

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

CAROLINA CARDOSO NOVO

**Formulação de Mínimos Quadrados Espaço-Tempo
Descontínuo Aplicada à Equação de Transporte**

NITERÓI

2008

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

CAROLINA CARDOSO NOVO

Formulação de Mínimos Quadrados Espaço-Tempo Descontínuo Aplicada à Equação de Transporte

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre. Área de concentração: Aplicações - Modelagem Computacional.

Orientadora:
Regina Célia Paula Leal Toledo

NITERÓI

2008

Formulação de Mínimos Quadrados Espaço-Tempo Descontínuo Aplicada à Equação de Transporte

Carolina Cardoso Novo

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre.

Aprovada por:

Prof^a. D.Sc. Regina Célia Paula Leal Toledo / IC-UFF
(Presidente)

Prof. D.Sc. Carlos Antônio de Moura/ IME-UERJ

Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo/ LNCC

Prof. D.Sc. Jorge J. Delgado Gómez/ IM-UFF

Prof. D.Sc. José Henrique Carneiro de Araujo/ IC-UFF

Niterói, 2008.

À minha eterna vizinha Déa...

Agradecimentos

À minha orientadora, Regina Célia Paula Leal Toledo, pela oportunidade de realização deste trabalho. Sobretudo pelo apoio e incentivo.

Aos professores do IC-UFF, em especial a Mauricio K., pelos valiosos conselhos incentivadores da minha escolha acadêmica.

Aos meus professores de graduação do IM-UFF, com carinho especial, à Katia e ao Jorge, pela grande amizade, pelo encorajamento e pelo consolo nos momentos difíceis.

Aos meus grandes amigos de graduação, Angel e Luciano, pelos tantos momentos bons...

Aos caríssimos companheiros do IC-UFF, Kennedy e Simoni.

Às minhas amigas Flavinha, Mandinha, Mônica e Alê.

Ao pessoal do LANTE, Manu, Joice, Eric, Tosta, Cristiane, Nilda, Sheila e minha extravagante amiga Bebete.

Aos meus tios e tias, primos e primas, minha irmã Silvia, meu irmão Dudu, e um agradecimento especial a tia Solange, minha prima Ju e minha queridinha sobrinha Bia.

A meus pais, Paulo e Lucia e às minhas avós, Estela e Déa, pela ajuda e por todo amor.

Ao Léo, pelos grandes momentos de felicidade, pela ajuda incondicional, pela paciência enorme e por me ensinar que sempre é possível ver o lado bom dos acontecimentos...

Resumo

A modelagem de vários problemas físicos das engenharias envolve a solução de equações de transporte. Diversas aproximações têm sido propostas para resolver este tipo de equação, como por exemplo as aproximações de diferenças finitas, volumes finitos e aproximações de elementos finitos, tanto as semi-discretas quanto as aproximações de elementos finitos no espaço e no tempo. Dentro desta metodologia de elementos finitos espaço-tempo, podemos destacar as formulações variacionais que utilizam as funções de aproximação contínuas no espaço e descontínuas no domínio temporal.

Neste trabalho, apresentamos o método dos elementos finitos com a formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo aplicado aos problemas de advecção-reação e advecção-difusão-reação. Essas equações de transporte são resolvidas a partir de sua descrição como um sistema de equações diferenciais de primeira ordem equivalente. Análises matemáticas de estabilidade e estimativa de erro são feitas para as formulações mistas propostas. Mostra-se que apesar de se tratar de um problema misto, não há necessidade de satisfazer a condição de Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi (LBB). Resultados numéricos são apresentados para confirmar os resultados da análise matemática aqui desenvolvidas.

Abstract

The modelling of many physical engineering problems concerns solution of transport equations. Several approximations have been proposed in order to solve these equations, for example, approximations by finite differences, finite volume and finite elements, both for the semi-discrete ones as well for the approximations by finite elements in space and in time. Within this methodology of space-time finite elements, we can highlight the variational formulations that use approximations functions which are continuous in space and discontinuous in time domain.

In the present work, we apply the finite elements with the discontinuous space-time least squares method to advection-diffusion and advection-diffusion-reaction problems. To solve these transport equations, we consider an equivalent system of first order differential equations. Mathematical analysis of stability and error estimative are carried for the presented mixed formulations. We also show that, even this problem is a mixed one, there is no need on satisfying the Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi(LBB) condition. Numerical results are presented to confirm the result achieved by the mathematical analysis here developed.

Palavras-chave

1. Equação de Transporte
2. Método dos Elementos Finitos
3. Formulação Variacional de Mínimos Quadrados
4. Formulação Espaço-Tempo
5. Formulação Mista

Sumário

Lista de Figuras	ix
1 Introdução	11
2 Formulação Variacional de Mínimos Quadrados	14
2.1 Notações e Definições	14
2.1.1 Problemas Variacionais	16
2.2 Método de Elementos Finitos Espaço-Tempo Descontínuo	17
2.2.1 Definições	18
2.2.2 Métodos Conformes	21
2.3 Sistema de Primeira Ordem e a Formulação de Mínimos Quadrados	22
2.3.1 Formulação Geral de Mínimos Quadrados	23
2.3.2 Formulação de Mínimos Quadrados Espaço-Tempo Descontínuo	24
2.3.3 Modelo Computacional de Elementos Finitos	26
3 Equação de Advecção-reação	28
3.1 Introdução	28
3.2 Definição do Problema	29
3.3 Formulação Variacional	29
3.3.1 Análise Numérica	34
3.4 Um Caso Particular: Um Problema Unidimensional	36
3.4.1 Resultados da Análise de Estabilidade	39
3.4.2 Exemplo 1: Problema unidimensional escalar de advecção	41

3.5	Formulação Variacional Mista	42
3.5.1	Análise Numérica	50
3.6	Resultados Numéricos	52
3.6.1	Exemplo 2: Problema unidimensional misto de advecção	53
3.6.2	Exemplo 3: Problema bidimensional de advecção	54
4	Equação de Advecção-difusão-reação	64
4.1	Introdução	64
4.2	Definição do Problema	65
4.3	Formulação Variacional	66
4.4	Formulação Variacional com Rotacional	82
4.4.1	Análise Numérica	83
4.5	Resultados Numéricos	84
4.5.1	Exemplo 1: Problema unidimensional de advecção-difusão	85
4.5.2	Exemplo 2: Problema unidimensional de advecção-difusão	86
4.5.3	Exemplo 3: Problema bidimensional de advecção-difusão	87
5	Conclusões	96
	Referências	98
	Apêndice	101

Lista de Figuras

2.1	Ilustração da partição do contorno.	19
2.2	Região de integração	20
2.3	Modelo esquemático de um pto da malha com aprox. cte. no tempo	21
3.1	Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 0,5$	41
3.2	Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 0,67$	41
3.3	Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 1,0$	41
3.4	Problema escalar unidimensional de advecção em $t = 0,6$	42
3.5	Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,5$	53
3.6	Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,55$	53
3.7	Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,67$	53
3.8	Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 1,0$	54
3.9	Ilustração do Problema bidimensional de advecção	54
3.10	Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8	55
3.11	Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0	56
3.12	Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8	57
3.13	Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0	58
3.14	Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8	59
3.15	Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0	60
3.16	Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8	61
3.17	Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0	62
3.18	Corte ao longo da linha $x = y$ para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0	63
4.1	Problema 1 advecção-difusão em $t = 0,5$	85

4.2	Exemplo 1 de advecção-difusão com $Pe=5$ em $t=20, 60, 100$	86
4.3	Problema 2 de advecção-difusão com $Pe=0,1$ em $t=2, 6, 20$	87
4.4	Ilustração do problema bidimensional de advecção-difusão	87
4.5	Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8	89
4.6	Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0	90
4.7	Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8	91
4.8	Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0	92
4.9	Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8	93
4.10	Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0	93
4.11	Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8	94
4.12	Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0	94

Capítulo 1

Introdução

A utilização das equações de transporte tem ampla aplicação em problemas de modelagem matemática nas mais diversas áreas, tais como mecânica dos fluidos, problemas de dinâmica de populações, entre outros. Os métodos numéricos que têm sido normalmente utilizados para a solução destas equações diferenciais parciais são os métodos de diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos.

As soluções de problemas transientes de transporte, com advecção dominante, são caracterizadas por apresentarem camadas limites, que são regiões de fortes gradientes. As primeiras tentativas para a resolução de problemas de transporte, com advecção, utilizando o método de elementos finitos, foram desenvolvidas usando a formulação semi-discreta de Galerkin, utilizando espaços de aproximações polinomiais clássicos de elementos finitos para discretizar o espaço, e o método de diferenças finitas para discretizar o tempo. No entanto, essa formulação apresenta oscilações espúrias por todo domínio, conduzindo a soluções não físicas, a menos que sejam utilizadas malhas muito refinadas que podem inviabilizar a utilização desse tipo de aproximação.

Como alternativa a estas limitações, diversas técnicas foram propostas nos últimos anos, destacando-se entre elas os métodos estabilizados de elementos finitos variacionalmente consistentes como, por exemplo, o Streamline-upwind/Petrov-Galerkin (SUPG) [1, 2, 3, 4] e o Galerkin/mínimos quadrados espaço-tempo (GLS/ST) [5, 6, 7, 8]. Basicamente, estes métodos acrescentam termos de estabilização na formulação de Galerkin, que são balanceados por parâmetros, fornecendo soluções estáveis com sólida validação matemática e numérica. Por outro lado, um de seus problemas é a necessidade de projetar adequadamente estes parâmetros estabilizadores em toda faixa de variação dos coeficientes das equações de transporte.

O objetivo deste trabalho é estudar o comportamento da formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo aplicada ao problema de transporte, onde o problema original é descrito como um sistema de equações de primeira ordem equivalente, transformando-se assim em um problema misto.

Métodos mistos de elementos finitos são baseados na aproximação simultânea dos campos envolvidos e têm como principal característica a necessidade de compatibilidade entre os espaços de aproximação empregados. A análise para assegurar a existência e unicidade de solução para esta categoria de problemas não pode ser feita, via de regra, pelo Teorema de Lax-Milgram. Neste caso, se utiliza o teorema de Babuska e de Brezzi, que impõe condições de compatibilidade entre os espaços de aproximações, denominada condição de Ladyshenkaya-Babuska-Brezzi (LBB), que deve ser verificada para cada uma das variáveis nas quais o problema é formulado.

Uma outra formulação que tem sido utilizada para esse tipo de problemas é a formulação semi-discreta de mínimos quadrados. A formulação variacional de mínimos quadrados, inicialmente aplicada a problemas de contorno elípticos, em sua forma clássica, tem a desvantagem de requerer maior grau de regularidade dos espaços de aproximação empregados, quando a ordem da equação é maior do que um. Como alternativa, para reduzir esta necessidade, tem-se adotado descrever o problema de equações diferenciais parciais como um sistema de primeira ordem equivalente, recaindo, dessa forma, em uma formulação mista. Apesar disso, diversos trabalhos têm mostrado que, para vários desses problemas, não há necessidade de compatibilidade entre os espaços de aproximação para garantia da existência e unicidade de solução [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15].

Uma formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo foi proposta em [16] para o problema puramente advectivo unidimensional. Neste trabalho, apesar da formulação de mínimos quadrados perder a simetria, uma de suas características em formulações semi-discretas, a análise de estabilidade mostrou excelentes características de precisão e estabilidade para o problema analisado, não apresentando a excessiva difusão artificial da formulação semi-discreta de mínimos quadrados [15].

Estendendo a utilização da formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo para a equação de transporte bidimensional, apresentamos, no capítulo 2, a formulação para esta formulação aplicada a um sistema transiente de equações diferenciais de primeira ordem genérico, onde utilizamos aproximações de elementos finitos na discretização espacial e temporal, aqui consideradas constantes em cada intervalo de tempo.

No capítulo 3, introduzimos o problema transiente de advecção-reação bidimensional.

A análise de estabilidade e convergência da formulação proposta é realizada para a equação escalar. Em seguida, reescrevemos o problema escalar original como um sistema de equações diferenciais. Para este sistema de equações, introduzimos uma formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo bem como sua análise matemática. Resultados numéricos são mostrados, tanto para problemas unidimensionais como bidimensionais, avaliando o comportamento dessas formulações.

No capítulo 4, definimos o problema escalar transiente de advecção-difusão-reação e, reescrevemos o problema original a um sistema equivalente de primeira ordem. Aplicamos a formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo, apresentamos a análise de existência e unicidade de solução e mostramos suas estimativas de erro. Uma formulação que inclui o termo do rotacional nulo também é considerada, bem como seus resultados de análise e convergência das soluções. Soluções numéricas são apresentadas para avaliar o comportamento da formulação proposta.

Finalmente, no capítulo 5, apresentamos conclusões do trabalho realizado, tecendo comentários finais e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Formulação Variacional de Mínimos Quadrados

O método dos elementos finitos é uma técnica de resolução aproximada de problemas de valor de contorno que envolve o particionamento do domínio em um número finito de elementos e, usando conceitos variacionais, a construção de uma aproximação da solução sobre esses elementos. Dessa forma, o princípio do método de elementos finitos consiste na definição de uma formulação variacional e da construção das funções de aproximações para o problema discretizado a ser resolvido.

Para construirmos tal formulação variacional precisamos de algumas definições e resultados sobre espaços de funções e normas associadas. Por isso, neste capítulo, definimos alguns conceitos e notações e apresentamos o clássico Teorema de Lax-Milgram sobre formulações abstratas para problemas variacionais. Em seguida, construímos a formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo para um problema genérico, descrito como um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem e apresentamos a teoria básica para a análise numérica da formulação de elementos finitos utilizada ao longo deste trabalho.

