



UMA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS 3D UTILIZANDO MALHAS OCTREE

André Guimarães Valente

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil.

Orientadores: Webe João Mansur
Leandro Di Bartolo

Rio de Janeiro
Março de 2018

UMA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS 3D UTILIZANDO MALHAS
OCTREE

André Guimarães Valente

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Examinada por:

Prof. Webe João Mansur, Ph.D.

Prof. Leandro Di Bartolo, D.Sc.

Prof. Franciane Conceição Peters, D.Sc.

Prof. Felipe dos Santos Loureiro, D.Sc.

Prof. Cosme Ferreira da Ponte Neto, D.Sc.

Prof. Rodrigo Pereira Barretto da Costa-Félix, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2018

Valente, André Guimarães

Uma Formulação de Volumes Finitos 3D utilizando Malhas OcTree/André Guimarães Valente. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2018.

XIII, 90 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Webe João Mansur

Leandro Di Bartolo

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Civil, 2018.

Referências Bibliográficas: p. 81 – 85.

1. Modelagem. 2. Sísmica. 3. OcTree. I. Mansur, Webe João *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Civil. III. Título.

*à memória de minha
mãe querida.*

***Agradeço** a meu Salvador
pela imensa graça e eterno
amor.*

***Agradeço** o companheirismo
e a paciência de meus mestres.*

***Agradeço** a todos os famili-
ares, amigos e colegas que de
várias formas gentilmente me
ajudaram.*

Obrigado

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

UMA FORMULAÇÃO DE VOLUMES FINITOS 3D UTILIZANDO MALHAS OCTREE

André Guimarães Valente

Março/2018

Orientadores: Webe João Mansur
Leandro Di Bartolo

Programa: Engenharia Civil

Com o objetivo de melhor representar domínios complexos, neste trabalho é desenvolvido um esquema numérico com malhas OcTree baseado no Método dos Volumes Finitos. Este tipo de malha tem como principal característica ser formada apenas por cubos tal que a razão entre as arestas de dois volumes é sempre uma potência de dois. A possibilidade de ter pequenos volumes próximos a interfaces irregulares permite uma mais detalhada discretização. Além disto, regiões onde a propriedade do meio é constante podem ser representadas por volumes maiores, economizando-se assim memória e tempo. São construídos operadores diferenciais discretos gradiente e divergente, através da montagem de matrizes que conectam os volumes a suas faces e duas novas aproximações para o operador diferencial gradiente são desenvolvidas, visando-se elevar a ordem de aproximação original e minimizar reflexões numéricas em virtude da malha ser não conforme. A técnica proposta é aplicada e discutida em fenômenos governados pelas equações do calor e da onda, incluindo a modelagem de um tratamento para o câncer por hipertermia e a propagação de ondas acústicas em ambientes geológicos complexos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

A 3D FINITE VOLUME FORMULATION USING OCTREE MESHES

André Guimarães Valente

March/2018

Advisors: Webe João Mansur

Leandro Di Bartolo

Department: Civil Engineering

In order to better handle problems with complex domain, a numerical scheme with OcTree meshes based on the Finite Volume Method is developed in the present work. The main feature of this mesh with cube form is that the ratio between the edges of two volumes retains a power of two. The possibility of having small volumes adjacent to irregular interfaces leads to a more precise capture of interfaces. Regions with constant property can be represented by larger volumes, resulting in saving both memory and CPU time. On the other hand, in the case of the study of seismic waves, the use of larger volumes in regions with higher wave propagation velocity reduces significantly data storage and processing time. Differential discrete gradient and divergent operators are constructed through the assembly of matrices that connect the volumes to their faces. In addition, two new approaches to the differential gradient operator are developed, aiming at raising the original approximation order and minimizing numerical reflections by virtue of the nonconforming mesh. The proposed technique is applied and discussed to phenomena governed by the heat and wave equations with substantially great practical interest, including a modeling of a treatment for cancer by hyperthermia and of the propagation of acoustic waves in complex geological environments.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiii
1 Introdução	1
2 Formulação numérica	7
2.1 Método dos volumes finitos (MVF)	7
2.2 Método das diferenças finitas com malha intercalada (MDFI)	8
2.3 Construção da malha OcTree	10
2.4 Construção do operador divergente	12
2.5 Construção do operador gradiente	16
2.6 Formulação α para o operador gradiente	18
2.6.1 Volumes fantasma	20
2.6.2 Otimização dos parâmetros α	22
2.7 Formulação λ para o operador gradiente	26
2.8 Validação com modelo de difusão de calor	27
2.9 Descrição da construção das matrizes	28
3 Simulação computacional de hipertermia com nanopartículas	32
3.1 Modelagem da condução do calor	34
3.1.1 Discretização em uma malha OcTree	34
3.1.2 Condições de contorno	34
3.1.3 Exemplo - Uma barra heterogênea	35
3.2 Hipertermia com nanopartículas	35
3.2.1 Nanopartículas: fonte de calor	36
3.2.2 Discretização da equação de Pennes	38
3.2.3 Integração no tempo	39
3.2.4 A Função Dano	40
3.2.5 Simulações numéricas e discussões	40
3.2.6 Discussões	49

4	Modelagem da onda acústica	53
4.1	A equação da onda acústica	55
4.2	Discretização em uma malha OcTree	55
4.3	Condições de contorno	56
4.4	Fonte sísmica	57
4.5	Estabilidade e dispersão numéricas	57
4.6	Estudo da acurácia	59
4.7	Exemplos Numéricos	63
4.7.1	Modelo de camadas planas	63
4.7.2	Modelo de camadas inclinadas	65
4.7.3	Domo de sal	69
4.8	Discussões de alguns aspectos computacionais	75
4.9	Considerações sobre os resultados obtidos	77
5	Conclusões	78
5.1	Contribuições e publicações	78
5.2	Trabalhos futuros	80
	Referências Bibliográficas	81
A	Equivalência entre MDFI e MVF com malhas OcTree regulares	86
A.1	Esquema de malha equivalente	86
A.2	Operadores diferenciais em uma malha OcTree regular	87

Lista de Figuras

1.1	Exemplo de malha OcTree. A esquerda a malha 3D, a direita um corte para melhor visualização do refinamento.	2
2.1	Malha intercalada 2D.	9
2.2	Uma pequena malha OcTree.	10
2.3	Exemplo de malha OcTree. A esquerda a malha 3D, a direita um corte para melhor visualização do refinamento.	12
2.4	Aproximação do divergente com vizinhos com tamanhos iguais.	13
2.5	Aproximação do divergente com vizinhos com tamanhos diferentes.	13
2.6	Pequena malha 2D.	15
2.7	Aproximação de componente do operador gradiente com faces de mesma dimensão.	17
2.8	Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes.	17
2.9	Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes.	19
2.10	Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes considerando volume fantasma.	19
2.11	Pequena malha em duas dimensões com volumes fantasmas.	22
2.12	Ilustração esquemática do refinamento da malha.	23
2.13	Modelo homogêneo com onda esférica	23
2.14	Comparação entre modelos de primeira ordem e com otimização de parâmetros para modelo com onda esférica.	24
2.15	Modelo homogêneo com onda plana.	25
2.16	Comparação entre modelos de primeira ordem e com otimização de parâmetros para modelo com onda plana.	25
2.17	Malha OcTree homogênea.	27
2.18	Solução numérica em alguns instantes de tempo.	28
2.19	Comparação entre a solução numérica e a solução analítica em alguns instantes de tempo.	28
2.20	Configuração inicial de uma pequena malha OcTree.	29

2.21	Primeiro refinamento em uma pequena malha OcTree.	30
2.22	Pequena malha OcTree.	30
3.1	Detalhe de uma malha OcTree heterogênea.	36
3.2	Barra heterogênea	37
3.3	Domínio da experiência numérica. Camadas de derme, gordura e músculo e tumor na forma de elipsoide.	41
3.4	Malha OcTree com 58.783 volumes de controle com quatro tamanhos diferentes: Malha 3D.	42
3.5	Malha OcTree com 58.783 volumes de controle com quatro tamanhos diferentes: Fatia plana em $y = 0,05$ m.	42
3.6	Fatia plana em $y = 0,05$ m da condição inicial obtida pela solução do problema no regime permanente sem a fonte gerada pelas nanopartículas. Escala de temperatura em graus célsius.	44
3.7	Comparação entre os modelos implícito e explícito.	45
3.8	Variação da temperatura no tempo em um ponto na superfície da pele $(0, 0,5, 0,5)$	45
3.9	Fatias planas em $y = 0,05$ m para os esquemas numéricos Imp (acima) e Ref (Abaixo) nos tempos 1000 s (esquerda), 2000 s (centro) e 3000 s (direita). A linha branda determina o contorno do tumor e a preta a isotérmica em $43^{\circ}C$. Escala de temperatura em graus célsius.	46
3.10	Domínio do modelo.	47
3.11	Malha OcTree com 68.839 volumes com quatro diferentes tamanhos.	48
3.12	Domínio do modelo e malha OcTree com 68.839 volumes com quatro diferentes tamanhos: Fatia plana em $y = 0,05m$	49
3.13	Cortes em $y = 0,05$ m do campo de temperaturas em 1000s (esquerda) e 3000s (direita). A linha preta representa uma isotérmica em $43^{\circ}C$ e a linha vermelha o limite do tumor.	50
3.14	Cortes em $y = 0,05$ m do campo da função dano em 1000s (esquerda) e 3000s (direita). A linha preta representa uma curva onde o dano é igual a 1 e a linha vermelha o limite do tumor.	50
3.15	Temperatura em relação ao tempo em um ponto na posição $(0,018m, 0,05$ m, $0,05m)$ no interior do tumor.	51
3.16	Dano em relação ao tempo em um ponto na posição $(0,018m ,0,05m ,0,05m)$ no interior do tumor.	51
4.1	Ondas senoidais monocromáticas de uma mesma frequência se propagando em dois meios com velocidades de propagação distintas.	59
4.2	Ilustração esquemática da malha OcTree.	60
4.3	Modelo com duas camadas	61

4.4	Resposta no receptor R_1 .	61
4.5	Resposta no receptor R_2 .	62
4.6	Erro em função do número de volumes em R_1 .	62
4.7	Erro em função do número de volumes em R_2 .	63
4.8	Refinamento próximo aos refletores.	64
4.9	Snapshot em $t = 2.0s$	65
4.10	Snapshot em $t = 2.5s$	66
4.11	Sismograma sintético.	66
4.12	Modelo com camadas inclinadas.	67
4.13	Refinamento próximo aos refletores.	67
4.14	Sismograma sintético	68
4.15	Snapshot 3D em $t = 0.336s$.	68
4.16	Snapshot em $t = 0.224s$.	69
4.17	Snapshot em $t = 0.336s$.	69
4.18	Snapshot em $t = 0.448s$.	70
4.19	Snapshot em $t = 0.56s$.	70
4.20	SEG/EAGE “salt dome” modificado.	71
4.21	Corte no modelo SEG/EAGE “salt” dome modificado em $y = 355, 2m$.	71
4.22	Corte no modelo SEG/EAGE salt dome modificado em $y = 355, 2m$. Região amarela com volumes de lado h e região azul com volumes de lado $2h$.	72
4.23	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 2s$ se simulação numérica.	72
4.24	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 25s$ se simulação numérica.	72
4.25	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 3s$ se simulação numérica.	72
4.26	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 35s$ se simulação numérica.	73
4.27	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 4s$ se simulação numérica.	73
4.28	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 45s$ se simulação numérica.	73
4.29	Fatia plana em $y = 355, 2$ m com $0, 5s$ se simulação numérica.	73
4.30	Fatia plana em $x = 1467, 05$ m com $0, 2s$ se simulação numérica.	74
4.31	Fatia plana em $x = 1467, 05$ m com $0, 25s$ se simulação numérica.	74
4.32	Fatia plana em $x = 1467, 05$ m com $0, 3s$ se simulação numérica.	74
4.33	Fatia plana em $x = 1467, 05$ m com $0, 35s$ se simulação numérica.	75

Lista de Tabelas

2.1	Comparação entre os erros obtidos com método de primeira ordem é os métodos α e λ	27
3.1	Taxa de perfusão sanguínea	38
3.2	Parâmetros físicos	43
3.3	Parâmetros da fonte	43
3.4	Parâmetros da simulação	44
3.5	Parâmetros do Modelo	48
4.1	Erro Quadrado médio	63

Capítulo 1

Introdução

Com os avanços tecnológicos recentes, um número cada vez maior de operações podem ser realizadas por computadores em uma pequena fração de segundo. Este fato tem possibilitado simulações computacionais de fenômenos físicos cada vez mais complexos. Diversos grupos de estudos, das mais diferentes áreas, têm pesquisado novos métodos e aprimorado os clássicos com o intuito de simular fenômenos de diversas naturezas, muitas vezes em domínios 3D.

Alguns métodos numéricos procuram discretizar o meio a ser estudado com malhas ou dividindo o domínio em subdomínios, como o método das diferenças finitas (VIRIEUX, 1986), o método dos elementos finitos (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983) e o método dos volumes finitos (BARTH, 1992). Isto transforma o problema, que geralmente consiste em uma equação diferencial parcial com condições iniciais e de contorno, em um sistema algébrico de equações lineares.

Esta discretização do domínio pode ser realizada de inúmeras maneiras. Pode-se considerar características do domínio a ser estudado ou simplesmente considerar uma malha regular, com o mesmo espaçamento em qualquer região. Para os fenômenos estudados neste trabalho (difusão de calor em tecidos vivos e propagação de ondas sísmicas em meios geológicos), considerar as propriedades do meio para discretizá-lo de forma otimizada parece adequado por diversos motivos. Dentre estes motivos pode-se citar os geométricos, para melhor descrição do modelo e os computacionais, para menores demandas de memória e tempo de processamento computacional.

Com o objetivo de melhor representar domínios, neste trabalho será desenvolvido um esquema numérico com malhas OcTree. Este tipo de malha tem como principal característica ser formada apenas por cubos tais que a razão entre as arestas de dois volumes é sempre uma potência de dois. Um exemplo de uma malha OcTree pode ser observado na Figura 1.1.

A possibilidade de ter pequenos volumes próximos a interfaces irregulares pode permitir uma mais detalhada descrição das mesmas. Regiões onde a propriedade do meio é constante podem ser representadas por volumes maiores, economizando-se

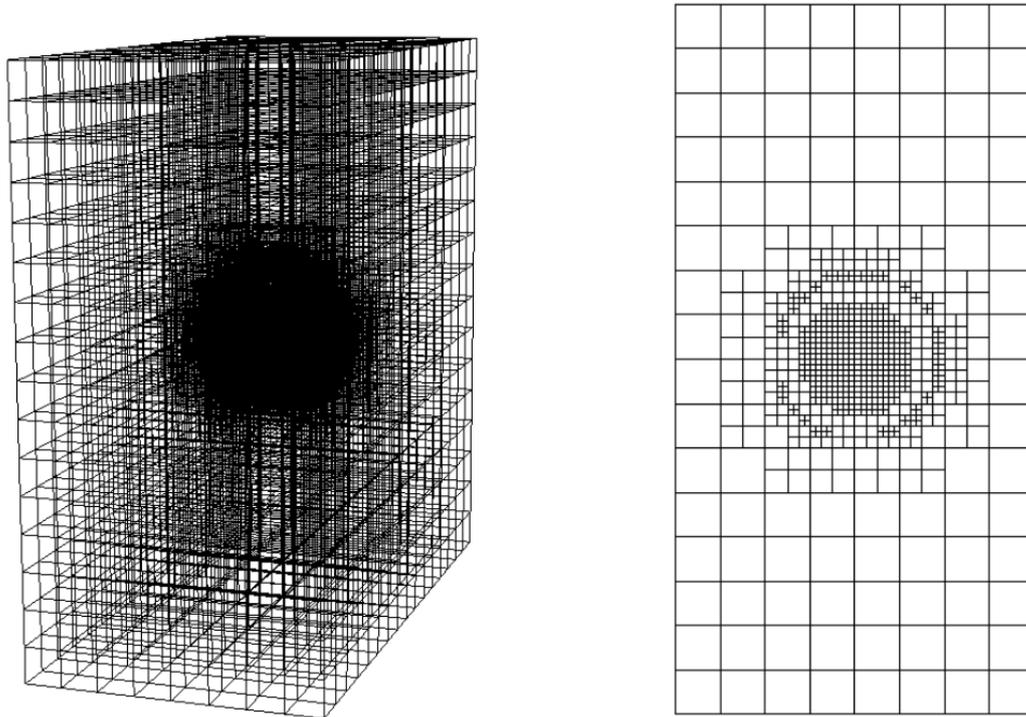


Figura 1.1: Exemplo de malha OcTree. A esquerda a malha 3D, a direita um corte para melhor visualização do refinamento.

assim memória e tempo de computação. No caso do estudo de ondas sísmicas, a utilização de volumes maiores em regiões com maior velocidade de propagação da onda pode permitir uma grande economia no armazenamento de dados e no tempo de processamento.

Um algoritmo que usa o método de volumes finitos (MVF) com malhas OcTree foi apresentado no trabalho de HABER e HELDMANN (2007), onde os autores desenvolvem uma série de ferramentas para simular fenômenos regidos pelas Equações de Maxwell.

Modelagem de tratamentos com hipertermia

Os tratamentos com o uso de nanotecnologia estão emergindo como uma nova fronteira em terapias para diversos tipos de câncer (HUANG e HAINFELD, 2013; MIN-KOWYCZ *et al.*, 2012). Os procedimentos de hipertermia têm um fator limitante principal: o grande aumento da temperatura no tecido vivo, que em alguns casos pode causar efeitos indesejáveis, como danos irreversíveis ao tecido saudável. O sucesso deste tipo de tratamento depende do aumento da temperatura apenas no tecido cancerígeno a altas temperaturas por um período de tempo específico de forma segura ao tecido saudável e suficiente para causar danos irreversíveis ao tecido doente. Assim, ferramentas numéricas e computacionais podem ser utilizadas em simulações

de tratamento com hipertermia com o objetivo de prever o campo de temperatura e estimar o dano causado pelo procedimento, com o intuito de orientar o especialista para um procedimento médico seguro e eficiente.

Com frequência, os modelos para o estudo destes fenômenos envolvem geometrias complexas e necessitam da adoção de métodos capazes de lidar com malhas não estruturadas. Os métodos mais utilizados são o método de elementos finitos (MEF) (ZIENKIEWICZ e MORGAN, 1983) e o método de volume finito (MVF) (BARTH, 1992). Os procedimentos de geração de malhas não estruturadas para geometrias complexas ainda são muito demorados e sujeitos a diversas questões numéricas como o condicionamento do sistema resultante, sendo um tema de pesquisa intensiva. Esta dificuldade, no entanto, pode ser minimizada em partes pelo uso de malhas OcTree, que possuem várias vantagens em relação ao uso de recursos computacionais e estrutura de dados. Nas malhas OcTree, a descrição de geometrias complexas é realizada por cubos e o refinamento ocorre apenas em certas regiões que precisam de maior resolução, enquanto outras podem ser descritas com volumes maiores. Esta abordagem é amplamente utilizada para modelar diversos fenômenos, tais como, a dinâmica dos fluidos (POPINET, 2003), o eletromagnetismo (HABER e HELDMANN, 2007; HORESH e HABER, 2011) e recentemente, ondas sísmicas (VALENTE *et al.*, 2015).

Vários pesquisadores aplicaram MVF para construir modelos computacionais da equação de Pennes em muitas aplicações diferentes (DAS e MISHRA, 2013, 2014; DAS *et al.*, 2013; GWON, 2015; NÓBREGA e COELHO, 2017; ZHANG, 2005). O MVF é muito flexível para lidar com qualquer tipo de volume de controle e qualquer tipo de malha não estruturada.

Modelagem da onda acústica

O estudo de métodos numéricos para simulação da propagação de ondas sísmicas é de grande importância na área de geofísica. Regiões offshore associadas à tectônica de sal se tornaram alvos comuns de exploração pela indústria do petróleo e, no momento, é bem sabido que uma proporção significativa das reservas de hidrocarbonetos do mundo estão em estruturas relacionadas a essas formações geológicas. Adicionalmente, o processamento 3D se tornou uma prática importante na área. Em muitos lugares ao redor do mundo, grande interesse tem sido focado no pré-sal, áreas estas de difícil iluminação com características geológicas muito complexas, tendo camadas de alta velocidade em conjunto com outras de velocidades mais baixas, tudo isso abaixo de milhares de metros da superfície da água. Por outro lado, o desenvolvimento tecnológico na aquisição e processamento de imagens tem permitido o aumento da resolução de imageamentos e a utilização de algoritmos de simulação

3D.

Existem enormes desafios na exploração e caracterização de reservatórios de hidrocarbonetos. Em diversos casos, algoritmos de modelagem sísmica, a partir dos quais são baseados algoritmos de inversão de onda completa (FWI, sigla em inglês) e migração reversa no tempo (RTM, sigla em inglês), estão em destaque atualmente. Neste contexto, o desenvolvimento de esquemas numéricos poderosos e eficientes para a modelagem sísmica tem importância fundamental. O método de diferenças finitas (MDF) é o método mais popular usado para modelar as ondas sísmicas, principalmente devido à sua robustez: é aplicável de forma simples em regiões complexas e, ao mesmo tempo, é relativamente preciso e computacionalmente eficiente. Além disso, é também simples de implementar e é muito adequado para paralelização. Naturalmente, o MDF não é livre de limitações. Existem dificuldades relacionadas ao espaçamento fixo do grid, que pode ser demasiadamente pequeno por imposição de parâmetros relacionados a dispersão numérica, mesmo em uma camada de alta velocidade, em adição a impossibilidade de refinamento local de regiões de interesse, por exemplo, uma camada de rocha fina com flancos de óleo e sal.

Neste sentido, o preço de se usar um grid regular com um espaçamento pequeno em uma área de interesse, imposta pela velocidade inferior presente no meio geofísico, é que este pequeno espaçamento tem de ser usado em todo o modelo. Isso faz com que o número de pontos do grid por comprimento de onda seja muito grande em camadas de alta velocidade, fazendo o método menos eficiente do que poderia ser. Além disto, o espaçamento fixo não permite refinamento para melhorar a representação de interfaces.

A introdução de malhas intercaladas (SSG, do inglês *standard staggered-grid*) no método das diferenças finitas (MDF) por VIRIEUX (1986) é considerada um passo importante na modelagem sísmica (MOCZO *et al.*, 2002), sendo tais esquemas SSG (GRAVES, 1996; LEVANDER, 1988) os algoritmos mais utilizados para modelagem sísmica atualmente. As vantagens destes esquemas são: funcionam em meios elásticos com qualquer razão de Poisson e a sua maior precisão em comparação aos esquemas MDF de malhas simples, embora as limitações acima referidas permaneçam.

DI BARTOLO *et al.* (2012) propuseram um esquema de malha intercalada equivalente (ESG), um esquema MDF numericamente equivalente ao esquema SSG para a acústica. Extensões para equação de ondas elásticas em meios anisotrópicos foram apresentados recentemente em DI BARTOLO *et al.* (2015), além de aplicações 3D para o caso pseudo-acústico em meios transversalmente isotrópicos (DI BARTOLO *et al.*, 2017). Os esquemas de ESG exigem menos memória de cálculo do que SSG, pois são baseados apenas em P, embora permaneça com as limitações do MDF mencionado anteriormente.

Nos trabalhos de ZHANG e VERSCHUUR (2002) e TADI (2004) foram desenvolvidos algoritmos com malhas mais genéricas usando esquemas similares aos de malha intercalada. O MVF foi usado nestes trabalhos e foram obtidos excelentes resultados, com a possibilidade de melhor representação dos meios não homogêneos e com contornos mais complexos com elementos triangulares e retangulares.

Objetivos

O objetivo do presente trabalho é desenvolver um novo esquema numérico 3D baseado no MVF utilizando malhas OcTree. Baseado no trabalho de HABER e HELDMANN (2007), operadores diferenciais discretos gradiente e divergente foram apresentados no Capítulo 2. Esta construção foi feita através da montagem de matrizes que conectam os volumes a suas faces, a fim de podermos simular fenômenos regidos pelas equações do calor e da onda. O algoritmo permite refinamento local usando malhas OcTree, que podem ser construídas com relativa facilidade e são geradas diretamente a partir de uma malha regular. O esquema proposto pode ser visto como uma extensão do ESG (DI BARTOLO *et al.*, 2012) para o caso de malhas OcTree, pois foi verificada a equivalência entre estes esquemas para o caso da malha OcTree ter todos os volumes com as mesmas dimensões (Apêndice A).

Duas novas aproximações para o operador diferencial gradiente foram desenvolvidas. A primeira foi a formulação α , que a partir de volumes fantasma gerados a partir de ponderações específicas de volumes próximos, melhora a precisão do operador (Seção 2.6). A segunda foi a formulação λ , que altera alguns parâmetros da formulação a fim de obter resultados mais precisos (Seção 2.7). Com estas duas novas aproximações, foram observadas expressivas melhoras nos resultados dos testes numéricos.

No capítulo 3 apresenta-se uma estratégia computacional através do uso do MVF para resolver a equação de biotransferência de calor não linear de Pennes em três dimensões aplicando malhas OcTree. São apresentadas simulações de um tipo de tratamento para câncer com o uso de nanopartículas onde o dano é avaliado em cada ponto do domínio em cada instante do tratamento. A técnica apresenta uma grande redução no número de graus de liberdade no sistema final. Assim, o uso de memória computacional e o tempo de processamento são reduzidos. Além disso, as malhas OcTree, como as usadas neste trabalho, são facilmente construídas, sendo tratadas como matrizes esparsas.

No capítulo 4 apresenta-se uma estratégia computacional através do uso do MVF para resolver a equação da onda acústica em três dimensões aplicando malhas OcTree. A técnica apresenta uma grande redução no número de graus de liberdade no sistema final. Estratégias para aplicação de condições de contorno e camadas de

absorção são também apresentadas.

No Capítulo 5 são apresentadas as conclusões deste trabalho. Também são apresentadas propostas para a continuação dos estudos realizados.

Capítulo 2

Formulação numérica

Baseado nos trabalhos de HORESH e HABER (2011), BARTH (1992), YEE (1966) e de VIRIEUX (1984), será feita a construção de operadores para a modelagem computacional de problemas regidos pelas equações da onda acústica, difusão de calor e de biotransferência de calor não linear de Pennes. Vale ressaltar que devido a maneira que os operadores serão construídos, uma grande variedade de fenômenos regidos por equações diferenciais parciais poderiam ser modelados. Uma breve revisão do método dos volumes finitos será apresentada na Seção 2.1 e uma também breve revisão do método das diferenças finitas com malhas intercaladas será apresentada na Seção 2.2. A seção 2.3 apresenta a definição e exemplos de malhas OcTree. Os Operadores Divergente e Gradiente construídos por HABER e HELDMANN (2007) serão apresentados nas Seções 2.4 e 2.5 respectivamente, onde também será apresentado um exemplo da construção destes operadores para uma pequena malha 2D. As Seções 2.6 e 2.7 deste capítulo apresentam duas novas formulações para o operador gradiente e os resultados são comparados. A Seção 2.8 contém uma validação do esquema desenvolvido a partir de um modelo de condução de calor. A última seção deste capítulo apresenta uma descrição detalhada da construção computacional das principais matrizes que compõem os operadores diferenciais discretos desenvolvidos.

2.1 Método dos volumes finitos (MVF)

Nesta seção será apresentada uma breve revisão sobre o Método dos Volumes Finitos (DORMY e TARANTOLA, 1995a; TADI, 2004). Este método é baseado no Teorema de Gauss. Este importante teorema permite transformar integrais de domínio em integrais de contorno, relacionando as componentes e as derivadas das componentes de uma função vetorial com suas primeiras derivadas parciais contínuas.

Teorema de Gauss

Seja Ω uma região compacta de R^3 cuja fronteira Γ é uma superfície orientada

positivamente. Se F for um campo vetorial C^1 em um subconjunto aberto de R^3 que contem Γ , então:

$$\int \int_{\Gamma} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma = \int \int \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \mathbf{F} dx dy dz.$$

A demonstração do teorema de Gauss pode ser encontrada em MORGADO (1989).

O MVF é uma técnica na qual a formulação integral da lei geral da conservação é discretizada diretamente no domínio do problema. Devido ao Teorema de Gauss, a variação da quantidade escalar no domínio Ω depende apenas do fluxo na superfície Γ . Assim, pode-se particionar Ω em um número finito de subdomínios disjuntos Ω_i , onde $\bigcup_i \Omega_i = \Omega$, e aplicar a lei da conservação para cada subdomínio e obter a conservação global no domínio Ω somando as expressões para todos os subdomínios, que serão chamados de volumes de controle.

A equação integral que rege a lei geral da conservação para um domínio compacto Ω com fronteira Γ , é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega} P d\Omega + \iint_{\Gamma} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma = \iiint_{\Omega} Q d\Omega,$$

onde P é uma quantidade escalar, \mathbf{F} é o fluxo ao longo contorno e Q é o termo fonte por unidade de volume.

Considerando Γ_i a fronteira de cada subdomínio Ω_i , podemos escrever

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega_i} P d\Omega_i + \iint_{\Gamma_i} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma_i = \iiint_{\Omega_i} Q d\Omega_i.$$

Se for considerado P_i o valor médio de P no subdomínio Ω_i , Q_i o valor médio de Q no subdomínio Ω_i , V_i o volume de Ω_i e se Γ_i for um poliedro convexo com faces Γ_i^j com área A_i^j , pode-se obter uma forma discreta da lei de conservação em cada volume de controle

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i V_i + \sum A_i^j \vec{F} = Q_i V_i.$$

Esta forma discreta será usada na seção 2.4 para a construção do operador divergente discreto para malhas OcTree.

2.2 Método das diferenças finitas com malha intercalada (MDFI)

Modelos numéricos são usados em diversas áreas de pesquisa como importante ferramenta. Para solução de equações diferenciais, o método das diferenças finitas (MDF)

é uma das principais e mais utilizadas metodologias, isto devido sua simplicidade e eficiência. No entanto, alguns tipos de problema, como por exemplo propagação de ondas sísmicas em meios heterogêneos onde parte do domínio tem parâmetro de Poisson maior que 0,25, o MDF não apresenta bons resultados (LEVANDER, 1988). Uma metodologia proposta por YEE (1966) resolveu de maneira muito eficiente problemas onde o MDF não era preciso ou estável. Yee desenvolveu um esquema de diferenças finitas com malha intercalada para solução das Equações de Maxwell no domínio do tempo e este método tem sido aplicado em diversas áreas de estudo apresentando bons resultados, como por exemplo em geofísica por VIRIEUX (1984) e LEVANDER (1988).

Os operadores diferenciais para malhas OcTree apresentados por HORESH e HABER (2011) usam de maneira natural conceitos do MDFI. A aplicação dos operadores nas informações contidas nas faces dos volumes da malha e nas informações contidas nos volumes propriamente ditos (centro dos volumes) formarão um esquema numérico equivalente ao MDFI no caso de uma malha OcTree regular (Apêndice A).

Pode-se observar uma malha intercalada como uma malha dupla, com pontos que podem ser considerados em uma malha original e outros pontos em malhas intercaladas. Em cada uma destas partes da malha intercalada, um tipo de informação é armazenado, por exemplo pressão e velocidade de propagação da onda P , no caso da modelagem da onda acústica. A Figura 2.1 mostra uma malha intercalada em duas dimensões.

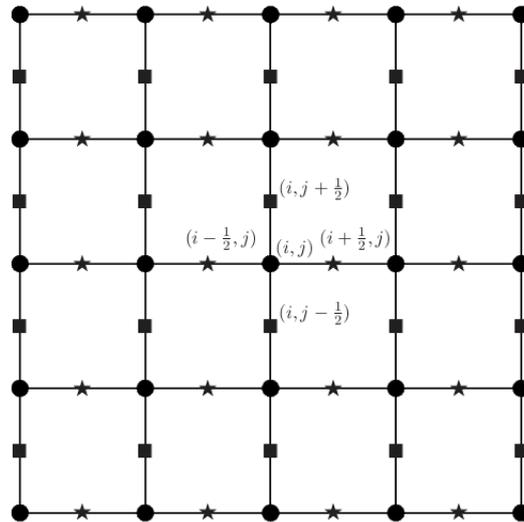


Figura 2.1: Malha intercalada 2D.

