



Universidade Federal da Paraíba

Centro de Informática

Departamento de Computação Científica

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

Maria Rejane Correia Ramos

**APLICAÇÕES DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS EM
PROBLEMAS DE DIFUSÃO**

João Pessoa

2016



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Informática
Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional

APLICAÇÕES DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS EM
PROBLEMAS DE DIFUSÃO.

Maria Rejane Correia Ramos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional, UFPB, da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Jairo Rocha de Faria

João Pessoa
Novembro de 2016

R175a Ramos, Maria Rejane Correia.
Aplicações do método das soluções fundamentais em
problemas de difusão / Maria Rejane Correia Ramos.- João
Pessoa, 2016.
64f. : il.
Orientador: Jairo Rocha de Faria
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CI
1. Informática. 2. Matemática computacional. 3. Difusão
anômala. 4. Equação de Helmholtz. 5. Método das soluções
fundamentais do tipo Kansa.

UFPB/BC

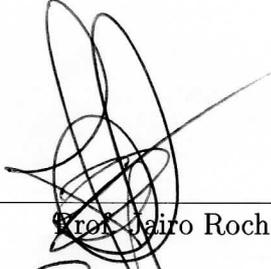
CDU: 004(043)

APLICAÇÕES DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS EM
PROBLEMAS DE DIFUSÃO.

Maria Rejane Correia Ramos

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
(PPGMMC) DO CENTRO DE INFORMÁTICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL
DA PARAÍBA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL.

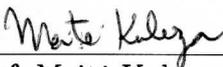
Examinada por:



Prof. Jairo Rocha de Faria, D.Sc



Prof. Antonio José Boness dos Santos, D.Sc



Prof. Maité Kulésza, D.Sc



Prof. Gilson F. de Oliveira Júnior, D.Sc

JOÃO PESSOA, PB – BRASIL
NOVEMBRO DE 2016

À minha Família.

Agradecimentos

Primeiramente a Deus por mais esta conquista e por ter me amparado em Seus braços nos momentos mais árduos desta caminhada.

À minha Mãe Aparecida, por sempre acreditar na força dos estudos, e ao meu Pai Remilson. À minha Tia Fátima pelo apoio e aos meus irmãos Júnior, Rosiele, Robson e Rosana pelas palavras de incentivo e pontos de apoio.

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Jairo Rocha de Faria pelas orientações técnicas e sábios conselhos, que foram de fundamental importância para o desenvolvimento deste projeto, ao Prof. Dr. Boness, enfim, a todos os professores do PPGMMC pelas aulas e significativas discussões.

Aos meus amigos Naila, Rômulo e Raul pela amizade e companheirismo nesta jornada de estudos.

Por fim, à Capes pelo apoio financeiro prestado.

A todos, muito obrigada.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGMMC/CI/UFPB como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

APLICAÇÕES DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS EM
PROBLEMAS DE DIFUSÃO.

Maria Rejane Correia Ramos

Novembro/2016

Orientador: Jairo Rocha de Faria

Programa: Modelagem Matemática e Computacional

Apresenta-se, nesta dissertação, uma formulação nova e geral para um modelo de difusão com retenção, recentemente introduzida por Bevilacqua et al., onde a equação resultante é uma equação diferencial parcial (PDE - *partial differential equation*) de quarta ordem. Além disso, nesse modelo o termo de retenção está associado ao termo de ordem superior da PDE, podendo ser interpretado como uma pequena perturbação singular de um fenômeno de difusão pura, levando-se em conta as diferentes ordens de grandeza nos respectivos parâmetros, como geralmente é observado nos dados experimentais. Esta abordagem possibilitou a proposta de uma expansão assintótica para a PDE de quarta ordem, onde obtemos três termos acoplados (de difusão pura) mais um pequeno termo remanescente, que pode ser desprezado, permitindo aproximar a solução numérica da difusão anômala espacial por um método de soluções fundamentais do tipo Kansa (KMFS), considerando-se a solução fundamental do operador de difusão. Em particular, neste trabalho serão apresentados alguns resultados numéricos da aplicação do MFS em problemas de difusão com retenção onde realizaremos uma análise de sensibilidade de seus parâmetros, o que nos auxiliará na discussão da viabilidade da metodologia ora proposta.

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

APLICAÇÕES DO MÉTODO DAS SOLUÇÕES FUNDAMENTAIS EM
PROBLEMAS DE DIFUSÃO.

Maria Rejane Correia Ramos

November/2016

Advisor: Jairo Rocha de Faria

Department: Computational Mathematic Modelling

Presented in this dissertation, a new formulation and general diffusion model with retention, recently introduced by Bevilacqua et al., where the resulting equation is a fourth order partial differential equation (PDE-partial differential equation). Besides, in this model the retention term is associated with higher-order term of the PDE, and can be interpreted as a small perturbation of a pure diffusion phenomenon, taking into account the different orders of magnitude in their parameters, as is generally observed in experimental data. This approach allowed the proposal of an asymptotic expansion for the fourth-order PDE, where we obtain three terms coupled (pure diffusion) plus a small remaining term, which may be despised, allowing closer to the numerical solution of the anomalous diffusion for a space of fundamental solutions of the type method Kansa (KMFS), considering the fundamental solution of the diffusion operator. In particular, this work will be presented some numerical results of application of MFS in diffusion problems with retention where we will perform a sensitivity analysis of its parameters, which will aid in the discussion of the feasibility of proposed methodology.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
2 Fenômenos Difusivos	3
2.1 A Equação do Calor	7
2.2 A Solução Fundamental da Equação do Calor	8
3 Difusão com Retenção	15
3.1 Modelo com PDE Fracionária	16
3.2 Modelo com Equação Diferencial Parcial de Quarta Ordem	17
4 Problemas Singularmente Perturbados	19
4.1 Exemplo de Problema Regularmente Perturbado	19
4.2 Exemplo de Problema Singularmente Perturbado	21
5 O Método das Soluções Fundamentais	24
5.1 Método das Soluções Fundamentais do tipo Kansa	26
5.1.1 Solução via Equação de Helmholtz	27
5.2 Métodos de Regularização	29
5.3 Exemplos Numéricos Preliminares	29
5.3.1 Exemplo 1	30
5.3.2 Exemplo 2	31
6 O MFS para o Problema da Condução do Calor Unidimensional	34
6.1 Descrição do Método	35
6.2 Resultados Numéricos	37
6.2.1 Dados sem Ruídos	37
6.2.2 Dados com Ruídos	41
6.3 Análise de Sensibilidade	47

7 Conclusões	49
Referências Bibliográficas	52
Apêndice	56

Lista de Figuras

2.1	Pequena porção cilíndrica de uma barra.	4
3.1	Distribuição simétrica com retenção [38].	17
4.1	Em (a): análise das curvas de u_ε e u_0 . Em (b): Erro absoluto $ u_\varepsilon - u_0 $	20
4.2	Fina haste conectando dois corpos sob temperaturas constantes.	21
4.3	Comportamento das soluções u_0 , u_ε e u_{assint} para o problema singularmente perturbado.	22
5.1	Geometria do problema 2D em MFS.	25
5.2	Ilustração das discretizações de diversas técnicas numéricas para um problema 2D com geometria complexa.	26
5.3	Exemplo 1: Solução analítica \times KMFS	30
5.4	Exemplo 2: Solução analítica \times KMFS, quando variamos T , (a) $T = 0.15$, (b) $T = 0.30$, (c) $T = 0.60$ e (d) $T = 1.00$	32
6.1	Distribuição dos pontos fonte e colocação para um problema unidimensional e transiente [23].	35
6.2	Distribuição dos pontos fonte (o) e de colocação (*) no domínio unidimensional.	38
6.3	Exemplo de curva L para o exemplo numérico com dados sem ruído com ($M = 60$) e ($N = 20$).	38
6.4	(Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.25$, com $\lambda = 10^{-8}$	39
6.5	(Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.50$, com $\lambda = 10^{-10}$	39
6.6	(Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.70$, com $\lambda = 10^{-14}$	40
6.7	(Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 1.00$, com $\lambda = 10^{-14}$	40
6.8	$u_0^\delta(-) \times u_0(*)$ para 10% de GWN.	42

6.9	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 5% de GWN.	42
6.10	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 10% de GWN.	42
6.11	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 15% de GWN.	43
6.12	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 20% de GWN.	43
6.13	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 5% de GWN.	44
6.14	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 10% de GWN.	44
6.15	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 15% de GWN.	45
6.16	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 20% de GWN.	45
6.17	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.70$ com 5% de GWN.	46
6.18	(Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.70$ com 10% de GWN.	46
6.19	(Erro Máximo Absoluto) × R para $\lambda = 10^{-14}$ (-), $\lambda = 10^{-12}$ (-), $\lambda = 10^{-10}$ (<).	47
6.20	(Erro Relativo) × T para $\lambda = 10^{-12}$ (-), $\lambda = 10^{-10}$ (-), $\lambda = 10^{-8}$ (<).	48

Lista de Tabelas

5.1 Tabela de Comparações entre os métodos numéricos: FEM, FDM, BEM e MFS.	25
---	----

Capítulo 1

Introdução

O Método das Soluções Fundamentais (*Method of Fundamental Solutions - MFS*) é uma eficiente técnica numérica que vem sendo utilizada para obtenção de aproximações numéricas com um alto grau de precisão de soluções de Equações Diferenciais Parciais (*Partial Differential Equations - PDE*) e com pequeno esforço computacional [13]. Em contrapartida, a aplicação do MFS só é possível quando uma solução fundamental da PDE homogênea que rege o problema é explicitamente conhecida. A partir de então, a solução é aproximada por uma combinação linear de soluções fundamentais com os pontos fonte (singularidades) localizados fora do domínio de interesse, isto é, em uma fronteira fictícia, e as condições de contorno e/ou iniciais são avaliadas em pontos de colocação. Recentemente o MFS foi estendido para problemas regidos por PDE não homogêneas através de um método denominado Kansa [2], ao qual passaremos a nos referir como (KMFS).

O Método das Soluções Fundamentais é usualmente aplicado em problemas de engenharia com o propósito de encontrar a solução do fluxo de calor para vários problemas de condução de calor, incluindo os problemas de difusão e transporte. Foi proposto e investigado, recentemente, a aplicação do MFS para a equação do calor linear em uma dimensão no espaço [21]. Este estudo foi estendido para a condução de calor em materiais em camadas unidimensionais [24] e para problemas de superfície livre de Stefan [9]. Motivados pela eficiência do método e pelos resultados viáveis alcançados neste trabalho, em especial, pretendemos estudar a aplicação do MFS para problemas de difusão clássica e anômala.

O presente texto está organizado do seguinte modo: no capítulo 2, introduzimos os fenômenos difusivos partindo da ótica do Princípio da Conservação de Energia Térmica descrevendo a equação do calor e sua solução fundamental; no capítulo 3, apresentamos um problema de difusão com retenção enfocando o recente modelo via equações diferenciais parciais de quarta ordem, introduzido por Bevilacqua et al. (2011) [5, 6]. Em seguida no capítulo 4, propomos uma expansão assintótica da solução da equação de quarta ordem, demonstrando que o modelo introduzido na

seção anterior, pode ser aproximado por três problemas de difusão simples acoplados e mais um termo remanescente que poderá ser desprezado quando o efeito da difusão anômala for consideravelmente menor que o da difusão simples, i.e., quando a PDE de quarta ordem puder ser representada por uma PDE de segunda ordem singularmente perturbada pelo efeito de retenção, como será evidenciado no texto. Expomos, no capítulo 5, de maneira formal, a ideia do MFS para PDE homogêneas, apresentando dois exemplos unidimensionais estacionários. Abordamos no capítulo 6 uma aplicação do MFS para problemas de condução de calor transiente [23] com pontos fonte dependente do tempo localizados na fronteira do domínio de interesse. Finalmente, no capítulo 7, apresentamos alguns exemplos numéricos que mostram que boas aproximações podem ser obtidas eficientemente com pequeno esforço computacional, além de realizarmos uma análise de sensibilidade dos parâmetros do MFS.

Capítulo 2

Fenômenos Difusivos

O fenômeno de difusão é de fundamental importância na modelagem de fenômenos biológicos, físicos, químicos e sociais, por exemplo sendo um dos fenômenos de transporte mais proeminentes encontrados na natureza. Grande parte dos processos cinéticos¹, em um meio adequado e sob determinadas condições, requerem a redistribuição de seus componentes tal qual ocorre com o processo de transporte de massa, energia, impulso ou carga em distâncias macroscópicas, encaminhando-se para o estado de equilíbrio. Esta redistribuição ocorre devido a um processo aleatório e irregular denominado difusão, como ocorre na propagação de fumaça pelo ar ou no alastramento de uma substância química em um solvente, por exemplo, e que são casos particulares dos processos de transporte de substâncias. Estes processos se caracterizam pelo fato de haver transferência de matéria das zonas mais elevadas de concentração para as zonas de baixa concentração.

Os fenômenos de difusão citados acima são processos onde, antes de um estudo aprofundado, estão inseridos em meios aparentemente contínuos, ou seja, sem a delimitação do espaço do domínio estudado. É neste meio que acontece a transferência de energia interna, como na condução térmica; o processo de transporte de massa, tal qual ocorre na difusão de um gás ou o transporte anômalo do momento linear, como pode ocorrer em fluidos. Estes problemas quando tratados de forma moderadamente semelhantes e considerando suas respectivas grandezas, como acontece em alguns fluidos por exemplo, correspondem, em cada caso particular, há uma determinada lei de conservação. Um ponto comum em todos os processos difusivos aqui mencionados é a equação de continuidade, que expressa matematicamente a natureza física dos princípios de conservação. Além disso, fazendo-se uso das leis constitutivas, que são as características do fenômeno específico, chegamos à modelagem de cada situação, em particular.

Na literatura há pelo menos quatro pontos de vista diferentes para o estudo e

¹Processo que estuda a velocidade das reações químicas e os fatores que as influenciam.

análise de problemas difusivos [14]:

1. *Matemático*: como um tópico em Equações Diferenciais Parciais;
2. *Físico-Químico*: como um tópico em Termodinâmica do Não Equilíbrio;
3. *Engenharia*: como um tema na Ciência dos Materiais;
4. *Probabilidade*: como um tópico em Processos Estocásticos.

Para analisarmos processos difusivos se faz necessário, primeiramente, expressar a equação da continuidade que, na verdade, é uma expressão matemática, de natureza física, que reflete os princípios de conservação. Logo após, para obtermos os modelos de cada processo de transporte comentado anteriormente, fazemos uso de leis constitutivas que são as características particulares ao fenômeno específico estudado.

Em particular, partiremos de um processo simples de transporte de massa para chegarmos a uma perspectiva clássica do princípio da conservação da massa com o intuito de deduzirmos a equação de continuidade e estarmos respaldados para introduzirmos a equação de difusão e a equação do calor em uma dimensão. Consideremos uma barra de comprimento L com as seguintes características:

- A barra é constituída por um material homogêneo;
- O corpo físico da barra é representado por parte de um cilindro reto, de seção circular uniforme de área A com eixo posicionado longitudinalmente na direção do eixo x ;
- A superfície lateral está completamente isolada.

A quantidade de massa que, na situação estudada denotaremos por $J(x, t)$, está sendo tratada como uma grandeza escalar, portanto, a mensuramos por unidade de área e de tempo fluindo pela seção A , na posição x no instante t . Podendo ser chamada de densidade de massa, e como nos referimos a um caso unidimensional, podemos defini-la positiva quando o fluxo se realiza no sentido positivo do eixo x , e negativa quando ocorre o contrário.

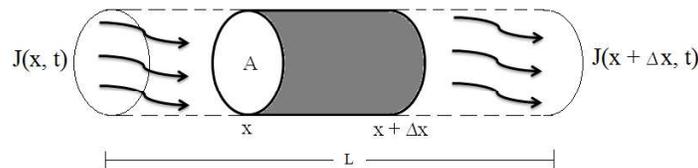


Figura 2.1: Pequena porção cilíndrica de uma barra.

A Figura (2.1) representa o esquema de parte de um cilindro reto, com eixo de simetria em x , de seção transversal circular de área A e massa $M(t)$, sujeito a um fluxo de partículas $J(x, t)$ por unidade de área e tempo.

