

Uso de termo fonte para avaliar qualidade de aproximação numérica para a solução de equação de difusão-advecção em problemas biológicos

Juliana M.R. Souza,¹ João F.C.A. Meyer²
DMA, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

Resumo. Neste trabalho introduz-se um termo fonte no modelo para Adesão Celular, do grupo da Universidade de Heidelberg na Alemanha (Matthaeus e Middleton, 2014), a fim de comparar a qualidade de soluções numéricas obtidas por meio de Diferenças Finitas e Elementos Finitos. Posto que a proposta inicial, confirmada, era de que o Método de Elementos Finitos devolveria resultados melhores do que o Método de Diferenças Finitas naquele caso específico, o processo para a obtenção do esquema de Elementos Finitos combinado com o Método de Galerkin e Crank-Nicolson também é apresentado. Por fim, é possível caracterizar para quais casos, ou seja quais campos de velocidades, o método de Elementos Finitos é o mais indicado.

Palavras-chave: *Qualidade de solução numérica; equações diferenciais parciais; elementos finitos.*

1. Introdução

Este artigo apresenta os resultados do trabalho desenvolvido durante contato com o grupo BIOMS da Universidade de Heidelberg, na Alemanha. Quando da interação, o grupo alemão precisava avaliar a qualidade da aproximação numérica obtida para a solução de um Problema de Valor de Contorno que tinha como base a equação diferencial parcial difusiva acrescida de termo de transporte.

¹jumarta@gmail.com

²joni@ime.unicamp.br

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D\nabla^2 p - \nabla(\vec{v}p), \quad (1.1)$$

$$p(0, y; t) = p(1, y; t), \quad (1.2)$$

$$p(x, 0; t) = p(x, 1; t) \text{ e} \quad (1.3)$$

$$p(x, y, 0) = \frac{1}{\bar{\sigma}\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\left[\frac{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2}{\sigma^2}\right]\right). \quad (1.4)$$

O problema (1.1–1.4) era parte de um modelo maior, íntegro-diferencial, relativo ao processo de Adesão Celular. O grupo alemão já havia chegado a uma aproximação numérica para a solução do problema íntegro-diferencial via Diferenças Finitas, para tratar a componente espacial, e aplicando métodos pré-programados que constam de pacotes do MATLAB para lidar com a componente temporal.

Ainda que os resultados obtidos parecessem adequados, não era possível mensurar sua acurácia. Além disso, o tempo requerido para a obtenção do resultado numérico, referente ao modelo completo, ou seja, a equação acima acrescida de outros termos mais, era elevado.

Com encontro dos grupos aventou-se a hipótese de obtenção da solução numérica via Elementos Finitos, no lugar de Diferenças Finitas, e usando códigos próprios para a discretização da componente temporal, também. Além disso, para que fosse possível comparar qual era o melhor método para tratar do problema, surgiu o interesse pela aplicação de uma técnica capaz de medir, na prática, a ordem do erro, já conhecida de acordo com a teoria, mas, mais, poder observar a evolução temporal do erro espacialmente distribuído.

A apresentação da parte de interesse do modelo de Adesão Celular, a abordagem, os resultados alcançados, as conclusões e os benefícios, no tocante à escolha de método numérico e potencial usado no modelo, advindos do trabalho desenvolvido junto ao grupo alemão são o tema deste trabalho.

2. Objetivos

Os dois principais objetivos deste trabalho se relacionam com a compreensão acerca da qualidade dos resultados numéricos obtidos para aproximar a solução de parte do modelo íntegro-diferencial desenvolvido por Alistair Middleton, (1.1–1.4).

Em (1.1), D corresponde ao coeficiente de difusão e o termo de transporte \vec{v} é dado por

$$\vec{v}(x, y) = (-V_0V(|x - y|), -V_0V(|y - x|))^T,$$

com V_0 um escalar. No modelo alemão, V_0 é entendido como o valor absoluto da força exercida entre células.