2.1 Notações e Definições

Considere um subdomínio limitado Ω de $\mathbb{R}^2$, com fronteira Lipschitz regular Γ . Seja $L^2(\Omega)$ o espaço das funções quadrado integráveis, denotado por:

$$L^2(\Omega) = \left\{ u : u \in \Omega \text{ e } \int_{\Omega} u^2 d\Omega < \infty \right\}, \quad (2.1)$$

com produto interno

$$(u, w) = \int_{\Omega} u w \, d\Omega, \quad (2.2)$$

e norma associada

$$\|u\|_0 = \|u\| = (u, u)^{1/2}. \quad (2.3)$$

Para algum inteiro não negativo d , definimos o espaço de Hilbert de ordem d sobre Ω , contendo funções u em $L^2(\Omega)$ tal que suas derivadas, no sentido das distribuições, estejam em $L^2(\Omega)$, isto é

$$H^d(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) : |\alpha| \leq d, \partial^\alpha u \in L^2(\Omega)\}, \quad (2.4)$$

onde

$$\partial^\alpha u = \frac{\partial^{|\alpha|} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2}}, \quad (2.5)$$

$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ é um vetor de inteiros não-negativos e $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2$.

O produto interno em $H^d(\Omega)$ é denotado por,

$$(u, v)_d = \sum_{|\alpha| \leq d} \int_{\Omega} (\partial^\alpha u) \cdot (\partial^\alpha v) \, d\Omega, \quad (2.6)$$

com norma associada

$$\|u\|_d = (u, u)_d^{1/2}. \quad (2.7)$$

Note que, para o caso particular $d = 0$, tem-se $L^2(\Omega) = H^0(\Omega)$ e, para $d = 1$, definimos o espaço

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) : \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2 \right\}, \quad (2.8)$$

com produto interno

$$(u, v)_1 = \int_{\Omega} \{uv + \nabla u \nabla v\} \, d\Omega \quad (2.9)$$

e norma associada

$$\|u\|_1 = (u, u)_1^{1/2}. \quad (2.10)$$

Considere o subespaço de $H^1(\Omega)$ das funções que se anulam no contorno Γ

$$H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega), u = 0 \text{ em } \Gamma\}, \quad (2.11)$$

com o produto interno e norma definidos em (2.9) e (2.10), respectivamente.

Sejam $u \in L^2(\Omega)$ um escalar e $\mathbf{p} = (p_1, p_2) \in [L^2(\Omega)]^2$. Definimos os seguintes operadores:

- gradiente

$$\nabla u = \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2} \right); \quad (2.12)$$

- divergente

$$\operatorname{div} \mathbf{p} = \nabla \cdot \mathbf{p} = \frac{\partial p_1}{\partial x_1} + \frac{\partial p_2}{\partial x_2}; \quad (2.13)$$

- rotacional

$$\operatorname{rot} \mathbf{p} = \nabla \times \mathbf{p} = \frac{\partial p_2}{\partial x_1} - \frac{\partial p_1}{\partial x_2}, \quad (2.14)$$

onde $\times$ denota produto vetorial.

Desse modo, os espaços de Hilbert $H(\operatorname{div})$ e $H(\operatorname{rot})$ são definidos por

$$H(\operatorname{div}) = \{ \mathbf{p} \in [L^2(\Omega)]^2 : \operatorname{div} \mathbf{p} \in L^2(\Omega) \}, \quad (2.15)$$

$$H(\operatorname{rot}) = \{ \mathbf{p} \in [L^2(\Omega)]^2 : \operatorname{rot} \mathbf{p} \in L^2(\Omega) \}, \quad (2.16)$$

com normas associadas

$$\| \mathbf{p} \|_{H(\operatorname{div})} = \left(\| \mathbf{p} \|^2 + \| \operatorname{div} \mathbf{p} \|^2 \right)^{1/2}, \quad (2.17)$$

$$\| \mathbf{p} \|_{H(\operatorname{rot})} = \left(\| \mathbf{p} \|^2 + \| \operatorname{rot} \mathbf{p} \|^2 \right)^{1/2}. \quad (2.18)$$

Sejam V e W espaços de Hilbert. Designamos sua norma por $\| \cdot \|_V$ e definimos norma no espaço produto $V \times W$ como:

$$\| (u, v) \|_{V \times W} = \left(\| u \|_V^2 + \| v \|_W^2 \right)^{1/2} \quad \forall (u, v) \in V \times W. \quad (2.19)$$

2.1.1 Problemas Variacionais

Podemos representar abstratamente as formulações variacionais para equações elípticas em um único campo, pelo seguinte problema de minimização:

PROBLEMA V1: Encontrar $u \in V$ tal que

$$J(u) \leq J(v) \quad \forall v \in V, \quad (2.20)$$

onde V é um espaço de Hilbert e $J : V \rightarrow \mathbb{R}$ é um funcional. Este problema é equivalente ao seguinte problema variacional:

PROBLEMA V2: Encontrar $u \in V$ tal que

$$\mathbb{B}(u, v) = \mathbb{L}(v) \quad \forall v \in V, \quad (2.21)$$

onde $\mathbb{B}(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ é uma forma bilinear e $\mathbb{L}(\cdot) : V \rightarrow \mathbb{R}$ é uma aplicação linear.

O estudo da existência e unicidade das soluções dos problemas variacionais apresentados neste trabalho é realizado através da aplicação do Teorema de Lax-Milgram [17, 18], enunciado a seguir.

Teorema 1 *Seja V um espaço de Hilbert, com norma associada $\|\cdot\|_V$.*

Se $\mathbb{B}(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ é uma forma bilinear satisfazendo:

1. (Linearidade de $\mathbb{B}(\cdot, \cdot)$) *Para todos $u, v, w \in V$ e $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ temos*

$$\begin{aligned} c\mathbb{B}(\alpha u + \beta v, w) &= \alpha \mathbb{B}(u, w) + \beta \mathbb{B}(v, w) \\ \mathbb{B}(w, \alpha u + \beta v) &= \alpha \mathbb{B}(w, u) + \beta \mathbb{B}(w, v); \end{aligned}$$

2. (Continuidade de $\mathbb{B}(\cdot, \cdot)$) *Existe uma constante $M > 0$ tal que*

$$|\mathbb{B}(u, v)| \leq M \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V;$$

3. (Coecividade de $\mathbb{B}(\cdot, \cdot)$) *Existe uma constante $C > 0$ tal que*

$$\mathbb{B}(v, v) \geq C \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V; e$$

4. (Continuidade de $\mathbb{L}(\cdot)$) *Para toda $\mathbb{L}$, aplicação linear limitada em V , existe uma constante $\gamma > 0$ tal que*

$$|\mathbb{L}(u)| \leq \gamma \|u\|_V \quad \forall u \in V;$$

então existe um único elemento $\bar{u} \in V$ tal que

$$\mathbb{B}(\bar{u}, u) = \mathbb{L}(u) \quad \forall u \in V.$$

2.2 Método de Elementos Finitos Espaço-Tempo Descontínuo

O método de elementos finitos é uma técnica computacional para solução de equações diferenciais parciais, onde o domínio do problema a ser resolvido é aproximado por um

conjunto de sub-domínios de geometria simples (elementos finitos), para os quais é possível definir de forma sistemática as funções de aproximações necessárias para a solução do problema variacional.

Nesta seção, apresentamos um procedimento do método dos elementos finitos para se obter a resolução de um conjunto de equações diferenciais parciais de primeira ordem com solução dependente do tempo.

Várias aproximações têm sido empregadas para resolver este tipo de equação. Muitos trabalhos utilizam aproximações semi-discretas [19, 15, 12, 20], isto é, usam aproximações por elementos finitos para discretizar o domínio espacial enquanto o domínio temporal é discretizado por diferenças finitas. Alternativamente às formulações semi-discretas, pesquisas foram desenvolvidas utilizando formulações onde as aproximações por elementos finitos são usadas tanto no domínio espacial como no temporal [5, 21, 16, 22].

Dentro da metodologia de elementos finitos espaço-tempo, podemos destacar as formulações variacionais que utilizam as funções de aproximação descontínuas no domínio temporal, tais como o método de Galerkin descontínuo no tempo e o GLS/ST [5, 6, 7].

Dessa forma, com base nas formulações espaço-tempo descontínuas, desenvolvemos a teoria para a construção da formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo, utilizando aproximações de elementos finitos para os domínios espacial e temporal, onde a aproximação usada para a discretização temporal é considerada constante em cada subintervalo de tempo. Nesta seção aplicamos esta formulação abstratamente a um problema descrito através de um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem.

Para isso, apresentamos a seguir definições e notações que são utilizadas no presente trabalho.

2.2.1 Definições

Sejam $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ o vetor normal unitário externo à fronteira Γ , $\mathbf{v}$ o campo de velocidade e $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. Com o objetivo de definir as condições de fronteira de modo que o problema seja bem posto, consideramos o conjunto $\{\Gamma^-, \Gamma^+\}$ uma partição de Γ , com

$$\Gamma^- = \{\mathbf{x} \in \Gamma : \mathbf{v}_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) < 0\}, \quad (2.22)$$

$$\Gamma^+ = \{\mathbf{x} \in \Gamma : \mathbf{v}_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) > 0\}, \quad (2.23)$$

onde $\mathbf{v}_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$. Sejam Γ_D e Γ_N as partes da fronteira onde são impostas as condições de contorno essenciais (Dirichlet) e naturais (Neumann), respectivamente. Denotamos os seguintes subconjuntos por:

$$\Gamma_D^\pm = \Gamma_D \cap \Gamma^\pm, \quad (2.24)$$

$$\Gamma_N^\pm = \Gamma_N \cap \Gamma^\pm, \quad (2.25)$$

como apresentado na Figura 2.1.

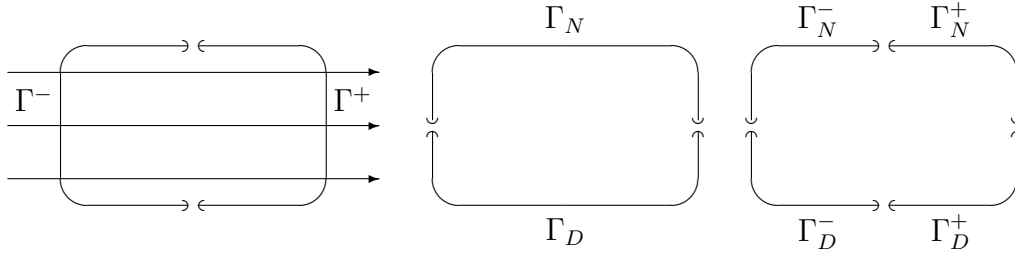


Figura 2.1: Ilustração da partição do contorno.

Sejam $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = T$ uma partição do domínio temporal $I = (0, T)$, com $I_n = \{(\mathbf{x}, t); \mathbf{x} \in \Omega, t_n < t < t_{n+1}\}$ o n -ésimo intervalo temporal e $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ o passo de tempo local. Para cada n , denotamos o domínio de integração espaço-tempo como sendo a “fatia” dada por

$$Q_n = \Omega \times I_n, \quad (2.26)$$

com fronteira

$$\Upsilon_n = \Gamma \times I_n. \quad (2.27)$$

Na n -ésima “fatia” espaço-tempo, o domínio espacial Ω é subdividido em (Ne) elementos $\Omega_e, e = 1, \dots, (Ne)$, dois a dois disjuntos, isto é,

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{(Ne)} \overline{\Omega_e}, \quad \Omega_e \cap \Omega_{e'} = \emptyset \quad \text{se} \quad e \neq e'. \quad (2.28)$$

Seja Q_n^e o domínio do elemento espaço-tempo na n -ésima “fatia”. Desse modo, dentro de cada elemento espaço-tempo, a função tentativa e as funções de ponderação são aproximadas por polinômios de interpolação $\mathbb{P}_k$, de ordem k , contínuas dentro de cada “fatia” espaço-tempo, porém descontínuas em suas interfaces.