A variação de fluxo nas posições $x + \Delta x$ e x , durante um determinado intervalo de tempo Δt , nos leva a entender que está havendo uma variação de massa presente na região espacial analisada. Caso o fluxo resultante seja positivo é porque está saindo do sistema mais massa do que entrando; caso o fluxo seja negativo, se verifica o contrário, ou seja, um aumento de massa na região considerada. Assim, o fluxo resultante e a variação de massa terão sinais opostos. Conseqüentemente, para Δx e Δt pequenos e levando em conta o princípio da conservação de energia que nos diz que: “a quantidade de calor cedida por um corpo somada com a quantidade de calor que o outro recebeu é nula”, nos leva a concluir que a variação de massa pode ser expressa por

$$\Delta M_1 = -[J(x + \Delta x, t) - J(x, t)]A\Delta t. \quad (2.1)$$

Na Equação (2.1) podemos acrescentar ainda a variação de massa através da presença de “fontes” e “sumidouros”, que podem ser representadas por uma função $F(x, t)$ supostamente conhecida que descreva a quantidade de massa por unidade de volume e tempo, que é incorporada (ou subtraída) em cada posição e instante da região analisada. Nesse caso, a equação pode ser remodelada como

$$\Delta M_2 = F(x, t)A\Delta x\Delta t. \quad (2.2)$$

Desta forma, entre os instantes t e $t + \Delta t$, a variação da massa em Δx é aproximadamente

$$\begin{aligned} M(t + \Delta t) - M(t) &= \Delta M_1 + \Delta M_2 \\ &= -[J(x + \Delta x, t) - J(x, t)]A\Delta t + F(x, t)A\Delta x\Delta t, \end{aligned} \quad (2.3)$$

ou

$$[\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t)] = -[J(x + \Delta x, t) - J(x, t)]A\Delta t + F(x, t)A\Delta x\Delta t, \quad (2.4)$$

onde a densidade de massa no cilindro, na posição x e no instante t , é denotada por $\rho(x, t)$. Portanto, com base no exemplo ilustrativo clássico do princípio da conservação, apresentamos a equação da continuidade em sua forma mais geral, em uma dimensão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial J}{\partial x}(x, t) = F(x, t). \quad (2.5)$$

Usando-se leis constitutivas que relacionam J e ρ e que devem ser especificadas em cada situação particular, podemos estudar situações especialmente importantes. Em particular, para fenômenos de “advecção”, onde

$$J = a(x, t)\rho(x, t) \quad (2.6)$$

para alguma função² $a(x, t)$ podendo ser considerada como a velocidade (no ponto x e no instante t) com que se desloca a substância cuja densidade é ρ . A equação de continuidade, obtida ao se substituir a Equação (2.6) na Equação (2.5), é chamada de *equação de transporte*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}(a\rho) = F(x, t). \quad (2.7)$$

Por outro lado, na hipótese de uma determinada região do espaço ser ocupada por um gás cuja concentração (ou densidade) seja irregular, havendo a transferência de partículas do gás das regiões de maior concentração para aquelas onde a concentração é menor, estamos nos referindo a um *processo difusivo*. Este processo também ocorre em soluções líquidas, onde a concentração do soluto é da mesma forma como mencionamos anteriormente, irregular ou não uniforme.

Conforme uma das leis constitutivas, a lei de Nernst, o fluxo das partículas de um gás, por unidade de área e de tempo, através da seção x , no instante t , é dada por

$$J(x, t) = -D(x)\frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t), \quad (2.8)$$

onde $D(x) > 0$ é o coeficiente de difusão em x e $\rho(x, t)$ é a densidade do gás em análise. Logo, pontuadas estas considerações, a Equação (2.5) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x}[D(x)\frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t)] + F(x, t), \quad (2.9)$$

denominada *equação de difusão*.

No caso em que supomos como constante o coeficiente de difusão $D(x) \equiv D$, a Equação (2.9) toma a seguinte forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) = D\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}(x, t) + F(x, t). \quad (2.10)$$

²Sua grandeza é necessariamente expressa em unidades de distância por unidades de tempo.

2.1 A Equação do Calor

A temperatura, que denotaremos por $u(x, t)$, é o fator determinante para o processo de condução do calor. Como já é conhecido na literatura, o calor flui dos pontos de mais alta temperatura até aqueles pontos que apresentam uma temperatura mais baixa. Nesse caso, a equação de continuidade (2.5) é expressa da seguinte forma,

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = F(x, t), \quad (2.11)$$

onde $q(x, t)$ é a densidade de calor (energia interna) no ponto x e no instante t , e $J(x, t)$ é o fluxo de calor por unidade de área e de tempo. Conforme a Lei de Fourier, que é a lei constitutiva para este caso em particular, o fluxo de calor é dado por

$$J(x, t) = -k(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t), \quad (2.12)$$

em que $k(x) > 0$ é o coeficiente de condutividade térmica do material. O sinal negativo do coeficiente nos indica o sentido contrário do fluxo ao gradiente de temperatura.

Em contrapartida, a definição de calor específico³ diz que a variação temporal da quantidade de calor por unidade de volume (densidade de calor por unidade de tempo) que um meio experimenta, se reflete em uma variação local de temperatura, dada por

$$\frac{\partial q}{\partial t}(x, t) = c(x)\rho(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t), \quad (2.13)$$

onde $c(x)$ denota o calor específico da substância e $\rho(x)$ a densidade de massa.

Temos ainda que incluir a presença de fontes (ou sumidouros) $F(x)$ de calor na Equação (2.13), que representa a quantidade de calor, por unidade de tempo e de volume, acrescentada (ou retirada) do sistema na posição x , no instante t . Desta forma, a Equação (2.13) é, portanto, reescrita da seguinte forma

$$c(x)\rho(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [k(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t)] = F(x, t), \quad (2.14)$$

denominada como a *equação do calor*. Caso o meio seja homogêneo, a Equação (2.14) é descrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + f(x, t), \quad (2.15)$$

em que $a^2 = k/c\rho$ é o coeficiente de difusividade térmica e $f(x, t) = F(x, t)/c\rho$.

Apesar de modelarem fenômenos diferentes, a Equação (2.10) e a Equação (2.15)

³ $c = \frac{C}{m}$, em que C é a capacidade térmica de um corpo e m é a massa desse corpo.

têm a mesma forma e, portanto, as trataremos de forma semelhante nas próximas seções. Estas equações representam a maneira mais simples de descrever os processos de transporte de massa e de energia interna. No entanto, é notável que o coeficiente de condutividade térmica (k) e o calor específico (c), assim como a densidade (ρ), em se tratando estritamente da equação do calor, são funções que variam com a temperatura. Do mesmo modo acontece com o termo de fonte (F) poder ser dependente da temperatura, como no caso de fontes de calor vindas das reações químicas. Então, para manter os parâmetros citados acima constantes, não será somente exigido a homogeneidade do meio como, também, pequenas variações de temperatura. Caso estas duas condições não sejam satisfeitas, teremos modelos não lineares e, nesta situação, a equação tem a seguinte forma geral

$$c(x, u)\rho(x, u)\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x, u)\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right] + F(x, t), \quad (2.16)$$

cujo estudo foge ao escopo deste trabalho.

2.2 A Solução Fundamental da Equação do Calor

Em nosso trabalho, iremos abordar a Equação (2.10) e a Equação (2.15) sem distinções uma da outra e passaremos a identificá-las pelo nome mais abrangente de “equação do calor”. Teremos a mesma intenção anterior com as *fontes* e *sumidouros*, as quais denominaremos de “fontes externas” e denotaremos por $f(x, t)$.

Assim como ocorre com qualquer equação diferencial parcial, a equação do calor pode admitir várias ou nenhuma solução. As condições iniciais são essenciais para que uma única solução seja obtida, além de condições de contorno apropriadas no caso de regiões limitadas.

Começaremos a investigar as soluções da equação do calor a partir de uma situação em um meio infinito e sem fronteira que é equivalente a uma modelagem simplificada de um cilindro infinito com eixo de simetria coincidindo com o eixo x do sistema de referência. A equação que modela esta situação, na ausência de fontes externas, tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (2.17)$$

A partir de um estudo feito sobre a solução da equação da onda e baseados na dedução de d’Alembert [25] para a obtenção da mesma, é comum perguntarmos se podemos usar os mesmos artifícios a fim de encontrar uma “solução geral” para a Equação (2.17), a partir da qual, dada uma condição inicial, pudéssemos obter a solução correspondente. Rapidamente perceberíamos que os argumentos utilizados para a equação da onda não se enquadram na resolução da equação do calor funda-

mentados nas seguintes observações. Preliminarmente, qualquer combinação linear de soluções do problema (2.17) é também uma solução, conforme o Princípio da Superposição. Além de que se denotarmos $u(x, t)$ como uma solução, sob condições adequadas, são válidas as próximas propriedades:

- i. qualquer derivada de u ($\frac{\partial u}{\partial t}$ ou $\frac{\partial u}{\partial x}$) é também uma solução;
- ii. $v(x, t) = u(x - y, t)$ é uma solução, $\forall y \in \mathbb{R}$;
- iii. $v(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x - y, t)g(y)dy$ é uma solução;
- iv. $v(x, t) = u(\lambda x, \lambda^2 t)$ é uma solução, $\forall \lambda \in \mathbb{R}$.

Amparados nestas propriedades, estabeleceremos uma *solução fundamental* a partir da qual serão produzidas “todas” as outras soluções utilizando a propriedade (ii). À primeira vista, notamos que a propriedade (iv) indica que a equação do calor homogênea é invariante em relação às transformações $(x, t) \mapsto (\lambda x, \lambda^2 t)$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Estas transformações tornam qualquer função $(x, t) \mapsto \phi(x/\sqrt{t})$ invariante, o que nos faz perguntar se a Equação (2.17) possui soluções desta forma (denominadas *autosemelhantes*).

Vamos considerar $\phi(\xi)$ uma função de classe C^2 e definir $u(x, t) = \phi(x/\sqrt{t})$. Então, a Equação (2.17) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{x}{2t\sqrt{t}}\phi' \left(\frac{x}{\sqrt{t}} \right) - \frac{a^2}{t}\phi'' \left(\frac{x}{\sqrt{t}} \right) = 0. \quad (2.18)$$

De onde se segue que

$$\phi''(\xi) + \frac{\xi}{2a^2}\phi'(\xi) = 0, \quad (2.19)$$

que tem como solução geral

$$\phi(\xi) = C_1 \int_0^\xi \exp \left(-\frac{s^2}{4a^2} \right) ds + C_2. \quad (2.20)$$

Verificamos, desta forma, que

$$\phi(\xi) = C_1 \int_0^{\frac{x}{\sqrt{t}}} \exp \left(-\frac{s^2}{4a^2} \right) ds + C_2, \quad (2.21)$$

é uma solução autosemelhante, para quaisquer que sejam as constantes C_1 e C_2 .

Exceto para o caso trivial, quando $C_1 = C_2 = 0$, as soluções acima apresentam uma característica inconveniente: não são funções integráveis em \mathbb{R} (para $t > 0$ fixado, como funções espaciais) e, por isso, limitam a utilização da propriedade (iii). No entanto, sabemos que a derivada espacial em u é uma solução a partir da propriedade (i). Por isso podemos considerar as funções da forma $(C_1/\sqrt{t})\exp(-x^2/4a^2t)$.

A função

$$G(x, t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2t}\right), \quad (x, t) \in (0, +\infty) \times \mathbb{R}, \quad (2.22)$$

é denominada de solução fundamental para a equação do calor (2.17).

Vale ressaltar que a constante particular $C_1 = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}$, na definição (2.22) acima, é uma “constante de normalização”, isto é

$$\int_{-\infty}^{\infty} G(x, t) dx = 1, \quad \forall t > 0. \quad (2.23)$$

Estamos munidos com condições fundamentais, a partir de agora, para utilizarmos a propriedade (iii) a fim de construirmos novas soluções. É o que justifica o teorema a seguir.

Teorema 1: Seja $\varphi \in C(\mathbb{R})$ uma função limitada. Defina

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x - y, t)\varphi(y) dy. \quad (2.24)$$

Então,

1. $u(x, t)$ é uma função de classe $C^\infty((0, +\infty) \times \mathbb{R})$;
2. $u_t - a^2u_{xx} = 0$, $t > 0$, $x \in \mathbb{R}$;
3. $\lim_{t \rightarrow 0} u(t, x) = \varphi(x)$, $\forall x \in \mathbb{R}$.

Uma propriedade evidente e muito significativa para a equação do calor, denominada *propriedade regularizante*, é exposta pelo Teorema (1) acima. Além de estabelecer uma “fórmula explícita” para a solução do problema de valor inicial para a equação do calor, a sua solução é C^∞ no domínio de interesse, não importando o quanto a condição $\varphi(x)$ inicial seja irregular.

A condição inicial deve ser entendida no sentido do limite do item (3) do Teorema (1). Na verdade, $G(x, 0)$ não está definida, como se pode observar. Deste modo, o problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, & t > 0, \quad x \in \mathbb{R} \\ u(x, 0) = \varphi(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.25)$$

possui uma solução dada através da fórmula

$$u(x, t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{4a^2t}\right) \varphi(y) dy. \quad (2.26)$$

A função $G(x - y, t)$ é positiva para cada $t > 0$ e para cada $y \in \mathbb{R}$ fixados satisfazendo a Equação (2.23) e

$$\lim_{t \rightarrow 0} G(x - y, t) = \begin{cases} +\infty & \text{se } x = y \\ 0 & \text{se } x \neq y, \end{cases} \quad (2.27)$$

uniformemente nos intervalos fechados que não contêm o ponto y .

Esta observação baseia-se no seguinte Corolário acerca dos “núcleos de Dirac” (ver Apêndice A), que são determinados a partir de uma função geradora do seguinte modo:

Corolário: Seja $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função positiva e integrável tal que

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi(x) dx = 1. \quad (2.28)$$

Logo, as funções $D_{\mu}(x) = \mu^{-1}\varphi(\mu^{-1}x)$, com $\mu > 0$ são núcleos de Dirac.

A função $G(x - y, t)$, para $t > 0$, define uma aproximação para a “função δ de Dirac” no ponto y , representada por $\delta(x - y)$. De maneira formal podemos escrever essa aproximação através de uma igualdade onde interpretamos estar fundamentada no item (iii) do Teorema (1)

$$G(x - y, 0) = \delta(x - y). \quad (2.29)$$

Formalmente, podemos ainda dizer que a função

$$x \mapsto G(x - y, t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{(x - y)^2}{4a^2 t}\right), \quad (2.30)$$

satisfaz o problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial t}(x - y, t) = a^2 \frac{\partial^2 G}{\partial x^2}(x - y, t), & t > 0, x \in \mathbb{R} \\ G(x - y, 0) = \delta(x - y), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.31)$$

uma vez que

$$\int_{-\infty}^{\infty} G(x - y, 0)\varphi(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y)\varphi(y) dy = \varphi(x). \quad (2.32)$$

Para o caso do problema (2.25) apresentar uma fonte externa $f(x, t)$, temos o seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t) & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ u(x, 0) = \varphi(x), & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.33)$$

Para resolvê-lo vamos considerar a decomposição $u = v + w$, onde $v(x)$ é a solução da equação homogênea (2.25) e $w(x)$ é a solução do problema (2.33) com a condição inicial nula, i.e., $\varphi(x) = 0$.

A solução w é dada pela seguinte expressão

$$w(x, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} G(x - y, t - \tau) f(y, \tau) dy d\tau, \quad (2.34)$$

em que G é a solução fundamental já definida na (2.22). A prova deste fato pode ser simplesmente verificada quando, tomando a derivada de w em relação a t , obtemos

$$\frac{\partial w}{\partial t} w(x, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} G(x - y, t - \tau) f(y, \tau) dy d\tau + \int_{-\infty}^{\infty} G(x - y, 0) f(y, t) dy. \quad (2.35)$$

De outra maneira,

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} w(x, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} G_{xx}(x - y, t - \tau) f(y, \tau) dy d\tau, \quad (2.36)$$

e a conclusão segue da Equação (2.31) e da Equação (2.32).

A interpretação para este resultado estabelece que nos processos dissipativos não pode ocorrer acúmulo de grandezas que se dissipam. Em particular, no caso da transferência de calor sem fontes externas como modelado pelo problema de valor inicial (2.25), por exemplo, os pontos em que a temperatura é máxima em um determinado instante $t > 0$ não podem estar mais quentes do que aqueles onde a temperatura era máxima no instante anterior $t = 0$.

A unicidade de solução é uma consequência desse resultado, uma vez que se $u_1(x, t)$ e $u_2(x, t)$ são soluções para o problema não homogêneo (2.33), fica evidente que $w(x, t) = u_1(x, t) - u_2(x, t)$ é solução do problema homogêneo (2.25) com condição inicial nula em \mathbb{R} . Logo, pelo Princípio do Máximo, $w(x, t) = 0$, $\forall x \in \mathbb{R}$ e $\forall t > 0$, e consequentemente, $u_1(x, t) = u_2(x, t)$.

Usaremos em nosso trabalho a versão discreta da Equação (2.26) para as soluções numéricas cuja aproximação será feita através de um método de aproximação denominado Método das Soluções Fundamentais.

Para finalizar, vamos mostrar que, de fato, a solução fundamental $\phi(x, t)$ representada pela Equação (2.30), satisfaz a equação da difusão dada por

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \quad (2.37)$$

Temos que

$$\phi(x, t) = \frac{\overbrace{1}^A}{2a\sqrt{\pi t}} \underbrace{\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4a^2t}\right)}_B \quad (2.38)$$

Calculando a derivada temporal de A e B, que aqui estamos representando por A' e B' , temos

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A' \exp(B) + AB' \exp(B). \quad (2.39)$$

Assim,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \exp(B) \left[\frac{-1}{4a\sqrt{\pi t} t} + \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \cdot \frac{(x-y)^2}{4a^2t^2} \right]. \quad (2.40)$$

Simplificando a expressão, obtemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A \exp(B) \left[\frac{-1}{2t} + \frac{(x-y)^2}{4a^2t^2} \right]. \quad (2.41)$$

Por outro lado, derivando a função $\phi(x, t)$ com respeito a x , obtemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = AB' \exp(B) = A \frac{-2(x-y)}{4a^2t} \exp(B). \quad (2.42)$$

Temos ainda,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = A \left(\frac{-2}{4a^2t} \right) \exp(B) + A \left(\frac{-2(x-y)}{4a^2t} \right)^2 \exp(B). \quad (2.43)$$

Assim,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = A \exp(B) \left[\frac{-2}{4a^2t} + \frac{4(x-y)^2}{(4a^2t)^2} \right]. \quad (2.44)$$

Podemos ainda reescrever a Equação (2.41) da seguinte forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = A \exp(B) \left[\frac{-2a^2t + (x-y)^2}{4a^2t^2} \right], \quad (2.45)$$

e a Equação (2.44) também pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= A \exp(B) \left[\frac{-2(4a^2t) + 4(x-y)^2}{(4a^2t)^2} \right] \\
&= \frac{4A \exp(B)}{4a^2} \left[\frac{-2a^2t + (x-y)^2}{4a^2t^2} \right] \\
&= \frac{1}{a^2} \frac{\partial \phi}{\partial t}.
\end{aligned} \tag{2.46}$$

De onde temos,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}. \tag{2.47}$$

Capítulo 3

Difusão com Retenção

Processos difusivos requerem a redistribuição de seus componentes tal qual ocorre com o processo de transporte de massa, energia, impulso ou carga em distâncias macroscópicas, que encaminham-se para o estado de equilíbrio. É uma característica do processo de difusão pura a dependência linear no crescimento temporal do deslocamento quadrático médio da variância, havendo um comportamento semelhante à distribuição de Gauss. Entretanto, quando este deslocamento cresce mais depressa (superdifusão) ou mais lentamente (subdifusão) do que a distribuição de Gauss estaremos nos referindo a um processo de difusão anômala que caracteriza-se pelo crescimento não linear da variância no decorrer do tempo. Este fenômeno é, muitas vezes, observado em materiais viscoelásticos [4] e no escoamento em meios heterogêneos como de aquíferos subterrâneos.