Posto que o grupo alemão já tinha em mãos uma solução de Diferenças Finitas para o problema completo, a proposta foi implementar o Método de Elementos Finitos para obter, por outra via, a mesma solução e disponibilizar um meio de avaliar a qualidade das soluções numéricas obtidas para, assim, poder compará-las.

E há um terceiro objetivo que se torna possível a partir da implementação do código para comparar a qualidade dos resultados numéricos: avaliar como o campo de velocidades relativo ao problema altera a qualidade das soluções e, daí, selecionar, existindo uma gama de possibilidades, o melhor método numérico para cada tipo de campo velocidades.

3. Metodologia

Há dois eixos principais de trabalho que confluem: a obtenção, a começar pela Formulação Variacional, da aproximação numérica da solução de (1.1–1.4) através do Método de Elementos Finitos combinado com o Método de Galerkin e Crank-Nicolson. E, para que posteriormente fosse possível estudar, analisar e compreender o comportamento da solução numérica, há o acréscimo de um termo fonte, $g(x, y; t)$, a (1.1), resultando em (3.5). Tal termo fonte pode ser tomado como identicamente nulo sempre que se desejar reaver o problema original:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D\nabla^2 p - \nabla(\vec{v}p) + g. \quad (3.5)$$

Ou seja, o segundo ramo trata da inserção, no problema original, de um termo que dele não constava a priori, que permitirá que a qualidade das soluções numéricas sejam comparadas. Tanto no tocante ao refinamento da malha espacial, quanto no tocante a resultados advindos de técnicas distintas ou quaisquer outras características.

Dentre as outras características possíveis de serem comparadas, o foco aqui é em apenas uma mais: a relação entre o campo de velocidades e o erro advindo da simulação a depender do método numérico. A opção por esse viés

ocorreu durante o desenvolvimento do trabalho quando foi observado que a qualidade da solução aumentava a depender não só do método numérico mas também do campo de velocidades usado no modelo.

3.1. Método de Elementos Finitos

Entendia-se que a aplicação do Método de Elementos Finitos obteria resultados mais acurados que a solução por Diferenças Finitas, esta foi, então, a primeira tarefa. Obter a solução numérica por este método. Parte-se a ela (Johnson, 1990).

3.1.1. Formulação Variacional

Seja $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, o domínio espacial. Toma-se (3.5), multiplica-se por $\varphi \in \vartheta = H_0^1(\Omega)$ e integra-se sobre Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial p}{\partial t} \varphi = D \int_{\Omega} \nabla^2 p \varphi - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p \varphi - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p) \varphi + \int_{\Omega} g \varphi.$$

De acordo com o Teorema de Green

$$\int_{\Omega} \nabla^2 p \varphi = \int_{\Gamma} \frac{\partial p}{\partial \eta} \varphi - \int_{\Omega} \nabla p \nabla \varphi,$$

então,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial p}{\partial t} \varphi = D \int_{\Gamma} \frac{\partial p}{\partial \eta} \varphi - D \int_{\Omega} \nabla p \nabla \varphi - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p \varphi - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p) \varphi + \int_{\Omega} g \varphi.$$

Uma vez que φ se anula na fronteira:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial p}{\partial t} \varphi = -D \int_{\Omega} \nabla p \nabla \varphi - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p \varphi - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p) \varphi + \int_{\Omega} g \varphi.$$

Então, a formulação fraca do problema original é obter $p \in \vartheta$ tal que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial p}{\partial t} \varphi = -D \int_{\Omega} \nabla p \nabla \varphi - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p \varphi - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p) \varphi + \int_{\Omega} g \varphi, \forall \varphi \in \vartheta.$$

3.1.2. Discretização espacial

Seja ϑ_h um subespaço de dimensão finita de $\vartheta = H_0^1$, o problema variacional de dimensão finita, o Método de Galerkin, é:

Determine $p_h \in \vartheta_h$ tal que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial p_h}{\partial t} \varphi &= -D \int_{\Omega} \nabla p_h \nabla \varphi - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p_h \varphi - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p_h) \varphi \\ &+ \int_{\Omega} g \varphi, \forall \varphi \in \vartheta_h. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Agora, se $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ é uma base para ϑ_h , (3.6) pode ser reformulada como

