Métodos de Elementos Finitos Para Problemas de Difusão-Convecção : Um Modelo Bidimensional

Márcio Rodolfo Fernandes - MTM/CFM/UFSC
fernands@ime.unicamp.br

Petronio Pulino - DMA/IMECC/UNICAMP
pulino@ime.unicamp.br

DMA/IMECC/UNICAMP
Caixa Postal 6065, CEP 13081-970
Campinas-SP-Brasil

Abstract: O método dos elementos finitos é um dos mais conhecidos e utilizados para a discretização de equações diferenciais, mas em sua forma padrão, conhecida como método de Galerkin, não apresenta bom comportamento em equações de difusão-convecção quando o coeficiente de difusão é pequeno em relação ao coeficiente de convecção. Neste trabalho, apresentamos algumas variantes do método de Galerkin para a resolução deste tipo de equações , construídas para a obtenção de melhores propriedades de estabilidade numérica.

1 Introdução

Equações diferenciais associadas a fenômenos de transporte têm grande importância prática na modelagem de um vasto número de problemas em mecânica dos fluidos. Vamos restringir nossas considerações ao seguinte

problema de difusão-convecção que modela a evolução espaço-tempo de manchas de óleo no mar sob a influência dos ventos, correntes marítimas e marés.

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - div(\alpha(x)\nabla u(x,t)) + \vec{\beta}(x)\cdot\nabla u(x,t) = f(x) \ \ , \ \ \Omega \times I \qquad (1)$$

$$u(x,t) = g(x) \ , \ x \in \ \partial\Omega_- \ , \ \ t \in I \qquad (2)$$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial \vec{\eta}} = 0 \ , \ \ x \in \ \partial\Omega_+ \ , \ \ t \in I \qquad (3)$$

$$u(x,0) = u_0(x) \ , \ x \in \Omega. \qquad (4)$$

Aqui, "$\cdot$" indica o produto escalar do $\Re^2$, Ω é um domínio limitado do $\Re^2$ com fronteira $\partial\Omega = \partial\Omega_+ \cup \partial\Omega_-$, onde

$$\partial\Omega_+ = \{ \ x \in \partial\Omega \ / \ \vec{\eta}(x)\cdot\vec{\beta}(x) \geq 0 \ \},$$

também conhecido como bordo de saída do fluxo e

$$\partial\Omega_- = \{ \ x \in \partial\Omega \ / \ \vec{\eta}(x)\cdot\vec{\beta}(x) < 0 \ \},$$

que recebe o nome de bordo de entrada do fluxo, sendo $\vec{\eta}(x)$ o vetor unitário normal no ponto $x \in \partial\Omega$, $I = [0,T] \subset \Re$, $\vec{\beta}(x) = (\beta_1(x), \beta_2(x))$ é um dado campo de velocidades e $\alpha \geq 0$ é o coeficiente de difusão. As funções $\alpha, \vec{\beta}, f$ e $g \in \mathcal{L}_2(\Omega)$.

2 Problema Variacional

Vamos considerar $(H, \langle\cdot,\cdot\rangle_H)$ um espaço de Hilbert com $\|\cdot\|_H$ a norma associada ao produto interno $\langle\cdot,\cdot\rangle_H$. Vamos indroduzir alguns conceitos que serão úteis no desenvolvimento deste trabalho. Uma forma linear $b(\cdot)$ em H é dita contínua se existe $c_1 > 0$ tal que

$$| \ b(v) \ | \leq c_1 \|v\|_H, \quad \forall \ v \in H.$$

De forma análoga, uma forma bilinear $a(\cdot,\cdot)$ em H é dita contínua se existe $c_2 > 0$ tal que

$$| a(v,w) | \leq c_2 \|v\|_H \|w\|_H, \quad \forall\, v, w \in H$$

e dita coerciva se existe $c_3 > 0$ tal que

$$a(v,v) \geq c_3 \|v\|_H^2, \quad \forall\, v \in H.$$

Se $a(u,v) = a(v,u), \quad \forall\, u, v \in H$, então dizemos que $a(\cdot,\cdot)$ é uma forma bilinear simétrica.

De modo geral, dada $a(\cdot,\cdot)$ uma forma bilinear simétrica, contínua e coerciva em H e dada uma forma linear contínua $b(\cdot)$, podemos definir o problema variacional simétrico abstrato

$(\mathcal{V})$ encontrar $u^* \in H$ solução da equação

$$a(u,v) = b(v), \quad \forall\, v \in H. \tag{5}$$

O teorema a seguir, garante sob quais condições o problema variacional *(5)* terá solução única e apresenta uma estimativa de estabilidade da solução.

Teorema de Lax-Milgram: Sejam H um espaço de Hilbert, $a(\cdot,\cdot) : H \times H \to \Re$ uma forma bilinear contínua e coerciva e $b(\cdot) : H \to \Re$ uma forma linear contínua. Então, existe um único $u^* \in H$ solução da equação

$$a(u,v) = b(v), \quad \forall\, v \in H,$$

além disso, vale a seguinte estimativa de estabilidade

$$\|u\|_H \leq \frac{c_1}{c_3}.$$

Se tomarmos $a(\cdot,\cdot)$ simétrica, então a demonstração do teorema acima é uma aplicação do Teorema de Representação de Riesz. Em ambos os casos, simétrico ou não-simétrico, a demonstração pode ser encontrada em *[1]*.

Associado ao problema variacional *(5)*, temos o seguinte problema variacional discreto ou aproximação de Ritz-Galerkin: dado um subespaço de dimensão finita $V_h \subset H$,

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar $u_h \in V_h$ solução da equação

$$a(u_h, v) = b(v), \quad \forall\, v \in V_h. \tag{6}$$

Tal qual o problema variacional *(5)*, o problema variacional discreto *(6)* também terá solução única garantida pelo Teorema de Lax-Milgram.