Ao longo das últimas duas décadas, uma grande quantidade de artigos científicos têm mostrado que os novos modelos desenvolvidos para fenômenos de difusão anômala podem ajustar-se melhor aos dados experimentais quando comparados aos modelos de difusão pura, justificando sua aplicação, mesmo face a uma maior complexidade. Em particular, tem sido bastante difundido o modelo por equações diferenciais fracionárias [34].

Neste trabalho, nos limitaremos aos problemas de difusão com retenção que, por sua vez, estão presentes em vários fenômenos relevantes aplicados na computação científica, como nas reações químicas que induzem processos de adsorção e fluxo multifásico em meios porosos heterogêneos [8]. Bevilacqua et al. (2011) [5, 6] propõem complementar a equação de difusão simples incluindo termos de ordem superior para modelar o fenômeno de difusão. Esta proposta foi formulada tendo-se em vista a necessidade, como nos processos de adsorção, de anisotropia, em retenção parcial e temporal de partículas e em muitos fenômenos físico-químicos, de melhoria em sua formulação analítica que apresentam alguns efeitos não incluídos no modelo de difusão. De fato, todos estes exemplos citados são modelados pela difusão com retenção, que apresentam um “atraso” em relação à difusão clássica. Nesta disserta-

ção, consideraremos os fenômenos de retenção como uma perturbação no modelo de difusão clássica, utilizando uma nova formulação analítica para processos de difusão anômala através de uma PDE de quarta ordem introduzida por Bevilacqua et al. (2011) [5, 6] que será alvo de nosso estudo.

3.1 Modelo com PDE Fracionária

Nas últimas duas décadas, os processos de difusão anômala têm sido modelados adequadamente por equações diferenciais fracionárias [8, 36]. No entanto, no presente trabalho vamos considerar apenas a derivada fracionária no tempo devido ao nosso interesse no estudo da “retenção temporal” conforme comentado na seção acima. Como exemplo, vamos considerar o seguinte problema de valor inicial e de contorno:

$$\begin{cases} {}^c D_t^\alpha u(\mathbf{x}, t) = \Delta u(x, t) + f(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Omega, t \in (0, T) \\ u(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \partial\Omega, t \in (0, T) \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases} \quad (3.1)$$

onde Ω é um domínio limitado em \mathbb{R}^n , $n \in \{1, 2, 3\}$ com borda suave $\partial\Omega$ e $T > 0$ um parâmetro fixo que representa o tempo final do processo difusivo. Além disso, ${}^c D_t^\alpha$, ($0 < \alpha < 1$) denota a derivada Caputo (1999) [36] de ordem α com respeito a t e é definida por

$${}^c D_t^\alpha u(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u(\mathbf{x}, \eta)}{\partial \eta} \frac{d\eta}{(t-\eta)^\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (3.2)$$

onde $\Gamma(\cdot)$ é a função gama, definida por

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty s^{z-1} e^{-s} ds, \quad \text{Real}(z) > 0. \quad (3.3)$$

Em particular, quando $\alpha = 1$, a derivada Caputo coincide com a derivada temporal usual, i.e., ${}^c D_t^1 u(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$ e o problema (3.1) passa a representar um fenômeno de difusão pura.

Tendo em vista as limitações do modelo via equações diferenciais fracionárias, tanto do ponto de vista teórico, com vários resultados de existência, unicidade e estabilidade em aberto; quanto do ponto de vista numérico, sendo os principais resultados disponíveis na literatura limitados à problemas unidimensionais [19], iremos utilizar o modelo via PDE de quarta ordem, proposto por Bevilacqua et al. (2011) [5], que será descrito na próxima seção.

3.2 Modelo com Equação Diferencial Parcial de Quarta Ordem

Embora o modelo de difusão simples seja aplicável a uma grande quantidade de problemas de interesse físico, existem alguns fenômenos difusivos cujos dados não são representados por este modelo, ainda que se tente ajustar os coeficientes do mesmo.

Recentemente, Bevilacqua et al. (2011) [5, 6] demonstraram que processos de difusão com retenção temporal podem ser modelados com derivadas de quarta ordem na variável espacial representando o efeito da retenção, além das derivadas de segunda ordem representarem o termo de difusão.

A partir de uma formulação matemática discreta do processo de difusão anômala, é introduzido um parâmetro $0 < \beta \leq 1$ que representa uma fração capaz de se difundir a partir da concentração total da célula tornando a difusão mais lenta do que para o problema da difusão clássica, conforme mostra a Figura (3.1). Para chegar a este resultado de forma mais clara, os autores partiram de um conjunto discreto de células justapostas segundo um arranjo unidimensional conforme os efeitos observados em processos de difusão com retenção.

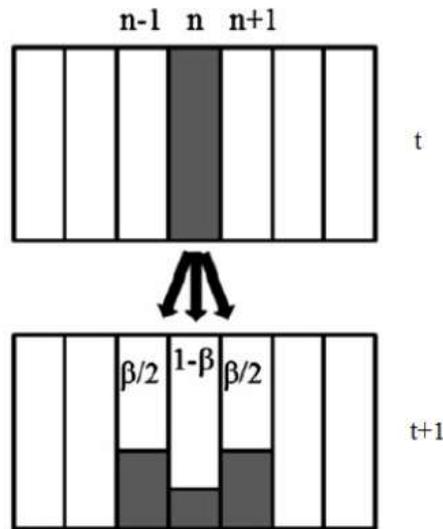


Figura 3.1: Distribuição simétrica com retenção [38].

Na Figura (3.1) está esquematizado o arranjo de células justapostas, bem como as regras de distribuição do conteúdo de uma célula genérica para as células vizinhas, com retenção de parte do conteúdo nesta mesma célula vizinha, assim $(1 - \beta)$ é a fração retida em cada etapa de tempo.

Considerando uma distribuição simétrica, cada célula vizinha $(n - 1)$ e $(n + 1)$ é carregada com uma fração $\frac{\beta}{2}$ da concentração de p em n células em cada passo

de tempo. Assim, a redistribuição do conteúdo de cada célula é governada pelas expressões algébricas

$$p_n^t = (1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1}, \quad (3.4)$$

$$p_n^{t+1} = (1 - \beta)p_n^t + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^t + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^t. \quad (3.5)$$

Da manipulação algébrica da Equação (3.4) e da Equação (3.5), ver Apêndice B, surge o seguinte modelo simétrico para a difusão anômala:

$$\frac{\Delta p_n^{t+\Delta t}}{\Delta t} = \beta \left(\frac{1}{2} \frac{L_0^2}{T_0} \frac{\Delta^2 p_n}{\Delta x^2} + \frac{O(\Delta x^2)}{\Delta x^2} - (1 - \beta) \frac{1}{4} \frac{L_1^4}{T_0} \frac{\Delta^4 p_n}{\Delta x^4} \right)^{t-\Delta t} \quad (3.6)$$

onde T_0 , L_0 e L_1 são fatores que assumiremos constantes ao longo de todo este trabalho. Denotando-se as constantes $K_2 = \frac{L_0^2}{2T_0}$ e $K_4 = \frac{L_1^4}{4T_0}$ e assumindo $p(x, t)$ suficientemente suave, podemos tomar o limite de $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$, obtendo

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta K_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta K_4 (1 - \beta) \frac{\partial^4 p}{\partial x^4}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0. \quad (3.7)$$

Observe que, se $\beta = 1$, o problema é reduzido à difusão pura, isto porque a estrutura contida na equação de difusão padrão é totalmente preservada. O termo negativo associado ao termo de quarta ordem corresponde ao efeito de retenção.

Em geral, a Equação (3.7) envolve parâmetros de diferentes ordens de magnitude $K_4 = O(10^{-2}K_2) = O(10^{-4}\beta)$ [5], sendo o termo de retenção significativamente menor do que o coeficiente de difusão. Devido às diferenças de magnitude dos parâmetros, consideramos neste trabalho o termo de retenção como uma pequena perturbação na difusão pura, o que nos permite interpretar o modelo acima num contexto de problemas singularmente perturbados, i.e., a equação de segunda ordem sofre uma pequena perturbação que aumenta a sua ordem, como ficará mais claro no próximo capítulo.

Capítulo 4

Problemas Singularmente Perturbados

Problemas Singularmente Perturbados são problemas relacionados a perturbações não suaves no domínio que ocorrem naturalmente nas aplicações em eletrostática, hidrodinâmica [11, 40], por exemplo. Uma rigorosa análise assintótica de tais problemas começou a ser desenvolvida na literatura mecânica há cerca de 30 anos. No entanto, o desenvolvimento do tratamento de expansões assintóticas para soluções de equações diferenciais que possuem parâmetros pequenos foi avançando com as ideias básicas da teoria das perturbações, a qual tem relevante importância em aplicações tanto na Engenharia como na Matemática.

A ideia básica da análise assintótica, de modo geral, se baseia na decomposição de um problema complexo em inúmeros problemas relativamente mais fáceis de resolver. As soluções aproximadas destes problemas são obtidas a partir de uma expansão assintótica da solução envolvendo um pequeno parâmetro geralmente denotado por ε , chamado de parâmetro de perturbação. A importância desta teoria consiste no fato de que, em geral, os primeiros termos da expansão assintótica são suficientes para apresentar características significantes de um problema. Com o intuito de fixar as ideias, nas próximas seções iremos reproduzir dois simples exemplos apresentados em Kozlov (1999) [30] envolvendo um parâmetro de perturbação ε .

4.1 Exemplo de Problema Regularmente Perturbado

Começamos com o seguinte problema de valor de contorno regularmente perturbado (PVC), cuja perturbação não modifica a ordem da equação analisada.

$$\begin{cases} u_\varepsilon''(x) - \varepsilon^2 u_\varepsilon(x) = 1, & 0 \leq x \leq 1, \\ u_\varepsilon(0) = 0, & u_\varepsilon(1) = 1. \end{cases} \quad (4.1)$$

Aqui, consideramos $\varepsilon > 0$ como um pequeno parâmetro positivo. Queremos obter uma aproximação de $u(x)$ quando $\varepsilon \rightarrow 0$.

A solução exata $u_\varepsilon(x)$ do problema (4.1) é

$$u_\varepsilon(x) = \frac{e^{\varepsilon x} + e^{-\varepsilon x} - 2}{2\varepsilon^2} + \frac{e^{\varepsilon x} + e^{-\varepsilon x}}{2\varepsilon^2(e^\varepsilon - e^{-\varepsilon})}(2 - e^\varepsilon - e^{-\varepsilon} + 2\varepsilon^2), \quad (4.2)$$

e sua principal ordem de aproximação assintótica $u_0(x)$ (para valores pequenos de ε) é

$$u_0(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{x}{2}. \quad (4.3)$$

A função $u_0(x)$ satisfaz o problema de valor de contorno (PVC)

$$\begin{cases} u_0''(x) = 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ u_0(0) = 0, & u_0(1) = 1. \end{cases} \quad (4.4)$$

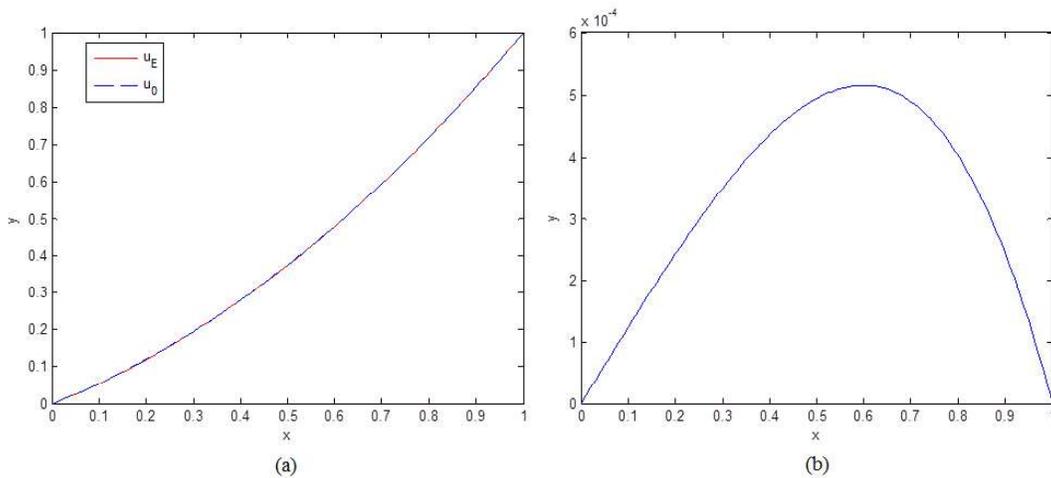


Figura 4.1: Em (a): análise das curvas de u_ε e u_0 . Em (b): Erro absoluto $|u_\varepsilon - u_0|$.

O comportamento das funções $y = u_\varepsilon(x)$ e $y = u_0(x)$ para $\varepsilon = 0.1$ está plotado na Figura (4.1a). As curvas são praticamente indistinguíveis para o problema (4.1) com $\varepsilon = 0.1$, e o erro de aproximação é pequeno $|u_\varepsilon(x) - u_0(x)|$, com o mesmo $\varepsilon = 0.1$ conforme o gráfico plotado na Figura (4.1b).

Quando o parâmetro de perturbação estiver associado à derivada de maior ordem da equação, teremos um problema singularmente perturbado. Como consideramos o

parâmetro de perturbação tendendo a zero ($\varepsilon \rightarrow 0$) ocorre a degeneração da equação diferencial em algum sentido, reduzindo sua ordem e muitas vezes, tornando as condições de contorno incompatíveis com o problema.

4.2 Exemplo de Problema Singularmente Perturbado

Admitamos que u satisfaça o PVC

$$\begin{cases} \varepsilon^2 u''(x) - u(x) = 1, & 0 \leq x \leq 1, \\ u(0) = 0, & u(1) = 1. \end{cases} \quad (4.5)$$

Do ponto de vista físico, a solução u pode ser interpretada como a temperatura de uma haste ligando dois grandes corpos que são mantidos cada um a uma temperatura constante, como mostrado na Figura (4.2). O coeficiente positivo ε^2 denota a condutividade térmica normalizada, e a temperatura do meio exterior é igual a -1 .

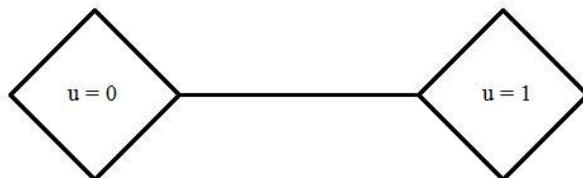


Figura 4.2: Fina haste conectando dois corpos sob temperaturas constantes.

Formalmente, se definirmos $\varepsilon = 0$ em (4.5), então a aproximação u_0 é obtida por

$$u_0 = -1. \quad (4.6)$$

Porém, u_0 não satisfaz as condições de contorno do problema singularmente perturbado (4.5). Neste caso, a solução exata u_ε do problema (4.5) é

$$u_\varepsilon = -1 + \frac{e^{\frac{1}{\varepsilon}}(e^{\frac{1}{\varepsilon}} - 2)}{e^{\frac{2}{\varepsilon}} - 1} e^{-\frac{x}{\varepsilon}} + \frac{2e^{\frac{1}{\varepsilon}} - 1}{e^{\frac{2}{\varepsilon}} - 1} e^{\frac{x}{\varepsilon}} \quad (4.7)$$

que tem expansão assintótica u_{assint} dada por

$$u_{assint} = -1 + e^{-\frac{x}{\varepsilon}} + 2e^{-\frac{(1-x)}{\varepsilon}}, \quad (4.8)$$

e que satisfaz a equação e deixa um erro exponencialmente pequeno nas condições de contorno do problema (4.5). Os dois últimos termos em (4.8) são os termos de correção que estão concentrados perto das extremidades do intervalo $(0, 1)$ e são chamados de “camada limite”.

Na Figura (4.3) plotamos a função $y = u_\varepsilon(x)$ quando $\varepsilon = 0.1$. Podemos observar que as funções u_ε e u_0 são muito próximas uma da outra na região média do domínio. No entanto, $|u_\varepsilon - u_0|$ torna-se grande nas proximidades dos pontos finais $x = 0$ e $x = 1$. Por outro lado, as funções u_ε e u_{assint} são muito próximas, de modo que é quase impossível distinguir entre seus gráficos (quando $\varepsilon = 0.1$, a diferença $u_\varepsilon - u_{assint}$ tem a ordem 10^{-4}).