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial p_h}{\partial t} \phi_i &= -D \int_{\Omega} \nabla p_h \nabla \phi_i - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) p_h \phi_i - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla p_h) \phi_i \\ &+ \int_{\Omega} g \phi_i, i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

E, como $p_h \in \vartheta_h$, p_h pode ser escrita unicamente como combinação dos elementos da base; $p_h(x, y, t) = \sum_{j=1}^N P_j(t) \phi_j(x, y)$, daí:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \frac{dP_j}{dt} \int_{\Omega} \phi_j \phi_i &= \sum_{j=1}^N P_j(t) \left\{ -D \int_{\Omega} \nabla \phi_j \nabla \phi_i - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) \phi_j \phi_i \right. \\ &\left. - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla \phi_j) \phi_i \right\} + \int_{\Omega} g \phi_i, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.1.3. A triangulação, a base e a malha

Uma vez que Γ é poligonal, uma triangulação de Ω é obtida subdividindo Ω em um conjunto $T_h = K_1, \dots, K_m$ de triângulos não sobrepostos K_i (Johnson, 1990) tal que o vértice de nenhum triângulo esteja sobre a aresta de outro triângulo. Sejam n_i , $i = 1, \dots, N$, os vértices ou nós.

Neste problema as condições de fronteira espaciais periódicas, também por estarem altamente relacionadas com características espaciais de \vec{v} , requerem atenção especial que se reflete no tratamento da malha.

Ressaltam-se alguns aspectos com que se teve maior cuidado.

Primeiro, uma vez que o número de intervalos em cada eixo, $nint_x$ e $nint_y$, sejam atribuídos, é possível determinar dx e dy . Aqui, numa primeira abordagem para aproveitar a simetria do problema, $dx = dy$ e, portanto, $nint_x = nint_y = nint$ mas esta condição não é necessária.

Como $p(0, y) = p(1, y)$ e $p(x, 0) = p(x, 1)$ são requeridas e para superar qualquer possível dificuldade devida ao comportamento de \vec{v} , os nós são colocados de tal modo que não recaiam sobre as bordas. Matematicamente, dado dx , $x_i = dx/2 + (i-1)dx$, $i = 1, \dots, nint$ e dado dy , $y_i = dy/2 + (i-1)dy$, $i = 1, \dots, nint$ são os pontos da malha com $M = nint^2$.

E, então, trabalhou-se com duas malhas espaciais.

A primeira malha, enumerada sem considerar as restrições devidas às fronteiras. Toda vez que a localização espacial de um nó foi necessária esta era a malha a que se recorreu. A segunda malha força as condições de contorno.

3.1.4. O espaço de dimensão finita e sua base

Seja K um triângulo e

$$P_1(K) = \{\varphi : \varphi \text{ é um polinômio de grau } \leq 1 \text{ sobre } K\}.$$

Define-se ϑ_h :

$$\vartheta_h = \{\varphi \in C^0(\bar{\Omega}) : v|_K \in P_1(K) \forall K \in T_h, \varphi = 0 \text{ sobre } \Gamma\}$$

Pode ser mostrado que uma função $\varphi \in \vartheta_h$ é unicamente determinada por seus valores sobre os nós de T_h (Johnson, 1990).

Os elementos da base para ϑ_h são definidos tais que $\phi_j(n_i) = \delta_{ij}$ com $i, j = 1, \dots, M$, excluindo os pontos da fronteira, já que $\varphi = 0$ sobre Γ ; assim o suporte de ϕ_j são os triângulos que compartilham o nó n_j . E as integrais sobre os elementos da base e/ou seus gradientes serão nulas a menos que os nós n_i e n_j sejam vértices do mesmo triângulo.

3.1.5. Montando do sistema

O sistema (3.7) pode ser reescrito como:

$$B \frac{dP}{dt} = AP + CP + G. \quad (3.8)$$

Em (3.8), A , B e C são matrizes $M \times M$. E dP/dt , P e G são vetores $M \times 1$. A e C são distintas pois neste caso \vec{v} depende das coordenadas espaciais.