Para obter as expressões de diferenças finitas intercaladas das derivadas em um ponto (i, j) da malha original em cada direção, deve-se fazer a expansão em séries de Taylor em pontos intermediários $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i - \frac{1}{2}, j)$, somar estas séries, e obter (DI BARTOLO, 2010)

$$\frac{dF_i}{dx} = \frac{F_{(i+\frac{1}{2};j)} - F_{(i-\frac{1}{2};j)}}{\Delta x} - O(\Delta x^2). \quad (2.1)$$

A aplicação deste operador leva informações da malha intermediária para malha original e vice-versa. O Apêndice A apresenta um pouco mais de detalhes deste esquema e a Seção A.2 deste apêndice mostra a equivalência deste esquema com um caso particular do método proposto neste trabalho.

Uma adaptação desta formulação será usada nas seções 2.5, 2.6 e 2.7 para a obtenção do operador gradiente para malhas OcTree.

2.3 Construção da malha OcTree

Define-se uma Malha OcTree como uma matriz esparsa e tridimensional $\mathbf{M}_{i,j,k}$, com dimensões $x_1 = k_1 2^{\alpha_1}$, $x_2 = k_2 2^{\alpha_2}$ e $x_3 = k_3 2^{\alpha_3}$ onde seus valores não nulos são potências de 2 e α_i, k_i são naturais diferentes de zero ($i = 1, 2, 3$). Define-se também h como o menor espaçamento desta malha. Os valores não nulos de \mathbf{M} representam volumes cúbicos com dimensões definidas pelo produto destes valores por h . A Figura 2.2 mostra uma pequena malha OcTree e uma descrição detalhada da construção de \mathbf{M} é feita na seção 2.9.

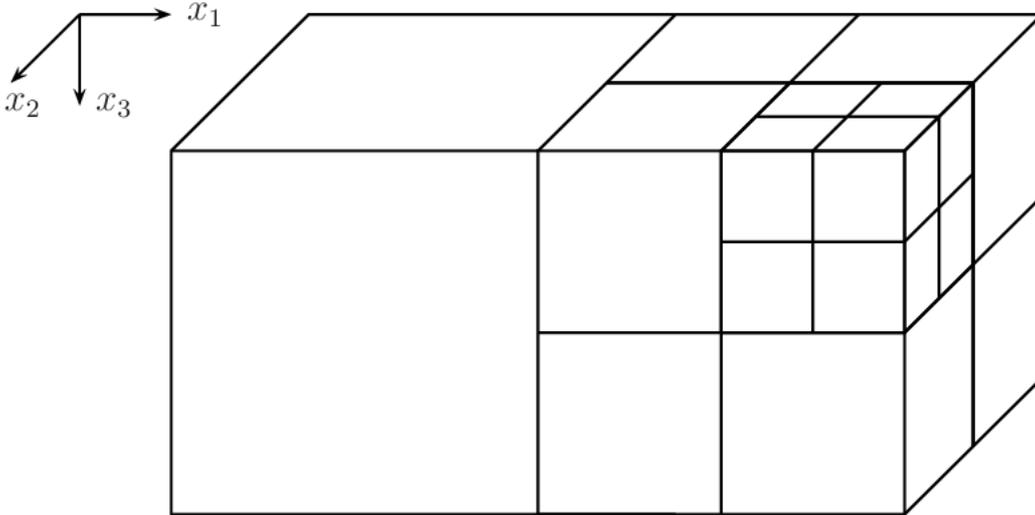


Figura 2.2: Uma pequena malha OcTree.

Uma malha OcTree é dita balanceada se a razão entre a medida dos lados de dois volumes vizinhos for 1 ou $\frac{1}{2}$. Este trabalho considera apenas as malhas balanceadas, isto devido as características dos operadores.

A matriz com dimensões $x_1 \times x_2 \times x_3 = 8 \times 4 \times 4$ que representa a malha da Figura 2.2 tem blocos formados por potências de 2 e zeros representando os volumes cúbicos. O armazenamento deste tipo de matriz, utilizando metodologias adequadas,

é bastante eficiente e econômico. Neste trabalho foi usado o método COO (do inglês, *Coordinate Format*), que armazena os valores não nulos e a posição destes valores em uma matriz com quatro linhas e tantas colunas quantos forem os valores não nulos da matriz a ser compactada (TEWARSON e REGINALD, 1973). Existem metodologias mais eficientes para o armazenamento de matrizes esparsas, descrita no trabalho citado, no entanto este método se mostrou muito conveniente para a ágil localização dos volumes na malha, bem como para a determinação de volumes vizinhos, algo fundamental para a construção dos operadores diferenciais.

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_{*,*,1} &= \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{*,*,3} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\mathbf{M}_{*,*,2} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{*,*,4} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Dado um grid A com dimensões $k_1 2^a \times k_2 2^b \times k_3 2^c$ semelhante a um grid para MDF, a partir de propriedades do meio a ser estudado, por exemplo um modelo de velocidades, alguns critérios são utilizados para a construção da malha OcTree \mathbf{M} . A malha OcTree é iniciada com volumes de tamanho máximo possível. Este tamanho máximo é determinado a partir de critérios para evitar dispersão numérica. É então iniciado um processo que examina cada um destes volumes e verifica se o desvio médio dos valores da propriedade física em questão em cada ponto do grid A é maior que um parâmetro γ . Caso seja, o volume de controle se divide em outros oito volumes com aresta com tamanho igual a metade da aresta do volume original. Este processo se repete para todos os tamanhos possíveis de volume. O resultado disto é que próximo as interfaces, os volumes da malha são mantidos com o menor tamanho possível e, ao se afastar das interfaces, os volumes aumentam progressivamente de tamanho até chegar ao tamanho máximo.

Os pequenos volumes próximos a interfaces irregulares permitem uma descrição delas mesmas com muito mais precisão e a utilização de volumes maiores em regiões com diferentes propriedades poderá permitir uma grande economia no armazenamento de dados e no tempo de processamento. A Figura 2.3 mostra uma malha OcTree com 68.839 volumes.

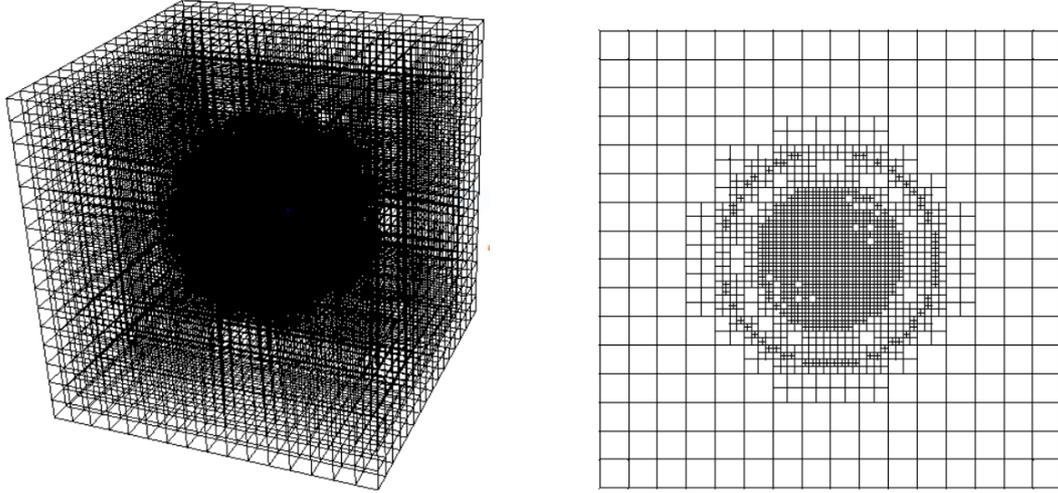


Figura 2.3: Exemplo de malha OcTree. A esquerda a malha 3D, a direita um corte para melhor visualização do refinamento.

2.4 Construção do operador divergente

Será usada a abordagem de balanço de fluxo (DORMY e TARANTOLA, 1995b) para a construção dos operadores diferenciais. Primeiro lidaremos com o operador divergente, que em sua forma contínua é definido por

$$Div(\mathbf{J}) = \lim_{V \rightarrow 0} \iint_S \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}}{V} dS. \quad (2.2)$$

onde S é a superfície do volume V , \mathbf{J} é um campo vetorial definido em V e \mathbf{n} o vetor unitário normal apontando para fora de S . Usando o Teorema de Gauss, podemos escrever

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J} dV = \iint_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.3)$$

Os volumes de uma malha OcTree são sempre cubos com faces ortogonais a eixos coordenados. Este conveniente fato permite a composição de um operador discreto para cada volume V_i de \mathbf{M} da seguinte forma

$$Div(\mathbf{J})_i \approx \frac{1}{Vol(V_i)} \sum_{j=1}^n \iint_{F_j} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.4)$$

onde n é o número de faces do volume de controle V_i .

Usando 2.4 pode-se construir o operador divergente discreto de forma matricial para toda a malha. A integral na superfície de cada cubo pode ser expressa a partir das dimensões dos cubos vizinhos. Isto permite diversas configurações, que dependem das dimensões destes volumes vizinhos. As Figuras 2.4 e 2.5 apresentam dois exemplos em duas configurações diferentes.

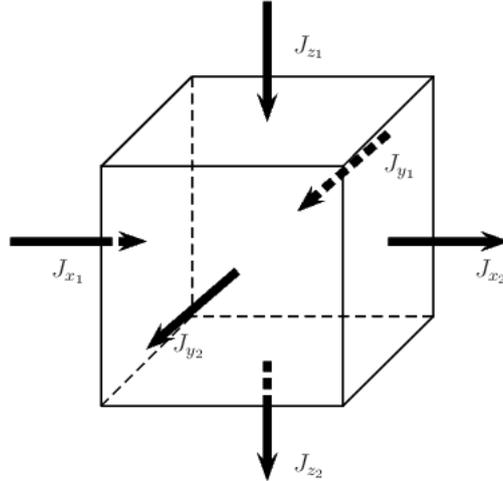


Figura 2.4: Aproximação do divergente com vizinhos com tamanhos iguais.

Na Figura 2.4 todos os vizinhos têm a mesma medida de lado $h2^n$ do volume onde a integral será calculada, onde n é um número natural. Temos o seguinte resultado

$$\iint_{S(V_j)} \mathbf{J} \cdot \mathbf{ndS} = 2^{2n} h^2 (-J_{x_1} + J_{x_2} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2}).$$

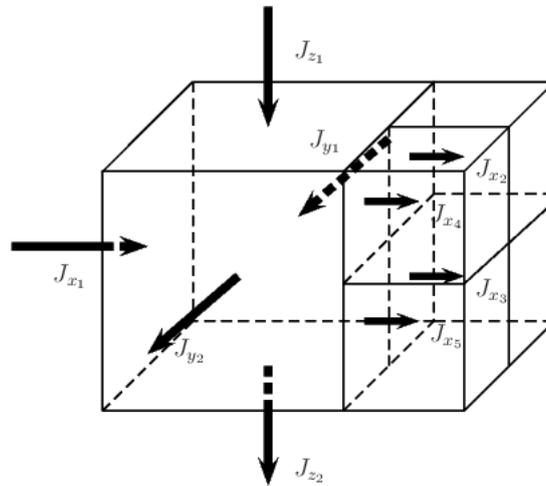


Figura 2.5: Aproximação do divergente com vizinhos com tamanhos diferentes.

Já na Figura 2.5 temos que o vizinho da direita tem medida do lado igual a metade do lado do volume onde a integral será calculada e os demais vizinhos tem as mesmas medidas. Temos então o resultado

$$\iint_{S(V_j)} \mathbf{J} \cdot \mathbf{ndS} = 2^{2n} h^2 (-J_{x_1} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2}) + 2^{2(n-1)} h^2 (J_{x_2} + J_{x_3} + J_{x_4} + J_{x_5}).$$

Assim podemos escrever

$$Div(\mathbf{J})_i \approx \frac{1}{2^{3n}h^3} \left[2^{2n}h^2(-J_{x_1} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2}) + 2^{2(n-1)}h^2(J_{x_2} + J_{x_3} + J_{x_4} + J_{x_5}) \right]. \quad (2.5)$$

Devido a complexidade que uma malha OcTree pode ter, existe uma grande variedade de possibilidades para esta integral em cada volume. Este fato acarreta a necessidade de uma formulação adequada para que o divergente de um campo \mathbf{J} seja corretamente representado em cada volume e armazenado de uma forma prática e eficiente. Para isso será construído um conjunto de matrizes, esparsas e com dois índices, que quando operadas da maneira adequada resultarão no operador divergente.

Antes da construção das matrizes é necessário considerar em uma malha OcTree \mathbf{M} com n_v volumes, uma numeração de seus volumes e uma numeração de todas suas n_f faces. Deve-se considerar também a matriz diagonal \mathbf{V}_0 , com dimensões $n_v \times n_v$, onde $V_{0,i,i}$ é igual a medida do lado do i -ésimo volume da malha ao cubo e a matriz diagonal \mathbf{F}_0 , com dimensões $n_f \times n_f$, onde $F_{0,j,j}$ é igual a medida do lado da j -ésima face.

Também é necessário definir uma matriz que informa como e quais volumes irão influenciar na abordagem de balanço de fluxo de cada volume para que o operador divergente seja corretamente expresso. Para tal, considera-se a matriz esparsa $n_v \times n_f$ \mathbf{N} , onde $N_{i,j} = 1$ se F_j pertence a V_i e se \mathbf{J} tem direção para o interior de V_i pela face F_j e $N_{i,j} = -1$ se F_j pertence a V_i e se \mathbf{J} tem direção para o exterior do V_i pela face F_j . Uma descrição mais detalhada da construção de \mathbf{N} é feita na seção 2.9.

Utilizando as matrizes descritas acima, tem-se então que o operador divergente pode ser escrito como

$$\mathbf{DIV} = \frac{1}{h} \mathbf{V}_0^{-1} \mathbf{N} \mathbf{F}_0^2. \quad (2.6)$$

Dado um campo \mathbf{J} , prescrito em todas n_f faces de \mathbf{M} pode-se notar que

$$Div(\mathbf{J}) = \left(\frac{1}{h} \mathbf{V}_0^{-1} \mathbf{N} \mathbf{F}_0^2 \right) \mathbf{J}$$

é um vetor com n_v componentes, cada uma expressando a integral (2.4) de cada volume.

Para exemplificar esta construção o operador divergente será construído para uma pequena malha em duas dimensões com três volumes e dez faces, como mostrado na figura 2.6. Os quadrados menores têm lado 2^n e o maior 2^{n+1} .

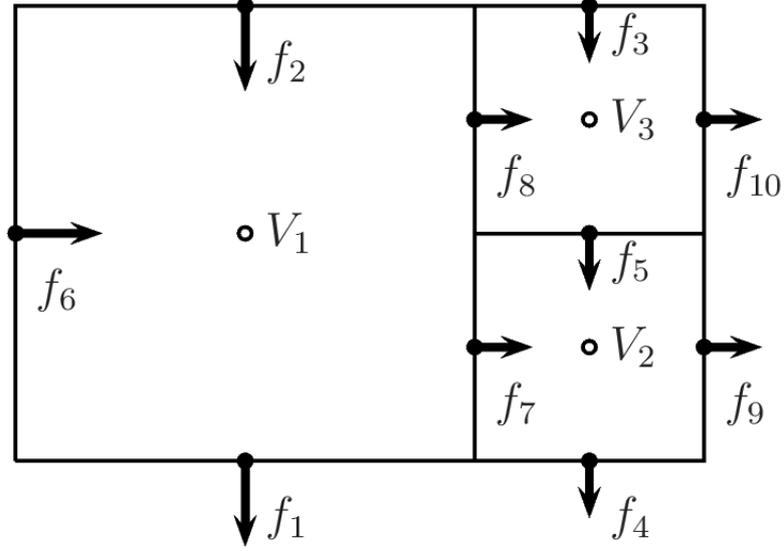


Figura 2.6: Pequena malha 2D.

Para esta malha temos as matrizes

$$\mathbf{V}_0 = \begin{pmatrix} 2^{n+1} & 0 & 0 \\ 0 & 2^n & 0 \\ 0 & 0 & 2^n \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_0 = \begin{pmatrix} 2^{n+1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2^{n+1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2^n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2^n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2^n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^{n+1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2^n \end{pmatrix}$$

e

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Logo podemos fazer os produtos adequados e obter o operador

$$\mathbf{DIV} = \begin{pmatrix} -\frac{2^{2(n+1)}}{h2^{n+1}} & \frac{2^{2(n+1)}}{h2^{n+1}} & 0 & 0 & 0 & \frac{2^{2(n+1)}}{h2^{n+1}} & -\frac{2^{2n}}{h2^{n+1}} & -\frac{2^{2n}}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2^{2n}}{h2^n} & \frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 & \frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 & -\frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 & -\frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 & 0 & \frac{2^{2n}}{h2^n} & 0 & -\frac{2^{2n}}{h2^n} \end{pmatrix}.$$

Deve-se notar que a linha i da matriz \mathbf{DIV} contém a informação de que faces influenciam no volume V_i . De acordo com a construção e a notação usada, V_i não terá necessariamente seis faces no caso 3D. A Figura 2.5, por exemplo, mostra um volume com nove faces, cinco com lado $h2^{n+1}$ e quatro com lado $h2^n$. O fator do operador \mathbf{DIV} que determina a área de cada face é a matriz diagonal \mathbf{F}^2 .

Outra observação que deve ser feita é que o operador divergente usa informações contidas nas faces da malha e atribui valores nos volumes. Esta característica possibilitará operadores semelhantes aos do MDFI, que leva a informação de uma malha para uma posição intercalada.

2.5 Construção do operador gradiente

Dada uma função real $P(V_j)$, cujo o domínio é o conjunto dos volumes de \mathbf{M} , será definido um operador discreto gradiente para P . Para isso precisa-se notar que, de maneira semelhante à construção do operador divergente, é necessário ter cuidado com a maneira de lidar com os volumes de \mathbf{M} , pois existem várias configurações possíveis para vizinhança, e cada uma delas deve gerar as componentes corretas para a construção do operador.

As derivadas parciais de P que compõem o gradiente serão armazenadas nas faces F_k e calculadas a partir de informações contidas nos volumes. Como os volumes de \mathbf{M} têm suas faces ortogonais aos eixos coordenados, as derivadas parciais de um volume V_j com lado $h2^n$, com todos os vizinhos também com lado $h2^n$, (Figura 2.7) em cada uma das componentes poderá ser aproximada por

$$J_x = \frac{\partial P}{\partial x}(F_k) \approx \frac{P(V_j) - P(V_i)}{h2^n}.$$

Quando os vizinhos têm tamanhos de lado diferentes, como o caso exposto na Figura 2.8, o componente do gradiente pode ser aproximado por

$$J_{x_1} = \frac{\partial P}{\partial x}(F_{k1}) \approx \frac{P(V_{j1}) - P(V_i)}{h2^{(n-1)}},$$

sendo obtidas de forma semelhante $J_{x_2} = \frac{\partial P}{\partial y}$ e $J_{x_3} = \frac{\partial P}{\partial z}$.

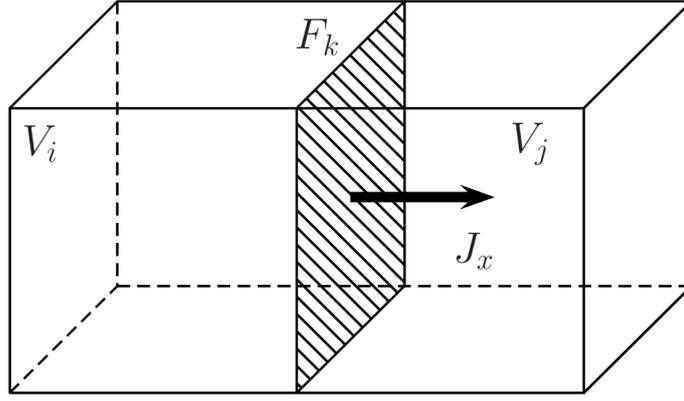


Figura 2.7: Aproximação de componente do operador gradiente com faces de mesma dimensão.

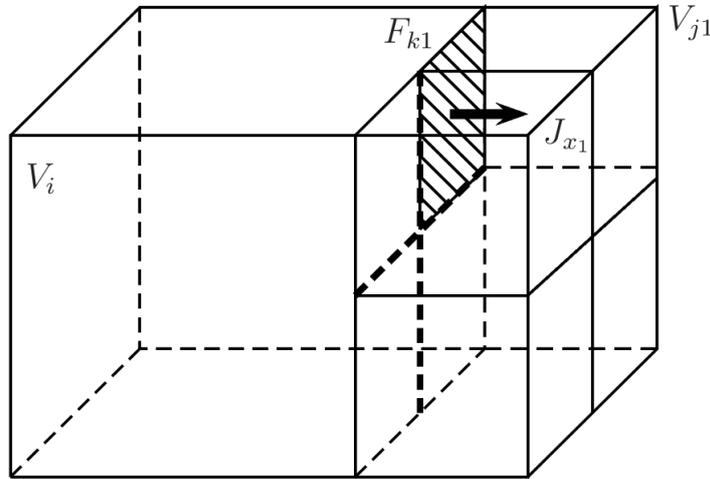


Figura 2.8: Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes.

Deve-se observar que, quando os volumes vizinhos têm o mesmo tamanho, a aproximação do gradiente é de segunda ordem. O mesmo não vale para vizinhos de tamanhos distintos (HORESH e HABER, 2011), resultando aproximações de primeira ordem. Uma aproximação de segunda ordem para o operador gradiente será construída na próxima seção.

As derivadas parciais aqui discutidas para cada face de \mathbf{M} definem um campo vetorial \mathbf{J} nas faces da Malha OcTree. Uma importante observação é que as informações contidas nas faces nas bordas da esquerda, de trás e de cima não serão utilizadas na construção do operador Gradiente. Este fato não causará transtorno algum, pois o procedimento do método neste trabalho proposto na fronteira a partir da aplicação de condições de contorno não utilizará informações contidas nestas faces.

Um fato a ser notado é que a matriz \mathbf{N}^t operada com P resulta em um vetor com n_v componentes e a componente i é formada pelo valor de P dos vizinhos do

volume i , com sinais trocados em relação à construção do Gradiente. Logo pode-se definir o operador gradiente por

$$\mathbf{GRAD} = -\frac{1}{h}\mathbf{F}_0^{-1}\mathbf{N}^t. \quad (2.7)$$

Como exemplo, pode-se construir o operador gradiente para a malha da Figura 2.6

$$\mathbf{GRAD} = \begin{pmatrix} \frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h2^n} & \frac{1}{h2^n} \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{h2^n} & -\frac{1}{h2^n} & 0 \\ \frac{1}{h2^n} & 0 & -\frac{1}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{h2^n} \end{pmatrix}$$

2.6 Formulação α para o operador gradiente

A aproximação para o operador gradiente citada na seção anterior apresenta ordem inferior a ordem de aproximação do operador divergente citado na seção 2.4 (HORESH e HABER, 2011). Isto se deve ao fato de que quando é feita a aproximação de alguma componente do gradiente em uma face onde os volumes que a possuem têm tamanhos diferentes, supõe-se que o volume maior tem as dimensões do menor. Portanto a componente do gradiente na face F na Figura 2.9 na aproximação da seção 2.5 seria

$$\frac{\partial\phi}{\partial x}(F) \approx \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{h2^{(n-1)}}.$$

Para garantir uma aproximação de segunda ordem, HORESH e HABER (2011)

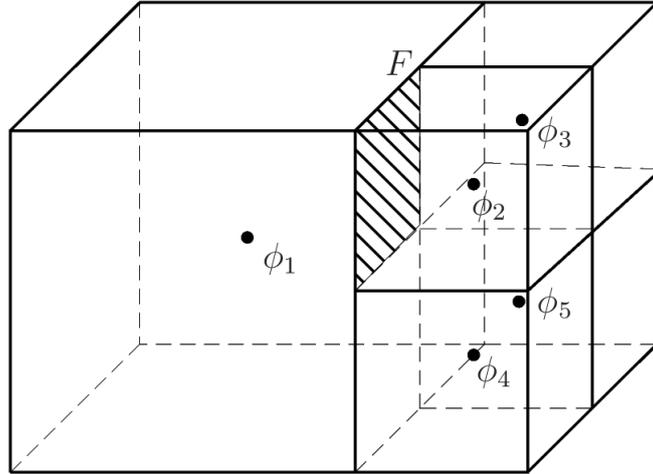


Figura 2.9: Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes.

propuseram um esquema numérico onde seriam gerados novos volumes de controle. Esta estratégia aumenta significativamente o número de graus de liberdade do modelo e considera, além dos dois volumes que possuem a face em questão, os outros três volumes menores que tem face em comum com o volume maior. O novo volume fantasma recebe um valor que é uma ponderação dos cinco volumes envolvidos, todos com mesmo peso. Usando este esquema, a aproximação para o operador gradiente na Figura 2.9 seria

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(F) \approx \frac{(\phi_2 - \phi_G)}{h2^{(n-1)}},$$

onde $\phi_G = \frac{\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 + \phi_5}{5}$.

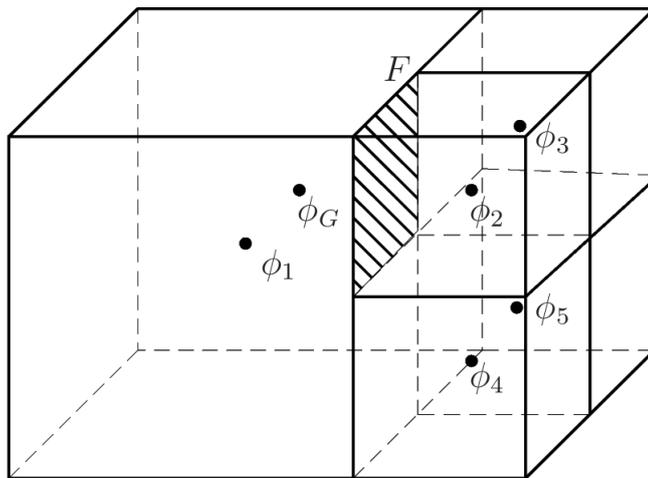


Figura 2.10: Aproximação de componente do operador gradiente com faces de dimensões diferentes considerando volume fantasma.

Apesar de aumentar a ordem de aproximação, o esquema proposto apresenta o inconveniente da geração de novos graus de liberdade, aumentando significativamente o custo computacional. Além disto, a estratégia proposta no trabalho citado não tem a preocupação em ponderar de forma otimizada os valores nos cinco volumes envolvidos, apesar disto, os resultados obtidos apresentaram precisão de segunda ordem. Uma estratégia para inserir o conceito dos volumes fantasma no esquema numérico sem aumentar o número de graus de liberdade foi desenvolvida e será apresentada na subseção 2.6.1. Um método de otimização foi usado para escolher parâmetros α_i adequados para que a expressão

$$\phi_G = \alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2 + \alpha_3\phi_3 + \alpha_4\phi_4 + \alpha_5\phi_5$$

represente adequadamente o problema de propagação de onda. Este método é apresentado na subseção 2.6.2.

2.6.1 Volumes fantasma

Na construção da matriz \mathbf{N} apresentada na seção 2.4, foram consideradas todas as faces de um determinado volume e valores 1 e -1 foram armazenados nas posições $(i, j1), (i, j2), \dots, (i, jn)$, onde n é o número de faces que pertencem ao volume i . Para a construção da aproximação do gradiente é usada a matriz \mathbf{N}^T , pois cada linha desta matriz que representa uma face que não está no contorno tem exatamente dois valores não nulos, um valor 1 na coluna correspondente ao volume por onde o fluxo entra na face em questão e outro igual a -1 na coluna correspondente ao volume por onde o fluxo sai na face em questão. Para construir uma nova aproximação a matriz \mathbf{N}^T será modificada para considerar 5 volumes, além dos dois volumes que possuem a face em questão, os outros três volumes menores que tem face em comum com o volume maior (os volumes correspondentes a ϕ_3, ϕ_4 e ϕ_5 na figura 2.10). Na coluna correspondente a cada um destes volumes serão substituídos os valores -1, 1, 0, 0 e 0 por $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ e α_5 . Assim a matriz \mathbf{N}^T modificada, que chamaremos de \mathbf{G} , será igual a matriz \mathbf{N}^T nas linhas correspondentes a faces com volumes que a possuem do mesmo tamanho e adaptada com os valores α nas demais linhas.

Como exemplo, pode-se construir as matrizes \mathbf{G}^T, \mathbf{G} e o novo operador gradiente para a malha da Figura 2.11

$$\mathbf{G}^T = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \alpha_1 & \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \alpha_2 & \alpha_3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & \alpha_3 & \alpha_2 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \alpha_1 & \alpha_3 & \alpha_2 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

$$\mathbf{GRAD} = \begin{pmatrix} \frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h2^n} & \frac{1}{h2^n} \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ \frac{\alpha_1}{h2^n} & \frac{\alpha_2}{h2^n} & \frac{\alpha_3}{h2^n} \\ \frac{\alpha_1}{h2^n} & \frac{\alpha_3}{h2^n} & \frac{\alpha_2}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{h2^n} \end{pmatrix}$$

Neste exemplo, dois volumes fantasmas são necessários e podem ser vistos na Figura 2.11

Apesar de tornar as matrizes que compõe os operadores discretos menos esparsas, esta estratégia não gera novos graus de liberdade. Para que este esquema numérico tenha sucesso os parâmetros α devem ser escolhidos de forma bastante criteriosa e isto será discutido na próxima subseção.

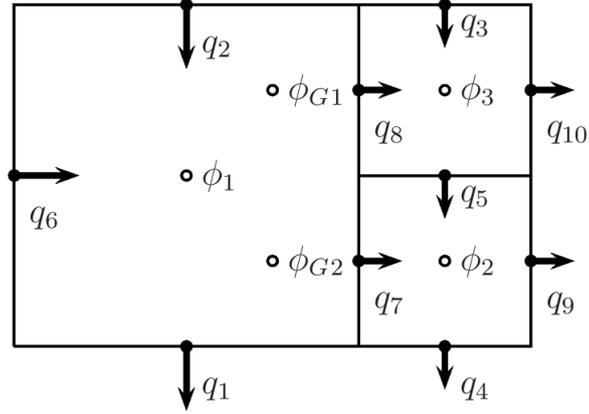


Figura 2.11: Pequena malha em duas dimensões com volumes fantasmas.

2.6.2 Otimização dos parâmetros α

Para realizar um processo de otimização dos parâmetros α os operadores diferenciais foram usados para formar a equação da onda acústica. Este processo será detalhado no Capítulo 4.

Foi construído um modelo homogêneo e um refinamento foi feito em uma região do modelo para gerar uma perturbação nos resultados. Isto porque uma fonte de erro esperada no esquema proposto é o fato de que a malha nas regiões onde há refinamento as faces de elementos vizinhos não coincidem (onde a malha é não conforme).

Este modelo sintético tem grid A com $256 \times 256 \times 256$ pontos. A malha OcTree foi iniciada com volumes de arestas medindo duas vezes o espaçamento do grid original e um refinamento com volumes com metade da aresta dos iniciados foi realizado em $x_3 = 480\text{m}$, como mostrado esquematicamente na Figura 2.12. Foram usados no modelo $c = 2000 \text{ m/s}$ e $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$. Foi colocada uma fonte no centro do modelo ($256 \text{ m}, 256 \text{ m}, 256 \text{ m}$). Nenhum tipo de camada de absorção nos contornos foi usada para não influenciar nos resultados. O modelo foi construído grande o suficiente para que a frente de onda não chegue às bordas antes das medições fossem feitas. Foram usados os parâmetros $h = 2 \text{ m}$, $\Delta t = 1,25 \times 10^{-4}\text{s}$ e $f_{corte} = 100\text{Hz}$, de modo que $\alpha = 10$ e $\beta \approx 4$ (BULCÃO, 2004). Na mesma posição do primeiro refinamento em uma fonte foi inserido um receptor e em $x_3 = 360 \text{ m}$ foi realizado o refinamento (Figura 2.13).