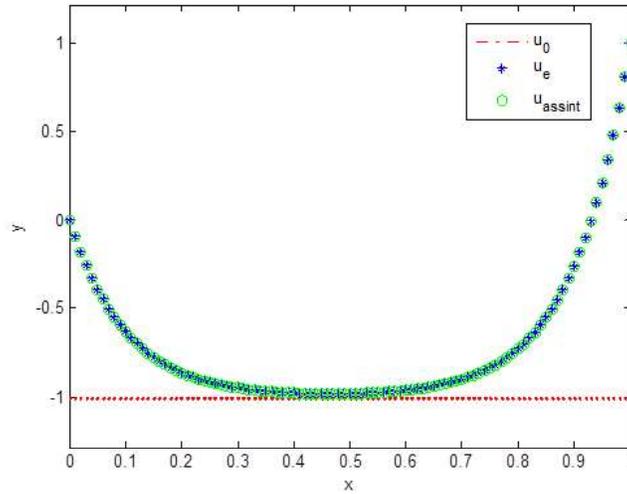


Figura 4.3: Comportamento das soluções u_0 , u_ε e u_{assint} para o problema singularmente perturbado.

Percebemos que a aproximação assintótica pode ser construída envolvendo os termos da camada limite para a solução do problema (4.5) sem o conhecimento prévio de u_ε . Observamos também que a solução assintótica não satisfaz as condições de contorno para quaisquer valores de ε , principalmente quando o parâmetro de perturbação assume valores grandes. Logo, entendemos que, para valores cada vez menores de ε , a equação diferencial de (4.5) tende a degenerar e, conseqüentemente, a mudar de ordem.

Em particular, no presente estudo, iremos abordar o modelo unidimensional representado pela Equação (3.7) como um problema singularmente perturbado (P_ε) que consiste em encontrar $p_\varepsilon(x, t)$, definida em $(x, t) \in (0, L) \times (0, T)$ satisfazendo o seguinte problema:

$$\frac{\partial p_\varepsilon}{\partial t} + d \frac{\partial^2 p_\varepsilon}{\partial x^2} + \varepsilon \frac{\partial^4 p_\varepsilon}{\partial x^4} = 0. \quad (4.9)$$

Iremos considerar as condições de contorno e iniciais dadas por

$$\begin{cases} p_\varepsilon(0, t) = a_0, & p_\varepsilon(L, t) = a_L, \\ \frac{\partial^2 p_\varepsilon}{\partial x^2} \Big|_{x=0} = \frac{\partial^2 p_\varepsilon}{\partial x^2} \Big|_{x=L} = 0, \\ p_\varepsilon(x, 0) = g(x), \end{cases} \quad (4.10)$$

onde $d = \beta K_2$ e $\varepsilon = \beta(1 - \beta)K_4$ são parâmetros constantes associados à difusão e retenção respectivamente, $g(x)$ uma determinada condição inicial, a_0 e a_L são constantes que satisfazem as condições de compatibilidade, ou seja, $a_0 = g(0)$ e $a_L = g(L)$. Em geral, conforme previamente mencionado, em aplicações práticas, temos que $\varepsilon \ll d$.

Então, podemos interpretar os fenômenos de retenção como uma perturbação singular da difusão pura. Tendo em conta este fato, para o problema não perturbado (P_0), nós desconsideramos o termo associado à retenção e obtemos um problema de difusão simples, consistindo em encontrar $p_0(x, t)$ que satisfazem o problema:

$$\frac{\partial p_0}{\partial t} + d \frac{\partial^2 p_0}{\partial x^2} = 0, \quad (4.11)$$

com as condições iniciais e de contorno dadas por

$$\begin{cases} p_0(0, t) = a_0, & p_0(L, t) = a_L, \\ p_0(x, 0) = g(x). \end{cases} \quad (4.12)$$

Observando a difusão com retenção sob esta ótica de um problema de difusão pura singularmente perturbado com um termo de ordem superior (quarta ordem) nos permitirá usar a solução fundamental da equação de difusão para aproximar os termos associados à expansão assintótica, como será evidenciado no Capítulo 6.

Capítulo 5

O Método das Soluções Fundamentais

O Método das Soluções Fundamentais é uma técnica numérica usada para a solução de problemas homogêneos de valor de contorno, sendo aplicável quando pelo menos uma solução fundamental da equação que rege o problema é explicitamente conhecida. Esse método numérico sem malha, cujas ideias básicas para sua formulação foram introduzidas por Kupradze e Aleksidze [31] em 1964, foi desenvolvido como um método computacional por Mathon e Johnston [32], em 1977. Desde então, a utilização do MFS é crescente e tem demonstrado muita eficiência para uma considerável variedade de problemas físicos. Atualmente, o método tem sido utilizado para uma grande variedade de problemas da modelagem computacional como pode ser observado no artigo de revisão de Fairweather e Karageorghis (1998) [13] e nas referências encontradas neste trabalho. Devemos destacar ainda a sua aplicação em problemas inversos, onde os métodos de discretização de malha podem ser associados a melhorias artificiais da solução, o que é conhecido na literatura por crimes inversos [12].

A visão geral do MFS é que a solução é aproximada através de uma combinação linear entre as soluções fundamentais onde os pontos de singularidade (pontos fonte) são colocados fora do domínio de interesse Ω . Estes pontos fonte formam um pseudo-domínio $\hat{\Omega}$ envolvendo toda a geometria do problema, impondo-se, desta maneira, as singularidades no exterior. Pontos de colocação são alocados sobre a superfície da fronteira $\partial\Omega$ onde se impõe as condições iniciais e/ou de contorno do problema. A escolha do número e da posição dos pontos de colocação, dos pontos fonte bem como a distância entre estes gera um grau adicional de arbitrariedade à solução do problema. Além do mais, o sistema de equações algébricas resultante do MFS é mal condicionado [3].

A Figura (5.1) representa o domínio de definição Ω e sua fronteira $\partial\Omega$ onde são posicionados os pontos de colocação (\bullet) e a fronteira fictícia $\partial\hat{\Omega}$, onde são posicio-

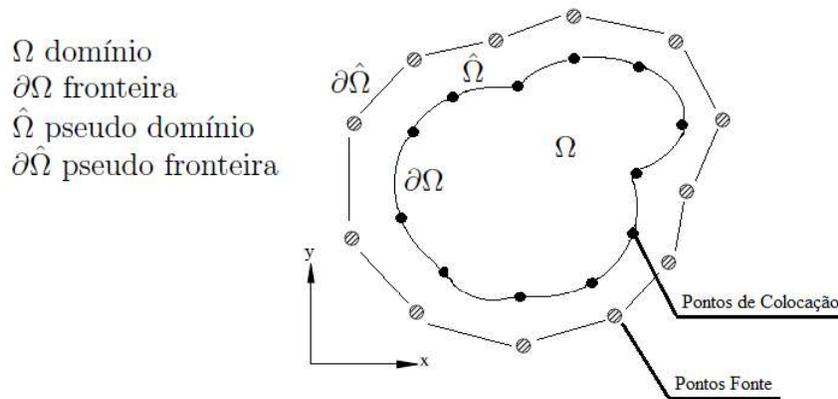


Figura 5.1: Geometria do problema 2D em MFS.

nados os pontos fonte (\circ).

Em geral, a abordagem do MFS apresenta todas as vantagens de um método sem malha sobre os métodos de discretização de domínio, como o Método das Diferenças Finitas (FDM) ou o Método de Elementos Finitos (FEM), por exemplo. A saber, nesses métodos é observado um alto custo computacional da discretização em dimensões mais elevadas ou para os casos onde o domínio apresenta geometria muito irregular. Por outro lado, considerando o Método de Elementos de Contorno (BEM) que também é um método sem malha, o MFS evita integrações sobre a fronteira e a solução em pontos arbitrários é calculada sem a necessidade de quadraturas. Além disso, as derivadas das soluções são calculadas de uma forma muito simples a partir da derivada da solução fundamental. Finalmente, a facilidade de aplicação do método e o pequeno esforço computacional utilizado devem ser enfatizados.

	Malha	Suavidade	Exatidão na fronteira	Precisão na fronteira	Rapidez
FEM	Sim	Não	Sim	Sim	Sim
FDM	Sim	Sim	Sim	Não	Não
BEM	Não	Sim	Não	Sim	Não
MFS	Não	Sim	Não	Não	Sim

Tabela 5.1: Tabela de Comparações entre os métodos numéricos: FEM, FDM, BEM e MFS.

Para efeito de comparação, montamos a Tabela (5.1) onde apresentamos as principais características contidas nos métodos numéricos mais utilizados pela comunidade de computação científica e sua respectiva eficiência. À primeira vista o FEM aparenta ser o mais robusto dos métodos citados, porém o sistema de equações integrais e as interpolações o tornam de difícil implementação. O MFS, quando aplicável, se destaca mais eficiente do que o FEM e os demais por ser sem malha, evitar integrações e interpolações e de fácil implementação. Com centenas de arti-

gos publicados anualmente sobre esta nova técnica, cada vez mais o MFS vem se estabelecendo como uma ferramenta computacional na análise de engenharia e uma alternativa viável em relação aos demais métodos numéricos.

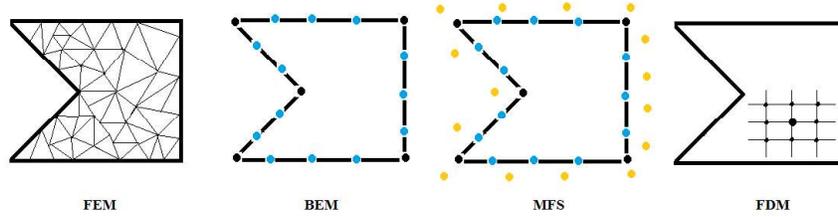


Figura 5.2: Ilustração das discretizações de diversas técnicas numéricas para um problema 2D com geometria complexa.

Podemos enumerar algumas desvantagens do MFS, como a necessidade da solução fundamental do operador diferencial ser explicitamente conhecida; o sistema algébrico resultante ser mal condicionado e a escolha de alguns parâmetros do método, como a posição e o número de pontos fonte ou de colocação ser feito de forma arbitrária o que pode influenciar o resultado obtido.

5.1 Método das Soluções Fundamentais do tipo Kansa

Com a finalidade de superar a limitação do MFS em lidar com PDE não homogêneas, o método de soluções particulares foi introduzido por Goldberg e Chen [15], em 1998. Alves e Chen [1] apresentaram uma nova metodologia para aproximar uma solução particular para o MFS em 2005. Mais recentemente, em 2007, Alves e Valchev [2] introduziram o Método de Soluções Fundamentais do tipo Kansa, ao qual iremos nos referir de modo abreviado por KMFS, para resolver PDE não homogêneas de uma maneira bastante direta. Recentemente aplicado em problemas elípticos [27] e problemas poli-harmônicos [28], o KMFS tem apresentado resultados animadores de acordo com as referências examinadas. No KMFS uma solução aproximada $u^{k+1}(x)$ é expressa da seguinte forma

$$u^{k+1}(x) \approx \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}^{k+1} \phi_{k_m}(x - y_n), \quad (5.1)$$

onde a_{mn}^{k+1} são os coeficientes de cada etapa ($k+1$) de tempo; m e n são os números de pontos de colocação e os números de pontos fonte, respectivamente; k_m são os autovalores do operador homogêneo; ϕ_{k_m} são as soluções fundamentais do operador correspondente aos autovalores já mencionados e, por fim, y_n são pontos fonte em uma pseudo fronteira fora do domínio Ω .

5.1.1 Solução via Equação de Helmholtz

Problemas do tipo Helmholtz surgem, frequentemente, em diversas aplicações na área da Física e Engenharia como, por exemplo, no estudo das vibrações de uma estrutura em acústica [12] ou no estudo da transferência de calor em uma haste de ferro [29].

A equação de Helmholtz, introduzida pelo físico alemão Hermann von Helmholtz, é um tipo particular de PDE obtida a partir da equação da onda

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \Delta \phi = 0, \quad (5.2)$$

onde ϕ é a velocidade potencial assumindo a solução harmônica $\phi(x, t) = e^{-i\omega t} u(x)$.

A razão pela qual utilizaremos a equação de Helmholtz é que, ao aproximarmos a derivada temporal da equação do calor por diferenças finitas avançadas, obtemos uma equação do tipo Helmholtz a ser resolvida em cada etapa de tempo. Em nosso estudo consideramos a equação do tipo Helmholtz em um domínio limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 2, 3$, ou seja

$$\Delta u(x) \pm k^2 u(x) = 0, \quad (5.3)$$

onde a equação de Helmholtz modificada, dada por

$$\Delta u(x) - k^2 u(x) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (5.4)$$

está relacionada com a transferência de calor, como ocorre na equação que modela a condução de calor em hastes. Já a equação de Helmholtz, dada por

$$\Delta u(x) + k^2 u(x) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (5.5)$$

modela problemas associados à meios acústicos.

Inicialmente, vamos realizar uma discretização na derivada temporal a partir de uma aproximação por diferença finitas a serem resolvidas a cada passo de tempo t_{k+1} . Suponhamos que o intervalo de tempo $[0, T]$ é discretizado uniformemente em k subintervalos, então, definimos $t_k = k\Delta t$, $k = 1, 2, \dots, k$, onde $\Delta t = T/k$ é o passo de tempo.

Em particular, vamos resolver o seguinte problema modelo para dar um exemplo do procedimento proposto. Dados $f_u(x, t)$, $g_u(x, t)$, u_0 e u_L encontrar $u(x, t)$ de modo que

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + d \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f_u, \\ u(0, t) = u_0, \quad u(L, t) = u_L, \\ u(x, 0) = g_u, \end{cases} \quad (5.6)$$

onde $(x, t) \in (0, L) \times (0, T)$.

Denotamos por $u(x, t_j)$ o valor exato da função $u(x, t)$ na etapa $t = t_j$. Por outro lado, usamos $u^j(x)$ para representar a aproximação numérica de $u(x, t_j)$. Em seguida, utilizamos a aproximação por diferenças finitas progressivas

$$\frac{\partial u(x, t_{j+1})}{\partial t} = \frac{u(x, t_{j+1}) - u(x, t_j)}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (5.7)$$

a fim de aproximar a derivada temporal.

Substituindo a equação (5.7) para o problema anterior (5.6), obtemos o seguinte problema de Helmholtz modificado: encontrar $u^{j+1}(x)$ de modo que

$$\begin{cases} u^{j+1}(x) - K \frac{d^2 u^{j+1}(x)}{dx^2} = F^{j+1}(x), \\ u^{j+1}(0) = u_0, \quad u^{j+1}(L) = u_L, \end{cases} \quad (5.8)$$

seja resolvida em cada passo de tempo t_{j+1} onde $x \in (0, L)$, $K = d\Delta t$ e $F^{j+1}(x) = \Delta t f_u^{j+1}(x) + u^j(x)$. Ressaltamos que a solução em um tempo t_{j+1} depende das soluções de todos os tempos anteriores $t_k < t_{j+1}$. Em geral, este fato implica em um alto consumo de tempo computacional quando usamos métodos de baixa ordem para a discretização espacial. A solução $u^{j+1}(x)$ então é aproximada por

$$u^{j+1}(x) \approx \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}^{j+1} \phi_{\kappa_m}(x - \zeta_n), \quad (5.9)$$

onde M e N são os números dos autovalores e os pontos fonte, respectivamente. Em particular, para este estudo unidimensional temos $N = 2$. Além disso, a_{mn}^{j+1} são os coeficientes da etapa $j + 1$; ζ_n são os pontos fonte e a autofunção ϕ_{κ_m} é solução fundamental do operador de Helmholtz:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} : C^q(\Omega) &\mapsto C^{q-2}(\Omega), \\ \mathcal{H}(\phi) &= \Delta \phi \pm \kappa_m^2 \phi, \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde $q \geq 2$.

Inserindo a equação (5.9) na equação (5.8), obtemos o seguinte sistema

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}^{j+1} (1 \pm K \kappa_m^2) \phi_{\kappa_m}(x_i - \zeta_n) = F^{j+1}(x_i), \quad \forall i = 1, \dots, I \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}^{j+1} \phi_{\kappa_m}(0 - \zeta_n) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N a_{mn}^{j+1} \phi_{\kappa_m}(L - \zeta_n) = 0, \end{cases} \quad (5.11)$$

onde x_i indica os pontos interiores. O sistema (5.11) pode ser representado como uma equação matricial da forma

$$A\mathbf{a}^{k+1} = \mathbf{b}^{k+1}, \quad (5.12)$$

onde $\mathbf{a}^{k+1} = [a_{1,1}^{k+1}, a_{1,N}^{k+1}, a_{M,1}^{k+1}, \dots, a_{M,N}^{k+1}]_{(M,N) \times 1}$ é o vetor de coeficientes desconhecidos e \mathbf{b}^{k+1} é o vetor de dados. A ordem da matriz A depende do número de pontos de colocação (n_a) no interior do domínio Ω e do número de pontos de colocação na borda (n_b) da pseudo fronteira onde $n_c = n_a + n_b$, ou seja, $A_{n_c \times MN}$.

Se $n_c = MN$, temos uma matriz quadrada de coeficientes cujo sistema é facilmente resolvido por eliminação de Gauss. Caso contrário, a equação matricial (5.12) deve ser resolvida por um método para problemas não lineares, como o Método dos Mínimos Quadrados, por exemplo. Como é típico do MFS, o sistema linear (5.11) é mal condicionado e algum método de regularização se faz necessário, como será melhor detalhado na próxima seção.

5.2 Métodos de Regularização

A regularização surgiu da necessidade de se resolver problemas mal condicionados. Em particular, vamos adotar o Método de Regularização de Tikhonov [39], que objetiva reduzir a influência dos erros de aproximação sobre os resultados numéricos. Portanto, a fim de obtermos uma regularização da solução estável para a equação matricial (5.12), resolveremos o sistema

$$(A^T A + \lambda I)\mathbf{a} = A^T \mathbf{b}, \quad (5.13)$$

onde A^T é a transposta da matriz A , I é a matriz identidade e λ é o parâmetro de regularização. A escolha do parâmetro λ é uma questão delicada, embora existam regras consagradas na literatura para este objetivo. Neste trabalho usaremos o critério da curva-L [16].