Os elementos de A , B , C e g são dados por:

$$a_{ij} = -D \int_{\Omega} \nabla \phi_j \nabla \phi_i,$$

$$b_{ij} = \int_{\Omega} \phi_j \phi_i,$$

$$c_{ij} = - \int_{\Omega} (\nabla \vec{v}) \phi_j \phi_i - \int_{\Omega} \vec{v} \cdot (\nabla \phi_j) \phi_i \text{ e}$$

$$g_i = \int_{\Omega} g \phi_i.$$

Maiores detalhes sobre a implementação do método podem ser encontrados em (Johnson, 1990; Pulino, 2012). Por ora, ressalta-se apenas que os termos de C são mais delicados de se trabalhar devido às componentes espaciais de \vec{v} .

3.1.6. A discretização temporal

Foram implementadas as três abordagens mais amplamente utilizadas para a discretização temporal, a Explícita, a Implícita e Crank-Nicolson (LeVeque, 2007).

As duas primeiras técnicas são $O(\Delta t)$ e, enquanto a primeira é computacionalmente mais barata, a segunda é mais estável. O método de Crank-Nicolson é $O(\Delta t^2)$, mais estável que os outros dois mas, também, mais dispendioso computacionalmente.

Após a realização de algumas execuções, observou-se que o tempo de execução não variou sensivelmente a depender da técnica empregada para tratar da derivada temporal, então o método de Crank-Nicolson foi tomado como padrão e foi aplicado em todos os casos apresentados neste trabalho. Além disso, o método de Elementos Finitos com base polinomial de primeiro grau é $O(\Delta x^2)$, logo usar um método também de segunda ordem na componente temporal é mais adequado.

3.1.7. Crank-Nicolson

O método de Crank-Nicolson pode ser expresso esquematicamente por

$$\frac{d}{dt}P^{n+1/2} \approx \frac{P^{n+1} - P^n}{\Delta t}. \quad (3.9)$$

onde,

$$P^{n+1/2} \approx \frac{P^{n+1} + P^n}{2}.$$

Daí,

$$B \frac{P^{n+1} - P^n}{\Delta t} = A \frac{P^{n+1} + P^n}{2} + C \frac{P^{n+1} + P^n}{2} + G^{n+1/2} \Rightarrow (2B - \Delta t A - \Delta t C)P^{n+1} = (\Delta t A + 2B + \Delta t C)P^n + 2\Delta t G^{n+1/2}. \quad (3.10)$$

3.2 Os potenciais ou velocidades

Antes de mais nada é preciso ter em mente que, a depender da perspectiva, \vec{v} pode ser entendida como uma velocidade, ou transporte, como é comum em problemas de Ecologia, ou como um campo proveniente de um potencial elétrico, como é o caso no modelo para a Adesão Celular. Quando do início do

trabalho, o campo usado pelos pesquisadores da Universidade de Heidelberg era dado por:

$$V_1'(x, y) = \begin{cases} -\text{signal}(x - y)V_0 \frac{2a}{\epsilon} \left(e^{\frac{-a(|r| - \epsilon r_0)}{\epsilon}} - e^{2\frac{-a(|x-y| - \epsilon r_0)}{\epsilon}} \right) \\ \text{se } |x - y| < \sigma\epsilon, \text{ ou} \\ 0 \quad \text{c.c.} \end{cases} \quad (3.11)$$

Ocorre que a expressão escolhida para o potencial, cuja derivada origina o campo (ou velocidade), influencia diretamente a qualidade da solução numérica e a descontinuidade de (3.11), como foi informado aos estudiosos da Adesão Celular, poderia estar afetando negativamente a qualidade dos resultados numéricos. Diante dessa possibilidade, questionou-se o grupo sobre uma outra expressão que modelasse satisfatoriamente o potencial do problema em questão, ao que deram como a alternativa a expressão que origina o campo a seguir:

$$V_2'(x, y) = \begin{cases} -V_0(x - y)4 \frac{a}{\epsilon^2} \left(e^{a\left(1 - \frac{(x-y)^2}{\epsilon^2}\right)} - e^{2a\left(1 - \frac{(x-y)^2}{\epsilon^2}\right)} \right) \\ \text{se } |x - y| < \sigma\epsilon, \text{ ou} \\ 0 \quad \text{c.c.} \end{cases} \quad (3.12)$$