O próximo lema mostrará uma estimativa do erro da aproximação de u^* por u_h, solução de *(6)*.

Lema de Céa: Considerando válidas as condições do Teorema de Lax-Milgram e supondo que u^* seja solução de *(5)*. Então, para o problema variacional discreto *(6)* vale que

$$\|u^* - u_h\|_H \leq \frac{c_2}{c_3} \min\{\ \|u - v\|_H,\ \ \forall\, v \in V_h\ \},$$

onde c_2 é a constante de continuidade e c_3 a constante de coercividade.

2.1 Semi-discretização no Tempo

Seja $\Pi:\ \ 0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_N = T$ uma partição qualquer de $I = [0, T]$ com $I_n = (t_{n-1}, t_n)$ e $k_n = t_n - t_{n-1}$ o passo local no tempo.

Vamos utilizar o método de **Euler Regressivo** para discretizar a equação *(1)*. Procuramos $u^n(x)$ aproximação de $u(x, t_n)$, $n = 1, 2, \cdots, N$, $x \in \Omega$, satisfazendo

$$\frac{u^n - u^{n-1}}{k_n} - div(\alpha(x)\nabla u^n) + \vec{\beta}(x) \cdot \nabla u^n = f(x) \tag{7}$$

e a condição inicial

$$u(x, 0) = u_0(x). \tag{8}$$

A formulação variacional do problema *(7)-(8)* com condições de contorno *(2)-(3)* será descrita a seguir.

Considerando o espaço das funções-teste $H_0 = \{v \in \mathcal{H}^1(\Omega)\ /\ v\ |_{\partial\Omega_-} = 0\}$, multiplicando *(7)* por $v \in H_0$, para um dado nível de tempo n, integrando sobre Ω e usando o teorema de Green, tem-se que

$$\langle u^n, v\rangle + k_n a(u^n, v) = b(v), \ \ \forall\, v \in H_0, \tag{9}$$

onde

$$a(u^n, v) = \int_\Omega \alpha(x)\nabla u^n(x)\nabla v(x)dx + \int_\Omega \vec{\beta}(x)\nabla u^n(x)v(x)dx,$$

$$b(v) = \langle k_n f + u^{n-1}, v\rangle = \int_\Omega k_n f(x)v(x)dx + \int_\Omega u^{n-1}(x)v(x)dx,$$

$$\langle u^n, v\rangle = \int_\Omega u^n(x)v(x)dx.$$

Impondo as condições de contorno fortemente, isto é, buscando a solução num conjunto cujas funções satisfaçam as condições de contorno dadas em *(2)*, devemos definir o conjunto de funções admissíveis como

$$H_g^1 = \{\ v \in \mathcal{H}^1(\Omega)\ /\ v\ |_{\partial\Omega_-} = g\ \}.$$

Assim, podemos enunciar o seguinte problema variacional:

$(\mathcal{V}_g)$ encontrar $u^n \in H_g^1,\ n = 1, 2, \cdots, N$, solução da equação

$$\langle u^n, v\rangle + k_n a(u^n, v) = b(v),\ \ \forall\ v \in H_0, \tag{10}$$

satisfazendo a condição inicial

$$u^0(x) = u_0(x). \tag{11}$$

Repare que o problema variacional *(10)* não se enquadra no teorema de Lax-Milgram porque H_g^1 é um subconjunto e não um subespaço de $\mathcal{H}^1(\Omega)$. Para contornar esta dificuldade vamos redefinir o problema *(10)* da seguinte forma, dado um elemento $\hat{u}^n \in H_g^1$, fixo, porém arbitrário, podemos descrever H_g^1 por

$$H_g^1 = \{\ u^n \in \mathcal{H}^1(\Omega)\ /\ u^n = w^n + \hat{u}^n,\ \forall\ w^n \in H_0\ \}.$$

Reescrevendo *(10)* com u^n da forma acima temos

$$A(w^n + \hat{u}^n, v) = b(v),$$

onde a forma bilinear $A(\cdot, \cdot)$ é dada por

$$A(u^n, v) = \langle u^n, v \rangle + k_n a(u^n, v).$$

Portanto, o problema variacional pode ser reescrito da seguinte forma

$(\mathcal{V})$ encontrar $w^n \in H_0,\ n = 1, 2, \cdots, N$, solução da equação

$$A(w^n, v) = \hat{b}(v),\ \ \forall\ v \in H_0,$$

onde $\hat{b}(v) = b(v) - A(\hat{u}^n, v)$.

Vamos supor que $a(\cdot, \cdot)$ seja um forma bilinear contínua e coerciva e $b(\cdot)$ seja uma forma linear contínua. Isto é, se existem constantes $c_1, c_2, c_3 > 0$ tal que

$$\mid b(v) \mid \leq c_1 \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}, \quad \forall\ v \in \mathcal{H}^1(\Omega),$$

$$\mid a(v, w) \mid \leq c_2 \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|w\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}, \quad \forall\ v, w \in \mathcal{H}^1(\Omega),$$

$$a(v, v) \geq c_3 \|v\|^2_{\mathcal{H}^1(\Omega)}, \quad \forall\ v \in \mathcal{H}^1(\Omega).$$

Da definição de $A(\cdot, \cdot)$ segue que

$$\mid A(u^n, v) \mid = \mid \langle u^n, v \rangle\ +\ k_n a(u^n, v) \mid \leq \mid \langle u^n, v \rangle \mid\ +\ \mid k_n a(u^n, v) \mid .$$

Usando a continuidade de $a(\cdot, \cdot)$ e a desigualdade de Cauchy-Schartz temos que

$$\mid A(u^n, v) \mid \leq\ \|u^n\| \|v\|\ +\ k_n c_2 \|u^n\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)},$$

onde "$\|\cdot\|$" denota a norma-$\mathcal{L}_2$.

