases} f_{u^*} = \frac{2b}{a+b} - 1 \\ f_{v^*} = (a+b)^2 \\ g_{u^*} = -2\left(\frac{b}{a+b}\right) \\ g_{v^*} = -(a+b)^2 \end{cases}$$

Simulação 1: Fazendo a comparação qualitativa de nossos resultados com os obtidos por Zhang e Loula [26] para os tempos  $t = 0.5$  e  $t = 2$ , com  $240 \times 240$  pontos.

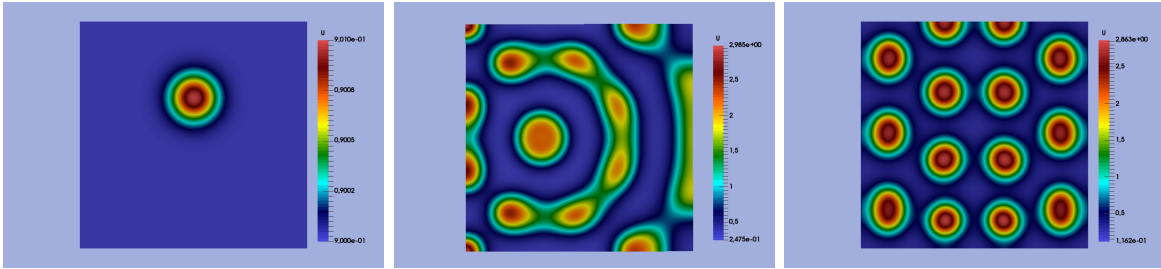


Figura 3.19: Concentração(U) para  $t=0$ ,  $t=0.5$  e  $t=2$

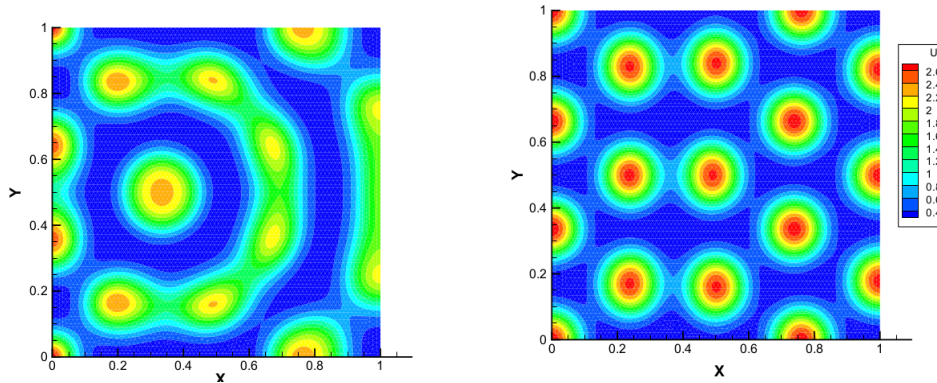


Figura 3.20: Concentração(U) para  $t=0.5$  e  $t=2$ , obtidos por Zhang e Loula [26]

Consideramos as seguintes condições iniciais dada por uma perturbação na solução estável de 0.9% adotados por Vanegas et al. [6] e Rodrigues et al. [7]:

$$\begin{cases} u(x, y, 0) = a + b - 0.009 * rand \\ v(x, y, 0) = \frac{b}{(a+b)^2} + 0.009 * rand \end{cases}$$

com os parâmetros:  $\gamma = 176.72$ ,  $a = 0.1$ ,  $b = 0.9$ ,  $D_u = 1.0$ ,  $D_v = 9.1676$  para acontecer a instabilidade de Turing. Onde *rand* é uma função que gera números aleatórios do Matlab. Simulação 2: Em seguida com o objetivo de validar os métodos aqui tratados apresentamos nas Figuras 3.21, 3.22 e 3.23 os resultados obtidos para este problema utilizando os mesmos dados empregados por Vanegas et al.[6] e Rodrigues et al. [7].

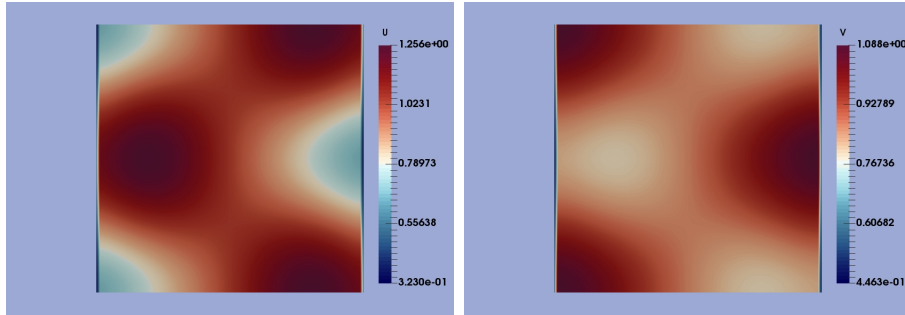


Figura 3.21: Concentração U e V para  $t=8.0$

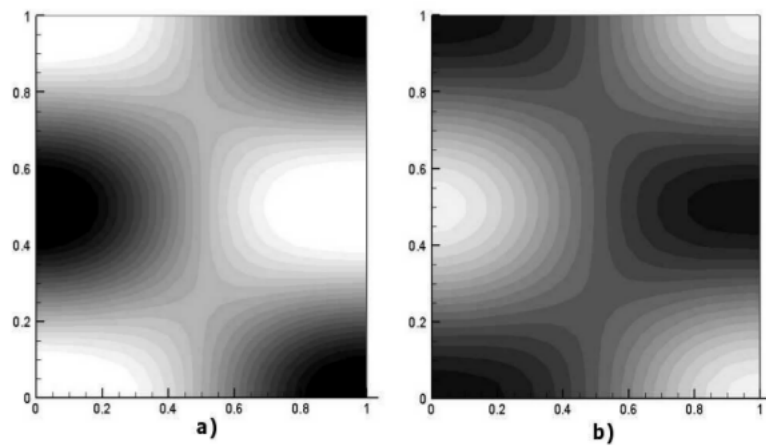


Figura 3.22: Concentração U e V para  $t=8.0$ , obtido por Vanegas [6]

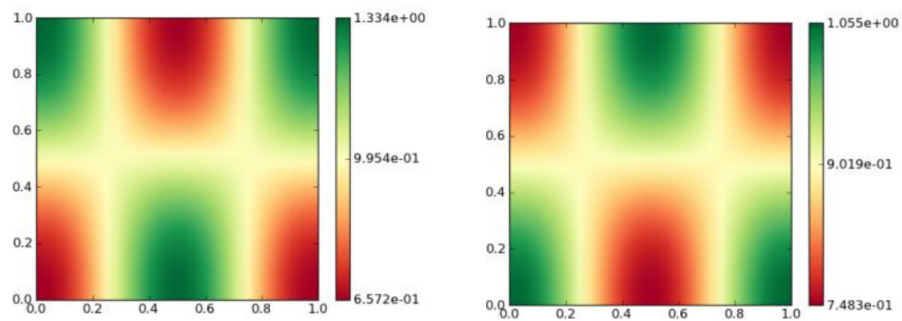


Figura 3.23: Concentração U e V para  $t=8.0$ , obtido por Rodrigues [7]

### 3.7 Modelo Tridimensional

Consideramos, o seguinte modelo de reação-difusão linear num domínio  $\Omega = [0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, \pi]$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = 0.2\nabla^2 u + 0.1u, \\ u(x, y, z, 0) = \cos(x) + \cos(y) + \cos(z) \\ \nabla u \cdot n = 0, \quad (x, y, z) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.13)$$

cuja solução exata é  $u = e^{-0.1t}(\cos(x) + \cos(y) + \cos(z))$  e tempo de simulação  $t = 2s$ , como determinado por Nie [21].