Como esperado, o refinamento causou uma perturbação que gerou uma reflexão numérica que pode ser captada pelo receptor. A estratégia adotada para otimizar os parâmetros α consistiu em minimizar esta reflexão numérica. Assim, foi criada uma função real $E(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5)$ que é determinada pelo quociente da amplitude da reflexão numérica pela amplitude da onda direta captada pelo receptor quando a matriz \mathbf{G} é construída com os parâmetros $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ e α_5 .

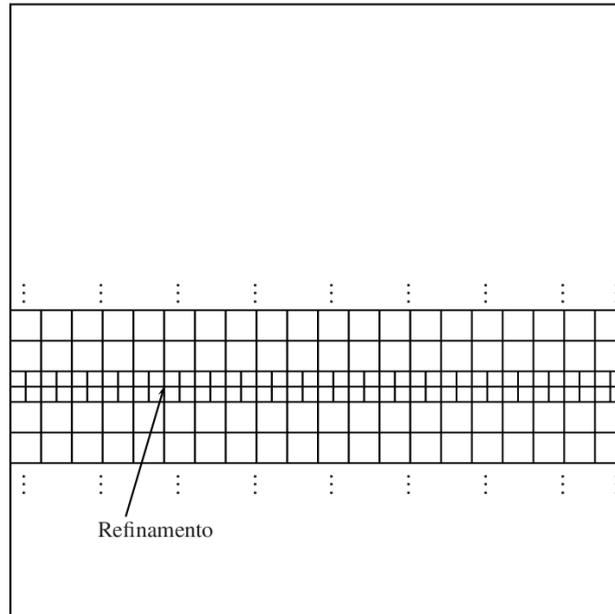


Figura 2.12: Ilustração esquemática do refinamento da malha.

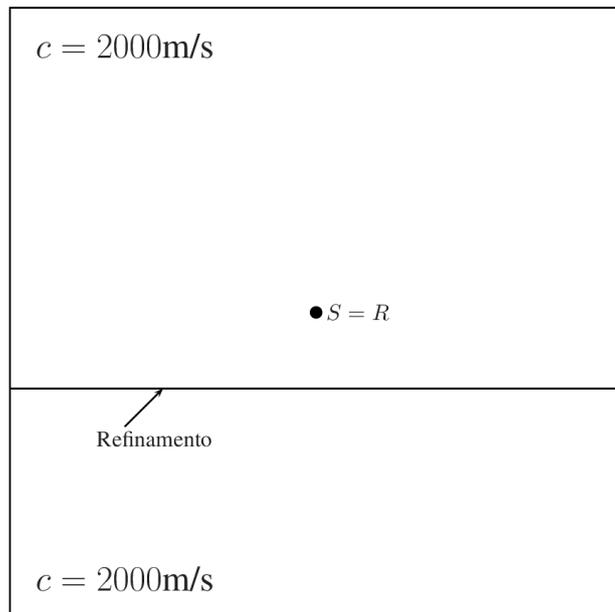


Figura 2.13: Modelo homogêneo com onda esférica

O método da máxima descida foi utilizado (WRIGHT e NOCEDAL, 1999) e foram encontrados os parâmetros ótimos $\alpha_1 = 0,673916$, $\alpha_2 = 0,204926222$, $\alpha_3 = 0,057463111$, $\alpha_4 = 0,057463111$ e $\alpha_5 = 0,006231556$.

A Figura 2.14 mostra o resultado obtido com a otimização. O modelo com o operador de primeira ordem apresentou $E = 0,005134$, já o operador com os parâmetros α otimizados apresentou $E = 0,000845$.

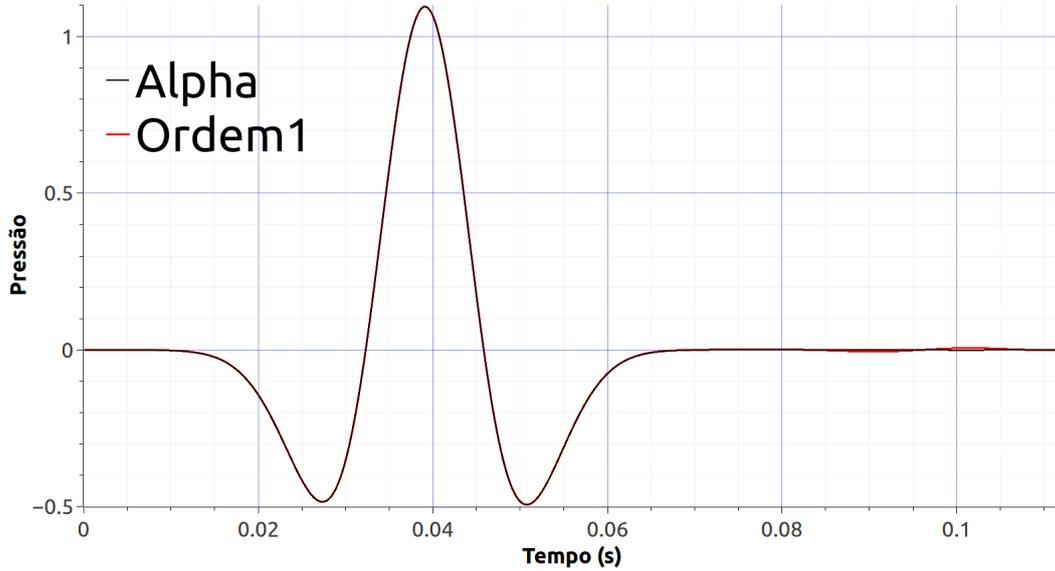


Figura 2.14: Comparação entre modelos de primeira ordem e com otimização de parâmetros para modelo com onda esférica.

Um experimento numérico com o uso de onda plana foi construído para comparar o esquema original com a nova formulação do gradiente. Foi construído um modelo sintético com grid A com $32 \times 32 \times 2048$ pontos. A malha OcTree foi iniciada com volumes de arestas medindo duas vezes o espaçamento do grid original e um refinamento com volumes com metade da aresta dos iniciados foi realizado em $z = 2304m$. Foram usados no modelo $c = 1500$ m/s e $\rho = 1000$ kg/m³. Foram colocadas fontes em todos pontos da seção $x_3 = 1536$ m da malha com o intuito de gerar uma onda plana. Condições de contorno adequadas foram aplicadas para que não houvessem reflexões, nem perda de energia. Foram usados os parâmetros $h = 1,25$ m, $\Delta t = 2.0 \times 10^{-4}$ s e $f_{corte} = 60$ Hz, de modo que $\alpha = 10$ e $\beta \approx 4$. No ponto $(24m, 24m, 1920m)$ foi inserido um receptor (Figura 2.15).

A reflexão numérica gerada foi maior do que no modelo com onda esférica. Os parâmetros α encontrados na otimização feita no modelo com onda esférica se mostraram também eficientes para redução do erro numérico, pois houve significativa redução. A Figura 2.16 mostra o resultado obtido. O modelo com o operador de primeira ordem apresentou $E = 0,020207$, já o operador com os parâmetros α apresentou $E = 0,001117$.

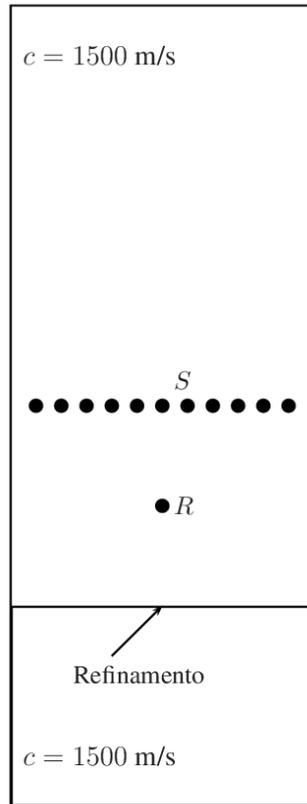


Figura 2.15: Modelo homogêneo com onda plana.

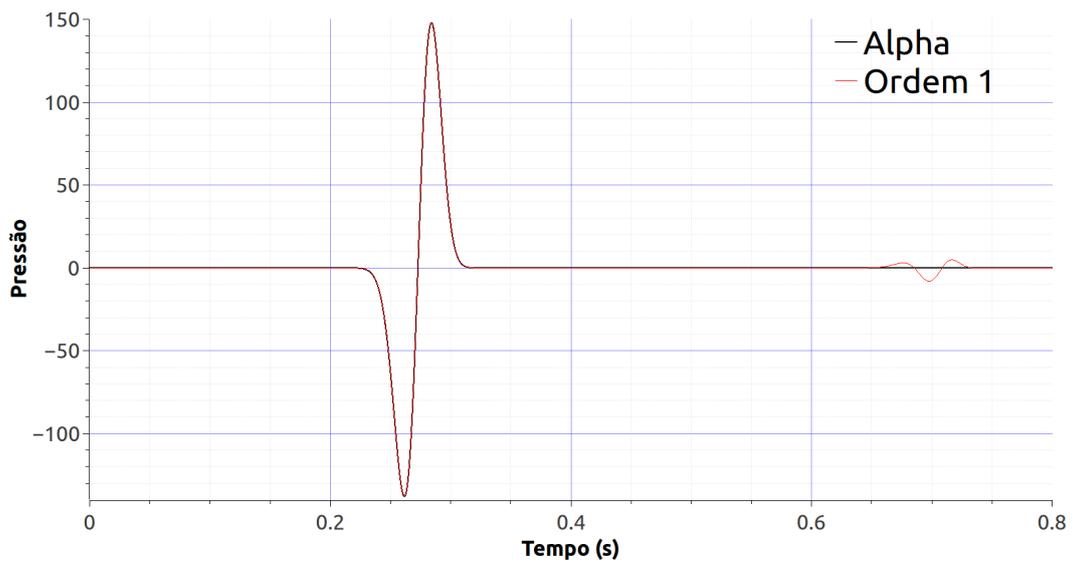


Figura 2.16: Comparação entre modelos de primeira ordem e com otimização de parâmetros para modelo com onda plana.

2.7 Formulação λ para o operador gradiente

Uma outra formulação para o operador gradiente foi desenvolvida. Nesta formulação foi usada uma estratégia para mudar o peso que cada face tem na construção deste operador. Para isso, a construção da matriz N , que é responsável por indicar quais faces pertencem a cada volume, foi ligeiramente alterada. Nos casos onde uma face k pertence a dois volumes com tamanhos diferentes v_i e v_j , $N_{i,k}$ e $N_{j,k}$ foram mudados de ± 1 para $\pm\lambda$. Em testes numéricos, verificou-se que no caso onde $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}$, o erro numérico nos testes descritos na subseção anterior tinha a mesma amplitude e fase invertida quando comparados aos erros com $\lambda = 1$. Empiricamente, foi encontrado $\lambda = \frac{2}{\sqrt{2+1}}$ como valor ótimo a partir da média harmônica de 1 e $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

Como exemplo, pode-se construir a matriz \mathbf{N}^λ e o novo operador gradiente para a malha da Figura 2.6.

$$\mathbf{N}^\lambda = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\lambda & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & \lambda & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{GRAD} = \begin{pmatrix} \frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h2^n} & \frac{1}{h2^n} \\ -\frac{1}{h2^{n+1}} & 0 & 0 \\ \frac{\lambda}{h2^n} & -\frac{\lambda}{h2^n} & 0 \\ \frac{\lambda}{h2^n} & 0 & -\frac{\lambda}{h2^n} \\ 0 & \frac{1}{h2^n} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{h2^n} \end{pmatrix}$$

Esta nova formulação tem como característica não diminuir a esparsidade das matrizes que compõe o esquema numérico. Apesar da simplicidade deste esquema, os resultados obtidos a partir dele foram satisfatórios em algumas situações. O

mesmos testes, com onda esférica e plana, realizados na seção 2.6.2 para o operador gradiente α foram também realizados com o operador gradiente λ . Os erros encontrados estão expressos na tabela 2.1.

Tabela 2.1: Comparação entre os erros obtidos com método de primeira ordem é os métodos α e λ .

	Ordem 1	α	λ
Onda Esférica	0.005134	0.000845	0.000563
Onda Plana	0.020207	0.001117	0.002013

2.8 Validação com modelo de difusão de calor

A seguir, será validada a formulação 3D utilizando um problema de difusão de calor com característica unidimensional utilizando a formulação λ para o gradiente. A discretização da equação do calor é apresentada em detalhes na Seção 3.1.

Uma barra homogênea com dimensões 4 cm \times 32 cm \times 4 cm, $k = 247$ W/mK, $\rho = 2700$ kg/m³ e $c = 900$ J/kgK. A malha OcTree regular \mathbf{M} será construída sobre um grid com dimensões 64 \times 512 \times 64 e será composta por 4096 volumes cúbicos com medida de lado 5mm (Figura 2.17).

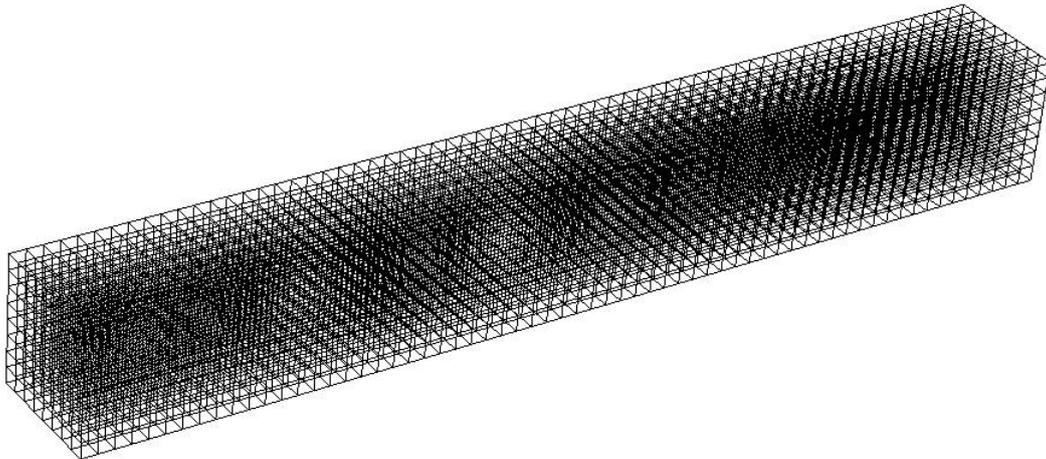


Figura 2.17: Malha OcTree homogênea.

Nas duas faces com menor área serão impostas condições de contorno essenciais, $\phi = 0^\circ\text{C}$. Os demais volumes da malha receberão condição inicial $\phi = 10^\circ\text{C}$. Além disso as demais faces do contorno receberão condição de contorno natural, com fluxo zero. Os resultados da simulação em uma linha reta no centro da barra em alguns instantes de tempo são apresentados na Figura 2.18. É importante analisar que a malha neste exemplo é regular sendo o esquema equivalente ao ESG (DI BARTOLO *et al.*, 2015).

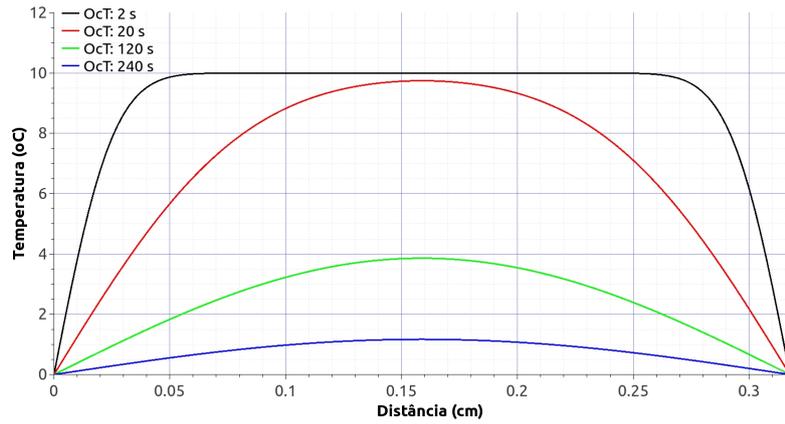


Figura 2.18: Solução numérica em alguns instantes de tempo.

Este problema em particular tem solução analítica conhecida (HABERMAN, 1983). A Figura 2.19 apresenta a comparação dos resultados obtidos com a modelagem numérica e a solução analítica em alguns instantes de tempo.

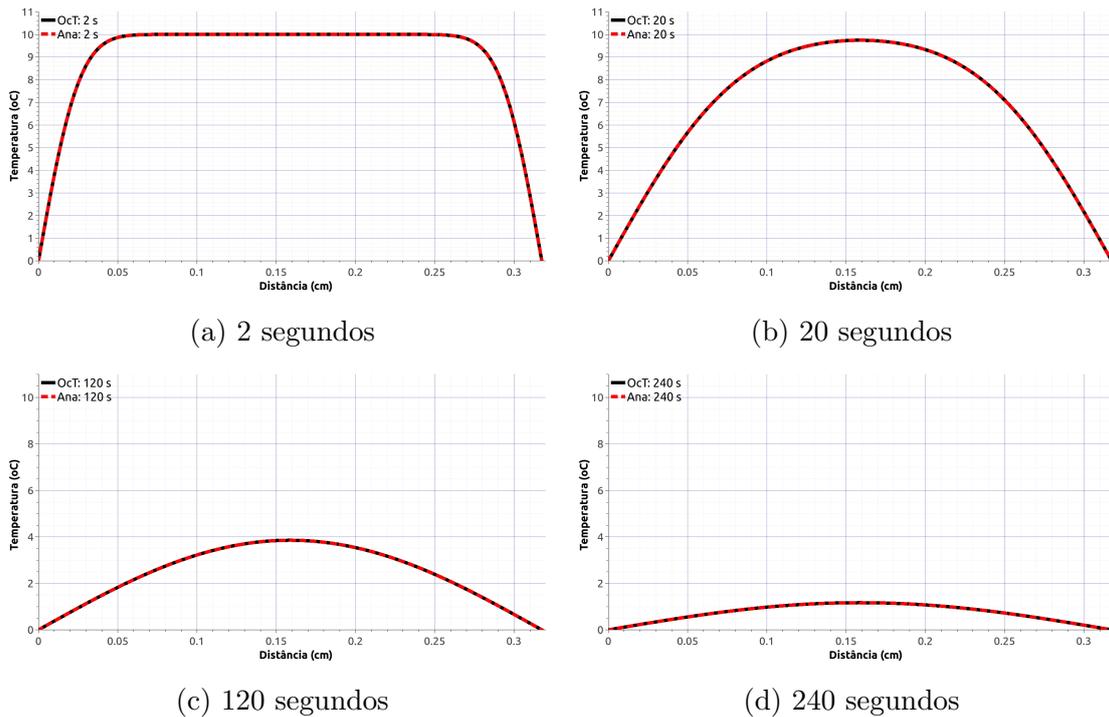


Figura 2.19: Comparação entre a solução numérica e a solução analítica em alguns instantes de tempo.

2.9 Descrição da construção das matrizes

Nesta seção serão descritas as construções das matrizes esparsas que formam os operadores diferenciais discretos construídos neste trabalho. Duas matrizes podem

ser consideradas como as mais importantes: a matriz \mathbf{M} , que representa a malha OcTree e a matriz \mathbf{N} , que indica a relação entre as faces e os volumes da malha OcTree. Um fato importante de se observar é que na construção de \mathbf{M} as faces não são consideradas, apenas quando a matriz \mathbf{N} é construída estes importantes elementos para o esquema numérico são determinados, como será descrito a seguir.

Construção de \mathbf{M}

A primeira matriz a ser construída é a que representará a malha OcTree. Para isso é necessário um grid A com $k_1 2^{\alpha_1} \times k_2 2^{\alpha_2} \times k_3 2^{\alpha_3}$ pontos, onde α_i, k_i são naturais diferentes de zero ($i = 1, 2, 3$), como visto na seção 2.3. Neste grid deverá estar armazenada alguma propriedade física relevante para a modelagem em questão.

Um valor inteiro $\iota \leq \min\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ deve ser escolhido para a malha OcTree ser iniciada com todos os volumes com lado 2^ι . Assim, no início do processo uma malha OcTree regular é construída como uma matriz tridimensional com valores nos índices $(r_1 2^\iota, r_2 2^\iota, r_3 2^\iota)$ iguais a 2^ι e todos os demais iguais a zero, r_1 variando de 0 até $k_1 2^{\alpha_1 - \iota}$, r_2 variando de 0 até $k_2 2^{\alpha_2 - \iota}$ e r_3 variando de 0 até $k_3 2^{\alpha_3 - \iota}$.

Por exemplo, para a pequena malha mostrada na Figura 2.2 foi escolhido $\iota = 2$ e a malha inicial é dada por dois volumes de lado 2^ι . A Figura 2.20 mostra esta malha inicial.

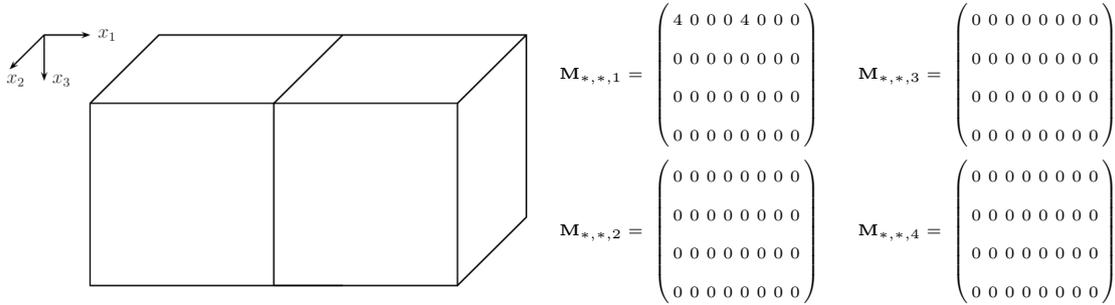


Figura 2.20: Configuração inicial de uma pequena malha OcTree.

A próxima etapa é composta da verificação do desvio médio da propriedade em todos os pontos do grid A que estão em cada volume da malha construída na primeira etapa (todos de lado 2^ι). Se em algum volume, na posição $(r_o 2^\iota, r_p 2^\iota, r_q 2^\iota)$, o desvio médio for maior do que um parâmetro empírico γ determinado, este volume deve ser dividido em oito outros de lado $2^{\iota-1}$. Neste caso a matriz M deve ser modificada alterando o valor na posição $(r_o 2^\iota, r_p 2^\iota, r_q 2^\iota)$ de 2^ι para $2^{\iota-1}$ e os valores nas posições $(r_o 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_p 2^\iota, r_q 2^\iota)$, $(r_o 2^\iota, r_p 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_q 2^\iota)$, $(r_o 2^\iota, r_p 2^\iota, r_q 2^\iota + 2^{\iota-1})$, $(r_o 2^\iota, r_p 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_q 2^\iota + 2^{\iota-1})$, $(r_o 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_p 2^\iota, r_q 2^\iota + 2^{\iota-1})$, $(r_o 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_p 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_q 2^\iota)$ e $(r_o 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_p 2^\iota + 2^{\iota-1}, r_q 2^\iota + 2^{\iota-1})$, de zero para $2^{\iota-1}$. Desta forma, oito novos volumes são gerados para a malha, todos de lado $2^{\iota-1}$, ocupando o espaço do volume original

com lado 2^l . Para exemplificar este processo, se for considerado uma diferença na propriedade física na malha da Figura 2.20 apenas no ponto $(x_1, x_2, x_3) = (7, 3, 3)$ o cubo do lado direito necessariamente será refinado e o resultado deste processo é apresentado na Figura 2.21.

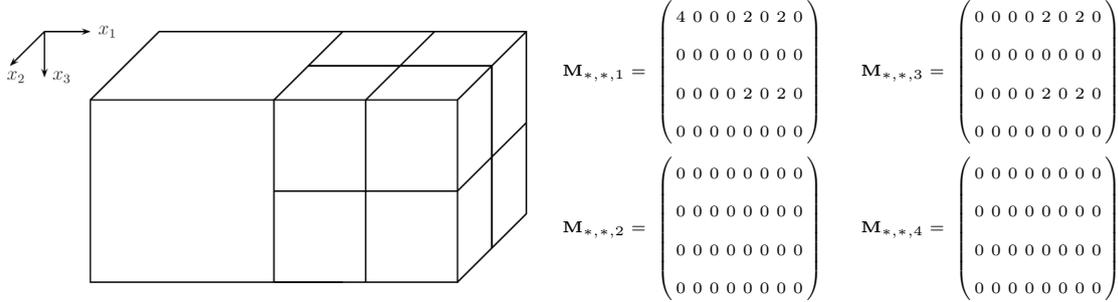


Figura 2.21: Primeiro refinamento em uma pequena malha Octree.

Este processo deve se repetir para os volumes de lado 2^{l-1} obtidos neste primeiro processo para gerar volumes de lado 2^{l-2} que por sua vez devem passar por este mesmo processo para gerar volumes de lado 2^{l-3} até que volumes do lado 2^0 sejam obtidos.

Com a malha M encontrada e refinada é necessário um processo de balanceamento, pois não é possível o uso dos operadores diferenciais discretos construídos neste capítulo se houver volumes vizinhos com relação entre as medidas dos lados maiores do que o dobro. Assim em toda a malha é verificado se volumes vizinhos têm relações entre suas medidas de lado inadequadas e novas divisões de volumes em oito são feitas para adequar a malha.

Para o exemplo apresentado nesta seção, temos a malha Octree resultante apresentada na Figura 2.22.

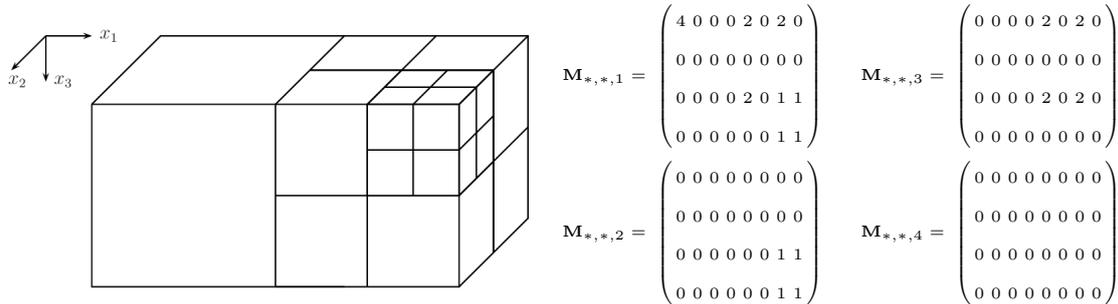


Figura 2.22: Pequena malha Octree.

Durante este processo uma matriz diagonal \mathbf{V}_0 é construída com número de linhas igual ao número de volumes da malha Octree, onde cada valor sobre a diagonal é igual ao lado do volume correspondente.

Construção de \mathbf{N}

A matriz \mathbf{N} será uma matriz bidimensional com número de linhas igual ao número de volumes da malha \mathbf{M} e número de colunas igual ao número de faces de \mathbf{M} . O número de faces será determinado juntamente com o processo de construção de \mathbf{N} . Uma numeração dos volumes é determinada em um processo auxiliar da construção de \mathbf{M} e uma numeração das faces será determinada na construção de \mathbf{N} .

Para a construção propriamente dita de \mathbf{N} , para cada volume com numeração v_i é verificado inicialmente se o mesmo está no contorno em cada um dos seis sentidos ou não. Se em algum dos sentidos o volume em questão estiver no contorno, uma face nesta direção é observada e numerada como f_j . Se a face estiver à esquerda, acima ou atrás do volume a matriz \mathbf{N} recebe valor -1 na posição (v_i, f_j) , se a face estiver à direita, abaixo ou a frente a matriz \mathbf{N} recebe valor 1 na posição (v_i, f_j) .

Se a face não estiver no contorno, então existe um outro volume da malha que a possui. Este volume é identificado como o volume numerado como v_k . Se o volume v_k tem o mesmo tamanho de lado que v_i então, a face é observada e numerada como f_j e se estiver à esquerda, acima ou atrás do volume v_i a matriz \mathbf{N} recebe valor -1 na posição (v_i, f_j) e valor 1 na posição (v_k, f_j) . Se a face estiver à direita, abaixo ou a frente do volume v_i , a matriz \mathbf{N} recebe valor 1 na posição (v_i, f_j) e valor -1 na posição (v_k, f_j) .

Se o volume v_k tem tamanho de lado igual à metade do tamanho do lado de V_i , quatro faces são observadas e numeradas como $f_{j1}, f_{j2}, f_{j3}, f_{j4}$, todas com lados na medida do lado de v_k . Se estas faces estiverem à esquerda, acima ou atrás do volume v_i a matriz \mathbf{N} recebe valor -1 na posição (v_i, f_j) e valor 1 nas posições $(v_k, f_{j1}), (v_k, f_{j2}), (v_k, f_{j3}), (v_k, f_{j4})$. Se estas faces estiverem a direita, abaixo ou a frente do volume v_i , a matriz \mathbf{N} recebe valor 1 na posição (v_i, f_j) e valor -1 nas posições $(v_k, f_{j1}), (v_k, f_{j2}), (v_k, f_{j3}), (v_k, f_{j4})$. Dado o grande número de volumes e faces no exemplo apresentado na subseção que descreve a construção de \mathbf{M} , não será possível apresentar a matriz \mathbf{N} desta malha. Em lugar disto, pode-se ver a matriz \mathbf{N} de um exemplo 2D apresentado na Figura 2.6 na seção 2.4.

Durante este processo, uma matriz diagonal \mathbf{F}_0 é construída com número de linhas igual ao número de faces da malha OcTree, onde cada valor sobre a diagonal é igual ao lado da face correspondente.

Capítulo 3

Simulação computacional de hipertermia com nanopartículas

Os tratamentos com o uso de nanotecnologia estão emergindo como uma nova fronteira em terapias para diversos tipos de câncer (HUANG e HAINFELD, 2013; MINKOWYCZ *et al.*, 2012). Os procedimentos de hipertermia têm um fator limitante principal: o aumento correto da temperatura no tecido vivo, que em alguns casos pode causar efeitos indesejáveis, como danos irreversíveis ao tecido saudável. O sucesso deste tipo de tratamento depende do aumento da temperatura no tecido cancerígeno por um período de tempo específico de forma segura e suficiente para causar danos irreversíveis ao tecido canceroso. Assim, ferramentas numéricas e computacionais podem ser utilizadas em simulações de tratamento com hipertermia com o objetivo de prever o campo de temperatura e estimar o dano causado pelo procedimento, com o intuito de orientar o especialista para um procedimento médico seguro e eficiente.

Entre as diferentes técnicas de hipertermia, uma baseada em nanopartículas tem recebido grande atenção devido a seu potencial e características distintas, como tamanho ultra pequeno das partículas (tamanhos médios abaixo de 100 nm), alta reatividade e interações únicas com sistemas biológicos (MINKOWYCZ *et al.*, 2012). Desta forma, o fluido base biocompatível com nanopartículas pode ser direcionado diretamente no tumor de forma não invasiva. Uma das principais questões relativas à hipertermia com nanopartículas decorre da maneira correta de controlar a quantidade de calor gerado e o aumento de temperatura. Assim, vários dispositivos eletromagnéticos diferentes foram desenvolvidos para esse fim (MOROS, 2013).

Ao longo das últimas décadas, tem havido um aumento no número de pesquisadores que trabalham na aplicação de métodos numéricos para a simulação de uma variedade de problemas médicos envolvendo geometrias complexas, isto com a adoção de métodos capazes de lidar com malhas não estruturadas. Os métodos mais utilizados são o método dos elementos finitos (MEF) (ZIENKIEWICZ e MORGAN,

1983) e o método dos volumes finitos (MVF) (BARTH, 1992).