5.3 Exemplos Numéricos Preliminares

Nesta seção vamos aplicar o MFS em dois exemplos unidimensionais com solução analítica e analisar alguns dos seus parâmetros. Como comentado anteriormente, o

MFS apresenta algumas desvantagens inerentes, como a arbitrariedade da escolha dos pontos fonte e colocação e da distância entre eles, além do sistema algébrico associado ao método ser mal condicionado.

5.3.1 Exemplo 1

Vamos considerar o seguinte problema não-homogêneo:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 9u = -9x, & x \in (0, 1) \\ u(0) = 2, & u(1) = 2e^3 + 1. \end{cases} \quad (5.14)$$

Neste exemplo, a solução analítica é dada por

$$u(x) = 2e^{3x} + x. \quad (5.15)$$

A solução fundamental para o operador de Helmholtz modificado unidimensional é

$$\phi(x, y) = e^{\kappa_m |x-y|} = e^{m|x-y|}, \quad (5.16)$$

Assim, considerando a equação (5.16) na equação (5.14), obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^M (c_m e^{mR} + \hat{c}_m e^{m(1+R)}) = 2, \\ \sum_{m=1}^M (m^2 - 9)(c_m e^{m(x_i+R)} + \hat{c}_m e^{m(x_i+R)}) = -9x_i, & \forall i = 2, \dots, 2M - 1 \\ \sum_{m=1}^M (c_m e^{m(1+R)} + \hat{c}_m e^{mR}) = 2e^3 + 1, \end{cases} \quad (5.17)$$

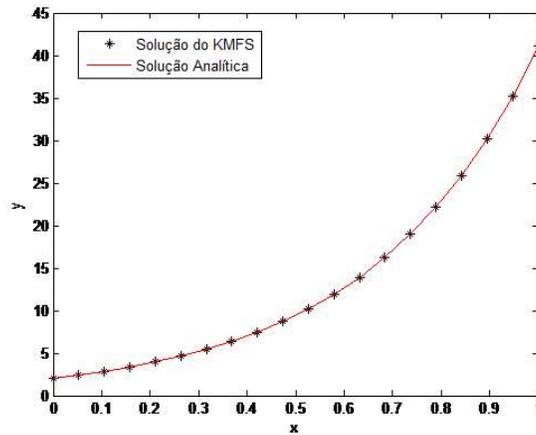


Figura 5.3: Exemplo 1: Solução analítica × KMFS

Resultados obtidos

Vale salientar que, neste exemplo, temos uma equação de Helmholtz modificada (5.4) não homogênea (5.6). Foram utilizados dois pontos de colocação $x_0 = 0$ e $x_L = 1$, $N = 2$, $\zeta_1 = -x_0 - R$, $\zeta_2 = x_L + R$. Além disso, devemos tomar as frequências de teste (autovalores) $k_m = m$; $m = 1, \dots, M$. Finalmente, a fim de termos uma equação matricial quadrada escolhemos $K = 2M - 1$, i.e., $0 < x_0 < x_1 < \dots < x_I < 1$.

A Figura (5.3) exibe a solução numérica do KMFS (*) e analítica (-), para $R = 1.0$ e $M = 10$. Embora a equação da matriz correspondente ao sistema (5.17) seja mal condicionada, podemos verificar resultados muito precisos, tendo em conta a abordagem KMFS, mesmo sem qualquer tipo de regularização.

5.3.2 Exemplo 2

Consideremos agora o seguinte problema difusivo:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_0}{\partial t} - d \frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} = 0, & (x, t) \in (0, 1) \times (0, T), \\ u_0(0, t) = u_0(1, t) = 0, \\ u_0(x, 0) = \sin(\pi x), \end{cases} \quad (5.18)$$

que tem solução analítica dada por

$$u_0(x, t) = e^{-d\pi^2 t} \sin(\pi x). \quad (5.19)$$

Usando a discretização temporal, obtemos os problemas de Helmholtz associados ao problema (5.18) a serem resolvidos em cada etapa de tempo, ou seja, a solução gerada em um tempo t_{j+1} depende das soluções de todos os tempos anteriores $t_k < t_{j+1}$.

Resultados obtidos

Neste exemplo transiente, após a discretização da derivada temporal como acima descrito, resolvemos o método KMFS com os seguintes parâmetros: $M = 20$ (número de autovalores); $N = 2$ (número de pontos fonte); $\Delta t = 0.01$ (intervalo de tempo); $na = 36$ (pontos interiores); $R = 1$ (distância dos pontos fonte); $\lambda = 10^{-7}$ (parâmetro de regularização de Tikhonov) e, por fim, $d = 1$ (coeficiente de difusão).

A Figura (5.4) apresenta o comportamento da solução aproximada (*) pelo KMFS em relação a solução analítica (-) quando variamos T . Nota-se que quanto menor o intervalo de tempo melhor se torna a solução aproximada em relação a solução analítica do problema: em (a), usamos $T = 0.15$; em (b), $T = 0.30$; em (c), $T = 0.60$ e em (d) $T = 1.00$.

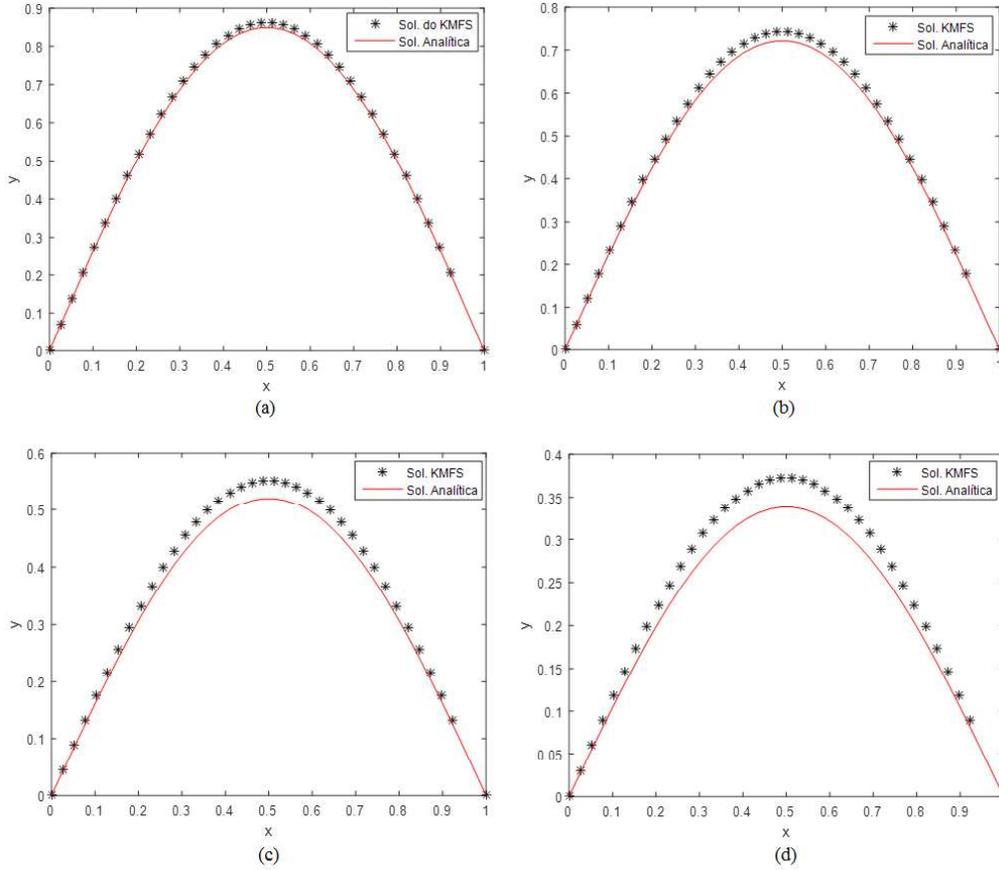


Figura 5.4: Exemplo 2: Solução analítica \times KMFS, quando variamos T , (a) $T = 0.15$, (b) $T = 0.30$, (c) $T = 0.60$ e (d) $T = 1.00$.

Este simples exemplo, demonstra a limitação da metodologia de discretização da derivada temporal para se resolver problemas estacionários acoplados (neste caso, do tipo Helmholtz) para cada etapa de tempo. A necessidade de resolver um problema não homogêneo aumenta a dimensão do sistema associado ao método numérico. Além do mais, o parâmetro de regularização necessita ser atualizado em cada passo de tempo, o que inviabiliza seu uso. A falta de acurácia do resultado numérico após um pequeno intervalo de tempo se impõe como um grande limitador para a aplicação do método proposto.

Devemos ressaltar que a utilização do MFS em PDE fracionárias, como descrito na Seção (3.1), utiliza uma analogia com a proposta discutida neste Capítulo, realizando uma discretização da derivada de Caputo (Equação (3.2)), como se pode verificar no trabalho de Yan e Yang (2014) [41]. Este resultado reforça a dificuldade do desenvolvimento de métodos numéricos para o modelo de equações diferenciais fracionárias, como previamente mencionado e ressalta a importância do desenvolvimento de novos modelos para se estudar difusão anômala, como, o modelo proposto por Bevilacqua et al., introduzido na Seção (3.2). Tendo em vista a limitação da

metodologia empregada no atual exemplo, no próximo Capítulo iremos explorar a aplicação do MFS para a equação de difusão pura utilizando a solução fundamental (Equação (2.30)) da equação do calor e criando uma fronteira fictícia ao longo do tempo, i.e., externamente ao domínio $\Omega \times (t_0, t_f)$.

Capítulo 6

O MFS para o Problema da Condução do Calor Unidimensional

Neste capítulo vamos considerar a formulação do MFS de maneira generalizada para problemas regidos por uma equação da forma

$$Lu(\rho) = 0, \quad \rho \in \Omega, \quad (6.1)$$

em que L é um operador linear elíptico e Ω é um domínio limitado em \mathbb{R} , com fronteira $\partial\Omega$. A solução do MFS, $u_N(\rho)$, é expressa através de combinações lineares de soluções fundamentais ϕ_n , $n = 1, \dots, N$,

$$u_N(\rho) = \sum_{n=1}^N a_n \phi_n, \quad \rho \in \hat{\Omega}, \quad (6.2)$$

que são densas no espaço do domínio das soluções [7]. Os coeficientes $\{a_n\}_{n=1}^N$ são encontrados impondo que a Equação (6.2) satisfaça as condições de contorno sobre os pontos de colocação.

Estudaremos nesse Capítulo uma análise do problema da condução de calor transiente e unidimensional. Como previamente mencionado, os pontos fontes (singularidades) serão colocados fora do domínio de interesse. Dada a característica transiente do problema sob análise, vamos levar em conta uma condição inicial dada no tempo $t = 0$, para a qual deveremos inserir pontos de colocação no interior do domínio, como na Figura (6.1).

Mais especificamente, o Problema da Condução de Calor abordado aqui é dado por

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = d \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, & (x,t) \in (0,1) \times (0,T), \\ u(0,t) = u(1,t) = 0, \\ u(x,0) = u_0(x), \end{cases} \quad (6.3)$$

onde $u_0(x)$ é uma função suficientemente suave.

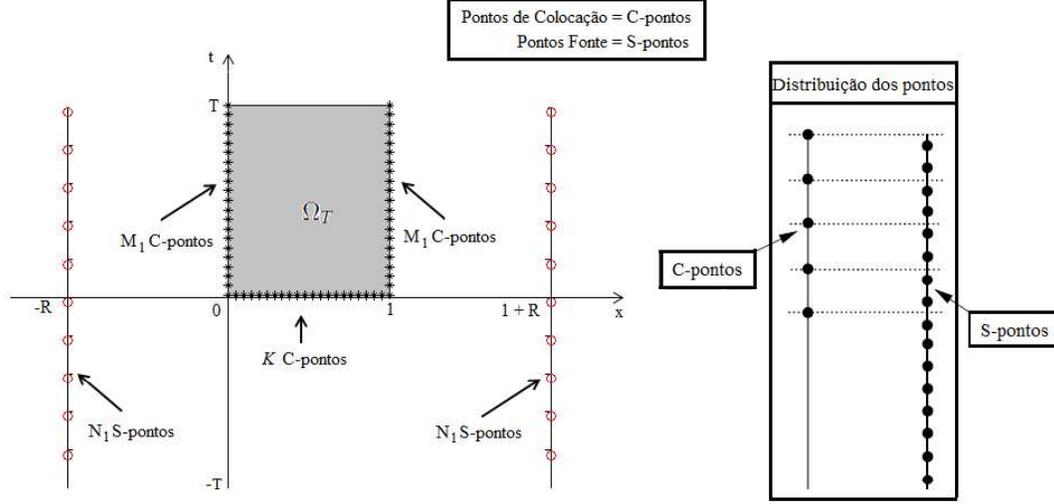


Figura 6.1: Distribuição dos pontos fonte e colocação para um problema unidimensional e transitório [23].

Em particular, vamos determinar uma solução u para o problema (6.3) no domínio $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$ com condição de contorno de Dirichlet. Para outras condições de contorno como Neumann ou Robin, bastaria uma pequena mudança na implementação computacional do MFS.

Além do mais, vamos considerar $u_0(x)$ analítica em Ω , de modo que o Problema (6.3) seja bem posto [20, 35].

6.1 Descrição do Método

De modo análogo ao algoritmo apresentado no trabalho de Johansson et al. [22], a solução fundamental para a equação do calor unidimensional, dada pela Equação (2.30), será reescrita por

$$F(x, t; y, \tau) = \frac{H(t - \tau)}{(4\pi(t - \tau))^{\frac{n}{2}}} \exp^{-\frac{|x-y|^2}{4(t-\tau)}}, \quad (6.4)$$

onde H é a função de Heaviside [24]. Note que aqui estamos considerando o coeficiente de condutividade térmica $d = 1$.

A verificação de que a Equação (6.4) satisfaz a equação do Problema (6.3) é imediata e análoga à demonstração apresentada no Capítulo 2. A construção da solução para o Problema (6.3) é dada por

$$u(x, t) \approx u_N(x, t) = \sum_{n=1}^{2N_1} \sum_{j=1}^2 a_n^{(j)} F(x, t; y_j, \tau_n), \quad (x, t) \in \Omega_T, \quad (6.5)$$

onde $N = 4N_1$. A função de Heaviside é aqui introduzida a fim de enfatizar que a solução fundamental é zero para todo $t < \tau$, vide Apêndice C.

A variável temporal será discretizada como:

$$t_i = \frac{i}{M_1} T, \quad i = 1, \dots, M_1. \quad (6.6)$$

Para gerar os pontos fonte (N) sobre o intervalo $(-T, T)$, existem dois casos diferentes, dependendo se $N_1 \geq M_1$ ou $N_1 < M_1$. Supomos que seja $N_1 = KM_1$ ou $M_1 = KN_1$ para algum inteiro $K > 0$. A relação entre os pontos fonte e colocação para $t > 0$, com $(\tau_n)_{n=1, \dots, 2N_1}$ é dada por:

$$\tau_n = \begin{cases} -T + \frac{n}{KM_1} T - \frac{T}{2KM_1}, & n = 1, \dots, 2N_1, \quad \text{se } N_1 = KM_1 \geq M_1, \\ -T + \frac{Kn}{M_1} T - \frac{T}{2M_1}, & n = 1, \dots, 2N_1, \quad \text{se } N_1 < M_1 = KN_1. \end{cases} \quad (6.7)$$

A garantia de que cada τ_n é diferente de cada t_i é fornecida pelos respectivos fatores de mudança $T/(2KM_1)$ e $T/(2M_1)$. Além disso, a disposição dessa construção faz com que cada dos $(t_i)_{i=1, M_1}$ e $(\tau_n)_{n=1, 2N_1}$ seja distribuído uniformemente nos intervalos $(0, T]$ e $(-T, T)$, conforme a Figura (6.1).

Os pontos fonte serão definidos nas retas suporte verticais dadas por:

$$y_1(\tau_n) = -R \quad e \quad y_2(\tau_n) = 1 + R, \quad n = 1, \dots, 2N_1,$$

e em $\Omega \times \{0\}$ definimos

$$x_0^{(l)} = \frac{l}{K+1}, \quad l = 1, \dots, K. \quad (6.8)$$

A condição de contorno de Dirichlet e a condição inicial são dados do Problema (6.3). Dessa forma, obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} u_N(x_0^{(l)}, 0) = u_0(x_0^{(l)}), & l = 1, \dots, K, \\ u_N(0, t_i) = u_N(1, t_1) = 0, & i = 1, \dots, M_1. \end{cases} \quad (6.9)$$

Substituindo-se a Equação (6.5), no sistema (6.9) obtemos um sistema de

$M = 2M_1 + K$ equações, com $N = 4N_1$ incógnitas $a_n^{(j)}$ para $j = 1, 2$ e $n = 1, \dots, 2N_1$. Este sistema pode ser reescrito de modo análogo à equação matricial (5.12) e, também, pode ser resolvido aplicando o Método dos Mínimos Quadrados Penalizado, comumente conhecido como o Método de Regularização de Tikhonov. Como já mencionado anteriormente, o critério da curva L foi usado para determinar uma boa escolha para o parâmetro de regularização $\lambda > 0$.

6.2 Resultados Numéricos

A fim de avaliar a precisão das soluções numéricas obtidas pelo MFS, aplicaremos a metodologia descrita na Seção anterior em um *benchmark* e comparamos os resultados numéricos com sua solução exata. Os exemplos são construídos propositalmente de modo que o número de pontos fonte e de colocação sejam grandes o suficiente para garantir que qualquer aumento desses números não melhora significativamente a precisão da solução numérica sem afetar sua estabilidade, fato corriqueiro no emprego no MFS.