Na Tabela (3.6) pode-se apreciar a ordem de convergência do método CIIF de segunda ordem, com a discretização espacial  $N = 10, 20, 40$ , mostrando o tempo de execução na CPU.

$N \times N \times N$	Erro $L^2$	Ordem Convergência	CPU(seg)
$10 \times 10 \times 10$	3.6621249e-03	-	1.399e-02
$20 \times 20 \times 20$	7.7912801e-04	2.2327	0.65599
$40 \times 40 \times 40$	1.8051937e-04	2.1097	92.1959

Tabela 3.7: Resultados para diferentes tamanhos da malha

Nas figuras 3.24(a)-(b), 3.25(a)-(b), 3.26(a)-(b) e 3.27(a)-(b) são apresentadas as soluções para os tempos  $t = 0s$  e  $t = 2.0s$

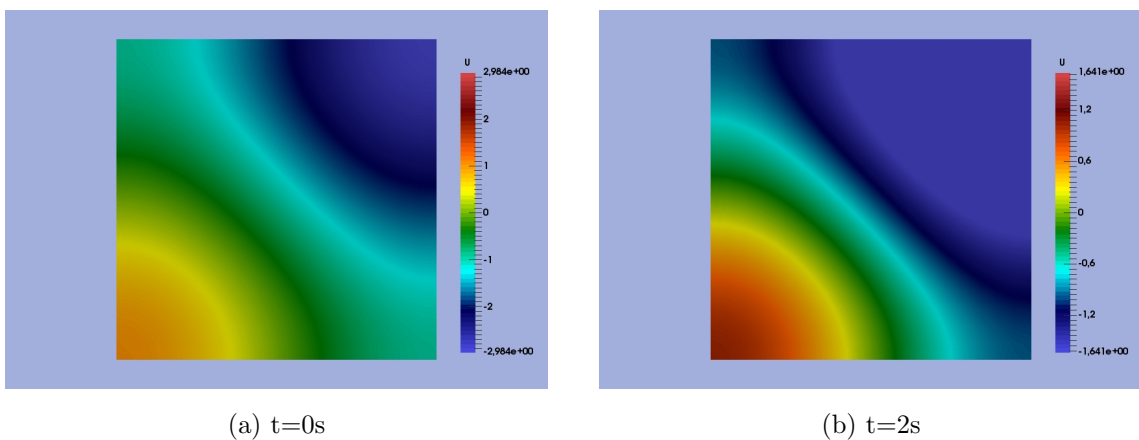


Figura 3.24: Solução aproximada no plano XY ( $Z=0$ ), para  $t=0.0$  e  $t=2.0$

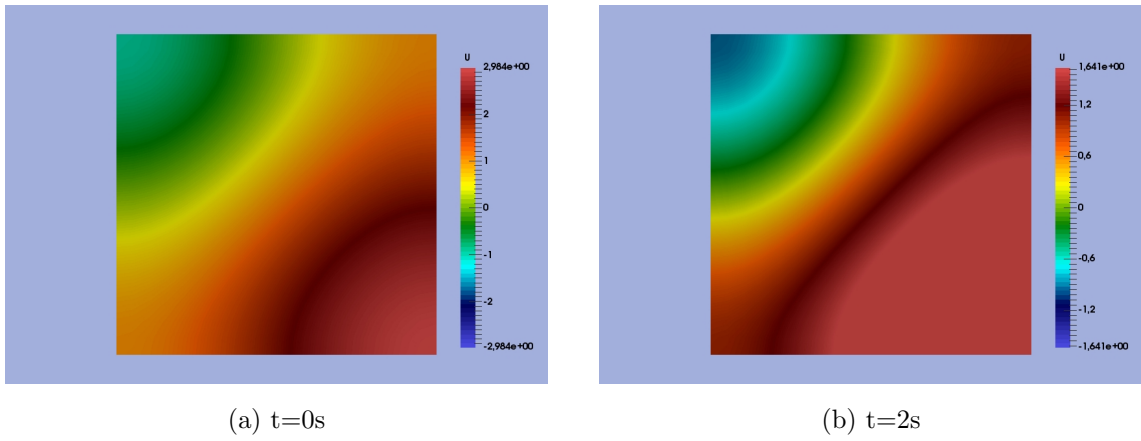


Figura 3.25: Solução aproximada no plano XZ ( $Y=0$ ), para  $t=0.0$  e  $t=2.0$

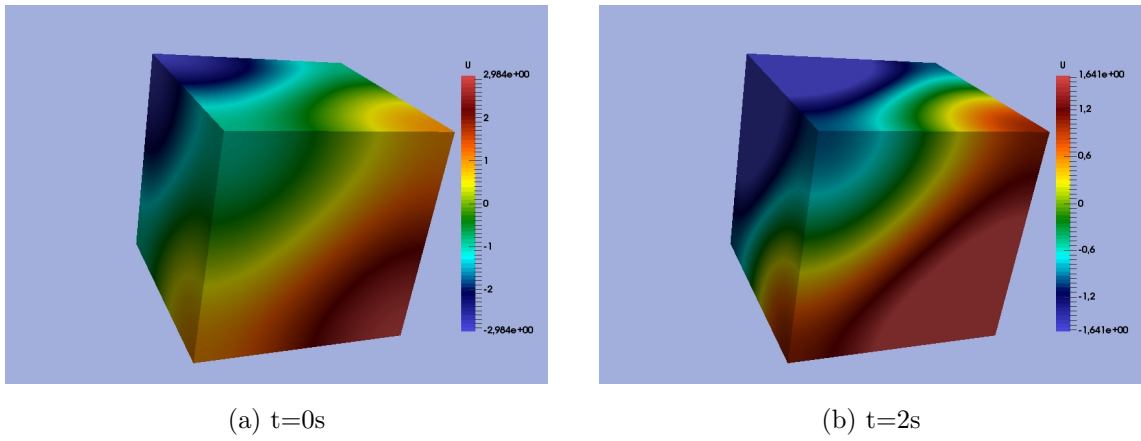


Figura 3.26: Solução aproximada para os tempos  $t=0.0$  e  $t=2.0$



## 4 CONCLUSÕES

No presente trabalho foram apresentados três métodos para a solução do PVI da discretização espacial por diferenças finitas de problemas de reação-difusão em domínios bi e tridimensionais. O método IIF, com boa eficiência para desacoplar o tratamento das reações e difusões, que trata explicitamente os termos difusivos e implicitamente os termos reativos.

Entretanto uma desvantagem deste método é a necessidade de grande uso de armazenamento e do cálculo da matriz exponencial, obtida da discretização do operador diferencial como mostrado no primeiro exemplo modelo aqui apresentado.

Um desenvolvimento alternativo a este método, para evitar o armazenamento das matrizes exponenciais de grande porte, é a utilização do método do subespaço de Krylov para calcular a multiplicação entre a exponencial da matriz-vetor sem formar explicitamente as matrizes.