Mas,

$$\|u^n\| \|v\|\ \leq\ \|u^n\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)},$$

e então,

$$| A(u^n, v) | \leq \overline{c_2}\|u^n\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}\|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)},$$

onde $\overline{c_2} = \max\{ 1, k_n c_2 \}$, que mostra que $A(\cdot,\cdot)$ também será continua.

Da definição de $\hat{b}(\cdot)$ juntamente com as continuidades de $b(\cdot)$ e $A(\cdot,\cdot)$ segue que

$$| \hat{b}(v) | = | b(v) - A(\hat{u}^n, v) | \leq | b(v) | + | A(\hat{u}^n, v) | \leq$$

$$\leq c_1\|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} + \overline{c_2}\|\hat{u}^n\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)}\|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \leq \overline{c_1}\|v\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)},$$

onde $\overline{c_1} = \max\{ c_1, \overline{c_2}\|\hat{u}^n\|_{\mathcal{H}^1(\Omega)} \}$, que mostra que $\hat{b}(\cdot)$ também será continua.

Para mostrar a coercividade de $A(\cdot,\cdot)$, vamos usar a coercividade de $a(\cdot,\cdot)$:

$$A(v,v) = \langle v, v\rangle + k_n a(v,v) \geq \langle v, v\rangle + k_n c_3\|v\|^2_{\mathcal{H}^1(\Omega)}.$$

Mas, $\langle v, v\rangle \geq 0$, e então,

$$A(v,v) \geq \overline{c_3}\|v\|^2_{\mathcal{H}^1(\Omega)},$$

onde $\overline{c_3} = k_n c_3$.

Assim, mostramos que $A(\cdot,\cdot)$ é uma forma bilinear contínua e coerciva e $\hat{b}(\cdot)$ é uma forma linear contínua, o que coloca o problema variacional $(\mathcal{V})$ com as hipóteses do teorema de Lax-Milgram garantindo assim, existência e unicidade de sua solução.

2.2 Discretização no Espaço e no Tempo

Vamos considerar que Ω seja um domínio poligonal convexo e tomar os subespaços de dimensão finita consistindo de funções polinomiais lineares por partes,$V_h \subset H_0$ dado por

$$V_h = \{ v \in H_0 \ / \ v\,|_K \in \mathcal{P}_1(K), \forall\, K \in T_h \},$$

e $V_h^g \subset H_g^1$ definido como

$$V_h^g = \{\ v \in H_g^1\ /\ v\ |_K \in \mathcal{P}_1(K), \forall\ K \in T_h\ \},$$

onde $T_h = \{K\}$ é uma triangularização de Ω e $\mathcal{P}_1(K)$ é o espaço dos polinômios de grau menor ou igual a 1, definidos no elemento K. Denotaremos também $h_K \equiv$ diâmetro de K, que é o maior lado do triângulo K e

$$h = \{\ \max h_K\ /\ K \in T_h\ \}.$$

Através de uma mudança de variáveis, podemos levar cada triângulo K no triângulo $\hat{K}$, também conhecido como elemento padrão, de vértices $(0,0)$, $(1,0)$ e $(0,1)$ e vice-versa. Desta forma, podemos construir uma base local $\{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_3\}$ para $\mathcal{P}_1(K)$ que recebe o nome de base local de Lagrange Linear para o espaço de funções $L_1(T_h)$.

Então, enunciamos o seguinte problema variacional discreto no espaço e no tempo, correspondente ao problema *(10)-(11)*:

$(\mathcal{V}_h)$ encontrar $u_h^n \in V_h^g,\ n = 1, 2, \cdots N$, tal que

$$\langle u_h^n, v\rangle + k_n a(u_h^n, v) = b(v),\ \ \forall\ v \in V_h, \tag{12}$$

$$\langle u_h^0, v\rangle = \langle u_0, v\rangle,\ \ \forall\ v \in V_h. \tag{13}$$

2.3 Condições de Estabilidade

Para estabelecer condições de estabilidade, consideremos a seguinte desigualdade geométrica

$$2ab \leq a^2\epsilon + \frac{b^2}{\epsilon},\quad \forall\ a, b \in \Re\ \ e\ \ \epsilon \in \Re_+^*. \tag{14}$$

Se tomarmos *(13)* com $v = u_h^0$ e levando em consideração *(14)* com $\epsilon = 1$, temos

$$\langle u_h^0, u_h^0\rangle = \langle u_0, u_h^0\rangle \leq \frac{1}{2}\|u_0\|^2 + \frac{1}{2}\|u_h^0\|^2,$$

onde "$\|\cdot\|$" denota a norma-$\mathcal{L}_2$.

Logo, concluímos que

$$\|u_h^0\| \leq \|u_0\|. \tag{15}$$

Para obter uma relação de estabilidade para o problema discreto *(12)-(13)*, com a simplificação $f = 0$, tomamos $v = u_h^n$ em *(12)*, obtendo

$$\|u_h^n\|^2 - \langle u_h^{n-1}, u_h^n \rangle + a(u_h^n, u_h^n)k_n = 0.$$

Usando *(14)* com $\epsilon = 1$, concluímos que para $n = 1, 2, \cdots, N$

$$\frac{1}{2}\|u_h^n\|^2 - \frac{1}{2}\|u_h^{n-1}\|^2 + a(u_h^n, u_h^n)k_n \leq 0.$$

Somando entre 1 e $\overline{n}$, fixo, temos

$$\|u_h^{\overline{n}}\|^2 + 2\sum_{m=1}^{\overline{n}} a(u_h^m, u_h^m)k_m \leq \|u_h^0\|^2 \leq \|u_0\|^2.$$

Usando novamente a coercividade de $a(\cdot, \cdot)$ chegamos a

$$\|u_h^{\overline{n}}\| \leq \|u_h^0\| \leq \|u_0\|, \;\; \overline{n} = 1, \cdots, N, \tag{16}$$

que é uma condição de estabilidade que relaciona a solução aproximada, em cada nível de tempo, com a aproximação da condição inicial e a condição inicial propriamente.