Em particular, vamos considerar a condição inicial dada por

$$u(x, 0) = \sin(\pi x), \quad x \in (0, 1). \quad (6.10)$$

A solução analítica do Problema (6.3) é então dada por:

$$u(x, t) = \sin(\pi x) \exp(-\pi^2 t), \quad (x, t) \in (0, 1) \times (0, T), \quad (6.11)$$

a qual satisfaz a equação do calor, bem como verifica as condições iniciais e de contorno – condições de Dirichlet homogêneas, i.e.,

$$u(0, t) = 0, \quad u(1, t) = 0, \quad t \in (0, T), \quad (6.12)$$

como pode ser diretamente verificado.

6.2.1 Dados sem Ruídos

Inicialmente, vamos considerar os seguintes parâmetros: $k = 20$, $M_1 = 20$, $N_1 = 5$, $T = 0.25$ e $R = 1$, que traduzem o domínio do problema representado pela Figura (6.2) onde indica que foram utilizados 60 pontos de colocação ($M = 60$) posicionados na fronteira do domínio e 20 pontos fonte ($N = 20$) colocados na fronteira do pseudo domínio.

A Figura (6.3) também foi construída levando-se em conta os parâmetros acima. O canto da curva L, mostrado na Figura (6.3), plotado a partir da norma do resíduo $\|\mathbf{A}\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_2$ versus a norma da solução $\|\mathbf{a}\|_2$, apresenta o melhor valor de aproximação

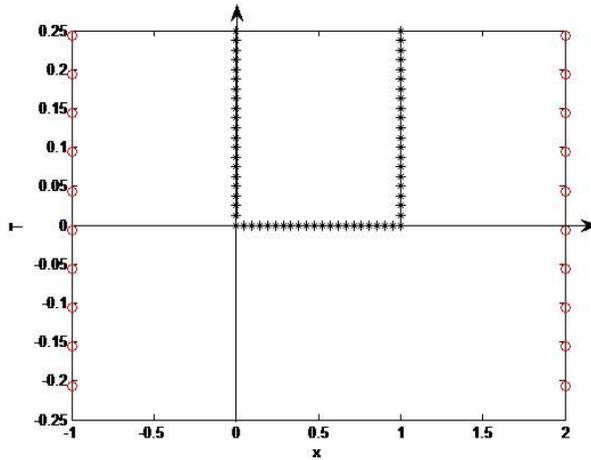


Figura 6.2: Distribuição dos pontos fonte (o) e de colocação (*) no domínio unidimensional.

atribuído para o parâmetro de regularização $\lambda = 10^{-8}$ localizado justamente na região de transição entre os valores com menos filtro (superior a curva) e mais filtro (inferior a curva), ou seja, valores mais próximos a 1 e valores mais distantes de 1, respectivamente. Para produzir as melhores aproximações possíveis, diferentes valores do parâmetro de regularização foram escolhidos dependendo do nível de ruído atribuído.

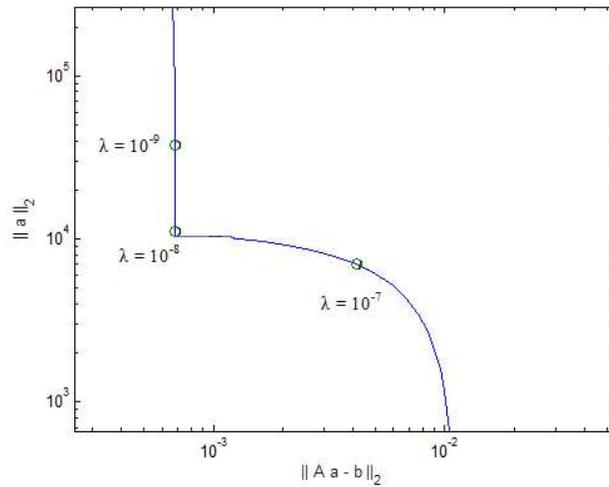


Figura 6.3: Exemplo de curva L para o exemplo numérico com dados sem ruído com ($M = 60$) e ($N = 20$).

Com estes elementos temos que a Figura (6.4) representa a solução do MFS *versus* solução analítica em $T = 0.25$.

Abaixo apresentamos os resultados obtidos para $T \in \{0.5, 0.7, 1.0\}$.

Podemos observar que, no presente caso, os resultados foram mais precisos do

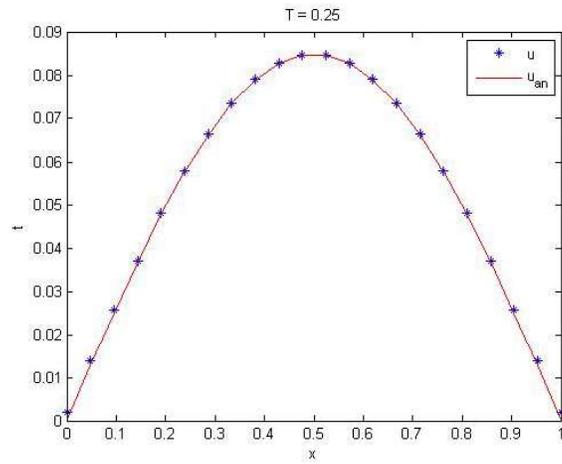


Figura 6.4: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.25$, com $\lambda = 10^{-8}$.

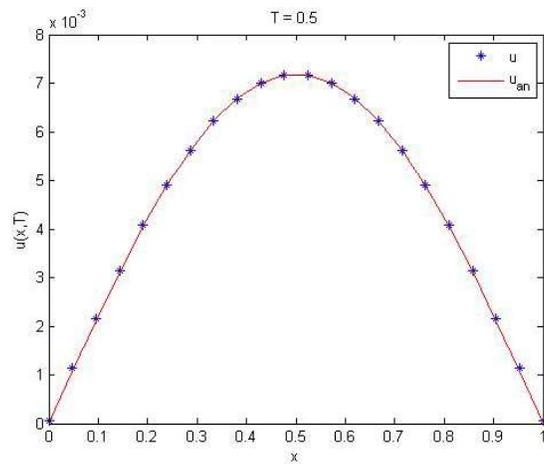


Figura 6.5: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.50$, com $\lambda = 10^{-10}$.

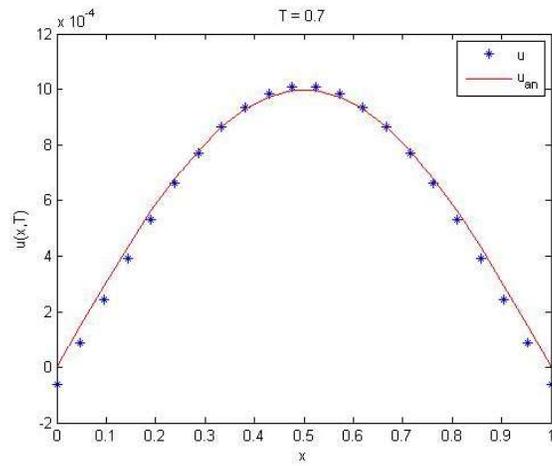


Figura 6.6: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 0.70$, com $\lambda = 10^{-14}$.

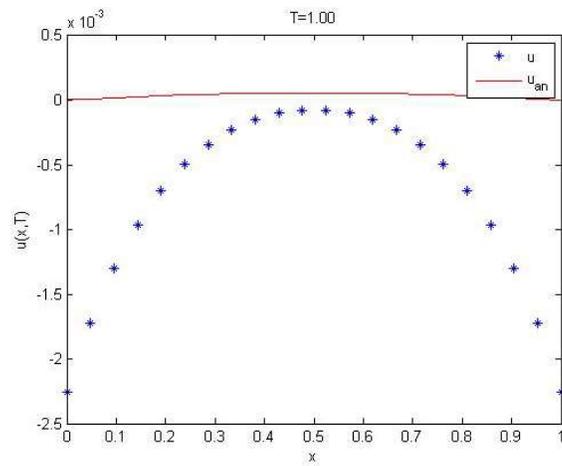


Figura 6.7: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) para $T = 1.00$, com $\lambda = 10^{-14}$.

que ocorreu quando discretizamos a derivada temporal e utilizamos a solução fundamental para a equação do tipo Helmholtz. De fato, o MFS apresentou resultados bastante acurados para valores até $T = 0.5$, apresentaram uma pequena discrepância no caso em que $T = 0.7$ e, finalmente, foram imprecisos para o caso em que $T = 1.0$. A presente abordagem, portanto, demonstrou-se mais adequada para aplicação na equação do calor, para até um certo limite de tempo T . Embora o método discutido nesta Seção não seja iterativo, é de se esperar, com o passar do tempo, os erros do método numérico fiquem da mesma ordem de grandeza da solução do problema difusivo. Motivados pelos resultados obtidos, a seguir vamos explorar o comportamento do método na presença de dados ruidosos, que são muito importantes no contexto das aplicações de engenharia.

6.2.2 Dados com Ruídos

Nesta Subseção, vamos adicionar ruído gaussiano branco (GWN – *Gaussian White Noise*) aos dados iniciais e comparar a solução numérica obtida com a analítica para diferentes níveis de ruído. Mais especificamente, vamos utilizar como condição inicial a função

$$u_0^\delta = \sin(\pi x) \exp(-\pi^2 T) + N(0, \sigma^2), \quad (6.13)$$

onde $N(0, \sigma^2)$ representa a distribuição normal com média zero e desvio padrão unitário,

$$\sigma = \delta \times \max_{x \in \Omega} |u_0| = \delta \exp(-\pi^2 T), \quad (6.14)$$

e δ é o nível percentual do ruído relativo. A Figura (6.8) apresenta o confronto entre os dados iniciais sem ruído e poluídos com 10% de GWN.

No que segue, vamos apresentar os resultados obtidos para diferentes níveis GWN para diferentes momentos. Em particular, vamos considerar $\delta \in \{0.05, 0.10, 0.15, 0.20\}$, nos instantes de tempo $T = \{0.25, 0.50, 0.70\}$, levando-se em conta os mesmos parâmetros para o MFS considerados anteriormente no caso sem ruído.

Os resultados expostos nas figuras abaixo nos permitem concluir que a metodologia ora analisada é bastante robusta na presença de ruídos do tipo GWN para pequenos intervalos de tempo. De fato, para $T = 0.25$ o MFS demonstrou acurácia mesmo na presença de ruído até um nível de 20%. Para intervalos de tempo maiores, o MFS fica mais sensível a ruídos nos dados iniciais. Em particular, podemos observar que para $\delta = 0.10$, i.e., 10% GWN a solução numérica é insatisfatória quando $T = 0.70$. No entanto, para os níveis de ruído usuais em aplicações ($\delta \leq 5\%$) o

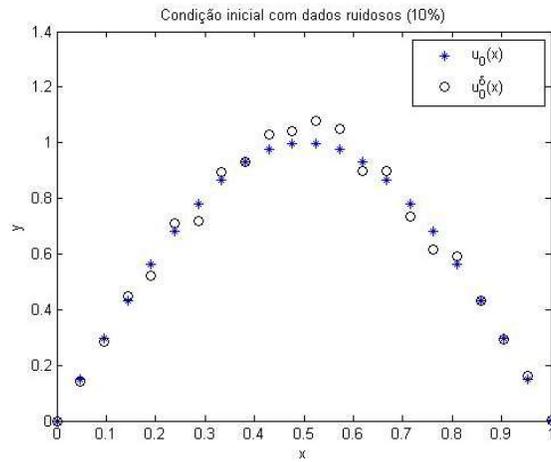


Figura 6.8: $u_0^\delta(-) \times u_0(*)$ para 10% de GWN.

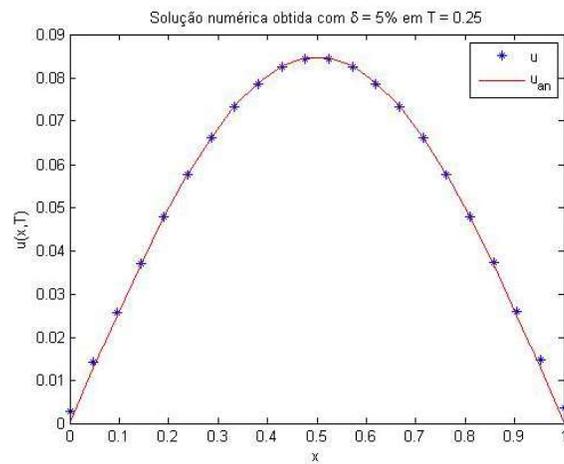


Figura 6.9: (Solução MFS) $(*) \times$ (Solução Analítica) $(-)$ em $T = 0.25$ com 5% de GWN.

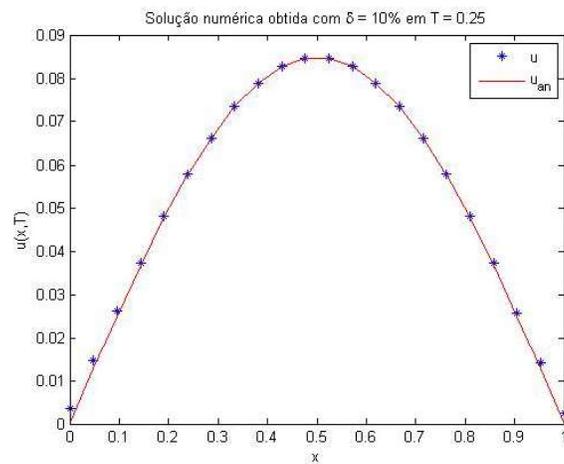


Figura 6.10: (Solução MFS) $(*) \times$ (Solução Analítica) $(-)$ em $T = 0.25$ com 10% de GWN.

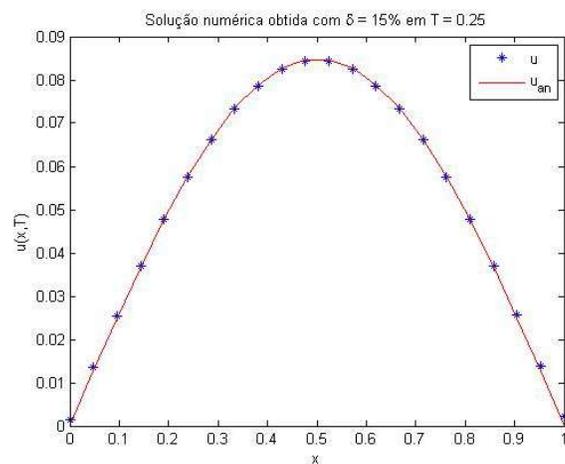


Figura 6.11: (Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 15% de GWN.

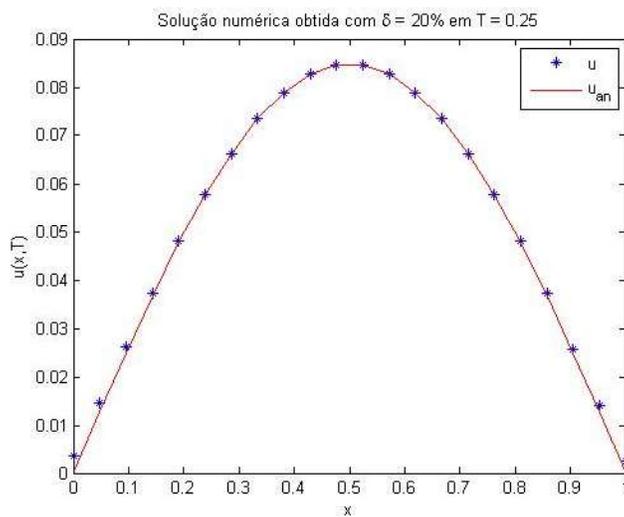


Figura 6.12: (Solução MFS) (*) × (Solução Analítica) (-) em $T = 0.25$ com 20% de GWN.

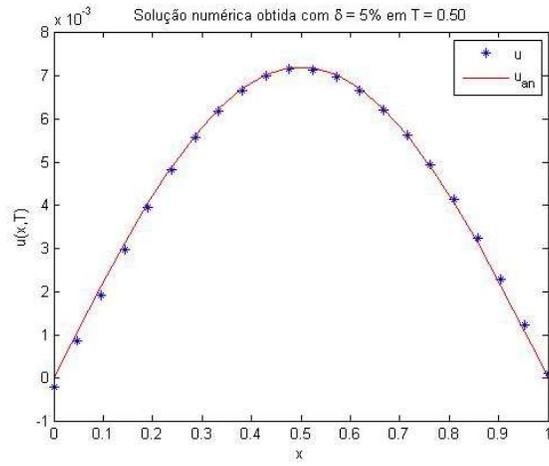


Figura 6.13: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 5% de GWN.

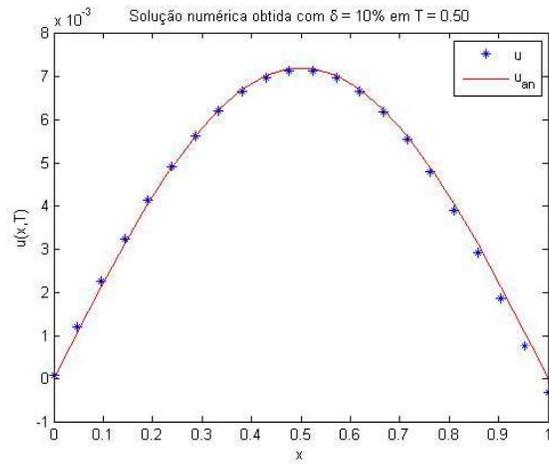


Figura 6.14: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 10% de GWN.