Estão claros agora os dois aspectos cujos impactos sobre a solução numérica se deseja investigar, o método aplicado à componente espacial e a escolha do potencial. Foi para este fim que se aproveitou uma ideia bastante simples e eficaz de estimar a qualidade das soluções numéricas, o teor da ideia é apresentado a seguir.

3.3 O papel função g

Já foi dito que se $g = 0$ o problema original é recuperado e sua solução numérica pode ser obtida. Assim a inserção de g tem por objetivo permitir testar o programa. No seguinte sentido: seja \bar{p} uma função escolhida para ser a solução do problema, então g pode ser montada de tal modo que \bar{p} deveria ser a solução numérica obtida. Tal g deveria ser:

$$g = -D\nabla^2\bar{p} + \nabla(\vec{v}\bar{p}) + \frac{\partial\bar{p}}{\partial t}.$$

Escolhendo bem \bar{p} , calcular suas derivadas e montar g não é um problema e, então, será possível comparar a \bar{P} numericamente obtida e a \bar{p} conhecida.

No presente trabalho manteve-se $\bar{p} = \exp^{-tD}p(x, y, 0)$, um bom modo de englobar a condição inicial de maneira simples e aproveitar a semelhança desta expressão com a solução do problema difusivo em domínio infinito. Sem mencionar a facilidade com as derivadas que serão requeridas para o cálculo do erro.

Lembrando mais uma vez que o mesmo código implementado com g pode, e deve, ser usado quando o objetivo for estimar P desconhecida, para tanto basta tomar $g := 0$.

3.3.1 Visualização do erro

Para comparar visualmente a \bar{P} numericamente obtida e a \bar{p} conhecida, trabalhou-se com a observação do gráfico de $\bar{P} - \bar{p}$. E computava-se $|\bar{P} - \bar{p}| / |\bar{p}|$ em cada passo temporal para analisar a progressão do erro no tempo e comparar as características, do erro, peculiares a cada método ou potencial.

Apenas mais um comentário antes de partir para os resultados: a fim de evitar o impacto de erros de integração sobrepostos, devido a aplicação do método de Elementos Finitos a um campo que varia espacial e temporalmente, códigos especiais para a integração numérica sobre triângulos com baixíssimo erro, foram usados (Burkardt, 2014).

4. Resultados

A função g foi introduzida nos códigos já prontos dos programas de Diferenças Finitas e nos novos programas de Elementos Finitos. Assim foi possível avaliar a qualidade de ambos os métodos e foi mais simples encontrar eventuais erros de implementação dos programas, posto que, da teoria, a ordem dos erros é conhecida e, como já foi dito, corresponde a $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$.

Seria mais do que conveniente manter este uso da g quando da obtenção da solução do problema com a parte integral. Ainda que o tempo de processamento, quando da avaliação do erro, devido aos cálculos necessários, aumente consideravelmente, o aumento de confiança nos resultados numéricos obtidos recompensa.

A seguir comparam-se o desempenho do Método de Diferenças Finitas com o de Elementos Finitos quanto a dois aspectos principais: refinamento da malha e potencial utilizado.

4.1 Diferenças Finitas vs. Elementos Finitos perante diferentes campos

Para comparar os desempenhos das duas técnicas foram selecionados alguns potenciais que apresentassem características distintas e para diferentes refinamentos de malha, acompanhou-se a progressão de $\|\bar{P} - \bar{p}\|/\|\bar{p}\|$ ao longo dos passos temporais.

A condição inicial conta como o primeiro passo temporal de 200 para todos os casos apresentados e os refinamentos da malha espacial são explicitados nos gráficos.

