

**OTIMIZAÇÃO COMPUTACIONAL DA TÉCNICA DE
ELEMENTOS FINITOS PARA O MODELAGEMTO
GEOFÍSICO ELETROMAGNÉTICO**

por

LURIMAR SMERA BATISTA

Matemático (Universidade Católica do Salvador - 1984)

Tese submetida como requisito parcial ao grau de

MESTRE EM CIÊNCIAS

em

GEOFÍSICA

ao

Colegiado do Curso de Pós-Graduação em

Geofísica

da

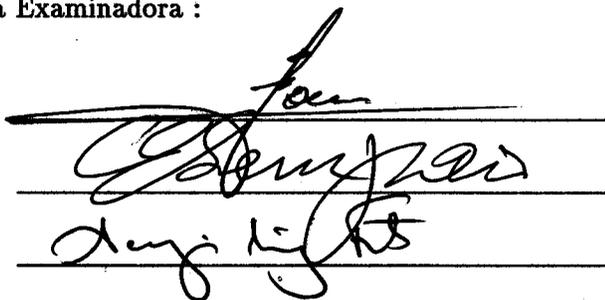
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ

Banca Examinadora :

Dr. Milton José Porsani (Orientador)

Dr. Edson Emanuel Starteri Sampaio

Dr. Sérgio Luiz Fontes



The image shows three horizontal lines representing the signatures of the exam board members. The first line has a signature that appears to be 'Milton José Porsani'. The second line has a signature that appears to be 'Edson Emanuel Starteri Sampaio'. The third line has a signature that appears to be 'Sérgio Luiz Fontes'.

Data da Homologação : 25/11/1991

T 379 **BATISTA, Lurimar Smera. Otimização computacional da**
B 333 **técnica de elementos finitos para o modelamento geo-**
 físico eletromagnético. Belém, Universidade Federal do
 Pará. Centro de Geociências, 1991. 80p. il.
 Tese (Mestrado em Geofísica) – Curso de Pós-Graduação
 em Geofísica, Centro de Geociências, UFPa., 1991.

1. MODELAMENTO GEOELETROMAGNÉTICO. 2. TÉCNICAS COMPUTACIONAIS EM GEOFÍSICA. 3. OTIMIZAÇÃO DE ALGORÍTMO COMPUTACIONAL. I. Universidade Federal do Pará. Centro de Geociências–Departamento de Geofísica. II. Título

T 379 - 0391/557 - 12.12.91

B 333

SUMÁRIO

SUMÁRIO	i
LISTA DE ILUSTRAÇÕES	iii
RESUMO	1
ABSTRACT	2
INTRODUÇÃO	3
CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	5
1.1 Equações Diferenciais do Campo EM Secundário	5
1.2 Técnica dos Elementos Finitos	7
CAPÍTULO 2 A TEF PARA O MODELAMENTO DE ESTRUTURAS 2D E 3D	11
2.1 Modelamento 2D	11
2.2 Modelamento 3D	14
CAPÍTULO 3 COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE SISTEMAS ..	17
3.1 Algoritmos em Linguagem Fortran-7	17
3.2 Algoritmos em AP	18
CAPÍTULO 4 OTMIZAÇÃO E APLICAÇÃO DA TEF NO MODELAMENTO 2D	22
4.1 Otimização do Algoritmo DLU no Modelamento 2D	22
4.2 Aplicação no Modelamento Magnetotelúrico 2D	25
4.3 Comparações e Discussão dos Resultados	25
CAPÍTULO 5 OTIMIZAÇÃO E APLICAÇÃO DA TEF NO MODELAMENTO 3D	34
5.1 Otimização do Algoritmo DLU no Modelamento 3D	34
5.2 Aplicação no Modelamento Magnetotelúrico 3D	37
5.3 Comparações e Discussão dos Resultados	38
CAPÍTULO 6 CONCLUSÕES	46
AGRADECIMENTOS	48
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	49

APÊNDICE A EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DOS CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS SECUN- DÁRIOS	51
APÊNDICE B MATRIZ DOS COEFICIENTES	55
APÊNDICE C FUNÇÕES BÁSICAS ASSOCIADAS A TEF	58
C.1 Funções Básicas para Elementos Triangulares	58
C.2 Funções Básicas para Elementos Tetraédricos	
APÊNDICE D MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES ..	61
D.1 Método Gradiente Conjugado	61
D.2 Método Gram-Schmidt	62
D.3 Método da Eliminação Gaussiana	64
D.4 Método da Decomposição LU	65
ANEXO I ALGORÍTMO SDLU	67
ANEXO II ALGORÍTMO SAPDLU	69
ANEXO III ALGORÍTMO CCMF	73
ANEXO IV ALGORÍTMO CDLUR	74
ANEXO VI ALGORÍTMO CDLURZ2D	76
ANEXO VII ALGORÍTMO CDLURZ3D	78

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1	Matriz dos coeficientes, A , apresentando a soma das contribuições de cada elemento, j . N corresponde ao número total de nós e v_j representa o último nó do elemento j na malha.	9
Figura 2.1	Malha retangular plana, com elementos triangulares	12
Figura 2.2	Representação das condições de fronteiras	13
Figura 2.3	Malha tridimensional, com células em forma de paralelepípedos contendo seis elementos tetraédricos não regulares.	14
Figura 3.1	Proporção de elementos nulos em relação ao número total de elementos na matriz dos coeficientes do sistema gerado pela TEF	18
Figura 3.2	Comparação em tempo de CPU dos métodos de solução de sistema esparso de equações; Gram-Schmidt, Gradiente Conjugado, Eliminação Gaussiana e Decomposição LU	19
Figura 3.3	Comparação em tempo de CPU dispendido na triangularização da matriz dos coeficientes, entre os métodos; Eliminação Gaussiana e Decomposição LU ...	20
Figura 3.4	Comparação entre os algoritmos em tempo de AP; Gradiente Conjugado e Decomposição LU	20
Figura 3.5	Comparação em tempo real decorrido dos algoritmos; SDLU e SAPDLU	21
Figura 4.1	Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo que soluciona o sistema total e o que utiliza o sistema reduzido	23
Figura 4.2	Matriz dos coeficientes após a decomposição LU, apresentando uma triangularização de zeros.	24
Figura 4.3	Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo CDLURZ2D	24
Figura 4.4	Modelos sintéticos 2D. Falha vertical (Fig. 4.4A) e corpo condutor imerso em um meio homogêneo (Fig. 4.4B)	26
Figura 4.5	Comparação entre as curvas de resistividade aparente e fase (MTE), obtidas através dos algoritmos de solução analítica e o de solução numérica, em um meio com três camadas planas horizontais	27

Figura 4.6	Comparação entre as curvas de resistividade aparente e fase (MTM), obtidas através dos algoritmos de solução analítica e o de solução numérica, em um meio com três camadas planas horizontais	27
Figura 4.7	Comparação entre as curvas de resistividade aparente, obtidas através do algoritmo de solução analítica e o de solução numérica no modelamento da falha vertical com $CR = 10$	28
Figura 4.8	Comparação entre as curvas de resistividade aparente, obtidas através do algoritmo de solução analítica e o de solução numérica no modelamento da falha vertical com $CR = 0.1$	29
Figura 4.9	Curvas de resistividade aparente e fase, para MTE. Utilizando-se a frequência de 0.1 Hz	30
Figura 4.10	Curvas de resistividade aparente e fase, para MTM. Utilizando-se a frequência de 0.1 Hz	31
Figura 4.11	Curvas de resistividade aparente e fase, para MTE. Utilizando-se a frequência de 0.1 Hz	32
Figura 4.12	Curvas de resistividade aparente e fase, para MTM. Utilizando-se a frequência de 0.1 Hz	33
Figura 5.1	Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo que soluciona o sistema total e o que soluciona o sistema reduzido	35
Figura 5.2	Matriz dos coeficientes após a decomposição LU, apresentando uma configuração de três triângulos de zeros	36
Figura 5.3	Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo CDLURZ3D	37
Figura 5.4	Modelo de estrutura tridimensional, utilizado no teste do algoritmo	39
Figura 5.5	Comparação entre as curvas de resistividade aparente MTM e MTE, obtidas através dos resultados em 2D e 3D, para falha vertical com $CR = 10$, variando o comprimento na direção y. Utiliza-se a frequência de 10 Hz	40
Figura 5.6	Comparação entre as curvas de resistividade aparente MTM e MTE, obtidas através dos resultados em 2D e 3D, para falha vertical com $CR = 0.5$, variando o comprimento na direção y. Utiliza-se a frequência de 10 Hz	41

Figura 5.7	Contornos de resistividade aparente na superfície, para frequência de 0.1 Hz. ρ_{xx} (Fig. 5.7A), ρ_{xy} (Fig. 5.7B), ρ_{yx} (Fig. 5.7C) e ρ_{yy} (Fig. 5.7D)	42
Figura 5.8	Contornos da fase na superfície, para frequência de 0.1 Hz. θ_{xx} (Fig. 5.8A), θ_{xy} (Fig. 5.8B), θ_{yx} (Fig. 5.8C) e θ_{yy} (Fig. 5.8D)	43
Figura 5.9	Contornos de resistividade aparente na superfície, para frequência de 10 Hz. ρ_{xx} (Fig. 5.9A), ρ_{xy} (Fig. 5.9B), ρ_{yx} (Fig. 5.9C) e ρ_{yy} (Fig. 5.9D)	44
Figura 5.10	Contornos da fase na superfície, para frequência de 10 Hz. θ_{xx} (Fig. 5.10A), θ_{xy} (Fig. 5.10B), θ_{yx} (Fig. 5.10C) e θ_{yy} (Fig. 5.10D)	45
Figura B.1	Malha retangular com quatro elementos retangulares (k, x, y, z)	56

OTIMIZAÇÃO COMPUTACIONAL DA TÉCNICA DE ELEMENTOS FINITOS PARA O MODELAMENTO GEOFÍSICO ELETROMAGNÉTICO

(TESE DE MESTRADO : Nov./91)

LURIMAR SMERA BATISTA

Orientador : Dr. Milton José Porsani

Departamento de Geofísica – Centro de Geociências/UFPA

Caixa Postal 309 – Belém, PA, Brasil

RESUMO

A técnica dos elementos finitos é notável pela sua flexibilidade em resolver numericamente as equações diferenciais para os campos eletromagnéticos secundários, gerados por modelos com geometria complexa. Entretanto, a aplicabilidade desta técnica para o modelamento eletromagnético de estruturas 2D e 3D, requer a solução de esparsos sistemas de equações lineares, constituídos de mais de 10^3 parâmetros. Conseqüentemente, o custo computacional para obtenção dessas soluções representam a principal limitação da técnica dos elementos finitos.

Com o objetivo de resolver eficientemente os sistemas de equações gerados pela técnica dos elementos finitos, quatro diferentes métodos de solução de sistemas são implementados e estudados. Inicialmente é utilizado o conhecimento prévio do campo eletromagnético nas fronteiras da malha para reduzir a ordem do sistema de equações. Em seguida é explorada a abundante presença de zeros e o bandeamento da matriz dos coeficientes, para remover as operações computacionais associadas aos elementos nulos. Este procedimento permitiu selecionar o método de decomposição LU como o mais eficiente para resolver o sistema de equações resultante da técnica dos elementos finitos. O algoritmo foi implementado e testado para o modelamento magnetotelúrico 2D e 3D, sendo utilizados os modelos da falha vertical e do prisma. Os resultados numéricos foram comparados com os obtidos a partir da solução analítica para o modelo da falha vertical 2D e 3D. A concordância entre esses resultados confirma a eficiência e a aplicabilidade do algoritmo otimizado.

**COMPUTATIONAL OPTIMIZATION OF THE
FINITE ELEMENT TECHNIQUE FOR THE
ELECTROMAGNETIC GEOPHYSICAL MODELING**

(MASTER THESIS : Nov./91)

LURIMAR SMERA BATISTA

Advisor : Dr. Milton José Porsani

Departamento de Geofísica – Centro de Geociências/UFPa

Caixa Postal 309 – Belém, PA, Brazil

ABSTRACT

The finite elements technique is notable for its flexibility to solve numerically differential equations related to secondary electromagnetic fields generated by models of complex geometry. However, the applicability of this technique for electromagnetic modelling on 2D and 3D structures requires solving sparse systems of linear equations, constituted of more than 10^3 parameters. Consequently, the computational cost to obtain such solutions represents the main limitation of the finite elements technique.

In order to solve efficiently sparse system of linear equations generated by finite elements technique, four different methods are optimally implemented. Initially, the previous knowledge of the electromagnetic field, given by the external boundary conditions, is used to reduce the order of the system. Next, the sparseness property of the coefficient matrix is conveniently exploited to remove unnecessary computational operations. This approach allow us to select the LU decomposition method as the most efficient for solving the resulting system of equations. The algorithm was implemented and tested for magnetotelluric modelling of 2D and 3D structures such as a vertical fault and a simple prismatic model. The numerical results are compared to those obtained from analytical solutions for the vertical fault model. The agreement attest the efficiency and feasibility of the optimized algorithm.

INTRODUÇÃO

O modelamento geofísico eletromagnético, utilizando técnicas numéricas, tem sido desenvolvido em grande escala nas últimas décadas por vários pesquisadores, devido ao avanço tecnológico dos computadores. Para solucionar os problemas do modelamento eletromagnético, EM, são utilizadas técnicas numéricas, as quais determinam as soluções aproximadas dos campos EM secundários. Dentre as mais utilizadas, destacam-se as técnicas; elementos finitos (Reddy et al, 1977; Pridmore et al, 1981), equações integrais (Raiche, 1974; Ting & Hohmann, 1981) e métodos híbridos (Best et al, 1985).

A técnica dos elementos finitos, TEF, é baseada na construção de soluções aproximadas de equações diferenciais, para problemas restritos a espaços limitados. A TEF implica em dividir o domínio da solução em um número finito de simples domínios, também chamados de elementos, os quais podem ser de diferentes geometrias. Utilizando-se de conceitos variacionais constroi-se uma aproximação da solução com base na coleção de informações de cada elemento. Esta técnica notabiliza-se por sua flexibilidade em solucionar problemas em modelos com geometria complexa. Por ser uma técnica versátil, a TEF tem sido usada com notável sucesso, resolvendo um grande número de problemas em diversas áreas da geofísica, engenharia e física matemática (Becker et al, 1981).

A utilização da TEF no modelamento geofísico EM de estruturas com geometria complexas requer a solução de sistemas esparsos de equações lineares da ordem de 10^3 parâmetros. Conseqüentemente, o elevado custo computacional para obtenção das soluções desses sistemas, constitui uma grande limitação na utilização dessa técnica.

Nesta pesquisa, investiga-se a aplicabilidade e eficiência de diferentes métodos de solução de sistema de equações esparsos, para otimizar a TEF no modelamento EM de estruturas com geometria complexas bidimensionais e tridimensionais. Para tanto são estudadas e implementadas, nos algoritmos, as propriedades específicas desse sistema gerado pela TEF, tais como: presença abundante de zeros na matriz coeficiente; redução da ordem do sistema propiciada pelas condições de fronteiras; e remoção das operações aritméticas associadas aos elementos nulos da matriz. Os algoritmos, desenvolvidos e otimizados, são aplicados no modelamento magnetotelúrico de estruturas bidimensionais e tridimensionais.

O texto está organizado como segue: No Capítulo 1 são apresentados os fundamentos da teoria eletromagnética para obtenção das equações diferenciais dos campos EM secundários, e também, os fundamentos da TEF. O Capítulo 2 apresenta a TEF para modelos bidimensionais e tridimensionais. Os métodos de solução de sistemas de equações esparsos são comparados no Capítulo 3. As otimizações e aplicações no modelamento magnetotelúrico da TEF em duas e três dimensões, são apresentados nos Capítulos 4 e 5 respectivamente. O Capítulo 6 apresenta as principais conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO 1

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste Capítulo são apresentados os fundamentos da teoria do eletromagnetismo na obtenção das equações diferenciais dos campos EM secundários. Também, são relatados os fundamentos teóricos da TEF, a qual é utilizada para determinar as soluções numéricas das equações diferenciais. A aplicação da TEF no modelamento geofísico EM, gera um sistema esparso de equações lineares. A formação e as propriedades da matriz dos coeficientes do sistema são mostradas e discutidas com detalhes.

1.1 Equações Diferenciais do Campo EM Secundário

As equações de Maxwell no domínio da frequência (no sistema de medidas, mks) são representadas como segue:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mathcal{Z}\mathbf{H}, \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathcal{Y}\mathbf{E} + \mathbf{j}_e, \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot (\mu\mathbf{H}) = 0 \quad (1.3)$$

e

$$\nabla \cdot (\epsilon\mathbf{E}) = q_v. \quad (1.4)$$

\mathbf{E} e \mathbf{H} representam os campos elétrico e magnético respectivamente; q_v representa a densidade volumétrica de cargas; \mathbf{j}_e representa a densidade de corrente elétrica associada às fontes do campo incidente; $\mathcal{Z} = i\omega\mu$; $\mathcal{Y} = \sigma + i\omega\epsilon$; ω é a frequência angular e μ, ϵ, σ são respectivamente a permeabilidade magnética, permissividade dielétrica, e a condutividade elétrica em cada ponto do campo. Separando os campos em secundário ($\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$) e primário ($\mathbf{E}_p, \mathbf{H}_p$), admitindo que os parâmetros elétricos são lineares, isotrópicos e independentes do tempo, então;

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_p + \mathbf{E}_s \quad (1.5)$$

e

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_p + \mathbf{H}_s. \quad (1.6)$$

Substituindo os campos primários nas equações (1.1) e (1.2), resulta:

$$\nabla \times \mathbf{E}_p = -Z\mathbf{H}_p \quad (1.7)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{H}_p = \mathcal{Y}_p \mathbf{E}_p + \mathbf{j}_e. \quad (1.8)$$

Substituindo (1.5), (1.6), (1.7) e (1.8) nas equações (1.1) e (1.2) (desenvolvimento matemático no Apêndice A), resulta:

$$\nabla \times \mathbf{E}_s = -Z\mathbf{H}_s - \Delta Z\mathbf{H}_p \quad (1.9)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{H}_s = \mathcal{Y}\mathbf{E}_s + \Delta \mathcal{Y}\mathbf{E}_p, \quad (1.10)$$

onde,

$$\Delta Z = Z - Z_p$$

e

$$\Delta \mathcal{Y} = \mathcal{Y} - \mathcal{Y}_p$$

Combinando as equações (1.9) e (1.10) (Apêndice A), resulta (Hohmann, 1985);

$$\nabla^2 \mathbf{E}_s + \nabla(\mathbf{E}_s \cdot \frac{\nabla \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}}) + k^2 \mathbf{E}_s = Z \Delta \mathcal{Y} \mathbf{E}_p - \nabla(\mathbf{E}_p \frac{\nabla(\Delta \mathcal{Y})}{\mathcal{Y}}) \quad (1.11)$$

e

$$\nabla^2 \mathbf{H}_s + \mathcal{Y} \nabla \times \mathbf{H}_s \times \nabla(\frac{1}{\mathcal{Y}}) + k^2 \mathbf{H}_s = Z \Delta \mathcal{Y} \mathbf{H}_p - \mathcal{Y} \nabla(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}}) \times \mathbf{E}_p, \quad (1.12)$$

onde:

$$k^2 = -Z\mathcal{Y}.$$

As equações (1.11) e (1.12) são as equações diferenciais para se determinar os campos EM secundários em cada posição do modelo em estudo.

1.2 A Técnica dos Elementos Finitos

As equações (1.11) e (1.12) podem ser escritas na forma simplificada,

$$L\mathbf{f} = \mathbf{g}, \quad (1.13)$$

onde, L representa um operador diferencial, \mathbf{f} representa o campo a ser determinado e \mathbf{g} a fonte.

A solução de (1.13) pode ser determinada empregando a técnica numérica dos elementos finitos a qual aproxima a solução exata da equação pela coleção de funções básicas Φ_i definidas em todo domínio. Esta função básica geralmente só depende da relação espacial de cada domínio para determinar o valor aproximado da solução. Estes pequenos domínios, onde as funções básicas são utilizadas, são chamados de elementos e um conjunto destes elementos determinam uma malha. A forma mais simples da função básica com dependência da posição é:

$$\Phi_i(x, y, z) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 z. \quad (1.14)$$

A aplicação da TEF consiste em combinar os α_i da equação (1.14) para determinar o valor de Φ_i em cada ponto da malha. Estes pontos são chamados de nós.

A função básica, representada pela equação (1.14), define um tetraedro, elemento tridimensional, que possui quatro nós. Uma função básica bidimensional pode definir um triângulo, ou outra figura plana qualquer, neste caso a coordenada em z é igual a zero, logo;

$$\Phi_i(x, y) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y. \quad (1.15)$$

Para determinar a solução aproximada do campo, \mathbf{f} , em cada elemento, é necessário obter o somatório do produto da função básica e o campo em cada nó do elemento.

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n \Phi_i(\mathbf{r}) f_i, \quad (1.16)$$

f_i representa o valor do campo em cada nó e n é o número total de nós do elemento.

Substituindo (1.16) em (1.13):

$$\sum_{i=1}^n L\Phi_i f_i - \mathbf{g} = \epsilon(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

$\epsilon(r)$ representa o erro da aproximação.

Para minimizar a função erro na equação (1.17), escolhe-se uma função peso $w_j(r)$, tal que o produto interno dessa função escolhida com a função erro, $\epsilon(r)$, resulte em zero, isto é,

$$\langle w_j, \epsilon \rangle = \sum_{i=1}^n \langle w_j, L\Phi_i f_i - g \rangle = 0, \quad (1.18)$$

onde, $\langle a, b \rangle$ representa a notação do produto interno que para este problema é igual a $\int_r abdr$. Este método da escolha da função $w_j(r)$ é chamado de Método Residual de Galerkin (Becker et al, 1981).

Com a equação (1.18) obtém-se;

$$\sum_{i=1}^n \int_r w_j L\Phi_i f_i dr = q_j. \quad (1.19)$$

Onde,

$$q_j = \int_r w_j g dr.$$

A integral (\int_r) pode ser de superfície (bidimensional) ou de volume (tridimensional).

Desenvolvendo o somatório da equação (1.19), resulta;

$$\left(\int_r w_j L\Phi_1 dr \right) f_1 + \left(\int_r w_j L\Phi_2 dr \right) f_2 + \dots + \left(\int_r w_j L\Phi_n dr \right) f_n = q_j. \quad (1.20)$$

Variando j na equação (1.20), resulta em um sistema de equações, o qual é escrito na forma matricial como segue;

$$\begin{bmatrix} \int_r w_1 L\Phi_1 dr & \int_r w_1 L\Phi_2 dr & \dots & \int_r w_1 L\Phi_n dr \\ \int_r w_2 L\Phi_1 dr & \int_r w_2 L\Phi_2 dr & \dots & \int_r w_2 L\Phi_n dr \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \int_r w_n L\Phi_1 dr & \int_r w_n L\Phi_2 dr & \dots & \int_r w_n L\Phi_n dr \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_n \end{bmatrix}. \quad (1.21)$$

O sistema acima pode ser escrito na forma;

$$Kf = q, \quad (1.22)$$

onde, os elementos $k_{j,i}$ da matriz são dados por,

$$k_{j,i} = \int_r w_j L\Phi_i dr,$$

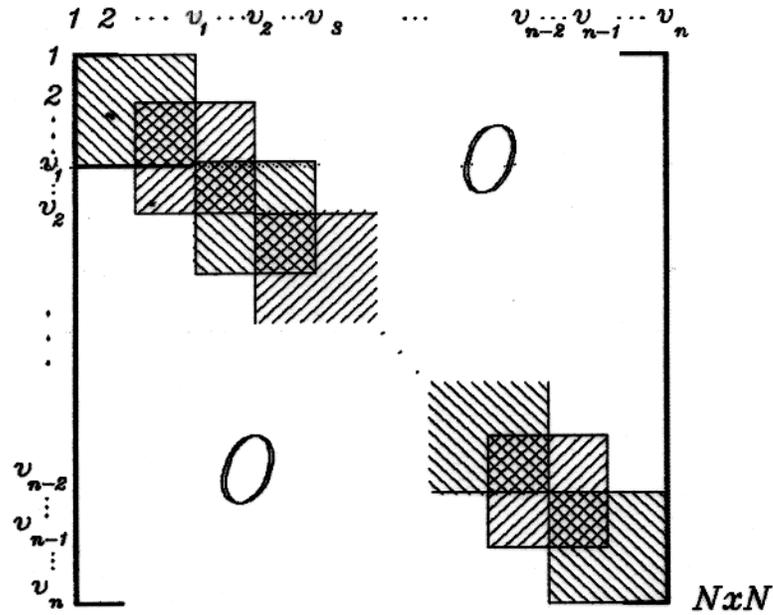


Figura 1.1: Matriz dos coeficientes, A , apresentando a soma das contribuições de cada elemento, j . N corresponde ao número total de nós e v_j representa o último nó do elemento j na malha.

o lado direito do sistema,

$$\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)^T,$$

e o vetor solução por,

$$\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^T.$$

O sistema de equações (1.22) apresenta a solução em cada elemento. As soluções aproximadas em toda malha são obtidas realizando a adição das contribuições das equações fornecidas pelos elementos. Os elementos são adjuntos na malha, alguns nós de um elemento são também nós de outro elemento. A adição entre as equações possibilita a interação entre todos elementos da malha (Apêndice B), originando o sistema de equações ampliado,

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{u} \tag{1.23}$$

A matriz A , possui dimensões $N \times N$, N é o número total de nós na malha, e os vetores \mathbf{x} e \mathbf{u} possuem dimensões $N \times 1$. Na Figura 1.1 é apresentada a estrutura da matriz dos coeficientes A , no sistema de equações ampliado, a qual é construída, com detalhes, no Apêndice B. Devido a disposição dos elementos na malha o resultado da combinação de um nó com outro nó e vice-versa são iguais, tornando assim a matriz simétrica. Como todos os nós são combinados entre si e os

resultados entre a combinação de um nó com outro nó que não esteja no mesmo elemento é igual a zero, a matriz A é quadrada e esparsa.