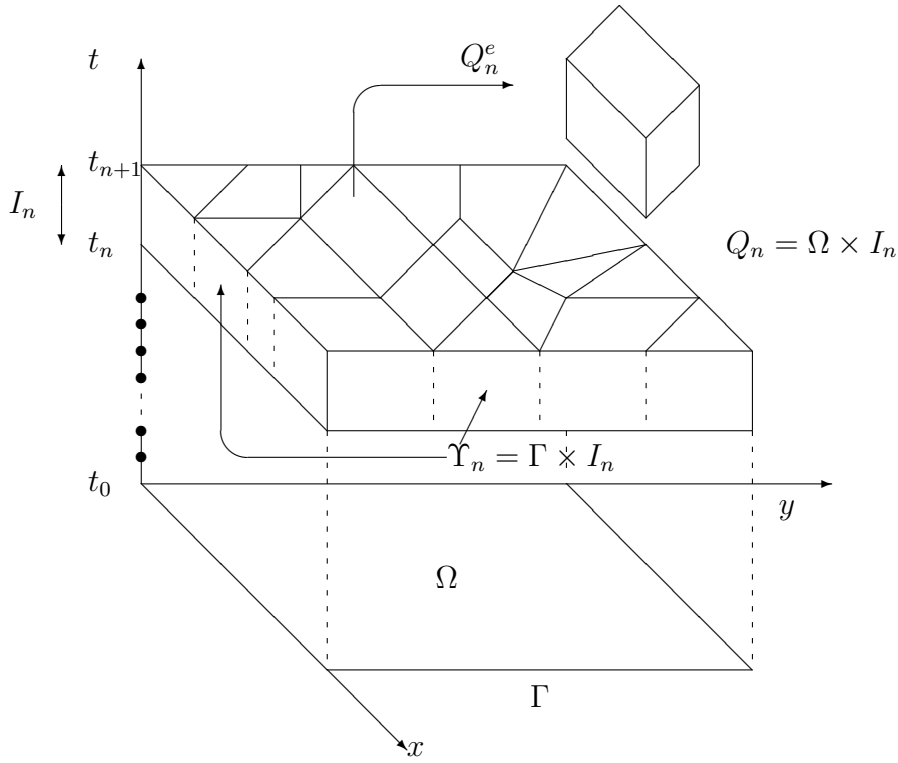


Figura 2.2: Região de integração

Definindo as funções de interpolação de elementos finitos na n -ésima “fatia” espaço-tempo, admitindo-se aproximação constante no tempo, temos

$$u^h(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \sum_{j=1}^{n_{np}} \phi_j(\mathbf{x}) u_{j,n+1}^h \quad \text{para } (\mathbf{x}, t) \in Q_n, \quad (2.29)$$

$$v^h(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \sum_{j=1}^{n_{np}} \phi_j(\mathbf{x}) v_{j,n+1}^h \quad \text{para } (\mathbf{x}, t) \in Q_n, \quad (2.30)$$

onde n_{np} é o número de pontos nodais, $\phi_j(\mathbf{x})$ é a função de interpolação para o nó j , $u_{j,n+1}^h$ é o valor nodal para u^h no nó j no tempo t_{n+1} e $v_{j,n+1}^h$ é o correspondente valor nodal da função de ponderação. Na Figura 2.3 apresentamos um esquema, para o domínio unidimensional, com aproximações constantes no tempo.

Considere o operador de salto temporal definido como:

$$[[u^h]] = u^h(t_n^+) - u^h(t_n^-), \quad (2.31)$$

com $u^h(t_n^\pm) = u^h(\mathbf{x}, t_n^\pm) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^\pm} u^h(\mathbf{x}, t_n + \varepsilon)$.

É importante notar que, como a discretização temporal é constante, temos

$$u^h(\mathbf{x}, t_{n+1}) \equiv u^h(\mathbf{x}, t_n^+) = u^h(\mathbf{x}, t_{n+1}^-). \quad (2.32)$$

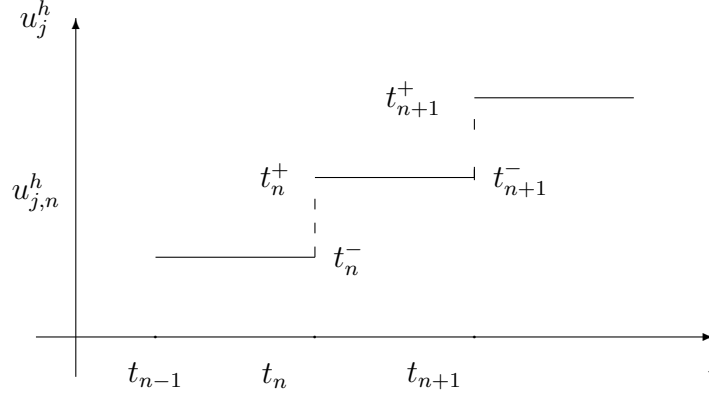


Figura 2.3: Modelo esquemático de um ponto da malha (u_j^h) variando no tempo com aproximação constante

Os subespaços de elementos finitos são definidos por:

$$V_n^h = \{v^h \in C^0(Q_n), v^h|_{Q_n^e} \in \mathbb{P}_k(Q_n^e); v^h = 0 \text{ em } \Upsilon_{Dn}\} \subset H_0^1(Q_n) = V, \quad (2.33)$$

$$S_n^h = \{\mathbf{p}^h \in [C^0(Q_n)]^m, \mathbf{p}^h|_{Q_n^e} \in [\mathbb{P}_k(Q_n^e)]^m; \mathbf{n} \cdot \mathbf{p}^h = 0 \text{ em } \Upsilon_{Nn}\} \subset [L^2(Q_n)]^m, \quad (2.34)$$

onde

$$\Upsilon_{Dn} = \Gamma_D \times I_n, \quad (2.35)$$

$$\Upsilon_{Nn} = \Gamma_N \times I_n. \quad (2.36)$$

2.2.2 Métodos Conformes

Considerando o **PROBLEMA V1** e assumindo que o espaço de Hilbert V , a forma bilinear $\mathbb{B}(\cdot, \cdot)$ e o funcional linear $\mathbb{L}(\cdot)$, satisfaçam as hipóteses do teorema de Lax-Milgram, podemos tomar um subespaço de elementos finitos V^h de V , tal que associado ao **PROBLEMA V1**, descrito na seção (2.1.1), definimos o seguinte problema discreto de minimização:

PROBLEMA V1_h: Encontrar $u^h \in V^h$ tal que

$$J(u^h) \leq J(v^h) \quad \forall v^h \in V^h. \quad (2.37)$$

Dizemos que uma aproximação por elementos finitos é *conforme* quando $V^h \subset V$.

No caso do **PROBLEMA V1** não possuir restrições adicionais, a utilização de aproximações conformes transfere automaticamente as propriedades de continuidade e elipticidade do problema contínuo para o discreto, ou seja, neste caso a existência e unicidade da solução aproximada são herdadas ao problema contínuo. Assim, equivalentemente ao **PROBLEMA V1_h**, podemos definir o problema discreto variacional:

PROBLEMA V2_h: Determinar $u^h \in V^h$ tal que

$$\mathbb{B}(u^h, v^h) = \mathbb{L}(v^h) \quad \forall v^h \in V^h. \quad (2.38)$$

2.3 Sistema de Primeira Ordem e a Formulação de Mínimos Quadrados

A formulação variacional de mínimos quadrados é baseada na soma ponderada dos resíduos de mínimos quadrados da solução aproximada de uma equação diferencial parcial e suas condições de contorno, não envolvendo integração por partes, como o método clássico de Galerkin. Devido a este fato, esta formulação tem a desvantagem de necessitar de um maior grau de regularidade dos espaços de aproximação empregados, quando a ordem da equação é superior a um.

Como alternativa, para reduzir esta necessidade, o que se propõe é que as equações diferenciais parciais que modelam fenômenos físicos, sejam transformadas em um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem equivalente [12, 9, 13, 14, 23]. Com isso, esta formulação normalmente conduz a um número maior de incógnitas nodais a serem determinadas, se comparadas às formulações usuais, como Galerkin e as formulações estabilizadas, dela derivada. Por outro lado, a formulação de mínimos quadrados têm conduzido, em muitos casos, a problemas de minimização de funcionais, mesmo quando as formulações são mistas. Além disso, a matriz, resultante do problema discretizado, é sempre simétrica para equações estacionárias quanto para equações transientes quando a discretização temporal é feita pelo método de diferenças finitas. Esses fatores têm levado a que vários pesquisadores [9, 15, 14, 10] a analisarem esta formulação.

Dessa forma, apresentamos nesta seção os principais conceitos da construção da formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo correspondente a um problema transiente descrito como um sistema de equações de primeira ordem. A for-

mulação variacional é definida em termos da forma bilinear e da aplicação linear como no **PROBLEMA V1_h**. A partir da variação do funcional de mínimos quadrados associado ao sistema, é desenvolvida a análise numérica baseada no Teorema de Lax-Milgram.

2.3.1 Formulação Geral de Mínimos Quadrados

Considere um problema transiente descrito através de equações diferenciais de primeira ordem, onde Ω é o domínio espacial considerado com fronteira Γ e $(0, T)$ é o intervalo aberto de tempo ($T > 0$), descrito da seguinte forma:

Encontrar o vetor de funções $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ tal que

$$\mathbf{M}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad \text{em} \quad \Omega \times (0, T), \quad (2.39)$$

com condição de contorno

$$\mathbf{N}\mathbf{u} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma \times (0, T), \quad (2.40)$$

onde

$$\mathbf{M} = \mathbf{A}_0 \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{A}_1 \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{B}, \quad (2.41)$$

sendo $\mathbf{A}_0$, $\mathbf{A}_1$, $\mathbf{A}_2$, $\mathbf{B}$ matrizes $m \times m$ que descrevem o sistema de equações diferenciais considerado e $\mathbf{N}$ operador diferencial que define as condições do contorno.

Definimos o resíduo do sistema (2.39) por:

$$R(\mathbf{u}) = \mathbf{M}\mathbf{u} - \mathbf{f} \quad \text{em} \quad \Omega \times (0, T). \quad (2.42)$$

Assim, podemos estabelecer o funcional de mínimos quadrados como:

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} R(\mathbf{u})^T R(\mathbf{u}) \, d\Omega \, dt, \quad (2.43)$$

isto é,

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} (\mathbf{M}\mathbf{u} - \mathbf{f})^T (\mathbf{M}\mathbf{u} - \mathbf{f}) \, d\Omega \, dt. \quad (2.44)$$

Ou ainda, equivalentemente,

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{M}\mathbf{u} - \mathbf{f}\|_{\Omega \times (0, T)}^2, \quad (2.45)$$

com

$$\|\cdot\|_{\Omega \times (0, T)}^2 = \int_0^T \int_{\Omega} |\cdot|^2 \, d\Omega \, dt. \quad (2.46)$$

Dessa forma, o problema de minimização deste funcional de mínimos quadrados J é equivalente a encontrar um único elemento $\mathbf{u} \in V$ que minimiza J em V , isto é,

$$J(\mathbf{u}) \leq J(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in V. \quad (2.47)$$

Sejam $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ e $\epsilon \in \mathbb{R}$ um valor arbitrário. Assim, a condição necessária para que $\mathbf{u}$ minimize o funcional J em (2.47), é calcular $\mathbf{u}$ tal que

$$\nabla J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \int_0^T \int_{\Omega} [M(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{v}) - f]^T [M(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{v}) - f] d\Omega dt, \quad (2.48)$$

seja zero, para todo $\mathbf{v} \in V$. Para o caso do método de elementos finitos conformes, definido na seção 2.2.2, a forma discreta para este problema pode ser determinada de maneira usual, como:

Encontrar $\mathbf{u}^h \in V_n^h \subset V$, tal que

$$J(\mathbf{u}^h) \leq J(\mathbf{v}^h) \quad \forall \mathbf{v}^h \in V_n^h. \quad (2.49)$$

Note que, em (2.48), o operador M contém o termo da derivada temporal. Como já foi dito, usualmente este termo é discretizado pelo método de diferenças finitas, resultando em formulações semi-discretas, e mais recentemente, pelo método de elementos finitos. Neste trabalho, apresentamos uma aproximação de elementos finitos descrita a seguir.

2.3.2 Formulação de Mínimos Quadrados Espaço-Tempo Descontínuo

Nesta seção, definimos a formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo baseado na minimização do funcional (2.44) do sistema de equações diferenciais parciais definido por (2.39). Encontrar o mínimo do funcional é equivalente a achar $\mathbf{u}$ na equação:

$$\nabla J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{\Omega} [M(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{v}) - f]^T [M(\mathbf{u} + \epsilon \mathbf{v}) - f] d\Omega dt = 0 \quad (2.50)$$

Dessa forma, utilizamos o método de elementos finitos tanto para a discretização espacial como a temporal, e definimos que as aproximações das variáveis $\mathbf{u}^h = \mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $\mathbf{v}^h = \mathbf{v}^h(\mathbf{x}, t_{n+1})$, são formadas por funções de interpolação constantes em cada “fatia” de tempo, como visto na seção 2.2.1. Dessa forma, sendo estas funções consideradas descontínuas nas interfaces das “fatias”, para garantirmos a imposição da continuidade, devemos adicionar

à equação do sistema que contêm derivadas no tempo, o termo do salto temporal. Assim, integrando em cada intervalo de tempo a equação (2.50), obtemos:

$$\nabla J(\mathbf{u}^h) = \Delta t \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h \right)^T \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{u}^h - \mathbf{f} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h \right)^T \mathbf{A}_0 [\![\mathbf{u}^h]\!] d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{v}^h \in V_n^h, \quad (2.51)$$

onde $[\![\mathbf{u}^h]\!]$, é o termo de salto definido em (2.31). Uma vez que, o termo $\partial \mathbf{u} / \partial t$ presente na expressão (2.41) é zero, devido ao fato das funções de interpolação serem constantes em cada intervalo de tempo, redefinimos em (2.52) o operador $\mathbf{M}$ como:

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_1 \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{B}. \quad (2.52)$$

Portanto, para cada $n = 0, 1, \dots, N-1$, apresentamos o seguinte problema equivalente a (2.51):

$$\begin{aligned} \nabla J(\mathbf{u}^h) &= \Delta t \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{u}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{f}(t_{n+1}^-) \right) d\Omega + \\ &+ \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \mathbf{A}_0 \left(\mathbf{u}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{u}^h(t_n^-) \right) d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{v}^h \in V_n^h, \end{aligned} \quad (2.53)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} &\Delta t \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{u}^h(t_{n+1}^-) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \mathbf{A}_0 \mathbf{u}^h(t_{n+1}^-) d\Omega = \\ &= \Delta t \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \mathbf{f}(t_{n+1}^-) d\Omega + \int_{\Omega} \left(\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}^h(t_{n+1}^-) \right)^T \mathbf{A}_0 \mathbf{u}^h(t_n^-) d\Omega. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Note que, o termo de salto presente nesta última equação é responsável por propagar a informação de um passo de tempo ao seguinte. Esse acréscimo na variação do funcional (2.53), acarreta a perda da simetria da formulação, que é uma importante característica do método clássico mínimos quadrados.