O MVF é muito flexível para lidar com qualquer tipo de volume de controle e qualquer tipo de malha não estruturada. No entanto, os procedimentos de geração de malhas não estruturadas para geometrias complexas ainda são muito demorados. Esta dificuldade, no entanto, pode ser minimizada em parte pelo uso de malhas OcTree, que possuem várias vantagens em relação ao uso de recursos computacionais e estrutura de dados. No método OcTree, a descrição de geometrias complexas é realizada por cubos (volumes) regulares e o refinamento ocorre somente em certas regiões que precisam de resolução maior (volumes menores), enquanto outras podem ser descritas com volumes maiores, dando origem a uma malha não conforme. O uso de matrizes esparsas como a estrutura de dados da malha OcTree permite a construção de operadores diferenciais discretos simples e eficientes. Esta abordagem é amplamente utilizada para modelar outros fenômenos, como a dinâmica dos fluidos (POPINET, 2003), o eletromagnetismo (HABER e HELDMANN, 2007; HORESH e HABER, 2011) e ondas sísmicas (VALENTE *et al.*, 2015).

Uma grande quantidade de estudos recentes utilizaram o MVF para construir modelos computacionais da equação de Pennes em muitas aplicações diferentes. Das *et al.* (DAS e MISHRA, 2013, 2014; DAS *et al.*, 2013) realizaram um estudo para estimar a localização e as dimensões dos tumores a partir da distribuição da temperatura da superfície das regiões do corpo humano. Gwon (GWON, 2015) empregou o MVF para simular numericamente os efeitos da terapia de contraste. A terapia térmica para o tratamento de vários tipos de câncer também é o foco de numerosos estudos (NÓBREGA e COELHO, 2017; ZHANG, 2005).

Neste capítulo é desenvolvida uma estratégia computacional através do uso do MVF para resolver a equação de transferência de calor de Pennes em três dimensões com malhas OcTree. A técnica apresenta uma grande redução no número de graus de liberdade no modelo estudado, uma vez que regiões com soluções suaves podem ser descritas com grandes volumes de controle, enquanto em regiões onde há soluções de alto gradiente ou onde geometrias complexas precisam ser descritas com precisão, podem ser usados volumes menores. Portanto, o uso de recursos computacionais, bem como o tempo de processamento, é bastante reduzido.

Na primeira seção deste capítulo será apresentada a discretização da equação do calor para malhas OcTree. O segunda seção deste capítulo terá como foco a simulação computacional de hipertermia com nanopartículas.

3.1 Modelagem da condução do calor

Usando os operadores construídos no capítulo 2, será feita uma discretização para malhas OcTree da equação do calor

$$-\nabla \cdot (\mathbf{q}) = \rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla \phi, \quad (3.2)$$

onde k é a condutividade térmica, ρ é a massa específica e c o calor específico do material, \mathbf{q} é o fluxo e ϕ é a temperatura.

3.1.1 Discretização em uma malha OcTree

Considerando ϕ uma distribuição de temperatura em uma malha OcTree \mathbf{M} , define-se ϕ_i como a temperatura no volume V_i de \mathbf{M} . Defini-se também uma matriz diagonal \mathbf{A} , com dimensões $n_v \times n_v$, onde $A_{i,i}$ é definido como o inverso do produto ρc em cada volume V_i e a matriz diagonal \mathbf{K} , com dimensões $n_f \times n_f$, com $K_{i,i}$ definido pela média harmônica da condutibilidade térmica dos volumes vizinhos que possuem como uma de suas faces F_i .

Pode-se reescrever a equação anterior como

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{k+1} - \phi^k}{\Delta t} &= \frac{1}{h} \mathbf{A} \mathbf{V}_0^{-1} \mathbf{N} \mathbf{F}_0^2 \left(\frac{1}{h} \mathbf{K} \mathbf{F}_0^{-1} \mathbf{N}^t \right) \phi^k \\ \phi^{k+1} &= \frac{\Delta t}{h^2} (\mathbf{A} \mathbf{V}_0^{-1} \mathbf{N} \mathbf{F} \mathbf{K} \mathbf{N}^t) \phi^k + \phi^k, \end{aligned} \quad (3.3)$$

e obter uma formulação explícita para a equação da Condução do Calor. Definindo $\mathbf{X} = \frac{\Delta t}{h^2} (\mathbf{A} \mathbf{V}_0^{-1} \mathbf{N} \mathbf{F} \mathbf{K} \mathbf{N}^t)$ podemos escrever a equação como

$$\phi^{k+1} = \mathbf{X} \phi^k + \phi^k. \quad (3.4)$$

3.1.2 Condições de contorno

Faz-se necessário definir a maneira de aplicar a esta formulação as condições de contorno essenciais (imposição de temperatura) e as naturais (imposição de fluxo de calor). As condições de contorno serão definidas nos volumes que estão nas bordas de \mathbf{M} .

Dado $M_f = \{V_{f_1}, V_{f_2}, \dots, V_{f_n}\}$ um subconjunto do conjunto de todos os volumes na borda de \mathbf{M} , pode-se definir uma condição de contorno essencial em M_f simplesmente multiplicando as linhas f_1, f_2, \dots, f_n da matriz \mathbf{X} por zero e colocando o valor 1 na diagonal principal. Desta maneira, a equação (3.4) quando aplicada aos

volumes de M_f mantêm o mesmo valor do passo anterior, portanto a condição inicial nestes volumes será mantida em todas as iterações.

Para se aplicar condições de contorno naturais, precisa-se observar que a malha \mathbf{M} tem todas as faces de sua fronteira ortogonais a eixos coordenados, assim a direção normal a cada face da fronteira será sempre a direção de um eixo coordenado. Esta propriedade se mostra muito conveniente, pois fazer que $\frac{\partial T}{\partial \bar{n}}(V_f) = 0$ significará que a temperatura no volume vizinho pela direção normal a fronteira deverá ser imposta ao volume na fronteira.

3.1.3 Exemplo - Uma barra heterogênea

Neste exemplo, a malha OcTree será construída sobre um grid com dimensões $64 \times 512 \times 64$. A barra será composta por dois tipos diferentes de materiais em três camadas. A primeira camada terá $4 \text{ cm} \times 2 \text{ cm} \times 4 \text{ cm}$, com propriedades térmicas $k = 1,15 \text{ W/mK}$, $\rho = 2000 \text{ kg/m}^3$ e $c = 0,29 \text{ W/kgK}$, a segunda camada $4 \text{ cm} \times 28 \text{ cm} \times 4 \text{ cm}$, com propriedades térmicas $k = 0,2 \text{ W/mK}$, $\rho = 1300 \text{ kg/m}^3$ e $c = 0,27 \text{ W/kgK}$ e a terceira camada será idêntica a primeira. Os volumes desta malha terão tamanhos distintos. Os volumes serão gradativamente menores até chegar ao ponto onde a barra muda de propriedade.

A malha OcTree gerada neste exemplo tem 27.392 volumes com diferentes dimensões. A Figura 3.1 mostra uma parte da malha gerada neste exemplo com o refinamento próximo da mudança de propriedade do material. A Figura 3.2 mostra os resultados da simulação no eixo da barra.

3.2 Hipertermia com nanopartículas

A hipertermia com nanopartículas pode ser utilizada como um tratamento não-invasivo para destruir tumores em tecidos vivos. O objetivo é aquecer o tumor até um limiar de temperatura acima do normal fisiológico por determinado tempo, a fim de destruir suas células, mantendo o dano ao tecido saudável tão mínimo quanto possível. Este processo pode ser modelado matematicamente considerando equações que descrevem a transferência de calor no tecido vivo. A equação de Pennes é amplamente empregada devido à sua simplicidade e concordância geral com dados experimentais (MINKOWYCZ, 1996). A equação de Pennes pode ser escrita como:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + W_b(\phi)c_b(\phi_a - \phi) + Q_m + Q_r = \rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla \phi \quad (3.6)$$

$$\phi = \bar{\phi} \quad (3.7)$$

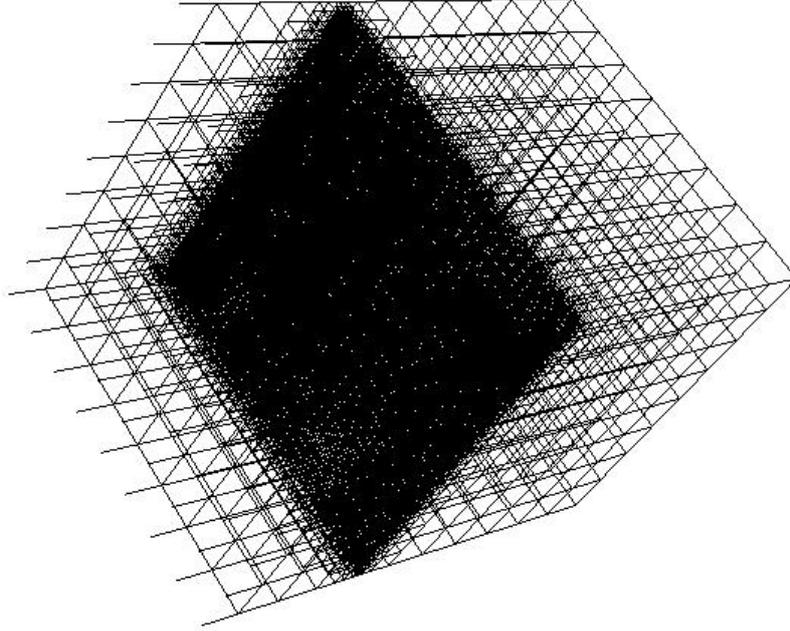


Figura 3.1: Detalhe de uma malha OcTree heterogênea.

$$q_n = \bar{q} \quad (3.8)$$

$$\phi(\cdot, 0) = \phi_0 \quad (3.9)$$

onde ϕ representa o campo de temperatura e $\bar{\phi}$ e \bar{q} são condições de contorno apropriadas e ϕ_0 uma condição inicial. As propriedades térmicas são representadas por k, ρ, c, c_b com índice subscrito b denotando sangue. Além disso, ϕ_a denota a temperatura arterial, enquanto Q_m e Q_r representam, respectivamente, a taxa volumétrica de geração de calor metabólico e a taxa volumétrica de geração de calor devido ao calor externo oriundo das nanopartículas. Finalmente, $W_b(\phi)$ é a perfusão sanguínea. Este termo é responsável por modelar a transferência de calor convectivo entre o tecido e o fluxo sanguíneo sob o pressuposto de pequenos capilares e equilíbrio térmico local. As expressões para $W_b(\phi)$ usadas neste trabalho estão expostas na Tabela 3.1 (LOUREIRO *et al.*, 2014; REIS *et al.*, 2016).

3.2.1 Nanopartículas: fonte de calor

Após a injeção das nanopartículas, um campo magnético externo é aplicado para excitar as nanopartículas e a quantidade de calor gerada é simulada neste trabalho através da Eq. (3.10), que é independente do tempo e é uma aproximação de um perfil gaussiano (SALLOUM *et al.*, 2008).

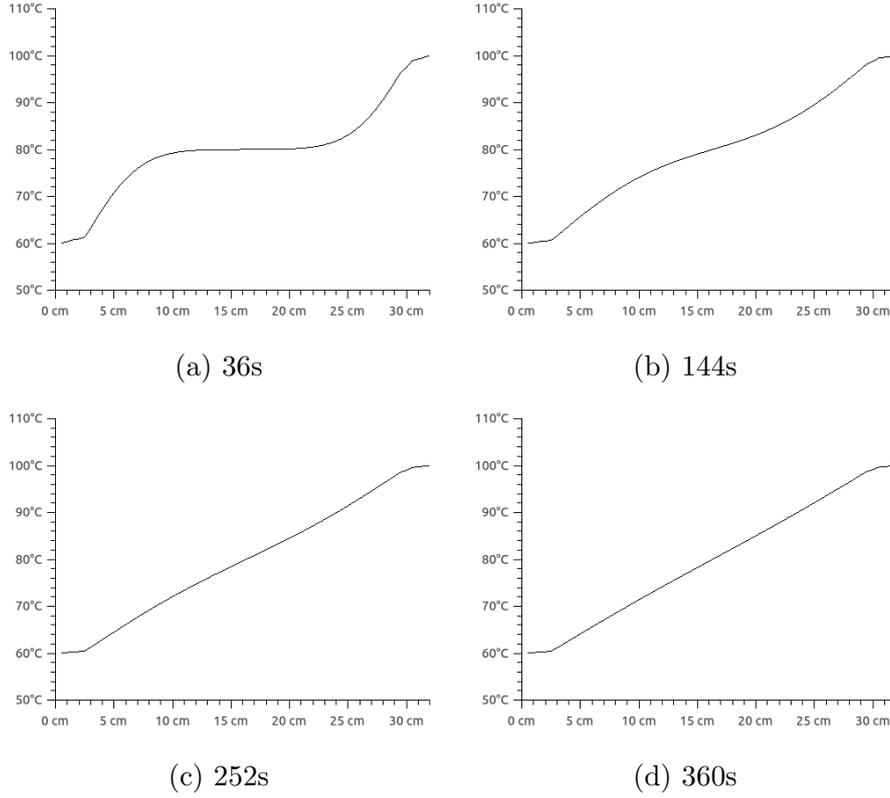


Figura 3.2: Barra heterogênea

$$Q_r = \sum_{i=1}^n A_i e^{-r_i^2/r_{i0}^2} \quad (3.10)$$

onde $r_i = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$ é a distância radial do ponto de injeção i , r_{i0} é a distância coberta pelo calor gerado, A_i é o valor máximo da taxa de geração de calor volumétrica e n é o número total de pontos de injeção.

Entre muitos tipos de nanopartículas com biocompatibilidade, os compostos de óxido de ferro magnetita Fe_3O_4 e maghemita $\gamma-Fe_2O_3$ são bem estudados e seguros (HILGER *et al.*, 2005; MOROZ *et al.*, 2002). O sucesso do tratamento consiste em aumentar a temperatura no tecido cancerígeno acima de $43^\circ C$ por um período de tempo específico de forma não invasiva. Isto é realizado pela injeção de um fluido base biocompatível com nanopartículas em vários lugares diferentes e com diferentes concentrações, o que permite um melhor tratamento de tumores com formas irregulares, comprometendo minimamente o tecido saudável. Desta forma, a terapia com hipertermia por nanopartículas magnéticas tem um excelente potencial para ser usado sozinho ou em conjunto com outros tratamentos convencionais.

Tabela 3.1: Taxa de perfusão sanguínea

Tecido	Função (kg/s/m³)
Pele	$W_P = \begin{cases} 0,4 + 1,4 \exp\left(-\frac{(\phi - 45.0)^2}{14.0}\right) & \phi \leq 45.0^\circ C \\ 1.8 & \phi > 45.0^\circ C \end{cases}$
Gordura	$W_G = \begin{cases} 0,36 + 0,36 \exp\left(-\frac{(\phi - 45.0)^2}{12.0}\right) & \phi \leq 45.0^\circ C \\ 0.72 & \phi > 45.0^\circ C \end{cases}$
Músculo	$W_M = \begin{cases} 0,45 + 3,55 \exp\left(-\frac{(\phi - 45.0)^2}{12.0}\right) & \phi \leq 45.0^\circ C \\ 4.0 & \phi > 45.0^\circ C \end{cases}$
Tumor	$W_T = \begin{cases} 0,833 & \phi < 37.0^\circ C \\ 0.833 - \frac{(\phi - 37.0)^{4.8}}{5438.0} & 37.0 \leq \phi \leq 42.0^\circ C \\ 0.416 & \phi > 42.0^\circ C \end{cases}$

3.2.2 Discretização da equação de Pennes

A discretização da equação de Pennes pode ser realizada usando os operadores construídos no Capítulo 2. A geração de calor metabólica e a fonte de calor gerada pelas nanopartículas nos volumes de controle da malha são representadas, respectivamente, pelos vetores \mathbf{q}_m e \mathbf{q}_r com dimensões $n_v \times 1$, obtidas considerando seus valores no centro de cada volume de controle. Foram definidas novas matrizes diagonais, a saber, as matrizes \mathbf{C} e $\bar{\mathbf{C}}(\phi)$ com dimensões $n_v \times n_v$, onde $C_{i,i} = (\rho_i c_i)^{-1}$ e $\bar{C}_{i,i} = W(\phi_i)(c_b)_i / (\rho_i c_i)$ para cada V_i ; a matriz \mathbf{L} com dimensões $n_f \times n_f$, onde $L_{i,i}$ é a média harmônica das condutividades térmicas dos volumes vizinhos que têm F_i como face. Finalmente, usando os operadores discretos, podemos escrever

$$(\mathbf{C}\mathbf{V}_o^{-1}\mathbf{N}\mathbf{F}_o^2\mathbf{L}\mathbf{F}_o^{-1}\mathbf{N}^t)\phi + \bar{\mathbf{C}}(\phi)(\phi_a - \phi) + \mathbf{C}\mathbf{q}_m + \mathbf{C}\mathbf{q}_r = \frac{\partial\phi}{\partial t}. \quad (3.11)$$

Escrevendo a matriz $\mathbf{C}\mathbf{V}_o^{-1}\mathbf{N}\mathbf{F}_o^2\mathbf{L}\mathbf{F}_o^{-1}\mathbf{N}^t = \mathbf{Y}$, os produtos $\mathbf{C}\mathbf{q}_m = \mathbf{m}$ e $\mathbf{C}\mathbf{q}_r = \mathbf{r}$, a Equação (3.11) pode ser reescrita como.

$$\mathbf{Y}\phi + \bar{\mathbf{C}}(\phi)(\phi_a - \phi) + \mathbf{m} + \mathbf{r} = \frac{\partial\phi}{\partial t}, \quad (3.12)$$

onde ϕ é o vetor com dimensões $n_v \times 1$ que tem a temperatura nos volumes de controle com dimensões $n_v \times 1$.

3.2.3 Integração no tempo

Para solução da Equação (3.12) dois tipos de integração no tempo foram desenvolvidas, um esquema explícito de diferenças finitas e um implícito com o uso do método de Picard para linearizar o sistema de equações não-lineares. Para este fim, em primeiro lugar, o intervalo de tempo de interesse I é particionado em N passos de tempo iguais, isto é, $[0, t_f] = \bigcup_{k=0}^{N-1} [t_k, t_{k+1}]$ com $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = t_f$, $\Delta t = t_{k+1} - t_k = t_f/N$ e $t_k = (k) \Delta t$. Assim, o esquema explícito usando diferença finita regressiva REDDY (2014); ZIENKIEWICZ e MORGAN (1983) pode ser escrita como:

$$\phi^{k+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{Y} - \Delta t \bar{\mathbf{C}}(\phi^k)) \phi^k + \Delta t \mathbf{R}^k \quad (3.13)$$

onde $\mathbf{R}^k = \bar{\mathbf{C}}(\phi^k) \phi_a + \mathbf{m} + \mathbf{r}^k$ e $\phi^k \equiv \phi(t_k)$. Por outro lado, o esquema implícito usando a diferença finita progressiva em conjunto com o método Picard (REDDY, 2014) pode ser escrito como:

$$(\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{Y} + \Delta t \bar{\mathbf{C}}(\phi^{k+1,p})) \phi^{k+1,p+1} = \phi^k + \Delta t \mathbf{R}^{k+1,p} \quad (3.14)$$

onde $p \in \mathbb{Z}^+$ significa iteração de Picard e $\mathbf{R}^{k+1,p} = \bar{\mathbf{C}}(\phi^{k+1,p}) \phi_a + \mathbf{m} + \mathbf{r}^{k+1}$.

Devido à estabilidade condicional da abordagem explícita, o tamanho do passo de tempo para o esquema usando uma malha OcTree é prontamente estimado considerando o critério do método de diferença finita padrão (MDF). No MDF, sob o pressuposto de um meio linear e isotrópico, um critério de estabilidade da forma $\frac{\Delta t}{\rho c} \left(\frac{3k}{h_{min}^2} + \frac{W_b c_b}{4} \right) \leq \frac{1}{2}$ deve ser satisfeito para garantir resultados estáveis, onde h_{min} é o tamanho mínimo da borda da malha inteira (REIS *et al.*, 2016). Pode-se observar que esta restrição pode levar a um pequeno tamanho de passo de tempo para a análise em uma grande quantidade de casos, exigindo um número excessivo de passos de tempo e, portanto, aumentando o esforço computacional. Por outro lado, na abordagem implícita, um algoritmo incondicionalmente estável é estabelecido. Embora, não haja restrições para o tamanho do passo de tempo, a computação vetorial da temperatura nodal para cada etapa do tempo requer um procedimento iterativo devido ao método Picard e, como consequência, a solução de $p + 1$ sistemas lineares precisa ser realizada. Ao contrário do esquema explícito, o procedimento iterativo no esquema implícito permite um controle do resíduo das equações que nos permite obter resultados confiáveis assim que o critério de convergência é cumprido, desde que o passo de tempo seja de tamanho adequado. Além disso, o número total de iterações de Picard está diretamente relacionado ao tamanho do passo de tempo, bem como ao grau de não-linearidade. O critério de convergência definido como

$\frac{\|\phi^{k+1,p+1} - \phi^{k+1,p}\|}{\|\phi^{k+1,p+1}\|} < \varepsilon$ é adotado aqui no método Picard para cada passo de tempo.

3.2.4 A Função Dano

O dano em um tecido vivo pode ser entendido como o fim das funções biológicas das moléculas das células e de fluidos extracelulares deste tecido, que pode ocorrer por consequência da elevação da temperatura (DILLER, 1992). Uma equação usada para simulação do dano do tecido em função da temperatura e do tempo de exposição é derivada da equação de Arrhenius (WELCH, 1985) e pode ser expressa como:

$$\Omega = A \int_{t_i}^{t_f} \exp(-E/RT) dT \quad (3.15)$$

onde t_i é o instante inicial de exposição, t_f o instante final de exposição, A é uma constante ($3 \times 10^{98} \text{s}^{-1}$), E é a energia de ativação para a reação ($6,27 \times 10^5 \text{ J/mol}$), R é a constante universal dos gases ($8,314 \text{ J/mol K}$), T é a temperatura (K) em função da posição e do tempo e Ω é o critério de dano. Para um dano irreversível WELCH (1985), a partir de experiência com animais, concluiu que o valor $\Omega = 1$ é um limite adequado.

3.2.5 Simulações numéricas e discussões

Nesta seção, a metodologia proposta é validada pela análise de alguns problemas de hipertermia tridimensional e os resultados são comparados aos obtidos com o MDF padrão. Para acelerar o tempo de execução, foram utilizadas ferramentas computacionais baseadas na biblioteca CUSP (BELL e GARLAND, 2012) para processamento em GPU, onde as manipulações algébricas de matrizes esparsas são realizadas.

Modelo com três camadas de tecido e tumor elipsoidal

O processo de hipertermia será simulado em um domínio computacional de dimensões $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,05 \text{ m}$, com três camadas (derme, gordura e músculo) e uma região com a forma de um elipsoide que simula um tumor, conforme descrito na Fig. 3.3. A malha OcTree foi construída com 58.783 volumes cúbicos de tamanhos de aresta $0,00078125 \text{ m}$, $0,0015625 \text{ m}$, $0,003125 \text{ m}$ e $0,00625 \text{ m}$ (Figuras 3.4 e 3.5).

A malha OcTree construída é capaz de descrever a geometria do modelo estudado com boa resolução pois um refinamento é claramente observado no tumor e nas camadas de gordura e pele. Vale ressaltar que, para uma malha regular representar essa mesma geometria com resolução equivalente, seria necessário uma malha composta de 1.048.576 volumes de controle com tamanho de borda $0,00078125 \text{ m}$,

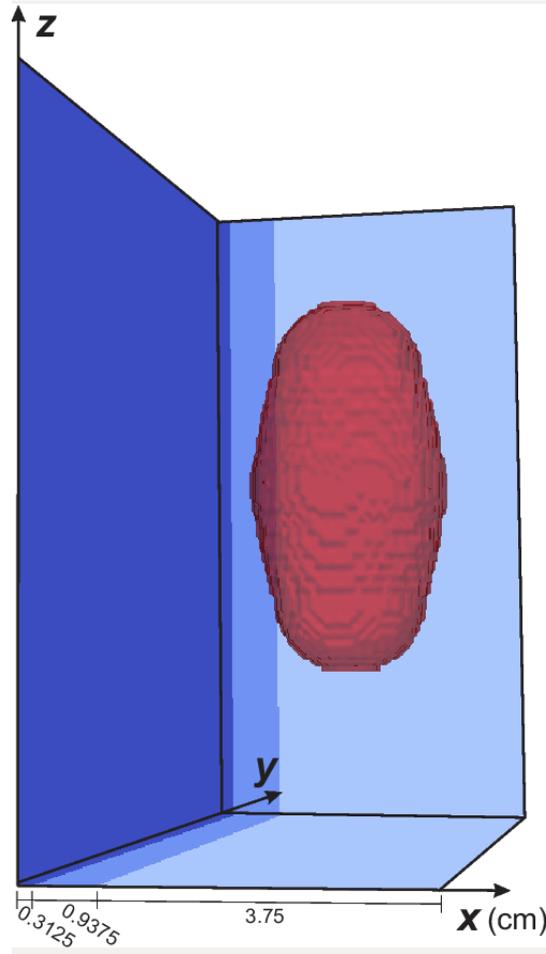


Figura 3.3: Domínio da experiência numérica. Camadas de derme, gordura e músculo e tumor na forma de elipsoide.

que é mais do que 17 vezes o número de graus de liberdade apresentado nesta malha OcTree.

Na borda com $x = 0,05$ m, uma temperatura $\phi = 37^\circ$ C é prescrita para simular a temperatura do corpo, enquanto um fluxo de calor nulo é prescrito nas bordas restantes. A temperatura arterial ϕ_a também é definida como 37° C. Os valores dos parâmetros foram retirados da literatura (LANG *et al.*, 1999; LOUREIRO *et al.*, 2014; MINKOWYCZ, 1996; REIS *et al.*, 2016) e são apresentados na Tabela 3.2. Quanto à fonte de calor, três posições para a injeção de nanopartículas são consideradas aqui com os parâmetros mostrados na Tabela 3.3.

Para determinar a condição inicial, o problema linear no regime permanente foi resolvido sem o uso da fonte gerada pelas nanopartículas (sem Q_r , aqui apenas Q_m é considerado) e considerando os valores médios W_b^* das correspondentes funções não lineares W_b . O sistema não-simétrico de equações obtido é resolvido pelo solver gradiente biconjugado estabilizado da biblioteca CUSP (BELL e GARLAND, 2012). A Figura 3.6 mostra o campo de temperatura em uma Fatia plana $y = 0,05$ m com a condição inicial calculada. Vale lembrar que, no esquema numérico adotado, a

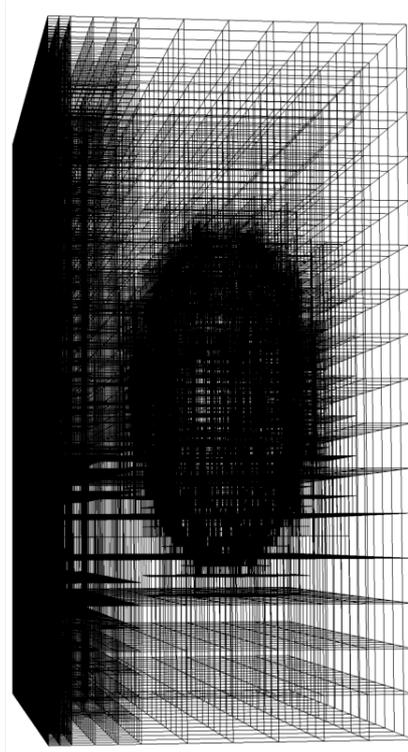


Figura 3.4: Malha OcTree com 58.783 volumes de controle com quatro tamanhos diferentes: Malha 3D.

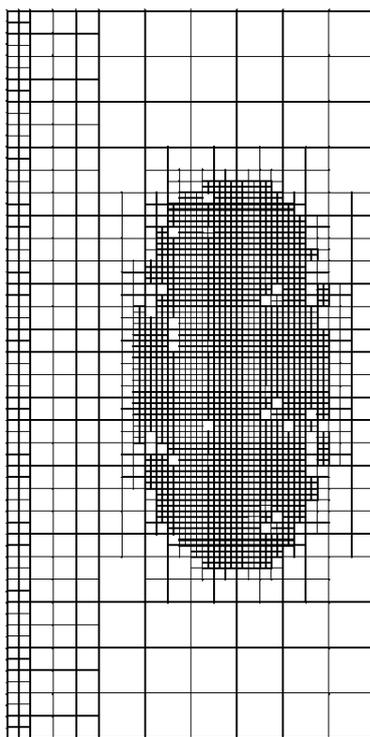


Figura 3.5: Malha OcTree com 58.783 volumes de controle com quatro tamanhos diferentes: Fatia plana em $y = 0,05$ m.

Tabela 3.2: Parâmetros físicos

Símbolo	Unidade	Derme	Gordura	Músculo	Tumor
Q_m	W/m ³	420,0	420,0	420,0	4200,0
c	J/kg°C	3600,0	2500,0	3800,0	4200,0
c_b	J/kg°C	4200,0	4200,0	4200,0	4200,0
κ	W/m°C	0,40	0,21	0,45	0,55
ρ	kg/m ³	1200,0	1000,0	1000,0	1000,0
W_b	kg/s/m ³	W_P	W_G	W_M	W_T
W_b^*	kg/s/m ³	1,3641	0,5049	1,8789	0,7579

Tabela 3.3: Parâmetros da fonte

Posição	A_i	r_{i0}
(0,030, 0,050, 0,050)	$3,3 \times 10^6$ W/m ³	$2,4 \times 10^{-3}$ m
(0,030, 0,050, 0,066)	$3,2 \times 10^6$ W/m ³	$2,3 \times 10^{-3}$ m
(0,030, 0,050, 0,034)	$3,2 \times 10^6$ W/m ³	$2,3 \times 10^{-3}$ m

temperatura é constante em cada volume de controle e todas as figuras do campo de temperatura são apresentadas sem qualquer procedimento de interpolação. Conforme discutido por REIS *et al.* (2016), as soluções não lineares e lineares para este conjunto de parâmetros diferem muito ligeiramente.

Foram utilizados três esquemas numéricos para simular o mesmo fenômeno físico, um usando o método explícito identificado por “Exp” e outro com o método implícito identificado por “Imp”, ambos usando a malha OcTree com quatro tamanhos diferentes de volumes de controle. O solver gradiente biconjugado estabilizado com pré-condicionador de Jacobi também foi empregado no implícito e foram necessárias entre 50 e 70 iterações para a convergência de cada sistema com uma tolerância de 10^{-6} . Para fins de comparação, um outro esquema identificado por “Ref” com uso de uma malha conforme regular com espaçamento de grade correspondente ao tamanho da menor borda da malha OcTree também é empregado. Neste último esquema, pode-se mostrar que existe uma equivalência completa do método de volume finito com o método de diferenças finitas com malha intercalada (DORMY e TARANTOLA, 1995a). Na verdade, este esquema possui equivalência completa com o chamado esquema de malha intercalada equivalente, um esquema formulado usando apenas um campo (temperatura neste caso) que considera implicitamente os fluxos (DI BARTOLO *et al.*, 2012; DI BARTOLO *et al.*, 2015). Os parâmetros numéricos adotados estão na Tabela 3.4. É importante ressaltar que o mesmo passo de tempo é empregado para os métodos explícito e de referência, devido ao menor espaçamento. Na verdade, embora a malha OcTree contenha volumes de tamanhos diferentes, o menor desses volumes deve ser considerado para encontrar um valor adequado para o tamanho do passo de tempo (Δt) devido à restrição de estabilidade do método

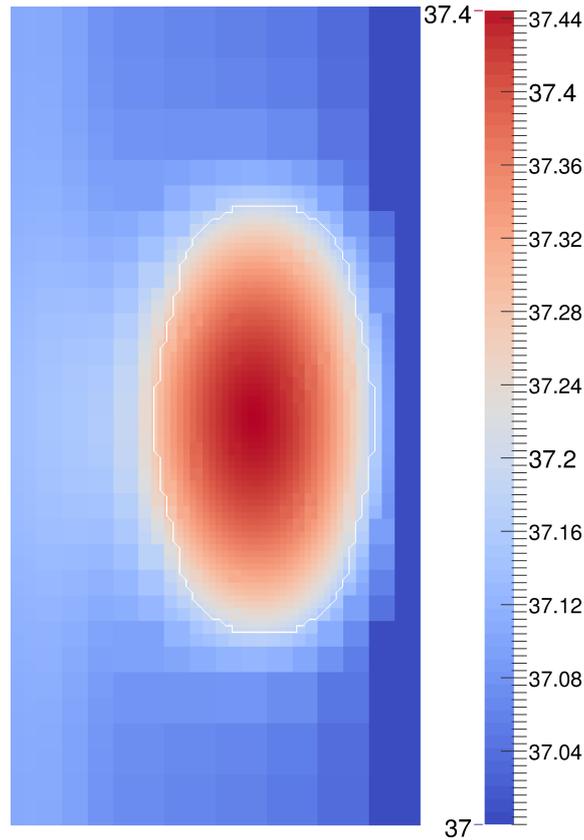


Figura 3.6: Fatia plana em $y = 0,05$ m da condição inicial obtida pela solução do problema no regime permanente sem a fonte gerada pelas nanopartículas. Escala de temperatura em graus célsius.

explícito. Isso produz um valor de Δt muito pequeno, levando a uma simulação demorada. A estratégia de usar um método implícito, por outro lado, supera essa desvantagem. Os métodos explícitos e implícitos levaram a resultados muito próximos, como pode ser visto por perfis em $t = 2000$ s e $t = 3000$ s em linha reta na direção do eixo x com $y = 0,05$ m e $z = 0,05$ m (Fig. 3.7). No entanto, o método implícito apresentou uma excelente vantagem em termos de tempo de processamento, uma vez que o desempenho da simulação do método implícito foi quase 30% mais rápido do que o explícito. Para o critério de convergência do método de Picard, $\varepsilon = 10^{-6}$ foi adotado e, para cada passo de tempo, duas iterações foram suficientes para alcançar essa tolerância. A Figura 3.8 mostra a variação de temperatura em relação ao tempo no ponto $(0$ m, $0,05$ m, $0,05$ m) na superfície da pele, comparando os três esquemas.