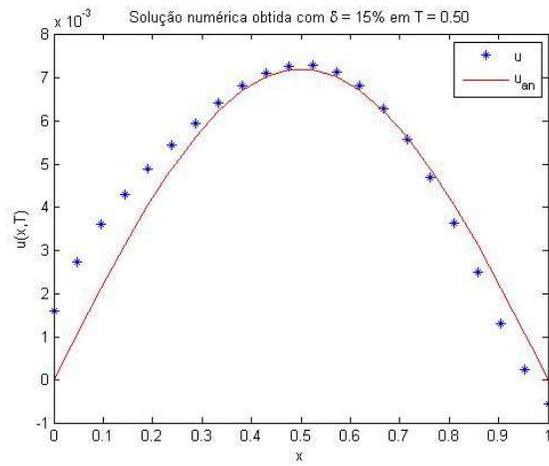


Figura 6.15: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 15% de GWN.

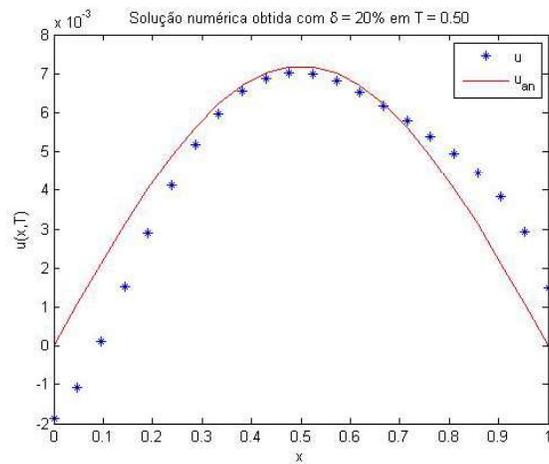


Figura 6.16: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.50$ com 20% de GWN.

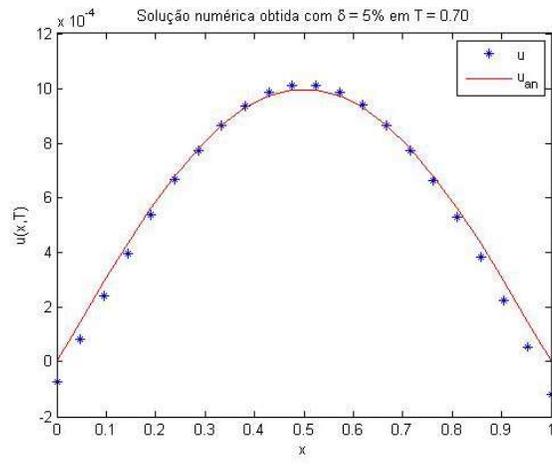


Figura 6.17: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.70$ com 5% de GWN.

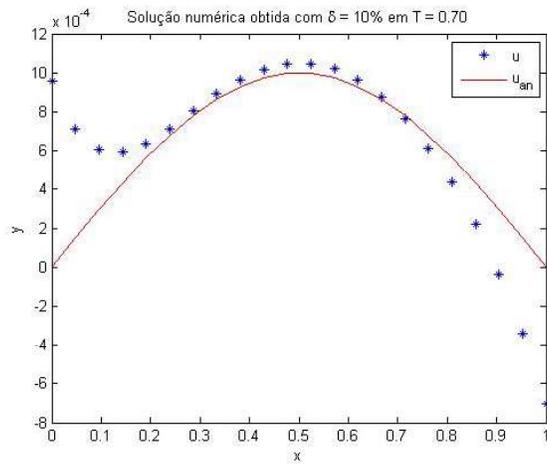


Figura 6.18: (Solução MFS) (*) \times (Solução Analítica) (-) em $T = 0.70$ com 10% de GWN.

método apresentado foi bastante satisfatório.

6.3 Análise de Sensibilidade

Como já mencionado no texto, a escolha de alguns parâmetros do MFS é arbitrária e influencia nos resultados obtidos, sendo essa uma das principais críticas em relação ao método. Com a finalidade de balizar nossa discussão acerca dessa questão, iremos estudar a sensibilidade do erro em relação aos parâmetros R e T para alguns dos exemplos explorados acima, sempre considerando um nível de GWN de 5% nos dados iniciais.

A Figura (6.19) exhibe o desempenho do erro máximo absoluto $\max(|u_{an} - u|(x, 0)|)$ produzido pelo MFS sobre $R \in (0, 5]$ para $\lambda = 10^{-14}$ (—), $\lambda = 10^{-12}$ (---) e $\lambda = 10^{-10}$ (<), obtidos com os seguintes parâmetros: $k = 20$, $M_1 = 20$ (60 pontos de colocação), $T = 0.5$, $N_1 = 5$, $\delta = 5\%$. Notamos da Figura (6.19) que a melhor escolha para R está entre 0.5 e 1.5, para todos os valores de λ considerados.

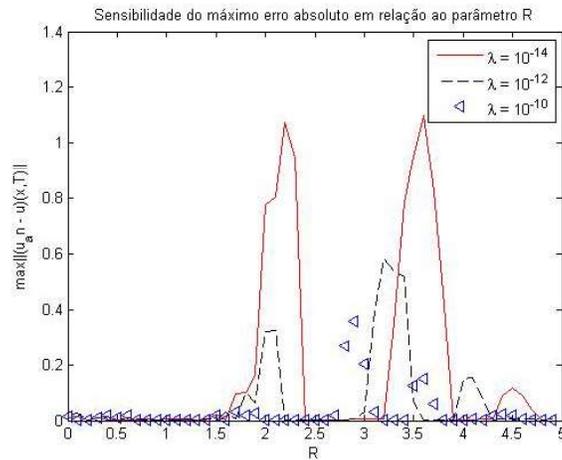


Figura 6.19: (Erro Máximo Absoluto) $\times R$ para $\lambda = 10^{-14}$ (—), $\lambda = 10^{-12}$ (---), $\lambda = 10^{-10}$ (<).

O erro máximo absoluto não é apropriado para a análise de sensibilidade em relação ao parâmetro T por conta da diferença de escala da solução ao longo do tempo. Na Figura (6.20) apresentamos a análise levando-se em conta o erro relativo, definido por

$$\epsilon_r = \frac{\max||u_{an} - u||}{\max||u||}, \quad (6.15)$$

onde podemos observar que o esquema numérico deixa de funcionar adequadamente tanto para pequenos quanto para grandes intervalos de tempo. De fato, quanto o intervalo de tempo é muito pequeno, nosso esquema numérico representado pela

Figura (6.2) não é adequado. No entanto, corroborando com nossos exemplos numéricos, o MFS é bastante preciso para $0.2 < T < 0.6$, desde que o parâmetro de regularização λ seja escolhido apropriadamente, como ocorre para $\lambda = 10^{-10}$ e $\lambda = 10^{-8}$.

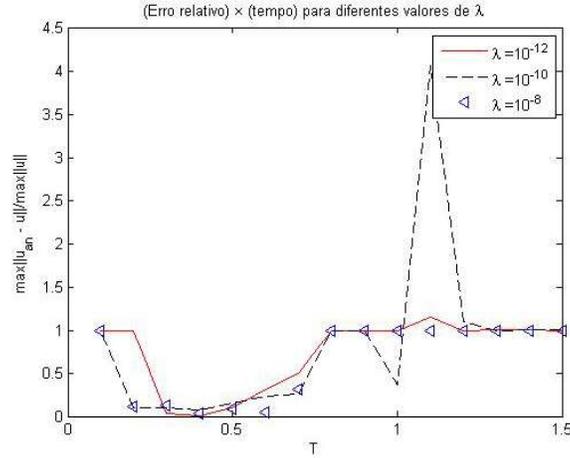


Figura 6.20: (Erro Relativo) $\times T$ para $\lambda = 10^{-12}$ (—), $\lambda = 10^{-10}$ (---), $\lambda = 10^{-8}$ (···).

Ressaltamos que a Figura (6.20) foi construída mantendo-se os mesmos pontos fonte e colocação acima, tomando-se $R = 1$, e variando-se $T \in (0, 1.5]$. O erro relativo r , dado pela Equação (6.15) é então examinado sobre T para $\lambda = 10^{-12}$ (—), $\lambda = 10^{-10}$ (---) e $\lambda = 10^{-8}$ (···), considerando-se 5% o nível de ruído.

Capítulo 7

Conclusões

Os processos difusivos desempenham papel de destaque na ciência, com aplicações em diversas áreas do conhecimento como na modelagem de processos físico e químicos, nos processos migratórios, na difusão do conhecimento e da informação, dentre outros. O processo de difusão (simples) é em geral modelado por uma equação diferencial parcial transiente de segunda ordem, o que é bem estabelecido na literatura, tanto do ponto de vista teórico quanto numérico.

Alguns processos difusivos, no entanto, não são adequadamente modelados por uma PDE de segunda ordem, ocorrendo o que se denominou de “difusão anômala” [26] e que ocorrem também em diversas aplicações de interesse, como no crescimento de superfícies, transporte de um fluido através de um meio poroso, análise do histograma obtido a partir das batidas do coração de um indivíduo saudável e nas variações de sistemas financeiros, por exemplo [5, 8].

Observando-se que o modelo via PDE de segunda ordem não era adequado para estes fenômenos difusivos, foi proposto um modelo via PDE fracionárias, que vem sendo empregado para a análise de processos de superdifusão e subdifusão. No entanto, após mais de uma década, esta metodologia ainda preserva importantes resultados de existência, unicidade e estabilidade em aberto, além de os métodos numéricos disponíveis serem bastante limitados e via-de-regra restritos a exemplos unidimensionais [41].

Em contrapartida a este desenvolvimento, Bevilacqua et al. [5, 6] propuseram um novo modelo para difusão anômala através de uma PDE, onde um novo termo de quarta ordem e relacionado à perturbação do fenômeno de difusão pura foi introduzido. Esta nova metodologia perpassa as dificuldades inerentes do modelo de equações diferenciais fracionárias e possibilita a utilização das técnicas numéricas já consolidadas no meio científico, como o Método dos Elementos Finitos, Método das Diferenças Finitas e Método dos Elementos de Contorno, por exemplo.

Em particular, o modelo de Bevilacqua pode ser decomposto em três problemas de difusão simples acoplados e mais um termo “remanescente” que pode ser despre-

zado quando o coeficiente do termo de quarta ordem é consideravelmente pequeno em relação ao coeficiente do termo de segunda ordem (termo de difusão) [37]. Em outras palavras, quando o fenômeno de difusão anômala pode ser considerado como uma perturbação singular [30] no processo difusivo. Esta interpretação, entre outras consequências, nos permite empregar o Método das Soluções Fundamentais, como um método para a solução numérica do modelo de difusão anômala.

Dentre os métodos numéricos mais empregados na computação científica, o MFS se destaca por suas vantagens de método sem malha, sobre os métodos de discretização de domínio, bem como também apresenta vantagens sobre o BEM, por evitar o cálculo via quadraturas tanto para a solução quanto para suas derivadas em pontos arbitrários do domínio. De particular interesse é o emprego do MFS em problemas inversos, como o ajuste de variáveis do modelo a dados experimentais, por exemplo (*fitting*). O emprego de métodos numéricos de discretização de domínio em problemas inversos pode ser associado a melhorias artificiais da solução, quando utilizamos a mesma malha para a simulação computacional dos dados e para a reconstrução dos parâmetros, fato relatado na literatura como crimes inversos. Além do mais, a rapidez do MFS, que gera uma matriz pequena (por ser um método de redução de domínio) e sua facilidade de implementação são atrativos relevantes para seu emprego.

Neste trabalho, portanto, investigamos a viabilidade da utilização do MFS na solução de modelos associados à difusão anômala.

A primeira estratégia a ser observada, foi a discretização da derivada temporal em um esquema de diferenças finitas adiantadas, de modo que o problema estacionário em cada etapa de tempo resultasse em uma equação do tipo Helmholtz, que apresenta solução fundamental – um dos pré-requisitos básicos para o emprego do MFS. Devemos destacar que esta abordagem já é conhecida na literatura, sendo utilizada até mesmo para derivada Caputo em modelos de PDE fracionárias [41]. Em nossos resultados numéricos, podemos constatar, no entanto, que esta proposta só é adequada para espaços de tempo curtos. De fato, por se tratar de um processo iterativo, o erro acumulado em cada iteração limita sua aplicação.

A segunda estratégia para o emprego do MFS foi a utilização da solução fundamental para a equação do calor, dada pela Equação (6.4) em um esquema proposto por Johansson et al. (2011) [23]. Os experimentos numéricos demonstraram que o MFS, neste caso, é um método preciso e robusto para intervalos de tempo maiores do que a metodologia anterior. Como consequência deste resultado, temos que este esquema demonstrou-se apropriado para a solução dos problemas acoplados associados à decomposição assintótica proposta por Rocha de Faria et al. (2015) [37] para o modelo de Bevilacqua.

O desenvolvimento e a análise desse método numérico é uma proposta para um

desenvolvimento futuro deste trabalho. Assim como sua extensão para problemas em duas e em três dimensões.

Referências Bibliográficas

- [1] Alves, C. J. S., Chen, C. S. A new method of fundamental solutions applied to nonhomogeneous elliptic problems. *Adv. Comp. Math.* 23, 125-142, 2005.
- [2] Alves, C. J. S., Valtchev, S. S. A Kansa type method using fundamental solutions applied to elliptic PDEs; in *Advances in Meshfree Techniques. Comput. Meth. Appl. Sc.* 5, Springer, pp. 241-256; 2007.
- [3] Augustin, M. A. A Method of Fundamental Solutions in Poroelasticity to Model the Stress Fields in Geothermal Reservoirs. *Geosystems Mathematics.* Birkhuser, 2015.
- [4] Bagley, R. L., Torvik, P. J. A theoretical basis for the application of fractional calculus to viscoelasticity. *Journal of Rheology*, 1983; 27(3):201-10.
- [5] Bevilacqua, L., Galeão, A.C.N.R., Costa, F. P. On the significance of higher order differential terms in diffusion processes. *J. Braz. Soc. Mech. Sci. Eng.*, Rio de Janeiro , v. 33, n. 2, p. 166-175, June 2011.
- [6] Bevilacqua, L., Galeão, A.C.N.R. Costa, F. P. A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion processes. *An. Acad. Bras. Cienc.* 2011; 83(4):1443-1464.
- [7] Bogomolny, A. Fundamental solutions method for elliptic boundary value problems, *SIAM J. Numer. Anal.* 22 (1985) 644-669.
- [8] Bouchaud, J. P., Georges, A. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications, *Physics Reports*, Volume 195, Issue 4, 1990.
- [9] Chantasiriwan, S., Johansson, B. T., Lenisc, D. The method of fundamental solutions for free surface Stefan problems. *Eng. Anal. Bound. Elem.* 33 (2009) 529-538.
- [10] Chen, C. S., Cho, H. A., Golberg, M. A. Some comments on the ill-conditioning of the method of fundamental solutions, *Eng. Anal. Bound. Elem.* 2006.

- [11] Cole, J. D. Perturbation method in applied mathematics. Blaisdell, Waltham, 1968.
- [12] Colton, D., Kress, R. Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory, Springer, Berlin, 1992, p. 121, 289 (new edition: 1998, p. 133, 304).
- [13] Fairweather, G., Karageorghis, A. The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems. *Adv. Comput. Math.*, 9 (1998), pp. 69-95.
- [14] Ghez, R. A Primer of Diffusion Problems. John Wiley Sons, 1988.
- [15] Golberg, M.A., Chen, C.S. The method of fundamental solutions for potential, Helmholtz and diffusion problems, [In:] *Boundary Integral Methods Numerical and Mathematical Aspects*, Golberg M.A. (Edit.), Boston, Computational Mechanics Publications, 1998, 103-176
- [16] Hansen, P. C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve, *SIAM Rev.* 34, 1992, 561-580.
- [17] Hon, Y. C., Li, M. A discrepancy principle for the source points location in using the MFS for solving the BHCP, *Int. J. Comput. Methods* 6(2009) 181-197.
- [18] Hui, L., Jijun L. Solution of backward heat problem by Morozov discrepancy principle and conditional stability. *Numer. Math. J. Chin. Univ. (Engl. Ser.)* 14 (2005) 180-192.
- [19] Jin, B., Rundell, W. A tutorial on inverse problems for anomalous diffusion processes. *Inverse Problems*, 2015.
- [20] John, E. Numerical solution of the equation of heat conduction for preceding times, *Ann. Mat. Pura Appl.(4)* 40 (1955) 129-142.
- [21] Johansson, B. T., Lesnic, D. A method of fundamental solutions for transient heat conduction, *Eng. Anal. Bound. Elem.* 32 (2008) 697-703.
- [22] Johansson, B. T., Lesnic, D., Reeve, T. A method of fundamental solutions for two-dimensional heat conduction, 2010b, *Int. J. Comput. Math.* (in press).
- [23] Johansson, B. T., Lesnic, D., Reeve, T. A comparative study on applying the method of fundamental solutions to the backward heat conduction problem, *Mathematical and Computer Modelling.* 54 (2011) 403-416.

