

WIL SCHILDERS  
Eindhoven University of Technology,  
Department of Mathematics and  
Computer Science,  
Eindhoven, The Netherlands &  
past president of EU-MATHS-IN  
(2016-2020)  
[w.h.a.schilders@tue.nl](mailto:w.h.a.schilders@tue.nl)

## NOVOS PROBLEMAS MATEMÁTICOS INSPIRADOS POR DESAFIOS INDUSTRIAIS

A matemática tem tido um papel essencial na inovação da indústria e da ciência. Em muitos países, foram publicados inúmeros livros com casos de sucesso de aplicações matemáticas na indústria, relatórios de fontes independentes demonstraram o elevado valor económico da matemática, e os “Study Groups in Industry<sup>1</sup>” encontram-se disseminados pelo mundo. Alguns afirmam que estes sucessos se baseiam em técnicas matemáticas existentes. Neste artigo, mostraremos que o contrário é igualmente verdadeiro: estes desafios industriais e sociais conduzem a novos problemas em matemática, e por vezes até a domínios de investigação completamente novos na matemática.

Em 1980, recebi o meu doutoramento do Trinity College Dublin, tendo trabalhado em métodos numéricos uniformes para problemas singularmente perturbados. Apesar de, durante os meus estudos em Nijmegen, ter apreciado sobretudo o lado mais puro da matemática, principalmente nas áreas de análise e teoria dos números, no final dos meus estudos decidi apostar na análise numérica, pois queria ter uma certa “perceção real” do que estava a fazer. Queria ver os resultados da matemática em situações práticas. Quando comecei a trabalhar no Grupo de Software Matemático da Philips, a investigação que desenvolvi no meu doutoramento teve aplicação imediata. Acontece que as equações no modelo de difusão com deriva para dispositivos semicondutores são singularmente perturbadas, tendo sido Peter Markowich [1] o primeiro a prová-lo. Surpreendentemente, porém, a comunidade de simulação de dispositivos semicondutores já utilizava o chamado esquema Scharfetter-Gummel no processo de discretização, que era um esquema inspirado em considerações físicas. Descobrimos nessa altura, que este esquema era exatamente o mesmo que o



<sup>1</sup><http://miis.maths.ox.ac.uk/how/>

esquema *ll'in* para equações diferenciais singularmente perturbadas e que, por pura coincidência, ambos os esquemas tinham sido publicados em 1969 [2,3]. Uma análise mais detalhada revelou que, de facto, os princípios físicos subjacentes ao método de Scharfetter-Gummel são exatamente os mesmos dos argumentos matemáticos utilizados na derivação do esquema de *ll'in*, ao utilizar o método da média harmónica [4]. Este foi o ponto de partida de muitas outras descobertas para este problema muito desafiante, importante para a indústria eletrónica. Desenvolvemos um método para resolver os sistemas de equações discretas fortemente não lineares, através da introdução de transformações não lineares de variáveis. Foi a primeira vez que, dentro do conhecido método de Newton, foram utilizadas diferentes variáveis para a solução de problemas lineares e não-lineares. Este método, a que chamamos "transformação de correção" [4] aplica-se a problemas gerais. Também desenvolvemos várias versões de um método denominado "solução de subconjunto" [5], cuja aplicação também não se limita à simulação em dispositivos semicondutores.

Trabalhar em ambiente industrial, e trabalhar em problemas desafiantes que estão na vanguarda da indústria eletrónica, foi uma grande experiência. Colaborámos com investigadores da IBM, da AT&T Bell Labs e da Universidade de Stanford, e participámos em conferências sobre simulação de dispositivos semicondutores que se fundiram no início dos anos 80 (NASECODE, SISDEP, SISPAD). Sentimo-nos então privilegiados, por termos

tido acesso a três consultores matemáticos de renome (Profs Van der Sluis, Van der Vorst e Hemker) que nos visitavam de duas em duas semanas durante um dia inteiro. Discutimos em profundidade os desafios e as possíveis soluções. Este trabalho conduziu-nos a muitas novas ideias e métodos e, como éramos todos matemáticos, conduziu também a métodos que são geralmente aplicáveis. Foi particularmente satisfatório descobrir a aplicabilidade geral dos métodos. Um dos exemplos mais gratificantes, na minha opinião pessoal, é a técnica de decomposição para matrizes indefinidas. Este trabalho começou com um problema que surgiu na solução numérica de sistemas de simulação de circuitos eletrónicos. Os programadores de software fizeram-nos notar que precisavam sistematicamente de utilizar o pivot, e que muitas vezes os processos de solução falhavam. Quando analisámos o problema, surgiu a ideia de fazer uso do facto de que existem dois tipos de variáveis: correntes e tensões. Isto despoletou a ideia de que talvez 2 x 2 pivots devessem ser utilizados! Foi o ponto de partida de muitas discussões interessantes, da solução do problema colocado pelos engenheiros de software, e um método inteiramente novo e geral de decomposição de uma matriz indefinida. Sinto-me honrado por os investigadores de Oxford terem nomeado esta abordagem como o método de fatorização de Schilders. Estabelecemos uma colaboração muito agradável e profícua com Andy Wathen e a sua equipa, com várias publicações em revistas [6,7]. Assim, um problema prático acabou por conduzir