Uma das vantagens da aplicação do método do subespaço de Krylov é que se pode manipular operadores de difusão envolvendo, os coeficientes de difusão que são funções espaciais ou operadores elípticos contendo derivadas cruzadas, além de nos permitir trabalhar com aproximações da matriz exponencial de dimensão muito menor que a dimensão do sistema após a discretização espacial (neste trabalho utilizamos para todos os casos  $m = 25$ ).

Neste caso a desvantagem do método do subespaço de Krylov é que este precisa ser realizado a cada passo de tempo, conduzindo a um incremento significativo no tempo de CPU como foi mostrado no primeiro modelo desta dissertação.

Motivados pela representação compacta para o operador Laplaciano, apresentamos o método CIIF, cuja discretização é representada na forma matricial, onde a discretização do operador de difusão é tratada por matrizes de dimensão menor comparada com aquela matriz do IIF, com a vantagem de preservar a estabilidade do método IIF, que resulta mais eficiente tanto em armazenamento quanto em custo de CPU.

Outra vantagem do CIIF é que as matrizes exponenciais podem ser pré-calculadas apenas uma vez e armazenadas para usos repetidos em cada passo de tempo da atualização

temporal.

A desvantagem do CIIF é que ele só funciona em sistemas com coeficientes de difusão constante e operador Laplaciano restrito a duas e três dimensões.

## 4.1 Trabalhos Futuros

Para trabalhos futuros pretende-se considerar problemas de convecção-difusão-reação transientes com discretização espacial feito por elementos finitos descontínuos e/ou descontínuos hibridizados, tratando a parte do PVI resultante pelo método KIIF.

Também deverão ser tratados a determinação de padrões resultantes de equações de reação-difusão em superfícies não planas tais como, esferas, cones e toros com o objetivo de aplicar estes estudos em geometrias diversas que permitam abordar formas como de animais tais como peixes, borboletas, zebras, nos quais observa-se a manifestação destes comportamentos ou padrões em formas de listras, manchas e pintas conforme [34].

Outra frente possível de pesquisa é o tratamento dos algoritmos aqui estudados para sua paralelização visando o uso mais efetivo de sistemas computacionais mais modernos permitindo o aumento de números de grau de liberdade nas simulações.

Mais interessante ainda é a utilização deste procedimento a problemas modelados através de equações de campo de fase empregados na abordagem de problemas de crescimento de tumores.

Tendo em vista a potencialidade dos pacotes utilizados no presente trabalho como o *Expokit* e na ampla utilização em diferentes áreas como na teoria de controle e no estudo de cadeias de Markov finitas pretende-se avançar no estudo mais aprofundado de sua utilização e suas diversas capacidades.

# Apêndice A

## Equação Geral de Reação-Difusão

Para derivar a equação geral de reação-difusão no espaço tridimensional, seja  $V \subset \mathbb{R}^3$  um domínio compacto e seja  $S \subset \mathbb{R}^2$  é a superfície contínua por partes. Considere  $u(\mathbf{X}, t)$  a concentração de uma substância em  $V$  localizado em  $\mathbf{X}$  no tempo  $t$ , e assumindo que  $u(\mathbf{X}, t)$  é contínuo. A teoria geral de conservação indica que a taxa de variação da quantidade de substância dentro de  $V$  é igual à quantidade de substância que flui através de  $S$  fora de  $V$  mais a quantidade de substância produzida pela sua origem dentro de  $V$ . Isto pode ser indicado matematicamente como:

$$\frac{d}{dt} \int_V u(\mathbf{X}, t) dV = - \int_S J \cdot dS + \int_V f(u(\mathbf{X}, t)) dV, \quad (1)$$

onde  $f(u(\mathbf{X}, t))$  representa a fonte da substância dentro de  $V$  e  $J$  representa o fluxo da substância através de  $S$ .

**Teorema 1** (Teorema da Divergência). *Se  $V$  é um domínio espacial limitado com uma superfície de contorno contínua por partes  $S$  com orientação positiva, e  $J$  é qualquer campo contínuo do vetor sobre o encerramento do  $V$ , então:*

$$\int_V \nabla \cdot J dV = \int_S J \cdot dS. \quad (2)$$

Agora utilizando (4.2), e reescrevendo a equação (4.1) como:

$$\frac{d}{dt} \int_V u(\mathbf{X}, t) dV = - \int_V \nabla \cdot J dV + \int_V f(u(\mathbf{X}, t)) dV$$

a qual implica:

$$\int_V \left[ \frac{du(\mathbf{X}, t)}{dt} + \nabla \cdot J - f(u(\mathbf{X}, t)) \right] dV = 0. \quad (3)$$

**Teorema 2** (Teorema do anulamento). *Se  $f(\mathbf{X})$  é uma função contínua em  $D$  tal que  $\int_{D'} f(\mathbf{X})dV = 0$  para todo subdomínio  $D' \subset D$ , então  $f(\mathbf{X}) \equiv 0$  em  $D$ .*

Assim aplicando o teorema 2 pra a equação (4.3), temos que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot J + f(u(\mathbf{X}, t)) \quad (4)$$

A primeira Lei de Fick afirma que  $J = -D\nabla u$ , onde  $D > 0$  é o coeficiente de difusão constante isotrópica. Usando a primeira lei de Fick, a equação (4.4) pode ser reescrita como a equação de reação-difusão geral:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u + f(u(\mathbf{X}, t))$$

## Obtenção da Equação de Allen-Cahn

Dado o funcional de Energia como:

$$\mathbf{E}(u) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{4\epsilon^2} (u^2 - 1)^2 dx \right\}$$

Defina-se a derivada de Gâteaux para o funcional  $\mathbf{E}(u) : \mathcal{D}(\mathbf{E}) \subset \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{R}$  como:

$$\delta \mathbf{E}(u, \eta) = \left. \frac{\partial \mathbf{E}(u + \gamma \eta)}{\partial \gamma} \right|_{\gamma=0},$$

que corresponde ao diferencial de Gâteaux do funcional  $\mathbf{E}$  no ponto  $u$  segundo a direção  $\eta$ , onde  $\eta$  é a variação admissível e  $\mathcal{U} = \{u; u \text{ suf. regular com primeira derivada quadrado integrável}\}$ . Finalmente, para minimizar o funcional de energia  $\mathbf{E}$  utilizarmos a derivada de Gâteaux para obter as Equações de Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(u + \gamma \eta) &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla(u + \gamma \eta)|^2 + \frac{1}{4\epsilon^2} ((u + \gamma \eta)^2 - 1)^2 dx \right\} \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla u + \gamma \nabla \eta|^2 + \frac{1}{4\epsilon^2} (u^2 + 2\gamma u \eta + \gamma^2 \eta^2 - 1)^2 dx \right\} \end{aligned}$$

Logo aplicando a condição necessária para se ter um extremo:

$$\left. \frac{d\mathbf{E}(u + \gamma \eta)}{d\gamma} \right|_{\gamma=0} = 0; \quad \forall \eta \in \mathcal{V}$$

obtém-se:

$$\Rightarrow \left\{ \int_{\Omega} (|\nabla u + \gamma \nabla \eta| |\nabla \eta| + \frac{1}{2\epsilon^2} (u^2 + 2\gamma u \eta + \gamma^2 \eta^2 - 1)(2u\eta + 2\gamma \eta^2)) dx \right\} \Big|_{\gamma=0} = 0$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} (|\nabla u| |\nabla \eta| + \frac{1}{2\epsilon^2} (u^2 - 1)(2u\eta)) dx = 0$$