Quanto maior o número de nós na malha mais exata torna-se a aproximação. Mas isso gera um número maior de equações. O sistema de equações lineares gerado pela técnica dos elementos finitos é grande e esparsa devido as disposições e combinações entre os nós da malha.

CAPÍTULO 2

A TEF PARA O MODELAMENTO DE ESTRUTURAS 2D E 3D

A utilização da TEF na solução das equações diferenciais dos campos EM secundários, implica em dividir o domínio total em um número finito de elementos. Em cada elemento é obtido uma aproximação dos campos EM secundários, realizando operações aritméticas entre as funções básicas e os campos em cada vértice do elemento. Neste capítulo apresenta-se o desenvolvimento teórico utilizado na obtenção das funções básicas, e na solução dos campos EM secundários para malha bidimensional ou tridimensional. Os elementos triangulares e tetraédricos são utilizados para o modelamento EM 2D e 3D respectivamente.

2.1 Modelamento 2D

Para realizar o modelamento de estruturas bidimensionais com dados eletromagnéticos é necessário solucionar as equações (1.11) e (1.12), para determinar os campos E_s e H_s . A solução aproximada destas equações é obtida utilizando a técnica numérica dos elementos finitos bidimensional, discretizando-se o modelo em uma malha retangular com elementos triangulares (Figura 2.1). Devido ao fato do modelamento ser bidimensional, a derivada parcial na direção y é igual a zero ($\frac{\partial}{\partial y} = 0$).

Para cada elemento obtém-se uma aproximação do campo realizando o somatório do produto da função básica pelo valor do campo em cada nó do elemento,

$$\tilde{U}_n(x, z) = \Phi_1(x, z)U_1 + \Phi_2(x, z)U_2 + \Phi_3(x, z)U_3 \quad (2.1)$$

onde, \tilde{U}_n é o valor do campo aproximado em cada elemento, U_i representa o valor do campo em cada vértice do elemento e Φ_i representa a função básica do elemento triangular.

A função linear para duas dimensões é da forma (Becker et al, 1981);

$$U_i(x, z) = a_1 + a_2x + a_3z \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

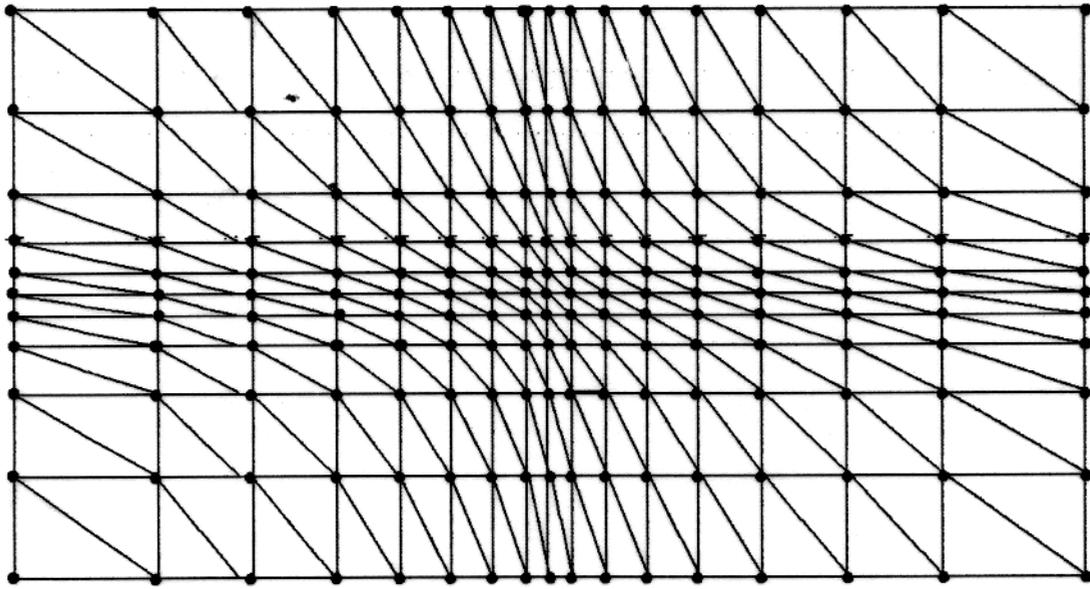


Figura 2.1: Malha retangular plana, com elementos triangulares.

onde, a_1 , a_2 , a_3 são constantes. Essas constantes são determinadas a partir da solução do sistema;

$$\begin{aligned} U_1 &= a_1 + a_2 x_1 + a_3 z_1 \\ U_2 &= a_1 + a_2 x_2 + a_3 z_2 \\ U_3 &= a_1 + a_2 x_3 + a_3 z_3 \end{aligned} \quad (2.3)$$

x_i e z_i são as coordenadas dos vértices de cada elemento.

Combinando as equações (2.1) e (2.2) com o sistema (2.3), obtém-se as expressões das funções básicas (desenvolvimento matemático no Apêndice C), as quais são representadas como segue

$$\Phi_1(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_2 z_3 - x_3 z_2) + (z_2 - z_3)x + (x_3 - x_2)z] \quad (2.4)$$

$$\Phi_2(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_3 z_1 - x_1 z_3) + (z_3 - z_1)x + (x_1 - x_3)z] \quad (2.5)$$

$$\Phi_3(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_1 z_2 - x_2 z_1) + (z_1 - z_2)x + (x_2 - x_1)z] \quad (2.6)$$

onde,

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \end{vmatrix}$$

A função peso escolhida para a equação (1.17), é a função básica (Rijo, 1990). Os valores de Φ_i após serem determinados, são substituídos na equação diferencial do campo eletromagnético.

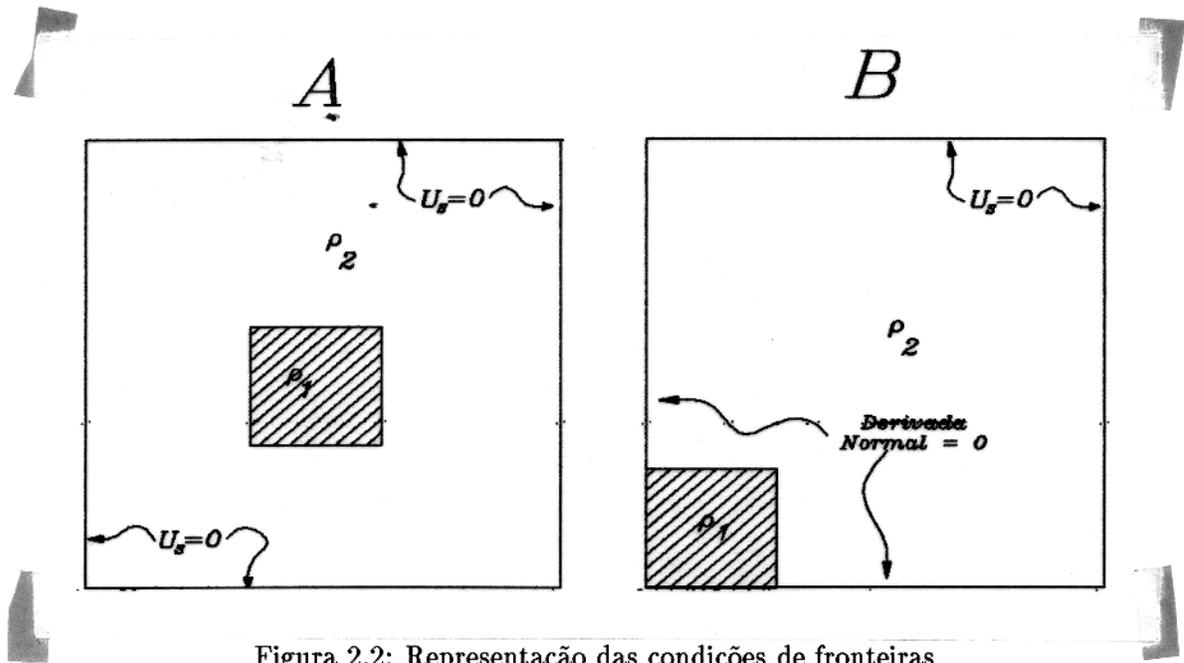


Figura 2.2: Representação das condições de fronteiras

Com isso realizam-se as operações necessárias (produto, soma, derivações, etc), com as funções básicas, resultando na obtenção da matriz dos coeficientes do sistema gerado pela TEF bidimensional.

O vetor do lado direito do sistema de equações gerado pela TEF é obtido através da somatória do produto dos campos primários pela função básica em cada elemento,

$$\tilde{f}_i = \Phi_1 f_1 + \Phi_2 f_2 + \Phi_3 f_3 \quad (2.7)$$

Após definir a matriz dos coeficientes e o lado direito do sistema de equações, são incluídas as condições de fronteiras que correspondem aos valores do campo (U_n) nas fronteiras da malha. Facilitando e determinando com precisão a solução do sistema.

Considerando a não homogeneidade com comprimento limitado, neste caso, as fronteiras da malha são colocadas a uma grande distância do corpo (Figura 2.2A), com isso o campo secundário, nos nós de fronteira, são nulos, pois não há interferência do campo secundário gerado pelo corpo nestes nós ($U_i = 0$, condições de fronteiras de Dirichlet).

Quando a não homogeneidade possui dimensões laterais infinitas, a derivada normal do campo é igual a zero nas fronteiras onde o corpo condutor se estende, condições de fronteiras de Neumann (Figura 2.2B). O valor aproximado do campo secundário, nesses nós de fronteiras, é determinado realizando a operação de subtração entre o campo primário do meio homogêneo

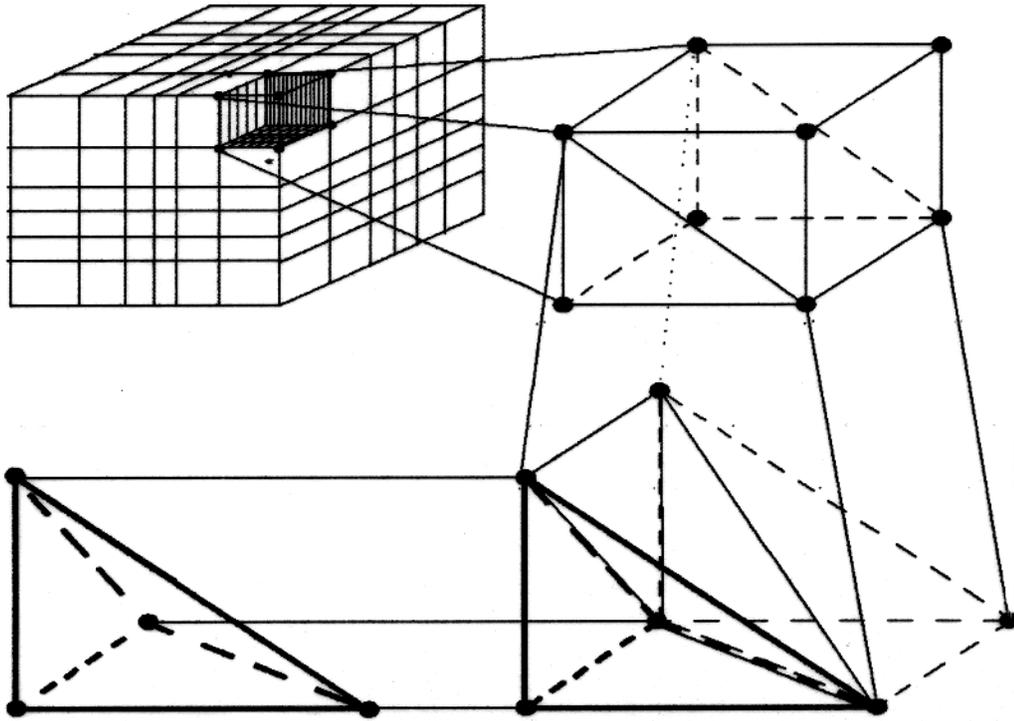


Figura 2.3: Malha tridimensional, com células em forma de paralelepípedos contendo seis elementos tetraédricos não regulares.

e o campo primário do meio com mais uma camada equivalente ao corpo condutor. As demais fronteiras são colocadas distantes da não homogeneidade, nas quais o campo secundário torna-se nulo (Rijo, 1990).

2.2 Modelamento 3D

Para determinar a solução das equações diferenciais dos campos EM secundários em três dimensões, é necessário discretizar o modelo em uma malha com elementos tetraédricos não regulares (Figura 2.3). Em cada elemento da malha é obtida a solução aproximada do campo, realizando o somatório do produto da função básica pelo valor do campo em cada nó do elemento,

$$\tilde{U}_n = \Phi_1 U_1 + \Phi_2 U_2 + \Phi_3 U_3 + \Phi_4 U_4 \quad (2.8)$$

onde, \tilde{U}_n é o valor do campo aproximado em cada elemento, U_i representa o valor do campo em cada nó do elemento e Φ_i representa a função básica do elemento tetraédrico.

A função que determina um espaço em três dimensões é da forma (Becker et al, 1981);

$$U_i(x, y, z) = a_1 + a_2x + a_3y + a_4z \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (2.9)$$

onde a_1, a_2, a_3 e a_4 são constantes, as quais são determinadas através da solução do sistema;

$$\begin{aligned} U_1 &= a_1 + a_2x_1 + a_3y_1 + a_4z_1 \\ U_2 &= a_1 + a_2x_2 + a_3y_2 + a_4z_2 \\ U_3 &= a_1 + a_2x_3 + a_3y_3 + a_4z_3 \\ U_4 &= a_1 + a_2x_4 + a_3y_4 + a_4z_4 \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde, U_i representa o campo em cada nó do elemento, x_i, y_i e z_i são as coordenadas na malha da posição de cada vértices do elemento.

Combinando o sistema (2.10) com as equações (2.8) e (2.9), obtém-se as relações das funções básicas tridimensionais para o elemento tetraédrico (desenvolvimento matemático no Apêndice C), as quais são representadas como segue;

$$\Phi_1 = \frac{1}{V} \left(\begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x + \begin{vmatrix} 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y - \begin{vmatrix} 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (2.11)$$

$$\Phi_2 = \frac{1}{V} \left(- \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_3 & y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (2.12)$$

$$\Phi_3 = \frac{1}{V} \left(\begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (2.13)$$

$$\Phi_4 = \frac{1}{V} \left(- \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} x - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \end{vmatrix} y + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} z \right) \quad (2.14)$$

onde,

$$V = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}.$$

Após a determinação das funções básicas, substitui-se a relação (2.8) na equação diferencial tridimensional do campo eletromagnético e, após as operações necessárias, é constituída a matriz dos coeficientes, a qual é formada por combinações das funções básicas.

O vetor do lado direito do sistema é obtido, realizando o somatório do produto entre a função básica e o campo primário em cada nó do elemento;

$$\tilde{f}_n = \Phi_1 f_1 + \Phi_2 f_2 + \Phi_3 f_3 + \Phi_4 f_4 \quad (2.15)$$

onde f_i , $i = 1, 2, 3, 4$, são os valores do campo primário em cada nó do elemento.

Após definir a matriz dos coeficientes e o vetor do lado direito do sistema, são incluídas as condições de fronteiras, os valores do campo secundário (U_n) já conhecidos nos nós de fronteiras. Essas condições são regidas seguindo as mesmas condições do modelamento bidimensional. O campo secundário é igual a zero nos nós de fronteira quando a não homogeneidade possui dimensões finitas. A derivada normal do campo é igual a zero, quando o corpo condutor se estende para as fronteiras (dimensões infinitas).

CAPÍTULO 3

COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE SISTEMAS

Conforme ilustrado na Figura 3.1, o sistema de equações lineares gerado pela TEF é grande e esparsa. Essa propriedade é consequência das disposições e combinações entre os nós da malha (Apêndice B).

Existem vários métodos para solucionar um sistema de equações, dentre os quais destaca-se (Apêndice D); Gradiente Conjugado (GC), Gram-Schmidt (GS), Eliminação Gaussiana (EG) e Decomposição LU (DLU). O uso destes métodos, sem otimizações, para solucionar o sistema esparsa é anti-econômico computacionalmente, pois a maioria das operações aritméticas na solução do sistema envolve zeros. Além disso, aloca-se uma grande área de memória para armazenar elementos nulos.

Os métodos para solução de sistemas esparsos devem atender a dois objetivos bem definidos, quais seja; propiciar economia no tempo de processamento para solucionar o sistema e permitir a redução no espaço de memória alocada para o armazenamento do sistema.

Neste capítulo, investiga-se a aplicabilidade e eficiência dos métodos de solução do sistema esparsa de equações lineares gerado pela TEF. Para tanto, são desenvolvidos algoritmos em linguagem Fortran-77, os quais são comparados em termos do tempo de processamento gasto para solucionar o sistema. Além disso são elaborados algoritmos em linguagem "Vector Function Chiner" (VFC) utilizando-se as rotinas do "array-processor" (AP) do sistema Disco-Vax 11/785, obtendo desse modo, maior rapidez em tempo real, na solução do sistema, em relação aos algoritmos em linguagem Fortran-77.

3.1 Algoritmos em Linguagem Fortran-77

Com o objetivo de avaliar a eficiência dos métodos de solução do sistema esparsa de equações lineares gerado pela TEF, foram elaborados programas em linguagem Fortran-77. Estes algoritmos estão otimizados para trabalharem apenas com os elementos não nulos da matriz dos coeficientes.

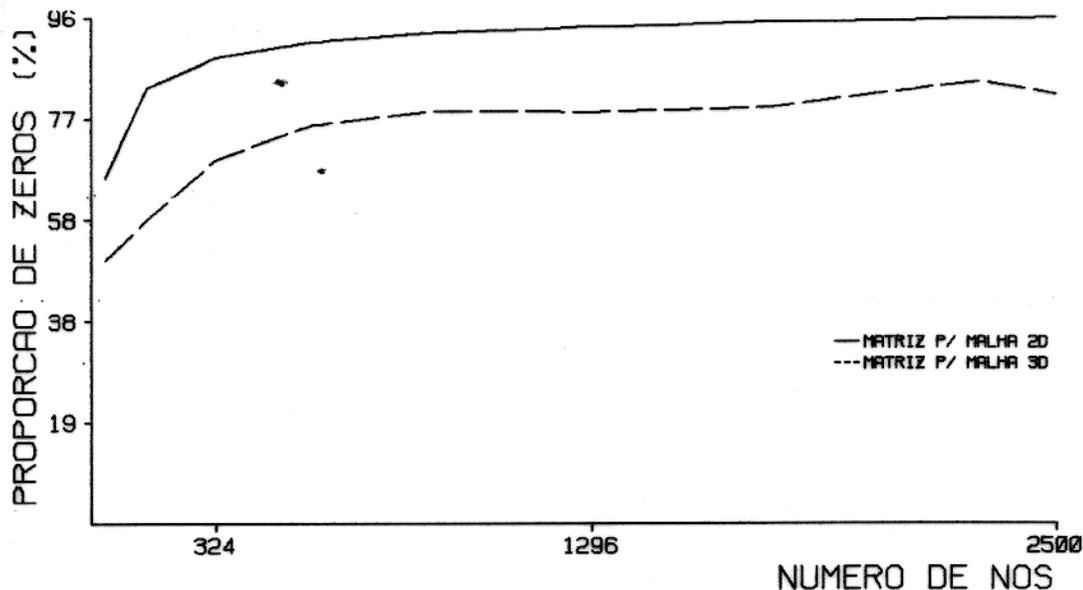


Figura 3.1: Proporção de elementos nulos em relação ao número total de elementos na matriz dos coeficientes do sistema gerado pela TEF

Para a medição do tempo de CPU dispendido na solução dos sistemas de equações, os programas Fortran-77 trabalharam com precisão simples e forneceram resultados com a mesma exatidão. Desta forma, o tempo de processamento (CPU) passa a ser o parâmetro determinante na escolha do método mais eficiente a ser utilizado para solução do sistema de equações. A comparação entre os métodos está representada na Figura 3.2. Para pequenas malhas (< 144 nós) os métodos apresentam níveis de eficiência aproximadamente iguais. O método da decomposição LU destaca-se dos demais, quando o sistema possui maior número de equações (malhas maiores que 144 nós).

Os métodos Decomposição LU e Eliminação Gaussiana possuem em comum o fato de triangularizar a matriz dos coeficientes, resolvendo-se o sistema triangular recursivamente. Nestes métodos, a maior parte do tempo de processamento é gasto para reduzir o sistema para a forma triangular. Este é o fator responsável pela diferença na eficiência de cada método. A DLU apresenta maior rapidez em solucionar o sistema (Figura 3.3), devido ao fato de conservar o bandeamento na matriz após a triangularização.

3.2 Algoritmos em AP

Para uma maior avaliação entre os métodos, foram elaborados algoritmos em linguagem VFC, para os métodos GC e DLU, utilizando-se as rotinas do "array-processor"(AP) do sistema

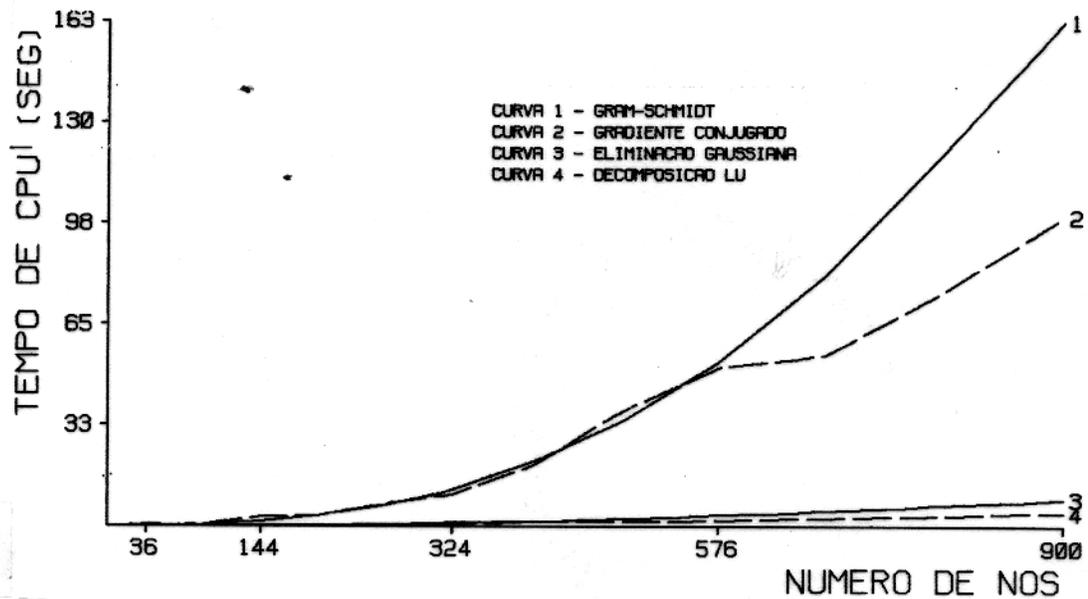


Figura 3.2: Comparação em tempo de CPU dos métodos de solução de sistema esparsos de equações; Gram-Schmidt, Gradiente Conjugado, Eliminação Gaussiana e Decomposição LU

Disco-Vax 11/785. Comparando-se a eficiência de ambos algoritmos (Figura 3.4), utilizando-se como parâmetro o tempo de AP, confirma-se a superioridade do algoritmo em DLU relativa ao método do Gradiente Conjugado, para solucionar o sistema de equações proposto.

O AP possui uma característica, a qual pode ser considerada como uma vantagem em relação a CPU de realizar o processamento sem interferência de outros processos do computador em uso, ou seja, o tempo de AP é igual ao tempo real decorrido. Comparando os algoritmos do método DLU, em AP, SAPDLU (Anexo II), e em CPU, SDLU (Anexo I), tendo como parâmetro o tempo real decorrido (Figura 3.5), observa-se que o algoritmo no AP é mais eficiente, sendo que, para malhas de 900 nós é 3 vezes mais rápido que a CPU.