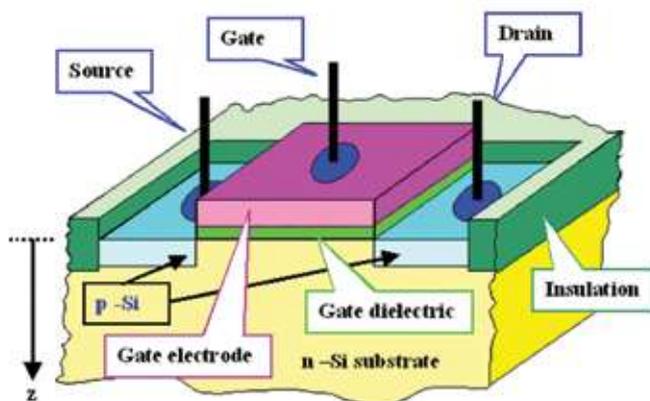


Figura 1. Esquema do dispositivo semicondutor de óxido de metal.

a uma nova forma de resolver sistemas lineares indefinidos. Tais sistemas são encontrados em muitas situações práticas, e por isso o método desenvolvido é de grande utilidade.

Tivemos também uma colaboração muito interessante durante vários anos com Franco Brezzi, Donatella Marini, Peter Markowich e Paola Pietra por volta de 1990. Na primeira conferência do ICIAM [8] em Paris (1987) organizámos um mini-simpósio sobre métodos numéricos para a simulação de dispositivos semicondutores. No final da minha conferência, Franco Brezzi levantou-se e perguntou: "Alguma vez pensou em utilizar elementos finitos mistos (MFEM) para o problema dos dispositivos semicondutores"? Eu respondi que não, pois estávamos sempre a utilizar o método de volumes finitos. Na pausa para café a seguir a esta apresentação, continuámos a discutir a utilização do MFEM. Mais uma vez, este foi um período dinâmico, onde durante vários anos tivemos reuniões e discussões sobre os detalhes do método dos elementos finitos mistos. Na Philips, introduzimos regras de quadratura para estabilizar os sistemas MFEM [9], enquanto Brezzi e a sua equipa se concentraram em novas famílias de elementos Raviart-Thomas [10] necessários para resolver os problemas de estabilidade para problemas com um termo de ordem zero dependente da solução. Mais uma vez, um problema prático levou a uma nova área de estudo na matemática muito estimulante.

O relato precedente é baseado em experiências na primeira pessoa, mas mostra que trabalhar em desafios industriais pode levar a novos métodos matemáticos que são geralmente aplicáveis. Um pré-requisito é, evidentemente, que os investigadores que trabalham nos desafios estejam dispostos a abordar possíveis generalizações. A indústria está principalmente interessada em resolver os problemas imediatos, e não tanto em criar novos métodos e teorias matemáticas. No entanto, na minha opinião, a indústria deveria permitir investigações matemáticas profundas. Comparo a resolução de problemas matemáticos na indústria com a visita de um paciente a um médico com queixas de dores de cabeça diárias. Um médico dirá ao paciente para tomar analgésicos todos os dias, esperando assim que o problema (bem como o paciente) desapareçam instantaneamente. No entanto, outro médico, sentar-se-á e começará a falar com o paciente, tentando descobrir o que causa as dores de cabeça. Uma vez que fique claro de onde vem o problema, o médico sabe o que fazer. A prática industrial é muito semelhante. Já vi muitos engenheiros afirmarem ter resolvido um problema in-

dustrial, não estando conscientes da causa dos problemas. E, de facto, são os próprios que nos abordam alguns meses mais tarde, admitindo que a solução não funcionou noutros casos. É essencial que se encontre a causa dos problemas, antes de se pensar em soluções. Os matemáticos que trabalham na indústria devem convencer os parceiros industriais de que este é o único caminho a seguir com sucesso. Esta forma de trabalhar pode ser mais morosa, mas é muito mais eficaz no longo e no médio prazo.