Podemos ainda obter uma outra estimativa de estabilidade envolvendo as primeiras derivadas da aproximação de Galerkin u_h. Para isso, necessitamos do seguinte resultado que se obtém diretamente da fórmula de Green, desde que $div\ \vec{\beta} = 0$:

$$\int_\Omega u\vec{\beta} \cdot \nabla u dx = \frac{1}{2}\int_{\partial\Omega} u^2 \vec{\beta} \cdot \vec{\eta} ds. \tag{17}$$

Tomando $v = u_h^n$ em *(12)* com $f = 0$ e usando *(17)*, obtemos

$$k_n\langle \alpha \nabla u_h^n, \nabla u_h^n \rangle + \frac{k_n}{2}\int_{\partial\Omega_+} (u_h^n)^2 \vec{\beta} \cdot \vec{\eta} ds + \langle u_h^n, u_h^n \rangle = \langle u_h^{n-1}, u_h^n \rangle.$$

Levando em conta *(14)* com $\epsilon = 1$, temos que

$$k_n\|\alpha^{\frac{1}{2}}\nabla u_h^n\|^2 + \frac{k_n}{2}\int_{\partial\Omega_+}(u_h^n)^2\,\vec{\beta}\cdot\vec{\eta}ds + \frac{1}{2}\|u_h^n\|^2 \leq \frac{1}{2}\|u_h^{n-1}\|^2.$$

Lembrando que a integral sobre $\partial\Omega_+$ desta última desigualdade é não-negativa, porque $\vec{\beta}\cdot\vec{\eta} \geq 0$ em $\partial\Omega_+$, e usando *(16)*

$$k_n\|\alpha^{\frac{1}{2}}\nabla u_h^n\|^2 + \frac{1}{2}\|u_h^n\|^2 \leq \frac{1}{2}\|u_h^{n-1}\|^2 \leq \frac{1}{2}\|u_h^0\|^2 \leq \frac{1}{2}\|u_0\|^2. \qquad (18)$$

Observação 1: Na estimativa *(18)* podemos notar que se a condição inicial u_0 for limitada obtemos um controle no comportamento das soluções aproximadas u_h, bem como em suas derivadas de primeira ordem, desde que o coeficiente de difusão $\alpha(x)$ não se aproxime de zero, isto é, $\alpha(x) > h$. Se $\alpha(x) < h$ o controle sobre a norma-$\mathcal{L}_2$ de ∇u_h^n se perde, podendo então aparecer oscilações espúrias na solução de Galerkin. Nas próximas seções, apresentaremos métodos de elementos finitos desenvolvidos para contornar este problema.

3 Método "Streamline Diffusion"

A forma mais simples de contornar as dificuldades apresentadas pelo método de Galerkin *(12)* com $\alpha(x) < h$, é evitar esta situação. Isto pode ser feito decrescendo-se o parâmetro da triangularização h até que $\alpha(x) > h$, mas esta estratégia pode se tornar impraticável se α for muito pequeno ou particularmente, se estivermos tratando de um problema puramente hiperbólico, isto é, sem transporte difusivo ($\alpha(x) = 0$). Por outro lado, podemos simplesmente acrescentar à equação *(1)* um termo de difusão artificial $-\delta\Delta u$, onde $\delta = h - \alpha(x)$. Esta é a idéia principal dos métodos de difusão artificial que, apesar de produzirem soluções não oscilatórias, tem o defeito de introduzir uma perturbação na equação original que não permite que a solução de elementos finitos seja melhor que $O(h)$. Outra escolha seria a introdução de difusão artificial somente na direção do campo de velocidades $\vec{\beta}$, através do termo $-\delta u_{\vec{\beta}\vec{\beta}}$, com $\delta = h - \alpha(x)$, sem a violação da consistência entre a equação diferencial e o esquema de discretização, onde por definição

$$u_{\vec{\beta}} = \vec{\beta}\cdot\nabla u$$

e

$$u_{\vec{\beta}\vec{\beta}} = \vec{\beta} \cdot \nabla(\vec{\beta} \cdot \nabla u).$$

Para isso, vamos alterar o espaço das funções-teste tornando-o diferente do espaço de aproximação. Métodos com esta propriedade são classificados como métodos de Petrov-Galerkin. O método "Streamline Diffusion" é um destes métodos. Para estabelecê-lo, tomaremos funções-teste do tipo $w = v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v$, $v \in V_h$, no problema *(12)-(13)*, que fica reescrito como

$$\langle \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{k_n}, v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle + \langle \alpha \nabla u_h^n, \nabla v \rangle - \langle div(\alpha \nabla u_h^n), \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle + \quad (19)$$

$$+ \langle \vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n, v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle = \langle f, v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle, \ \forall \ v \in V_h, \ \ n = 1, 2, \cdots, N.$$

$$\langle u_h^0, v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle = \langle u_0, v + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla v \rangle, \ \forall \ v \in V_h, \quad (20)$$

onde $\delta = Ch$ se $\alpha < h$, $C > 0$ suficientemente pequena e $\delta = 0$ se $\alpha \geq h$.