Além disso,

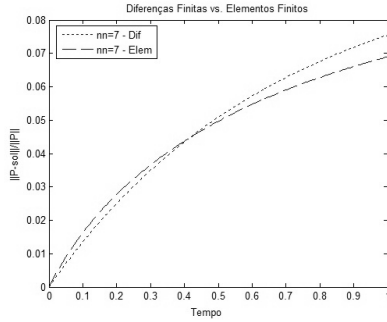
$$\bar{p}(x, y, t) = \frac{1}{\bar{\sigma}\sqrt{2\pi}} e^{-tD} e^{-\left(\frac{x-0.5}{\bar{\sigma}}\right)^2} e^{-\left(\frac{y-0.5}{\bar{\sigma}}\right)^2}, \text{ com } D = 1 \text{ e } \bar{\sigma} = 0.2.$$

Abaixo os campos elétricos são apresentados seguidos dos gráficos com o desempenho de cada método e os comentários pertinentes a cada caso específico.

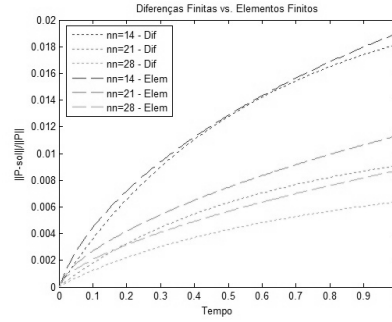
Inicialmente toma-se um campo V' com $\nabla V' = 0$:

$$V' = (y, x)^T. \quad (4.13)$$

Pode-se ver os resultados nas figuras 1(a) e 1(b). Na primeira, uma malha bastante gorsseira leva à opção por Elementos Finitos se o comportamento no tempo final de execução é mais importante do que os detalhes do que acontece com a solução no tempo inicial.



(a) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas com $\nabla V' = 0$ e malha grosseira.



(b) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas com $\nabla V' = 0$ e refinando a malha.

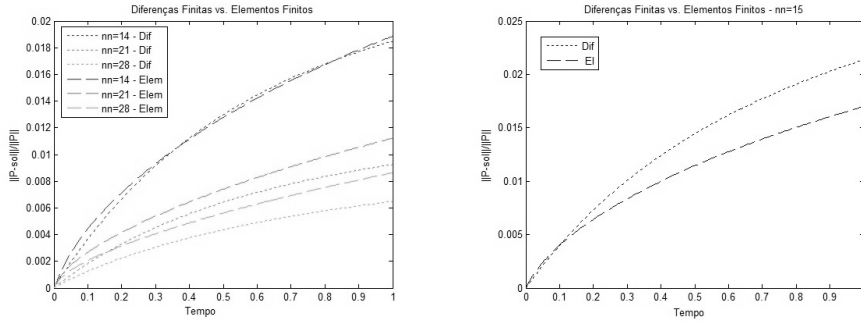
Figura 1: Comparação da progressão do erro relativo para dois tipos de malha.

Com o refinamento da malha, observando que as escalas das figuras 1(a) e 1(b) são diferentes, o método de Diferenças Finitas apresenta um resultado melhor.

Parte-se, então, para análise de resultados com potenciais cujos gradientes dos campos são não-nulos. O gráfico da figura 3(a) foi obtido dos resultados numéricos em um cenário com velocidade não-nula em apenas uma das direções:

$$V' = (e^{-x}, 0)^T; \nabla V' \neq 0. \quad (4.14)$$

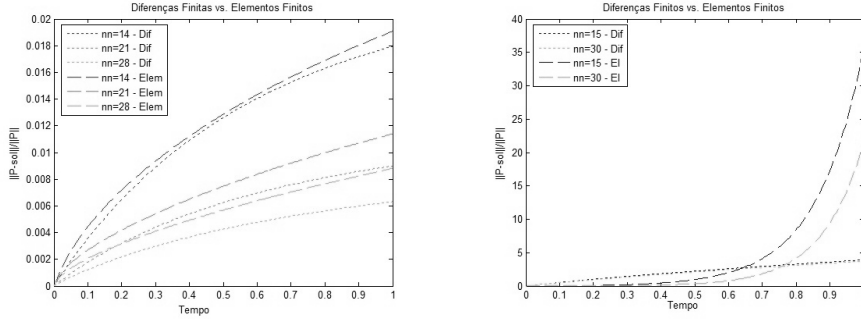
Já a figura 2(a) traz um gráfico relativo à simulação em que ambas as direções com velocidades não nulas:



(a) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas com $\nabla V' \neq 0$ e componentes de V' não nulas em ambas as direções e refinando a malha.