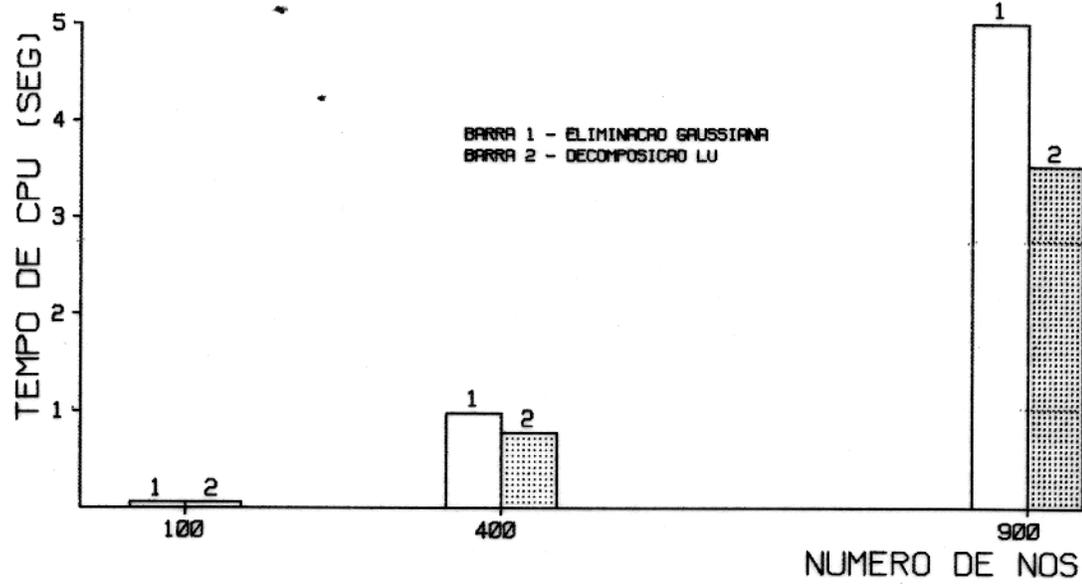


Figura 3.3: Comparação em tempo de CPU dispendido na triangularização da matriz dos coeficientes, entre os métodos; Eliminação Gaussiana e Decomposição LU

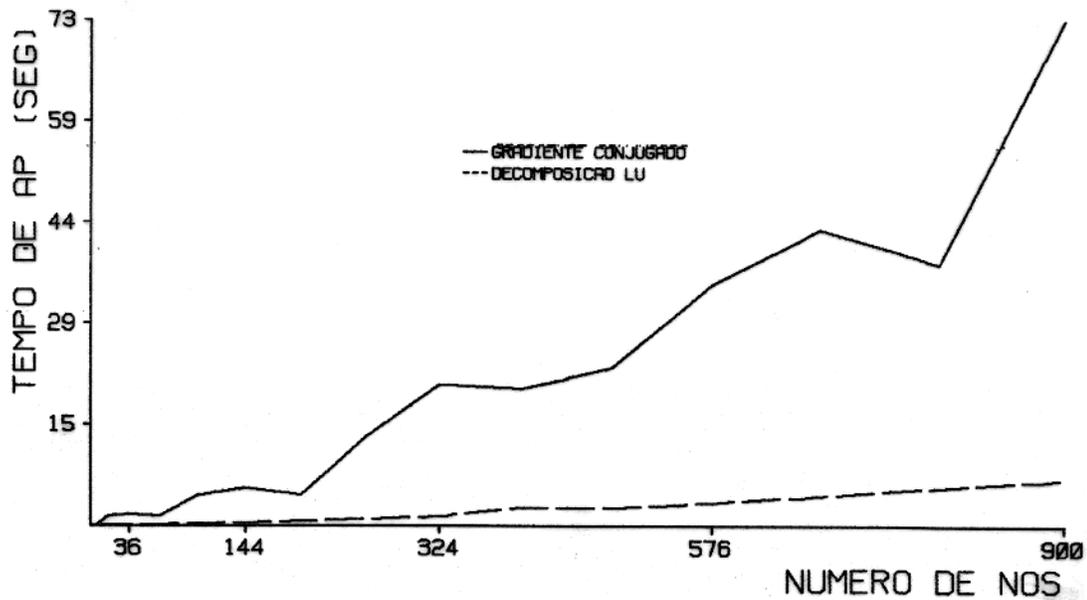


Figura 3.4: Comparação entre os algoritmos em tempo de AP; Gradiente Conjugado e Decomposição LU

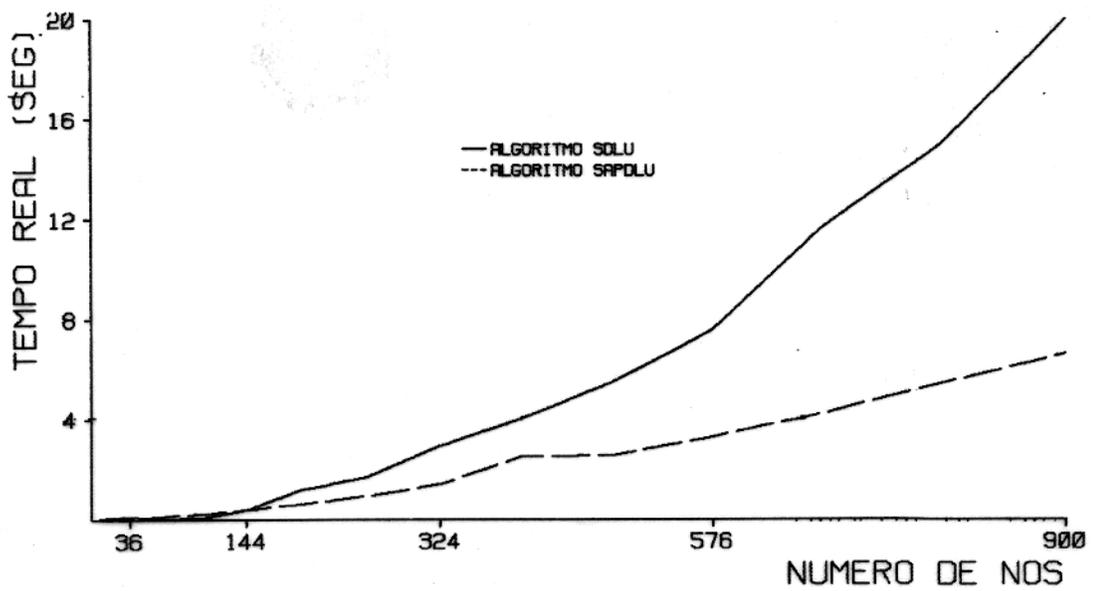


Figura 3.5: Comparação em tempo real decorrido dos algoritmos; SDLU e SAPDLU

CAPÍTULO 4

OTIMIZAÇÃO E APLICAÇÃO DA TEF NO MODELAMENTO 2D

Neste Capítulo são estudados e implementados, no método da DLU, as propriedades específicas do sistema esparsos de equações lineares gerado pela TEF aplicado ao modelamento EM de estruturas 2D. A redução da ordem do sistema propiciada pelo conhecimento prévio dos campos EM secundários nas fronteiras da malha, e a remoção das operações aritméticas relacionadas com os elementos nulos da matriz dos coeficientes constituem os dois principais fatores utilizados na otimização dos algoritmos. Após a implementação dessas propriedades, o algoritmo otimizado é comparado com o não otimizado em cada fase do processo de otimização, obtendo um alto grau de eficiência.

A TEF otimizada é aplicada no modelamento geofísico de dados magnetotélúricos em estruturas 2D. Os resultados obtidos pelo algoritmo desenvolvido são comparados com outros obtidos através da solução analítica para o modelo da falha vertical e o modelo de camadas planas horizontais. São apresentados resultados do modelamento magnetotélúrico, resistividade aparente e fase na superfície, de modelos sintéticos bidimensionais, os quais comprovam a eficiência dos algoritmos otimizados.

4.1 Otimização do Algoritmo DLU no Modelamento 2D

Para solucionar o sistema de equações gerado pela TEF utiliza-se o método da decomposição LU para sistemas complexos, pois dentre os métodos estudados no Capítulo 3, verificou-se ser este o método mais eficiente para solucionar o sistema de equações gerado pela TEF. Os elementos do vetor solução associados aos nós de fronteiras da malha possuem valores previamente conhecidos (condições de fronteiras, Capítulo 2). Essa propriedade possibilita a redução da ordem do sistema, retirando-se dos cálculos de solução, as equações que representam os nós externos da malha. A exclusão das equações é realizada de modo a não alterar a estrutura básica do sistema. Para tanto, são realizadas operações aritméticas entre os elementos excluídos e os demais elementos da matriz dos coeficientes e, também, nos elementos do vetor do lado esquerdo do sistema. As contribuições

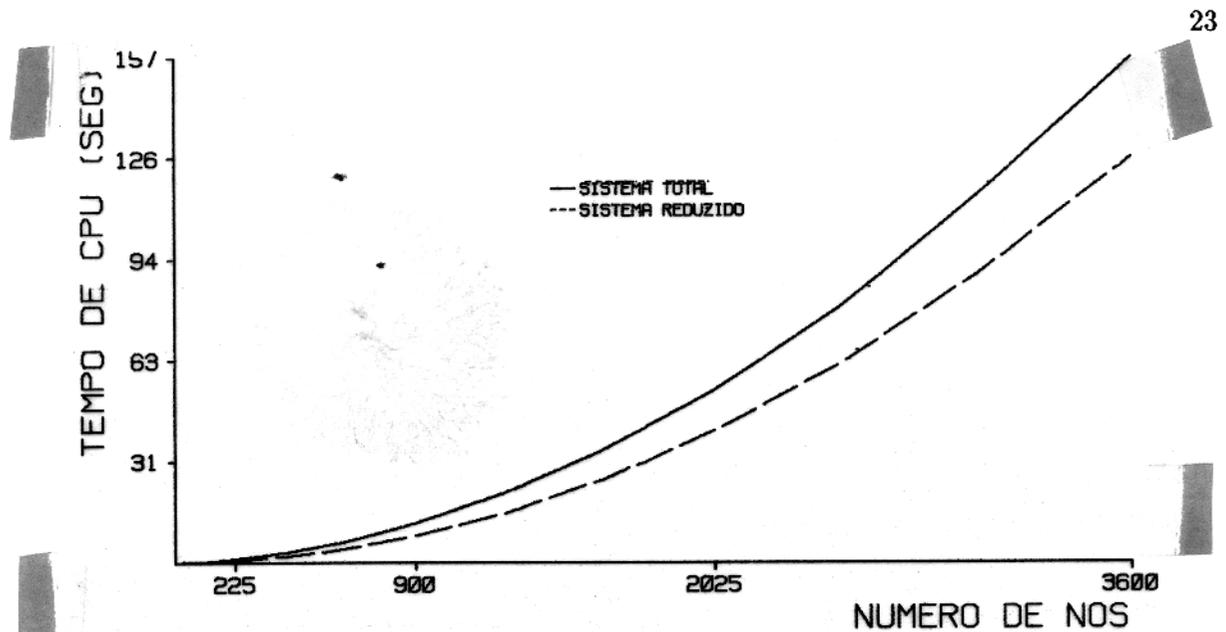


Figura 4.1: Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo que soluciona o sistema total e o que utiliza o sistema reduzido.

das equações excluídas são distribuídas quantitativamente entre as equações restantes. No algoritmo CCMF (Anexo III) estão codificados em linguagem Fortran-77 as operações necessárias para obtenção da redução da ordem do sistema. Essa flexibilidade ocasionada pelo algoritmo CCMF, possibilitou o desenvolvimento em linguagem Fortran-77 do algoritmo otimizado CDLUR (Anexo IV), o qual soluciona o sistema reduzido de equações lineares. Na Figura 4.1 está representada a comparação em tempo de CPU, entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo que soluciona o sistema total.

A matriz dos coeficientes após ser decomposta pelo método DLU, apresenta uma conformação onde observa-se um triângulo de zeros bem definidos (Figura 4.2). Esta conformação é dependente, em sua magnitude, do número total de intervalos, entre os nós, na direção z da malha. Foi elaborado um algoritmo em linguagem Fortran-77, otimizando a DLU, algoritmo CDLURZ2D (Anexo V), o qual não realiza operações com os elementos nulos integrantes do triângulo de zeros. A Figura 4.3 apresenta a comparação em tempo de CPU entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo CDLURZ2D, comprovando que o CDLURZ2D é mais eficiente computacionalmente.

O tempo de processamento para solucionar o sistema de equações gerado pela TEF, equivale à 75% ou mais, do tempo total de processamento para realização do modelamento. Devido a eficiência do algoritmo CDLURZ2D, é possível realizar o modelamento de dados eletromagnéticos em estruturas bidimensionais complexas em tempo de processamento reduzido.

$$\begin{bmatrix}
 a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1,m} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{k,1} & a_{k,2} & a_{k,3} & \cdots & a_{k,k} & a_{k,k+1} & \cdots & a_{k,m} \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_{k+1,m} \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+2,k+1} & \cdots & a_{k+2,m} \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{k+3,k} & a_{k+3,k+1} & \cdots & a_{k+3,m} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{l,k} & a_{l,k+1} & \cdots & a_{l,m} \\
 0 & 0 & a_{l+1,3} & \cdots & a_{l+1,k} & a_{l+1,k+1} & \cdots & a_{l+1,m} \\
 0 & a_{l+2,2} & a_{l+2,3} & \cdots & a_{l+2,k} & a_{l+2,k+1} & \cdots & a_{l+2,m} \\
 a_{l+3,1} & a_{l+3,2} & a_{l+3,3} & \cdots & a_{l+3,k} & a_{l+3,k+1} & \cdots & a_{l+3,m} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \cdots & a_{n,k} & a_{n,k+1} & \cdots & a_{n,m}
 \end{bmatrix}$$

Figura 4.2: Matriz dos coeficientes após a decomposição LU, apresentando uma triangularização de zeros.

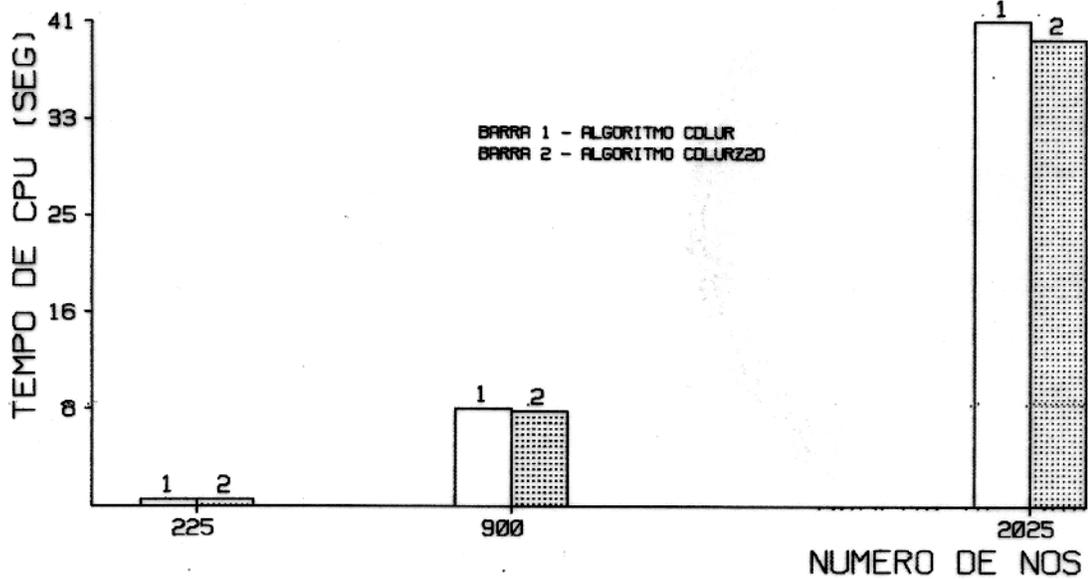


Figura 4.3: Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo CDLURZ2D

4.2 Aplicação no Modelamento Magnetotelúrico 2D

Para comprovar a eficiência e fidelidade dos algoritmos otimizados, foi desenvolvido um programa em linguagem Fortrã-77 capaz de realizar o modelamento de dados magnetotelúricos bidimensionais em estruturas complexas, utilizando-se da TEF para solucionar os campos eletromagnéticos secundários. Após calcular os campos secundários em toda malha, o algoritmo determina nos pontos, ou nós, de superfície ($z = 0$), os valores da resistividade aparente e fase para o campo elétrico incidente; paralelo (E_{\parallel}), modo transversal magnético (MTM), e perpendicular (E_{\perp}), modo transversal elétrico (MTE), com as relações seguintes;

$$\rho_{\parallel} = \frac{1}{\omega\mu} |\tilde{Z}|^2 \quad (4.1)$$

$$\theta_{\parallel} = \arctan(\text{Im}(\tilde{Z})/\text{Re}(\tilde{Z})) \quad (4.2)$$

$$\rho_{\perp} = \frac{1}{\omega\mu} |1/\tilde{Y}|^2 \quad (4.3)$$

$$\theta_{\perp} = \arctan(\text{Im}(1/\tilde{Y})/\text{Re}(1/\tilde{Y})) \quad (4.4)$$

onde, ρ_{\parallel} e θ_{\parallel} , ρ_{\perp} e θ_{\perp} representam a resistividade aparente e fase em MTM e MTE respectivamente; $\tilde{Z} = E_x/H_y$, representa a impedância de superfície (ou impedância aparente), $\tilde{Y} = -H_x/E_y$, representa a admitância de superfície (ou admitância aparente); Im e Re representam a parte imaginária e real de um número complexo.

4.3 Comparações e Discussão dos Resultados

Para comparar os resultados obtidos com o modelamento bidimensional, utiliza-se um modelo no qual apresenta um corpo condutor retangular imerso em um meio homogêneo (Figura 4.4B). Estendendo as dimensões do corpo para o infinito, na direção x , obtém-se com isso um meio unidimensional com três camadas planas horizontais. Na superfície desse modelo, são obtidos, para diferentes frequências, os valores de ρ e θ (MTE e MTM), utilizando-se o algoritmo numérico 2D e o algoritmo de soluções analíticas em uma dimensão. As Figuras 4.5 e 4.6 apresentam a comparação entre os resultados desses algoritmos.

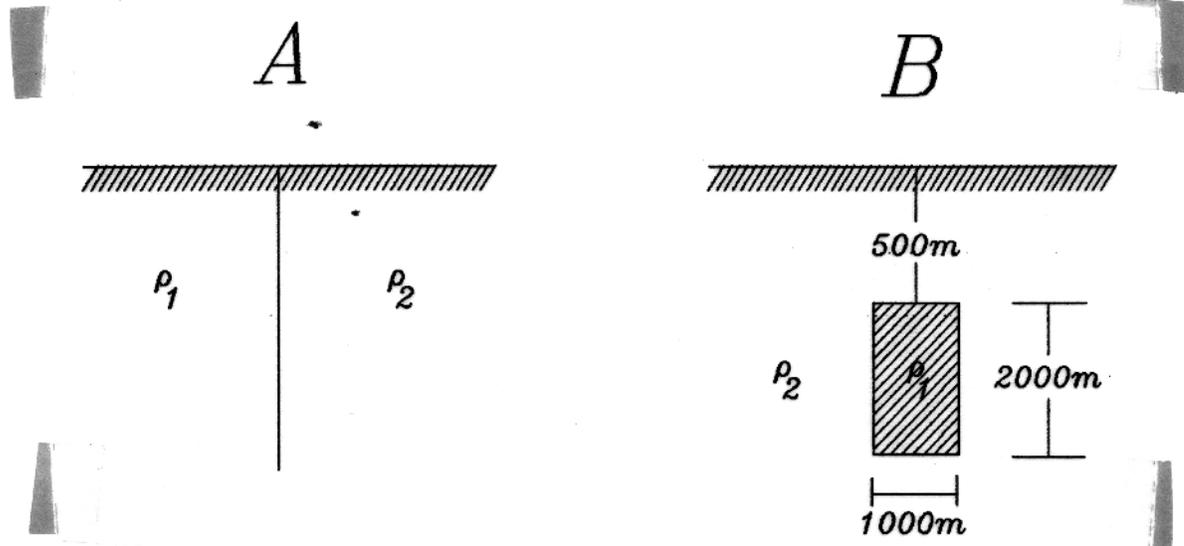


Figura 4.4: Modelos sintéticos 2D. Falha vertical (Fig. 4.4A) e corpo condutor imerso em um meio homogêneo (Fig. 4.4B)

Para uma definitiva confirmação da eficiência dos resultados do algoritmo desenvolvido, foi realizado o modelamento em uma estrutura que simula a falha vertical em duas dimensões (Figura 4.4A), possuindo camadas; com espessuras infinitas e com contraste de resistividade ($CR = \rho_1/\rho_2$) variáveis. Os resultados numéricos da resistividade aparente MTM para o modelo da falha vertical, são comparados com os resultados analíticos de d'Erceville & Kunetz (1962). Para uma comparação de primeira ordem dos resultados numéricos obtidos da resistividade aparente MTE, utilizou-se os resultados analíticos de Weaver (1963). Comparações numéricas de mais alta ordem poderiam ser realizadas utilizando-se do recente trabalho de Sampaio & Fokkema (1991). Estes autores realizaram o estudo do espalhamento de uma onda eletromagnética plana por dois quartos-de-espaço condutor, obtendo resultados numéricos da solução analítica mais exatos, comparados com os de Weaver (1963). As comparações de primeira ordem realizadas estão apresentadas nas Figuras 4.7 e 4.8 onde, os valores da resistividade aparente são variados em relação a distância normalizada pelo "skin depth", $\delta^2 = 2/\omega\mu\sigma_1$, na direção x . Estes resultados obtidos (comparação com um meio em uma dimensão e com o modelo da falha vertical), demonstram a validade do algoritmo bidimensional na determinação da resistividade aparente e fase.

Após comparar a eficiência do algoritmo de modelamento de dados magnetotelúrico em duas dimensões, nas Figuras 4.9, 4.10 e 4.11, 4.12 são apresentadas as curvas de resistividade aparente e fase (MTE e MTM) em relação a variação de x , na superfície, para frequências de 0.1 Hz e 10 Hz, respectivamente.

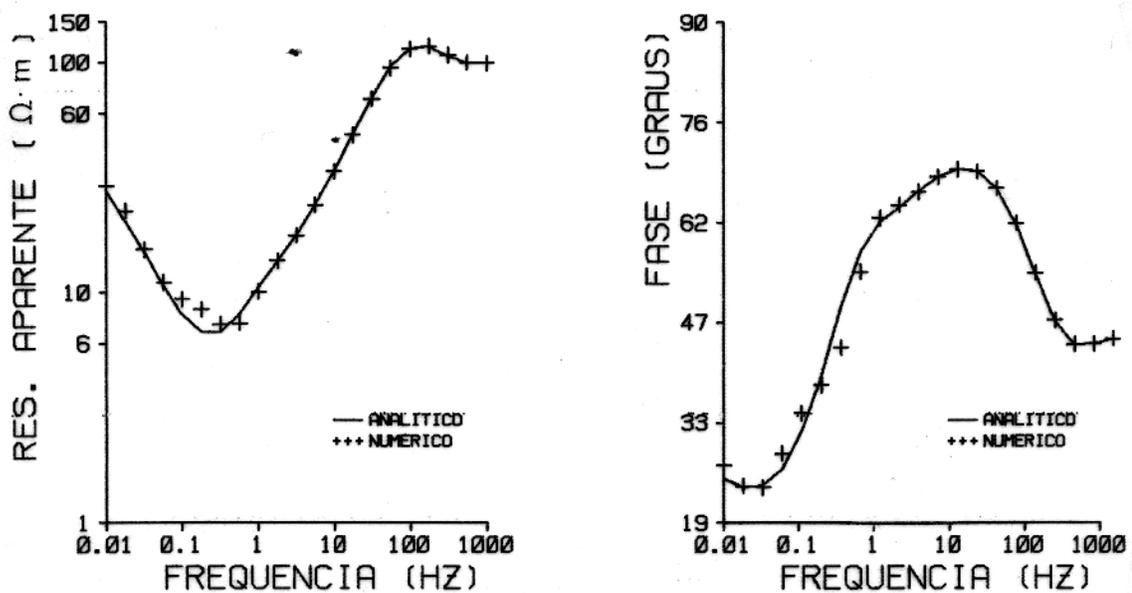


Figura 4.5: Comparação entre as curvas de resistividade aparente e fase (MTE), obtidas através dos algoritmos de solução analítica e o de solução numérica, em um meio com três camadas planas horizontais

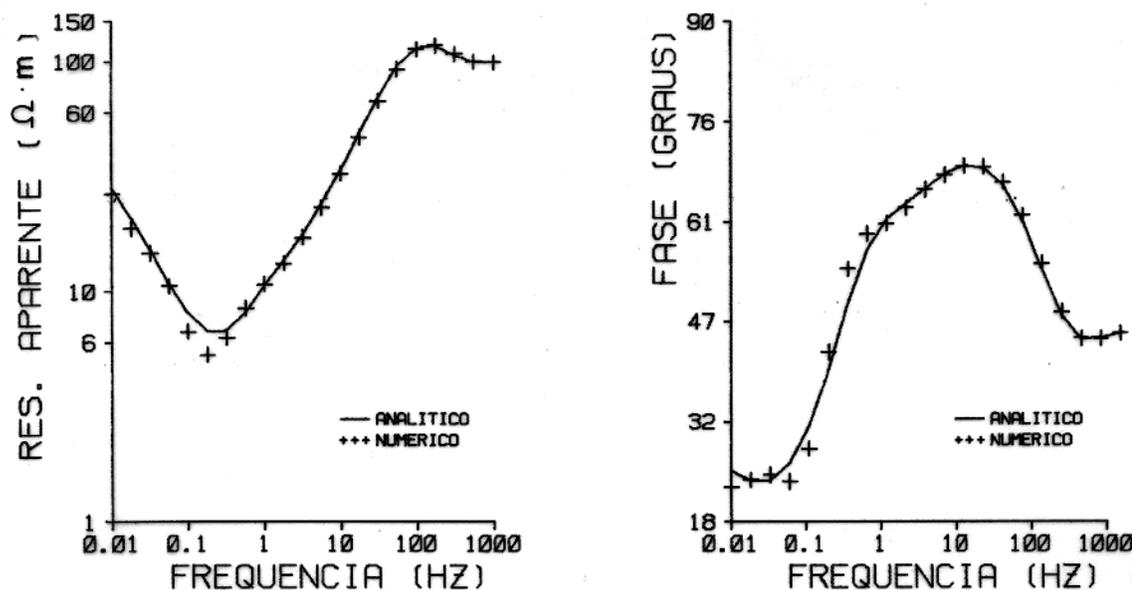


Figura 4.6: Comparação entre as curvas de resistividade aparente e fase (MTM), obtidas através dos algoritmos de solução analítica e o de solução numérica, em um meio com três camadas planas horizontais