Repare que o termo $\delta\langle\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n, \vec{\beta} \cdot \nabla v\rangle$ é um transporte difusivo na direção de $\vec{\beta}$ e funciona como uma fonte de estabilização do método numérico porque aumenta a quantidade de difusão na direção do vetor $\vec{\beta}$.

Para estabelecer condições de estabilidade para o método "streamline diffusion" , tomamos $v = u_h^n$ em *(19)* com a simplificação $f = 0$, obtendo

$$\langle u_h^n, u_h^n + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n \rangle + k_n \langle \alpha \nabla u_h^n, \nabla u_h^n \rangle - k_n \langle div(\alpha \nabla u_h^n), \delta\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n \rangle +$$

$$+ k_n \langle \vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n, u_h^n + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n \rangle = \langle u_h^{n-1}, u_h^n + \delta\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n \rangle.$$

Supondo α constante e usando *(14)* e *(17)* temos que

$$k_n \|\alpha^{\frac{1}{2}} \nabla u_h^n\|^2 + \frac{\delta + k_n}{2} \int_{\partial\Omega_+} (u_h^n)^2 \vec{\beta} \cdot \vec{\eta} ds + \|u_h^n\|^2 + k_n \delta \|\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n\|^2 \leq$$

$$\leq \frac{1}{2}\|u_h^{n-1}\|^2 + \frac{1}{2}\|u_h^n\|^2 + \frac{\epsilon\delta}{2}\|u_h^{n-1}\|^2 + \frac{\delta}{2\epsilon}\|\vec{\beta} \cdot \nabla u_h^n\|^2.$$

Usando a positividade da integral sobre o bordo $\partial\Omega_+$ desta última desigualdade,

$$k_n\|\alpha^{\frac{1}{2}}\nabla u_h^n\|^2+\frac{1}{2}\|u_h^n\|^2+(k_n\delta-\frac{\delta}{2\epsilon})\|\vec{\beta}\cdot\nabla u_h^n\|^2\leq\frac{1+\epsilon\delta}{2}\|u_h^{n-1}\|^2. \qquad (21)$$

Observação 2: A estimativa acima revela a existência de um controle do gradiente de u_h^n na direção de $\vec{\beta}$ que não pode ser obtido pelo método de Galerkin.

4 Método de Galerkin com Funções Bolha

O método de Galerkin com funções bolha se baseia na mesma formulação variacional do problema contínuo *(1)-(4)*, mas com espaço de aproximação maior. A idéia principal deste método é escolher o espaço V_h adequadamente, de modo a aumentar a estabilidade do método de Galerkin. Isto pode ser conseguido pela adição de funções bolha a cada elemento.

Uma função bolha φ tem suporte contido em um único elemento e satisfaz $\varphi>0,\ \forall\ x\in K,\ \varphi(x)=0\ ,\forall\ x\in\partial K$ e $\varphi=1$ no baricentro do triângulo K, $\forall\ K\in T_h$. Chamaremos de $\mathcal{B}(K)$ o espaço das funções bolha definidas sobre cada elemento da triangularização T_h.

Em cada elemento padrão, a função bolha $\hat{\varphi}$ pode ser escrita como

$$\hat{\varphi}=27\hat{\lambda}_1\hat{\lambda}_2\hat{\lambda}_3\ ,$$

onde $\{\hat{\lambda}_1,\hat{\lambda}_2,\hat{\lambda}_3\}$ é a base local de Lagrange Linear para o espaço $\mathcal{P}_1(K)$.

Vamos considerar o subespaço

$$V_h^b=\{\ v\in H_0:v\mid_K\in\mathcal{P}_1(K)\oplus\mathcal{B}(K),\ \forall K\in T_h\ \}.$$

Discretizando o tempo pelo método de Euler regressivo, estaremos procurando $u_h\in V_h^b$, aproximação de $u(x,t_n)$, $n=1,2,\cdots,N,\ x\in\Omega$, satisfazendo

$$\langle\frac{u_h^n-u_h^{n-1}}{k_n},v\rangle+\langle\alpha\nabla u_h^n,\nabla v\rangle+\langle\vec{\beta}\cdot\nabla u_h^n,v\rangle=\langle f,v\rangle,\ \forall v\in V_h^b, \qquad (22)$$

$$\langle u_h^0, v\rangle = \langle u_0, v\rangle,\ \forall v \in V_h^b. \tag{23}$$

Se em *(22)* tomarmos $v = \varphi(x)$ para $x \in K$ e $v = 0$ caso contrário, obtemos

$$\langle \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{k_n}, \varphi\rangle_K + \langle \alpha \nabla u_h^n, \nabla\varphi\rangle_K + \langle \vec{\beta}\cdot\nabla u_h^n, \varphi\rangle_K = \langle f, \varphi\rangle_K, \tag{24}$$

onde $\langle\cdot,\cdot\rangle_K$ indica o produto interno de $\mathcal{L}_2$ com integração sobre o elemento K.

Podemos decompor a solução u_h^n em sua parte linear $u_1^n \in V_h$ e sua parte gerada pelas bolhas, isto é,

$$u_h^n = u_1^n + \sum_K u_b^{nK}\varphi, \tag{25}$$

onde u_b^{nK} é o coeficiente da função bolha no elemento K.