Para simplificar a notação, denotamos $\mathbf{u}^h(t_{n+1}^-) = \mathbf{u}_{n+1}^h$ e $\mathbf{u}^h(t_n^-) = \mathbf{u}_n^h$.

Desse modo, considerando o **PROBLEMA V1_h**, o método de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo nos leva a seguinte formulação variacional:

Para cada $n = 0, \dots, N-1$, devemos achar $\mathbf{u}^h \in V_n^h$ tal que

$$\mathbb{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) = \mathbb{L}(\mathbf{v}^h) \quad \forall \mathbf{v}^h \in V_n^h, \quad (2.55)$$

onde

$$\mathbb{B}(\mathbf{u}^h, \mathbf{v}^h) = \Delta t (\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{u}_{n+1}^h, \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}_{n+1}^h) + (\mathbf{u}_{n+1}^h, \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}_{n+1}^h), \quad (2.56)$$

$$\mathbb{L}(\mathbf{v}^h) = \Delta t (\mathbf{f}_{n+1}, \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}_{n+1}^h) + (\mathbf{u}_n^h, \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{v}_{n+1}^h), \quad (2.57)$$

2.3.3 Modelo Computacional de Elementos Finitos

A seguir, descrevemos o modelo computacional de elementos finitos para a formulação variacional discreta de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo, definida em (2.55).

Podemos escrever o problema discreto no formato matricial, considerando a discretização de elementos finitos da variável $\mathbf{u}^h$ dada por (2.29) na n -ésima “fatia” espaço-tempo, definida de maneira usual na forma vetorial como:

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \sum_{j=1}^{N_e} \phi_j(\mathbf{x}) \begin{bmatrix} u_{1j,(n+1)} \\ u_{2j,(n+1)} \\ \vdots \\ u_{mj,(n+1)} \end{bmatrix} = \Phi \mathbf{U}_{n+1}^e, \quad (2.58)$$

sendo N_e o número de nós do elemento, Φ é a matriz das funções de interpolação, dada por:

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi_1 I & \phi_2 I & \dots & \phi_{N_e} I \end{bmatrix}, \quad (2.59)$$

onde ϕ_i é a função de interpolação associada ao nó i , $\mathbf{I}$ a matriz identidade de ordem m , m é o número de incógnitas de cada nó do elemento, $\mathbf{U}_{n+1}^e$ é o vetor das incógnitas de cada elemento no tempo t_{n+1} , ou seja

$$[\mathbf{U}_{n+1}^e]^T = \begin{bmatrix} u_{11,(n+1)} & u_{21,(n+1)} & \dots & u_{m1,(n+1)} & \dots & u_{mN_e,(n+1)} \end{bmatrix}. \quad (2.60)$$

Assim, trabalhando no nível do elemento, substituindo a aproximação de elementos finitos definida em (2.58) na equação (2.54), obtemos

$$\begin{aligned} & \Delta t \int_{\Omega_e} (\widetilde{\mathbf{M}})^T \widetilde{\mathbf{M}} \Phi \mathbf{U}_{n+1}^e d\Omega_e + \int_{\Omega_e} (\widetilde{\mathbf{M}})^T \mathbf{A}_0 \Phi \mathbf{U}_{n+1}^e d\Omega_e = \\ & = \Delta t \int_{\Omega_e} (\widetilde{\mathbf{M}})^T \mathbf{f}_{n+1}^e d\Omega_e + \int_{\Omega_e} (\widetilde{\mathbf{M}})^T \mathbf{A}_0 \Phi \mathbf{U}_n^e d\Omega_e, \end{aligned} \quad (2.61)$$

que é equivalente ao seguinte sistema

$$(\mathbf{K}_e + \widetilde{\mathbf{K}}_e) \mathbf{U}_{n+1}^e = \mathbf{F}_{n+1}^e + \widetilde{\mathbf{K}}_e \mathbf{U}_n^e, \quad (2.62)$$

onde

$$\mathbf{K}_e = \Delta t \int_{\Omega_e} \left(\mathbf{A}_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \mathbf{B} \Phi \right)^T \left(\mathbf{A}_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \mathbf{B} \Phi \right) d\Omega_e, \quad (2.63)$$

$$\widetilde{\mathbf{K}}_e = \int_{\Omega_e} \left(\mathbf{A}_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \mathbf{B} \Phi \right)^T \mathbf{A}_0 \Phi d\Omega_e, \quad (2.64)$$

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = \Delta t \int_{\Omega_e} \left(\mathbf{A}_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \mathbf{B} \Phi \right)^T \mathbf{f} d\Omega_e. \quad (2.65)$$

Denotando $\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \Phi_x$ e $\frac{\partial \Phi}{\partial y} = \Phi_y$, temos

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_e &= \Delta t \int_{\Omega_e} (\Phi_x^T \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_1 \Phi_x + \Phi_x^T \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_2 \Phi_y + \Phi_x^T \mathbf{A}_1^T \mathbf{B} \Phi) d\Omega_e + \\ &\quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\Phi_y^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_1 \Phi_x + \Phi_y^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_2 \Phi_y + \Phi_y^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{B} \Phi) d\Omega_e + \\ &\quad + \Delta t \int_{\Omega_e} (\Phi^T \mathbf{B}^T \mathbf{A}_1 \Phi_x + \Phi^T \mathbf{B}^T \mathbf{A}_2 \Phi_y + \Phi^T \mathbf{B}^T \mathbf{B} \Phi) d\Omega_e, \end{aligned} \quad (2.66)$$

$$\widetilde{\mathbf{K}}_e = \int_{\Omega_e} (\Phi_x^T \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_0 \Phi + \Phi_y^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_0 \Phi + \Phi^T \mathbf{B}^T \mathbf{A}_0 \Phi) d\Omega_e, \quad (2.67)$$

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = \Delta t \int_{\Omega_e} (\Phi_x^T \mathbf{A}_1^T \mathbf{f}^e + \Phi_y^T \mathbf{A}_2^T \mathbf{f}^e + \Phi^T \mathbf{B}^T \mathbf{f}^e) d\Omega_e. \quad (2.68)$$

Tendo-se as matrizes $\mathbf{K}_e$, $\widetilde{\mathbf{K}}_e$ e $\mathbf{F}_{n+1}^e$ de cada elemento dadas em (2.66), (2.67) e (2.68), respectivamente, as matrizes $\mathbf{K}$, $\widetilde{\mathbf{K}}$ e $\mathbf{F}$ globais podem ser montadas da maneira usual de elementos finitos.

Descrito dessa forma, o método apresenta grande facilidade em sua implementação computacional. O código é desenvolvido, não apenas para uma equação diferencial, mas para um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem. Dessa forma, quando um novo problema é dado, precisamos somente fornecer as matrizes de entrada A_i , B e f ao código computacional.

Capítulo 3

Equação de Advecção-reação

3.1 Introdução

Uma aproximação de elementos finitos no espaço e no tempo, descontínua no tempo, foi proposta em [16] para um problema unidimensional puramente advectivo utilizando a formulação de mínimos quadrados. Resultados da análise de von Neumann mostram excelentes características de estabilidade da formulação proposta para o problema unidimensional analisado. A natural expansão desse trabalho é sua análise para problemas de dimensão maior que um.

Desta forma, o objetivo deste capítulo é o desenvolvimento de um modelo numérico utilizando a formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo para a equação transiente do problema de transporte bidimensional. Para isso inicialmente apresentamos na Seção 3.3, a generalização da formulação escalar de mínimos quadrados, para o problema de advecção-reação. A seguir, resultados da formulação aplicada ao problema unidimensional encontrados em [16] são apresentados na seção 3.4.

Para enfraquecer a exigência de regularidade dos espaços de aproximação exigidos na formulação de mínimos quadrados em sua forma clássica, a equação analisada foi escrita como um sistema de equações diferenciais de primeira ordem e transformada em um problema misto na variável primal da equação considerada e em uma variável auxiliar que aproxima sua derivada. Na seção 3.5, taxas de convergência são obtidas para essa formulação mista e na seção 3.6 resultados numéricos da formulação escalar e da mista são apresentados e comparados.

3.2 Definição do Problema

O problema hiperbólico de advecção-reação transiente, tratado neste trabalho, consiste em encontrar a função escalar $u = u(\mathbf{x}, t)$ tal que

$$u_t + \mathbf{v} \cdot \nabla u + \sigma u = f \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (3.1)$$

com condição de contorno

$$u = 0 \quad \text{em } \Gamma_D^- \times (0, T), \quad (3.2)$$

e condição inicial

$$u = u^0 \quad \text{em } \Omega \quad \text{para } t = 0, \quad (3.3)$$

onde

- $u(\mathbf{x}, t)$ é a quantidade escalar sendo transportada pelo campo de velocidade $\mathbf{v}$;
- $\sigma(\mathbf{x}, t)$ é o coeficiente de reação limitado, com $0 < \sigma(\mathbf{x}, t) \leq c_1$;
- $f : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ é o termo de fonte conhecido;
- $u_t = \frac{\partial u}{\partial t}$.

3.3 Formulação Variacional

Nesta seção, a análise da formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo é realizada para a equação de transporte (3.1), assumindo aproximações de elementos finitos contínuas no espaço e descontínuas no tempo, como descrito no capítulo anterior. A formulação utilizada é baseada no funcional de mínimos quadrados definido em (2.43) de modo que o resíduo do problema transiente em questão é denotado como

$$R(u) = u_t + \mathbf{v} \cdot \nabla u + \sigma u - f, \quad (3.4)$$

e o funcional de mínimos quadrados correspondente a este resíduo é dado por

$$J(u) = \int_0^T \int_{\Omega} (u_t + \mathbf{v} \cdot \nabla u + \sigma u - f)^2 \, d\Omega \, dt. \quad (3.5)$$

Sabemos que a construção da formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo é resultante da minimização deste funcional com respeito a variável $u \in V$ e, desse modo, podemos obter para cada $u^h \in V_n^h \subset V$, a seguinte variação do funcional (3.5):

$$\nabla J(u^h) = \int_0^T \int_{\Omega} (w_t^h + \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h) (u_t^h + \mathbf{v} \cdot \nabla u^h + \sigma u^h - f) \, d\Omega \, dt = 0, \quad (3.6)$$

ou seja,

$$\nabla J(u^h) = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{\Omega} (w_t^h + \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h) (u_t^h + \mathbf{v} \cdot \nabla u^h + \sigma u^h - f) \, dQ_n = 0, \quad (3.7)$$

para todo $w^h \in V_n^h$.

Como a discretização das variáveis u^h e w^h é constante em cada sub-intervalo de tempo I_n , temos $u_t^h = 0$ e $w_t^h = 0$ e, como vimos seção (2.3.2), o termo do salto temporal (2.31), impondo continuidade através das interfaces de cada “fatia” espaço-tempo deve ser adicionada à variação do funcional (3.7). Assim, integrando (3.7) em relação ao tempo, obtemos a seguinte formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo:

Problema $P1_h$: Para $n = 0, 1, \dots, N-1$, queremos encontrar $u^h \in V_n^h$ tal que

$$\begin{aligned} & \Delta t (\mathbf{v} \cdot \nabla u^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-) - f(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-))_{\Omega} + \\ & + ([u^h], \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-))_{\Omega} = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

para todo $w^h \in V_n^h$.

Como já mencionado, o termo do salto $\llbracket u^h \rrbracket = u^h(t_n^+) - u^h(t_n^-)$ presente última parcela de (3.8) transporta a informação da “fatia” prévia de tempo como entrada para a “fatia” seguinte.

Por simplicidade, considere $(\cdot, \cdot)_{\Omega} = (\cdot, \cdot)$. Assim, o *Problema $P1_h$* pode ser descrito como:

Problema $P1_t$: Para $n = 0, 1, \dots, N-1$, achar $u^h \in V_n^h$ tal que

$$\mathbb{B}_{1_t}(u^h, w^h) = \mathbb{L}_{1_t}(w^h) \quad \forall w^h \in V_n^h, \quad (3.9)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{1_t}(u^h, w^h) &= \Delta t (\mathbf{v} \cdot \nabla u^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &+ (u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)), \end{aligned} \quad (3.10)$$

e

$$\begin{aligned}\mathbb{L}_{1_t}(w^h) &= \Delta t(f(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + (u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)).\end{aligned}\quad (3.11)$$

A seguir, empregamos o método θ , apresentado nos trabalhos [16, 24], que interpola os valores nodais nos extremos de cada sub-intervalo de tempo. Isso é feito, para possibilitar diferentes aproximações no intervalo de tempo $I_n = [t_n, t_{n+1}]$, escrevendo a equação (3.9) em algum $t = t_{n+\theta}$, com $\theta \in [0, 1]$. Neste caso, podemos definir a seguinte aproximação:

$$u^h(\mathbf{x}, t_{n+\theta}) = \theta u^h(t_{n+1}^-) + (1 - \theta) u^h(t_n^-). \quad (3.12)$$

Dessa forma, definimos o novo *Problema* $P1_\theta$, descrito no tempo $t_{n+\theta}$, como:

Problema $P1_\theta$: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, encontrar $u^h \in V_n^h$ tal que

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h) = \mathbb{L}_{1_\theta}(w^h) \quad \forall w^h \in V_n^h, \quad (3.13)$$

onde

$$\begin{aligned}\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h) &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla u^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \theta (u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)),\end{aligned}\quad (3.14)$$

$$\begin{aligned}\mathbb{L}_{1_\theta}(w^h) &= (\theta - 1) \Delta t (\mathbf{v} \cdot \nabla u^h(t_n^-) + \sigma u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad \Delta t (f(t_{n+\theta}), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \theta (u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)).\end{aligned}\quad (3.15)$$

Note que, como o *Problema* $P1_\theta$ está definido no intervalo de tempo $[t_n, t_{n+\theta}]$, o termo do salto fica descrito por:

$$\theta ([u^h], \mathbf{v} \cdot \nabla w^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)). \quad (3.16)$$

Por simplicidade de notação, denotamos $u^h = u^h(t_{n+1}^-)$ e $w^h = w^h(t_{n+1}^-)$. A existência e unicidade para a solução deste problema pode ser garantida pelo Teorema de Lax-Milgram (1), como se mostra a seguir.