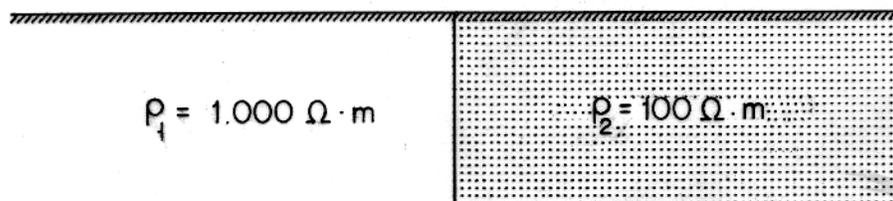
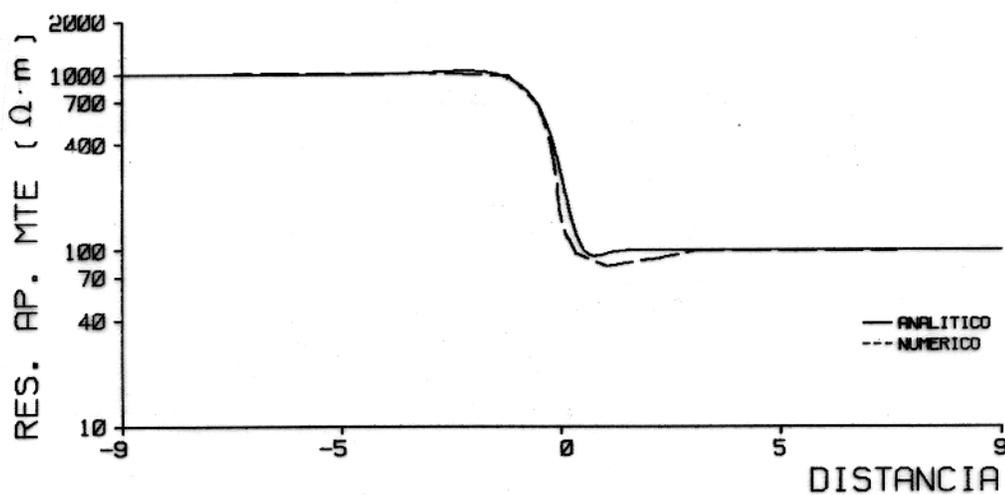
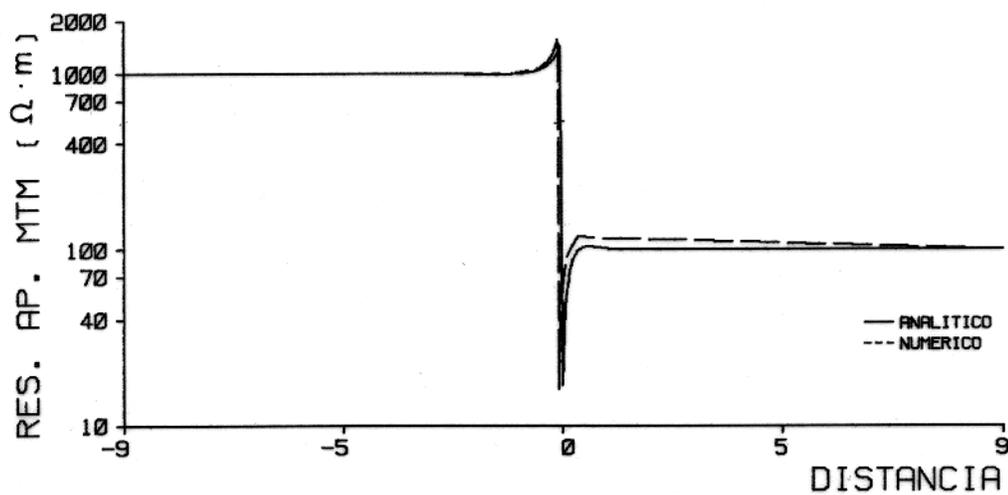


Figura 4.7: Comparação entre as curvas de resistividade aparente, obtidas através do algoritmo de solução analítica e o de solução numérica no modelamento da falha vertical com $CR = 10$

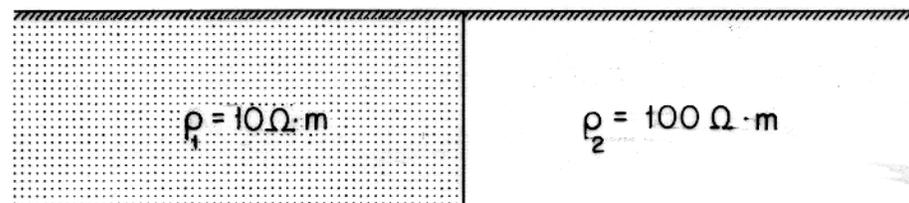
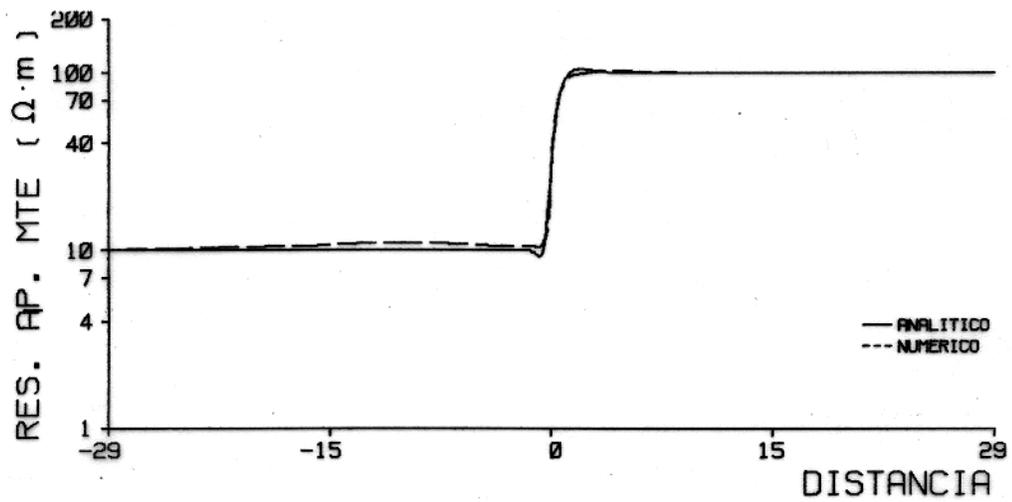
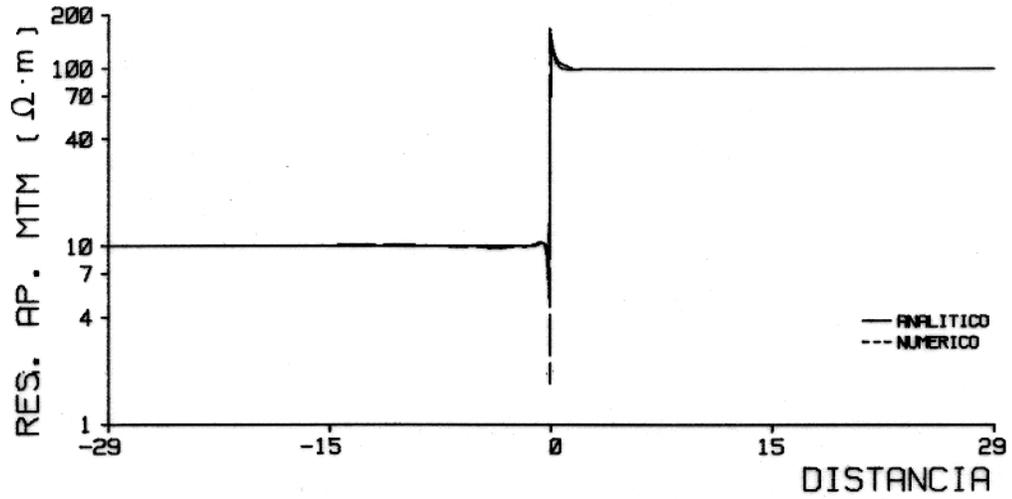
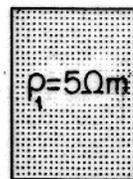
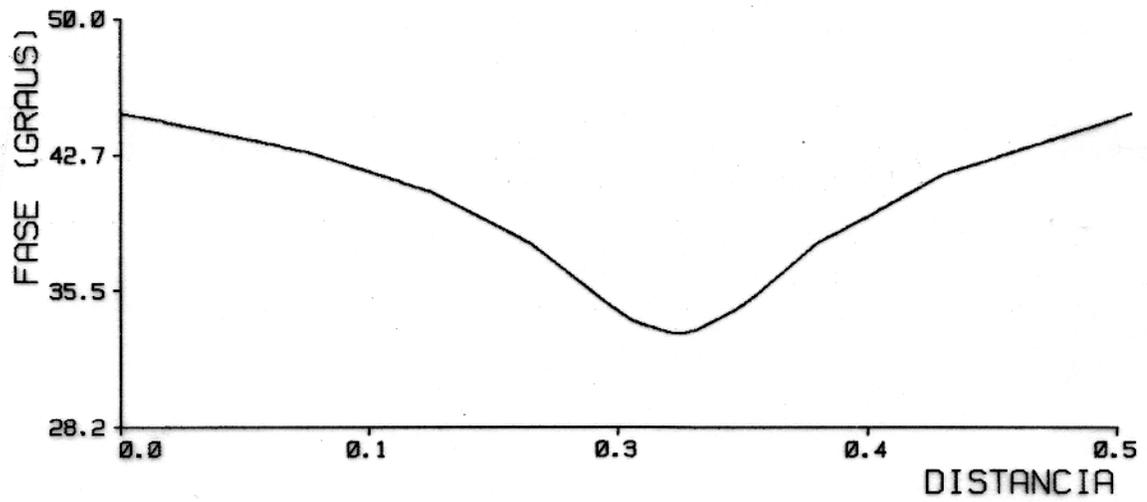
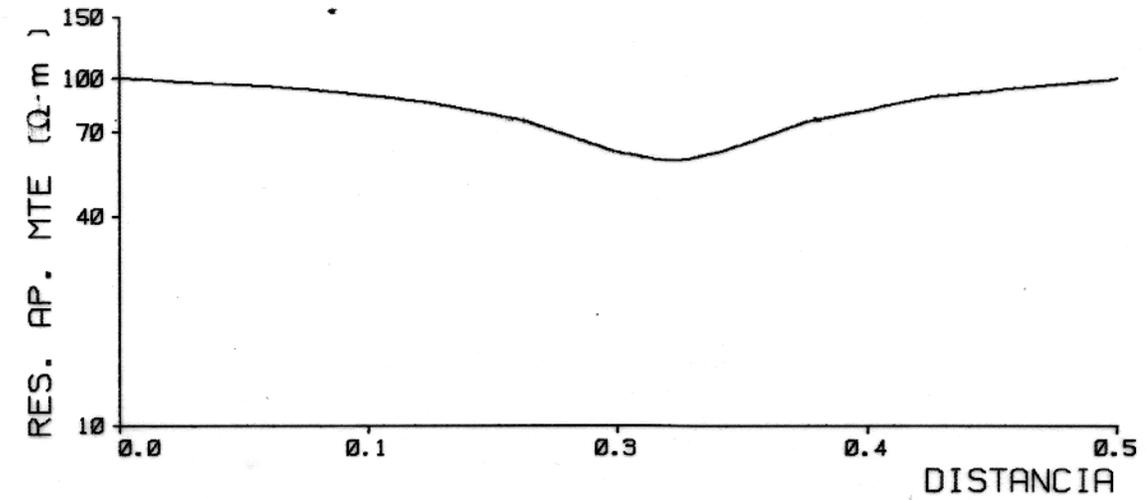


Figura 4.8: Comparação entre as curvas de resistividade aparente, obtidas através do algoritmo de solução analítica e o de solução numérica no modelamento da falha vertical com $CR = 0.1$



$\rho_2 = 100 \Omega \cdot m$

Figura 4.9: Curvas de resistividade aparente e fase, para MTE. Utilizando-se a frequência de 0.1 Hz

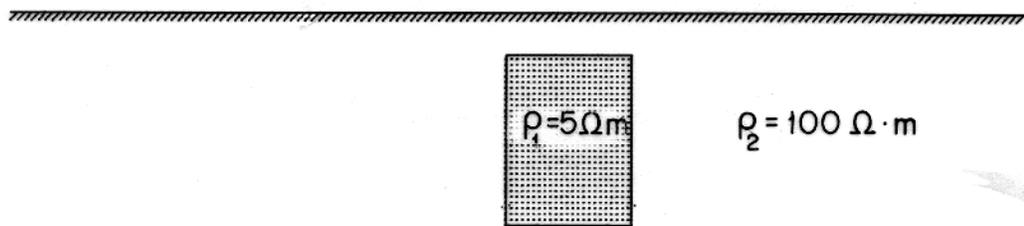
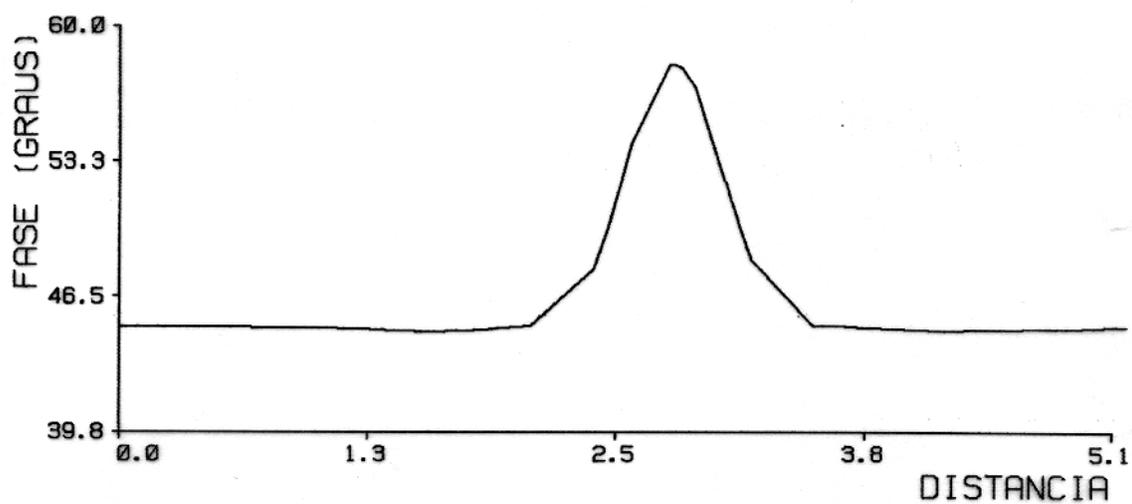
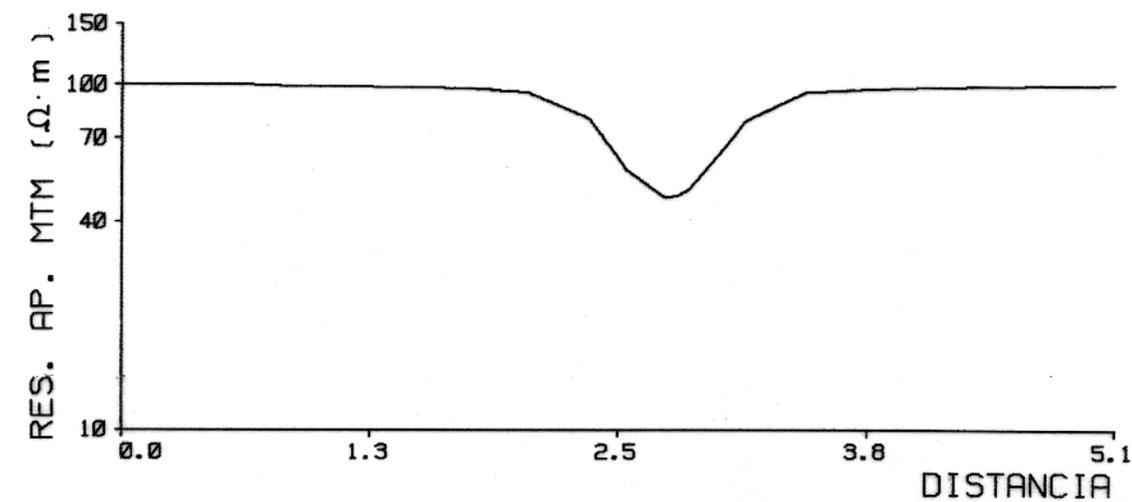


Figura 4.10: Curvas de resistividade aparente e fase, para MTM. Utilizando-se a freqüência de 0.1 Hz

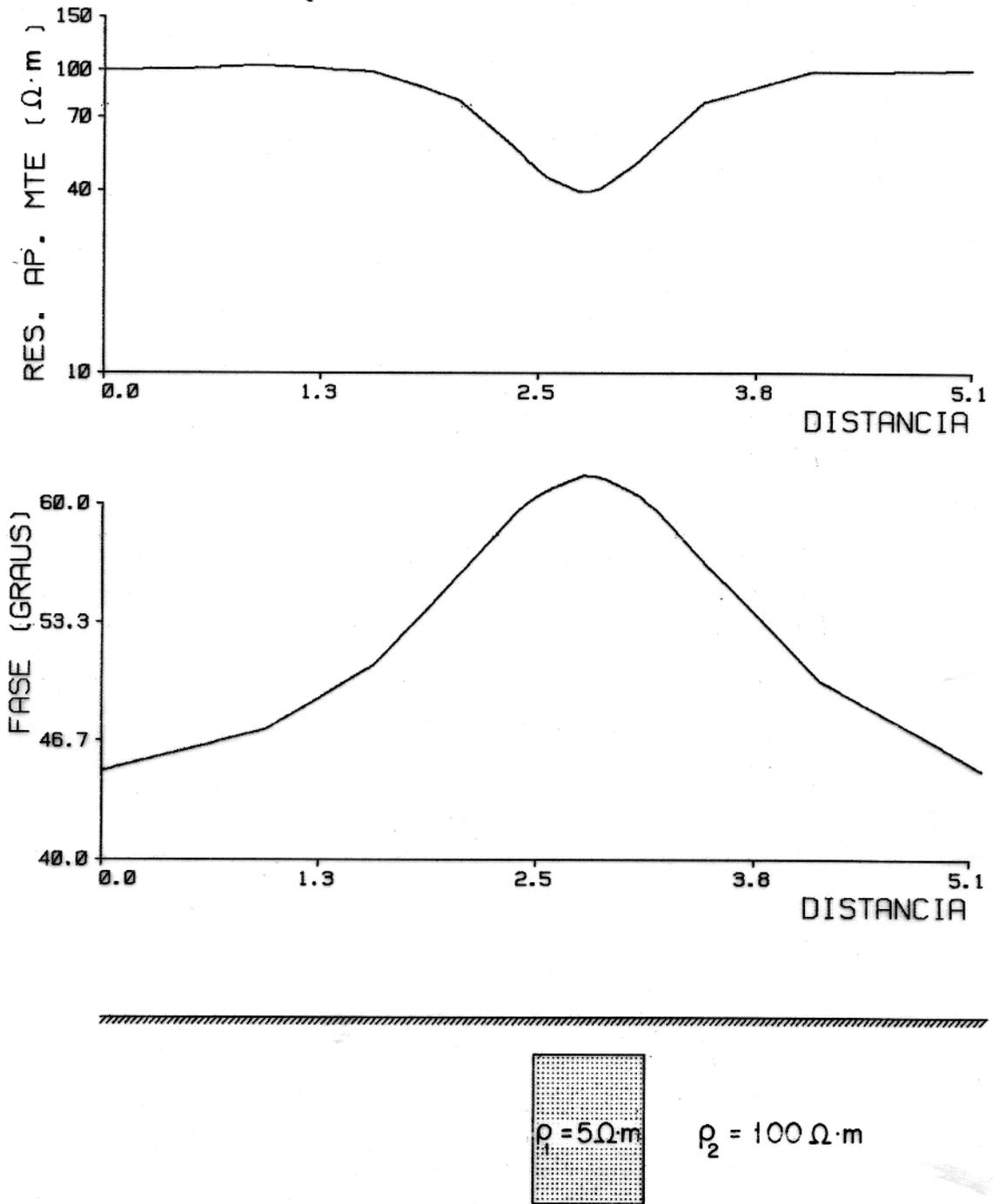


Figura 4.11: Curvas de resistividade aparente e fase, para MTE. Utilizando-se a frequência de 10 Hz

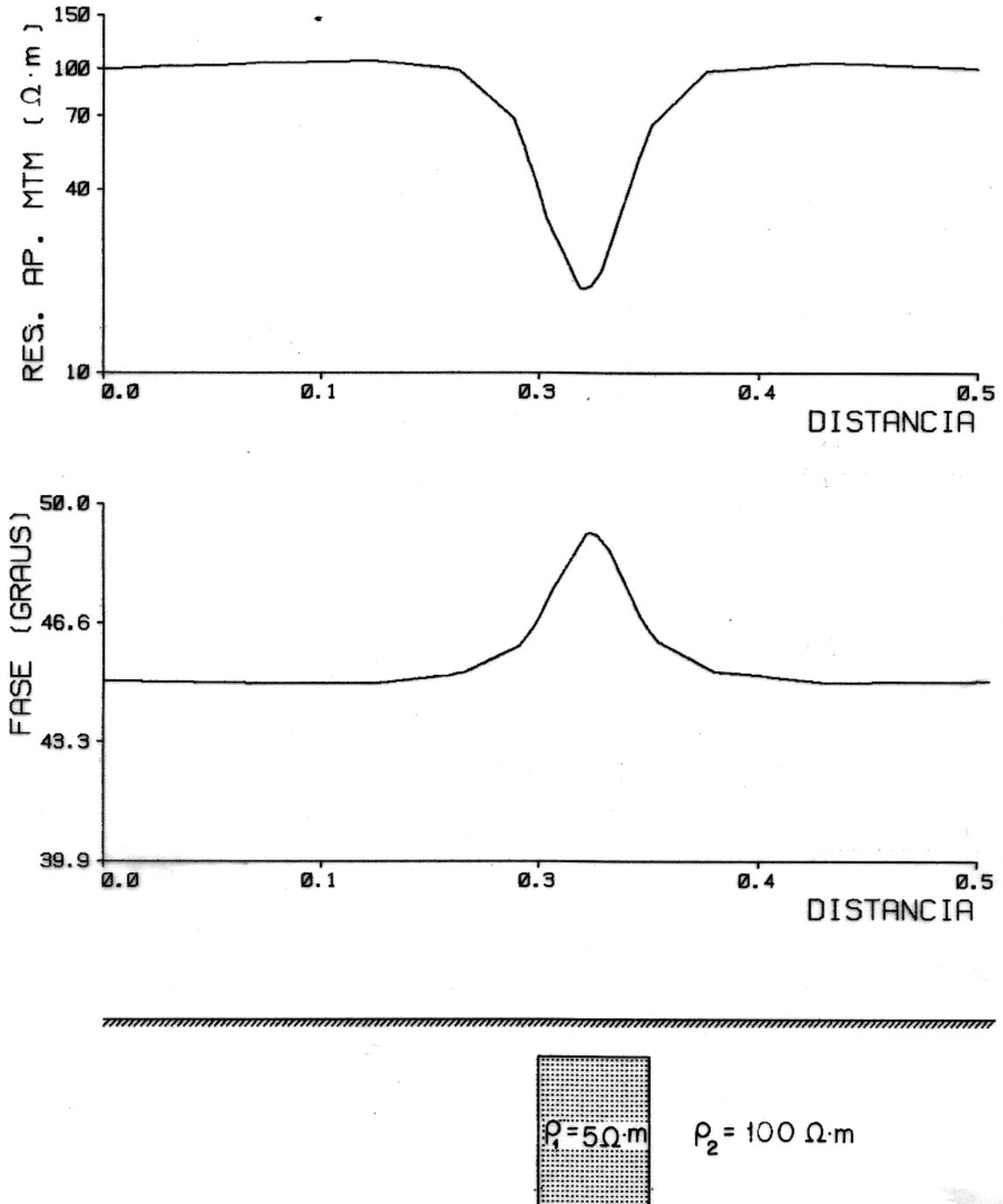


Figura 4.12: Curvas de resistividade aparente e fase, para MTM. Utilizando-se a frequência de 10 Hz

CAPÍTULO 5

OTIMIZAÇÃO E APLICAÇÃO DA TEF NO MODELAMENTO 3D

Neste Capítulo são estudadas e implementadas no método da DLU, as propriedades específicas, citadas no Capítulo 4, dos sistemas de equações lineares gerados pela TEF aplicada ao modelamento EM de estruturas 3D. Em virtude da malha tridimensional possuir um número maior de nós nas fronteiras, em relação à malha bidimensional, um alto grau de otimização no algoritmo de solução de sistema é possível de ser obtido. Após a otimização da TEF associada a estruturas 3D, é desenvolvido um algoritmo em linguagem Fortran-77 capaz de realizar o modelamento magnetotelúrico em estruturas tridimensionais. Os resultados obtidos a partir deste algoritmo são comparados com os gerados pelo algoritmo em duas dimensões para o modelamento em uma falha vertical. São apresentados resultados do modelamento magnetotelúrico em estruturas sintéticas 3D, os quais comprovam a eficiência dos algoritmos otimizados.