Substituindo *(25)* em *(24)* temos

$$\langle u_1^n, \varphi\rangle_K + k_n\langle \alpha\nabla u_1^n, \nabla\varphi\rangle_K + k_n\langle \vec{\beta}\cdot\nabla u_1^n, \varphi\rangle_K +$$

$$+ u_b^{nK}[\langle\varphi,\varphi\rangle_K + k_n\langle\alpha\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle_K + k_n\langle\vec{\beta}\cdot\nabla\varphi,\varphi\rangle_K] \ =$$

$$= \ k_n\langle f,\varphi\rangle_K + \langle u_h^{n-1},\varphi\rangle_K.$$

Entretanto, para $\forall\ w_1 \in V_h$ temos, usando a fórmula de Green

$$\langle\nabla w_1, \nabla\varphi\rangle_K = -\langle\Delta w_1, \varphi\rangle_K + \int_{\partial K}\varphi\nabla w_1\cdot\vec{\eta}ds = 0. \tag{26}$$

E então,

$$u_b^{nK} = \frac{\langle k_n f + u_h^{n-1} - u_1^n - k_n\vec{\beta}\cdot\nabla u_1^n, \varphi\rangle_K}{\langle\varphi + k_n\alpha\nabla\varphi + k_n\vec{\beta}\cdot\nabla\varphi, \varphi\rangle_K}. \tag{27}$$

Este procedimento pode ser repetido para cada elemento $K \in T_h$.

Se em *(22)* tomarmos $v = v_1^n \in V_h$ e usarmos *(25)*, teremos

$$\langle u_1^n, v_1^n \rangle + k_n \langle \alpha \nabla u_1^n, \nabla v_1^n \rangle + k_n \langle \vec{\beta} \cdot \nabla u_1^n, v_1^n \rangle +$$

$$+ \sum_K u_b^{nK} [\langle \varphi, v_1^n \rangle_K + k_n \langle \alpha \nabla \varphi, \nabla v_1^n \rangle_K + k_n \langle \vec{\beta} \cdot \nabla \varphi, v_1^n \rangle_K] \; = \qquad (28)$$

$$= \; k_n \langle f, v_1^n \rangle_K + \langle u_h^{n-1}, v_1^n \rangle.$$

Então, o problema variacional resultante *(28)* é equivalente a usar o método de Galerkin com mais um termo que em vista de *(27)* e da fórmula de Green pode ser reescrito como

$$\sum_K u_b^{nK} \langle \varphi + k_n \vec{\beta} \cdot \nabla \varphi, v_1^n \rangle_K \; =$$

$$\sum_K \frac{\langle k_n f + u_h^{n-1} - u_1^n - k_n \vec{\beta} \cdot \nabla u_1^n, \varphi \rangle_K}{\langle \varphi + k_n \alpha \nabla \varphi + k_n \vec{\beta} \cdot \nabla \varphi, \varphi \rangle_K} \langle \varphi, v_1^n - k_n \vec{\beta} \cdot \nabla v_1^n \rangle_K \; =$$

$$= \; \sum_K \frac{\langle k_n f + u_h^{n-1} - u_1^n - k_n \vec{\beta} \cdot \nabla u_1^n, v_1^n - k_n \vec{\beta} \cdot \nabla v_1^n \rangle_K}{\langle \varphi + k_n \alpha \nabla \varphi + k_n \vec{\beta} \cdot \nabla \varphi, \varphi \rangle_K} C \|\varphi\|_K^2, \qquad (29)$$

onde C é uma constante.

Isto sugere uma alteração do espaço das funções teste, ou seja, a inclusão de funções bolha funciona como um método tipo Petrov-Galerkin para estabilizar o problema variacional discreto.

5 Simulações Numéricas

A seguir, vamos mostrar algumas simulações numéricas do problema *(1)-(4)* com os métodos apresentados neste trabalho. No primeiro exemplo, vamos tomar como coeficiente de difusão $\alpha = 10^{-3}$, como campo de velocidades $\vec{\beta} = (1 - y^2, 0)$ que corresponde a um escoamento laminar bidimensional entre placas paralelas, $f = 0$, $g = 0$ em $\partial\Omega_-$ e a condição inicial

$u_0(x,y) = 0.1exp(-16((x+0.5)^2 + y^2))$. O domínio Ω será dado por $\Omega = [-1,6] \times [-1,1]$ e $I = [0,6]$. Suas fronteiras podem ser descritas por

$$\partial\Omega_- = \{\ (x,y)\ /\ x = -1,\ y \in [-1,1]\ \},$$

$$\partial\Omega_+ = \{\ (x,y)\ /\ x = 6,\ y \in [-1,1]\ \} \cup$$

$$\cup\ \{\ (x,y)\ /\ y = -1,\ x \in [-1,6]\ \}\ \cup\ \{\ (x,y)\ /\ y = 1,\ x \in [-1,6]\ \}.$$

Para o domínio Ω foi gerada uma rede de triângulos com 5888 elementos e 3057 nós. O intervalo I foi dividido em 120 subintervalos de tamanhos iguais. As figuras *1*, *2* e *3* mostram as curvas de nível da evolução da solução aproximada pelo método "Streamline Diffusion" utilizando o espaço $L_1(T_h)$ para $t = 4$, $t = 5$ e $t = 6$, respectivamente.