Lema 1 (*Continuidade de $P1_\theta$*)

Existe uma constante $M_1 > 0$ tal que

$$|\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| \leq M_1 \|u^h\|_{\mathbf{v}} \|w^h\|_{\mathbf{v}} \quad \forall u^h, w^h \in V_n^h. \quad (3.17)$$

Demonstração: Da definição de $\mathbb{B}_{1_\theta}(\cdot, \cdot)$ em (3.14), temos

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h) = \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla u^h + \sigma u^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h) + \theta (u^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h). \quad (3.18)$$

Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$|(u^h, w^h)| \leq \|u^h\| \|w^h\| \quad \forall u^h, w^h \in V_n^h, \quad (3.19)$$

em (3.18), temos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq \theta \Delta t \|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h + \sigma u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h\| + \\ &\quad + \theta \|u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h\|. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Usando desigualdade triangular

$$\|u^h + w^h\| \leq \|u^h\| + \|w^h\| \quad \forall u^h, w^h \in V_n^h, \quad (3.21)$$

obtemos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq \theta \Delta t (\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + \|\sigma u^h\|) (\|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\| + \|\sigma w^h\|) + \\ &\quad + \theta \|u^h\| (\|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\| + \|\sigma w^h\|). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Sabendo que $\sigma > 0$ e reagrupando os termos de (3.22), segue

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq (\theta \Delta t \|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + (\sigma \theta \Delta t + \theta) \|u^h\|) \|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\| + \\ &\quad + (\sigma \theta \Delta t \|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + (\sigma^2 \theta \Delta t + \theta \sigma) \|u^h\|) \|w^h\|. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Sejam $C_1 = \max\{\theta \Delta t, \theta(\sigma \Delta t + 1)\}$ e $C_2 = \max\{\sigma \theta \Delta t, \sigma \theta(\sigma \Delta t + 1)\}$. Dessa forma,

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq C_1 (\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + \|u^h\|) \|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\| + \\ &\quad + C_2 (\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + \|u^h\|) \|w^h\|. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Colocando os termos $\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + \|u^h\|$ de (3.24) em evidência, temos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq C_1 C_2 (\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| + \|u^h\|) \\ &\quad (\|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\| + \|w^h\|), \end{aligned} \quad (3.25)$$

ou equivalentemente,

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| &\leq 2C_1C_2 \left(\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\|^2 + \|u^h\|^2 \right)^{1/2} \\ &\quad \left(\|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\|^2 + \|w^h\|^2 \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Portanto,

$$|\mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h)| \leq M_1 \|u^h\|_{\mathbf{v}} \|w^h\|_{\mathbf{v}}, \quad (3.27)$$

onde $M_1 = 2C_1C_2$ e $\|\cdot\|_{\mathbf{v}}$ denota a norma:

$$\|u^h\|_{\mathbf{v}} = \left(\|\mathbf{v} \cdot \nabla u^h\|^2 + \|u^h\|^2 \right)^{1/2}. \quad (3.28)$$

Lema 2 (*Coercividade de $P1_\theta$*)

Existe uma constante $\alpha > 0$ tal que

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) \geq \alpha \|w^h\|_{\mathbf{v}}^2 \quad \forall w^h \in V_n^h. \quad (3.29)$$

Demonstração: Expandindo $\mathbb{B}_{1_\theta}(\cdot, \cdot)$, temos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h) + \theta (w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h + \sigma w^h) \\ &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + 2\Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, \sigma w^h) + \Delta t \theta (\sigma w^h, \sigma w^h) + \\ &\quad + \theta (w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + \theta (w^h, \sigma w^h). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como $\sigma > 0$, podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + (2\Delta t \theta \sigma + \theta) (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, w^h) + \\ &\quad + \Delta t \theta (\sigma w^h, \sigma w^h) + \theta (w^h, \sigma w^h). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Aplicando o teorema de Green, no segundo termo de (3.31), obtemos

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, w^h) = -(w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} w^h, w^h)_{\Gamma_n} - (\operatorname{div} \mathbf{v} w^h, w^h), \quad (3.32)$$

ou seja,

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, w^h) = \frac{1}{2} \{ (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} w^h, w^h)_{\Gamma_n} - (\operatorname{div} \mathbf{v} w^h, w^h) \}. \quad (3.33)$$

Assim, substituindo (3.33) em (3.31) segue

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} w^h, w^h)_{\Gamma_n} - \\ &\quad - (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) (\operatorname{div} \mathbf{v} w^h, w^h) + \Delta t \theta (\sigma w^h, \sigma w^h) + \\ &\quad + \theta (w^h, \sigma w^h). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Sabendo que $\Upsilon_n = \Upsilon_{D_n}^- \cup \Upsilon_{D_n}^+$ e sendo $w^h = 0$ em $\Upsilon_{D_n}^-$, o termo da equação (3.34) referente ao contorno Υ_n pode ser descrito por:

$$(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} w^h, w^h)_{\Upsilon_n} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} w^h, w^h)_{\Upsilon_{D_n}^+}. \quad (3.35)$$

Como $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$ em $\Upsilon_{D_n}^+$, a igualdade (3.35) é positiva. Assim, desprezando a segunda parcela de (3.34) e reordenando as parcelas restantes, obtemos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) \geq & \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \nabla w^h, \mathbf{v} \cdot \nabla w^h) + (\Delta t \theta \sigma^2 + \theta \sigma) (w^h, w^h) - \\ & - (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) (\operatorname{div} \mathbf{v} w^h, w^h). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Suponha que

$$\theta \sigma (\Delta t \sigma + 1) - \theta (\Delta t \sigma + 1/2) \operatorname{div} \mathbf{v} > 0. \quad (3.37)$$

Assim, considerando

$$\alpha = \min \{ \Delta t \theta, \theta \sigma (\Delta t \sigma + 1) - (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \operatorname{div} \mathbf{v} \}, \quad (3.38)$$

obtemos

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) \geq \alpha [\|\mathbf{v} \cdot \nabla w^h\|^2 + \|w^h\|^2], \quad (3.39)$$

ou seja,

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(w^h, w^h) \geq \alpha \|w^h\|_{\mathbf{v}}^2. \quad (3.40)$$

Note que, considerando o caso em que $\sigma = 0$ na definição do problema bidimensional (3.2), teríamos em (3.37) a condição $\frac{\theta \operatorname{div} \mathbf{v}}{2} < 0$. Caso contrário, não seria possível a demonstração desta forma, para a estabilidade do problema variacional (3.13).

3.3.1 Análise Numérica

Lema 3 (*Consistência de $P1_\theta$*)

A solução exata u , satisfaz a formulação variacional discreta

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(u, w^h) = \mathbb{L}_{1_\theta}(w^h) \quad \forall w^h \in V_n^h. \quad (3.41)$$

Demonstração: Se, em (3.13), a variável u^h for substituída pela solução exata u , a igualdade continua válida.

Lema 4 (*Ortogonalidade do erro de $P1_\theta$*)

Seja $e = u - u^h$. Então,

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(e, w^h) = 0 \quad \forall w^h \in V_n^h. \quad (3.42)$$

Demonstração: De fato, subtraindo (3.41) de (3.13), temos

$$\begin{aligned}\mathbb{B}_{1_\theta}(e, w^h) &= \mathbb{B}_{1_\theta}(u, w^h) - \mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, w^h) \\ &= \mathbb{L}_{1_\theta}(w^h) - \mathbb{L}_{1_\theta}(w^h) = 0.\end{aligned}\tag{3.43}$$

Lema 5 (*Melhor aproximação de $P1_\theta$*) *Lema de Céa: Existe uma constante β_1 , independente do subespaço V_n^h , tal que*

$$\|u - u^h\|_{\mathbf{v}} \leq \beta_1 \|u - \tilde{u}^h\|_{\mathbf{v}} \quad \forall \tilde{u}^h \in V_n^h,\tag{3.44}$$

onde $\tilde{u}^h$ é o interpolante de u^h .

Demonstração: De (3.29), temos

$$\alpha \|u^h\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{1_\theta}(u^h, u^h) \quad \forall u^h \in V_n^h.\tag{3.45}$$

Assim,

$$\alpha \|u - u^h\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, u - u^h).\tag{3.46}$$

Somando e subtraindo o interpolante $\tilde{u}^h \in V_n^h$ em (3.46), obtemos

$$\alpha \|u - u^h\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, u - \tilde{u}^h + \tilde{u}^h - u^h).\tag{3.47}$$

Pela linearidade de $\mathbb{B}_{1_\theta}(\cdot, \cdot)$, segue

$$\alpha \|u - u^h\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, u - \tilde{u}^h) + \mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, \tilde{u}^h - u^h).\tag{3.48}$$

Por (3.42), temos que

$$\mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, \tilde{u}^h - u^h) = 0.\tag{3.49}$$

Dessa forma, pela continuidade (3.18), verificamos

$$\alpha \|u - u^h\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{1_\theta}(u - u^h, u - \tilde{u}^h) \leq M_1 \|u - u^h\|_{\mathbf{v}} \|u - \tilde{u}^h\|_{\mathbf{v}}.\tag{3.50}$$

Portanto,

$$\|u - u^h\|_{\mathbf{v}} \leq \beta_1 \|u - \tilde{u}^h\|_{\mathbf{v}} \quad \forall \tilde{u}^h \in V^h,\tag{3.51}$$

onde $\beta_1 = M_1/\alpha$.

Levando em conta a expressão do Lema de Céa (3.51), as propriedades de interpolação definidas no Apêndice e admitindo que a solução exata u , seja suficientemente regular,

obtemos as seguinte estimativa de erro de interpolação:

$$\|u - u^h\| + \|\mathbf{v} \cdot \nabla u - \mathbf{v} \cdot \nabla u^h\| \leq Ch^k \|u\|_{k+1}. \quad (3.52)$$

Note que a taxa de erro encontrada é a mesma comparada com o método clássico de Galerkin, como é bem conhecido na literatura [25]. Os resultados numéricos para este problema fornecem soluções apresentando oscilações espúrias, que não pertencem ao problema físico, quando a malha não é suficientemente refinada. Exemplos numéricos que comprovam esta análise serão exibidos mais adiante.

3.4 Um Caso Particular: Um Problema Unidimensional

A formulação foi analisada para o problema unidimensional com $\sigma = 0$ em [16], obtendo excelentes resultados. Nesta seção, a equação de diferenças associada a aplicação desta formulação com aproximação linear no domínio espacial é apresentada e é feito a análise de estabilidade de von Neumann. Resultados mostram uma formulação incondicionalmente estável para $\theta \geq 1/2$ e um número de Courant arbitrário e resultados ótimos para $\theta = 1/2$ e Courant=1.

Considere o problema transiente puramente advectivo descrito em um domínio unidimensional $\Omega = [0, 1]$, definido como:

Encontrar $u = u(x, t)$, tal que

$$u_t + v u_x = f \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (3.53)$$

com condição de contorno

$$u = 0 \quad \text{em } \Gamma_D^- \times (0, T), \quad (3.54)$$

e condição inicial

$$u(\mathbf{x}, 0) = u^0 \quad \text{em } \Omega, \quad (3.55)$$

com $u(x, t)$ e $f : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ definidos na seção 3.3.

O funcional de mínimos quadrados correspondente ao problema discreto unidimensional

(3.53) é dado por:

$$J(u^h) = \int_0^T \int_{\Omega} (u_t^h + v u_x^h - f)^2 d\Omega dt, \quad (3.56)$$

e a variação deste funcional com respeito a variável $u^h \in V_n^h \subset V$ é determinada por:

$$\nabla J(u^h) = \int_0^T \int_{\Omega} (w_t^h + v w_x^h) (u_t^h + v u_x^h - f) d\Omega dt = 0, \quad (3.57)$$

ou seja,

$$\nabla J(u^h) = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{\Omega} (w_t^h + v w_x^h) (u_t^h + v u_x^h - f) dQ_n = 0 \quad \forall w^h \in V_n^h. \quad (3.58)$$

Como descrito na seção 3.3, as variáveis u^h e w^h são constantes em cada intervalo de tempo I_n , temos que $u_t^h = 0$ e $w_t^h = 0$. Assim, integrando a equação (3.58) em relação ao tempo e adicionando o termo do salto, obtemos a seguinte formulação variacional de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo:

Problema P_h : Para cada $n = 0, 1, \dots, N-1$, calcular $u^h \in V_n^h$ tal que

$$\Delta t \int_{\Omega} [v u_x^h(t_{n+1}^-) - f(t_{n+1}^-)] v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega + \int_{\Omega} |[u^h]| v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega = 0, \quad (3.59)$$

para todo $w^h \in V_n^h$.