Tabela 3.4: Parâmetros da simulação

Esquema	$\Delta t(s)$	Passos de tempo N	Volumes n_v
Exp	0,75	4000	58783
Imp	250	12	58783
Ref	0,75	4000	1048576

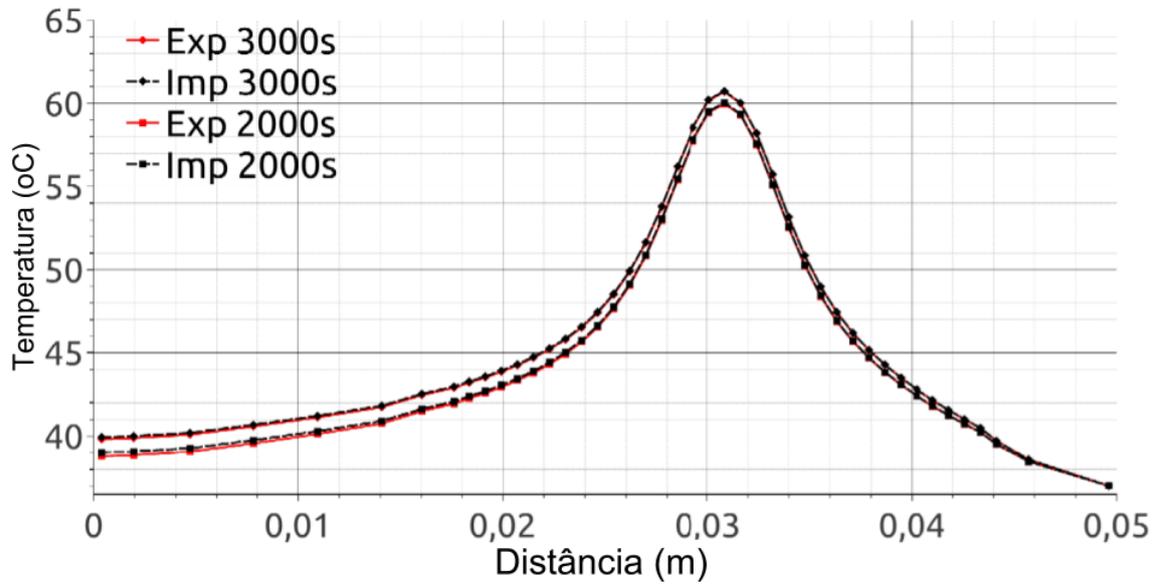


Figura 3.7: Comparação entre os modelos implícito e explícito.

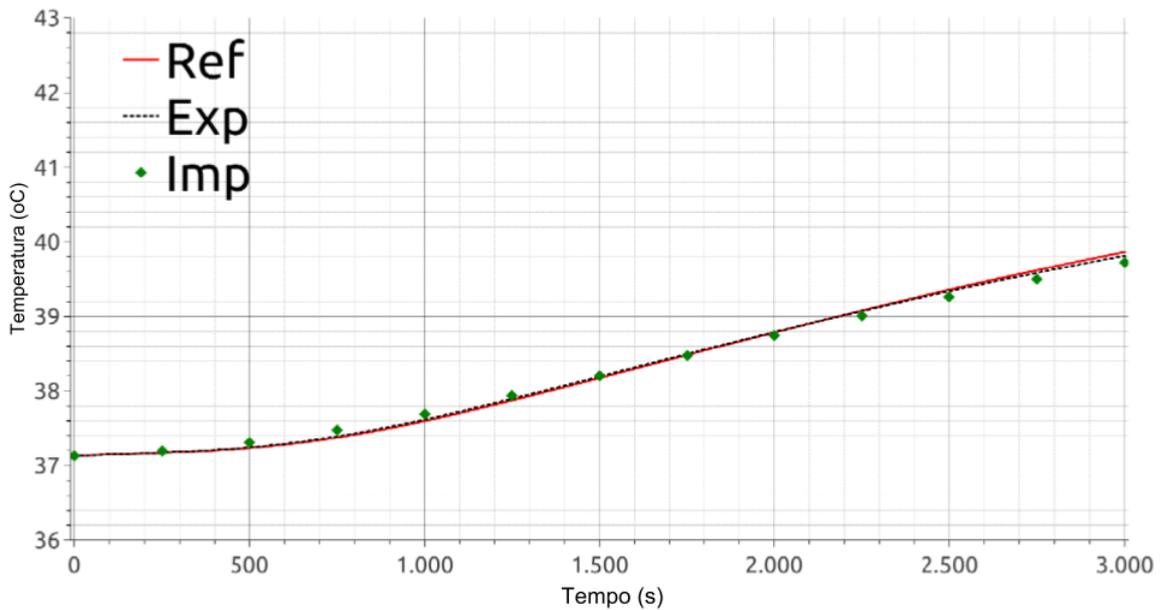


Figura 3.8: Variação da temperatura no tempo em um ponto na superfície da pele (0, 0,5, 0,5).

Um conjunto de instantâneos do campo de temperatura em alguns tempos no plano xz com $y = 0,05$ m é apresentado na Fig. 3.9 comparando os esquemas “Imp” e “Ref” para mostrar a difusão de calor em todo o tumor. Tendo em mente que uma célula humana pode ser destruída durante uma exposição a partir de 43° C, uma linha isotérmica (linha preta) de 43° C também é plotada para melhor visualizar a região sobre a qual as células podem ser danificadas. A linha branca, por outro lado, mostra o limite (forma) do tumor na figura cortada. Ao analisar essas figuras,

observa-se que o tumor pode ser destruído com sucesso, sem aumentar a temperatura acima de 43°C no tecido saudável.

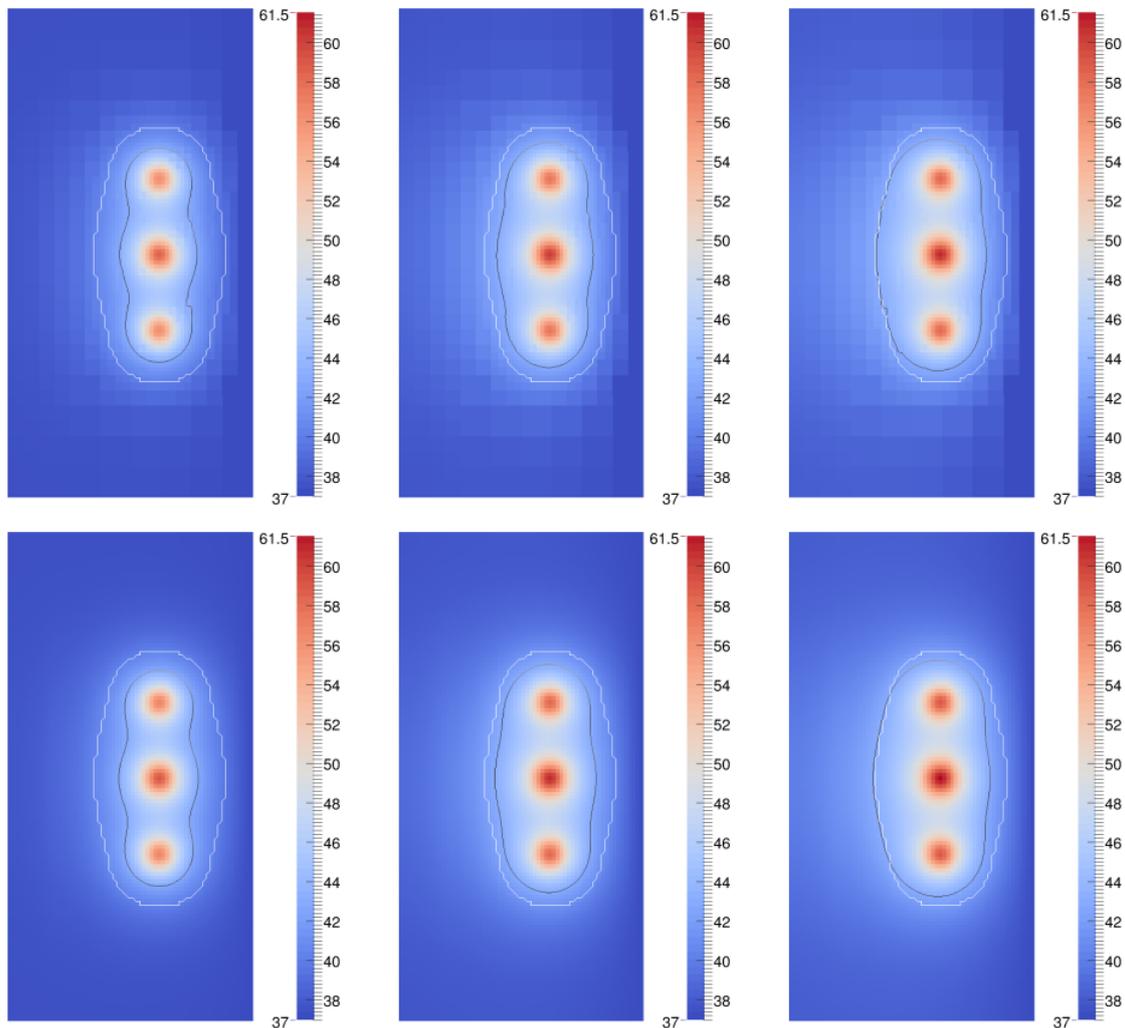


Figura 3.9: Fatias planas em $y = 0,05$ m para os esquemas numéricos Imp (acima) e Ref (Abaixo) nos tempos 1000 s (esquerda), 2000 s (centro) e 3000 s (direita). A linha branca determina o contorno do tumor e a preta a isotérmica em 43°C . Escala de temperatura em graus célsius.

Análise do dano

Neste exemplo, o processo de hipertermia é simulado em um domínio computacional de dimensões $0,05\text{ m} \times 0,1\text{ m} \times 0,1\text{ m}$, com uma camada de tecido saudável e um tumor esférico interno com $0,25\text{ m}$ de diâmetro no centro do domínio, conforme descrito na Figura 3.10. A função dano será considerada neste exemplo. A malha OcTree é mostrada nas Figuras 3.11 e 3.12.

A malha OcTree construída tem 14.018 volumes cúbicos de tamanhos de lado $0,00078125\text{ m}$, $0,0015625\text{ m}$, $0,003125\text{ m}$ e $0,00625\text{ m}$. A malha é capaz de descrever a geometria do tumor com boa resolução e, ao mesmo tempo, reduz muito o

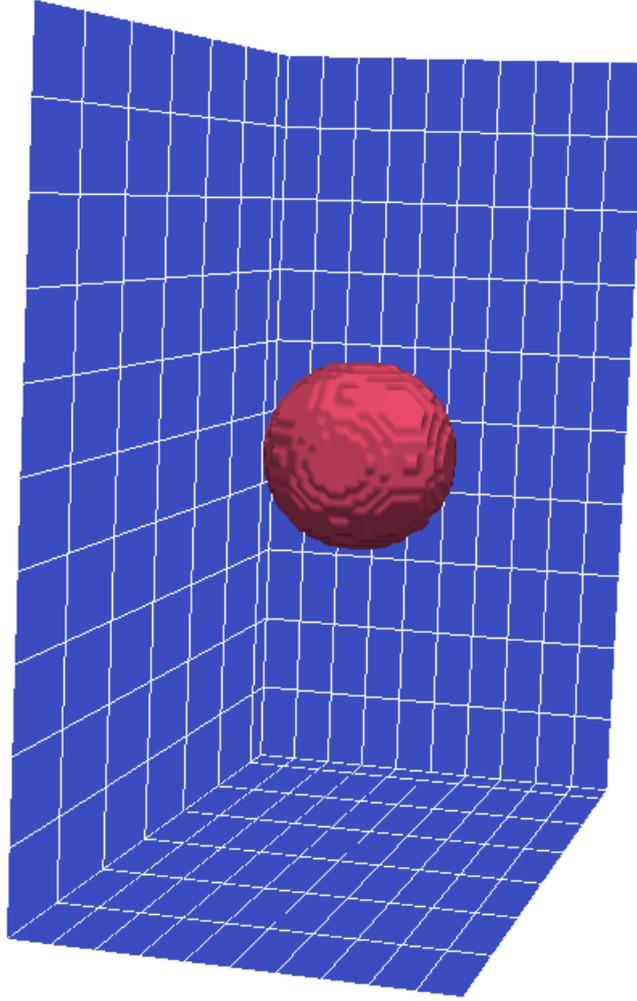


Figura 3.10: Domínio do modelo.

número de volumes. Nesse sentido, uma malha regular para representar essa mesma geometria com resolução equivalente exigiria 1.048.576 volumes de controle com tamanho de lado 0,00078125 m, que é mais de 70 vezes o número de graus de liberdade apresentado na malha OcTree. Foi usado $\Delta t = 0,75$ s para a análise transiente.

Em relação às condições de contorno, na fronteira que representa o interior do corpo, é prescrita uma temperatura de $\phi = 37^\circ\text{C}$, enquanto os fluxos de calor nulo são prescritos nos demais limites. A temperatura arterial ϕ_a também é definida como 37°C . Os demais parâmetros foram retirados da literatura (LANG *et al.*, 1999; LOUREIRO *et al.*, 2014; MINKOWYCZ, 1996; REIS *et al.*, 2016) e são apresentados na Tabela 3.5. Quanto à fonte de calor, a posição para a injeção de nanopartículas é (0,025 m, 0,05 m, 0,05 m) e os parâmetros $A = 0,65 \times 10^6$ W/m³ e $r_0 = 9,0 \times 10^{-3}$. Para determinar a condição inicial, o problema em regime permanente foi resolvido sem Q_r e com o valor médio W_b^* de perfusão sanguínea. O sistema de equações obtido foi resolvido com gradiente biconjugado estabilizado. Para o solução deste sistema e também para a marcha no tempo foi utilizado a ferramenta CUSP, que

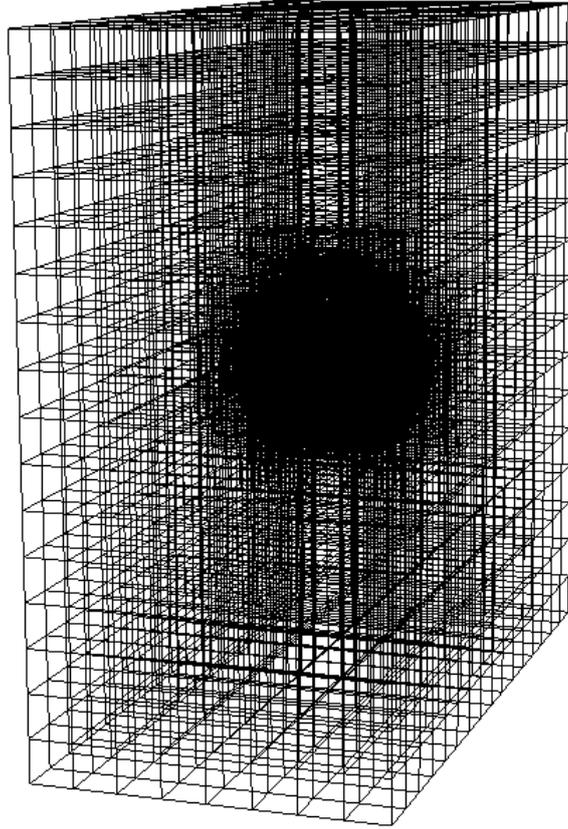


Figura 3.11: Malha OcTree com 68.839 volumes com quatro diferentes tamanhos.

realiza as operações em paralelo com o uso de GPU.

Tabela 3.5: Parâmetros do Modelo

Símbolo	Unidade	Saudável	Tumor
Q_m	W/m ³	420,0	4200,0
c	J/kg°C	3800,0	4200,0
c_b	J/kg°C	4200,0	4200,0
κ	W/m°C	0,45	0,55
ρ	kg/m ³	1000,0	1000,0
W_b^*	kg/s/m ³	1,8789	0,7579

A Figura 3.13 mostra o campo de temperaturas no plano $y = 0,05$ m em dois instantes da simulação, 1000s e 3000s. Nestas figuras a linha preta representa uma isotérmica em 43°C e a linha vermelha o limite do tumor. A Figura 3.14 mostra o dano nos mesmos cortes e nos mesmos instantes. Já nestas figuras, a linha preta representa uma curva onde o dano é igual a 1 e a linha vermelha o limite do tumor.

A simulação do monitoramento da temperatura e do dano em um ponto interior ao tumor com posição (0,018m , 0,05m , 0,05m) é apresentado nas Figuras 3.15 e 3.16. Observe que o regime estacionário em tal ponto é alcançado acima de 48°C, temperatura acima da requerida nos tratamentos de hipertermia necessária para

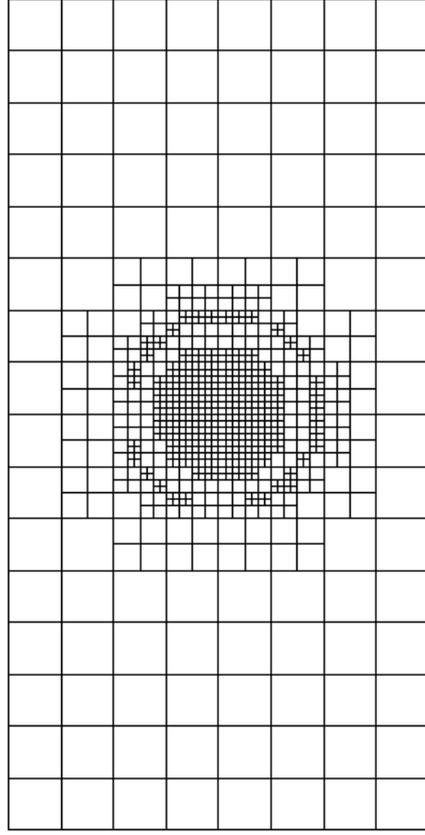


Figura 3.12: Domínio do modelo e malha OcTree com 68.839 volumes com quatro diferentes tamanhos: Fatia plana em $y = 0,05m$.

ocorrer dano ao tecido quando exposto por um determinado tempo.

3.2.6 Discussões

No exemplo que compara a simulação numérica com malhas OcTree com o MDF para um modelo com três camadas e tumor com forma de elipsoide, uma simulação 3D não-linear de hipertermia utilizando nanopartículas magnéticas em um tecido vivo heterogêneo com base na equação de biotransferência de calor de Pennes foi investigada. O método de volume finito foi aplicado usando malhas OcTree. A técnica de volume finito OcTree para discretização espacial tem algumas vantagens em comparação com esquemas que utilizam grade regular e malha não estruturada. A malha OcTree é relativamente fácil de gerar em comparação com malhas não estruturadas e, ao mesmo tempo, permite aprimoramento local. A malha OcTree tem uma boa relação entre precisão e tempo de CPU. O refinamento local é importante para uma boa representação geométrica do tumor e tecidos, bem como para capturar com maior precisão as variações de temperatura devido a gradientes altos como, por exemplo, aqueles em torno de fontes concentradas. Além disso, a malha não conforme é facilmente incorporada no esquema numérico através do equilíbrio de fluxo

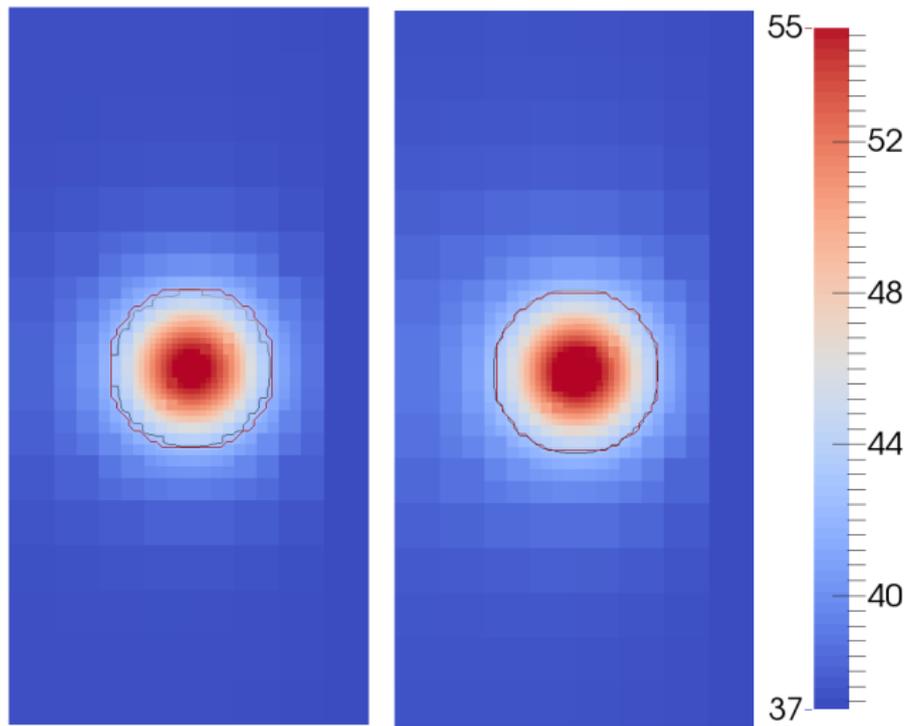


Figura 3.13: Cortes em $y = 0,05$ m do campo de temperaturas em 1000s (esquerda) e 3000s (direita). A linha preta representa uma isotérmica em 43°C e a linha vermelha o limite do tumor.

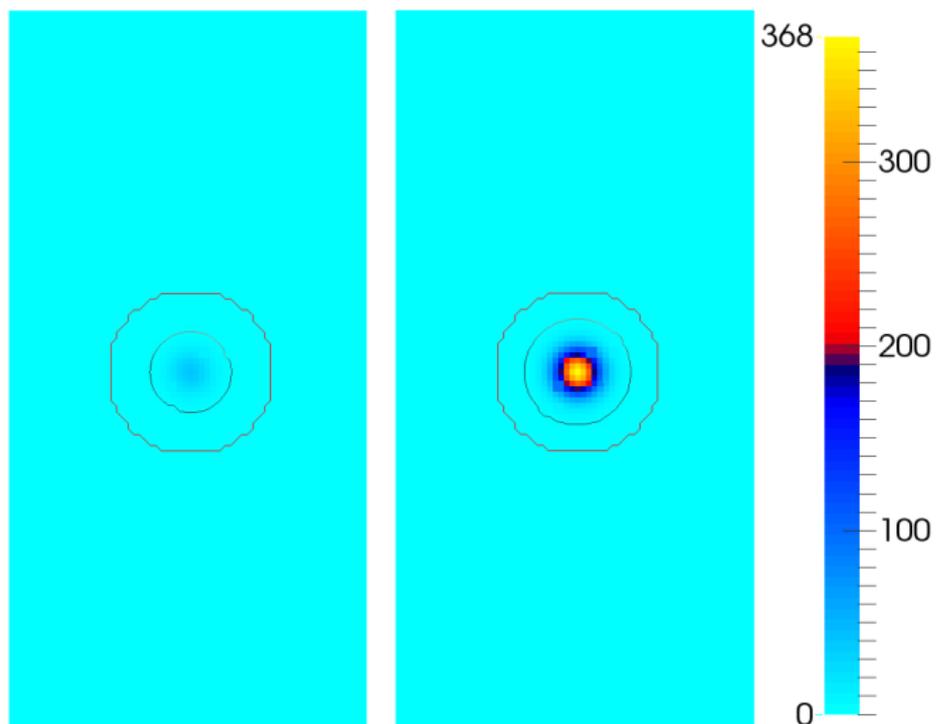


Figura 3.14: Cortes em $y = 0,05$ m do campo da função dano em 1000s (esquerda) e 3000s (direita). A linha preta representa uma curva onde o dano é igual a 1 e a linha vermelha o limite do tumor.

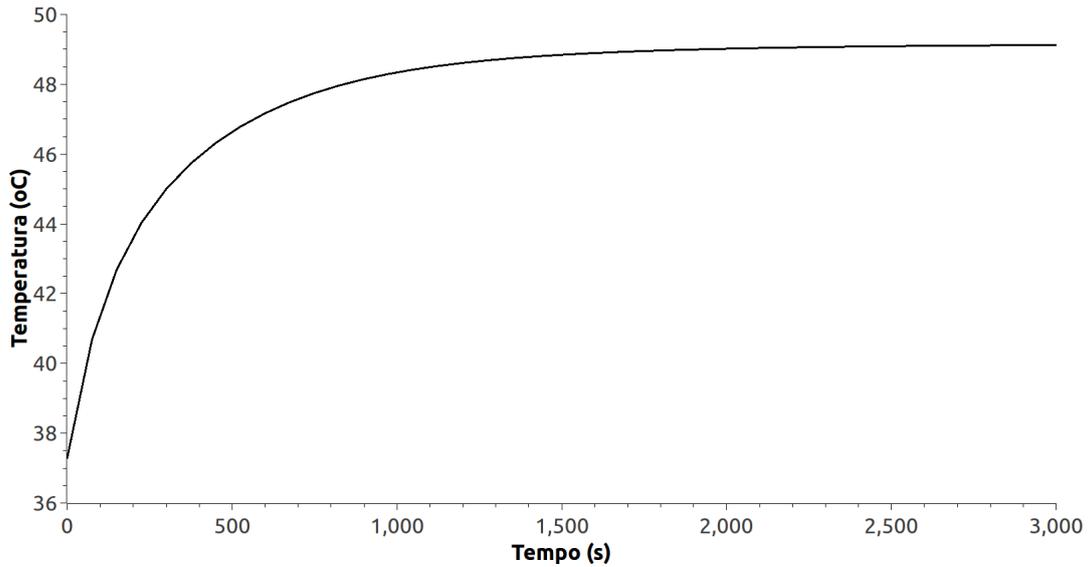


Figura 3.15: Temperatura em relação ao tempo em um ponto na posição (0,018m, 0,05 m, 0,05m) no interior do tumor.

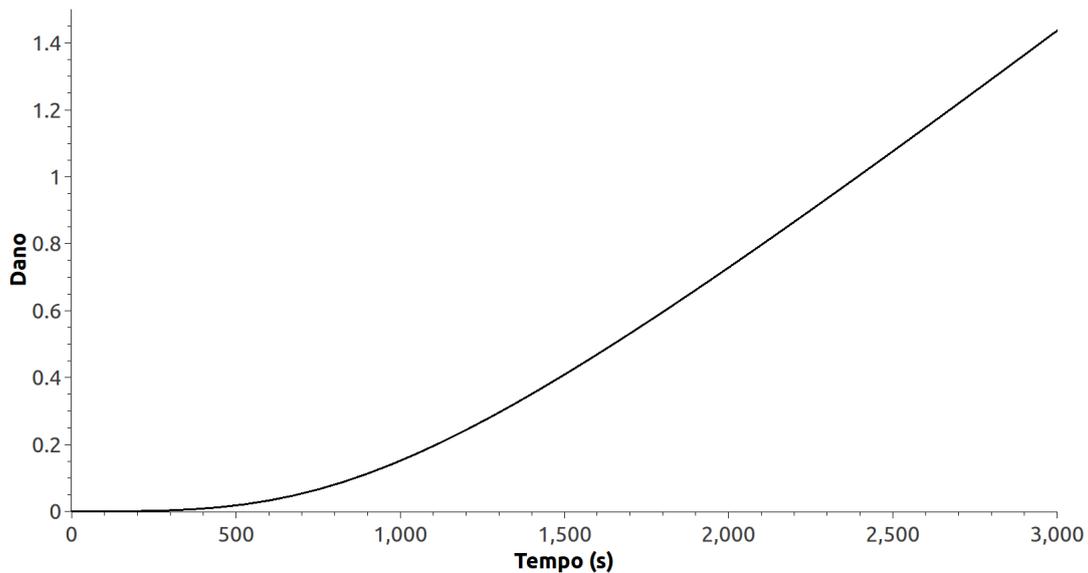


Figura 3.16: Dano em relação ao tempo em um ponto na posição (0,018m ,0,05m ,0,05m) no interior do tumor.

nas faces; uma característica não encontrada em outros métodos numéricos, como o método dos elementos finitos em que uma formulação mais complexa (elementos finitos descontínuos) deve ser levada em consideração.

A técnica apresentada neste exemplo leva a uma grande redução no número de graus de liberdade em comparação com as grids regulares. Na verdade, comparando o uso de uma malha OcTree com um grid regular, uma aceleração de 20 vezes foi alcançada sem degradar consideravelmente a precisão. As matrizes esparsas obtidas foram manipuladas usando o CUSP, uma biblioteca que usa internamente

CUDA para executar de forma eficiente operações entre matrizes esparsas (BELL e GARLAND, 2012).

Foi observado no modelo estudado que o esquema implícito de marcha no tempo com o método Picard foi 30% mais rápido do que o explícito para uma precisão similar. Assim, o uso de malhas OcTree em conjunto com o esquema implícito de marcha do tempo pode ser aplicado para resolver de forma eficiente problemas de hipertermia. Além disso, o uso de recursos de processamento paralelo pode permitir a análise da influência dos parâmetros do modelo em tempo real.

No exemplo da análise do dano, foi apresentada uma simulação numérica 3D de um tratamento por hipertermia com nanopartículas considerando em cada volume da malha e em cada instante de tempo o dano causado pela hipertermia. Este processo foi modelado matematicamente considerando a equação de Pennes que descreve a transferência de calor no tecido vivo. O MVF foi aplicado usando malhas OcTree para discretização espacial.

O algoritmo desenvolvido foi aplicado a um domínio simples composto por um tecido vivo homogêneo saudável com um tumor esférico. O esquema proposto é muito promissor especialmente devido à possibilidade de refinamento local, importante para uma boa representação geométrica do tumor, bem como para capturar com maior precisão as variações de temperatura e o dano causado pelo procedimento.

Este exemplo apresenta uma grande redução no número de graus de liberdade em comparação com as malhas regulares. E pelo fato da eficiência computacional ser uma questão crucial a ser considerada ao resolver problemas de otimização, o esquema numérico desenvolvido pode ser útil em simulações em tempo real para monitoramento do tratamento com hipertermia por exemplo, observando o campo de temperaturas na superfície da pele e usando algoritmos de inversão para prever a temperatura interna e o dano causado.

Capítulo 4

Modelagem da onda acústica

Problemas de propagação de onda muitas vezes aparecem em várias áreas da ciência, especialmente na engenharia, na física e na geofísica aplicada. Em regiões onde o meio de propagação é complexo, o uso de métodos numéricos eficientes para obter soluções aproximadas para equações hiperbólicas desempenha um papel central em várias aplicações importantes. Na geofísica, exemplos podem ser encontrados na imagem de estruturas subterrâneas e em inversão.