Note que:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\partial \Omega} (\nabla u \cdot n) v - \int_{\Omega} \Delta u v$$

Assim obtemos que:

$$\int_{\Omega} \left( -\Delta u + \frac{1}{\epsilon^2} (u^2 - 1)u \right) \eta dx = 0; \forall \eta \in \mathcal{V}$$

Portanto obtém-se a equação de Euler-Lagrange:

$$-\Delta u + \frac{1}{\epsilon^2} (u^2 - 1)u = 0, \quad \forall \eta \in \mathcal{V}$$

Dado que  $u$  não é conservativo, em vez de utiliza-lo para determinar o fluxo, pode-se definir a derivada do tempo de  $u$  diretamente para a derivada variacional, assim segue a equação de Allen-Cahn ou equação de Ginzburg-Landau não conservativo :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u - \frac{1}{\epsilon^2} (u^3 - u)$$

## Subespaço de Krylov

Para uma matriz  $\mathbf{A}$  de dimensão  $n$  e um vetor unitario  $v \in \mathbb{R}^n$ , o processo de Arnoldi gera uma base ortonormal  $\mathbf{V}_m = [v_1, \dots, v_m]$  para o subespaço de Krylov  $\mathbf{K}_m$ :

$$\mathbf{K}_m = \text{Span}\{v, \mathbf{A}v, \dots, \mathbf{A}^{m-1}v\},$$

e uma matriz superior de Hessenberg de dimensão  $m$  tal que:

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m + h_{m+1,m}v_{m+1}\mathbf{e}_m^T,$$

onde  $\mathbf{e}_i$  é o  $i$ -ésimo vetor base canônico de  $\mathbb{R}^m$ . Gallopulos e Saad [35] mostraram que para funções analíticas  $f$

$$f(\mathbf{A})v \approx \mathbf{V}_m f(\mathbf{H}_m)\mathbf{e}_1 \quad (5)$$

para  $m \ll n$ , logo  $\mathbf{V}_m f(\mathbf{H}_m)\mathbf{e}_1$  é usualmente mais facil de se calcular do que  $f(\mathbf{A})v$ . Podemos utilizar (5) para aproximar o produto

$$\phi(\mathbf{A}\Delta t)v \approx \mathbf{V}_m \phi(\Delta t\mathbf{H}_m)\mathbf{e}_1 \quad (6)$$

Onde  $\phi(z) = \frac{e^z - 1}{z}$  ou  $\phi = e^z$ .

### *Método de Arnoldi*

O método de Arnoldi é uma projeção ortogonal de  $\mathbf{A}$  sobre  $\mathbf{K}_m$ , onde a matriz  $\mathbf{A}$  é não Hermitiana, pois o caso  $\mathbf{A}$  Hermitiana,  $\mathbf{K}_m$  é comunmente encontrado através do método de Lanczos. O algoritmo 3 ilustra o processo de Arnoldi que produz uma sequência de vetores ortonormais, as quais gera o subespaço de Krylov.

---

**Algoritmo 3: MÉTODO DE ARNOLDI**


---

```

 $v_1, \|v_1\| = 1$ 
para  $j = 1, \dots, m$  faça
  para  $i = 1, \dots, j$  faça
     $| h_{i,j} = (\mathbf{A}v_j, v_i)$ 
  fim
   $w_j = \mathbf{A}v_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j}v_i$ 
   $h_{j+1,j} = \|w_j\|$ 
  se  $h_{j+1,j} = 0$  então
     $|$  Parar
  fim
   $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$ 
fim

```

---

Para qualquer passo, o algoritmo aplica o produto matriz-vetor com  $\mathbf{A}v_j$  e ortonormaliza  $w_j$  de  $v_i, i = 1, \dots, j$  pelo processo de Gram-Schmidt estabilizado. Denotemos por  $\mathbf{V}_m$  a matriz  $n \times m$  onde suas colunas são os vetores  $v_1, \dots, v_m$  achados no algoritmo acima. Nos denotamos por  $\mathbf{H}_m$  a matriz de Hessenberg de ordem  $m \times m$  com entradas não nulas  $h_{ij}$  achados no algoritmo acima.

**Teorema 3.** *Se o algoritmo 3 não parar antes do passo  $m$ , então os vetores  $v_1, \dots, v_m$  formam uma base para  $\mathbf{K}_m$*

**Teorema 4.** *Se temos que:*

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m + w_m\mathbf{e}_m^T \quad (7)$$

e

$$\mathbf{V}_m^T\mathbf{A}\mathbf{V}_m = \mathbf{H}_m \quad (8)$$

podemos escrever (7) como:

$$\mathbf{A}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m + h_{j+1,m}\mathbf{V}_m\mathbf{e}_m^T$$

notamos o que algoritmo 3 irá parar na etapa  $j < m$ , se  $h_{j+1,j} = 0$ . Neste caso, temos o seguinte resultado



**Teorema 5.** *Se o algoritmo 3 parar na etapa  $j < m$ , então o subespaço  $\mathbf{K}_j$  é invariante sobre  $\mathbf{A}$ .*

As provas dos teoremas (3),(4) e (5) podem ser encontrado na referência [36]. O algoritmo 3 assume a aritmética exata, na maioria dos casos arredondar erro e cancelamento pode ser grave nas etapas de ortogonalização. Em particular, o método de Gram-Schmidt clássico tem propriedades numéricas pobres, e uma grave perda de ortogonalidade é exibido entre cada  $v_i$ . Uma significativa melhoria vem da dupla ortogonalização.

Assim dado  $v_1, \dots, v_m$  uma base ortonormal, note-se que  $\mathbf{V}_m^T \mathbf{V}_m = \mathbf{I}$ . Assim, podemos definir o operador de projeção ortogonal  $P : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{K}_m$  dado por  $P = \mathbf{V}_m \mathbf{V}_m^T$  e projetar o produto  $\mathbf{A}v$  por:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}v \approx P\mathbf{A}Pv &= \mathbf{V}_m \underbrace{\mathbf{V}_m^T \mathbf{A} \mathbf{V}_m}_{\mathbf{H}_m} \mathbf{V}_m^T v \\ &= \mathbf{V}_m \mathbf{H}_m \mathbf{V}_m^T v \end{aligned}$$

Escrevendo  $v = \|v\|v_1$  e  $v_1 = \mathbf{V}_m \mathbf{e}_1$ , temos que:

$$\mathbf{A}v \approx \|v\| \mathbf{V}_m \mathbf{H}_m \mathbf{e}_1$$

## Obtenção do Método CIIF

Inicialmente temos que:

$$\frac{dU}{dt} = AU + UB + \mathcal{F}(U) \quad (9)$$

Demonstraremos que:

$$\frac{d(e^{-At}Ue^{-Bt})}{dt} = e^{-At}\mathcal{F}(U)e^{-Bt}$$

Partimos de:

$$\frac{d(e^{-At}Ue^{-Bt})}{dt} = (-Ae^{-At})Ue^{-Bt} + e^{-At}\frac{dU}{dt}e^{-Bt} + e^{-At}U(-Be^{-Bt})$$