(b) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas e potencial descontínuo.

Figura 2: Comparações da progressão do erro relativo para dois tipos de campo.



(a) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas com $V' \neq 0$ em uma direção, $\nabla V' \neq 0$ e refinando a malha.

(b) Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas e campo descontínuo, V_1' .

Figura 3: Comparações da progressão do erro relativo para campos distintos.

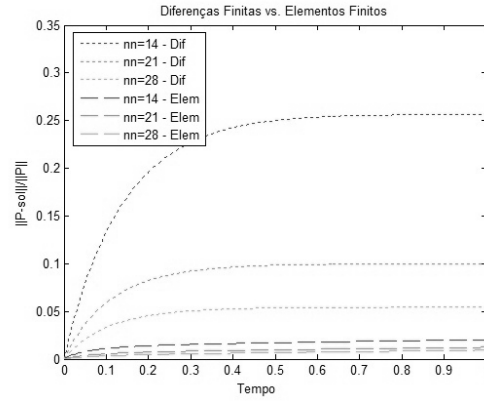


Figura 4: Comparação da progressão do erro relativo do método de Elementos Finitos com o do método de Diferenças finitas - campo recomendado.

$$V = (xy, xy)^T; \nabla V \neq 0. \quad (4.15)$$

Como se pode ver, salvo pequenas modificações quantitativas, os resultados que aparecem nas figuras 3(a) e 2(a) foram similares ao do primeiro caso. O resultados com $n_{int} = 7$ são omitidos por apresentarem erro alto, de mesma

ordem que no caso anterior.

Foi, então, introduzida uma velocidade descontínua:

$$V' = (x \text{ se } x \leq 0.5, x^2 \text{ c.c. ; } 0)^T; \nabla V' \neq 0. \quad (4.16)$$

E a superioridade do Método de Elementos Finitos aparece, como se vê na figura 2(b) em que para $t \in [0, 0.15]$ ambos os métodos apresentam resultados similares, com discreta superioridade do Método de Diferenças Finitas e, para $t > 0.15$ o erro relativo proveniente da solução de Elementos Finitos torna-se significativamente menor do que o proveniente da solução de Diferenças Finitas pela primeira vez.

Por fim, é claro, analisou-se os resultados relativos os potenciais de interesse, cujos campos são (3.11) e (3.12).

$$V' = V'_1; \nabla V' \neq 0.$$

$$V' = V'_2; \nabla V' \neq 0.$$

Os resultados expressos pelos gráficos das figuras 3(b) e 4 coroam o fim do trabalho. E permitem que se passe às conclusões.

5. Conclusão

Como se pôde acompanhar durante a exposição dos resultados, o método de Diferenças Finitas apresenta os melhores resultados quando velocidades de “bom comportamento” são empregadas. Além disso, por não requerer integrais, é de menor custo computacional. Assim, sem sombra de dúvidas, é o mais recomendado para casos simples.

Por outro lado, quando o potencial, por necessidade de realismo, como é o caso do modelo alemão para a Adesão Celular, origina um campo elétrico com baixa regularidade, o método de Elementos Finitos devolve soluções muito mais acuradas, *cf.* figuras 3(b) e 4.

Na figura 3(b), observa-se também que o erro de Método de Elementos Finitos responde positivamente ao refinamento da malha, enquanto que o erro de Diferenças Finitas não o faz.

Ainda sobre o campo (3.11), foi recomendado ao grupo alemão, quando da obtenção dos resultados, que se possível deixassem de utilizá-lo, uma vez

que o potencial que leva a (3.12) também modela fidedignamente o cenário e, com o último, o comportamento das soluções numéricas se mostra muito mais estável.