- [24] Johansson, B. T., Lesnic, D. A method of fundamental solutions for transient heat conduction in layered materials, *Eng. Anal. Bound. Elem.* 33 (2009)1362-1367.
- [25] Juan, L. G., Rolci, C. *Iniciação à Física Matemática. Modelagem de Processos e Métodos Matemáticos.* IMPA - Coleção Matemática e Aplicações. Rio de Janeiro, 2016.
- [26] Klafter, J. Shlesinger, F. M. Zumofen, G. Beyond Brownian motion, *Phys. Today*, New York, v. 49, p. 33-39, 1996.
- [27] Karageorghis, A. Efficient Kansa-type MFS algorithm for elliptic problems. *Numerical Algorithms* 2010;54(2):261-78.
- [28] Karageorghis, A. Efficient MFS algorithms for inhomogeneous polyharmonic problems. *Journal of Scientific Computing* 2011;46(3):519-41.
- [29] Kraus, A. D., Aziz, A., Welty, J. *Extended Surface Heat Transfer.* Wiley, New York, 2001.
- [30] Kozlov, V. A., Maz'ya, V. G., Movchan, A. *Asymptotic Analysis of Fields in Multi-Structures.* University Oxford. Oxford University Press. Oxford, New York, 1999.
- [31] Kupradze, V., Aleksidze, M. A. The method of functional equations for the approximate solution of certain boundary value problems, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 4:4 (1964), 683-715
- [32] Mathon, R., Johnston, R. L. The approximate solution of elliptic boundary-value problems by fundamental solutions, *SIAM Journal on Numerical Analysis.* (1977) 638-650.
- [33] Mera, N. S. The method of fundamental solutions for the backward heat conduction problem. *Inverse Probl. Sci. Eng.* 13(2005) 65-78.
- [34] Metzler, R., Klafter, J. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 2004;37(31):R161.
- [35] Miranker, W. L. A well-posed problem for the backward heat equation. *Proc. Amer. Math. Soc.* 12 (1961) 243-254.
- [36] Podlubny, I. *Fractional Differential Equations*, vol. 198 of *Mathematics in Science and Engineering.* Academic Press, San Diego, USA, 1999.

- [37] Rocha de Faria, J. Wyse, A. P. P, Santos, A. J. B. ; Bevilacqua, L. ; Costa, F. P. Second Order Topological Derivative for the Inverse Problem in Diffusion with Retention. In: XXXVI Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering, 2015, Rio de Janeiro. v. 1.
- [38] Simas, J. G. Modelagem Computacional do Problema de Difusão com Retenção. Petrópolis, Rio de Janeiro. Laboratório Nacional de Computação Científica, 2014.
- [39] Tikhonov, A. N., Arsenin, V. Y. Solutions of Ill-posed Problems. John Wiley and Sons, New York, 1977.
- [40] Van Dyke, M. D. Perturbation method in fluid mechanics. Academic Press, New York, 1964.
- [41] L. Yan and F. Yang, Efficient Kansa-type MFS algorithm for time-fractional inverse diffusion problems, *Comput. Math. Appl.* 67 (2014), no. 8, 1507-1520.

Apêndice A: Núcleos de Dirac

Núcleos de Dirac são as funções $D_\mu : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\mu > 0$, que satisfazem as propriedades abaixo:

1.

$$\int_{\mathbb{R}} D_\mu(x) dx = 1, \quad \forall \mu > 0,$$

2.

$$\int_{\mathbb{R}} |D_\mu(x)| dx < \alpha, \quad \forall \mu > 0,$$

3.

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\{|x| \geq a\}} |D_\mu(x)| dx = 0, \quad \forall a > 0,$$

onde $\alpha > 0$ não depende de μ e as integrais devem ser entendidas como integrais impróprias de Reimann, i.e.,

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) dx = \lim_{\substack{N \rightarrow -\infty \\ M \rightarrow +\infty}} \int_N^M f(x) dx,$$

$$\int_{\{|x| \geq a\}} f(x) dx = \int_{-\infty}^{-a} f(x) dx + \int_a^{\infty} f(x) dx.$$

A característica fundamental dos núcleos de Dirac está estabelecida pela proposição que segue junto a sua prova.

Proposição: Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e limitada. Então, para cada $x \in \mathbb{R}$, tem-se:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}} D_\mu(x-y) f(y) dy = f(x).$$

Prova: Para cada $x \in \mathbb{R}$, consideremos

$$f_\mu(x) = \int_{\mathbb{R}} D_\mu(x-y) f(y) dy.$$

A integral acima converge, sendo f contínua e limitada, e para cada $\mu > 0$, define uma função na variável x .

A começar pelo item (1) das propriedades acima já mencionadas, temos

$$f_\mu(x) - f(x) = \int_{\mathbb{R}} [f(x-y) - f(x)] D_\mu(y) dy. \quad (1)$$

Por f ser limitada, existe $M > 0$ tal que $|f(y)| \leq M$ para todo $y \in \mathbb{R}$. Além disso, por f ser contínua em x , dado $\epsilon > 0$ existe um $\delta > 0$ tal que se $|y| < \delta$, então $|f(x-y) - f(x)| < \epsilon/2\alpha$. Portanto, resulta do item (2),

$$\begin{aligned} |f_\mu(x) - f(x)| &\leq \int_{\mathbb{R}} |f(x-y) - f(x)| |D_\mu(y)| dy \\ &\leq \frac{\epsilon}{2\alpha} \int_{-\delta}^{\delta} |D_\mu(y)| dy + 2M \int_{\{|y| \geq \delta\}} |D_\mu(y)| dy \\ &\leq \frac{\epsilon}{2} + 2M \int_{\{|y| \geq \delta\}} |D_\mu(y)| dy. \end{aligned}$$

Agora pelo item (3), fixando μ_0 tal que se $\mu < \mu_0$, então

$$\int_{\{|y| \geq \delta\}} |D_\mu(y)| dy < \frac{\epsilon}{4M}.$$

Logo, teremos

$$\mu - \mu_0 \Rightarrow |f_\mu(x) - f(x)| < \epsilon$$

e terminamos a prova da característica fundamental dos núcleos de Dirac.

Os núcleos de Dirac são determinados a partir de uma função geradora, na maioria das aplicações, tal como

Corolário: Seja $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função positiva e integrável tal que

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi(x) dx = 1.$$

Logo, as funções $D_\mu(x) = \mu^{-1}\varphi(\mu^{-1}x)$ são núcleos de Dirac.

Apêndice B: Modelo de Quarta Ordem para Difusão com Retenção

Neste apêndice vamos apresentar, com maiores detalhes, a derivação do modelo devido a Bevilacqua et. al. [5, 6] partindo-se do modelo discreto representado pelas equações (3.4) e (3.5) que reproduzimos aqui para maior comodidade.

$$p_n^t = (1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1}, \quad (2)$$

$$p_n^{t+1} = (1 - \beta)p_n^t + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^t + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^t. \quad (3)$$

A distribuição do conteúdo na célula genérica (n) da expressão (3) está sendo avaliada no instante t . Para que a mesma seja avaliada no instante $(t-1)$ é necessário fazer a distribuição em cada célula genérica já definida:

$$p_n^t = (1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1}, \quad (4)$$

$$p_{n-1}^t = (1 - \beta)p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-2}^{t-1}, \quad (5)$$

$$p_{n+1}^t = (1 - \beta)p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+2}^{t-1}, \quad (6)$$

Feito isto, basta substituírmos as identidades (4), (5) e (6) nos seus respectivos termos em (3).

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} &= (1 - \beta) \left[(1 - \beta)p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+1}^{t-1} \right] \\
&+ \frac{1}{2}\beta \left[(1 - \beta)p_{n-1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n-2}^{t-1} \right] \\
&+ \frac{1}{2}\beta \left[(1 - \beta)p_{n+1}^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_n^{t-1} + \frac{1}{2}\beta p_{n+2}^{t-1} \right].
\end{aligned}$$

Convenientemente, agrupando-se os termos obtemos:

$$p_n^{t+1} = (1 - \beta)^2 p_n^{t+1} + (1 - \beta)\beta [p_{n-1}^{t-1} + p_{n+1}^{t-1}] + \frac{1}{4}\beta^2 [p_{n-2}^{t-1} + 2p_n^{t-1} + p_{n+2}^{t-1}], \quad (7)$$

Subtraindo a equação (2) da Equação (7), temos

$$\begin{aligned}
p_n^{t+1} - p_n^t &= \frac{1}{4}\beta [(p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1}) + (p_n^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1})] \\
&+ \frac{1}{4}\beta(1 - \beta)(-p_{n-2}^{t-1} + p_{n-1}^{t-1} - p_n^{t-1} + p_{n+1}^{t-1} - p_{n+2}^{t-1}). \quad (8)
\end{aligned}$$

Observamos que, quando avaliamos a Equação (8) pelo lado esquerdo, obtemos a diferença da célula (n) em dois instantes consecutivos ($t + 1$) e (t), denotado por $\Delta_t p_n^t$, ou seja

$$\Delta_t p_n^t = p_n^{t+1} - p_n^t.$$

Por outro lado, quando avaliamos a Equação (8) pelo lado direito, obtemos diferenças de segunda ordem do conteúdo de três células consecutivas no instante ($t - 1$), denotadas por

$$\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} = p_{n-2}^{t-1} - 2p_{n-1}^{t-1} + p_n^{t-1}$$

e

$$\Delta_x^2 p_{n+1}^{t-1} = p_n^{t-1} - 2p_{n+1}^{t-1} + p_{n+2}^{t-1},$$

respectivamente.

Sendo assim, a equação (8) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\Delta_t p_n^t = \beta \left[\frac{1}{4}(\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} + \Delta_x^2 p_{n+1}^{t-1}) - \frac{1}{4}(1 - \beta)\Delta_x^4 p_n^t \right]. \quad (9)$$

Obtendo a diferença de segunda ordem em cada termo da expressão $(\Delta_x^2 p_{n-1}^{t-1} + \Delta_x^2 p_{n+1}^{t-1})$ no conteúdo de três células consecutivas, no instante $(t-1)$ e considerando os demais termos de ordem $O(\Delta x^3)$. Então, a equação (9) pode ser reescrita como:

$$\Delta_t p_n^t = \beta \left\{ \frac{1}{2} [\Delta_x^2 p_n^{t-1} + O(\Delta x^3)] - \frac{1}{4} (1 - \beta) \Delta_x^4 p_n^t \right\}. \quad (10)$$

A partir dos próximos passos, passamos do modelo discreto para o modelo contínuo quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$. Para isso, escrevemos a equação (10) da seguinte forma equivalente:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta t} \Delta t = \beta \left\{ (\Delta x)^2 \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta_x^2 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{O(\Delta x^3)}{(\Delta x)^2} \right] - (\Delta x)^4 \frac{1}{4} (1 - \beta) \frac{\Delta_x^4 p_n^t}{(\Delta x)^4} \right\}. \quad (11)$$

Os fatores de escala L_0 , L_1 , T_0 e m são definidos como:

$$\Delta x = \frac{L_0}{m} = \frac{L_1}{\sqrt{m}}$$

e

$$\Delta t = \frac{T_0}{m^2}.$$

A relação (h) pode ser reescrita quando introduzimos os coeficientes $k_2 = \frac{1}{2} \frac{L_0^2}{T_0}$ e $k_4 = \frac{1}{4} \frac{L_0^4}{T_0}$ como:

$$\frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta t} = \beta \left\{ k_2 \left[\frac{1}{2} \frac{\Delta_x^2 p_n^{t-1}}{(\Delta x)^2} + 2 \frac{O(\Delta x^3)}{(\Delta x)^2} \right] - (1 - \beta) k_4 \frac{\Delta_x^4 p_n^t}{(\Delta x)^4} \right\}. \quad (12)$$

Tomando $(p(x, t); x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}^+)$ como um elemento da classe de funções suficientemente regulares, tais que:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta_t p_n^t}{\Delta t} &= \frac{\partial p(x, t)}{\partial t}, \\ \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta_x^2 p_n^{t-\Delta t}}{\Delta x^2} &= \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}, \\ \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta_x^4 p_n^{t-\Delta t}}{\Delta x^4} &= \frac{\partial^4 p(x, t)}{\partial x^4}. \end{aligned}$$

Desta maneira, desenvolvendo o cálculo do limite da equação (6) quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x \rightarrow 0$, obtemos

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta K_2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta K_4 (1 - \beta) \frac{\partial^4 p}{\partial x^4}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0. \quad (13)$$

que representa a equação diferencial que governa o problema transiente de difusão com retenção temporal em um domínio unidimensional.

A partir da regra de distribuição esquematizada pela figura (3.1), verifica-se que:

- Se $\beta = 1$, temos um problema de difusão pura;
- Se $\beta = 0$, temos um problema estacionário, definido como retenção pura;
- Se $0 < \beta < 1$, temos o problema de difusão com retenção, caracterizado pela presença do termo de quarta ordem na equação (3.7).

Apêndice C: Função de Heaviside

O cálculo simbólico de Heaviside foi introduzido em 1893 pelo engenheiro Heaviside interessado nos estudos das equações diferenciais ordinárias que modelam fenômenos elétricos transientes. Um pouco mais adiante, em 1927, com a publicação do artigo *Proceedings of the Royal Society of London*, escrito pelo físico teórico inglês Paul Adrian M. Dirac, incorporava-se um novo tipo de “função” com a qual conseguia-se deduzir fórmulas extraordinárias, porém não faziam sentido do ponto de vista da Matemática mas, sob os olhos da Física conduziam à resultados corretos. Uma das muitas técnicas usadas por Heaviside em seu método era o “impulso unitário”, que nada mais era do que a função δ de Dirac. Parte do cálculo simbólico de Heaviside foi justificado matematicamente apenas após sua morte, em 1926, através da utilização da transformada de Laplace por Norbert Wiener e Carson. Mas foi em 1944 com a Teoria das Distribuições que Schwartz generaliza o conceito clássico do Cálculo Diferencial e vários problemas envolvendo Equações Diferenciais Parciais puderam ser resolvidas, entre elas os cálculos formais de Heaviside e Dirac puderam ser rigorosamente justificados na literatura.

Na resolução de diversos problemas físicos leva-se em consideração a atuação de forças externas, supondo-as conhecidas e agindo em cada instante t . Entretanto, existem situações em que estas forças atuam durante um curto período de tempo, mas de forma intensa e considerável agindo como se fossem “pulsos”. Tais forças podem ser modeladas, de modo aproximado, pela função δ de Dirac.

Partiremos de um exemplo envolvendo o conceito de pulso de duração infinitamente curta com a finalidade de introduzirmos o conceito da função de descontinuidade de Heaviside. Consideremos uma partícula P de massa $m = 1$ (em unidade qualquer) que encontra-se em repouso ($t = 0$) na origem, em um sistema inercial referencial conhecido. Apliquemos a essa partícula P uma força externa $\mathbf{F}_\varepsilon(t)$, constante e de módulo 1, durante o intervalo de tempo $[t_0, t_0 + \varepsilon)$, onde $t_0, \varepsilon > 0$. Em termos matemáticos, consideremos

$$\mathbf{F}_\varepsilon(t) = \begin{cases} (1, 0, 0) & \text{se } t_0 \leq t < t_0 + \varepsilon, \\ (0, 0, 0) & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (14)$$

Concluimos que, a partir da segunda lei de Newton, nessas condições a partícula se desloca sobre o eixo dos x com velocidade escalar igual a

$$v_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t \leq t_0, \\ t - t_0 & \text{se } t_0 < t \leq t_0 + \varepsilon, \\ \varepsilon & \text{se } t > t_0 + \varepsilon. \end{cases} \quad (15)$$

Observamos nitidamente da expressão acima que para $t \in \mathbb{R}$ fixado, $v_\varepsilon(t) \rightarrow 0$ quando $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

Em outra situação, imaginemos a força $\mathbf{F}_\varepsilon(t)$ agindo sobre P durante o intervalo de tempo $[t_0, t_0 + \varepsilon)$, mas com intensidade $1/\varepsilon$. É perceptível ver que, neste caso,

$$v_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t \leq t_0, \\ (t - t_0)/\varepsilon & \text{se } t_0 < t \leq t_0 + \varepsilon, \\ 1 & \text{se } t > t_0 + \varepsilon. \end{cases} \quad (16)$$

e, para $t \in \mathbb{R}$ fixado, temos

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} v_\varepsilon(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t \leq t_0, \\ 1 & \text{se } t > t_0. \end{cases} \quad (17)$$

Estas duas situações são bastante diferentes entre si para $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeno. Temos, como aproximação, a velocidade nula na primeira situação e, na segunda, a velocidade se comporta com um salto de descontinuidade em $t = t_0$. Assim, caso desconsideremos a atuação da força para $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeno na primeira situação, não devemos fazê-lo na segunda.

Nosso interesse maior está na segunda situação citada acima. Nas condições consideradas, descartamos o caráter vetorial do problema e escrevemos a componente x da força \mathbf{F}_ε na forma $F_\varepsilon(t) = D_\varepsilon(t - t_0)$, sendo

$$D_\varepsilon(\xi) = \frac{1}{\varepsilon}(H(\xi) - H(\xi - \varepsilon)) \quad (18)$$

e onde $\xi \mapsto H(\xi)$ denota a função de Heaviside

$$H(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \xi < 0, \\ 1 & \text{se } \xi \geq 0. \end{cases} \quad (19)$$

Como podemos observar, a função $D_\varepsilon(t - t_0)$ satisfaz as seguintes propriedades para todo $t_0 \in \mathbb{R}$:

i.

$$D_\varepsilon(t - t_0) \geq 0, \quad (20)$$

ii.

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_\varepsilon(t - t_0) dt = 1, \quad \forall \varepsilon > 0, \quad (21)$$

iii.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b D_\varepsilon(t - t_0) dt = 1, \quad \forall a < t_0 < b. \quad (22)$$

Além disso, é fácil perceber que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} D_\varepsilon(t - t_0) = \begin{cases} +\infty & \text{se } t = t_0, \\ 0 & \text{se } t \neq t_0. \end{cases} \quad (23)$$

Optamos usar como artifício para aplicação do *MFS* em um dos nossos exemplos numéricos a função de Heaviside a fim de obtermos resultados viáveis para analisarmos o comportamento da solução aproximada pelo método e a solução analítica do problema que propusemos. Em particular, a introdução desta função tem por objetivo enfatizar que a solução fundamental do problema (6.3) é zero para $t \leq \tau$ em (6.4).