Este capítulo foca a geofísica aplicada ao petróleo. Os enormes desafios na exploração e na caracterização do reservatório colocam os algoritmos baseados na equação de onda em destaque, fazendo a inversão de forma de onda completa (FWI), usada para obter o modelo de velocidade, por exemplo, e migração de tempo reverso (RTM), um método poderoso para obter imagens de estruturas subterrâneas, ferramentas importantes na indústria. As regiões associadas a corpos salinos tornaram-se alvos de exploração comuns na indústria do petróleo e, no momento, é sabido que uma proporção significativa das reservas mundiais de hidrocarbonetos estão em estruturas relacionadas a essas formações geológicas. Em muitos lugares ao redor do mundo, grande interesse tem sido focado em formações geológicas abaixo de camadas de sal. Essas áreas são difíceis de iluminar e muito complexas geologicamente, onde camadas com altas velocidades, aparecem próximas de camadas com velocidades mais baixas, tudo abaixo de milhares de metros da superfície da água. Por outro lado, o desenvolvimento tecnológico em aquisição e processamento permite o aprimoramento da resolução das imagens obtidas.

Neste contexto, o desenvolvimento de esquemas numéricos poderosos e eficientes para a modelagem sísmica tem uma importância fundamental. O método das diferenças finitas (MDF) é o método mais popular usado para modelar ondas sísmicas, principalmente por sua eficiência e robustez. O MDF é um dos métodos mais simples para implementar e é muito adequado para a paralelização. É aplicável de forma simples às regiões complexas e é relativamente preciso e eficiente. No entanto, o MDF não está livre de limitações causadas por interfaces irregulares entre cama-

das de material descontínuo e o espaçamento de grid fixo e muito pequeno imposto pela dispersão numérica (especialmente em camadas de alta velocidade), além da impossibilidade de refinamento local.

Em algoritmos baseados no MDF, o preço para usar um grid regularmente espaçado é que um pequeno espaçamento restritivo deve ser usado em todo o modelo, imposto pela menor velocidade presente no meio geofísico. Isso faz com que o número de pontos por comprimento de onda seja muito grande em camadas de alta velocidade, tornando esses esquemas menos eficientes do que poderiam ser. Embora o uso de operadores de alta ordem permita um maior espaçamento do grid, esta estratégia resolve o problema mas pode causar outro: uma possível perda de resolução devido ao tamanho do pixel muito grande em relação à resolução nominal.

A introdução de esquemas de malha intercalada, chamados de esquemas OSG, do inglês, *ordinary staggered-grid schemes*, usando MDF por VIRIEUX (1986) é considerado um marco na modelagem sísmica (MOCZO *et al.*, 2002), sendo os esquemas OSG (GRAVES, 1996; LEVANDER, 1988) os algoritmos mais aplicados para modelagem sísmica e aplicações. DI BARTOLO *et al.* (2011) propuseram o esquema de malha intercalada equivalente (ESG), um esquema MDF numericamente equivalente ao esquema OSG para acústica, em termos apenas do campo de pressão. As extensões à equação da onda elástica foram apresentadas recentemente em DI BARTOLO *et al.* (2015). Os esquemas ESG exigem menos memória computacional do que os OSG, embora permaneça com as limitações do MDF mencionadas anteriormente, tanto quanto o OSG.

Neste capítulo, desenvolve-se um novo esquema explícito para meios 3D baseado em método de volume finito (MVF) que aborda os problemas acima mencionados, visando ainda permanecer com malhas relativamente simples. Aqui, discutimos a sua aplicação no caso mais simples: em acústica. O algoritmo permite o refinamento local usando malhas OcTree, um bom compromisso entre malhas estruturadas e não estruturadas. Nesse sentido, o OcTree pode ser gerado diretamente a partir de um grid regular usando critérios simples. Por isso, é possível fazer refinamento local, por exemplo, em qualquer interface, flancos de sal e/ou camadas alvo, de uma maneira simples. Além disso, o refinamento pode ser adotado na superfície de regiões terrestres, especialmente na presença de topografia, usando uma condição de vácuo, para garantir um número suficiente de pontos por comprimento de onda para garantir precisão de modelagem (ROBERTSSON *et al.*, 1996).

O método proposto aqui é baseado no trabalho de HORESH e HABER (2011) para resolver as equações de Maxwell em regime quase estático. Ele pode ser visto como uma extensão do esquema OSG para malhas OcTree. O algoritmo é construído usando um formalismo geral com matrizes esparsas e permite o uso de diferentes espaçamentos do grid em camadas com diferentes velocidades e o refinamento em

regiões de interesse, o que caracteriza a malha OcTree. Ferramentas computacionais para processamento paralelo na GPU foram usadas para a manipulação das matrizes esparsas (BELL e GARLAND, 2012).

4.1 A equação da onda acústica

A equação da onda acústica, em termos de velocidade de propagação e pressão, é obtida usando a segunda lei de Newton juntamente com a equação da continuidade. Tem-se então o seguinte sistema acoplado de primeira ordem em termos de velocidade \vec{v} e pressão p

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} p(\mathbf{r}, t) = \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \quad (4.1)$$

$$\frac{1}{\kappa(\mathbf{r})} \frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial i_V(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (4.2)$$

onde \mathbf{r} é o vetor de posição, t é o tempo, ρ é a densidade do meio, \mathbf{f} é a densidade da força externa aplicada, $\partial/\partial t$ é a derivada no tempo, $\vec{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$, κ é o módulo de compressão adiabática do meio e i_V , representando a fonte, é a densidade volumétrica do volume injetado (por exemplo, *air gun*).

Eliminando o campo de velocidades no sistema de equações 4.1-4.2, a equação da onda acústica em termos apenas de pressão pode ser escrita como

$$\rho \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p \right) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = -s, \quad (4.3)$$

onde s e c são, respectivamente, a fonte e a velocidade da onda:

$$s = \rho \frac{\partial^2 i_V}{\partial t^2} - \rho \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{\rho} \vec{f} \right), \quad c = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho}}. \quad (4.4)$$

Na próxima seção será discretizada a Equação 4.3 usando os operadores construídos no Capítulo 2 para malhas OcTree.

4.2 Discretização em uma malha OcTree

Seja p uma função real em uma malha OcTree \mathbf{M} que representará a pressão média em cada volume. Define-se p_i como a pressão no volume V_i de \mathbf{M} . Define-se também uma matriz diagonal \mathbf{B} , com dimensões $n_v \times n_v$, onde $B_{i,i}$ é definido como o produto $\Delta t^2 c^2 \rho_i \frac{1}{h^2}$ em cada volume V_i e a matriz diagonal \mathbf{L} , com dimensões $n_f \times n_f$, com $L_{i,i}$ definido pelo inverso da média harmônica da densidade volumétrica de massa dos

volumes vizinhos que possuem como uma de suas faces F_i e \mathbf{S} uma matriz $n_v \times n_v$ tal que seu único valor diferente de zero, $S_{j,j}$ é a função s que representará a fonte que está localizada no volume V_j .

Usando os operadores discretos para malha OcTree já descritos, podemos discretizar a Equação 4.3 como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} &= c_i^2 \rho_i \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_i} \nabla p \right) + c_i^2 s \\ \frac{\mathbf{p}^{n+1} - 2\mathbf{p}^n + \mathbf{p}^{n-1}}{\Delta t^2} &= c_i^2 \rho_i \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_i} \nabla \mathbf{p}^n \right) + c_i^2 s \\ \mathbf{p}^{n+1} &= \Delta t^2 c_i^2 \rho_i \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho_i} \nabla \mathbf{p}^n \right) + \Delta t^2 c_i^2 s + 2\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{n-1} \\ \mathbf{p}^{n+1} &= (\mathbf{B}\mathbf{V}_0^{-1}\mathbf{N}\mathbf{F}_0^2\mathbf{L}\mathbf{F}_0^{-1}\mathbf{N}^t) \mathbf{p}^n + 2\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{n-1} + \mathbf{S}\end{aligned}$$

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{Y}\mathbf{p}^n + 2\mathbf{p}^n - \mathbf{p}^{n-1} + \mathbf{S} \quad (4.5)$$

onde $\mathbf{Y} = \mathbf{B}\mathbf{V}_0^{-1}\mathbf{N}\mathbf{F}_0^2\mathbf{L}\mathbf{F}_0^{-1}\mathbf{N}^t$.

4.3 Condições de contorno

Com a intenção de simular computacionalmente meios infinitos, condições de contorno adequadas devem ser aplicadas para que a modelagem da propagação da onda seja mais próxima da realidade.

Condições de contorno não reflexivas (CCNR), propostas por REYNOLDS (1978), podem ser aplicadas. Para isso a condição de contorno

$$\frac{dp}{d\vec{n}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (4.6)$$

deve ser aplicada em todos os volumes que estão na borda que se deseja simular infinita.

Para a aplicação desta condição de contorno no esquema explícito proposto é necessário conhecer para cada volume V_i no contorno seu vizinho pela direção normal ao contorno, que será chamado V_i^{viz} . Assim 4.6 pode ser discretizada neste esquema

como

$$\frac{p^n(V_i) - p^n(V_i^{\text{viz}})}{h} = \frac{1}{c} \frac{(p^n(V_i) - p^{n+1}(V_i))}{\Delta t} \quad (4.7)$$

o que resulta explicitamente em

$$p^{n+1}(V_i) = p^n(V_i) - \frac{c\Delta t}{h} \frac{(p^n(V_1) - p^n(V_i^{\text{viz}}))}{h}. \quad (4.8)$$

No caso em que o vizinho do volume no contorno tem tamanho diferente, assume-se que são de tamanhos iguais e a aproximação é feita da mesma forma.

No entanto, apenas esta abordagem não é suficiente para uma atenuação satisfatória dos efeitos da reflexão nas bordas. Faz-se necessário então uma outra abordagem complementar. Camadas de absorção se mostram muito eficientes para este fim. Uma metodologia proposta em CERJAN *et al.* (1985) se mostra muito simples e relativamente eficiente. Outros tipos de camadas se mostram mais eficazes em atenuar as reflexões das bordas, como a proposta em BERENGER (1994) para ondas eletromagnéticas, pois consideram localmente fatores mais adequados para atenuação, enquanto o fator do método proposto no trabalho citado anteriormente é o mesmo em todo domínio.

4.4 Fonte sísmica

Neste trabalho serão usadas fontes pontuais, que objetivam simular aproximadamente o efeito de um *airgun*. O pulso de Ricker é utilizado, sendo sua expressão dada por

$$F(t) = [2\pi(\pi f_c t_d)^2 - 1] \exp[-(\pi f_c t_d)^2] \quad (4.9)$$

onde $f_c = \frac{f_{\text{corte}}}{3\sqrt{\pi}}$ é um parâmetro relacionado com a frequência de corte f_{corte} e $t_d = t - t_0$ é o tempo defasado, utilizado para deslocar o início da aplicação da fonte, onde $t_0 = \frac{2\sqrt{\pi}}{f_{\text{corte}}}$ e $t_M = 2t_0$ é o tempo de aplicação da fonte.

4.5 Estabilidade e dispersão numéricas

O método proposto neste trabalho apresenta uma malha com espaçamento não uniforme. Teoricamente esta característica pode implicar, se usada de maneira adequada, em economia de tempo de processamento e armazenamento de memória. Estes fatores são importantes para modelagem numérica, em particular para modelagens 3D. Como a dispersão numérica depende diretamente das dimensões dos volumes da malha (BULCÃO, 2004) e estes não são valores fixos em uma malha

OcTree, um estudo aprofundado deste tema se faz necessário.

O esquema proposto é uma generalização do esquema ESG baseado no MDFI (tópico A.1 do Apêndice A) e, devido a isso, as análises empreendidas são iniciadas com critérios de não dispersão numérica e estabilidade comumente adotados em esquemas de diferenças finitas.

Pelo fato da velocidade de propagação de onda ser uma característica local, pode-se estabelecer localmente o critério

$$h_{\text{local}} \leq \frac{c_{\text{local}}}{Gf_{\text{corte}}}, \quad (4.10)$$

onde G é um parâmetro empírico que regula a dispersividade numérica. Tal parâmetro é caracterizado pelo número de volumes da malha que são necessários para representar o menor comprimento de onda, que é obtido considerando a frequência de corte da fonte, e a velocidade de propagação local. No caso 3D, para operadores de quarta ordem, cinco pontos são suficientes para uma boa aproximação (MOCZO *et al.*, 2010).

A vantagem de utilizar malhas OcTree é que os tamanhos dos volumes nestes esquemas podem ser distintos em diferentes regiões do modelo. Especificamente, pode-se utilizar tamanhos de arestas cujas razões são potências de 2. Com isso, de forma geral, quando a velocidade aumenta, pode-se também utilizar volumes maiores, mantendo o número de pontos por comprimento de onda similar e, portanto, as características locais de dispersão numérica semelhantes em toda a malha, elevando a eficiência computacional. Por exemplo, quando a onda passa de uma camada de velocidade 1500 m/s para 3000 m/s, pode-se dobrar o tamanho da aresta do volume na camada de maior velocidade, como ilustra a Figura 4.1, sem gerar dispersão numérica (observa-se $G = 6$ nas duas situações ilustradas).

Quanto à estabilidade, pode-se observar que o valor de Δt é constante no método proposto, assim deve-se exigir que seja satisfeita a seguinte condição:

$$\Delta t \leq \frac{h_{\text{mim}}}{\beta c_{\text{max}}}, \quad (4.11)$$

onde β é um parâmetro que determina quantos intervalos de tempo são necessários para que a frente de onda percorra uma distância equivalente à aresta do menor volume da malha com a maior velocidade. Para operadores de segunda ordem o valor $\beta = 4$ é suficiente (BULCÃO, 2004).

Um estudo aprofundado para a otimização dos parâmetros G e β é particularmente relevante para o esquema proposto neste trabalho. Estes parâmetros podem ser usados para determinar automaticamente as dimensões máximas que os volumes da malha podem ter em cada região, e assim gerar maior velocidade no processamento e economia de memória para a modelagem.

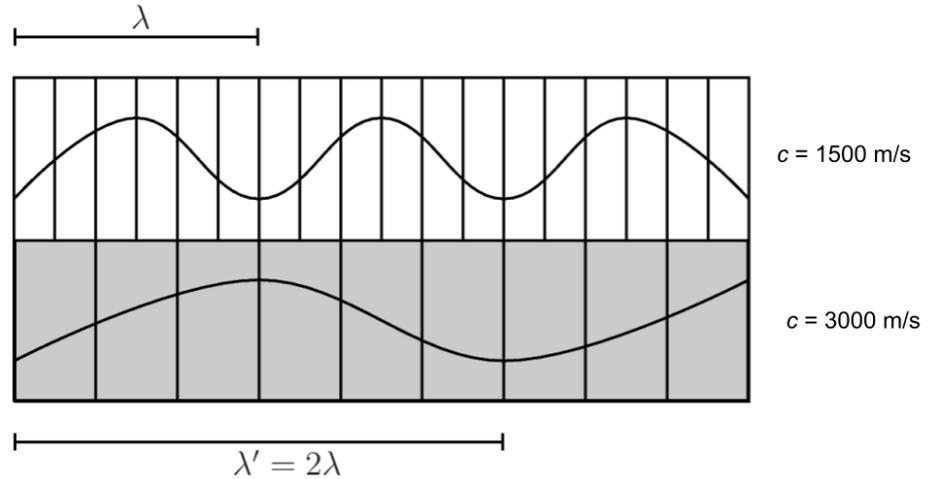


Figura 4.1: Ondas senoidais monocromáticas de uma mesma frequência se propagando em dois meios com velocidades de propagação distintas.

4.6 Estudo da acurácia

Um importante fator que interfere na acurácia de esquemas numéricos é o espaçamento da malha que discretiza o modelo. Esta medida é obtida quando se encontra o número de volumes da malha por comprimento de onda da fonte (ALFORD *et al.*, 1974). A modelagem da propagação da onda acústica com malhas OcTree proposta neste trabalho tem a possibilidade de ter vários espaçamentos distintos em um mesmo modelo. Este fato acarreta a necessidade de um estudo sobre como esta característica afeta a acurácia da modelagem proposta.

Modelos de propagação de onda com esquema de diferenças finitas com malha intercalada que contêm apenas interfaces alinhadas as faces da malha e com valores de G suficientemente grandes apresentam resultados muito próximos a soluções analíticas (HOLBERG (1987) e MITTET *et al.* (1988)). Portanto, neste trabalho, pelo fato do esquema proposto ser equivalente ao esquema de diferenças finitas com malha intercalada quando a malha OcTree é regular (Apêndice A), usaremos um modelo *REF* com grande refinamento e com volumes de mesmas dimensões como referência para comparação de acurácia (grid *A* com $32 \times 32 \times 4096$ e $h = 0,5 \text{ m}$).

Um modelo sintético foi construído com grid *A* com $32 \times 32 \times 2048$ pontos e duas camadas. Na primeira camada foram definidas as propriedades $c = 2000 \text{ m/s}$ e $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ e na segunda $c = 4000 \text{ m/s}$ e $\rho = 1500 \text{ kg/m}^3$ a frequência de corte usada foi de 50 Hz . Várias malhas OcTree foram construídas para este modelo, em todas o tamanho da aresta dos volumes é dobrado na segunda camada, pois como a velocidade de propagação da onda é o dobro na segunda camada os critérios de estabilidade e não dispersão numéricas são observados. A Figura 4.2 ilustra esquematicamente as malhas construídas. Na posição $z = 1024$ foram colocadas fontes em todos pontos da malha com o intuito de gerar uma onda plana e

condições de contorno adequadas foram aplicadas para evitar reflexões numéricas. Foi inserido um receptor R_1 em $(16, 16, 1280)$, na primeira camada e outro receptor R_2 em $(16, 16, 1792)$, na segunda camada. Em $z = 1536$ foi realizada a mudança de camadas com refinamento (Figura 4.3).

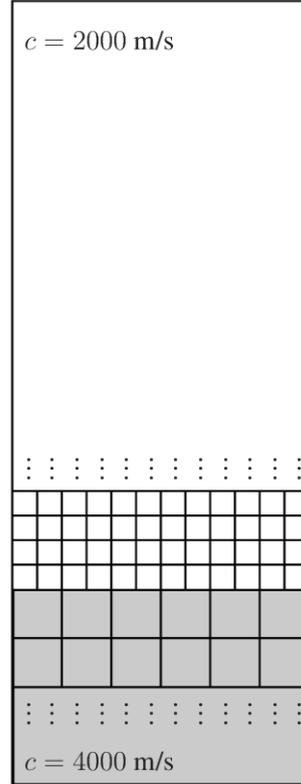


Figura 4.2: Ilustração esquemática da malha OcTree.

O espaçamento padrão do Grid A foi de $h = 1$ m. Três malhas OcTree foram construídas com este grid: Oc4-8, Oc2-4 e Oc1-2. A malha Oc4-8 tem volumes de aresta $4 \times h$ na primeira camada (com 2000 m/s) e volumes de aresta $8 \times h$ na segunda (com 4000 m/s). A malha Oc2-4 tem volumes de aresta $2 \times h$ na primeira camada e volumes de aresta $4 \times h$ na segunda. Já a malha Oc1-2, tem volumes de aresta h na primeira camada e volumes de aresta $2 \times h$ na segunda camada. Nestes modelos foi usado a aproximação α para o gradiente (Seção 2.6).

Foram feitas simulações de 0,57 s (9000 passos de tempo), o suficiente para que os receptores recebam o sinal da onda direta e da reflexão. Para cada modelagem foi calculado o erro de quadrado médio (RMS) tendo como referência o modelo “REF” em cada instante de tempo. A Tabela 4.1 apresenta os valores de erro encontrados. A Figura 4.4 mostra os resultados no primeiro receptor e a Figura 4.5 no segundo.

As Figuras 4.6 e 4.7 apresentam o erro em função do número de volumes de cada modelo estudado.

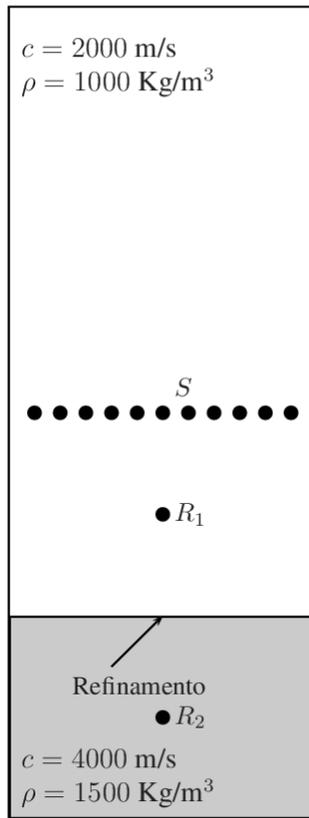


Figura 4.3: Modelo com duas camadas

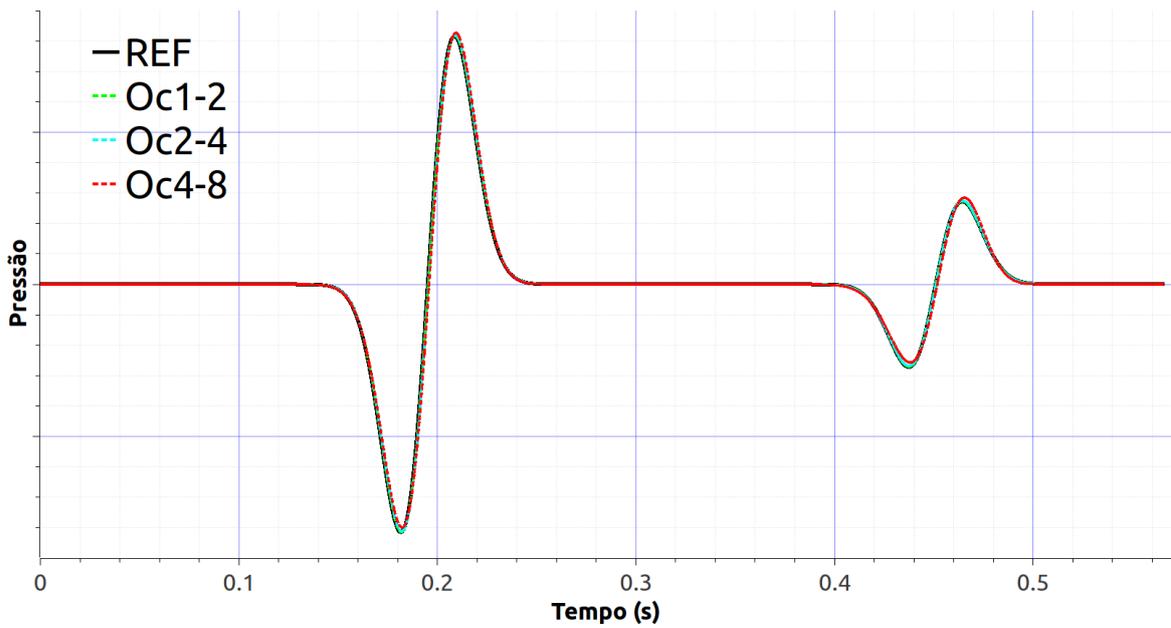


Figura 4.4: Resposta no receptor R_1 .

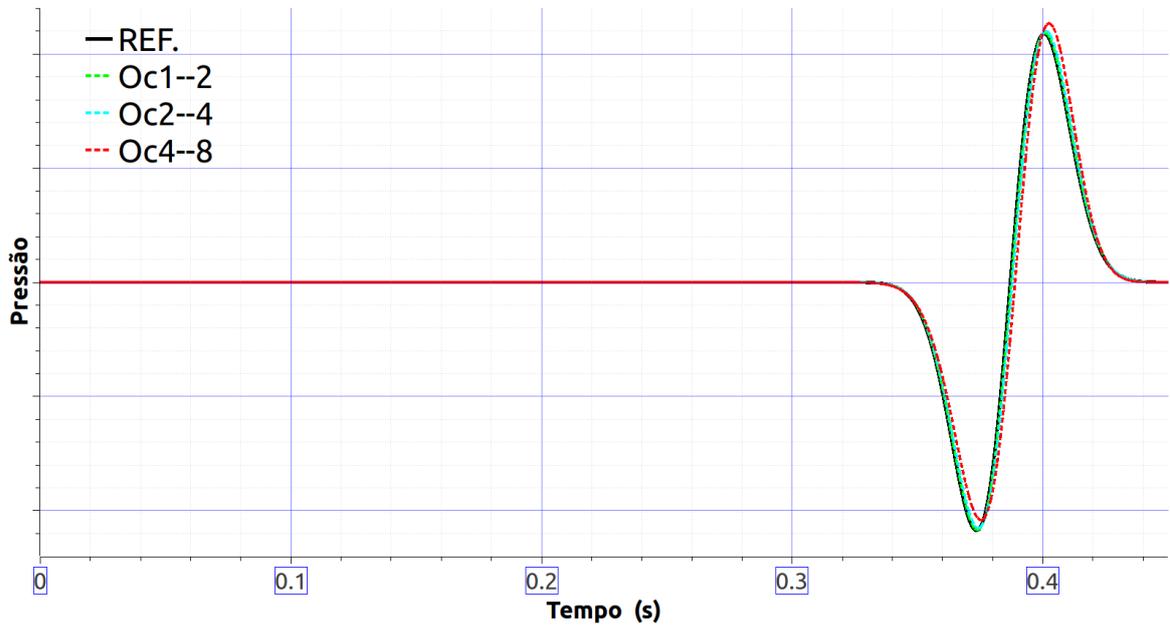


Figura 4.5: Resposta no receptor R_2 .

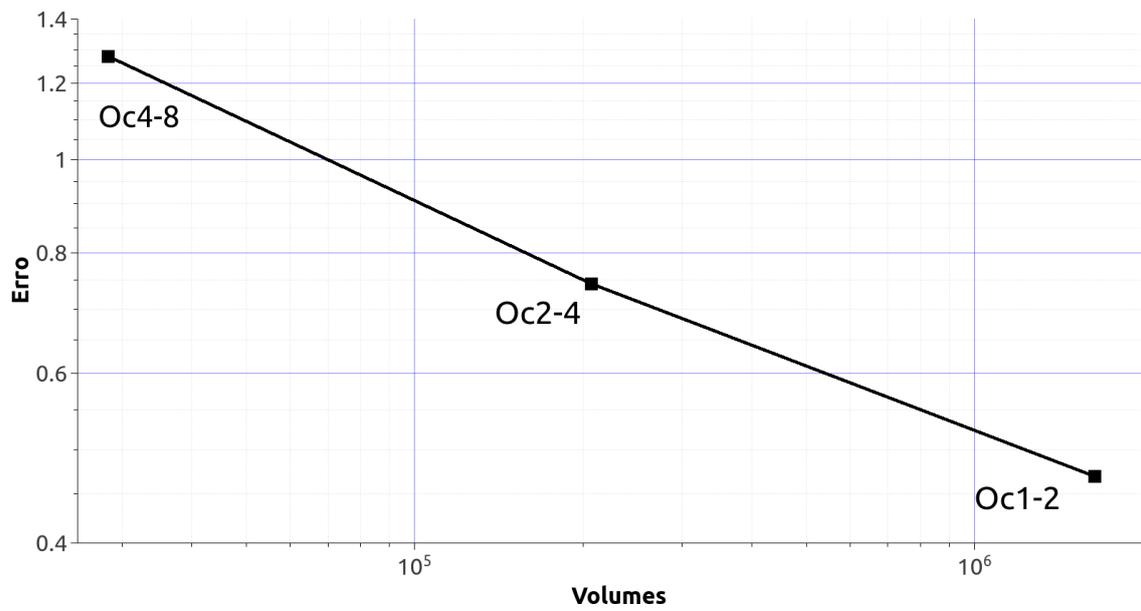


Figura 4.6: Erro em função do número de volumes em R_1 .

Tabela 4.1: Erro Quadrado médio

	Volumes	h_{min}	h_{max}	Erro em R1	Erro em R2
Oc4-8	28323	4 m	8 m	1,281089218	5,9433880461
Oc2-4	206599	2 m	4 m	0,7436213867	2,4911231297
Oc1-2	1638400	1 m	2 m	0,4691218916	1,1661559565

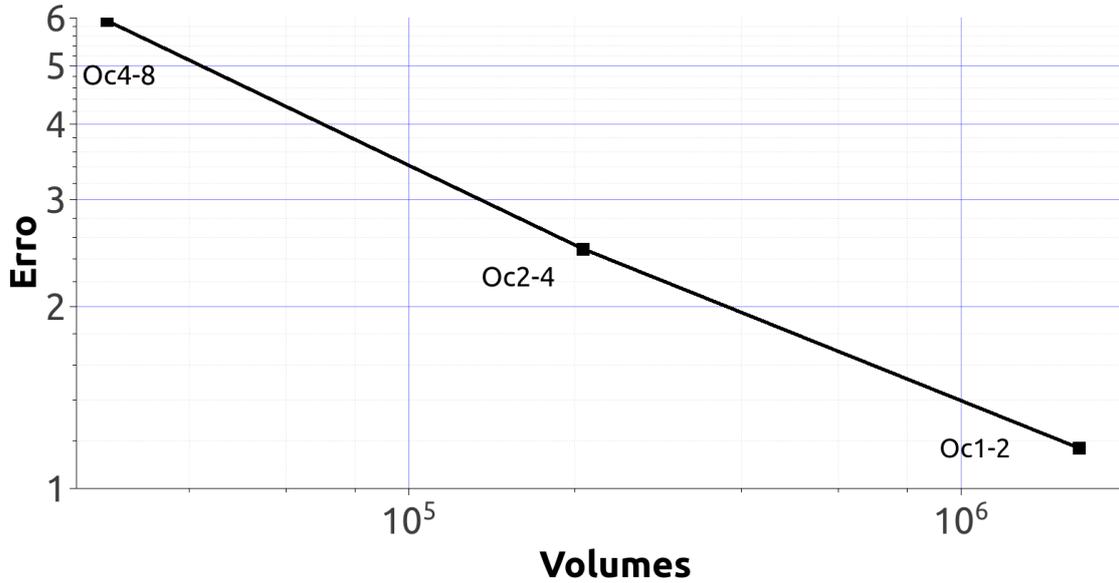


Figura 4.7: Erro em função do número de volumes em R_2 .

4.7 Exemplos Numéricos

Nesta seção, serão apresentados três exemplos para demonstrar o desempenho do esquema numérico em diferentes situações. Os dois primeiros foram construídos com camadas horizontais e inclinadas e no terceiro foi usada uma modificação do modelo SEG/EAGE “salt dome” para a construção da malha OcTree para a modelagem numérica. Em todos estes exemplos, a aproximação α para o gradiente foi usada.

O fato de que as malhas geradas para modelagem de ondas sísmicas em meios geológicos possuam alguns milhões de volumes de controle não permitirá a construção de ilustrações como as exibidas no capítulo 3, que possuem apenas alguns milhares de volumes. Alguns recursos gráficos serão usados buscando ilustrar característica de interesse das malhas usadas neste capítulo (Figuras 4.8, 4.13 e 4.22).

4.7.1 Modelo de camadas planas

Para implementar o esquema numérico, usamos linguagem C no sistema Linux Ubuntu executado em uma CPU Intel Core i7-2600 3.40GHz×8 com 16 Gb. Ferramentas computacionais foram usadas para processamento na GPU, onde a ma-

nipulação algébrica de matrizes esparsas foi feita de forma otimizada, utilizamos a biblioteca CUSP (BELL e GARLAND, 2012).