Equivalentemente, podemos definir o *Problema P_h* da seguinte forma:

Problema P_t : Encontrar $u^h \in V_n^h$, para cada $n = 0, 1, \dots, N-1$, tal que

$$\mathbb{B}(u^h, w^h) = \mathbb{L}(w^h) \quad \forall w^h \in V_n^h, \quad (3.60)$$

onde

$$\mathbb{B}(u^h, w^h) = \Delta t \int_{\Omega} v u_x^h(t_{n+1}^-) v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega + \int_{\Omega} u^h(t_{n+1}^-) v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega \quad (3.61)$$

e

$$\mathbb{L}(w^h) = \Delta t \int_{\Omega} f(t_{n+1}^-) v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega + \int_{\Omega} u^h(t_n^-) v w_x^h(t_{n+1}^-) d\Omega. \quad (3.62)$$

Substituindo as aproximações de elementos finitos descritas em (2.29) e (2.30) na equação

variacional (3.60), obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{n_{np}} \left(\Delta t \int_{\Omega} (v \phi_{x_j}) (v \phi_{x_i}) d\Omega + \int_{\Omega} (v \phi_{x_i}) d\Omega \right) u_{j,n+1}^h = \\ & = \Delta t \int_{\Omega} f(t_{n+1}) (v \phi_{x_i}) d\Omega + \int_{\Omega} \sum_{j=1}^{n_{np}} \phi_j (v \phi_{x_i}) d\Omega u_{j,n}^h, \end{aligned} \quad (3.63)$$

para $i = 1, \dots, n_{np}$, onde n_{np} é o número de pontos nodais. Este esquema é implícito e a solução pode ser computada sucessivamente em uma sequência de passos. Esse método pode ser escrito como uma equação de diferenças, a nível do elemento, designada por:

$$(\Delta t \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{K}}) \mathbf{U}_{n+1}^e = \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{U}_n^e + \Delta t \mathbf{F}_{n+1}^e, \quad (3.64)$$

com

$$\mathbf{K} = K_{ij} = \int_{\Omega_e} (v \phi_{x_j}) (v \phi_{x_i}) d\Omega_e, \quad (3.65)$$

$$\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{K}_{ij} = \int_{\Omega_e} \phi_j (v \phi_{x_i}) d\Omega_e, \quad (3.66)$$

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = F_i = \int_{\Omega_e} f(t_{n+1}) (v \phi_{x_i}) d\Omega_e, \quad (3.67)$$

para $i, j = 1, \dots, n_{np}$. Escrevendo a equação (3.64) como um esquema de Euler implícito, segue

$$\mathbf{U}_{n+1}^e = \mathbf{U}_n^e + \Delta t \tilde{\mathbf{F}}_{n+1}^e, \quad (3.68)$$

onde

$$\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}^e = (\tilde{\mathbf{K}})^{-1} [\mathbf{F}_{n+1}^e - \mathbf{K} \mathbf{U}_{n+1}^e] \quad (3.69)$$

Para possibilitar diferentes aproximações no intervalo de tempo I_n , vamos reescrever a equação (3.64) em algum tempo $t = t_{n+\theta}$, dado seguinte maneira:

$$\mathbf{U}_{n+1}^e = \mathbf{U}_n^e + \Delta t (\tilde{\mathbf{K}})^{-1} [\mathbf{F}_{n+\theta}^e - \mathbf{K} \mathbf{U}_{n+\theta}^e], \quad (3.70)$$

onde $\theta \in [0, 1]$ e $\mathbf{U}_{n+\theta}^e$ é aproximado por:

$$\mathbf{U}_{n+\theta}^e = \theta \mathbf{U}_{n+1}^e + (1 - \theta) \mathbf{U}_n^e. \quad (3.71)$$

Dessa forma, utilizando a aproximação descrita por (3.71) na equação (3.63), obtemos

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{n_{np}} \left(\theta \Delta t \int_{\Omega_e} (v \phi_{x_j}) (v \phi_{x_i}) d\Omega_e + \int_{\Omega_e} (v \phi_{x_i}) d\Omega_e \right) u_{j,n+1}^h = \\
& = \sum_{j=1}^{n_{np}} \left(-(1-\theta) \Delta t \int_{\Omega_e} (v \phi_{x_j}) (v \phi_{x_i}) d\Omega_e + \int_{\Omega_e} (v \phi_{x_i}) d\Omega_e \right) u_{j,n}^h + \\
& + \Delta t \int_{\Omega_e} f(t_{n+\theta}) (v \phi_{x_i}) d\Omega_e.
\end{aligned} \tag{3.72}$$

Note que, para $\theta = 1$ em (3.72), temos um método implícito e, para $\theta = 0,5$, obtemos o método de Crank-Nicolson.

3.4.1 Resultados da Análise de Estabilidade

A equação de diferenças associada a igualdade (3.72) usando funções lineares com espaçamento uniforme Δx é dada por:

$$\begin{aligned}
& \frac{\Delta t v^2}{\Delta x} \theta (u_{j+1,n+1} - 2u_{j,n+1} + u_{j-1,n+1}) + \frac{v}{2} (u_{j+1,n+1} - u_{j-1,n+1}) = \\
& = \frac{\Delta t v^2}{\Delta x} (1-\theta) (u_{j+1,n} - 2u_{j,n} + u_{j-1,n}) + \frac{v}{2} (u_{j+1,n} - u_{j-1,n}).
\end{aligned} \tag{3.73}$$

O valor nodal da variável u no nó j e no tempo n da solução de elementos finitos pode ser escrito como:

$$u_{j,n} = a_n e^{ikj\Delta x}, \tag{3.74}$$

onde k é o número de onda com comprimento $\lambda = 2\pi/k$ e $i = \sqrt{-1}$.

Assim, substituindo (3.74) na equação (3.73), temos

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} \theta (e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{ikj\Delta x} + e^{ik(j-1)\Delta x}) + \frac{v}{2} (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x}) \right] a_{n+1} \\
& = \left[\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} (1-\theta) (e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{ikj\Delta x} + e^{ik(j-1)\Delta x}) + \frac{v}{2} (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x}) \right] a_n.
\end{aligned} \tag{3.75}$$

Dessa forma, podemos escrever (3.75) na forma $a_{n+1} = G a_n$, onde G é o fator de amplificação definido, neste caso, por:

$$G = \frac{\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} (1-\theta) (e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{ikj\Delta x} + e^{ik(j-1)\Delta x}) + \frac{v}{2} (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x})}{\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} \theta (e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{ikj\Delta x} + e^{ik(j-1)\Delta x}) + \frac{v}{2} (e^{ik(j+1)\Delta x} - e^{ik(j-1)\Delta x})}. \tag{3.76}$$

Sabendo-se que $e^{a+ib} = \cos a + i \sin b$, a expressão (3.76) pode ser simplificada fornecendo:

$$G = \frac{\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} (1 - \theta) 2 (\cos \xi - 1) + v (i \sin \xi)}{\frac{\Delta t v^2}{\Delta x} \theta 2 (\cos \xi - 1) + v (i \sin \xi)}, \quad (3.77)$$

com $\xi = k \Delta x$.

Multiplicando o numerador e o denominador de (3.77) pela expressão:

$$\frac{-\Delta t}{\Delta x} \theta 2 (1 - \cos \xi) - \frac{1}{v} i \sin \xi, \quad (3.78)$$

podemos reescrever o fator de amplificação G como:

$$G = \frac{Z_1}{Z_2}, \quad (3.79)$$

onde

$$Z_1 = (\sin^2 \xi + 4c^2 \theta (1 - \theta) (1 - \cos \xi)^2) - 2(c\theta - c(1 - \theta) (1 - \cos \xi) \sin \xi) i \quad (3.80)$$

e

$$Z_2 = (2c\theta(1 - \cos \xi))^2 + \sin^2 \xi, \quad (3.81)$$

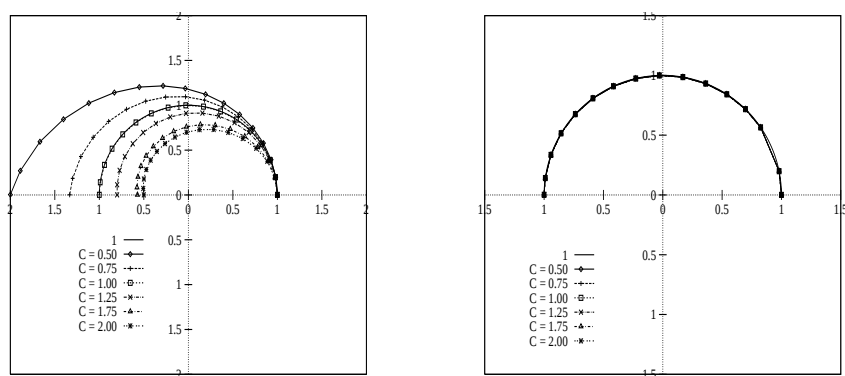
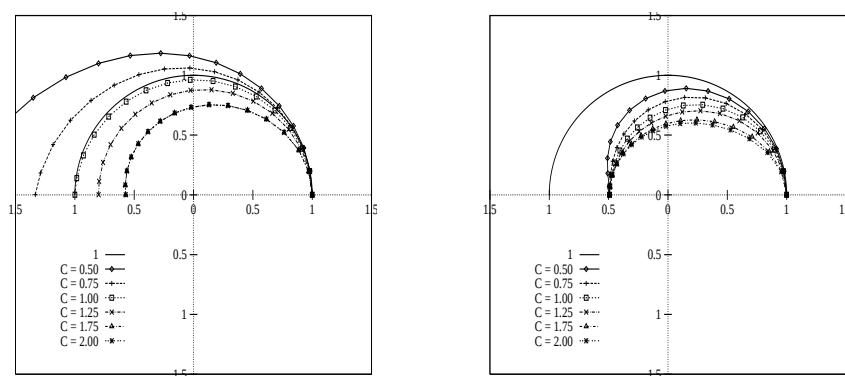
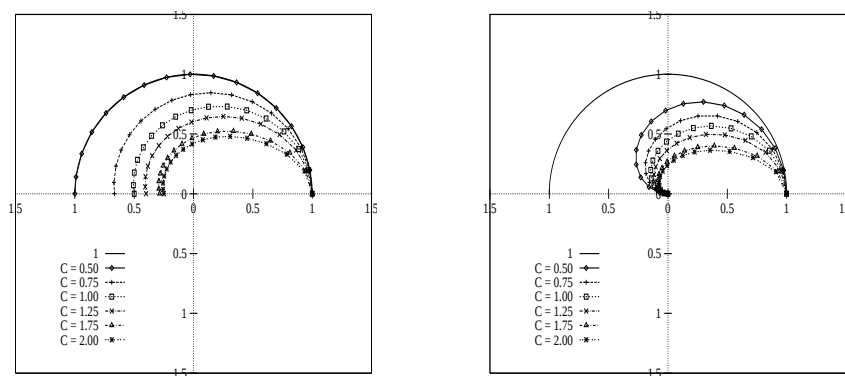
sendo $c = CFL = \frac{v \Delta t}{\Delta x}$ o número de Courant-Friedrichs-Levi.

Se $|Z_2| \geq |Z_1|$ então $|G| \leq 1$ e o esquema é estável. Neste caso, a afirmação é válida para $0.5 \leq \theta \leq 1.0$ e para qualquer CFL .

O controle de oscilações, influenciado pelo erro de fase, pode ser expresso como:

$$\epsilon_\xi = \frac{\tan^{-1} (\text{Im} G / \text{Real} G)}{c\xi}. \quad (3.82)$$

Para confirmar a análise de von-Neumann, apresentamos a seguir resultados do fator de amplificação e erro de fase para $\theta = 0,5$; $\theta = 0,67$ e $\theta = 1,0$; respectivamente.

Figura 3.1: Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 0,5$ Figura 3.2: Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 0,67$ Figura 3.3: Erro de fase e fator de amplificação para $\theta = 1,0$

3.4.2 Exemplo 1: Problema unidimensional escalar de advecção

Considere o problema modelo de advecção pura definido no domínio unidimensional $[0, 1]$ com o campo de velocidade constante $v = 1$ dado por:

$$u_t + v u_x = 0, \quad (3.83)$$

com condição de contorno

$$u(0, t) = 1, \quad (3.84)$$

e condição inicial

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{para } x = 0 \\ 0, & \text{para } x \in (0, 1]. \end{cases} \quad (3.85)$$

A Figura 3.4 mostra os resultados para uma discretização com 10 elementos lineares, θ iguais 0,5, 0,67 e 1,0 e CFL iguais 0,5; 1,0 e 2,0 no tempo 0,6.