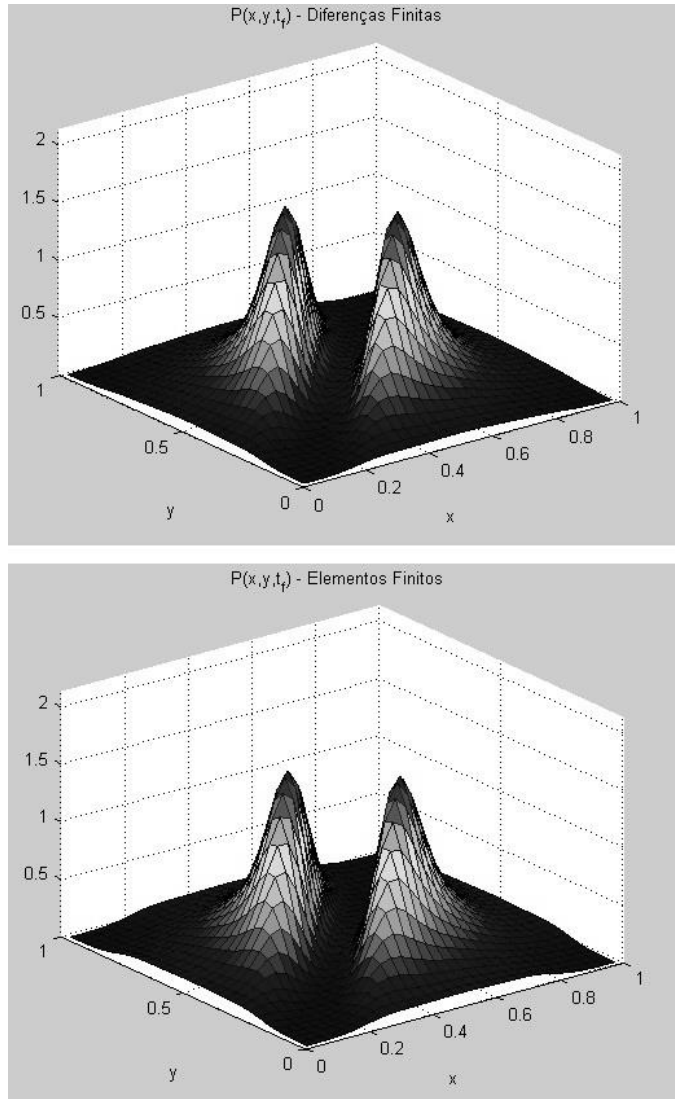


Figura 5: Aparência das soluções no tempo final usando o potencial recomendado. Acima, a solução obtida via Diferenças Finitas e, abaixo, via Elementos Finitos.

Para que se possa visualizar o problema que foi trabalhado observe a figura 5 em que a solução numérica no tempo final usando uma malha espacial com $n_{int}=30$ e o potencial recomendado pode ser vista. Acima a solução foi obtida pelo método de Diferenças Finitas e abaixo pelo Método de Elementos Finitos cuja qualidade, como atesta a figura 4, é superior.

Assim, considera-se que o trabalho em conjunto foi um sucesso e ficam abertas as portas para que a cooperação continue com a re-inserção da parte integral do problema.

Agradecimentos

É imprescindível que se agradeça ao grupo alemão (Matthaeus e Middleton, 2014) pela acolhida e ao CNPq pelo financiamento através da bolsa de Doutorado Sanduíche pelo programa Ciência Sem Fronteiras.

Referências

- Burkardt, J. (2014). Códigos de Programas. Disponível em: http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f_src/lyness_rule/lyness_rule.html. Acesso em Maio, 2014.
- Johnson, C. (1990). *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Cambridge University Press, Cambridge.
- LeVeque, R. J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. SIAM, Estados Unidos.
- Matthaeus, F. e Middleton, A. (2014). CompBioSys.
- Pulino, P. (2012). Codigos de Programas. Disponível em: <http://www.ime.unicamp.br/~pulino/MT623/>. Acesso em Janeiro, 2014.