Logo da equação(9), temos que:

$$\begin{aligned} \frac{d(e^{-At}Ue^{-Bt})}{dt} &= -Ae^{-At}Ue^{-Bt} + e^{-At}(AU + UB + \mathcal{F}(U))e^{-Bt} - e^{-At}UBe^{-Bt} \\ &= -Ae^{-At}Ue^{-Bt} + e^{-At}AUe^{-Bt} + e^{-At}\mathcal{F}(U)e^{-Bt} \end{aligned} \quad (10)$$

Mostremos que:

$$Ae^{-At} = e^{-At}A \quad (11)$$

Em efeito, seja A uma matriz diagonalizável, então existe uma matriz P de autovetores de A, tal que:

$$A = PDP^{-1} \quad e \quad e^A = Pe^D P^{-1}. \quad (12)$$

Onde D é uma matriz diagonal de autovalores de A. Então, temos que:

$$-Ae^{-At} = \frac{d(e^{-At})}{dt}$$

Logo da equação (12), obtém-se:

$$\begin{aligned} -Ae^{-At} &= \frac{d(e^{-At})}{dt} = \frac{d(Pe^{-Dt}P^{-1})}{dt} \\ &= -PDe^{-Dt}P^{-1} \\ &= -Pe^{-Dt}DP^{-1} \\ &= -Pe^{-Dt}P^{-1}PDP^{-1} \\ &= -e^{-At}A \end{aligned}$$

Assim mostra-se que:

$$Ae^{-At} = e^{-At}A$$

Finalmente da equação (10), obtém-se que:

$$\begin{aligned}\frac{d(e^{-At}Ue^{-Bt})}{dt} &= -e^{-At}AUe^{-Bt} + e^{-At}AUe^{-Bt} + e^{-At}\mathcal{F}(U)e^{-Bt} \\ &= e^{-At}\mathcal{F}(U)e^{-Bt}\end{aligned}$$

## Lei de Ação das Massas

Esta lei estabelece que a taxa de uma reação é proporcional ao produto das concentrações de seus reagentes. Para indicar uma forma geral para esta lei considere-se a seguinte reação:



Os coeficientes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$  são constantes não negativas conhecidas como *Coefficientes Estequiométricos* para a reação e as variáveis A, B, C, D designam as concentrações das substâncias presentes nesta reação. Em efeito, reação refere que  $\alpha A$  combina com  $\beta B$  para formar  $\gamma C$  e  $\delta D$ . As espécies do lado esquerdo A e B, são denominados reagentes e os do lado direito C e D, são os produtos para esta reação particular. A ordem da reação é o número total de reagentes, neste caso é  $\alpha + \beta$ .

A lei de ação das massas, afirma que a taxa  $r$  da reação para (13) é:

$$r = kA^\alpha B^\beta, \quad (14)$$

onde  $k$  é a constante da taxa ou coeficiente de velocidade de reação.

**Definição** A Lei de Ação das Massas consiste das seguintes três premissas:

- 1 A taxa,  $r$ , da reação é proporcional ao produto das concentrações dos reagentes, com cada concentração elevada à potência igual ao seu respectivo coeficiente estequiométrico.
- 2 A taxa de alteração da concentração de cada espécie na reação é o produto do seu coeficiente estequiométrico com a velocidade da reação, ajustada para o sinal (+ se for produto, e – se for reagente).
- 3 Para um sistema de reações, as taxas se adicionam.

Para ilustrar consideremos a reação (13). A parte (1) da definição é simplesmente a fórmula (14) colocado em outras palavras. Para a parte (2), a taxa de variação  $\frac{dA}{dt}$  é igual a  $-\alpha r$ , enquanto que  $\frac{dC}{dt}$  é qual a  $\gamma r$ . Combinando esta informação, a partir da lei de

ação das massas as equações cinéticas para as concentrações são :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dA}{dt} = -\alpha r = -\alpha k A^\alpha B^\beta \\ \frac{dB}{dt} = -\beta k A^\alpha B^\beta \\ \frac{dC}{dt} = \gamma k A^\alpha B^\beta \\ \frac{dD}{dt} = \delta k A^\alpha B^\beta \end{array} \right. \quad (15)$$

Para completar a formulação, assumam-se que as condições iniciais são conhecidas,  $A(0) = A_0$ ,  $B(0) = B_0$ ,  $C(0) = C_0$ , e  $D(0) = D_0$  são dados.

**Lei de Conservação** Produzimos quatro equações para as quatro espécies envolvidas no exemplo da reação em (13). Embora estas equações não sejam fáceis de se resolver simplificações significativas podem ser feitas a partir da constatação de que é possível combinar as duas primeiras dessas equações. Para explicar que é isso, note que é possível combinar as duas primeiras equações para produzir zero no lado direito. Especificamente  $\frac{d(\beta A - \alpha B)}{dt} = 0$ , isso significa  $\beta A - \alpha B = \text{constante}$ . Usando as condições iniciais, temos que :

$$\beta A - \alpha B = \beta A_0 - \alpha B_0. \quad (16)$$

De forma similar, pela combinação de  $C$  e  $A$ , obtém-se :

$$\gamma A - \alpha C = \gamma A_0 - \alpha C_0 \quad (17)$$

e das equações  $D$  e  $A$ , temos que :

$$\delta A - \alpha D = \delta A_0 - \alpha D_0 \quad (18)$$

As equações (16)-(18) são leis de conservação que desempenham papel essencial no estudo de equações de reação sendo importante definir seu significado. Estes irão desempenhar um papel essencial em nosso estudo de equações cinéticas, por isso é importante definir exatamente o que isso significa.

**Definição** Dado as espécies  $A, B, C, \dots, Z$  e os números  $a, b, c, \dots, z$ ; então  $aA + bB + cC + \dots + zZ$  é dito ser conservada se:

$$\frac{d(aA + bB + cC + \dots + zZ)}{dt} = 0 \quad (19)$$

Isto requer que mínimo um dos números  $a, b, c, \dots, z$  seja diferente de zero, e (19) detém independentemente os valores para a condição inicial e constantes de velocidade. A correspondente lei de conservação é  $aA + bB + cC + \dots + zZ = \text{constante}$ . Um dos usos da lei de conservação é para reduzir o número de equações necessárias para ser resolvido. Por exemplo, das equações (16),(17) e (18), temos que:

$$B = B_0 + \beta(A - A_0)/\alpha \quad (20)$$

$$C = C_0 + \gamma(A_0 - A)/\alpha \quad (21)$$

$$D = D_0 + \delta(A_0 - A)/\alpha \quad (22)$$

Além disso, uma vez conhecido  $A$  nós conseguimos determinar as outras concentrações. A equação para  $A$  toma a forma:

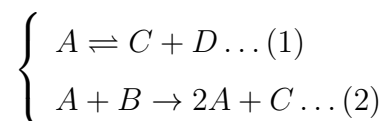
$$\frac{dA}{dt} = -\alpha k A^\alpha (a + bA)^\beta, \quad (23)$$

onde  $a = B_0 - bA_0$  e  $b = \beta/\alpha$ . Esta ainda é uma equação formidável, mas só temos de lidar com uma ao invés de quatro, como foi inicialmente previsto.