Nos muitos anos em que trabalhei com a indústria, e como presidente da ECMI (2010-2011 [11]) e da EU-MATHS-IN (2016-2020; [12]), tenho testemunhado muitos outros casos em que os métodos matemáticos foram desenvolvidos como resultado de desafios na indústria. Trabalhar na área da "matemática para a indústria" é absolutamente bidirecional: os métodos matemáticos são aplicados a problemas industriais, mas também novos desenvolvimentos matemáticos emergem de tais desafios. Uma área em que tal tem sido muito visível é em modelos de redução de ordem (MOR). A indústria eletrónica tem sido instrumental no seu desenvolvimento, uma vez que a maioria destes problemas tem origem na simulação de circuitos eletrónicos e na eletro-magnetização. Roland Freund e Peter Feldmann, então (1994) a trabalhar na AT&T Bell Labs, desenvolveram o método de Pade-via-Lanczos (PVL) como um substituto estável para a avaliação de forma de onda assintótica (AWE) que foi desenvolvido na indústria eletrónica. A PVL estimulou muitos investigadores, e novos métodos MOR foram desenvolvidos desde então, por exemplo, o PRIMA e o SPRIM, muitos destes abordando problemas práticos específicos.

Nos últimos anos, novos desafios tiveram origem noutros setores industriais e conduziram a áreas de investigação florescentes e dinâmicas [13] com muitos novos métodos matemáticos propostos. Por vezes, o debate consiste na troca de argumentos sobre se a inovação em matemática é um resultado direto dos desafios industriais, ou se esses desenvolvimentos acabariam por surgir na matemática independentemente do desafio proposto pela indústria. É o caso, por exemplo, da área dos métodos de base reduzida (RB), visando o MOR para problemas parametrizados. Na minha opinião, este desenvolvimento tem sido estimulado, de uma forma ou de outra, pelos desafios industriais e pelo enorme interesse resultante na área dos MOR.

Foi em virtude da experiência aqui relatada que desenvolvi, juntamente com o meu colega da Bergische

Universität Wuppertal, Prof. Michael Günther, a ideia de um livro sobre o tema "Novel mathematical methods inspired by industrial challenges" [14]. Ambos temos trabalhado com a indústria já há várias décadas, temos testemunhado muitas ocasiões em que novos métodos matemáticos, e por vezes também campos inteiramente novos dentro da matemática, surgiram como resultado do trabalho sobre desafios industriais. Convidámos alguns colegas a escrever capítulos sobre temas que pensamos serem ilustrativos do conceito desenvolvido no livro.

Um dos capítulos é sobre a análise de dados topológicos (TDA), um campo relativamente novo. Citando a Wikipedia: "A análise de dados topológicos é uma abordagem à análise de conjuntos de dados utilizando técnicas da topologia. A extração de informação de conjuntos de dados que são de alta dimensão, incompletos e ruidosos é geralmente um desafio. A TDA fornece um quadro geral para analisar tais dados de uma forma que não depende da métrica particular escolhida e proporciona redução de dimensionalidade e robustez ao ruído. Além disso, herda a *funtorialidade*, um conceito fundamental da matemática moderna, da sua natureza topológica, o que lhe permite adaptar-se a novas ferramentas matemáticas". O TDA foi inspirado por desafios industriais, mas é hoje uma área de investigação muito ativa dentro da matemática. O livro contém também capítulos sobre modelos de redução de ordem de análise de Kringing, tendo esta última origem na indústria mineira. Também a matemática fundamental se alia a desafios práticos, como se pode ver no resumo do capítulo de Verhulst e Kirrilov:

*Four classical systems, the Kelvin gyrostat, the Maclaurin spheroids, the Brouwer rotating saddle, and the Ziegler pendulum have directly inspired development of the theory of Pontryagin and Krein spaces with indefinite metric and singularity theory as independent mathematical topics, not to mention stability theory and nonlinear dynamics. From industrial applications in shipbuilding, turbomachinery, and artillery to fundamental problems of astrophysics, such as asteroseismology and gravitational radiation – that is the range of phenomena involving the Krein collision of eigenvalues, dissipation-induced instabilities, and spectral and geometric singularities on the neutral stability surfaces, such as the famous Whitney's umbrella.*

O livro será publicado algures no primeiro semestre de 2021, na série Springer ECMI [8].