5.1 Otimização do Algoritmo DLU no Modelamento 3D

Para solucionar o sistema de equações gerado pela TEF tridimensional utiliza-se a DLU para sistemas complexos. Analogamente ao modelamento 2D, apresentado no Capítulo 4, é possível retirar dos cálculos os nós de fronteiras, tornando assim o sistema reduzido. Como a malha é tridimensional, a magnitude do sistema, ao retirar os nós de fronteiras, é consideravelmente reduzida, possibilitando uma significativa economia no tempo de processamento e na área de memória requerida para armazenar os dados do sistema. A Figura 5.1 apresenta a comparação entre o algoritmo que soluciona o sistema utilizando todos os nós e o algoritmo que soluciona o sistema reduzido, algoritmo CDLUR (Anexo IV), demonstrando uma economia de 65% no tempo total de CPU.

A matriz dos coeficientes após ser decomposta pela DLU, em matrizes triangulares inferior e superior apresenta uma conformação, na qual, observa-se três triângulos de zeros bem definidos, Figura 5.2. Nos triângulos menores, a magnitude é dependente do número de intervalos entre os nós na direção z . O maior triângulo de zeros é dependente em sua magnitude do produto entre o número de intervalos entre os nós na direção z , e o número de intervalos na direção x , ou seja,

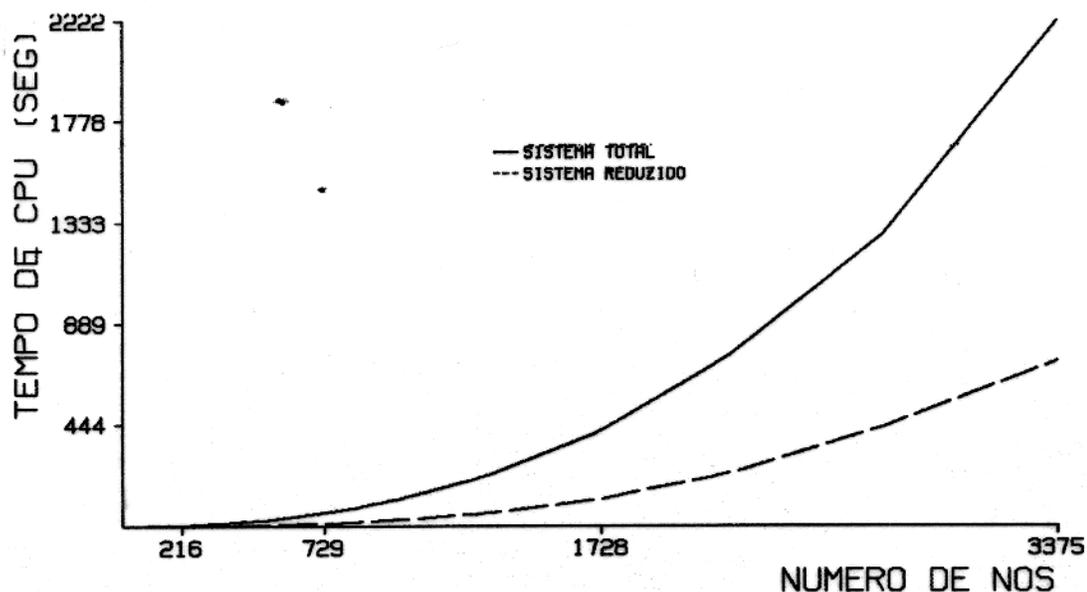


Figura 5.1: Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo que soluciona o sistema total e o que soluciona o sistema reduzido

o número total de intervalos em uma malha plana. Valendo-se dessas propriedades foi elaborado um algoritmo em linguagem Fortran-77, algoritmo CDLURZ3D (Anexo VI), o qual não realiza operações com os elementos nulos contidos nesses triângulos. O algoritmo CDLUR3D apresenta uma maior eficiência comparado com o CDLUR, conforme ilustrado na Figura 5.3.

A otimização do algoritmo para solucionar o sistema de equação, foi possível devido a elaboração e utilização do algoritmo CCMF (Anexo III). Esse algoritmo monta a matriz dos coeficientes e o lado direito do sistema, sem os nós de fronteiras, realizando as operações necessárias às inclusões das contribuições destes nós nos nós internos.

As otimizações realizadas na TEF tridimensional possibilita a realização do modelamento com dados eletromagnéticos em estruturas tridimensionais complexas, em um tempo de processamento menor, mais acessíveis com os atuais computadores disponíveis. Para um aumento maior da eficiência dos algoritmos é recomendável que também seja utilizado os algoritmos em "array-processor", pois o tempo real para o processamento é ainda menor, conforme ficou demonstrado no Capítulo 3.

$$\begin{bmatrix}
 a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1,l} & a_{1,l+1} & \cdots & a_{1,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{1,k} & a_{k,2} & \cdots & a_{k,k} & a_{k,k+1} & \cdots & a_{k,l} & a_{k,l+1} & \cdots & a_{k,m} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k+1} & \cdots & a_{k+1,l} & a_{k+1,l+1} & \cdots & a_{k+1,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & a_{l,k} & a_{l,k+1} & \cdots & a_{l,l} & a_{l,l+1} & \cdots & a_{l,m} \\
 0 & a_{l+1,2} & \cdots & a_{l+1,k} & a_{l+1,k+1} & \cdots & a_{l+1,l} & a_{l+1,l+1} & \cdots & a_{l+1,m} \\
 a_{l+2,1} & a_{l+2,2} & \cdots & a_{l+2,k} & a_{l+2,k+1} & \cdots & a_{l+2,l} & a_{l+2,l+1} & \cdots & a_{l+2,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,k} & a_{n,k+1} & \cdots & a_{n,l} & a_{n,l+1} & \cdots & a_{n,m} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_{n+1,m} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n+2,l+1} & \cdots & a_{n+2,m} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_{n+3,l} & a_{n+3,l+1} & \cdots & a_{n+3,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{p,k+1} & \cdots & a_{p,l} & a_{p,l+1} & \cdots & a_{p,m} \\
 0 & 0 & \cdots & a_{p+1,k} & a_{p+1,k+1} & \cdots & a_{p+1,l} & a_{p+1,l+1} & \cdots & a_{p+1,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 0 & a_{q,2} & \cdots & a_{q,k} & a_{q,k+1} & \cdots & a_{q,l} & a_{q,l+1} & \cdots & a_{q,m} \\
 a_{q+1,1} & a_{q+1,2} & \cdots & a_{q+1,k} & a_{q+1,k+1} & \cdots & a_{q+1,l} & a_{q+1,l+1} & \cdots & a_{q+1,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{r,1} & a_{r,2} & \cdots & a_{r,k} & a_{r,k+1} & \cdots & a_{r,l} & a_{r,l+1} & \cdots & a_{r,m} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{r+1,k+1} & \cdots & a_{r+1,l} & a_{r+1,l+1} & \cdots & a_{r+1,m} \\
 0 & 0 & \cdots & a_{r+2,k} & a_{r+2,k+1} & \cdots & a_{r+2,l} & a_{r+2,l+1} & \cdots & a_{r+2,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 0 & a_{s,2} & \cdots & a_{s,k} & a_{s,k+1} & \cdots & a_{s,l} & a_{s,l+1} & \cdots & a_{s,m} \\
 a_{s+1,1} & a_{s+1,2} & \cdots & a_{s+1,k} & a_{s+1,k+1} & \cdots & a_{s+1,l} & a_{s+1,l+1} & \cdots & a_{s+1,m} \\
 \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
 a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,k} & a_{m,k+2} & \cdots & a_{m,l} & a_{m,l+1} & \cdots & a_{m,m}
 \end{bmatrix}$$

Figura 5.2: Matriz dos coeficientes após a decomposição LU, apresentando uma configuração de três triângulos de zeros

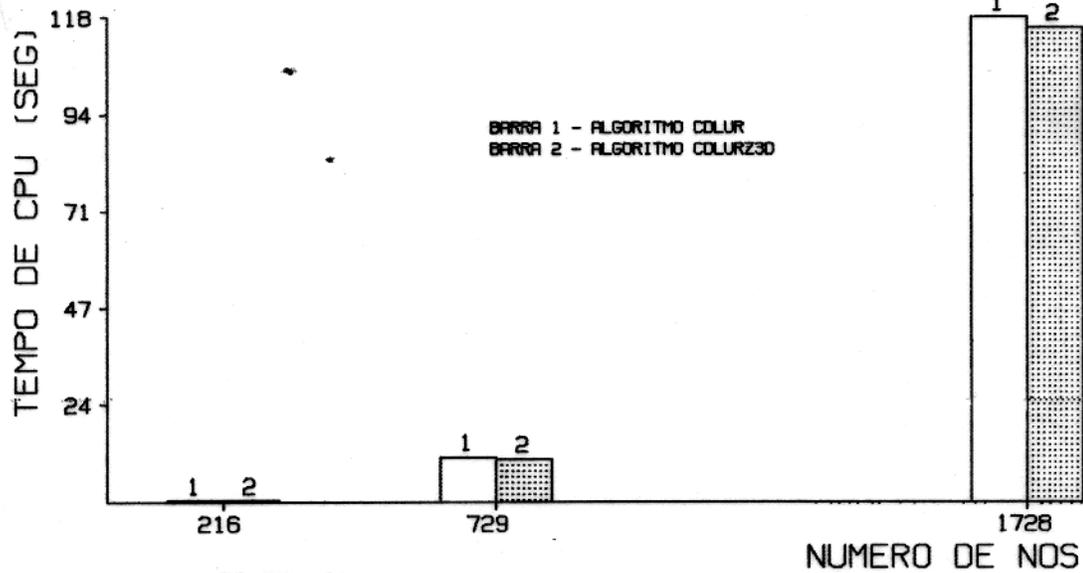


Figura 5.3: Comparação em tempo de CPU entre o algoritmo CDLUR e o algoritmo CDLURZ3D

5.2 Aplicação no Modelamento Magnetotelúrico 3D

Para comprovar a eficiência e fidelidade dos algoritmos otimizados, foi desenvolvido um programa em linguagem Fortran-77 capaz de realizar o modelamento de dados magnetotelúricos em estruturas tridimensionais, utilizando-se da TEF para solucionar os campos eletromagnético secundários. Após o cálculo do campo EM secundário em todos elementos da malha, o produto final deste algoritmo são os valores das resistividades aparentes e fases na superfície do modelo em estudo.

Após o cálculo dos campos EM secundários nas direções x e y , obtém-se na superfície, no domínio da frequência, as seguintes relações ;

$$E_x = Z_{xx}H_x + Z_{xy}H_y \quad (5.1)$$

$$E_y = Z_{yx}H_x + Z_{yy}H_y$$

que podem ser escritas na forma compacta como sendo;

$$\mathbf{E} = \mathbf{Z}\mathbf{H} \quad (5.2)$$

onde,

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} Z_{xx} & Z_{xy} \\ Z_{yx} & Z_{yy} \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

\mathbf{E} e \mathbf{H} são os vetores formados por (E_x, E_y) e (H_x, H_y) respectivamente e \mathbf{Z} representa o tensor de impedância. Para determinar os valores de \mathbf{Z} é necessário o cálculo dos campos EM secundários em uma segunda polarização do campo incidente, diferente da primeira polarização, observadas em intervalos de tempo diferentes, obtendo-se as expressões;

$$\begin{aligned} E_{x2} &= Z_{xx}H_{x2} + Z_{xy}H_{y2} \\ E_{y2} &= Z_{yx}H_{x2} + Z_{yy}H_{y2} \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde o subscrito 2 designa que o campo eletromagnético é calculado com a segunda polarização do campo incidente ou fonte.

Combinando os sistemas acima, obtém-se as relações dos elementos do tensor de impedância;

$$\begin{aligned} Z_{xx} &= \frac{\begin{vmatrix} E_x & H_y \\ E_{x2} & H_{y2} \end{vmatrix}}{H_{xy}} & Z_{xy} &= \frac{\begin{vmatrix} H_x & E_x \\ H_{x2} & E_{x2} \end{vmatrix}}{H_{xy}} \\ Z_{yx} &= \frac{\begin{vmatrix} E_y & H_y \\ E_{y2} & H_{y2} \end{vmatrix}}{H_{xy}} & Z_{yy} &= \frac{\begin{vmatrix} H_x & E_y \\ H_{x2} & E_{y2} \end{vmatrix}}{H_{xy}} \end{aligned}$$

onde,

$$H_{xy} = \begin{vmatrix} H_x & H_y \\ H_{x2} & H_{y2} \end{vmatrix}$$

De posse das relações do tensor de impedância, é necessário agora determinar as relações da resistividade aparente (ρ) e fase (θ) em cada direção, como sendo;

$$\rho_{ij} = \frac{1}{\omega\mu} |Z_{ij}|^2 \quad (5.5)$$

$$\theta_{ij} = \arctan(\text{Im}(Z_{ij})/\text{Re}(Z_{ij})) \quad (5.6)$$

onde, $\text{Im}(Z_{ij})$ e $\text{Re}(Z_{ij})$, $i, j = x, y$, são as partes imaginária e a real do número complexo Z_{ij} .

5.3 Comparações e Discussão dos Resultados

Para comparar os resultados obtidos com o modelamento de estruturas tridimensionais, utilizam-se os resultados analíticos obtidos com o programa em linguagem Fortran-77 em duas

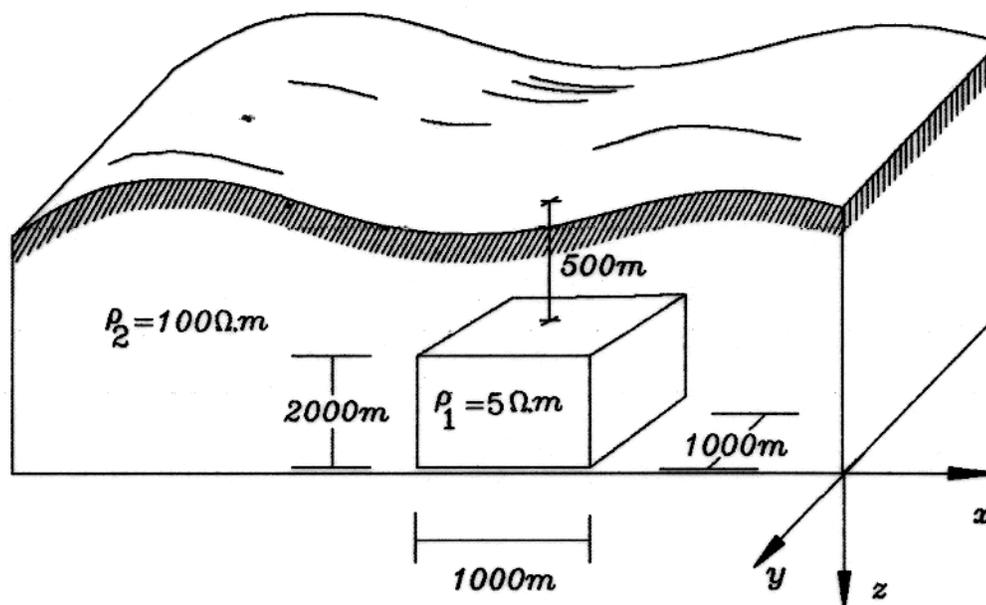


Figura 5.4: Modelo de estrutura tridimensional, utilizado no teste do algoritmo

dimensões, onde calculam-se as resistividades aparentes para MTE e MTM no modelo sintético da falha vertical. Variando o comprimento da falha em relação a direção y , calculam-se as resistividades aparentes ao longo de x . As curvas de resistividade aparente são obtidas no ponto médio entre as laterais, ao longo de y , da falha. Esses resultados são comparados com os resultados obtidos para meio bidimensional. As Figura 5.5 e 5.6 apresentam essa comparação para MTE e MTM. Estes resultados obtidos demonstram a validade do algoritmo tridimensional na determinação dos valores da resistividade aparente.

Após a comparação entre os resultados bidimensionais e tridimensionais, apresenta-se nas Figuras 5.7 e 5.9 os contornos da resistividade aparente ao longo do plano xy , na superfície do modelo da Figura 5.4, para frequências de 0.1 e 10 Hz respectivamente. Os contornos da fase para as respectivas impedâncias, as quais foram calculadas as resistividades aparente, são apresentadas nas Figuras 5.8 e 5.10. Esses resultados demonstram a eficiência dos algoritmos para o modelamento de estruturas tridimensionais.

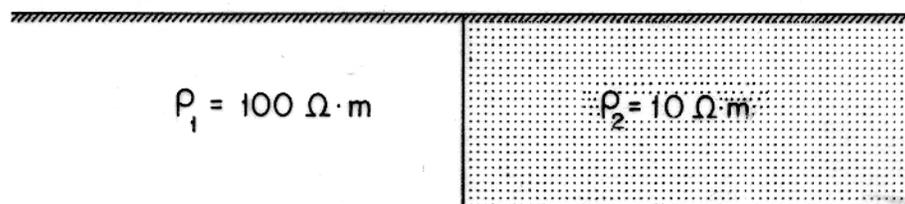
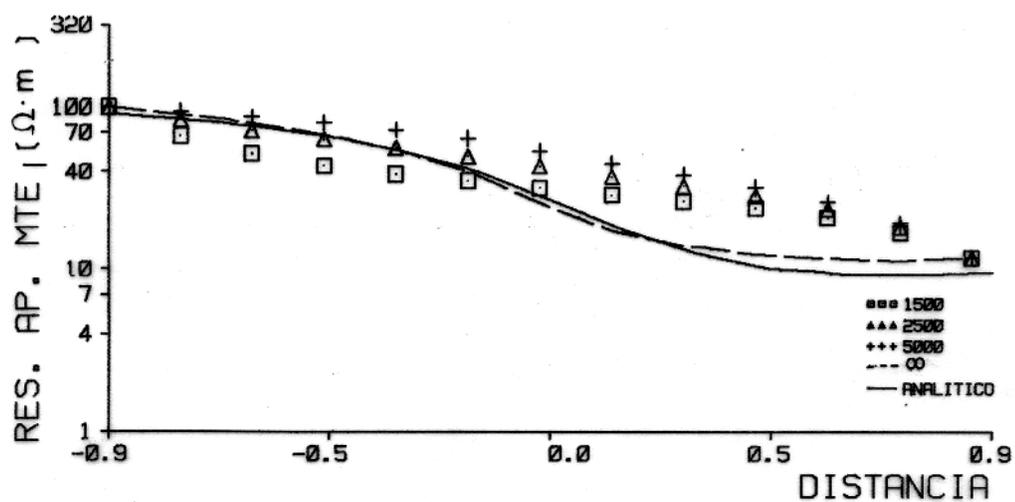
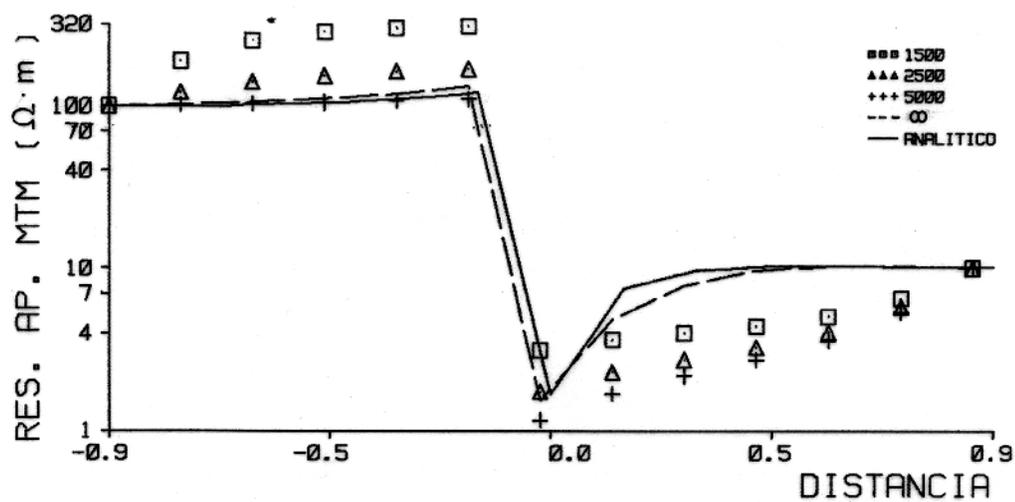


Figura 5.5: Comparação entre as curvas de resistividade aparente MTM e MTE, obtidas através dos resultados em 2D e 3D, para falha vertical com $CR = 10$, variando o comprimento na direção y . Utiliza-se a frequência de 10 Hz

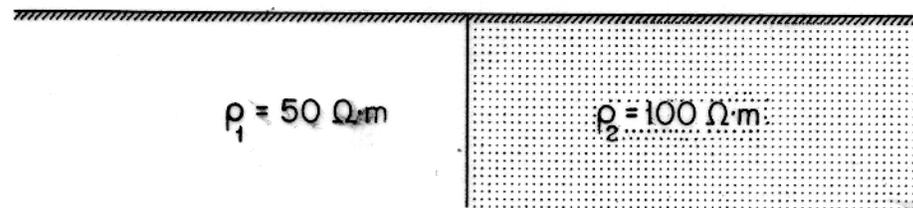
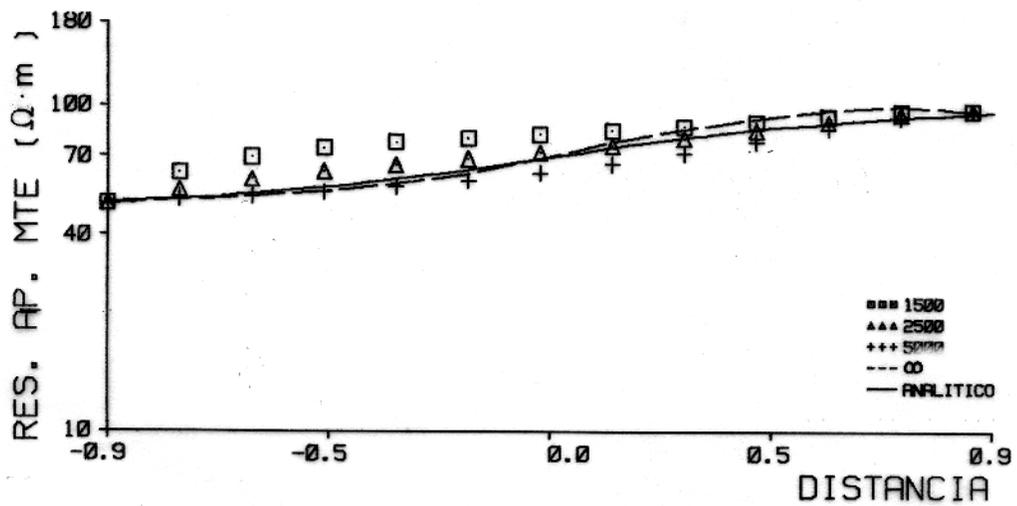
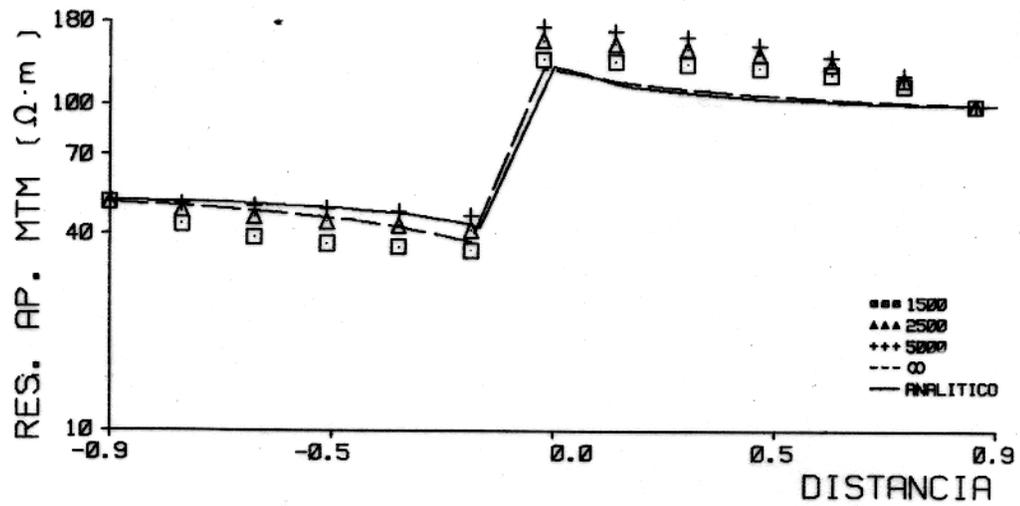


Figura 5.6: Comparação entre as curvas de resistividade aparente MTM e MTE, obtidas através dos resultados em 2D e 3D, para falha vertical com $CR = 0.5$, variando o comprimento na direção y . Utiliza-se a frequência de 10 Hz