**Estado Estável** Além das leis de conservação estamos também interessados em soluções estáveis. Para ser um estado estacionário a concentração deve ser constante e deve satisfazer as equações cinéticas. Da equação (23) existem duas soluções estáveis, um é  $A = 0$  e o segundo  $A = -a/b$ . Os valores correspondentes das soluções estáveis para as outras espécies na reação são determinadas de (20)-(22). Como impomos uma restrição que concentrações são não sejam negativas. Se  $a \geq 0$ , então o único estado estável fisicamente relevante para a equação (23) é  $A = 0$ .

Considere-se o seguinte exemplo para deixar em claro as definições feitas até aqui.

Seja a reação química dada por:



Da equação (1) podemos escrever  $A \rightarrow C + D$  e  $C + D \rightarrow A$ . Neste caso a reação é dito ser reversível. Cada uma têm sua própria constante de velocidade, consideremos  $k_1$  para o primeiro e  $k_{-1}$  para o segundo. Em segundo lugar, a equação (2) é um exemplo de uma reação autocatalítica porque  $A$  esta sendo utilizado para se produzir do mesmo modo (isto é, há mais  $A$  no final da reação, embora seja um do reagente). Usamos  $k_2$  para a sua constante de velocidade.

As correspondentes taxas são  $r_1 = k_1A$ ,  $r_{-1} = k_{-1}CD$  e  $r_2 = k_2AB$ , agora a lei de conservação das massas se aplica a cada reação e as taxas são adicionadas para construir a equação cinética para cada espécie. Por exemplo, a equação cinética para  $A$  é:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -r_1 + r_{-1} - r_2 + 2r_2 \\ &= -k_1A + k_{-1}CD - k_2AB + 2k_2AB \\ &= -k_1A + k_{-1}CD + k_2AB. \end{aligned}$$

Note que para reação em (2),  $A$  é tratado com ambos reagente ( $-r_2$ ) e produto ( $+2r_2$ ) como especificado pela reação. De forma análoga, as equações cinéticas para as outras espécies são:

$$\begin{cases} \frac{dB}{dt} = -k_2AB \\ \frac{dC}{dt} = k_1A - k_{-1}CD \\ \frac{dD}{dt} = k_1A - k_{-1}CD \end{cases}$$

## Condições Gerais para a Instabilidade de Turing

A análise matemática da instabilidade de Turing prevê a possibilidade da existência, o tipo e a forma dos padrões que podem surgir na solução das equações de reação-difusão. Consideremos um sistema descrevendo a difusão e a reação entre duas espécies descrito pelas equações abaixo.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \beta f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d\nabla^2 v + \beta g(u, v) \end{cases} \quad (24)$$

Onde  $f$  e  $g$  são funções que descrevem os processos de reação e  $d$  é a razão entre as constantes de difusão. Na análise da instabilidade de Turing usualmente assume-se que as condições de fluxo no contorno são iguais a zero.

Supõe-se que para as equações (24) exista um estado estacionário (estável) homogêneo. Nesta situação os termos de difusão ( $\nabla^2 u, \nabla^2 v$ ) se anulam. Diz-se que as equações (24) apresentam instabilidades de Turing quando pequenas perturbações espaciais deste estado levam o sistema a assumir um novo estado estacionário não homogêneo.

A análise da estabilidade temporal destes estados estacionários homogêneos é feita a partir de (24) na ausência dos termos de difusão:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \beta f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \beta g(u, v). \end{cases} \quad (25)$$

O estado estável do sistema em (24) é  $(u, v) = (u^*, v^*)$  tal que:

$$f(u^*, v^*) = g(u^*, v^*) = 0. \quad (26)$$

Note que as equações (25) podem ser escritas para um ponto,  $(u^* + w^u(t), v^* + w^v(t))$ , na vizinhança do estado de equilíbrio, à partir da expansão em série de Taylor das funções  $f$  e  $g$ . Considerando-se apenas os termos lineares, temos que:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{dw^u}{dt} \approx \beta[f(u^*, v^*) + \frac{\partial f}{\partial u} w^u + \frac{\partial f}{\partial v} w^v]. \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{dw^v}{dt} \approx \beta[g(u^*, v^*) + \frac{\partial g}{\partial u} w^u + \frac{\partial g}{\partial v} w^v]. \end{cases} \quad (27)$$



As equações (27) podem ser escritas matricialmente como:

$$\mathbf{w}_t = \beta \mathbf{A} \mathbf{w}, \quad (28)$$

onde:

$$\mathbf{w}_t = \begin{pmatrix} \frac{dw^u}{dt} \\ \frac{dw^v}{dt} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{(u^*, v^*)}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w^u \\ w^v \end{pmatrix}. \quad (29)$$

onde os sub-índices representam a derivação e  $\mathbf{A}$ , matriz de estabilidade (Jacobiana), armazena as derivadas avaliadas em  $(u^*, v^*)$ .

Se  $\lambda$  é um autovalor de  $\beta \mathbf{A}$  com autovetor  $\mathbf{V}$ , então:

$$\beta \mathbf{A} \mathbf{V} = \lambda \mathbf{V} \quad (30)$$

Dessa forma  $\mathbf{X} = e^{\lambda t} \mathbf{V}$  é solução da equação (30) uma vez que:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_t &= \lambda e^{\lambda t} \mathbf{V} \\ &= e^{\lambda t} \beta \mathbf{A} \mathbf{V} \\ &= \beta \mathbf{A} e^{\lambda t} \mathbf{V} \\ &= \beta \mathbf{A} \mathbf{X}. \end{aligned}$$

O estado estacionário  $\mathbf{w} = 0$  é linearmente estável se a parte real do autovalor é negativo, isto é,  $Re(\lambda) < 0$ , uma vez que, neste caso, a perturbação  $\mathbf{w} \rightarrow 0$  com  $t \rightarrow \infty$ .

A determinação dos autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}$  se dá através da imposição de que a equação (30) tenha solução não nula, desta forma:

$$\det(|\beta \mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}|) = \begin{vmatrix} \beta f_u - \lambda & \beta f_v \\ \beta g_u & \beta g_v - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (31)$$

A equação (31) acima, conhecida como equação característica, expandida fornece:

$$\lambda^2 - \beta(f_u + g_v)\lambda + \beta^2(f_u g_v - f_v g_u) = 0 \quad (32)$$

Assim resolvendo a equação (32) as raízes podem ser escritas como:

$$\lambda_1, \lambda_2 = \frac{\beta[(f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)}]}{2} = 0 \quad (33)$$

A partir da análise da equação (33) pode-se perceber que a estabilidade linear, isto é  $Re(\lambda) < 0$  é garantida se:

$$tr(\mathbf{A}) = f_u + g_v < 0. \quad (34)$$

$$|\mathbf{A}| = f_u g_v - f_v g_u > 0. \quad (35)$$

As condições acima garantem a estabilidade linear no tempo do estado homogêneo, portanto, sem a influência dos termos difusivos. Na presença da difusão, tem-se o sistema de reação-difusão completo.

$$\mathbf{w}_t = \mathbf{D}\nabla^2 \mathbf{w} + \beta A \mathbf{w}, \quad \text{com} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \quad (36)$$

As soluções do sistema (36) são da forma:

$$\mathbf{w}(r, t) = \sum_k c_k e^{\lambda^{(k)} t} \mathbf{W}_k(\mathbf{r}) \quad (37)$$