Um modelo sintético com três camadas horizontais e grid A com dimensões $(n_x, n_y, n_z) = (2^9, 2^9, 2^9)$ foi construído, onde o espaçamento do grid foi de $h = 1$, formando um modelo cúbico com 512 m de borda. As velocidades das camadas foram respectivamente $c_1 = 1.200$ m/s , $c_2 = 1.500$ m / s e $c_3 = 3.000$ m / s; e as densidades foram $\rho_1 = 1.200$ g/m³ , $\rho_2 = 1.500$ g/m³ e $\rho_3 = 3.000$ g/m³. A malha OcTree neste exemplo é muito simples: os volumes próximos das interfaces são refinados (com tamanho h e $2h$) e os outros volumes, longe das interfaces, têm tamanho $4h$, conforme mostrado na Figura 4.8. A malha gerada tem $n_f = 9,047,808$ e $n_v = 2,899,968$. Os parâmetros numéricos utilizados nesta modelagem foram $\Delta t = 1ms$, e a fonte sísmica utilizada foi uma wavelet de Ricker com frequência de corte $f_c = 80$ Hz colocado no centro do plano xy com $z = 6m$. Os receptores estão em $z = 6m$.

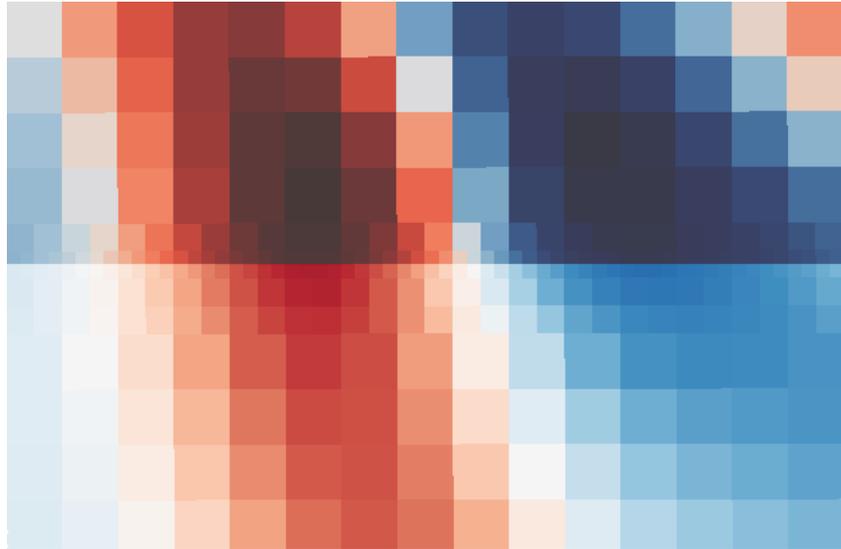


Figura 4.8: Refinamento próximo aos refletores.

A Figura 4.8 mostra um zoom do modelo perto dos refletores, onde pode ser visto o refinamento da malha como mencionado acima. O exemplo é simples, mas pode-se ver que, com esse refinamento, a resolução nos refletores irregulares pode ser melhorada. É interessante notar que para modelar com esta mesma resolução em todos os pontos do modelo precisaríamos de um grid com 512^3 pontos ($h = 1m$). No entanto, o número de volumes nesta malha OcTree é apenas 2.1% deste número, evitando custo excessivamente alto que inviabiliza a análise com os recursos computacionais disponíveis.

As Figuras 4.9 e 4.10 mostram snapshots 3D em fatias planas ortogonais, nos tempos 2s e 2,5s , respectivamente. O sismograma sintético é mostrado na Fig. 4.11. Pode-se observar claramente que a onda acústica se propaga bem no meio, sem

artefatos e sem dispersão. O tempo de execução, após calcular todas as matrizes, foi de cerca de 5 minutos.

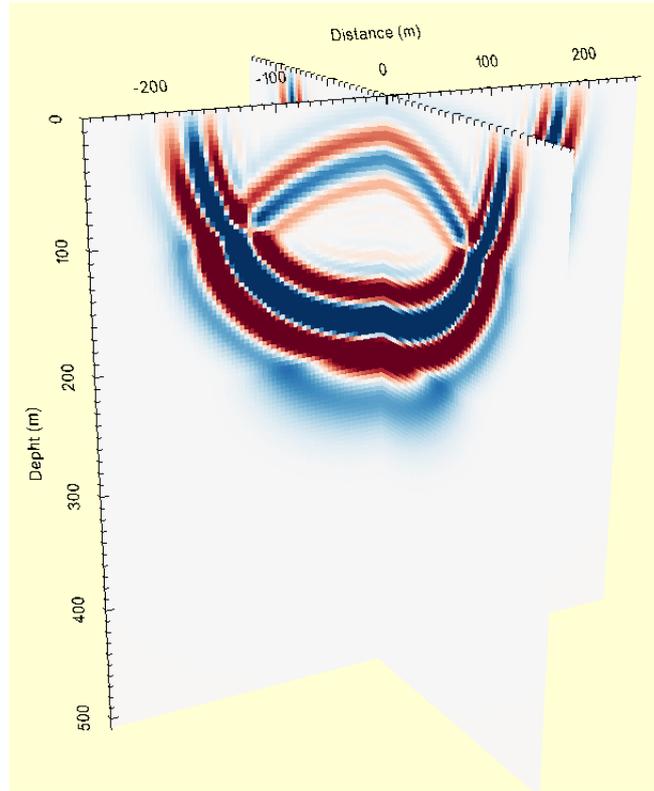


Figura 4.9: Snapshot em $t = 2.0s$

4.7.2 Modelo de camadas inclinadas

Para este exemplo usamos a linguagem C no sistema Ubuntu Linux rodando em um 4X AMD Opteron 6376 Abu Dhabi 2.3GHz com 258 Gb. As ferramentas computacionais usadas para processamento na GPU (NVIDIA Tesla C2075), foram novamente a biblioteca CUSP, onde a manipulação algébrica de matrizes esparsas é feita de forma muito eficiente.

Conforme ilustrado na Figura 4.12, é usado um pequeno modelo sintético de sete camadas inclinadas. O número total de pontos no grid de entrada é $(n_x, n_y, n_z) = (2^9, 2^9, 2^9)$ e o espaçamento adotado foi de $h = 1,3m$ (o menor h para a malha OcTree) e, portanto, o modelo é um cubo com $665.6m$ de borda. As velocidades da camada são $c_1 = 1500m/s$, $c_2 = 2000m/s$, $c_3 = 2500m/s$, $c_4 = 3000m/s$, $c_5 = 4500m/s$, $c_6 = 3500m/s$ e $c_7 = 3800m/s$; e a densidade foi de $\rho = 1.000kg/m^3$ em todo o modelo. A malha OcTree gerada neste exemplo é muito simples: os volumes próximos das interfaces são refinados (tamanho de lado h) e os volumes nas camadas têm lado $2h$, como mostrado na Fig. 4.13. Neste exemplo, temos $n_v = 18,461,698$ e $n_f = 56,378,628$. O valor adotado para o passo de tempo foi

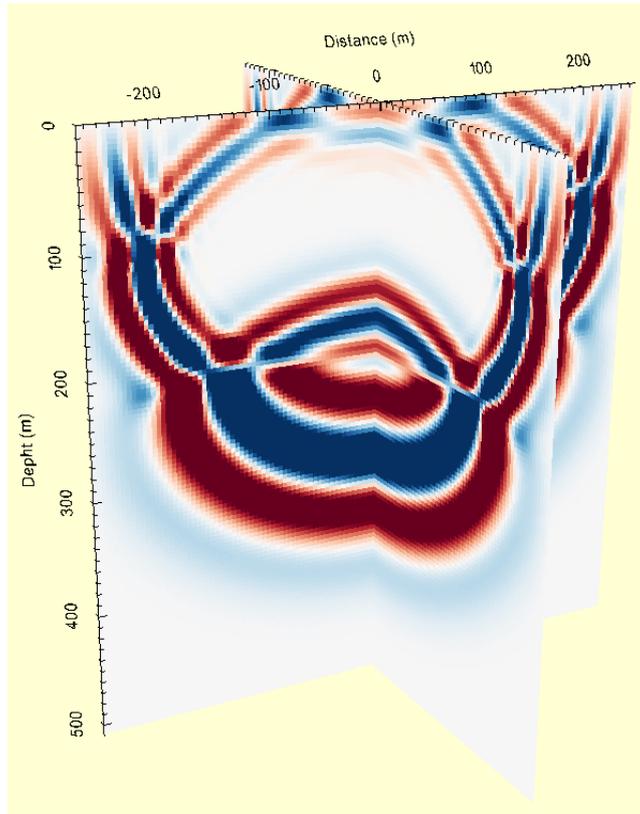


Figura 4.10: Snapshot em $t = 2.5s$

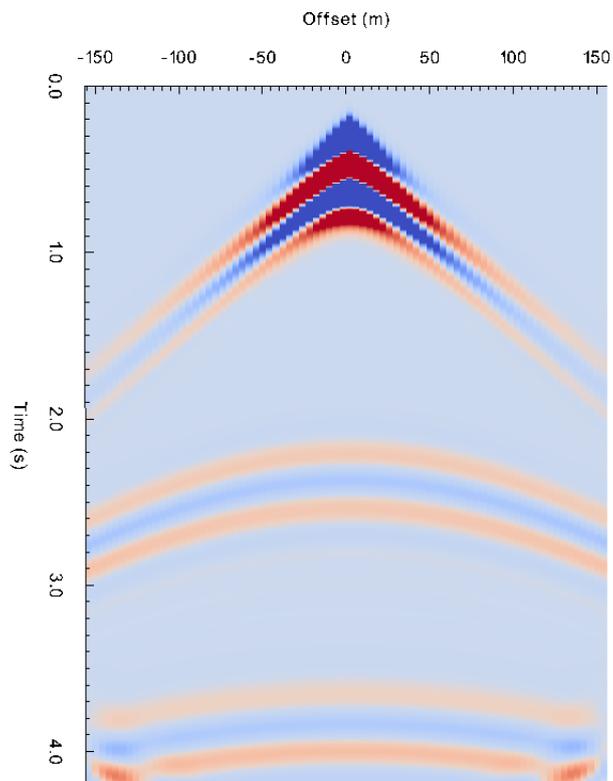


Figura 4.11: Sismograma sintético.

$\Delta t = 0,001s$ e uma fonte de pulso de Ricker foi usada (colocada em $z = 20,8m$) com frequência de corte de 80 Hz. Os receptores estão localizados em profundidade $z = 10,4m$.

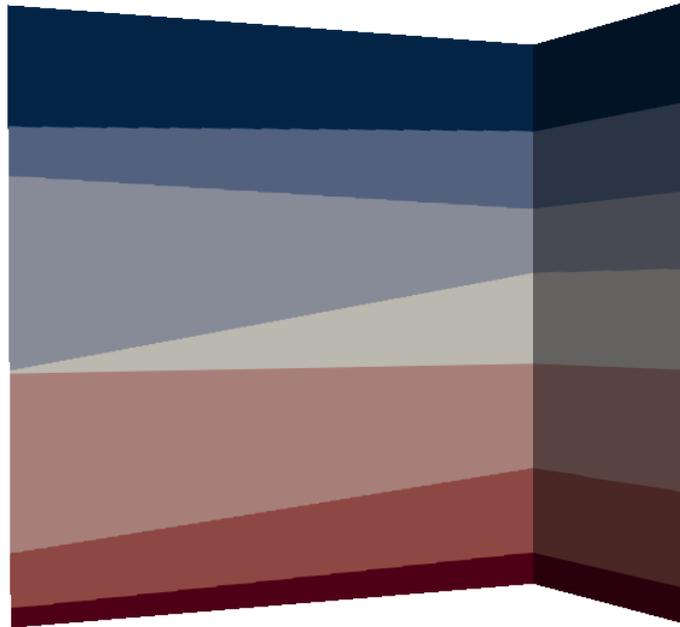


Figura 4.12: Modelo com camadas inclinadas.

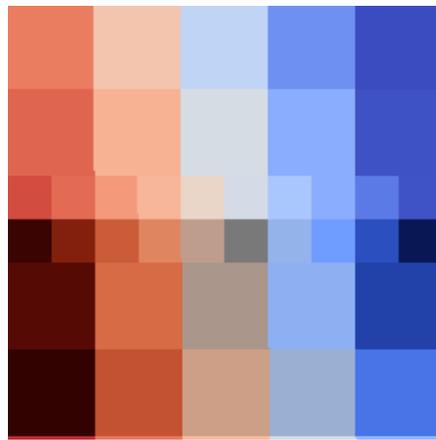


Figura 4.13: Refinamento próximo aos refletores.

A Figura 4.14 mostra o sismograma sintético 2D obtido e a Figura 4.15 mostra fatias planas ortogonais de um snapshot 3D no tempo $t = 0,336s$. As Figuras 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19 mostram quatro snapshots em fatias planas. Pode-se observar claramente que a onda acústica se propaga bem no meio, sem artefatos e sem dispersão. As reflexões dos limites foram muito atenuadas com as camadas de absorção. A eficácia das condições de contorno implementadas pode ser vista no sismograma (Fig. 4.14), pois mostra todas as reflexões esperadas provenientes das interfaces, mas

as reflexões do contorno estão ausentes. Vale ressaltar que os tamanhos de volume de $2,6m$, na primeira camada, significam que o número de pontos por comprimento de onda é $G = 7.2$. Na região refinada desta camada, $G = 14,4$. Nas outras camadas, $G > 9,5$.

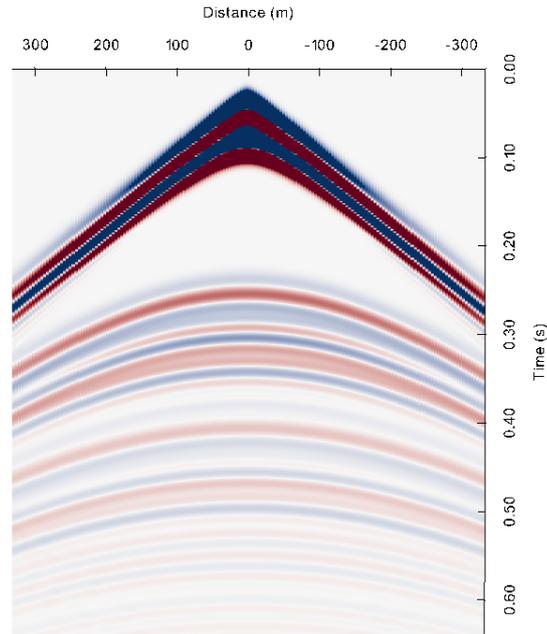


Figura 4.14: Sismograma sintético

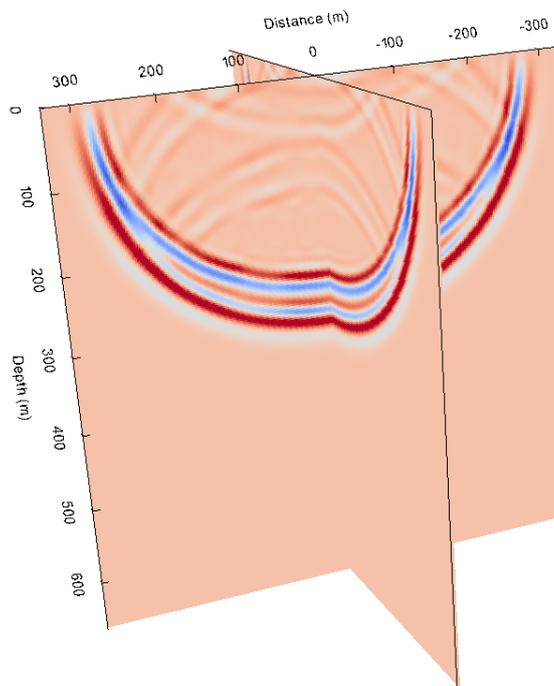


Figura 4.15: Snapshot 3D em $t = 0.336s$.

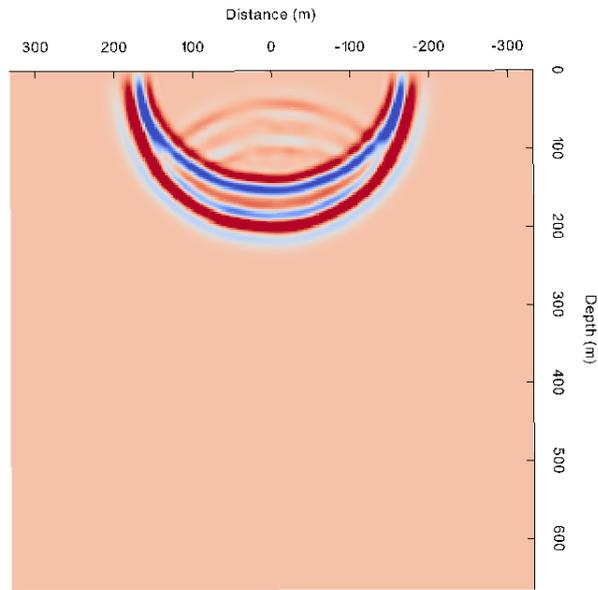


Figura 4.16: Snapshot em $t = 0.224s$.

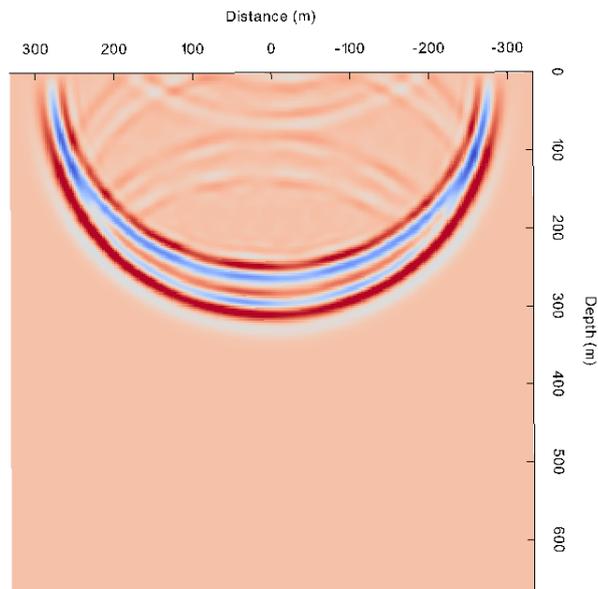


Figura 4.17: Snapshot em $t = 0.336s$.

4.7.3 Domo de sal

Também para este exemplo, usamos a linguagem C no sistema Ubuntu Linux rodando em um 4X AMD Opteron 6376 Abu Dhabi 2.3GHz com 258 Gb. Também foram usadas as ferramentas da biblioteca CUSP para processamento em GPU (NVIDIA Tesla C2075).

O modelo SEG/EAGE Salt Dome foi modificado para este exemplo para ser o grid A de entrada para a construção da malha OcTree (Figura 4.20). O modelo

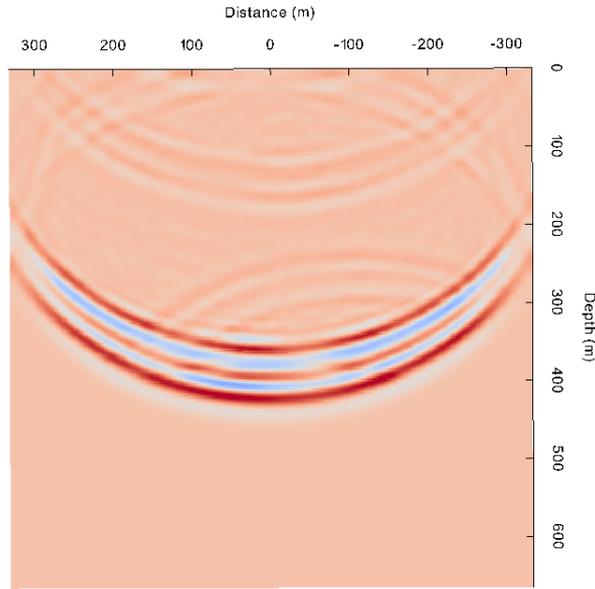


Figura 4.18: Snapshot em $t = 0.448s$.

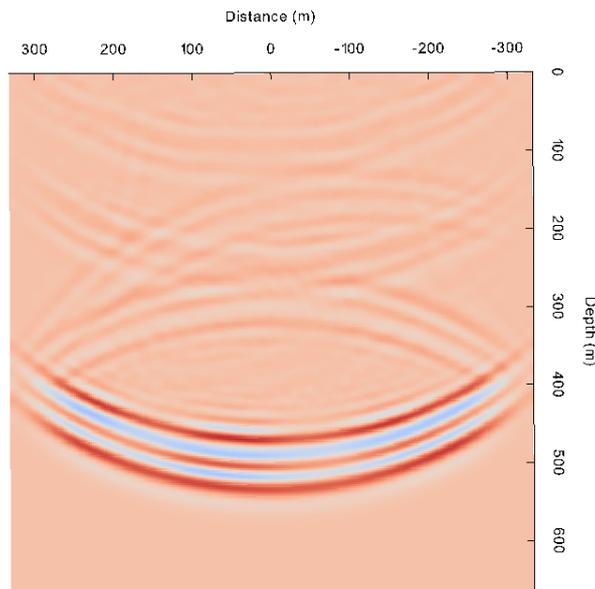


Figura 4.19: Snapshot em $t = 0.56s$.

modificado tem $1536 \times 384 \times 384 = 233.865.216$ pontos e a malha OcTree gerada tem $n_v = 53.652.756$ e $n_f = 167.778.537$. O espaçamento do grid adotado foi de $h = 1,85m$ (o menor h para a malha OcTree) e, portanto, o modelo é um paralelepípedo com $2.934.1m \times 710,4m \times 710,4m$. As velocidades do modelo variam entre 1500 m/s e 4485 m/s e a densidade foi considerada constante $\rho = 1.000kg/m^3$ em todo o modelo.

Para a geração da malha OcTree para este modelo um critério empírico foi usado. Para que um volume seja dividido em oito foi necessário que a diferença da propri-

idade em todos os pontos do grid A que compõem este volume tenha desvio médio maior que γ . Neste exemplo, foi usado $\gamma = 5$ m/s. Neste modelo onde há em várias regiões gradientes suaves de velocidade de propagação, se fossem usados os mesmos critérios para a construção da malha que nos exemplos anteriores (refinamento se desvio médio for maior que zero), haveria refinamento em todos os pontos da malha e assim a malha OcTree seria igual ao grid A . Se for tomado o parâmetro γ muito grande, variações importantes de velocidade seriam ocultadas. A Figura 4.21 mostra um corte no modelo em $y = 355,2$ m e a Figura 4.22 mostra uma representação dos diferentes tamanhos de volumes usados na malha OcTree.

Uma fonte de pulso de Ricker foi usada (colocada no centro do plano xy em $z = 7,4$ m) com frequência de corte de 50 Hz. Os receptores estão localizados em profundidade $z = 29,6$ m.

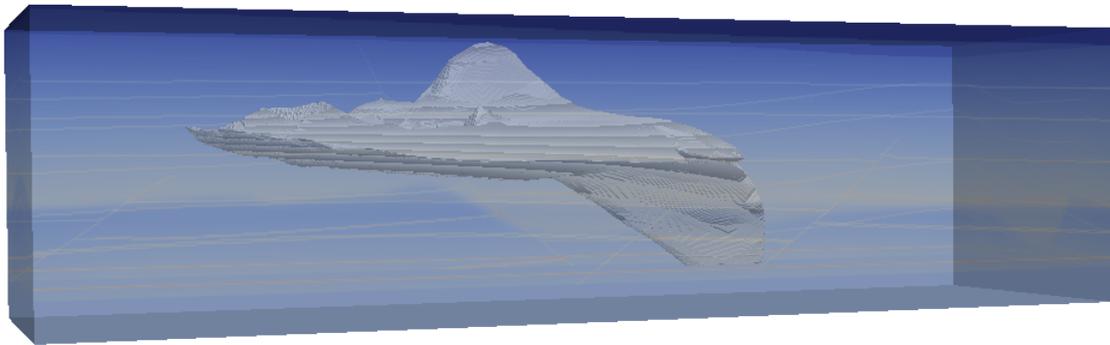


Figura 4.20: SEG/EAGE “salt dome” modificado.

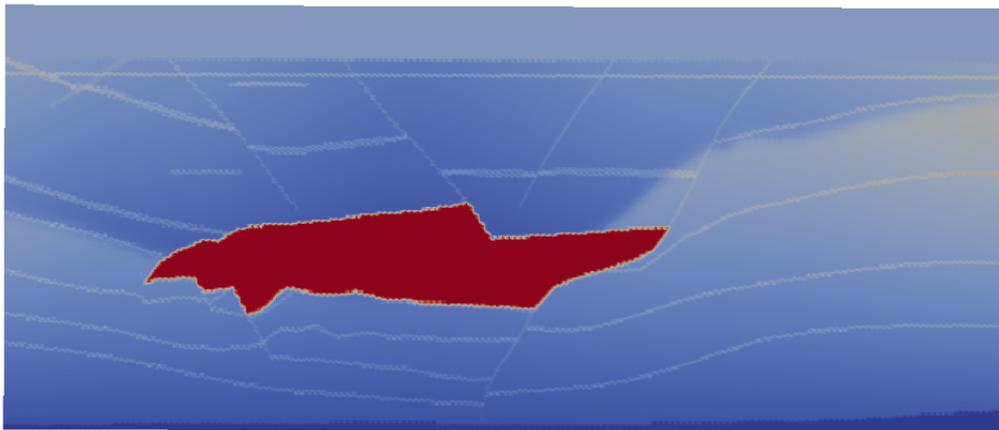


Figura 4.21: Corte no modelo SEG/EAGE “salt” dome modificado em $y = 355,2$ m.

As Figuras 4.23, 4.24, 4.25, 4.26, 4.27, 4.28 e 4.29 mostram snapshots em alguns instantes da simulação numérica em um corte na posição $y = 355,2$ m. As Figuras 4.30, 4.31, 4.32 e 4.33 mostram snapshots desta mesma simulação em um corte na posição $x = 1467,05$ m.

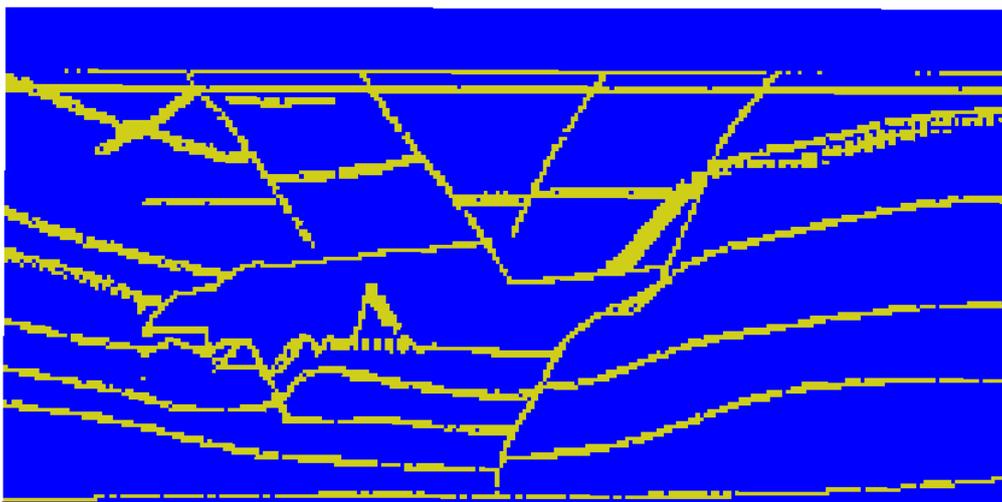


Figura 4.22: Corte no modelo SEG/EAGE salt dome modificado em $y = 355,2$ m. Região amarela com volumes de lado h e região azul com volumes de lado $2h$.

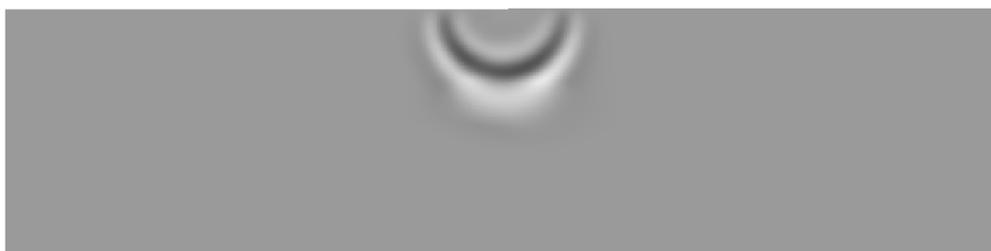


Figura 4.23: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,2s se simulação numérica.



Figura 4.24: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,25s se simulação numérica.



Figura 4.25: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,3s se simulação numérica.



Figura 4.26: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,35s se simulação numérica.



Figura 4.27: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,4s se simulação numérica.



Figura 4.28: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,45s se simulação numérica.



Figura 4.29: Fatia plana em $y = 355,2$ m com 0,5s se simulação numérica.

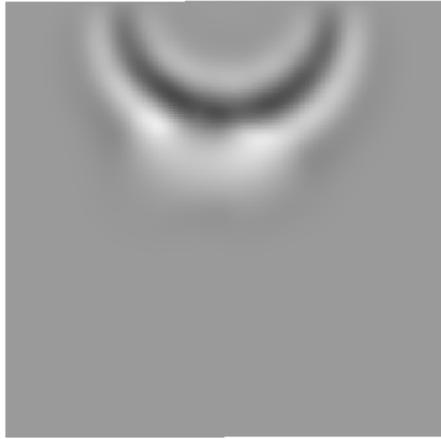


Figura 4.30: Fatia plana em $x = 1467,05$ m com 0,2s se simulação numérica.



Figura 4.31: Fatia plana em $x = 1467,05$ m com 0,25s se simulação numérica.



Figura 4.32: Fatia plana em $x = 1467,05$ m com 0,3s se simulação numérica.

A modelagem da propagação da onda acústica realizada com o esquema numérico proposto neste trabalho no modelo tridimensional adaptado do SEG/EAGE *salt dome* foi realizada de forma bastante satisfatória. As imagens obtidas com cortes



Figura 4.33: Fatia plana em $x = 1467,05$ m com 0,35s de simulação numérica.

2D nas direções xz e yz em diversos instantes mostraram a propagação no meio 3D e pode-se observar que a onda se propaga bem no meio, sem artefatos e sem dispersão. As camadas de absorção atenuaram as reflexões nas bordas. O esquema com malhas OcTree se mostra bastante promissor.

4.8 Discussões de alguns aspectos computacionais

Nesta seção, serão discutidas algumas características numéricas do algoritmo desenvolvido, em especial relativas ao dispêndio de memória e tempo de CPU. Além disso, objetiva-se extrapolar os resultados para aplicações de interesse, objeto de pesquisa futura.

- **Demanda por memória**

Quanto a este tópico, observou-se que para a construção da matriz Y , da equação 4.5, é necessário um considerável gasto de memória, em particular quando é feito o produto de duas matrizes esparsas. Para este processo é necessário o uso de variáveis auxiliares que elevam consideravelmente o uso de memória. No entanto, quase toda a memória gasta neste processo pode ser liberada no momento que a matriz Y é calculada. Especificamente, o cálculo da matriz Y envolve a utilização de várias matrizes que armazenam informações como a localização dos volumes e conexões entre volumes e faces.

Outros processos podem ser otimizados quanto a este ponto. Acredita-se que, por exemplo, as informações da posição dos volumes da malha, a conectividade e as informações referentes a quais volumes estão no contorno podem ser armazenadas de maneira mais eficiente utilizando-se técnicas mais sofisticadas de computação.

- **Tempo de processamento**

Para efeito de comparação, um algoritmo MDF, com as mesmas características do segundo exemplo da seção 4.7 foi rodado no mesmo computador do exemplo citado. Esta simulação usou o mesmo grid usado na construção da malha OcTree do exemplo de camadas inclinadas. Enquanto a simulação da seção 4.7 foi executada em aproximadamente 11,5 minutos a com MDF levou aproximadamente quinze horas e meia. Existem alguns motivos para a existência desta tão grande diferença e o maior deles é o número de graus de liberdade que, na simulação com OcTree é aproximadamente 2% do número de graus de liberdade da modelagem MDF rodada. Soma-se a isso o uso de paralelização em GPU. Nesta comparação, pode-se considerar que os dois modelos têm a mesma resolução.

Uma outra simulação foi feita usando este mesmo algoritmo MDF, porém com um grid com $128 \times 128 \times 128$ pontos. Este novo grid, segundo critérios discutidos na seção 4.5, mantém a estabilidade com espaçamento de malha quatro vezes maior, mantendo assim, as mesmas dimensões físicas do modelo OcTree da comparação anterior. No entanto as interfaces nesta nova simulação não são bem representadas por falta de resolução. Esta nova simulação tem aproximadamente 28% a menos de graus de liberdade da exposta na seção 4.7, e precisou de aproximadamente 24 minutos para ser realizada.