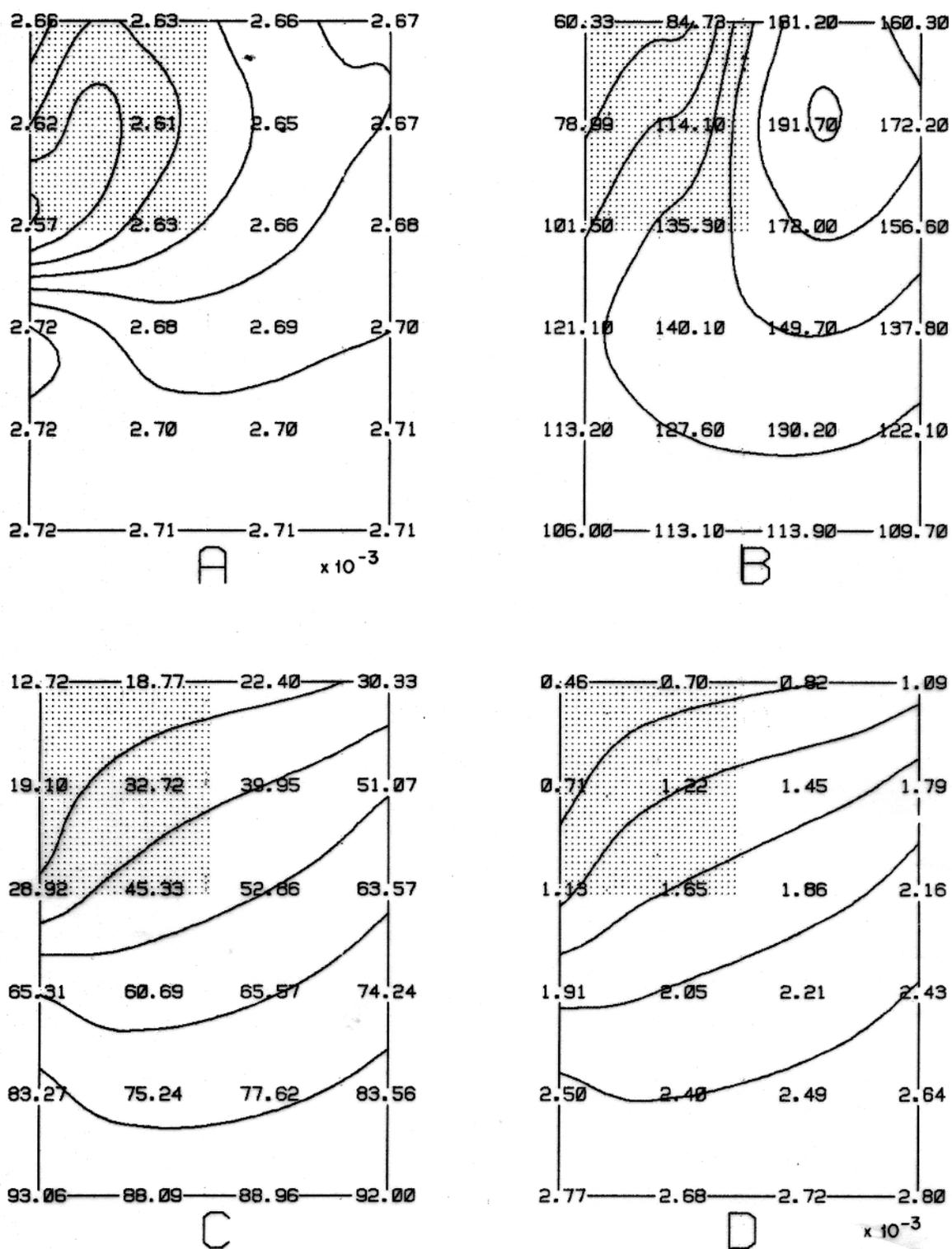


Figura 5.7: Contornos de resistividade aparente na superfície, para frequência de 0.1 Hz. ρ_{xx} (Fig. 5.7A), ρ_{xy} (Fig. 5.7B), ρ_{yx} (Fig. 5.7C) e ρ_{yy} (Fig. 5.7D)

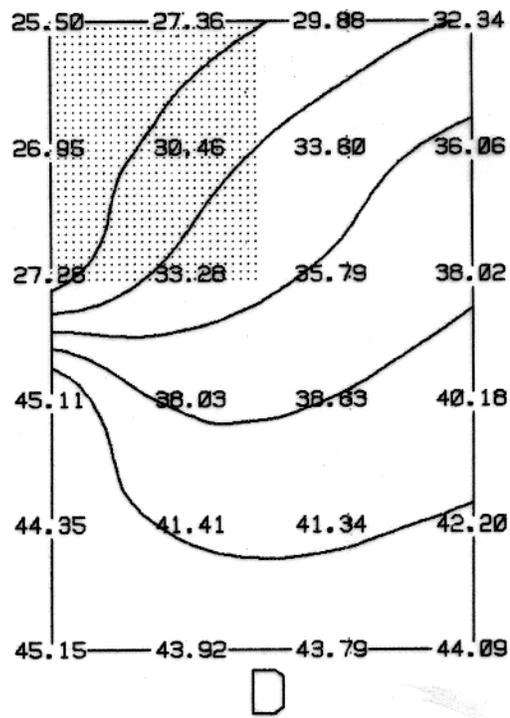
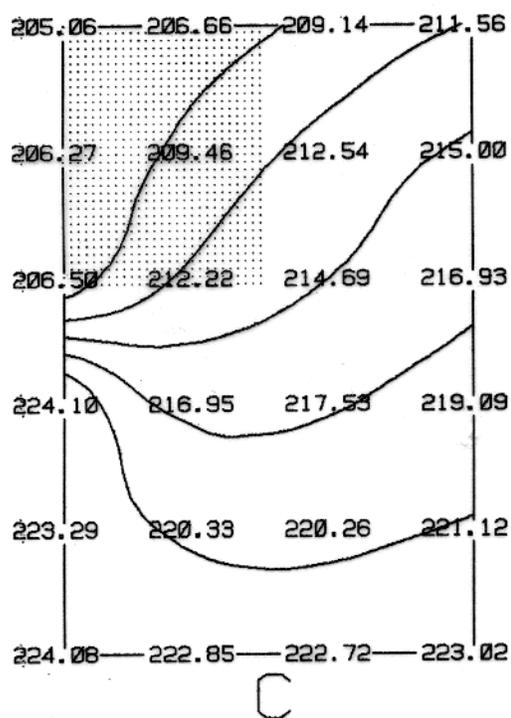
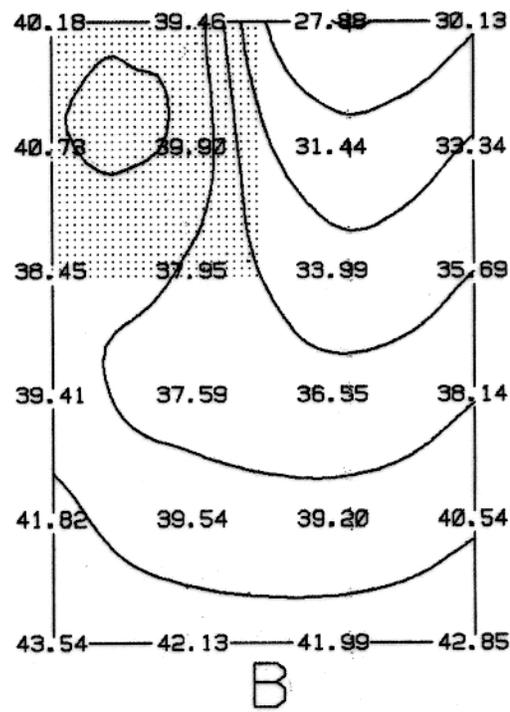
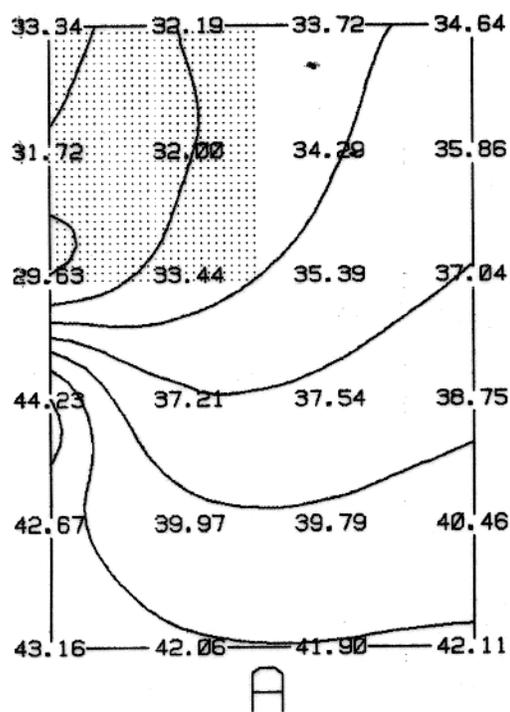


Figura 5.8: Contornos da fase na superfície, para frequência de 0.1 Hz. θ_{xx} (Fig. 5.8A), θ_{xy} (Fig. 5.8B), θ_{yx} (Fig. 5.8C) e θ_{yy} (Fig. 5.8D)

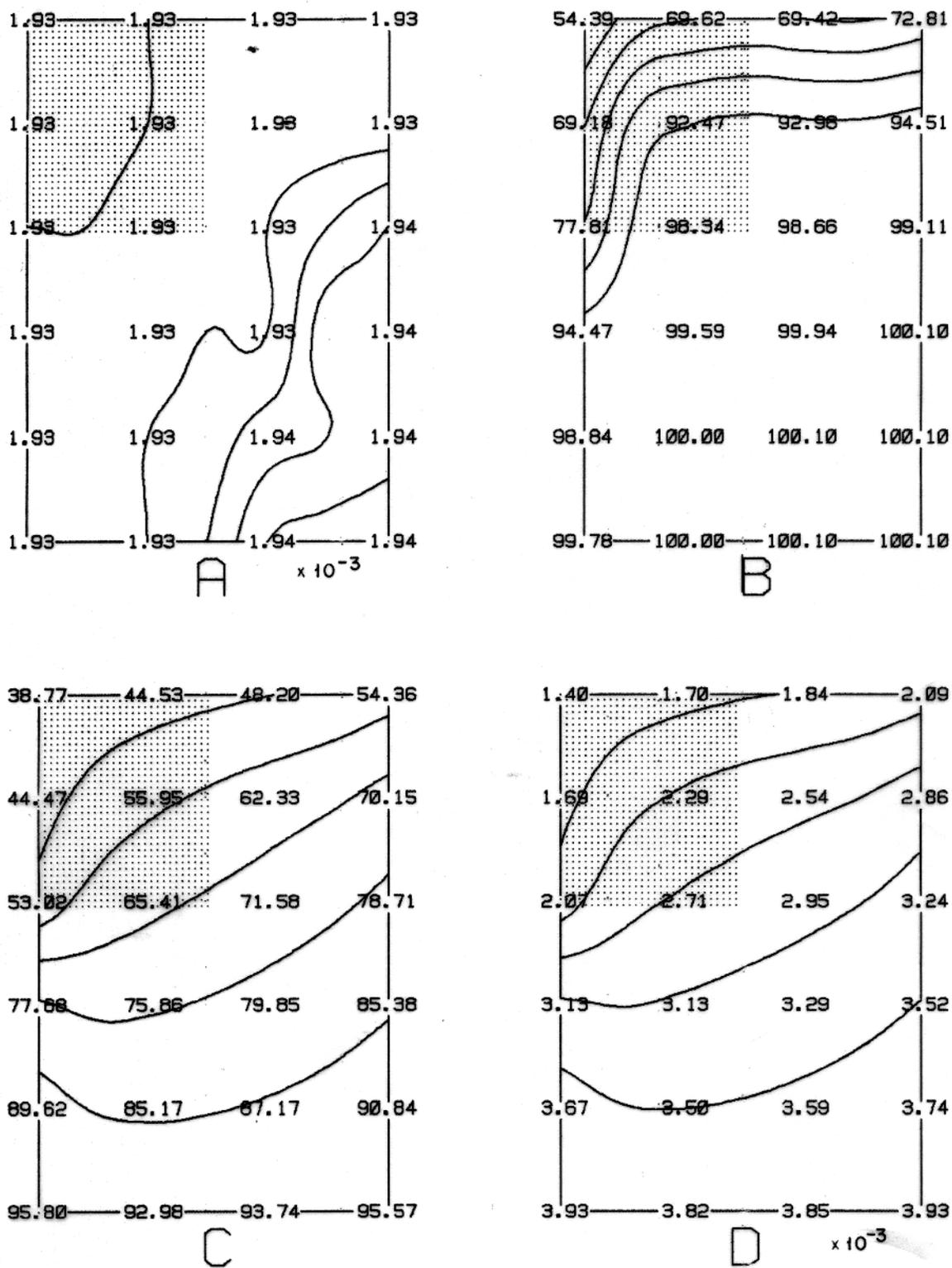


Figura 5.9: Contornos de resistividade aparente na superfície, para frequência de 10 Hz. ρ_{xx} (Fig. 5.9A), ρ_{xy} (Fig. 5.9B), ρ_{yx} (Fig. 5.9C) e ρ_{yy} (Fig. 5.9D)

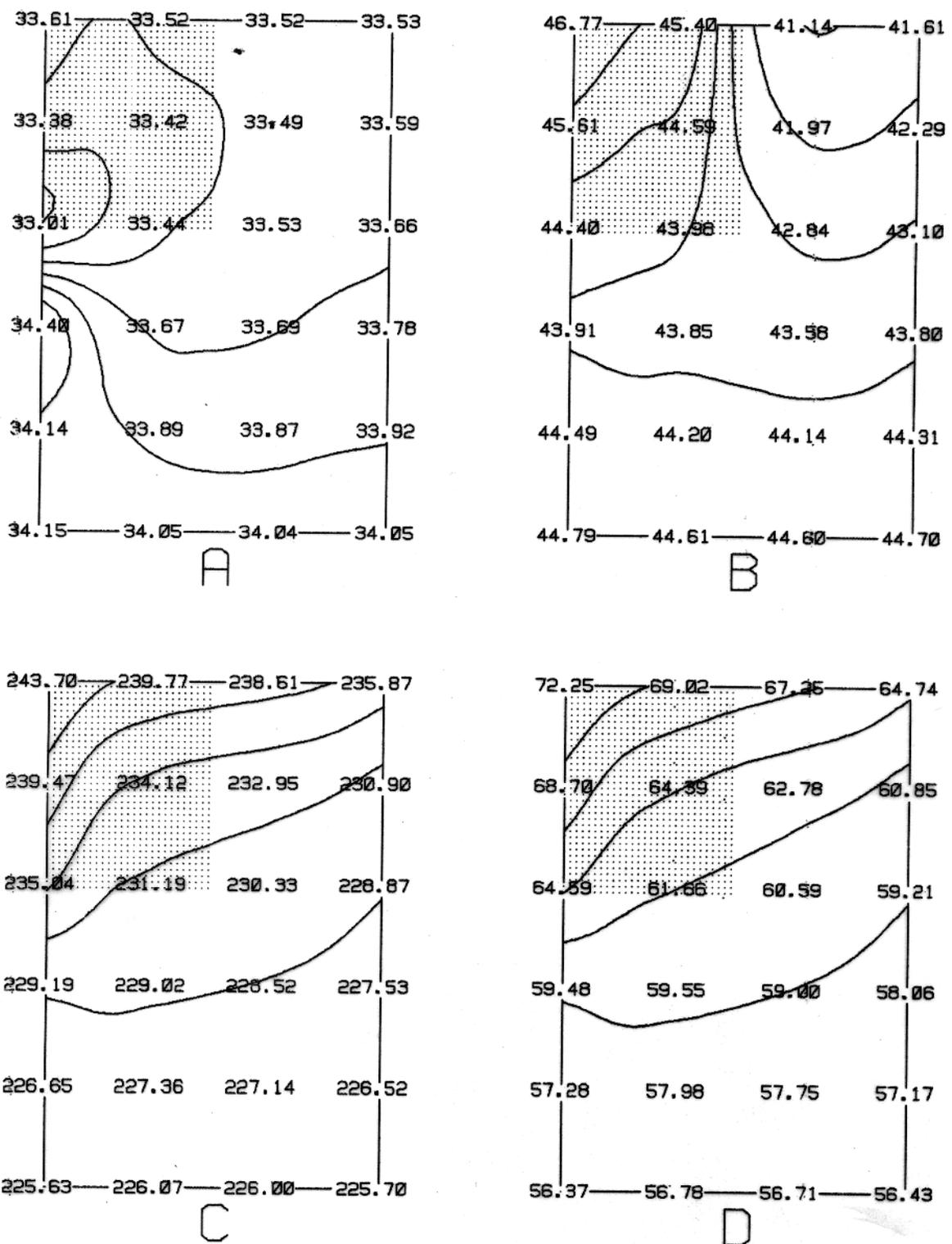


Figura 5.10: Contornos da fase na superfície, para frequência de 10 Hz. θ_{xx} (Fig. 5.10A), θ_{yx} (Fig. 5.10B), θ_{xy} (Fig. 5.10C) e θ_{yy} (Fig. 5.10D)

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou e discutiu os resultados dos estudos comparativos, sobre a eficiência de diferentes métodos de solução de sistema de equações lineares gerado pela TEF aplicada no modelamento EM. Foram utilizados os métodos: Gradiente Conjugado, Gram-Schmidt, Eliminação Gaussiana e Decomposição LU. Algoritmos em linguagem Fortran-77 foram desenvolvidos para cada método. Esses algoritmos foram otimizados, removendo-se as operações aritméticas associadas aos elementos nulos da matriz dos coeficientes. O desempenho de cada algoritmo na solução do sistema foi comparado com base no tempo de CPU. Para malhas com número superior a 144 nós, o método da DLU demonstrou ser mais eficiente que os demais. Nos métodos Gradiente Conjugado e Decomposição LU, foram implementadas as rotinas do "array-processor" do sistema Disco-Vax 11/785. Com base no tempo de AP, os algoritmos foram comparados, confirmando-se a superioridade do método DLU, possibilitando a redução do tempo real de processamento em relação as rotinas em linguagem Fortran-77.

O conhecimento prévio dos campos EM secundários, nos nós das fronteiras da malha (condições de fronteiras), possibilitou a redução da ordem do sistema de equações gerado pela TEF, diminuindo, conseqüentemente, a área de memória para o armazenamento dos dados do sistema. Utilizando o método da DLU, foi elaborado um algoritmo otimizado em linguagem Fortran-77, o qual soluciona o sistema de equações lineares na forma reduzida.

Após a decomposição LU, constatou-se a formação de triângulos de elementos nulos na matriz. Esses triângulos, em número de 3 para modelos 3D e em número de 1 para modelos 2D, situam-se ao lado esquerdo da matriz dos coeficientes decomposta e são dependentes, em magnitude, do número total de elementos da malha. Essa informação foi implementada no algoritmo DLU, de modo a se evitar as operações aritméticas relacionadas aos elementos pertencentes a esses triângulos de zeros.

As otimizações realizadas no algoritmo DLU, redução da ordem do sistema e remoção das

operações aritméticas associadas aos elementos dos triângulos de zeros, possibilitou o desenvolvimento de um eficiente algoritmo para solução do sistema de equações lineares gerado pela TEF. Esse algoritmo foi aplicado na solução de sistemas gerados a partir de malhas bidimensionais e tridimensionais. A performance obtida por este algoritmo, comparado com o algoritmo não otimizado, foi superior a 30% e 65% em economia de CPU, para malhas bidimensionais e tridimensionais respectivamente.

A TEF otimizada foi aplicada no modelamento de dados magnetotelúricos para modelos sintéticos bidimensionais e tridimensionais. Os resultados numéricos sobre modelos simples, a exemplo da falha vertical, foram comparados com os resultados obtidos a partir das soluções analíticas, comprovando assim a eficiência e a aplicabilidade dos algoritmos desenvolvidos para o modelamento eletromagnético através da técnica dos elementos finitos.

AGRADECIMENTOS

Ao NPGP/UFPa e a todo corpo docente, técnico e administrativo por terem propiciado os meios para realização deste trabalho. Em especial ao prof. Dr. Carlos A. Dias por todo apoio dado e pelos encorajadores estímulos que muito contribuíram para a viabilização do meu trabalho.

À PETROBRÁS pelo suporte financeiro, na minha condição de bolsista.

Ao prof. Dr. Milton José Porsani, pela paciência com que me transmitiu seus conhecimentos durante suas aulas e palestras individuais; pela dedicação em orientar a pesquisa; corrigir os erros e aperfeiçoar o texto desta tese.

A agradável acolhida a mim dispensada pelos professores e funcionários do PPPG/UFBa, em especial a secretaria da coordenação Alcirlene C. Fonseca, no período do desenvolvimento desse trabalho, tornando-o mais gratificante.

Aos membros da comissão examinadora, profs. Drs. Edson E. S. Sampaio e Sergio Luiz Fontes, pelas críticas e sugestões que contribuíram para melhorar a apresentação final deste trabalho.

A todos colegas do NPGP/UFPa e PPPG/UFBa pelo companherismo demonstrado a cada dia garantindo um ambiente sadio e promissor à pesquisa.

À minha esposa Maria do Socorro, minha filha Tatiana, aos meus pais e irmãos, por toda compreensão, apoio e estímulo que a mim sempre foi dado, aos quais sou devedor pela ausência quase integral a que os submeti durante a longa jornada deste trabalho.

Finalmente, a todas as pessoas que, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BECKER, B. E.; GAREY, G. F.; ODEN, J. T. 1981. Finite elements. New Jersey, Prentice-Hall, v. 1.
- BEST, M. E.; DUNCAN, P.; JACOBS, F. J. & SCHEEN, W. L. 1985. Numerical modeling of the electromagnetic response of three-dimensional conductors in layered earth. *Geophysics*, 50: 665 – 676.
- d' ERCEVILLE, I. & KUNETZ, G. 1962. The effect of a fault on the Earth's natural electromagnetic field. *Geophysics*, 27(5): 651 – 665.
- HOHMANN, G. W. 1985. Three-dimensional EM modeling. *Geophysics reprint series*, 5: 373 – 399.
- PORSANI, M. J. 1991. Levinson's principle and correlated algorithms. *Notas do curso apresentado na II Escuela Latinoamericana de Geofísica. Mérida, Venezuela.* p. 112.
- PRESS, W. H.; FLANNEY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T. 1986. *Numerical recipes.* Cambridge, Cambridge University Press, 818 pp.
- PRIDMORE, D. F.; HOHMANN, G. W.; WARD, S. H.; SILL, W. R. 1981. An investigation of finite-element modeling for electrical and electromagnetic data in three-dimensions. *Geophysics*, 46: 1009 – 1024.
- RAICHE, A. P. 1974. An integral equation approach to three-dimensional modeling. *Geophy. Jour. of the Royal Astr. Society*, 36: 363 – 376.
- REDDY, I. K.; RANKIN, D.; PHILLIPS, R. J. 1977. Three-dimensional modeling in magnetotelluric and magnetic variational sounding. *Geophy. Jour. of the Royal Astr. Society*, 51: 313 – 325.
- RIJO, L. 1990. *Notas de aulas dos cursos "Teoria dos métodos eletromagnéticos I e II". Curso de Pós graduação em Geofísica, UFPa.* p. 364.
- SAMPAIO, E. E. S. & FOKKEMA, J. T. 1991. Scattering of monochromatic acoustic and electromagnetic plane waves by two quarter-spaces. *No prelo.*

TING, S. C. & Hohmann, G. W. 1981. Integral equation modeling of three-dimensional magnetotelluric response. *Geophysics*, 46: 182 – 197.

WAVER, J. T. 1963. The electromagnetic field withing a discontinuous conductor with reference to geomagnetic micropulsations near a coastline. *Can. J. Physics*, 41: 484 – 495.

APÊNDICE A

EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DOS CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS SECUNDÁRIOS

As equações de Maxwell no domínio da frequência (no sistema de medidas mks) onde $e^{i\omega t}$ é assumido na dependência do tempo, são:

$$\nabla \times E = -ZH, \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \times H = \mathcal{Y}E + j_e, \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \cdot (\mu H) = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot (\epsilon E) = q_v. \quad (\text{A.4})$$

Separando os campos em secundário (E_s, H_s) e primário (E_p, H_p), presumindo que os parâmetros elétricos são lineares, isotrópicos e independentes do tempo, então;

$$E = E_p + E_s, \quad (\text{A.5})$$

$$H = H_p + H_s. \quad (\text{A.6})$$

Substituindo os campos primários nas equações (A.1) e (A.2), obtém-se;

$$\nabla \times E_p = -Z_p H_p \quad (\text{A.7})$$

e

$$\nabla \times H_p = \mathcal{Y}_p E_p + j_e. \quad (\text{A.8})$$

Substituindo (A.5) e (A.6) na equação (A.1), obtém-se;

$$\nabla \times (E_p + E_s) = -Z(H_p + H_s).$$

$$\nabla \times E_p + \nabla \times E_s = -ZH_s - ZH_p \quad (\text{A.9})$$

$$= -ZH_s - \Delta Z H_p - Z_p H_p. \quad (\text{A.10})$$

Onde, $\Delta Z = Z - Z_p$.

Como $\nabla \times E_p + Z_p H_p = 0$ (equação A.7) então;

$$\nabla \times E_s = -Z H_s - \Delta Z H_p. \quad (\text{A.11})$$

Substituindo (A.5) e (A.6) na equação (A.2), obtém-se;

$$\nabla \times (H_p + H_s) = \mathcal{Y}(E_p + E_s) + j_e.$$

$$\nabla \times H_p + \nabla \times H_s = \mathcal{Y}E_s + \mathcal{Y}E_p + j_e \quad (\text{A.12})$$

$$= \mathcal{Y}E_s + \Delta \mathcal{Y}E_p + \mathcal{Y}_p E_p + j_e \quad (\text{A.13})$$

Onde, $\Delta \mathcal{Y} = \mathcal{Y} - \mathcal{Y}_p$.