Onde as constantes  $c_k$  são determinadas por expansão de Fourier das condições iniciais em termos de  $\mathbf{W}_k(\mathbf{r})$ , que são autovetores associados aos autovalores  $k$  do problema de autovalor.

$$\nabla^2 \mathbf{W} + k^2 \mathbf{W} = 0, \quad \text{com} \quad n \cdot \nabla \mathbf{W} = 0 \quad \text{no contorno.} \quad (38)$$

Se o problema for unidimensional definido em  $0 < x < a$ ,  $\mathbf{W}$  é uma combinação linear de termos na forma  $\cos(\frac{n\pi x}{a})$  e os autovalores,  $k = \frac{n\pi}{a}$  (um conjunto discreto de valores) são chamados números de onda da solução. Substituindo a equação (37) em (36), obtém-se para cada  $k$ :

$$\lambda \mathbf{W}_k = \beta A \mathbf{W}_k + D \nabla^2 \mathbf{W}_k \quad (39)$$

Como  $\mathbf{W}_k$  deve satisfazer a equação (38), a equação (39) pode ser re-escrita como:

$$\lambda \mathbf{W}_k = \beta A \mathbf{W}_k - D k^2 \mathbf{W}_k. \quad (40)$$

Logo, como

$$[\lambda \mathbf{I} - \beta A - k^2 D] \mathbf{W}_k = 0, \quad (41)$$

procuramos uma solução não trivial para o sistema acima com a condição:

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \beta A - k^2 D) = 0 \quad (42)$$

Avaliando o determinante da equação (42) acima com  $A$  e  $D$  definidos nas equações (29) e (34), obtém-se os autovalores  $\lambda(k)$ :

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1 + d) - \beta(f_u + g_v)] + h(k^2) = 0, \quad (43)$$

onde

$$h(k^2) = dk^4 - \beta(df_u + f_v)k^2 + \beta^2|A|. \quad (44)$$

A equação (43) acima é semelhante à equação (31), onde a exigência de que  $Re(\lambda) < 0$  leva à necessidade da satisfação às equações (34) e (35). Para que o estado estacionário seja instável as perturbações espaciais, deve-se impor que a solução de (46) tenha  $Re(\lambda(k)) > 0$  para algum  $k \neq 0$ . Tendo em vista a expressão em (34) e que  $\beta$  e  $d$  são positivos, pode-se concluir que o coeficiente que multiplica o termo linear em  $\lambda$  é positivo, o que implica que a soma das raízes da equação (43) seja negativa. Desta forma, para garantir que haja uma raíz positiva, é necessário que o produto das raízes, termo independente de  $\lambda$  em (43), seja negativo, isto é,  $h(k^2) < 0$ . Uma outra forma de se chegar a esta conclusão é a análise das soluções de (43):

$$2\lambda = -[k^2(1 + d) - \beta(f_u + g_v)] \pm \{[k^2(1 + d) - \beta(f_u + g_v)]^2 - 4h(k^2)\}^{1/2} \quad (45)$$

Por outro lado, para que  $h(k^2)$  seja negativo, para algum  $k$ , deve-se analisar a equação (44), que por sua vez é um polinômio de segundo grau em  $k^2$ . Uma vez que o coeficiente do termo de quarto grau em  $k$  é positivo, os valores negativos de  $h(k^2)$  vão ocorrer para  $k^2$  entre as raízes  $k_1^2$  e  $k_2^2$  de (44), isto é:

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2, \quad (46)$$

onde:

$$k_1^2 = \frac{\beta}{2d}[(df_u + g_v) - \{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|\}^{1/2}] \quad (47)$$

$$k_2^2 = \frac{\beta}{2d}[(df_u + g_v) + \{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|\}^{1/2}]. \quad (48)$$

Observando as equações acima (47) e (48), percebe-se que para obter  $k_1^2$  e  $k_2^2$  positivos com  $d \neq 1$ , é necessário que seja satisfeita a condição:

$$(df_u + g_v) > 0 \quad (49)$$

Por outro lado, para que existam duas raízes reais diferentes é necessário que o discriminante seja positivo, isto é:

$$(df_u + g_v)^2 - 4d|A| > 0. \quad (50)$$

Mantendo-se fixa a cinética das reações pode-se observar o comportamento de  $h(k^2)$  com a variação de  $d$ . Supondo  $f_u < 0$  e  $g_v > 0$ , para que (49) e (34) sejam satisfeitas é necessário que  $d < 1$ . Neste caso só há a possibilidade de ocorrer a instabilidade de Turing se  $d$  for menor que um valor crítico  $d_c$ . Após todas as considerações apresentadas nesta seção, obtém-se assim as condições para a geração de padrões espaciais por mecanismo de reação-difusão de duas espécies. Em resumo, as condições que restringem o espaço de parâmetros caracterizando o espaço de Turing se resumem com os seguintes conjuntos de desigualdades, a partir das equações (34), (35), (49) e (50):

$$\left\{ \begin{array}{l} f_u + g_v < 0 \\ f_u g_v - f_v g_u > 0 \\ df_u + g_v > 0 \\ (df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0 \end{array} \right. \quad (51)$$

## Expokit

Expokit constitui-se de um conjunto de rotinas para cálculo de exponenciais de matrizes capaz de determinar também o resultado do produto da exponencial de uma grande matriz esparsa por um vetor e até mesmo a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares. Utiliza métodos de projeção em subespaços de Krylov o que o capacita a operar com matrizes esparsas de grandes dimensões. Codificado em Fortran utiliza chamadas a bibliotecas científicas como BLAS e LAPACK possuindo módulos essenciais mínimos para substituição destas bibliotecas para sua maior portabilidade.

Nesta seção mostramos as principais rotinas do pacote Expokit para resolver a exponencial de qualquer matriz na linguagem Fortran e Matlab. O fluxo geral do programa é representado esquematicamente a seguir, onde as rotinas de relevância para a implementação de nossos métodos de integração estão assinaladas com um asterisco e serão detalhadas a seguir.

$$\mathbf{Expokit} = \begin{cases} \text{Expv.f}^* \\ \text{Phiv.f} \\ \text{Padm.f}^* \\ \text{Chbv.f} \\ \text{Blas.f/Lapack.f}^* \\ \text{Expv.m/mexpv.m}^* \end{cases}$$

**Rotina EXPV** Esta rotina calcula  $w = \exp(tA)v$ , onde  $t$  pode ser positivo ou negativo. A acção do operador exponencial matriz no vector operando é avaliado directamente, isto é,  $\exp(tA)$  não é calculado isoladamente antes de ser aplicado a  $v$ . Uma variante a esta rotina é *DMEXPV* aplicado a problemas de Cadeia de Markov.

**Rotina PHIV** Esta rotina calcula  $w = \exp(tA)v + t\psi(tA)u$  a qual é a solução da equação diferencial ordinária linear não-homogênea:

$$\begin{cases} \frac{dw}{dt} = Aw + u \\ w(0) = w_0 = v \end{cases}$$

Onde  $\psi(x) = (e^x - 1)/x$ . O parâmetro  $t$  pode ser positivo ou negativo, se  $u = 0$  este procedimento é matematicamente equivalente a *Expv*, e se  $v = 0$  este calcula  $t\psi(tA)u$ .