Concluindo, podemos dizer que "a matemática para a indústria" ou, ainda mais amplamente, a "matemática aplicada", é muito mais do que apenas aplicar os métodos matemáticos existentes aos problemas industriais. Em muitos casos, a aplicação dos métodos existentes não conduz à solução desejada, e por isso é necessário desenvolver adaptações dos métodos existentes ou mesmo desenvolver métodos inteiramente novos, a fim de enfrentar eficazmente o desafio industrial. Em alguns casos, isto levou a campos inteiramente novos dentro da matemática. A interação entre a matemática e a indústria é, portanto, benéfica para ambas. A indústria ganha ao ver os seus problemas resolvidos e a matemática beneficia porque são desenvolvidos novos métodos que são versáteis na sua conceção e na sua natureza.

## REFERÊNCIAS

- [1] P.A. Markowich, "The stationary semiconductor device equations", in series "Computational Microelectronics" (S. Selberherr, ed), Springer Verlag, Vienna (1986)
- [2] A.M. Il'in, "Differencing Scheme for a Differential Equation with a Small Parameter Affecting the Highest Derivative", *Math. Notes*, vol. 6, pp. 596-602 (1969)
- [3] D.L. Scharfetter and H.K. Gummel, "Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator", *IEEE Trans. El. Dev.*, Volume 16, number 1 (1969)
- [4] S.J. Polak, C. den Heijer, W.H.A. Schilders, and P.A. Markowich, "Semiconductor Device Modeling from the Numerical Point of View", *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 24, pp. 763- 838 (1987)
- [5] S.J. Polak, W.H.A. Schilders, C. den Heijer, A.J.H. Wachters, and H.M. Vaes, "Automatic problem size reduction for on-state semiconductor problems", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 4, pp. 452-461 (1983)
- [6] H.S. Dollar, N.I.M. Gould, W.H.A. Schilders, A.J. Wathen, "On iterative methods and implicit-factorization preconditioners for regularized saddle-point systems", *SIAM J. Matr. Anal. Appl.*, vol. 27, pp. 170-189 (2006)
- [7] W.H.A. Schilders, "Solution of indefinite linear systems using an LQ decomposition for the linear constraints", *Linear Algebra and its Applications*, vol.431 (30-4), pp. 381-395 (2009)

[8] <https://iciam.org/>

[9] S.J. Polak, W.H.A. Schilders, and H.D. Couperus, *A Finite Element Method with Current Conservation*, Proceedings SISDEP 3 Conference, G. Baccarani and M. Rudan (eds.), Tecnoprint, Bologna (1988)

[10] L.D. Marini and P. Pietra, "New mixed finite element schemes for current continuity equations", *COMPEL*, vol. 9, no. 4, pp. 257-268 (1990)

[11] <https://ecmiindmath.org>

[12] <https://eu-maths-in.eu>

[13] <http://www.eu-mor.net>

[14] W.H.A. Schilders and M. Günther, "Novel mathematics inspired by industrial challenges", Springer ECMI Series on "Mathematics for industry" (L. Bonilla, O. Scherzer, W. Schilders and M. Günther, Eds.), to appear 2021

[15] <https://www.brown.edu/research/projects/crunch/george-karniadakis>

**Wil Schilders** obteve o seu mestrado na Universidade de Radboud Nijmegen em 1978, e o seu doutoramento no Trinity College Dublin em 1980. De 1980 a 2006 trabalhou nos Laboratórios de Investigação Philips, e de 2006-2010 para a NXP Semiconductors. Desde 1999, tem sido (inicialmente a tempo parcial) professor titular de Computação Científica para a Indústria na Universidade de Tecnologia de Eindhoven. Desde 2010, é também o diretor executivo da Plataforma Holandesa de Matemática. Foi presidente do ECMI entre 2010 e 2011, e cofundador da EU-MATHS-IN, bem como presidente desta organização de 2016 a 2020. Em 2019, foi eleito *officer-at-large* na direção do ICIAM. Os seus principais interesses de investigação são em MOR (*model order reduction*) e na solução de grandes sistemas lineares, trabalhando em muitos projetos em conjunto com a indústria. Recentemente, tem também trabalhado em redes neurais dinâmicas, desenvolvendo as chamadas *neural networks physics-informed* [15]

Coordenação do espaço PT-MATHS-IN:

Paula Amaral, Universidade Nova de Lisboa, [pt-maths-in@spm.pt](mailto:pt-maths-in@spm.pt).

CENTRO DE FORMAÇÃO  
SOCIEDADE PORTUGUESA  
DE MATEMÁTICA  
EST. 1916 - 2016

spm  
SOCIETY OF PORTUGUESE  
MATHEMATICS

O Centro de Formação da Sociedade Portuguesa de Matemática continua a contribuir para um contínuo aprofundar de conhecimentos nas diversas áreas da Matemática.

[www.formacao.spm.pt](http://www.formacao.spm.pt)