Utilizando-se da relação (A.8) do campo magnético primário, resulta;

$$\nabla \times H_s = \mathcal{Y}E_s + \Delta \mathcal{Y}E_p. \quad (\text{A.14})$$

Aplicando-se o rotacional na equação (A.11), e considerando a permeabilidade magnética constante em todos os pontos do campo e igual a permeabilidade do ar ($\mu_i = \mu_0$), resultando em $\Delta Z = 0$, obtém-se;

$$\nabla \times \nabla \times E_s = -Z \nabla \times H_s. \quad (\text{A.15})$$

Sabendo-se que,

$$\nabla \times \nabla \times E_s = \nabla(\nabla \cdot E_s) - \nabla^2 E_s,$$

então ;

$$\nabla(\nabla \cdot E_s) - \nabla^2 E_s = -Z \nabla \times H_s. \quad (\text{A.16})$$

Sabendo-se que o divergente do rotacional de uma função é igual a zero ($\nabla \cdot (\nabla \times f) = 0$).

Aplicando-se o divergente na equação (A.14), resulta;

$$\nabla \cdot (\nabla \times H_s) = \nabla \cdot (\mathcal{Y}E_s) + \nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) = 0,$$

logo;

$$\nabla \cdot (\mathcal{Y}E_s) = -\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p).$$

Sabendo-se que,

$$\nabla \cdot (\mathcal{Y}E_s) = \mathcal{Y}\nabla \cdot E_s + E_s \cdot \nabla \mathcal{Y} = -\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p),$$

resulta em,

$$\nabla \cdot E_s = -\frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) - E_s \cdot \frac{\nabla \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}}.$$

Substituindo o resultado acima na equação (A.16), obtém-se;

$$-\nabla \left[\frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) \right] - \nabla \left(E_s \cdot \frac{\nabla \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) - \nabla^2 E_s = -Z\nabla \times H_s. \quad (\text{A.17})$$

Substituindo a equação (A.14) na equação acima, resulta;

$$-\nabla \left(E_s \cdot \frac{\nabla \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) - \nabla^2 E_s + Z\mathcal{Y}E_s = -Z\Delta \mathcal{Y}E_p + \nabla \left[\frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) \right]. \quad (\text{A.18})$$

Sabendo-se que,

$$\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) = \Delta \mathcal{Y}\nabla \cdot E_p + E_p \cdot \nabla (\Delta \mathcal{Y}).$$

Visto que $\nabla \cdot E_p$ é igual a zero dentro do corpo não homogêneo e $\Delta \mathcal{Y}$ é nulo nos pontos fora do corpo, resulta em;

$$\nabla \cdot (\Delta \mathcal{Y}E_p) = E_p \cdot \nabla (\Delta \mathcal{Y}).$$

Então, substitui-se a relação acima na equação (A.18), resultando na equação diferencial do campo elétrico secundário;

$$\nabla^2 E_s + \nabla \left(E_s \cdot \frac{\nabla \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) - Z\mathcal{Y}E_s = Z\Delta \mathcal{Y}E_p - \nabla \left(E_p \cdot \frac{\nabla (\Delta \mathcal{Y})}{\mathcal{Y}} \right). \quad (\text{A.19})$$

Obtém-se da equação (A.14) a seguinte relação;

$$E_s = \frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \times H_s - \frac{(\Delta \mathcal{Y})}{\mathcal{Y}}E_p. \quad (\text{A.20})$$

Substituindo a equação (A.20) na equação (A.11), resulta;

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \times H_s \right) - \nabla \times \left(\frac{(\Delta \mathcal{Y})}{\mathcal{Y}}E_p \right) = -ZH_s. \quad (\text{A.21})$$

Sabe-se que,

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla \times H_s \right) = \nabla \frac{1}{\mathcal{Y}} \times (\nabla \times H_s) + \frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla (\nabla \cdot H_s) - \frac{1}{\mathcal{Y}}\nabla^2 H_s,$$

e

$$\nabla \times \left(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} E_p \right) = \nabla \left(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) \times E_p + \frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \nabla \times E_p.$$

Substituindo-se as relações acima na equação (A.21), resulta;

$$\nabla \left(\frac{1}{\mathcal{Y}} \right) \times (\nabla \times H_s) + \frac{1}{\mathcal{Y}} \nabla (\nabla \cdot H_s) - \frac{1}{\mathcal{Y}} \nabla^2 H_s - \nabla \left(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) \times E_p - \frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \nabla \times E_p = -Z H_s. \quad (\text{A.22})$$

Aplicando-se o divergente na equação (A.11), sabendo-se que $\nabla \cdot (\nabla \times E_s) = 0$, então;

$$\nabla \cdot H_s = 0.$$

Substituindo-se o resultado acima na equação (A.22) e separando os campos secundários no lado esquerdo da equação e o primário para o lado direito, obtém-se;

$$\nabla \left(\frac{1}{\mathcal{Y}} \right) \times (\nabla \times H_s) - \frac{1}{\mathcal{Y}} \nabla^2 H_s + Z H_s = \frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \nabla \times E_p + \nabla \left(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) \times E_p. \quad (\text{A.23})$$

Multiplicando a expressão acima por $(-\mathcal{Y})$ e substituindo a relação de $\nabla \times E_p$ (equação A.7), finalmente obtém-se a equação diferencial do campo magnético secundário, dada por;

$$\nabla^2 H_s + \mathcal{Y} \nabla \times H_s \times \nabla \left(\frac{1}{\mathcal{Y}} \right) - Z \mathcal{Y} H_s = Z \Delta \mathcal{Y} H_p - \mathcal{Y} \nabla \left(\frac{\Delta \mathcal{Y}}{\mathcal{Y}} \right) \times E_p. \quad (\text{A.24})$$

APÊNDICE B

MATRIZ DOS COEFICIENTES ASSOCIADA A TEF

Seja uma malha plana retangular formada por quatro elementos retangulares e com nove nós (Figura B.1). Para determinar a matriz dos coeficientes do sistema de equações de cada elemento, é necessário combinar as funções básicas relacionadas a cada nó do elemento. Cada nó é combinado com todos os nós do elemento e vice-versa gerando desta forma matrizes simétricas.

A matriz dos coeficientes do elemento k , é determinada a partir da combinação dos nós 1, 2, 4 e 5 correspondentes a malha (Figura B.1), que na construção da matriz são relacionados ao primeiro, segundo, terceiro e quarto nó respectivamente do elemento, resultando assim;

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & k_{1,3} & k_{1,4} \\ k_{2,1} & k_{2,2} & k_{2,3} & k_{2,4} \\ k_{3,1} & k_{3,2} & k_{3,3} & k_{3,4} \\ k_{4,1} & k_{4,2} & k_{4,3} & k_{4,4} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Onde, \mathbf{K} representa a matriz dos coeficientes do sistema de equações para o elemento k . Inserindo a matriz \mathbf{K} na matriz dos coeficientes do sistema ampliado, que representa todos nós da malha, observando a correspondência dos vértices do elemento k com os nós da malha, resulta;

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & 0 & k_{1,3} & k_{1,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{2,1} & k_{2,2} & 0 & k_{2,3} & k_{2,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{3,1} & k_{3,2} & 0 & k_{3,3} & k_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{4,1} & k_{4,2} & 0 & k_{4,3} & k_{4,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Onde, \mathbf{A} representa a matriz dos coeficientes do sistema total ou ampliado.

A matriz dos coeficientes do elemento x , é determinada a partir da combinação dos nós 2, 3, 5 e 6 correspondentes a malha (Figura B.1), que na construção da matriz são relacionados ao primeiro, segundo, terceiro e quarto nó respectivamente do elemento x , resultando,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

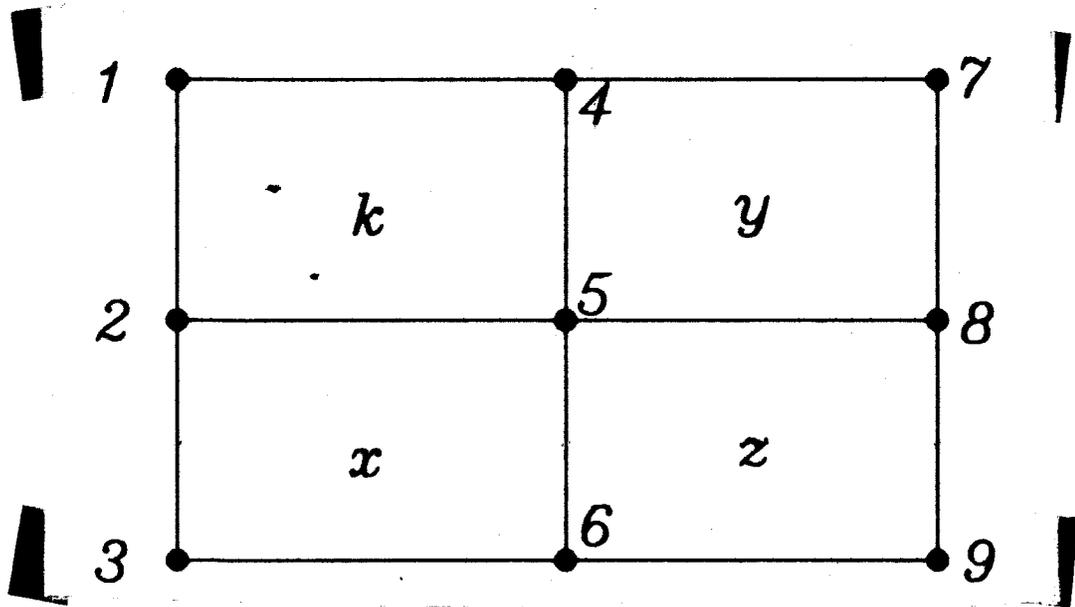


Figura B.1: Malha retangular com quatro elementos retangulares (k, x, y, z).

onde, X representa a matriz dos coeficientes do sistema de equações para o elemento x .

Inserindo a matriz X , na matriz ampliada A e realizando a soma dos valores de X com K nos nós 2 e 5, os quais fazem parte simultaneamente desses dois elementos, então;

$$A = \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & 0 & k_{1,3} & k_{1,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{2,1} & k_{2,2} + x_{1,1} & x_{1,2} & k_{2,3} & k_{2,4} + x_{1,3} & x_{1,4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_{2,1} & x_{2,2} & 0 & x_{2,3} & x_{2,4} & 0 & 0 & 0 \\ k_{3,1} & k_{3,2} & 0 & k_{3,3} & k_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{4,1} & k_{4,2} + x_{3,1} & x_{3,2} & k_{4,3} & k_{4,4} + x_{3,3} & x_{3,4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_{4,1} & x_{4,2} & 0 & x_{4,3} & x_{4,4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (B.4)$$

Realizando as operações para determinar as matrizes dos coeficientes dos elementos y e z e inserindo na matriz dos coeficientes ampliada da malha (segundo as mesmas regras dos elementos k e x , obtém-se;

$$A = \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} & 0 & k_{1,3} & k_{1,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{2,1} & k_{2,2} + x_{1,1} & x_{1,2} & k_{2,3} & k_{2,4} + x_{1,3} & x_{1,4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_{2,1} & x_{2,2} & 0 & x_{2,3} & x_{2,4} & 0 & 0 & 0 \\ k_{3,1} & k_{3,2} & 0 & k_{3,3} + y_{1,1} & k_{3,4} + y_{1,2} & 0 & y_{1,3} & y_{1,4} & 0 \\ k_{4,1} & k_{4,2} + x_{3,1} & x_{3,2} & k_{4,3} + y_{2,1} & k_{4,4} + x_{3,3} + y_{2,2} + z_{1,1} & x_{3,4} + z_{1,2} & y_{2,3} & y_{2,4} + z_{1,3} & z_{1,4} \\ 0 & x_{4,1} & x_{4,2} & 0 & x_{4,3} + z_{2,1} & x_{4,4} + z_{2,2} & 0 & z_{2,3} & z_{2,4} \\ 0 & 0 & 0 & y_{3,1} & y_{3,2} & 0 & y_{3,3} & y_{3,4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & y_{4,1} & y_{4,2} + z_{3,1} & z_{3,2} & y_{4,3} & y_{4,4} + z_{3,3} & z_{3,4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{4,1} & z_{4,2} & 0 & z_{4,3} & z_{4,4} \end{bmatrix}$$

A matriz \mathbf{A} é simétrica, pois todas as matrizes de coeficientes dos elementos são simétricas e os resultados das operações de soma nos elementos da matriz \mathbf{A} são iguais aos seus simétricos. Nesta malha (Figura B.1), por exemplo, devido ao fato do nó de número 1 não fazer parte em um mesmo elemento com o nó de número 9, não há a possibilidade de haver combinação entre eles, resultando em um elemento nulo da matriz ($a_{1,9} = a_{9,1} = 0$). Esse resultado demonstra que a matriz \mathbf{A} é esparsa. Após realizar as operações de soma na matriz \mathbf{A} , é possível representá-la da seguinte forma;

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & a_{1,4} & a_{1,5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & 0 & a_{2,5} & a_{2,6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{2,2} & a_{3,3} & 0 & a_{3,5} & a_{3,6} & 0 & 0 & 0 \\ a_{4,1} & a_{4,2} & 0 & a_{4,4} & a_{4,5} & 0 & a_{4,7} & a_{4,8} & 0 \\ a_{5,1} & a_{5,2} & a_{5,3} & a_{5,4} & a_{5,5} & a_{5,6} & a_{5,7} & a_{5,8} & a_{5,9} \\ 0 & a_{6,2} & a_{6,3} & 0 & a_{6,5} & a_{6,6} & 0 & a_{6,8} & a_{6,9} \\ 0 & 0 & 0 & a_{7,4} & a_{7,5} & 0 & a_{7,7} & a_{7,8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{8,4} & a_{8,5} & a_{8,6} & a_{8,7} & a_{8,8} & a_{8,9} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{9,5} & a_{9,6} & 0 & a_{9,8} & a_{9,9} \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

APÊNDICE C

FUNÇÕES BÁSICAS ASSOCIADAS A TEF

C.1 Funções Básicas para Elementos Triangulares

Em cada elemento da malha é obtida uma aproximação do campo como sendo;

$$\tilde{U}_n(x, z) = \Phi_1(x, z)U_1 + \Phi_2(x, z)U_2 + \Phi_3(x, z)U_3, \quad (\text{C.1})$$

onde, $\tilde{U}_n(x, z)$ representa o campo aproximado em cada elemento, U_i representa o valor do campo nos vértices do elemento e $\Phi_i(x, z)$ representa a função básica do elemento triangular.

A função linear para duas dimensões (Becker et al, 1981) é da forma;

$$U_n(x, z) = a_1 + a_2x + a_3z \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{C.2})$$

onde, a_1, a_2, a_3 são constantes. Essas constantes são determinadas a partir da solução do sistema;

$$\begin{aligned} U_1 &= a_1 + a_2x_1 + a_3z_1 \\ U_2 &= a_1 + a_2x_2 + a_3z_2 \\ U_3 &= a_1 + a_2x_3 + a_3z_3 \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

x_i e z_i são as coordenadas dos vértices de cada elemento.

Solucionando o sistema (C.3), resulta;

$$a_1 = \frac{1}{\Delta} [U_1(x_2z_3 - x_3z_2) + U_2(x_3z_1 - x_1z_3) + U_3(x_1z_2 - x_2z_1)],$$

$$a_2 = \frac{1}{\Delta} [U_1(z_2 - z_3) + U_2(z_3 - z_1) + U_3(z_1 - z_2)],$$

e

$$a_3 = \frac{1}{\Delta} [U_1(x_3 - x_2) + U_2(x_1 - x_3) + U_3(x_2 - x_1)],$$

onde,

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \end{vmatrix}$$

Substituindo-se os valores de a_1, a_2 e a_3 na equação (C.2) resulta,

$$U_n(x, z) = \frac{1}{\Delta} [U_1 \quad U_2 \quad U_3] \begin{bmatrix} (x_2z_3 - x_3z_2) + (z_2 - z_3)x + (x_3 - x_2)z \\ (x_3z_1 - x_1z_3) + (z_3 - z_1)x + (x_1 - x_3)z \\ (x_1z_2 - x_2z_1) + (z_1 - z_2)x + (x_2 - x_1)z \end{bmatrix}. \quad (\text{C.4})$$

Igualando as equações (C.4) e (C.1), resulta;

$$\frac{1}{\Delta} [U_1 \quad U_2 \quad U_3] \begin{bmatrix} (x_2 z_3 - x_3 z_2) + (z_2 - z_3)x + (x_3 - x_2)z \\ (x_3 z_1 - x_1 z_3) + (z_3 - z_1)x + (x_1 - x_3)z \\ (x_1 z_2 - x_2 z_1) + (z_1 - z_2)x + (x_2 - x_1)z \end{bmatrix} = [U_1 \quad U_2 \quad U_3] \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{bmatrix}. \quad (C.5)$$

Sendo assim, as expressões que determinam as funções básicas são;

$$\Phi_1(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_2 z_3 - x_3 z_2) + (z_2 - z_3)x + (x_3 - x_2)z] \quad (C.6)$$

$$\Phi_2(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_3 z_1 - x_1 z_3) + (z_3 - z_1)x + (x_1 - x_3)z] \quad (C.7)$$

$$\Phi_3(x, z) = \frac{1}{\Delta} [(x_1 z_2 - x_2 z_1) + (z_1 - z_2)x + (x_2 - x_1)z] \quad (C.8)$$

C.2 Funções Básicas para Elementos Tetraédricos

Em cada elemento da malha é obtida a solução aproximada do campo, realizando o somatório do produto da função básica pelo valor do campo em cada nó do elemento, ou seja;

$$\tilde{U}_n(x, y, z) = \Phi_1(x, y, z)U_1 + \Phi_2(x, y, z)U_2 + \Phi_3(x, y, z)U_3 + \Phi_4(x, y, z)U_4 \quad (C.9)$$

A função que determina um espaço em três dimensões (Becker et al, 1981) é da forma;

$$U_i(x, y, z) = a_1 + a_2 x + a_3 y + a_4 z \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (C.10)$$

As constantes a_1 , a_2 , a_3 e a_4 são determinadas a partir da solução do sistema;

$$\begin{aligned} U_1 &= a_1 + a_2 x_1 + a_3 y_1 + a_4 z_1 \\ U_2 &= a_1 + a_2 x_2 + a_3 y_2 + a_4 z_2 \\ U_3 &= a_1 + a_2 x_3 + a_3 y_3 + a_4 z_3 \\ U_4 &= a_1 + a_2 x_4 + a_3 y_4 + a_4 z_4 \end{aligned} \quad (C.11)$$

onde, U_i representa o campo em cada nó do elemento, x_i , y_i e z_i são as coordenadas na malha da posição de cada vértices do elemento.

Solucionando o sistema (C.11), resulta;

$$a_1 = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} U_1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ U_2 & x_2 & y_2 & z_2 \\ U_3 & x_3 & y_3 & z_3 \\ U_4 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} \quad a_2 = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} 1 & U_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & U_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & U_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & U_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}$$

$$a_3 = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & U_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & U_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & U_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & U_4 & z_4 \end{vmatrix} \quad a_4 = \frac{1}{V} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & U_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & U_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & U_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & U_4 \end{vmatrix}$$

onde,

$$V = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}.$$

Substituindo os valores correspondentes a a_1 , a_2 , a_3 e a_4 na equação (C.10) e igualando a equação (C.9), obtém-se as funções básicas tridimensionais para o elemento tetraédrico não regular;

$$\Phi_1 = \frac{1}{V} \left(\begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x + \begin{vmatrix} 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y - \begin{vmatrix} 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (C.12)$$

$$\Phi_2 = \frac{1}{V} \left(- \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_3 & y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (C.13)$$

$$\Phi_3 = \frac{1}{V} \left(\begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix} x + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_4 & z_4 \end{vmatrix} y - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_4 & y_4 \end{vmatrix} z \right) \quad (C.14)$$

$$\Phi_4 = \frac{1}{V} \left(- \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & y_1 & z_1 \\ 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} x - \begin{vmatrix} 1 & x_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & z_3 \end{vmatrix} y + \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} z \right). \quad (C.15)$$

APÊNDICE D

MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

D.1 Método Gradiente Conjugado

Seja um sistema da forma $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Considerando-se \mathbf{y}_i uma estimativa da solução deste sistema obtém-se um vetor residual \mathbf{r}_i (Porsani, 1991),

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{y}_i, \quad (\text{D.1})$$

A forma quadrática do resíduo é dada por;

$$\mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_i = (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{y}_i)^T (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{y}_i). \quad (\text{D.2})$$

O sobrescrito (T) significa transposição, \mathbf{r}^T representa a transposta do vetor resíduo.

Considerando-se o relacionamento iterativo definido por;

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + \lambda_{i+1} \mathbf{u}_i, \quad (\text{D.3})$$

onde, λ_{i+1} é um parâmetro a determinar e \mathbf{u}_i representa um vetor auxiliar não nulo que será definido posteriormente. Substituindo-se (D.3) em (D.2) e minimizando $\mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_i$ em relação a λ_{i+1} , obtém-se;

$$\frac{d(\mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_i)}{d\lambda_{i+1}} = 2\mathbf{u}_i^T \mathbf{A}^T \mathbf{r}_i - 2\lambda_{i+1} \mathbf{u}_i^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{u}_i = 0, \quad (\text{D.4})$$

que juntamente com a expressão para o resíduo acumulado ($\mathbf{r}_{i+1}^T \mathbf{r}_{i+1}$) podem ser representados como segue,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_i & -\mathbf{r}_i^T \mathbf{q}_i \\ -\mathbf{q}_i^T \mathbf{r}_i & \mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \lambda_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{i+1}^T \mathbf{r}_{i+1} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{D.5})$$

onde,

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{A} \mathbf{u}_i.$$

Resolvendo (D.4) para λ_{i+1} , resulta,

$$\lambda_{i+1} = \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{r}_i}{E_i}, \quad (\text{D.6})$$

onde,

$$E_i = \mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i. \quad (\text{D.7})$$

De (D.5) e (D.6) obtém-se,

$$\mathbf{r}_{i+1}^T \mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_i - \frac{(\mathbf{q}_i^T \mathbf{r}_i)^2}{E_i} \quad (\text{D.8})$$

Verifica-se que para a convergência do método ser acelerada é necessário que E_i em (D.8) seja mínimo. Então pode-se definir \mathbf{u}_{j+1} como;

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \alpha_{i+1} \mathbf{u}_i. \quad (\text{D.9})$$

Substituindo (D.9) em (D.7) e minimizando E_{i+1} em relação a α_{i+1} , resulta;

$$\frac{dE_{i+1}}{d\alpha_{i+1}} = 2\mathbf{q}_i^T \mathbf{A} \mathbf{r}_{i+1} + 2\alpha_{i+1} \mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i = 0. \quad (\text{D.10})$$

Logo,

$$\alpha_{i+1} = \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{p}_{i+1}}{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i}, \quad (\text{D.11})$$

onde, $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{A} \mathbf{r}_{i+1}$.

Sendo \mathbf{y}_0 a aproximação inicial para solução \mathbf{x} , tem-se que a solução converge após um número de interações menor que o número total de equações do sistema, atingindo-se um resíduo menor do que o admissível (escolhido neste trabalho como sendo 10^{-8}).

D.2 Método Gram-Schmidt

Este método consiste em gerar uma base ortogonal, \mathbf{V} , para representar a matriz \mathbf{A} e determinar uma matriz triangular superior através da projeção da matriz \mathbf{A} em \mathbf{V} , reduzindo o sistema a um sistema triangular superior, o qual pode ser resolvido recursivamente, da última para a primeira equação.

O sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é escritos na forma;

$$[\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{b}, \quad (\text{D.12})$$

onde, os vetores \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, \dots, n$) representam as colunas da matriz \mathbf{A} , n representa o número total de colunas e x_i os elementos do vetor solução \mathbf{x} .

Projetando os vetores coluna (\mathbf{a}_i) em uma base ortogonal \mathbf{v}_i resultam as equações;

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{a}_2 &= \mathbf{v}_2 + \lambda_{1,2}\mathbf{v}_1 \\ \mathbf{a}_3 &= \mathbf{v}_3 + \lambda_{1,3}\mathbf{v}_1 + \lambda_{2,3}\mathbf{v}_2 \\ &\vdots \\ \mathbf{a}_n &= \mathbf{v}_n + \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_{i,n}\mathbf{v}_i, \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

onde, $\lambda_{i,j}$ representam os coeficientes de projeção dos vetores em cada eixo ortogonal. Os valores de $\lambda_{i,j}$ são calculados como segue.