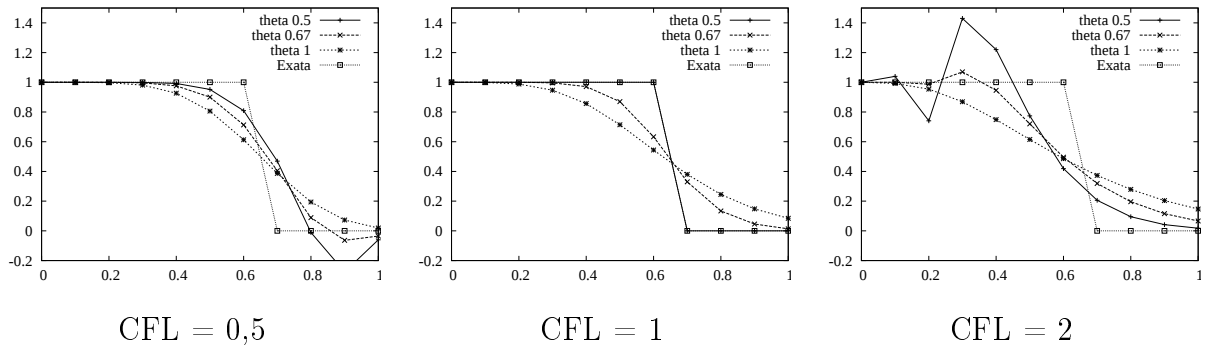


Figura 3.4: Problema escalar unidimensional de advecção em $t = 0,6$

3.5 Formulação Variacional Mista

Como foi visto anteriormente, a taxa de erro encontrada para o problema escalar é comparada ao resultado fornecido pela formulação clássica de Galerkin. Dessa forma, o objetivo desta seção é apresentar uma alternativa para melhorar essas taxas de convergências encontradas, reescrevendo a equação original de transporte, descrita em (3.1), como um sistema equivalente de primeira ordem, introduzindo uma variável auxiliar ao problema.

O problema variacional formulado em dois campos é denominado problema misto. A construção dos métodos mistos de elementos finitos são baseados na aproximação simultânea da variável primal e a auxiliar que, de forma geral têm a necessidade de compatibilidade dos espaços empregados. A dificuldade neste caso reside em encontrar espaços de elementos finitos que satisfaçam a existência e unicidade de solução imposta pela condição de LBB. Além disso, propriedades do problema contínuo, tais como continuidade e coercividade, podem não ser transferidas ao problema discreto, acarretando diversos problemas nas soluções numéricas.

Para satisfazer tais condições de compatibilidade entre os espaços, sem obedecer a condição (LBB), métodos mistos estabilizados de elementos finitos têm sido desenvolvidos. Basicamente, estes métodos acrescentam termos de estabilização baseados no resíduos às formulações variacionais mistas clássicas do problema. Assim, o problema original de ponto de sela é convertido em um problema de minimização.

Neste trabalho, como será visto a seguir, a formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo definida recai em um problema de minimização de um funcional e, para este caso, os interpolantes para as variáveis envolvidas são de mesma ordem e não necessitam satisfazer a condição LBB. Apresentamos, nesta seção, a análise numérica para a formulação, de modo a assegurarmos a existência e unicidade de sua solução assumida pelo Teorema de Lax-Milgram.

Para escrever a equação original de advecção-reação (3.1) como um sistema equivalente de primeira ordem, definimos a variável auxiliar $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ como $\mathbf{p} = \nabla u$. Dessa forma, obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais equivalente de primeira ordem:

$$\begin{aligned} u_t + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} + \sigma u &= f & \text{em } \Omega \times (0, T), \\ \mathbf{p} - \nabla u &= 0 & \text{em } \Omega \times (0, T), \\ u &= 0 & \text{em } \Gamma_D^- \times (0, T), \\ u &= u^0 & \text{em } \Omega \text{ para } t = 0. \end{aligned} \quad (3.86)$$

O funcional de mínimos quadrados correspondente ao problema discreto (3.86) é definido como:

$$\tilde{J}(u^h, \mathbf{p}^h) = \int_0^T \int_{\Omega} \left[(u_t^h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h + \sigma u^h - f)^2 + (\mathbf{p}^h - \nabla u^h)^2 \right] d\Omega dt. \quad (3.87)$$

A formulação variacional mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo é resultante da minimização deste funcional em relação as variáveis discretas $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$. Dessa forma, a variação do funcional (3.87) é dada por

$$\begin{aligned} \nabla \tilde{J}(u^h, \mathbf{p}^h) &= \int_0^T \int_{\Omega} \left[(u_t^h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) (u_t^h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h + \sigma u^h - f) + \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{q}^h - \nabla w^h) (\mathbf{p}^h - \nabla u^h) \right] d\Omega dt = 0, \end{aligned} \quad (3.88)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \nabla \tilde{J}(u^h, \mathbf{p}^h) = & \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{\Omega} [(w_t^h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) (u_t^h + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h + \sigma u^h - f) + \\ & + (\mathbf{q}^h - \nabla w^h) (\mathbf{p}^h - \nabla u^h)] dQ_n = 0, \end{aligned} \quad (3.89)$$

onde $(w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h$.

O termo do salto temporal (2.31), impondo continuidade através das interfaces de cada “fatia” espaço-tempo também deve ser adicionada à variação do funcional definido em (3.89). Mais uma vez, como as incógnitas u^h e w^h são constantes em cada subintervalo de tempo, temos $u_t^h = 0$ e $w_t^h = 0$. Portanto, integrando (3.89) em relação ao tempo, obtemos a formulação variacional mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo, aplicada ao problema descrito pelo sistema de equações de primeira ordem (3.86):

Problema P2_h: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, achar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\begin{aligned} & \Delta t (\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-) - f(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-))_{\Omega} + \\ & + ([u^h], \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-))_{\Omega} + \\ & + \Delta t (\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \nabla w^h(t_{n+1}^-))_{\Omega} = 0, \end{aligned} \quad (3.90)$$

$\forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h$.

Assim, de modo equivalente, podemos definir o seguinte problema variacional:

Problema P2_t: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, devemos achar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\mathbb{B}_{2t}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{L}_{2t}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (3.91)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2t}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = & \Delta t (\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ & + (u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ & + \Delta t (\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \nabla w^h(t_{n+1}^-)) \end{aligned} \quad (3.92)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbb{L}_{2t}(w^h, \mathbf{q}^h) = & (u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ & + \Delta t (f(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)). \end{aligned} \quad (3.93)$$

Também neste caso, para possibilitar diferentes aproximações no intervalo de tempo $I_n = [t_n, t_{n+1}]$, escrevemos a parcela referente a equação evolutiva (3.86) em (3.91) para algum $t = t_{n+\theta}$, com $\theta \in [0, 1]$ e definimos as seguintes aproximações:

$$u^h(\mathbf{x}, t_{n+\theta}) = \theta u^h(t_{n+1}^-) + (1 - \theta) u^h(t_n^-), \quad (3.94)$$

$$\mathbf{p}^h(\mathbf{x}, t_{n+\theta}) = \theta \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + (1 - \theta) \mathbf{p}^h(t_n^-). \quad (3.95)$$

Numa tentativa de avaliar a solução obtida para o problema escalar transiente, vamos ponderar o último termo de (3.92), por um parâmetro estabilizador $\tau > 0$. Desse modo, achar a solução do problema (3.91), é equivalente a determinar a solução do problema seguinte:

Problema $P2_\theta$: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, encontrar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{L}_{2_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (3.96)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \theta (u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \Delta t \tau (\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \nabla w^h(t_{n+1}^-)) \end{aligned} \quad (3.97)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbb{L}_{2_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) &= \Delta t (\theta - 1) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h(t_n^-) + \sigma u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \theta (u^h(t_n^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ &\quad + \Delta t (f(t_{n+1}^-), \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)). \end{aligned} \quad (3.98)$$

A existência e unicidade da a solução do *Problema $P2_\theta$* pode ser garantida pelo teorema de Lax-Milgram (1), como se mostra a seguir.

Lema 6 (*Continuidade de $P2_\theta$*)

Existe uma constante $M_2 > 0$ tal que

$$|\mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq M_2 \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{\mathbf{v}}, \quad (3.99)$$

$$\forall (u^h, \mathbf{p}^h), (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h.$$

Demonstração: Da definição de $\mathbb{B}_{2_\theta}\{\cdot; \cdot\}$, sabemos que

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h + \sigma u^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \theta (u^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\ &\quad + \Delta t \tau (\mathbf{p}^h - \nabla u^h, \mathbf{q}^h - \nabla w^h). \end{aligned} \quad (3.100)$$

Assim, pela desigualdade de Cauchy-Schwartz (3.19), temos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| &= \Delta t \theta \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h + \sigma u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h\| + \theta \|u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h\| + \\ &\quad + \Delta t \tau \|\mathbf{p}^h - \nabla u^h\| \|\mathbf{q}^h - \nabla w^h\|. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Usando a desigualdade triangular (3.21) em cada parcela de (3.101), obtemos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| &\leq \Delta t \theta (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| + \|\sigma u^h\|) (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\sigma w^h\|) + \\ &\quad + \theta \|u^h\| (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\sigma w^h\|) + \\ &\quad + \Delta t \tau (\|\mathbf{p}^h\| + \|\nabla u^h\|) (\|\mathbf{q}^h\| + \|\nabla w^h\|). \end{aligned} \quad (3.102)$$

Fazendo a multiplicação dos termos de (3.102), reagrupando os termos restantes e adicionando os termos positivos

$$\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|\mathbf{q}^h\|, \|\mathbf{p}^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|, \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|\nabla w^h\|, \|w^h\| \|\mathbf{p}^h\|, \quad (3.103)$$

$$\|\nabla u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|, \|u^h\| \|\mathbf{q}^h\|, \|\nabla u^h\| \|w^h\| \text{ e } \|u^h\| \|\nabla w^h\|, \quad (3.104)$$

segue

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| &\leq (\Delta t \theta \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|\mathbf{q}^h\| + \\ &\quad + \|\mathbf{p}^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \Delta t \tau \|\mathbf{p}^h\| \|\mathbf{q}^h\|) + \\ &\quad + (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|\nabla w^h\| + \Delta t \theta \sigma \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| \|w^h\| + \\ &\quad + \Delta t \tau \|\mathbf{p}^h\| \|\nabla w^h\| + \|w^h\| \|\mathbf{p}^h\|) + \\ &\quad + (\|\nabla u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \Delta t \tau \|\nabla u^h\| \|\mathbf{q}^h\| + \\ &\quad + (\Delta t \theta \sigma + \theta) \|u^h\| \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|u^h\| \|\mathbf{q}^h\|) + \\ &\quad + (\Delta t \tau \|\nabla u^h\| \|\nabla w^h\| + \|\nabla u^h\| \|w^h\| + \\ &\quad + \|u^h\| \|\nabla w^h\| + (\Delta t \theta \sigma^2 + \theta \sigma) \|u^h\| \|w^h\|). \end{aligned} \quad (3.105)$$

Sejam

$$\gamma_1 = \max\{\Delta t\theta, \Delta t\tau, 1\}, \quad (3.106)$$

$$\gamma_2 = \max\{\Delta t\theta\sigma, \Delta t\tau, 1\}, \quad (3.107)$$

$$\gamma_3 = \max\{\Delta t\theta\sigma + \theta, \Delta t\tau, 1\} \text{ e} \quad (3.108)$$

$$\gamma_4 = \max\{\Delta t\theta\sigma(\sigma + \theta), \Delta t\tau, 1\}. \quad (3.109)$$

Então,

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq & \gamma_1 (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{q}^h\|) (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| + \|\mathbf{p}^h\|) + \\ & + \gamma_2 (\|\nabla w^h\| + \|w^h\|) (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| + \|\mathbf{p}^h\|) + \\ & + \gamma_3 (\|\nabla u^h\| + \|u^h\|) (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{q}^h\|) + \\ & + \gamma_4 (\|\nabla u^h\| + \|u^h\|) (\|\nabla w^h\| + \|w^h\|), \end{aligned} \quad (3.110)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq & \gamma_1\gamma_2 [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{q}^h\|) + (\|\nabla w^h\| + \|w^h\|)] \\ & (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| + \|\mathbf{p}^h\|) + \\ & + \gamma_3\gamma_4 [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{q}^h\|) + (\|\nabla w^h\| + \|w^h\|)] \\ & (\|\nabla u^h\| + \|u^h\|). \end{aligned} \quad (3.111)$$

Dessa forma, tomando $\gamma = \max\{\gamma_1\gamma_2, \gamma_3\gamma_4\}$, obtemos

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq & \gamma [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\| + \|\mathbf{p}^h\|) + (\|\nabla u^h\| + \|u^h\|)] \\ & [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{q}^h\|) + (\|\nabla w^h\| + \|w^h\|)], \end{aligned} \quad (3.112)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} |\mathbb{B}_{2\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq & C_1\gamma [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{p}^h\|^2 + \|\mathbf{p}^h\|^2) + (\|\nabla u^h\|^2 + \|u^h\|^2)]^{1/2} \\ & [(\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2) + (\|\nabla w^h\|^2 + \|w^h\|^2)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Portanto,

$$|\mathbb{B}_{2\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq M_2 \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{\mathbf{v}}, \quad (3.114)$$

onde $M_2 = C_1\gamma$ e a norma $\|(\cdot, \cdot)\|_{\mathbf{v}}$ é definida por:

$$\|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{\mathbf{v}} = (\|\mathbf{q}^h\|_{\bar{\mathbf{v}}}^2 + \|w^h\|_1^2)^{1/2}, \quad (3.115)$$

com

$$\|\mathbf{q}^h\|_{\bar{\mathbf{v}}} = (\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2)^{1/2}. \quad (3.116)$$

Lema 7 (*Coercividade de $P2_\theta$*)

Existe uma constante $\tilde{\alpha} > 0$ tal que

$$\mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \tilde{\alpha} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{\bar{\mathbf{v}}}^2 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (3.117)$$

Demonstração: Expandindo $\mathbb{B}_{2_\theta}(\cdot, \cdot)$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\ &\quad + \theta (w^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h - \nabla w^h, \mathbf{q}^h - \nabla w^h) \\ &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h) + 2\Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h, \sigma w^h) + \Delta t \theta (\sigma w^h, \sigma w^h) + \\ &\quad + \theta (w^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h) + \theta (w^h, \sigma w^h) + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h, \mathbf{q}^h) - 2\Delta t \tau (\mathbf{q}^h, \nabla w^h) + \\ &\quad + \Delta t \tau (\nabla w^h, \nabla w^h). \end{aligned} \quad (3.118)$$

Como $\sigma > 0$, podemos ter $\theta(w^h, \sigma w^h) = \frac{\theta\sigma}{2}(w^h, w^h) + \frac{\theta\sigma}{2}(w^h, w^h)$.