O esquema numérico proposto, com o uso de GPU, é capaz de ser mais rápido que esquemas MDF com menor número de graus de liberdade. Os modelos sintéticos usados nesta comparação são iguais quanto as dimensões físicas e diferentes quanto a resolução, pois o esquema OcTree é capaz de descrever as interfaces inclinadas com maior precisão devido ao refinamento local.

- **Paralelização**

Para a construção do algoritmo foi utilizada a biblioteca *Cusp*, escrita em linguagem CUDA (BELL e GARLAND, 2012). Esta biblioteca dispõe de uma série de algoritmos para álgebra linear de matrizes esparsas e possibilitou a paralelização em GPU de alguns cálculos no algoritmo, como por exemplo o produto entre matriz e vetor \mathbf{Yp}^{n-1} da equação 4.5, que é calculado em cada passo de tempo.

Percebeu-se uma forte necessidade de um aprofundamento nas técnicas de paralelização mistas de algoritmos computacionais. O fato do algoritmo desenvolvido neste trabalho utilizar paralelismo em GPU para efetuar cálculos de maneira mais ágil, não exclui a possibilidade de otimizar partes do código utilizando paralelização em CPU. Por exemplo, a implementação de algoritmos de migração reversa no tempo seria fortemente beneficiada por este tipo de paralelização mista.

4.9 Considerações sobre os resultados obtidos

Neste capítulo foi apresentado um algoritmo de volume finito explícito em 3D aplicado à propagação da onda acústica e três exemplos foram apresentados, sendo o último em um meio complexo adaptado do modelo *SEG/EAGE salt dome*. Os resultados obtidos mostram o potencial do método proposto para a simulação da propagação de ondas acústicas em meios complexos. O esquema numérico obtido é uma generalização do esquema padrão de malha intercalada (para acústica) para permitir refinamento local usando malhas OcTree. Na verdade, é uma generalização do esquema ESG 3D apresentado por DI BARTOLO *et al.* (2012). A malha OcTree pode ser gerada facilmente a partir de um grid para MDF refinada usando critérios simples. O esquema é muito promissor para a modelagem sísmica, bem como suas aplicações em migração e inversão (por exemplo, RTM e FWI). A possibilidade de usar diferentes tamanhos de volume pode ser responsável tanto pela melhor eficiência quanto pela resolução em interfaces. Considerando o intervalo de velocidade frequentemente encontrado na exploração sísmica, podem ser usados dois ou três tamanhos de volume diferentes nas camadas. Considerando a possibilidade de refinamento local em interfaces, podem ser utilizados tamanhos diferentes para descrever interfaces irregulares e garantir um bom número de pontos por comprimento de onda em interfaces, bem como na superfície no caso on-shore (utilizando-se uma formulação de vácuo para a correta representação da topografia).

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Contribuições e publicações

O presente trabalho apresentou uma nova estratégia para modelagem computacional de fenômenos regidos por EDPs em meios tridimensionais com o uso de malhas OcTree, que podem ser adaptadas às propriedades físicas dos meios estudados para otimização computacional e melhor descrição de geometrias complexas. Esta estratégia foi baseada no trabalho de HABER e HELDMANN (2007), que utilizou operadores diferenciais discretos em malhas OcTree para simular fenômenos regidos pelas Equações de Maxwell. Duas novas formulações para o operador diferencial gradiente foram desenvolvidas: a formulação α , que a partir de volumes fantasma que são gerados a partir de ponderações específicas de volumes próximos, melhora a precisão do operador (Seção 2.6) e a formulação λ , que altera alguns parâmetros da formulação a fim de obter resultados mais precisos (Seção 2.6.2). Estas duas novas aproximações apresentaram expressiva melhora nos resultados. Algoritmos para a geração de malhas OcTree e também para construção das matrizes que compõem os operadores Divergente e Gradiente foram escritos em linguagem C.

Duas aplicações foram abordadas neste trabalho: difusão do calor em meios biológicos e propagação de ondas acústicas em meios geológicos. Cada uma destas aplicações tem seus desafios próprios e as vantagens em utilizar as malhas OcTree em cada um dos casos foi discutida. Os resultados foram comparados com métodos numéricos clássicos ou respostas analíticas e observou-se em cada caso o potencial do método desenvolvido.

O primeiro problema abordado foi a condução de calor em meios homogêneos ou heterogêneos e posteriormente a condução do calor em meios biológicos (Capítulo 3). Esta estratégia foi seguida devido a menor complexidade em relação a aplicação da propagação da onda acústica, que desde o início apresentou grandes desafios, como a existência de reflexões numéricas provenientes do refinamento da malha,

algo inexistente na difusão do calor. Nesta aplicação foi testada a construção da malha OcTree, seus refinamentos locais, como também a construção dos operadores diferenciais que combinados foram capazes de descrever a equação do calor e também a equação de biotransferência de calor de Pennes. Um problema de modelagem do tratamento do câncer com hipertermia gerada por uma fonte de nanopartículas foi abordado e os resultados foram bastante satisfatórios (VALENTE *et al.*, 2018).

Posteriormente, deu-se início o estudo da modelagem da propagação da onda acústica no domínio do tempo. A equação da onda acústica em termos da pressão foi descrita a partir dos operadores construídos e foram desenvolvidos métodos para simulação de fontes sísmicas, camadas de absorção semelhantes às desenvolvidas por CERJAN *et al.* (1985) e condições de contorno não reflexivas semelhantes as propostas por REYNOLDS (1978). Vários testes com modelos sintéticos complexos foram realizados, mostrando o correto funcionamento do algoritmo e a economia em número de volumes utilizados com a malha OcTree. As reflexões numéricas nas regiões com refinamento foram fortemente atenuadas, demonstrando o potencial do método para aplicações geofísicas.

Durante o período do doutorado alguns trabalhos foram submetidos, apresentados e publicados em anais de eventos de grande relevância e um artigo foi publicado em um periódico internacional.

Anais de congressos

- 3D seismic modeling using staggered-grid OcTree mesh, SEG Tech. Progr. Expand. Abstr., pp. 3754-3758. A.G. Valente, L. Di Bartolo, W.J. Mansur. (2015)
- 3D OcTree Finite-volume method for acoustic wave simulation. In Proceedings of the XXXVI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering . Rio de Janeiro. Valente, A. Di Bartolo, L. Mansur, W. (2015).
- Hyperthermia treatment simulation using 3D OcTree meshes. In Proceedings of the XXXVIII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering (Vol. m). Florianópolis. Valente A. Di Bartolo, L. Loureiro, Felipe. Mansur, W. (2017).

Artigo em periódico

- Computer simulation of hyperthermia with nanoparticles using an OcTree finite volume technique. International Communications in Heat and Mass Transfer, 91, 248-255. Valente, A., Loureiro, F., Di Bartolo, L., Mansur, W. J. (2018).

Um trabalho para um periódico internacional com os resultados da propagação da onda acústica em meios geológicos complexos está em fase de preparação.

5.2 Trabalhos futuros

Devido a característica particular da metodologia desenvolvida neste trabalho de construção de operadores diferenciais discretos, pode-se simular uma ampla variedade de fenômenos regidos por equações diferenciais parciais. Isto abre espaço para diversas aplicações e a simulação computacional de outros problemas físicos. Pode-se propor, a partir deste trabalho, as seguintes atividades:

1. Desenvolver um esquema computacional útil para a simulação do monitoramento em tempo real do tratamento com hipertermia. Pretende-se, observando o campo de temperaturas na superfície da pele, usar algoritmos de inversão para prever a temperatura em todo o domínio tridimensional estudado, estimando assim em tempo real o dano causado ao tecido doente, como também o dano causado ao tecido saudável.
2. Construção de operadores divergente e gradiente de quarta ordem.
3. Fazer um estudo profundo de estabilidade e dispersão numérica para o problema da biotransferência de calor como também para a propagação de ondas.
4. Implementar camadas de absorção mais eficientes para propagação da onda: Baseado no trabalho de BERENGER (1994), construir camadas do tipo PML para o esquema proposto.
5. Aplicação do algoritmo de modelagem à migração RTM pré-empilhamento. Baseado nos trabalhos de BULCÃO (2004) e de SHI e WANG (2016) pretende-se implementar algoritmos de migração. Para isso podem ser implementados códigos que se valem de paralelismo em CPU e em GPU.
6. Estender a formulação para modelagem pseudo-acústica em meios VTI e utilizá-la na RTM.
7. Estender a formulação para modelagem elástica em meios isotrópicos e anisotrópicos com anisotropia ortotrópica.
8. Desenvolver uma metodologia de adaptação temporal: Baseado no trabalho de ANTUNES *et al.* (2014), é possível construir um esquema numérico capaz de ter passos de tempo distintos em diferentes regiões do modelo. Isto poderá acarretar em uma considerável redução no tempo de processamento.

Referências Bibliográficas

- ALFORD, R. M., KELLY, K. R., BOORE, D. M., 1974, “Accuracy of finite-difference modeling of the acoustic wave equation”, *Geophysics*, v. 39, n. 6, pp. 834–842.
- ANTUNES, A. J., LEAL-TOLEDO, R. C., FILHO, O. T. D. S., et al., 2014, “Finite Difference Method for Solving Acoustic Wave Equation Using Locally Adjustable Time-steps”, *Procedia Comput. Sci.*, v. 29, pp. 627–636.
- BARTH, T. J., 1992, *Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier-Stokes equations*.
- BELL, N., GARLAND, M., 2012. “Cusp: Generic Parallel Algorithms for Sparse Matrix and Graph Computations”. Disponível em: <<http://cusp-library.googlecode.com>>. Version 0.3.0.
- BERENGER, J., 1994, “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves”, *Journal of computational physics*, v. 114, n. 2, pp. 185–200.
- BULCÃO, A., 2004, “Modelagem e migração reversa no tempo empregando operadores elásticos e acústicos”, *Tese de Doutorado-UFRJ: PEC/COPE*.
- CERJAN, C., KOSLOFF, D., KOSLOFF, R., et al., 1985, “A nonreflecting boundary condition for discrete acoustic and elastic wave equations”, *Geophysics*, v. 50, n. 4, pp. 705–708.
- DAS, K., MISHRA, S. C., 2013, “Estimation of tumor characteristics in a breast tissue with known skin surface temperature”, *J. Therm. Biol.*, v. 38, n. 6, pp. 311–317. ISSN: 0306-4565.
- DAS, K., MISHRA, S. C., 2014, “Non-invasive estimation of size and location of a tumor in a human breast using a curve fitting technique ?” *Int. Commun. Heat Mass Transf.*, v. 56, pp. 63–70. ISSN: 0735-1933.
- DAS, K., SINGH, R., MISHRA, S. C., 2013, “Numerical analysis for determination of the presence of a tumor and estimation of its size and location in a tissue”, *J. Therm. Biol.*, v. 38, n. 1, pp. 32–40. ISSN: 0306-4565.

- DI BARTOLO, L., 2010, *Modelagem sísmica Anisotrópica Através do Método das diferenças finitas utilizando sistemas de equações em segunda ordem*. Tese de Doutorado, Ph. D. Thesis, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- DI BARTOLO, L., DORS, C., MANSUR, W., 2011, “A new finite difference scheme for modeling acoustic wave propagation”. In: *82nd Annual International Meeting*. Society of Exploration Geophysicists.
- DI BARTOLO, L., DORS, C., MANSUR, W., 2012, “A new family of finite-difference schemes to solve the heterogeneous acoustic wave equation”, *Geophysics*, v. 77, n. 5, pp. T187–T199. doi: 10.1190/geo2011-0345.1. Disponível em: <<https://doi.org/10.1190/geo2011-0345.1>>.
- DI BARTOLO, L., DORS, C., MANSUR, W. J., 2015, “Theory of equivalent staggered-grid schemes: application to rotated and standard grids in anisotropic media”, *Geophys. Prospect.* doi: 10.1111/1365-2478.12210. Disponível em: <<https://doi.org/10.1111/1365-2478.12210>>.
- DI BARTOLO, L., LOPES, L., LEMOS, L. J. R., 2017, “High-order FD approximations to solve pseudo-acoustic equations in 3D VTI media”, *Geophysics*, v. 82, n. 5, pp. T225–T235.
- DILLER, K. R., 1992, “Modeling of bioheat transfer processes at high and low temperatures”, *Advances in heat transfer*, v. 22, pp. 157–357.
- DORMY, E., TARANTOLA, A., 1995a, “Numerical simulation of elastic wave propagation using a finite volume method”, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth (1978–2012)*, v. 100, n. B2, pp. 2123–2133.
- DORMY, E., TARANTOLA, A., 1995b, “Numerical simulation of elastic wave propagation using a finite volume method”, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth (1978–2012)*, v. 100, n. B2, pp. 2123–2133.
- GRAVES, R., 1996, “Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences”, *Bulletin of the Seismological Society of America*, v. 86, n. 4, pp. 1091.
- GWON, H., 2015, “International Journal of Heat and Mass Transfer Numerical analysis for the conjugate heat transfer of skin under contrast therapy”, *Int. J. Heat Mass Transf.*, v. 86, pp. 388–396. ISSN: 0017-9310.
- HABER, E., HELDMANN, S., 2007, “An octree multigrid method for quasi-static Maxwell’s equations with highly discontinuous coefficients”, *J. Comput. Phys.*, v. 223, n. 2, pp. 783–796.

- HABERMAN, R., 1983, *Elementary applied partial differential equations*, v. 987. Prentice Hall Englewood Cliffs, NJ.
- HILGER, I., HERGT, R., KAISER, W. A., 2005, “Towards breast cancer treatment by magnetic heating”. In: *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 293, pp. 314–319. ISBN: 03048853. doi: 10.1016/j.jmmm.2005.02.026.
- HOLBERG, O., 1987, “Computational Aspects of the Choice of Operator and Sampling Interval for Numerical Differentiation in Large-Scale Simulation of Wave Phenomena*”, *Geophys. Prospect.*, v. 35, n. 6, pp. 629–655.
- HORESH, L., HABER, E., 2011, “A second order discretization of Maxwell’s equations in the quasi-static regime on octree grids”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 33, n. 5, pp. 2805–2822.
- HUANG, S., HAINFELD, J., 2013, “Intravenous magnetic nanoparticle cancer hyperthermia”, *International Journal of Nanomedicine*, pp. 2521–2532.
- LANG, J., ERDMANN, B., SEEBASS, M., 1999, “Impact of nonlinear heat transfer on temperature control in regional hyperthermia”, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 46, n. 9, pp. 1129–1138.
- LEVANDER, A. R., 1988, “Fourth-order finite-difference P-SV seismograms”, *Geophysics*, v. 53, n. 11, pp. 1425–1436.
- LOUREIRO, F., MANSUR, W., WROBEL, L., et al., 2014, “The explicit Green’s approach with stability enhancement for solving the bioheat transfer equation”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 76, pp. 393–404.
- MINKOWYCZ, W., 1996, *Advances in numerical heat transfer*, v. III. CRC press.
- MINKOWYCZ, W., SPARROW, E. M., ABRAHAM, J. P., 2012, *Nanoparticle heat transfer and fluid flow*. CRC press.
- MITTET, R., HOLBERG, O., ARNTSEN, B., et al., 1988, “Fast finite-difference modeling of 3-D elastic wave propagation”, *58th Ann. Internat. Mtg. p. Session:S23.7*.
- MOCZO, P., KRISTEK, J., VAVRYCUK, V., et al., 2002, “3D heterogeneous staggered-grid finite-difference modeling of seismic motion with volume harmonic and arithmetic averaging of elastic moduli and densities”, *Bulletin of the Seismological Society of America*, v. 92, n. 8, pp. 3042.

- MOCZO, P., KRISTEK, J., GALIS, M., et al., 2010, “On accuracy of the finite-difference and finite-element schemes with respect to P-wave to S-wave speed ratio”, *Geophysical Journal International*, v. 182, pp. 493–510.
- MORGADO, D., 1989, *Calculo Diferencial E Integral De Funções De: VARIAS VARIÁVEIS*. UFRJ EDITORA. ISBN: 9788571083998. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=xZUyvgAACAAJ>>.
- MOROS, EG, W. R. H., 2013, *Physics of Thermal Therapy: Fundamentals and Clinical Applications*. CRC press.
- MOROZ, P., JONES, S. K., GRAY, B. N., 2002, “Magnetically mediated hyperthermia: current status and future directions.” *Int. J. Hyperthermia*, v. 18, n. 4, pp. 267–84. ISSN: 0265-6736. doi: 10.1080/02656730110108785. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/12079583>>.
- NÓBREGA, S., COELHO, P. J., 2017, “A parametric study of thermal therapy of skin tissue”, *J. Therm. Biol.*, v. 63, n. November 2016, pp. 92–103. ISSN: 0306-4565. doi: 10.1016/j.jtherbio.2016.11.016.
- POPINET, S., 2003, “Gerris: A tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries”, *J. Comput. Phys.*, v. 190, n. 2, pp. 572–600.
- REDDY, J. N., 2014, *An Introduction to Nonlinear Finite Element Analysis: with applications to heat transfer, fluid mechanics, and solid mechanics*. OUP Oxford.
- REIS, R. F., LOUREIRO, F. S., LOBOSCO, M., 2016, “3D numerical simulations on GPUs of hyperthermia with nanoparticles by a nonlinear bioheat model”, *J. Comput. Appl. Math.*, v. 295, pp. 35–47. ISSN: 03770427.
- REYNOLDS, A. C., 1978, “Boundary Conditions for the Numerical Solution of Wave Propagation Problems”, *Geophysics*, v. 43, n. 6, pp. 1099–1110.
- ROBERTSSON, J., LEVANDER, A., HOLLIGER, K., 1996, “A hybrid wave propagation simulation technique for ocean acoustic problems”, *Journal of Geophysical Research*, v. 101, n. B5, pp. 11225.
- SALLOUM, M., MA, R., ZHU, L., 2008, “An in-vivo experimental study of temperature elevations in animal tissue during magnetic nanoparticle hyperthermia”, *Int. J. Hyperth.*, v. 24, n. 7, pp. 589–601.
- SHI, Y., WANG, Y., 2016, “Reverse time migration of 3D vertical seismic profile data”, v. 81, n. 1. ISSN: 19422156. doi: 10.1190/GEO2015-0277.1.

- TADI, M., 2004, “Finite Volume Method for 2D Elastic Wave Propagation”, *Bull. Seismol. Soc. Am.*, v. 94, n. 4 (aug), pp. 1500–1509.
- TEWARSON, R. P., REGINALD, P., 1973. “Sparse Matrices (Part of the Mathematics in Science & Engineering series)” .
- VALENTE, A. G., DI BARTOLO, L., MANSUR, W. J., 2015, “3D seismic modeling using staggered-grid OcTree mesh”. In: *SEG Tech. Progr. Expand. Abstr. 2015*, pp. 3754–3758.
- VALENTE, A., LOUREIRO, F., DI BARTOLO, L., et al., 2018, “Computer simulation of hyperthermia with nanoparticles using an OcTree finite volume technique”, *Int. Commun. Heat Mass Transf.*, v. 91, pp. 248–255. ISSN: 07351933. doi: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2017.12.021. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0735193317303512>>.
- VIRIEUX, J., 1984, “SH-wave propagation in heterogeneous media: Velocity-stress finite-difference method”, *Geophysics*, v. 49, n. 11, pp. 1933–1957.
- VIRIEUX, J., 1986, “P-SV wave propagation in heterogeneous media: Velocity-stress finite-difference method”, *Geophysics*, v. 51, n. 4, pp. 889–901.
- WELCH, A., 1985, “Laser irradiation of tissue”, *Heat transfer in medicine and biology*, v. 2, pp. 135–179.
- WRIGHT, S., NOCEDAL, J., 1999, “Numerical optimization”, *Springer Science*, v. 35, n. 67-68, pp. 7.
- YEE, K., 1966, “Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media”, *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on [legacy, pre - 1988]*, v. 14, n. 3, pp. 302–307.
- ZHANG, J., VERSCHUUR, D. J., 2002, “Elastic wave propagation in heterogeneous anisotropic media using the lumped finite-element method”, *Geophysics*, v. 67, n. 2, pp. 625.
- ZHANG, S. C. J. & X. X., 2005, “Dynamic modeling of photothermal interactions for laser-induced interstitial thermotherapy : parameter sensitivity analysis”, *Lasers Med. Sci.*, v. 20, n. 3, pp. 122–131.
- ZIENKIEWICZ, O. C., MORGAN, K., 1983, *Finite Element and Approximation*.

Apêndice A

Equivalência entre MDFI e MVF com malhas OcTree regulares

Neste apêndice será demonstrada a equivalência do método dos volumes finitos com malhas OcTree, proposto neste trabalho, com o esquema de malha equivalente (ESG, do inglês *equivalent staggered grid*), no caso em que a malha OcTree é regular, ou seja, todos seus volumes têm aresta com medida h .

A.1 Esquema de malha equivalente

Nesta seção, é exposto o esquema ESG, conforme discutido em DI BARTOLO *et al.* (2012). A malha intercalada utilizada é a extensão da apresentada na figura 2.1 para o caso 2D, uma vez que se está tratando o caso 3D. A seguir, são apresentados os operadores ESG utilizados e, posteriormente, o esquema numérico resultante da aplicação dos operadores baseados no MVF desenvolvidos neste trabalho à equação acústica da onda para o caso 3D.

Em primeiro lugar, a aproximação temporal é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p_{i,j,k}^n}{\partial t^2} &= D(Dp_{i,j,k}^n) = \frac{\left(\frac{p_{i,j,k}^{n+1} - p_{i,j,k}^n}{\Delta t}\right) - \left(\frac{p_{i,j,k}^n - p_{i,j,k}^{n-1}}{\Delta t}\right)}{\Delta t} \\ &= \frac{p_{i,j,k}^{n+1} - 2p_{i,j,k}^n + p_{i,j,k}^{n-1}}{\Delta t^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

onde D é o operador de segunda ordem para derivadas primeiras em malha intercalada.

A aproximação espacial, em segunda ordem de precisão, é dada por

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(b \frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i,j,k}^n = \frac{1}{h} \left[b_{i+\frac{1}{2},j,k} \left(\frac{p_{i+1,j,k}^n - p_{i,j,k}^n}{h} \right) - b_{i-\frac{1}{2},j,k} \left(\frac{p_{i,j,k}^n - p_{i-1,j,k}^n}{h} \right) \right], \quad (\text{A.2})$$

onde b é o inverso da densidade, considerado em posição intermediária da malha (malha intercalada), sendo necessário utilizar a mesma interpolação que o esquema SSG para se obter a equivalência.

Aplicando operadores deste tipo na equação em 3D, ou seja,

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = c^2 \rho \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} \right) \right], \quad (\text{A.3})$$

obtem-se o seguinte esquema numérico:

$$p_{i,j,k}^{n+1} = \frac{\Delta t^2}{h^2} c_{i,j,k}^2 \rho_{i,j,k} \left[b_{i+\frac{1}{2},j,k} (p_{i+1,j,k}^n - p_{i,j,k}^n) - b_{i-\frac{1}{2},j,k} (p_{i,j,k}^n - p_{i-1,j,k}^n) + b_{i,j+\frac{1}{2},k} (p_{i,j+1,k}^n - p_{i,j,k}^n) - b_{i,j-\frac{1}{2},k} (p_{i,j,k}^n - p_{i,j-1,k}^n) + b_{i,j,k+\frac{1}{2}} (p_{i,j,k+1}^n - p_{i,j,k}^n) - b_{i,j,k-\frac{1}{2}} (p_{i,j,k}^n - p_{i,j,k-1}^n) \right] + 2p_{i,j,k}^n - p_{i,j,k}^{n-1}. \quad (\text{A.4})$$

A.2 Operadores diferenciais em uma malha OcTree regular

Para a construção do operador divergente para uma malha OcTree regular usaremos a integral 2.4, que é calculada na superfície de cada hexaedro vizinho, que neste caso são todos de mesmas dimensões.

Na situação apresentada, todos os vizinhos têm a mesma medida de lado h do volume onde a integral será calculada. Temos o seguinte resultado

$$\iint_{S(V_j)} \mathbf{J} \cdot \mathbf{ndS} = 2^{2n} h^2 (-J_{x_1} + J_{x_2} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2}).$$

Assim podemos escrever

$$\text{Div}(\mathbf{J})_i \approx \frac{1}{h^3} [h^2 (-J_{x_1} + J_{x_2} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2})].$$

$$\text{Div}(\mathbf{J})_i \approx \frac{1}{h} [(-J_{x_1} + J_{x_2} - J_{y_1} + J_{y_2} - J_{z_1} + J_{z_2})]. \quad (\text{A.5})$$

Podemos escrever então o operador divergente usando a notação matricial de maneira semelhante a equação 2.6 da seguinte maneira

$$\mathbf{DIV} = \frac{1}{h} \mathbf{N}. \quad (\text{A.6})$$

De maneira semelhante a equação 2.7, podemos construir o operador gradiente para uma malha OcTree regular como

$$\mathbf{GRAD} = -\frac{1}{h} \mathbf{N}^t. \quad (\text{A.7})$$

Portanto, pode-se agora escrever um operador explícito para equação da onda acústica em termos de pressão, semelhante a equação 4.5, como

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} &= c^2 \rho \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) + s \\ \frac{\mathbf{p}^n - 2\mathbf{p}^{n-1} + \mathbf{p}^{n-2}}{\Delta t^2} &= c^2 \rho \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p}^{n-1} \right) + s \\ \mathbf{p}^n &= \Delta t^2 c^2 \rho \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p}^{n-1} \right) + \mathbf{S} + 2\mathbf{p}^{n-1} - \mathbf{p}^{n-2} \\ \mathbf{p}^n &= (\mathbf{BNLN}^t) \mathbf{p}^{n-1} + 2\mathbf{p}^{n-1} - \mathbf{p}^{n-2} + \mathbf{S} \end{aligned}$$

$$\mathbf{p}^n = \mathbf{K} \mathbf{p}^{n-1} + 2\mathbf{p}^{n-1} - \mathbf{p}^{n-2} + \mathbf{S}, \quad (\text{A.8})$$

onde a matriz diagonal $B_{i,i}$ é definido como o produto $\Delta t^2 c^2 \rho \frac{1}{h^2}$ em cada volume V_i , $L_{i,i}$ definido pelo oposto do inverso da média harmônica da densidade volumétrica de massa dos volumes vizinhos que possuem como uma de suas faces F_i , \mathbf{S} uma matriz $n_v \times n_v$ tal que seu único valor diferente de zero $S_{j,j}$ é a função s que representará a fonte que está localizada no volume V_j e $\mathbf{K} = \mathbf{BNLN}^t$.

Cada linha i de \mathbf{K} contém o Operador Laplaciano discretizado para cada volume v_i da malha OcTree regular. Em seguida, será analisado este operador para o volume v_i para que possamos compara-lo com o operador usado no esquema ESG e assim comprovar a equivalência entre eles.

Deve-se primeiramente observar que pelo fato da matriz \mathbf{N} ter dimensões $n_v \times n_f$, o operador laplaciano expresso pela matriz \mathbf{K} será $n_v \times n_v$, o que permitirá que operador explícito A.8 seja aplicado aos volumes da malha, de forma que as operações que consideram as faces, as quais será argumentado que são equivalentes as relacionadas a malha intercalada do esquema ESG, fiquem apenas nas operações que constituem \mathbf{K} .

Dado um volume v_i de uma malha OcTree regular, podemos afirmar que v_i tem

seis faces apenas. Logo, a linha i de \mathbf{N} tem apenas seis valores não nulos, três iguais a 1 outros três iguais a -1 . Ao multiplicar \mathbf{N} por \mathbf{LN}^t , precisa-se notar que a linha i de \mathbf{NLN}^t terá apenas sete valores não nulos. O valor da diagonal principal será naturalmente $-\left(\frac{1}{\rho(f_{j1})} + \frac{1}{\rho(f_{j2})} + \frac{1}{\rho(f_{j3})} + \frac{1}{\rho(f_{j4})} + \frac{1}{\rho(f_{j5})} + \frac{1}{\rho(f_{j6})}\right)$, onde $f_{j1}, f_{j2}, f_{j3}, f_{j4}, f_{j5}, f_{j6}$ são as faces de v_i . Os outros seis valores não nulos serão encontrados ao multiplicar a linha i de \mathbf{N} exatamente pelas colunas relacionadas as faces de v_i . Assim $N_{i,j}$ será $\rho(f_j)$.

A linha i do produto de \mathbf{B} por \mathbf{NLN}^t , portanto tem sete valores não nulos, um na diagonal principal, a saber $-\Delta t^2 c(v_i)^2 \rho(v_i) \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{\rho(f_{j1})} + \frac{1}{\rho(f_{j2})} + \frac{1}{\rho(f_{j3})} + \frac{1}{\rho(f_{j4})} + \frac{1}{\rho(f_{j5})} + \frac{1}{\rho(f_{j6})}\right)$ e outros seis $\Delta t^2 c(v_i)^2 \rho(v_i) \frac{1}{h^2} \frac{1}{\rho(f_{jk})}$, $k = 1, \dots, 6$.

Aplicando A.8 apenas ao volume v_i tem-se

$$p^n(v_i) = \mathbf{K}p^{n-1}(v_i) + 2p^{n-1}(v_i) - p^{n-2}(v_i)$$

Logo,

$$\begin{aligned} p^n(v_i) = & \frac{\Delta t^2 c(v_i)^2 \rho(v_i)}{h^2} \left[- \left[\frac{1}{\rho(f_{j1})} + \frac{1}{\rho(f_{j2})} + \frac{1}{\rho(f_{j3})} + \frac{1}{\rho(f_{j4})} + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{1}{\rho(f_{j5})} + \frac{1}{\rho(f_{j6})} \right] p^{n-1}(v_i) + \frac{1}{\rho(f_{j1})} p^{n-1}(v_i^1) + \frac{1}{\rho(f_{j2})} p^{n-1}(v_i^2) + \frac{1}{\rho(f_{j3})} p^{n-1}(v_i^3) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\rho(f_{j4})} p^{n-1}(v_i^4) + \frac{1}{\rho(f_{j5})} p^{n-1}(v_i^5) + \frac{1}{\rho(f_{j6})} p^{n-1}(v_i^6) \right] + 2p^{n-1}(v_i) - p^{n-2}(v_i), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

onde v_i^k , $k = 1, \dots, 6$ são os vizinhos de v_i .

Arrumando esta expressão de maneira adequada, podemos notar que temos exatamente o que seria construído no esquema ESG, se considerarmos as faces da malha OcTree como a malha intercalada do ESG. A saber

$$\begin{aligned} p^n(v_i) = & \frac{\Delta t^2 c(v_i)^2 \rho(v_i)}{h^2} \left[\frac{1}{\rho(f_{j1})} (p^{n-1}(v_i^1) - p^{n-1}(v_i)) + \right. \\ & \frac{1}{\rho(f_{j2})} (p^{n-1}(v_i^2) - p^{n-1}(v_i)) + \frac{1}{\rho(f_{j3})} (p^{n-1}(v_i^3) - p^{n-1}(v_i)) + \\ & \frac{1}{\rho(f_{j4})} (p^{n-1}(v_i^4) - p^{n-1}(v_i)) + \frac{1}{\rho(f_{j5})} (p^{n-1}(v_i^5) - p^{n-1}(v_i)) + \\ & \left. \frac{1}{\rho(f_{j6})} (p^{n-1}(v_i^6) - p^{n-1}(v_i)) \right] + 2p^{n-1}(v_i) - p^{n-2}(v_i). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Para verificar que a equação acima é exatamente igual a equação A.4, basta notar que o volume v_i seria equivalente a um ponto $P_{i,j,k}$ de uma malha ESG e que, por

exemplo, o volume a esquerda seria o ponto $P_{i-1,j,k}$ e que a face que os unem seria o ponto $P_{i-\frac{1}{2},j,k}$. Além disso deve-se considerar $b = \frac{1}{\rho}$.