Multiplicando as equações (2.11) por \mathbf{v}_i^T , resulta,

$$\mathbf{v}_1^T \mathbf{a}_2 = \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_2 + \lambda_{1,2} \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1. \quad (\text{D.14})$$

Impondo que $\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = 0$, para $i \neq j$, então;

$$\lambda_{1,2} = \frac{\mathbf{v}_1^T \mathbf{a}_2}{\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1}. \quad (\text{D.15})$$

Generalizando;

$$\lambda_{i,j} = \frac{\mathbf{v}_i^T \mathbf{a}_j}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i}. \quad (\text{D.16})$$

Substituindo em (D.12) os valores de \mathbf{a}_i obtidos com as equações (2.11), resulta,

$$\left[\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 + \lambda_{1,2}\mathbf{v}_1 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_n + \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_{i,n}\mathbf{v}_i \right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{b}, \quad (\text{D.17})$$

que pode ser escrita como segue,

$$\left[\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_n \right] \begin{bmatrix} 1 & \lambda_{1,2} & \cdots & \lambda_{1,n} \\ 0 & 1 & \cdots & \lambda_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \mathbf{b}. \quad (\text{D.18})$$

Utilizando-se da propriedade de ortogonalidade da matriz $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$, $\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = 0$, permitindo multiplicar (D.18) por \mathbf{V}^T resulta,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{v}_n^T \mathbf{v}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \lambda_{1,2} & \cdots & \lambda_{1,n} \\ 0 & 1 & \cdots & \lambda_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \mathbf{b} \\ \mathbf{v}_2^T \mathbf{b} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \mathbf{b} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.19})$$

Multiplicando o sistema (D.19) pela inversa da matriz diagonal, obtém-se;

$$\begin{bmatrix} 1 & \lambda_{1,2} & \cdots & \lambda_{1,n} \\ 0 & 1 & \cdots & \lambda_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \mathbf{b} / \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2^T \mathbf{b} / \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \mathbf{b} / \mathbf{v}_n^T \mathbf{v}_n \end{bmatrix}. \quad (\text{D.20})$$

O sistema (D.20) possui solução fácil e rápida computacionalmente podendo ser resolvido recursivamente da última para primeira equação, da seguinte forma:

$$x_n = \frac{\mathbf{v}_n^T \mathbf{b}}{\mathbf{v}_n^T \mathbf{v}_n} \quad (\text{D.21})$$

e os demais valores do vetor \mathbf{x} ,

$$x_j = \frac{\mathbf{v}_j^T \mathbf{b}}{\mathbf{v}_j^T \mathbf{v}_j} - \sum_{i=j+1}^n \lambda_{j,i} x_i, \quad j = n-1, \dots, 1. \quad (\text{D.22})$$

D.3 Método da Eliminação Gaussiana

Este método consiste em reduzir a matriz dos coeficientes em uma matriz triangular superior, através de sucessivas operações entre as linhas desta matriz (pivotamento). Estas operações também são realizadas no lado direito do sistema, seguindo a mesma ordem das operações realizadas na matriz (Press et al, 1986).

Após a realização das operações nas equações do sistema, obtém-se o sistema triangular;

$$\begin{bmatrix} a'_{1,1} & a'_{1,2} & \cdots & a'_{1,n} \\ 0 & a'_{2,2} & \cdots & a'_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix} \quad (\text{D.23})$$

onde, $a'_{i,j}$ e b'_i são os valores modificados do sistema original. Com a última equação deste novo sistema obtém-se:

$$a_n = \frac{b'_n}{a'_{n,n}}. \quad (\text{D.24})$$

Para determinar os demais valores de \mathbf{a} , utiliza-se a relação a seguir, onde os valores já determinados contribuem para a solução dos demais, tornando a relação geral;

$$a_j = \frac{1}{a'_{j,j}} [b'_j - \sum_{i=j+1}^n a'_{i,j} a_i], \quad j = n-1, \dots, 1. \quad (\text{D.25})$$

D.4 Método da Decomposição LU

Decompondo-se a matriz \mathbf{A} do sistema de equações $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, em um produto entre duas matrizes triangulares (Press et al, 1986).

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}, \quad (\text{D.26})$$

onde, \mathbf{L} representa uma matriz triangular inferior e \mathbf{U} uma matriz triangular superior, ou seja:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{1,2} & l_{2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{n,n} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.27})$$

Em particular, quando $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$ (matriz simétrica) implica em $\mathbf{L}^T = \mathbf{U}$, simplificando a decomposição.

Substituindo-se a decomposição (D.26), no sistema de equações resulta;

$$\mathbf{Ax} = (\mathbf{LU})\mathbf{x} = \mathbf{L}(\mathbf{Ux}) = \mathbf{b}, \quad (\text{D.28})$$

fazendo-se;

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ux}, \quad (\text{D.29})$$

Resolve-se o sistema $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$, que é formado por uma matriz triangular inferior (\mathbf{L}), logo de fácil solução :

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{1,1}}, \quad (\text{D.30})$$

e os demais valores do vetor \mathbf{y} ,

$$y_j = \frac{1}{l_{j,j}} [b_j - \sum_{i=1}^{j-1} l_{i,j} y_i] \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (\text{D.31})$$

Com os valores de \mathbf{y} , substitui-se no sistema (D.29) e obtém-se a solução do sistema geral, com as seguintes relações ;

$$x_n = \frac{y_n}{u_{n,n}}, \quad (\text{D.32})$$

e os demais valores da solução x ,

$$x_j = \frac{1}{u_{j,j}} \left[y_j - \sum_{i=j+1}^n u_{i,j} x_i \right] \quad j = n-1, n-2, \dots, 2, 1. \quad (\text{D.33})$$

ANEXO I

ALGORITMO SDLU

```

SUBROUTINE SDLU(N,NZ,A,H)
C*****
C PROPOSITO: SOLUCIONAR O SISTEMA DE EQUACOES LINEAR COM MATRIZ FATORADA.
C           UTILIZA-SE O METODO DA DECOMPOSICAO LU.
C
C PARAMETROS DE ENTRADA: N : ORDEM DA MATRIZ A
C                       NZ : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS NA MATRIZ A.
C                       A : MATRIZ A SER DECOMPOSTA (SIMETRICA)
C                       H : VETOR DO LADO DIREITO DO SISTEMA (FONTE)
C
C PARAMETROS DE SAIDA:  H : VETOR SOLUCAO
C
C AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
C REAL A(NZ,*),H(*)
C DECOMPOSICAO DA MATRIZ
C DO 40 J=1,N
C   NFI=MIN(N,NZ+J-1)-J+1
C   KJ=NZ-1
C   IF(KJ.GE.J)KJ=J-1
C     DO 10 KK=1,KJ
C       A(1,J)=A(1,J)-A(KK+1,J-KK)**2.
10    CONTINUE
C     A(1,J)=SQRT(A(1,J))
C     DO 30 KI=2,NFI
C       ITF=NZ-KI
C       IF(ITF.GE.J)ITF=J-1
C       DO 20 IT=1,ITF
C         A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
20    CONTINUE
C     A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
30    CONTINUE
40  CONTINUE
C SOLUCAO DE H
C DO 60 I=1,N
C   INI=MAX(1,I+1-NZ)
C   KI=I-INI+1
C   DO 50 J=INI,I-1
C     H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
C     KI=KI-1
50  CONTINUE
C   H(I)=H(I)/A(1,I)
60  CONTINUE
C DO 80 J=N,1,-1
C   NFI=MIN(N,NZ+J-1)
C   DO 70 I=J+1,NFI
C     KI=I-J+1
C     H(J)=H(J)-A(KI,J)*H(I)
70  CONTINUE
C   H(J)=H(J)/A(1,J)

```

80

CONTINUE
RETURN
END

ANEXO II

. ALGORITMO SAPDLU

```

DEFINE SAPDLU(NZ,N)
*****
" PROPOSITO: SOLUCIONAR SISTEMA DE EQUACOES LINEARES SPARSO (COM MATRIZ
"   COEFICIENTES FATORADA) UTILIZANDO A DECOMPOSICAO LU.
"   OBS: ALGORITMO EM LINGUAGEM VFC E AS AS ROTINAS UTILIZADAS
"   SAO DO "ARRAY-PROCESSOR" (AP) DO SISTEMA DISCO-VAX 11/785.
"   PARA INICIALIZAR EM AP E NECESSARIO UTILIZAR O ALGORITMO
"   SCHPDLU EM LINGUAGEM FORTRAN-77 RELACIONADO ABAIXO.
"
"   PARAMETROS DE ENTRADA: NZ : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS DA MATRIZ.
"   N : NUMERO TOTAL DE COLUNAS DA MATRIZ.
"
"   PARAMETRO DE SAIDA: VETOR SOLUCAO EM AP.
"
"   AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
*****
LOCAL INC,NLS1,INI,NUM,J,KI,NS,ITF,NFI1,INI1,INI2,II1,II2,II3,II4
LOCAL A,B,D,W,U,Y,Z,Q,X,H,G,F,NFI,J1,J2,NTESW,KI1,KI2,NFI2,II6
LOCAL TESW,TESZ,IG,IG1
NA1=N*NZ
NA2=NA1+N
INC=NZ-1
J=0
A:   J=J+1
      II1=J-1
      NLS1=II1*NZ
      INI=J-1
      NUM=J-1
      CALL SVESQ(INI,INC,NA2,NUM)
      CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
      CALL VSQRT(NLS1,1,NLS1,1,1)
      II6=NZ
      KI=1
B:   KI=KI+1
      II2=II1*NZ
      II3=KI-1
      NS=II2+II3
      ITF=NZ-KI
      IF J > ITF GOTO Y
      ITF=J-1
Y:   II4=II1-ITF
      NFI1=II4*NZ
      INI1=NFI1+ITF
      II2=NFI1+KI
      II3=ITF-1
      INI2=II2+II3
      CALL DOTPR(INI1,INC,INI2,INC,NA2,ITF)
      CALL VSUB(NA2,1,NS,1,NS,1,1)
      CALL VDIV(NLS1,1,NS,1,NS,1,1)
IF KI < II6 GOTO B

```

```

IF J < NZ GOTO A
"
NUM=NZ-1
NTESW=N
J1=NZ
W: J1=J1+1
   II1=J1-1
   NLS1=II1*NZ
   II2=J1-NZ
   II3=II2+1
   II4=II3*NZ
   INI=II4-1
   CALL SVESQ(INI,INC,NA2,NUM)
   CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
   CALL VSQRT(NLS1,1,NLS1,1,1)
   NFI=NZ
   KI1=1
   II2=NZ-1
   II6=N-II2
   IF II6 > J1 GOTO Z
   III=J1-1
   NFI=N-III
   II6=1
   IF II6 = NFI GOTO Q
Z:   KI1=KI1+1
     II2=KI1-1
     II3=II1*NZ
     NS=II3+II2
     ITF=NZ-KI1
     II4=II1-ITF
     NFI1=II4*NZ
     INI1=NFI1+ITF
     II2=NFI1+KI1
     II3=ITF-1
     INI2=II2+II3
     CALL DOTPR(INI1,INC,INI2,INC,NA2,ITF)
     CALL VSUB(NA2,1,NS,1,NS,1,1)
     CALL VDIV(NLS1,1,NS,1,NS,1,1)
   IF KI1 < NFI GOTO Z
Q:   IF J1 < NTESW GOTO W
"
   INC=NZ-1
   INI2=NA1
   IG=0
X:   IG=IG+1
     III=IG-1
     NS=III*NZ
     NLS1=NA1+III
     INI1=IG-1
     NUM=IG-1
     CALL DOTPR(INI1,INC,INI2,1,NA2,NUM)
     CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
     CALL VDIV(NS,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
     IF IG < NZ GOTO X
"
   NUM=NZ-1
   IG1=NZ

```

```

H:          IG1=IG1+1
           III1=IG1-1
           NS=III1*NZ
           NLS1=NA1+III1
           II2=IG1-NZ
           II3=II2+1
           II4=II3*NZ
           INI1=II4-1
           INI2=NA1+II2
           CALL DOTPR(INI1,INC,INI2,1,NA2,NUM)
           CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
           CALL VDIV(NS,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
IF IG1 < N GOTO H
CALL VCLR(NA2,1,1)
"
           II3=N-NZ
           TESW=II3+1
           J=N+1
G:          J=J-1
           II4=J
           III1=J-1
           NS=III1*NZ
           NLS1=NA1+III1
           II2=III1*NZ
           INI1=II2+1
           INI2=NA1+J
           NUM=N-J
           CALL DOTPR(INI1,1,INI2,1,NA2,NUM)
           CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
           CALL VDIV(NS,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
           IF II4 > TESW GOTO G
"
           NUM=NZ-1
           TESZ=1
           J2=TESW
F:          J2=J2-1
           II4=J2
           III1=J2-1
           NS=III1*NZ
           NLS1=NA1+III1
           II2=III1*NZ
           INI1=II2+1
           INI2=NA1+J2
           CALL DOTPR(INI1,1,INI2,1,NA2,NUM)
           CALL VSUB(NA2,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
           CALL VDIV(NS,1,NLS1,1,NLS1,1,1)
           IF II4 > TESZ GOTO F
END

```

SUBROUTINE SCHAPDLU(N,NZ,X,H)

C*****

C PROPOSITO: ABRIR E FECHAR OS ARQUIVO EM AP, ACESSANDO SAPDLU.

C

C PARAMETROS DE ENTRADA: N : ORDEM DA MATRIZ A

C

NZ : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS NA MATRIZ A.

C

X : MATRIZ DECOMPOSTA (SIMETRICA)

C

H : VETOR DA DIREITA (FONTE)

C

```
C      PARAMETROS DE SAIDA:  H  : VETOR SOLUCAO
C
C      AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
      REAL X(NZ,*),H(N)
C      ABERTURA DO ARRAY PROC.
      NA1=NZ*N
      NA2=NA1+N
      CALL APINIT(2,0,I)
      CALL APPUT(X,0,NA1,2)
      CALL APPUT(H,NA1,N,2)
      CALL APWD
      CALL SAPDLU(NZ,N)
C      RETORNO DOS VALORES DO ARRAY PROC.
      CALL APWR
      CALL APGET(H,NA1,N,2)
      CALL APWD
      RETURN
      END
```

ANEXO III

ALGORITMO CCMF

```

SUBROUTINE CCMF(NTY,NO,INODES,K,JINF,ADC,FON,AA,FE)
C*****
C      PROPOSITO: CONSTRUCAO DA MATRIZ DOS COEFICIENTES E DO VETOR FONTE
C      DE UM SISTEMA GERADO PELA TECNICA DOS ELEMENTOS FINITOS.
C      A MATRIZ RESULTANTE E DA FORMA FATORADA E REDUZIDA.
C
C      PARAMETROS DE ENTRADA : NTY      : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS
C                               NO       : NUMERO DE VERTICE EM DOS ELEMENTO
C                               INODES   : VETOR NUMERO DO NO NA MALHA ( NO )
C                               K        : MATRIZ DOS NOS NO ELEMENTO ( NO , NO )
C                               JINF    : VETOR DOS INDICES DOS NOS INTERNOS
C                               ADC     : VETOR CONDICoes DE FRONTEIRAS
C                               FON     : VETOR DO CAMPO NOS VERTICES.
C
C      PARAMETROS DE SAIDA : AA      : MATRIZ REDUZIDA E FATORADA
C                               FE     : VETOR DA DIREITA REDUZIDO
C
C      AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
      COMPLEX FON(*),FE(*)
      COMPLEX K(NO,*),AA(NTY,*),ADC(*),AUX
      INTEGER INODES(NO),JINF(*)
      DO 30 I=1,NO
      IG=INODES(I)
      IF(JINF(IG).EQ.0)GOTO 30
      IGI1=JINF(IG)
      FE(IGI1)=FE(IGI1)+FON(I)
      DO 20 J=1,NO
      AUX=K(I,J)
      IF(AUX.EQ.CMPLX(0.,0.))GOTO 20
      JG=INODES(J)
      IF(JINF(JG).EQ.0)GOTO 10
      IF(IG.LT.JG)GOTO 20
      JGJ=JINF(JG)
      IGI=IGI1-JGJ+1
      AA(IGI,JGJ)=AA(IGI,JGJ)+AUX
      GOTO 20
10  FE(IGI1)=FE(IGI1)-ADC(JG)*AUX
20  CONTINUE
30  CONTINUE
      RETURN
      END

```

ANEXO IV

. ALGORITMO CDLUR

```

SUBROUTINE CDLUR(N,NZ,A,H)
C*****
C   PROPOSITO: RESOLVER O SISTEMA REDUZIDO GERADO PELA TEF, UTILIZANDO A
C             DECOMPOSICAO LU.
C
C   PARAMETROS DE ENTRADA: N   : ORDEM DA MATRIZ A
C                           NZ  : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS NA MATRIZ A.
C                           A   : MATRIZ A SER DECOMPOSTA (FATORADA,REDUZIDA)
C                           H   : VETOR LADO DIREITO (FONTE)
C
C   PARAMETROS DE SAIDA:  H   : VETOR SOLUCAO
C
C   AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
C   COMPLEX A(NZ,*),H(N)
C   DECOMPOSICAO DE A
C   DO 40 J=1,N
C     NFI=MIN(N,NZ+J-1)-J+1
C     KJ=NZ-1
C     IF(KJ.GE.J)KJ=J-1
C       DO 10 KK=1,KJ
C         KK1=KK+1
C         JKK=J-KK
C         A(1,J)=A(1,J)-A(KK1,JKK)*A(KK1,JKK)
10      CONTINUE
C       A(1,J)=SQRT(A(1,J))
C       DO 30 KI=2,NFI
C         ITF=NZ-KI
C         IF(ITF.GE.J)ITF=J-1
C         DO 20 IT=1,ITF
C           A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
20      CONTINUE
C       A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
30      CONTINUE
40      CONTINUE
C   CALCULO DE H
C   DO 60 I=1,N
C     INI=MAX(1,I+1-NZ)
C     KI=I-INI+1
C     DO 50 J=INI,I-1
C       H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
C     KI=KI-1
50      CONTINUE
C     H(I)=H(I)/A(1,I)
60      CONTINUE
C     DO 80 J=N,1,-1
C       NFI=MIN(N,NZ+J-1)
C       DO 70 I=J+1,NFI
C         KI=I-J+1
C         H(J)=H(J)-A(KI,J)*H(I)
70      CONTINUE

```

80

```
H(J)=H(J)/A(1,J)
CONTINUE
RETURN
END
```

ANEXO V

ALGORITMO CDLURZ2D

```

SUBROUTINE CDLURZ2D(N,NZ,A,H)
C*****
C PROPOSITO: SOLUCIONA O SISTEMA GERADO PELA TEF 2D, UTILIZANDO A DLU,
C COM VANTAGEM DE NAO OPERAR COM ELEMENTOS NULOS DA MATRIZ.
C
C PARAMETROS DE ENTRADA: N : ORDEM DA MATRIZ A
C NZ : NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS NA MATRIZ A.
C A : MATRIZ A SER DECOMPOSTA (FATORADA,REDUZIDA)
C H : VETOR DO LADO DIREITO (FONTE)
C
C PARAMETROS DE SAIDA:H : VETOR SOLUCAO
C
C AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
C COMPLEX A(NZ,*),H(N)
C DECOMPOSICAO DE A
DO 20 J=1,NZ-3
A(1,J)=SQRT(A(1,J)-A(2,J-1)*A(2,J-1))
A(2,J)=(A(2,J)-A(2,J-1)*A(3,J-1))/A(1,J)
DO 10 KI=NZ-J,NZ-1
A(KI,J)=(A(KI,J)-A(2,J-1)*A(KI+1,J-1))/A(1,J)
10 CONTINUE
A(NZ,J)=A(NZ,J)/A(1,J)
20 CONTINUE
J=NZ-2
A(1,J)=SQRT(A(1,J)-A(2,J-1)*A(2,J-1))
DO 30 KI=2,NZ-1
A(KI,J)=(A(KI,J)-A(2,J-1)*A(KI+1,J-1))/A(1,J)
30 CONTINUE
A(NZ,J)=A(NZ,J)/A(1,J)
DO 70 J=NZ-1,N-NZ+1
DO 40 KK=1,NZ-1
A(1,J)=A(1,J)-A(KK+1,J-KK)*A(KK+1,J-KK)
40 CONTINUE
A(1,J)=SQRT(A(1,J))
DO 60 KI=2,NZ
DO 50 IT=1,NZ-KI
A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
50 CONTINUE
A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
60 CONTINUE
70 CONTINUE
C
DO 110 J=N-NZ+2,N
DO 80 KK=1,NZ-1
A(1,J)=A(1,J)-A(KK+1,J-KK)*A(KK+1,J-KK)
80 CONTINUE
A(1,J)=SQRT(A(1,J))
DO 100 KI=2,N-J+1
DO 90 IT=1,NZ-KI
A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)

```

```

90          CONTINUE
          A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
100         CONTINUE
110        CONTINUE
C          CALCULO DE H
          DO 120 I=1,NZ-2
          H(I)=(H(I)-A(2,I-1)*H(I-1))/A(1,I)
120        CONTINUE
          DO 140 I=NZ-1,N
          INI=MAX(1,I+1-NZ)
            KI=I-INI+1
            DO 130 J=INI,I-1
            H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
            KI=KI-1
130          CONTINUE
          H(I)=H(I)/A(1,I)
140        CONTINUE
          DO 160 J=N,NZ-3,-1
            NFI=MIN(N,NZ+J-1)
            DO 150 I=J+1,NFI
            KI=I-J+1
            H(J)=H(J)-A(KI,J)*H(I)
150          CONTINUE
          H(J)=H(J)/A(1,J)
160        CONTINUE
          DO 180 J=NZ-4,1,-1
            KI=J+1
            H(J)=H(J)-A(2,J)*H(KI)
            DO 170 I=NZ-J,NZ
            KI=I+J-1
            H(J)=H(J)-A(I,J)*H(KI)
170          CONTINUE
          H(J)=H(J)/A(1,J)
180        CONTINUE
          RETURN
          END

```

ANEXO VI

ALGORITMO CDLURZ3D

```

SUBROUTINE CDLURZ3D(N,NZ,A,H)
C*****
C   PROPOSITO: SOLUCIONA O SISTEMA GERADO PELA TEF 3D, UTILIZANDO A DLU,
C             COM VANTAGEM DE NAO OPERAR COM OS ELEMENTOS NULOS DA MATRIZ.
C
C   PARAMETROS DE ENTRADA: N : ORDEM DA MATRIZ A
C                          NZ: NUMERO DE DIAGONAIS NAO NULAS NA MATRIZ A.
C                          A : MATRIZ A SER DECOMPOSTA (FATORADA E REDUZIDA)
C                          H : VETOR DO LADO DIREITO ( FONTE )
C
C   PARAMETROS DE SAIDA:  H : VETOR SOLUCAO
C
C   AUTOR: LURIMAR SMERA BATISTA
C*****
C   COMPLEX A(NZ,*),H(*)
C   DECOMPOSICAO DA MATRIZ
DO 60 J=1,NZ-2*NTY+1
  KJ=J
    DO 10 I=2,MIN(J,NTY)
      KJ=KJ-1
      A(1,J)=A(1,J)-A(I,KJ)*A(I,KJ)
10    CONTINUE
      A(1,J)=SQRT(A(1,J))
      DO 30 KI=2,NTY
        DO 20 IT=1,MIN(J-1,NTY-KI)
          A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
20        CONTINUE
          A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
30        CONTINUE
          DO 50 KI=NZ-NTY-J+2,NZ
            DO 40 IT=1,MIN(J-1,NZ-KI)
              A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
40            CONTINUE
              A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
50            CONTINUE
60        CONTINUE
      DO 100 J=NZ-2*NTY+2,NZ-NTY
        KJ=J-NTY
          DO 70 I=NTY,2,-1
            KJ=KJ+1
            A(1,J)=A(1,J)-A(I,KJ)*A(I,KJ)
70          CONTINUE
            A(1,J)=SQRT(A(1,J))
            DO 90 KI=2,NZ
              DO 80 IT=1,MIN(J-1,NZ-KI)
                A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
80              CONTINUE
                A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
90              CONTINUE
100         CONTINUE
          DO 140 J=NZ-NTY+1,N-NZ+1

```

```

KJ=J
DO 110 KK=1,MIN(NZ-1,J-1)
KJ=KJ-1~
A(1,J)=A(1,J)-A(KK+1,KJ)*A(KK+1,KJ)
110 CONTINUE
A(1,J)=SQRT(A(1,J))
DO 130 KI=2,NZ
DO 120 IT=1,MIN(NZ-KI,J-1)
A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
120 CONTINUE
A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
130 CONTINUE
140 CONTINUE
DO 180 J=N-NZ+2,N
KJ=J
DO 150 KK=1,NZ-1
KJ=KJ-1
A(1,J)=A(1,J)-A(KK+1,KJ)*A(KK+1,KJ)
150 CONTINUE
A(1,J)=SQRT(A(1,J))
DO 170 KI=2,N-J+1
DO 160 IT=1,NZ-KI
A(KI,J)=A(KI,J)-A(IT+1,J-IT)*A(KI+IT,J-IT)
160 CONTINUE
A(KI,J)=A(KI,J)/A(1,J)
170 CONTINUE
180 CONTINUE
C SOLUCAO DE H
DO 200 I=1,NTY
KI=I
DO 190 J=1,I-1
H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
KI=KI-1
190 CONTINUE
H(I)=H(I)/A(1,I)
200 CONTINUE
DO 220 I=NTY+1,NZ-NTY
J=I-NTY+1
DO 210 KI=NTY,2,-1
H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
J=J+1
210 CONTINUE
H(I)=H(I)/A(1,I)
220 CONTINUE
DO 240 I=NZ-NTY+1,N
INI=MAX(1,I+1-NZ)
KI=I-INI+1
DO 230 J=INI,I-1
H(I)=H(I)-A(KI,J)*H(J)
KI=KI-1
230 CONTINUE
H(I)=H(I)/A(1,I)
240 CONTINUE
DO 260 J=N,NZ-2*NTY+1,-1
NFI=MIN(N,NZ+J-1)
DO 250 I=J+1,NFI
KI=I-J+1
H(J)=H(J)-A(KI,J)*H(I)

```

```
250      CONTINUE
      H(J)=H(J)/A(1,J)
260      CONTINUE
      DO 290 J=NZ-2*NTY,1,-1
          DO 270 I=1,NTY
              KI=I+J-1
              H(J)=H(J)-A(I,J)*H(KI)
270          CONTINUE
          NAU=NZ-NTY-J+2
          DO 280 I=NAU,NZ
              KI=I+J-1
              H(J)=H(J)-A(I,J)*H(KI)
280          CONTINUE
      H(J)=H(J)/A(1,J)
290      CONTINUE
      RETURN
      END
```