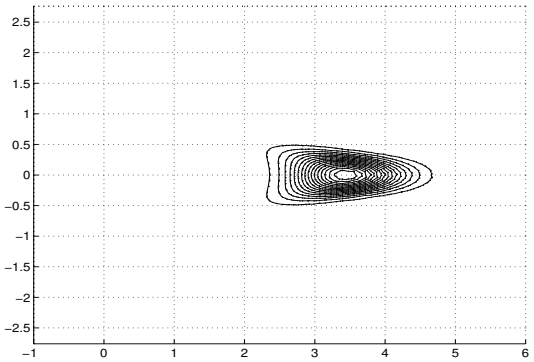

Figura 1: Método "Streamline Diffusion" - $t = 4$

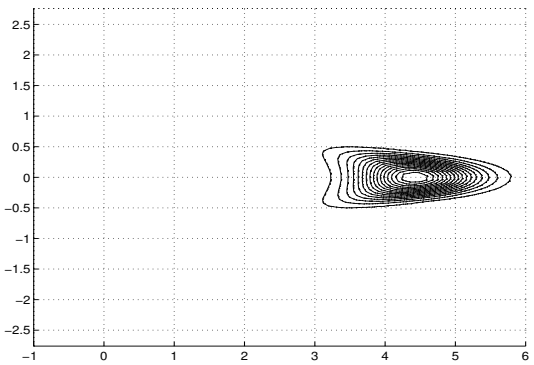

Figura 2: Método "Streamline Diffusion" - $t = 5$

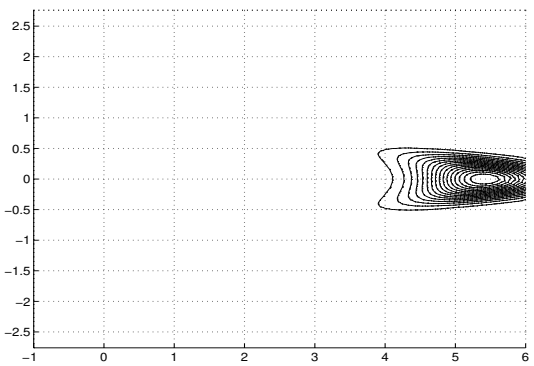

Figura 3: Método "Streamline Diffusion" - $t = 6$

Podemos observar nas figuras *1-3* que a solucão toma a forma parabólica devido ao campo de velocidades escolhido para a simulação, além disso, a solução passa pelo bordo $\partial\Omega_+$ sem apresentar oscilações. Estes fatos evidenciam que os métodos numéricos apresentados não alteraram as características do problema.

No próximo exemplo, vamos tomar o domínio Ω composto pelo retângulo dado por $[-3.5, 3.5] \times [-1, 1]$ com um obstáculo dado pela circunferência de centro na origem e raio $r = 0.25$, como pode ser visto na figura *4*.

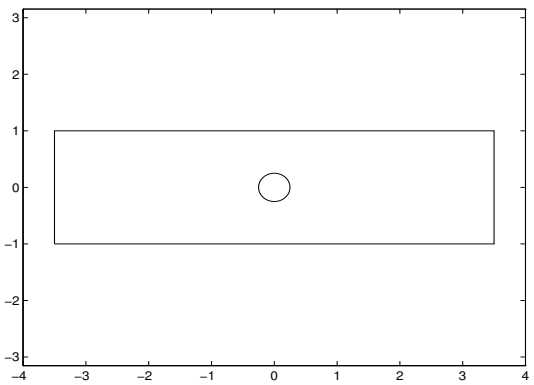

Figura 4: Domínio retangular com obstáculo

O campo de velocidades para este tipo de domínio será dado por

$$\vec{\beta} = \left(1 - \frac{2x^2r^2}{(x^2+y^2)^2} + \frac{r^2}{(x^2+y^2)} \ , \ -\frac{2xyr^2}{(x^2+y^2)^2} \right).$$

Escolhemos também o coeficiente de difusão $\alpha = 10^{-3}$,$f = 0$, e a condição inicial $u_0(x, y) = 0.1exp(-16((x+2.5)^2+y^2))$. Para as condições de contorno tomamos $g = 0$ em $\partial\Omega_-$, onde as fronteiras são descritas por

$$\partial\Omega_- = \{\ (x, y)\ /\ x = -3.5,\ y \in [-1, 1]\ \},$$

$$\partial\Omega_+ = \{\ (x, y)\ /\ x^2 + y^2 = r^2\ \}\ \cup\ \{\ (x, y)\ /\ x = 3.5,\ y \in [-1, 1]\ \} \cup$$

$$\cup\ \{\ (x, y)\ /\ y = -1,\ x \in [-3.5, 3.5]\ \}\ \cup\ \{\ (x, y)\ /\ y = 1,\ x \in [-3.5, 3.5]\ \}.$$

Para o domínio Ω foi gerada uma rede de triângulos com 3520 elementos e 1840 nós. O intervalo $I = [0, 6]$ foi dividido em 120 subintervalos de tamanhos iguais. As figuras *5* , *6* e *7* mostram as curvas de nível da evolução da solução aproximada pelo método Galerkin com base Lagrange Linear mais funções bolha para $t = 2$, $t = 3$ e $t = 4$, respectivamente.

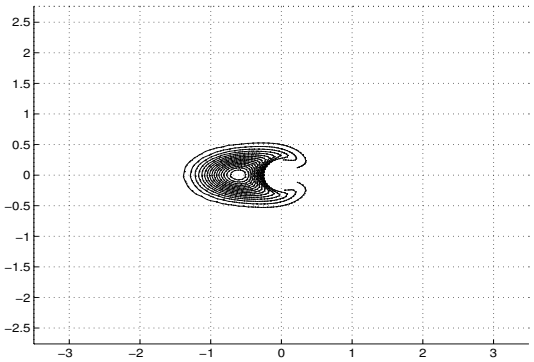

Figura 5: Método de Galerkin com funções bolha - $t = 2$

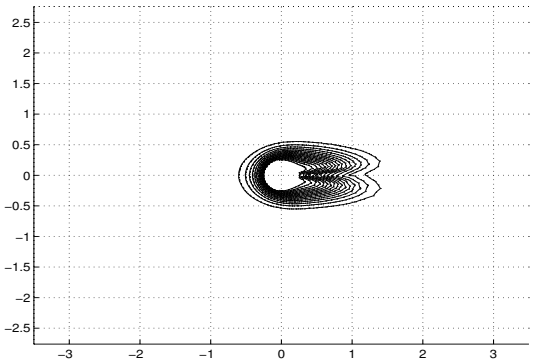

Figura 6: Método de Galerkin com funções bolha - $t = 3$

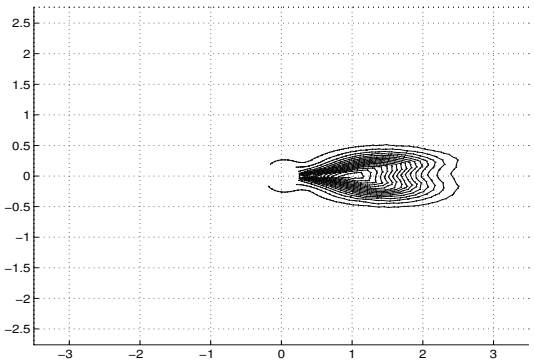

Figura 7: Método de Galerkin com funções bolha - $t = 4$

Podemos observar nas figuras *5-7* que a solução atravessa o obstáculo sem perder massa e com o comportamento físico esperado.