**Rotina PADM** A rotina *Padm* calcula a exponencial da matriz  $\exp(tH)$  na totalidade quando  $H$  é uma matriz relativamente pequeno.

**Rotina BLAS/LAPACK** Essas rotinas utilizadas para otimizar produtos de matriz-vetor, matriz-matriz, etc.

**Rotina EXP.m/MEXPV.m** Estas rotinas são semelhantes as rotinas *Expv* e *Dmexpv* em Fortran adaptado ao linguagem Matlab.

## REFERÊNCIAS

- [1] TORRES, L. A. G., *Simulación de las ecuaciones Reacción-Difusión en dominios fijos y crecientes*. Master's Thesis, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2008.
- [2] HOLMES, M. H., *Introduction to the foundations of applied mathematics*. v. 56. Springer Science & Business Media, 2009.
- [3] MURRAY, J. D., *Mathematical Biology I: An Introduction, Vol. 17 of Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer, New York, USA,, 2002.
- [4] MEINHARDT, H., MEINHARDT, H., *Models of biological pattern formation*. v. 6. Academic Press London, 1982.
- [5] TURING, A. M., “The chemical basis of morphogenesis”, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London B: Biological Sciences*, v. 237, n. 641, pp. 37–72, 1952.
- [6] VANEGAS, J., LANDINEZ, N., GARZON, D., “Analysis of Turing instability in biological models”, *Dyna*, v. 76, n. 158, pp. 123–134, 2009.
- [7] RODRIGUES, D., BARRA, L. P., LOBOSCO, M., BASTOS, F., “Analysis of Turing Instability for Biological Models”. In: *International Conference on Computational Science and Its Applications*, pp. 576–591, Springer International Publishing Switzerland, 2014.
- [8] HINDMARSH, A. C., BROWN, P. N., GRANT, K. E., LEE, S. L., SERBAN, R., SHUMAKER, D. E., WOODWARD, C. S., “SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers”, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, v. 31, n. 3, pp. 363–396, 2005.
- [9] WEINER, R., SCHMITT, B. A., PODHAISKY, H., “ROWMAPâa ROW-code with Krylov techniques for large stiff ODEs”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 25, n. 2, pp. 303–319, 1997.
- [10] HOCHBRUCK, M., LUBICH, C., SELHOFER, H., “Exponential integrators for large systems of differential equations”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 19, n. 5, pp. 1552–1574, 1998.

- [11] SCHNAKENBERG, J., “Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour”, *Journal of Theoretical Biology*, v. 81, n. 3, pp. 389–400, 1979.
- [12] BENEŠ, M., CHALUPECKÝ, V., MIKULA, K., “Geometrical image segmentation by the Allen–Cahn equation”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 51, n. 2, pp. 187–205, 2004.
- [13] KAY, D. A., TOMASI, A., “Color image segmentation by the vector-valued Allen–Cahn phase-field model: a multigrid solution”, *IEEE Transactions on Image Processing*, v. 18, n. 10, pp. 2330–2339, 2009.
- [14] PEREIRA, S., FÉLIX, M. G., “100 anos de supercondutividade e a teoria de Ginzburg-Landau”, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 35, n. 1, pp. 1313, 2013.
- [15] AGRAWAL, G., *Applications of nonlinear fiber optics*. Academic press, 2001.
- [16] XU, B., BINČZAK, S., JACQUIR, S., PONT, O., YAHIA, H., “Parameters analysis of FitzHugh-Nagumo model for a reliable simulation”. In: *2014 36th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society*, pp. 4334–4337, 2014.
- [17] SIDJE, R. B., “EXPOKIT. A Software Package for Computing Matrix Exponentials”, *ACM Trans. Math. Softw.*, v. 24, n. 1, pp. 130–156, 1998.
- [18] NIE, Q., ZHANG, Y.-T., ZHAO, R., “Efficient semi-implicit schemes for stiff systems”, *Journal of Computational Physics*, v. 214, n. 2, pp. 521–537, 2006.
- [19] WANG, D., ZHANG, L., NIE, Q., “Array-representation integration factor method for high-dimensional systems”, *Journal of computational physics*, v. 258, pp. 585–600, 2014.
- [20] CHEN, S., ZHANG, Y.-T., “Krylov implicit integration factor methods for spatial discretization on high dimensional unstructured meshes: application to discontinuous Galerkin methods”, *Journal of Computational Physics*, v. 230, n. 11, pp. 4336–4352, 2011.



- [21] NIE, Q., WAN, F. Y., ZHANG, Y.-T., LIU, X.-F., “Compact integration factor methods in high spatial dimensions”, *Journal of Computational Physics*, v. 227, n. 10, pp. 5238–5255, 2008.
- [22] HIGHAM, N. J., “The scaling and squaring method for the matrix exponential revisited”, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 26, n. 4, pp. 1179–1193, 2005.
- [23] LEVEQUE, R. J., *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. v. 98. Siam, 2007.
- [24] ALLEN, S. M., CAHN, J. W., “A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening”, *Acta Metallurgica*, v. 27, n. 6, pp. 1085–1095, 1979.
- [25] SHI, B., GUO, Z., “Lattice Boltzmann model for nonlinear convection-diffusion equations”, *Physical Review E*, v. 79, n. 1, pp. 016701, 2009.
- [26] ZHANG, R., YU, X., ZHU, J., LOULA, A. F., “Direct discontinuous Galerkin method for nonlinear reaction–diffusion systems in pattern formation”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 38, n. 5, pp. 1612–1621, 2014.
- [27] ASHI, H., *Numerical methods for stiff systems*, Ph.D. Thesis, University of Nottingham, 2008.
- [28] FENG, X., PROHL, A., “Numerical analysis of the Allen-Cahn equation and approximation for mean curvature flows”, *Numerische Mathematik*, v. 94, n. 1, pp. 33–65, 2003.
- [29] WENDLER, F., BECKER, J. K., NESTLER, B., BONIS, P. D., WALTE, N. P., “Phase-field simulations of partial melts in geological materials”, *Computers & Geosciences*, v. 35, n. 9, pp. 1907–1916, 2009.
- [30] KUZNETSOV, Y. A., *Elements of applied bifurcation theory*. v. 112. Springer Science & Business Media, 2013.
- [31] ZHOU, C., YU, M., HE, X., “X-wave solutions of complex Ginzburg-Landau equations”, *Physical Review E*, v. 73, n. 2, pp. 026209, 2006.

- [32] LI, J., LI, J., “HIGH-ORDER COMPACT DIFFERENCE METHODS FOR SIMULATING WAVE PROPAGATIONS IN EXCITABLE MEDIA”, *INTERNATIONAL JOURNAL OF NUMERICAL ANALYSIS AND MODELING, SERIES B*, v. 5, n. 4, pp. 339–346, 2014.
- [33] FOGACA, J., <http://www.brasilecola.com/quimica/autocatalise.html>. 2013.
- [34] NATALYA, M. S. C., *Pattern Formation in Partial Differential Equations*. Submitted to Scripps College in Partial Fulfillment of the Degree of Bachelor of Arts, The Women’s Collegue Claremont, 2006.
- [35] GALLOPOULOS, E., SAAD, Y., “Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods”, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, v. 13, n. 5, pp. 1236–1264, 1992.
- [36] SAAD, Y., *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. PWS, 1996.