5.1 Conservação da Massa

Vamos estabelecer uma propriedade de conservação de massa da solução do problema *(1)-(4)* e que continua sendo válida após sua discretização. Para isso, vamos tomar a equação *(7)* para o caso especial $f = 0$ juntamente com a condição de Dirichlet *(2)* com $g = 0$:

$$\frac{u^n - u^{n-1}}{k_n} - div(\alpha(x)\nabla u^n) + \vec{\beta}(x) \cdot \nabla u^n = 0. \tag{30}$$

Vamos integrar *(30)* sobre Ω para obter

$$\int_\Omega u^n dx - k_n \int_\Omega div(\alpha(x)\nabla u^n)dx + k_n \int_\Omega \vec{\beta}(x) \cdot \nabla u^n dx = \int_\Omega u^{n-1} dx.$$

Usando o teorema de divergência chegamos a

$$\int_\Omega u^n dx - k_n \int_{\partial\Omega} \alpha(x)\nabla u^n \cdot \vec{\eta} ds + k_n \int_{\partial\Omega} u^n \vec{\beta}(x) \cdot \vec{\eta} ds = \int_\Omega u^{n-1} dx. \tag{31}$$

Analisando *(31)* para um domínio retangular sem furos, caso da primeira simulação que realizamos, concluímos que as integrais sobre o bordo de Ω se anulam quando a solução não está em contato com a fronteira. Desta forma,

$$\int_\Omega u^n dx = \int_\Omega u^{n-1} dx, \tag{32}$$

isto é, a massa medida em dois tempos consecutivos deve manter-se constante enquanto a solução não sofrer influência das condições de contorno.

Esta propriedade do problema contínuo no espaço também foi verificada nas simulações realizadas com os métodos de elementos finitos que tratamos neste trabalho.

Para o domínio da segunda simulação, valem as mesmas observações anteriores acrescidas de uma análise da passagem da solução pelo obstáculo no centro do domínio. Quando isto estiver acontecendo, cabe ressaltar que o campo de velocidades $\vec{\beta}$ para este problema foi construído de forma a ter apenas componente tangencial nas proximidades do bordo da circunferência colocada no centro do retângulo. Assim, as integrais sobre o bordo de Ω também se anulam. Portanto, continua valendo a conservação de massa e esta propriedade foi alcançada com êxito pelos métodos de elementos finitos que utilizamos.

Na figura *8*, encontramos o gráfico da massa da solução aproximada do problema do primeiro exemplo desta seção, em função do tempo. Observe que, antes de atingir o bordo $\partial\Omega_+$ a massa se mantém constante.

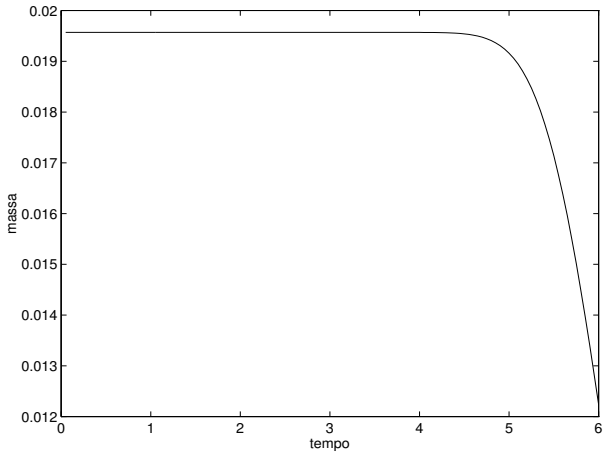

Figura 8: Gráfico da massa em função do tempo

6 Conclusões

Os métodos "Streamline Diffusion" e Galerkin com funções bolha alcançaram bons resultados em nossas simulações numéricas. A escolha de um ou de outro pode se basear no fato do primeiro apresentar dificuldades em sua

implementação devido ao aparecimento de termos adicionais em sua formulação variacional. Já o segundo se baseia na mesma formulação variacional do método de Galerkin, mas introduz mais variáveis no sistema linear resultante da discretização.

Como trabalho futuro, pretendemos testar os métodos apresentados neste relatório em problemas de Navier-Stokes. Desta forma, poderemos calcular o campo de velocidades $\vec{\beta}$ para diversas geometrias mais complicadas e utilizá-lo na simulação dos problemas de difusão-convecção em situações mais próximas da realidade.

Referências

[1] B. Dayanand Reddy , *Functional Analysis and Boundary-value Problems: an Introductory Treatment*, Longman Scientific & Techinical, 1986.

[2] C. Johnson , *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, Cambridge University Press, 1987.

[3] S.C. Brenner & L. Scott, *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Springer-Verlag, 1994.

[4] L.P. Franca & C. Farhat, *"On the Limitations of Bubble Functions", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 117:225-230, 1994.

[5] L.P. Franca & C. Farhat, *"Bubble functions prompt unusual stabilized finite element methods", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 123:299-380, 1995.