Dessa forma, colocando a parcela $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h, w^h)$ em evidência, temos em (3.118) que

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h) + (2\Delta t \theta \sigma + \theta) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h, w^h) + \\ &\quad + \Delta t \theta \sigma^2 (w^h, w^h) + \frac{\theta\sigma}{2} (w^h, w^h) + \frac{\theta\sigma}{2} (w^h, w^h) + \\ &\quad + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h, \mathbf{q}^h) - 2\Delta t \tau (\mathbf{q}^h, \nabla w^h) + \frac{\Delta t \tau}{2} (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ &\quad + \frac{\Delta t \tau}{2} (\nabla w^h, \nabla w^h). \end{aligned} \quad (3.119)$$

Usando a desigualdade

$$-k^* \|u^h\|^2 - \frac{1}{k^*} \|w^h\|^2 \leq \pm 2(u^h, w^h) \leq k^* \|u^h\|^2 + \frac{1}{k^*} \|w^h\|^2 \quad \forall k^* > 0, \quad (3.120)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \left[-k_1 \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^h - \frac{1}{k_1} \|w^h\|^2 \right] + \\ &\quad + \Delta t \theta \sigma^2 \|w^h\| + \frac{\theta\sigma}{2} \|w^h\| + \frac{\theta\sigma}{2} \|w^h\| + \\ &\quad + \Delta t \tau \left[-k_2 \|\mathbf{q}^h\|^2 - \frac{1}{k_2} \|\nabla w^h\|^2 \right] + \frac{\Delta t \tau}{2} \|\nabla w^h\|^2 + \frac{\Delta t \tau}{2} \|\nabla w^h\|^2 \end{aligned}$$

Considere a desigualdade de Poincaré-Friedrichs

$$\|w^h\| \leq C_F \|\nabla w^h\| \quad \forall w^h \in V_n^h, \quad (3.122)$$

com $C_F = C_F(\Omega) > 0$ e a desigualdade inversa [25], para $c > 0$

$$(\nabla w^h, \nabla w^h) \leq ch^{-2}(w^h, w^h). \quad (3.123)$$

Assim, aplicando (3.122) e (3.123) no quinto e no último termos de (3.121), respectivamente, segue

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \left[-k_1 \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 - \frac{1}{k_1} \|w^h\|^2 \right] + \\ &\quad + (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \sigma(w^h, w^h) + \frac{\theta \sigma c^{-1} h^2}{2} \|\nabla w^h\|^2 + \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 + \\ &\quad \Delta t \tau \left[-k_2 \|\mathbf{q}^h\|^2 - \frac{1}{k_2} \|\nabla w^h\|^2 \right] + \frac{\Delta t \tau}{2} \|\nabla w^h\|^2 + \\ &\quad + \frac{(C_F^{-1})^2 \Delta t \tau}{2} \|w^h\|^2. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Isto é,

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq [\Delta t \theta - (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) k_1] \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + [\Delta t \tau - \Delta t \tau k_2] \|\mathbf{q}^h\|^2 + \\ &\quad + \left[(\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \sigma + \frac{(C_F^{-1})^2 \Delta t \tau}{2} - \frac{(\Delta t \theta \sigma + \theta/2)}{k_1} \right] \|w^h\|^2 + \\ &\quad + \left[\frac{\theta \sigma c^{-1} h^2}{2} + \frac{\Delta t \tau}{2} - \frac{\Delta t \tau}{k_2} \right] \|\nabla w^h\|^2. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Sejam

$$\theta [\Delta t - (\Delta t \sigma + 1/2) k_1] > 0, \quad (3.126)$$

$$\Delta t \tau (1 - k_2) > 0, \quad (3.127)$$

$$\frac{\theta \sigma c^{-1} h^2}{2} + \frac{\Delta t \tau}{2} - \frac{\Delta t \tau}{k_2} > 0, \quad (3.128)$$

e

$$(\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \sigma + \frac{(C_F^{-1})^2 \Delta t \tau}{2} - \frac{(\Delta t \theta \sigma + \theta/2)}{k_1} > 0. \quad (3.129)$$

Dessa forma, tomando

$$\widetilde{\alpha}_1 = \min \left\{ \frac{\theta \sigma c^{-1} h^2}{2} + \frac{\Delta t \tau}{2} - \frac{\Delta t \tau}{k_2}, (\Delta t \theta \sigma + \theta/2) \sigma + \frac{(C_F^{-1})^2 \Delta t \tau}{2} - \frac{(\Delta t \theta \sigma + \theta/2)}{k_1} \right\}, \quad (3.130)$$

e

$$\widetilde{\alpha}_2 = \min \{ \theta [\Delta t - (\Delta t \sigma + 1/2) k_1], \Delta t \tau (1 - k_2) \}, \quad (3.131)$$

obtemos

$$\mathbb{B}_{2_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \widetilde{\alpha}_1 [\|\nabla w^h\|^2 + \|w^h\|^2] + \widetilde{\alpha}_2 [\|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2]. \quad (3.132)$$

Considerando

$$\tilde{\alpha} = \min \{ \widetilde{\alpha_1}, \widetilde{\alpha_2} \}, \quad (3.133)$$

temos

$$\mathbb{B}_{2_\theta} \{ (w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \geq \tilde{\alpha} [\|\nabla w^h\|^2 + \|w^h\|^2 + \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}^h\|^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2]. \quad (3.134)$$

Logo,

$$\mathbb{B}_{2_\theta} \{ (w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \geq \tilde{\alpha} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{\mathbf{v}}^2. \quad (3.135)$$

3.5.1 Análise Numérica

Lema 8 (*Consistência de P_{2_θ}*)

A solução exata $(u, \mathbf{p})$, satisfaz a formulação variacional discreta

$$\mathbb{B}_{2_\theta} \{ (u, \mathbf{p}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = \mathbb{L}_{2_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (3.136)$$

Demonstração: Se substituirmos as variáveis $(u^h, \mathbf{p}^h)$ em (3.96), pela solução exata $(u, \mathbf{p})$, a igualdade continua válida.

Lema 9 (*Ortogonalidade do erro de P_{2_θ}*)

Sejam $e = u - u^h$ e $\mathbf{e} = \mathbf{p} - \mathbf{p}^h$. Então

$$\mathbb{B}_{2_\theta} \{ (e, \mathbf{e}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = 0 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (3.137)$$

Demonstração: De fato, subtraindo (3.136) de (3.96), temos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{2_\theta} \{ (e, \mathbf{e}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} &= \mathbb{B}_{2_\theta} \{ (u, \mathbf{p}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} - \mathbb{B}_{2_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \\ &= \mathbb{L}_{2_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) - \mathbb{L}_{2_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) = 0. \end{aligned} \quad (3.138)$$

Lema 10 (*Melhor aproximação de P_{2_θ}*)

Lema de Céa: Existe uma constante β_2 , independente do subespaço produto $V_n^h \times S_n^h$, tal que

$$\|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}} \leq \beta_2 \|(u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{\mathbf{v}} \quad \forall (\tilde{u}^h, \tilde{\mathbf{p}}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (3.139)$$

onde $\tilde{u}^h$ e $\tilde{\mathbf{p}}^h$ são os interpolantes das variáveis u^h e $\mathbf{p}^h$, respectivamente.

Demonstração: Em (3.117), provamos que

$$\tilde{\alpha} \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{2_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (u^h, \mathbf{p}^h) \} \quad \forall (u^h, \mathbf{p}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (3.140)$$

Assim,

$$\tilde{\alpha} \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\}. \quad (3.141)$$

Considere a identidade,

$$\begin{aligned} & \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\} = \\ & = \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - \tilde{u}^h + \tilde{u}^h - u^h, \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h + \tilde{\mathbf{p}}^h - \mathbf{p}^h)\} = \\ & = \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - \tilde{u}^h, \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\} + \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (\tilde{u}^h - u^h, \tilde{\mathbf{p}}^h - \mathbf{p}^h)\}. \end{aligned} \quad (3.142)$$

Por (3.137), temos que

$$\mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (\tilde{u}^h - u^h, \tilde{\mathbf{p}}^h - \mathbf{p}^h)\} = 0. \quad (3.143)$$

Desse modo, em (3.141), obtemos

$$\tilde{\alpha} \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}}^2 \leq \mathbb{B}_{2_\theta} \{(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - \tilde{u}^h, \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\}. \quad (3.144)$$

Portanto por (3.99), concluimos

$$\tilde{\alpha} \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}}^2 \leq M_2 \|(u - u^h, \mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}} \|(u - \tilde{u}^h, \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{\mathbf{v}}, \quad (3.145)$$

ou seja,

$$\|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{\mathbf{v}} \leq \beta_2 \|(u - \tilde{u}^h, \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{\mathbf{v}}, \quad (3.146)$$

onde $\beta_2 = M_2/\tilde{\alpha}$.

Dessa forma, levando em conta a expressão do Lema de Céa (3.146), as propriedades de interpolação definidas no Apêndice e considerando a solução exata $(u, \mathbf{p})$ suficientemente regular, obtemos a seguinte estimativa de erro de interpolação:

$$\|u - u^h\|_1 + \|\mathbf{p} - \mathbf{p}^h\|_{\mathbf{v}} \leq Ch^k (\|u\|_{k+1} + \|\mathbf{p}\|_{k+1}), \quad (3.147)$$

para $k = l$ que é uma escolha conveniente do ponto de vista computacional.

Apesar de aumentar o número de incógnitas nodais do problema, note que, a formulação variacional mista de mínimos quadrados apresenta uma estabilidade extra quando comparado ao problema da seção anterior. A estabilidade da formulação $\mathbb{B}_{1_\theta}(\cdot, \cdot)$ do problema $P1_\theta$, é garantida apenas na norma $\|w^h\|^2$ em $L^2(\Omega)$ e, como o método de Galerkin,

sua performance não é satisfatória para alguns valores de θ . As estimativas (3.52) e (3.147) indicam que o método misto de mínimos quadrados mostra ser melhor que o método de mínimos quadrados apresentado para o problema escalar. Na próxima seção, resultados numéricos são exibidos a fim de validar a análise numérica apresentada.

3.6 Resultados Numéricos

Apresentamos nesta seção alguns exemplos utilizados na literatura, para uma validação das formulações de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo definidas nas seções anteriores. Começamos, redefinindo o exemplo escalar da seção 3.4.2 como um sistema e, em seguida, apresentamos o problema de velocidade inclinada em relação à malha para a equação puramente advectiva com coeficiente de reação nulo ($\sigma = 0$).

As matrizes A_0, A_1, A_2 e B que descrevem o sistema de equações, para o problema misto de advecção, são dadas por:

$$A_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.148)$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\Delta t \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.149)$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\Delta t \tau & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.150)$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & v_x & v_y \\ 0 & \Delta t \tau & 0 \\ 0 & 0 & \Delta t \tau \end{bmatrix}, \quad (3.151)$$

para

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}. \quad (3.152)$$

3.6.1 Exemplo 2: Problema unidimensional misto de advecção

O objetivo deste exemplo é testar a influência do parâmetro τ , que pondera a equação da variável auxiliar na solução do problema escalar definido na seção 3.4.2, descrito como um sistema equivalente, usando a formulação mista de mínimos quadrados.

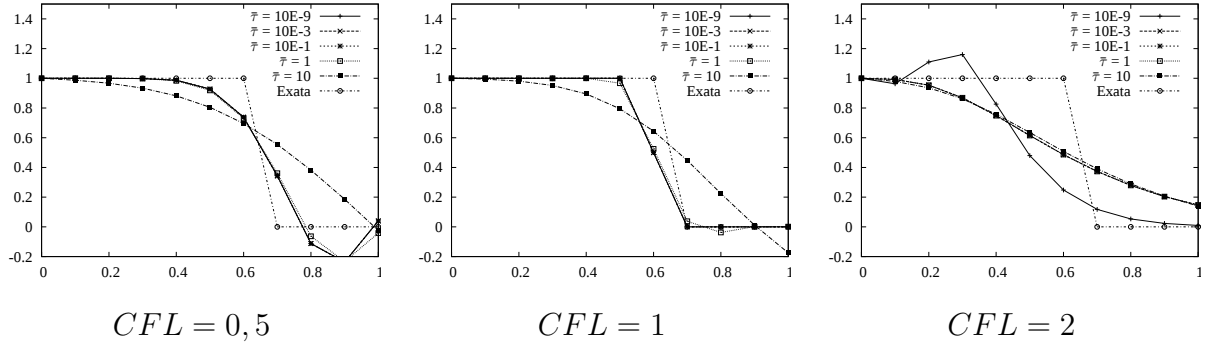


Figura 3.5: Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,5$

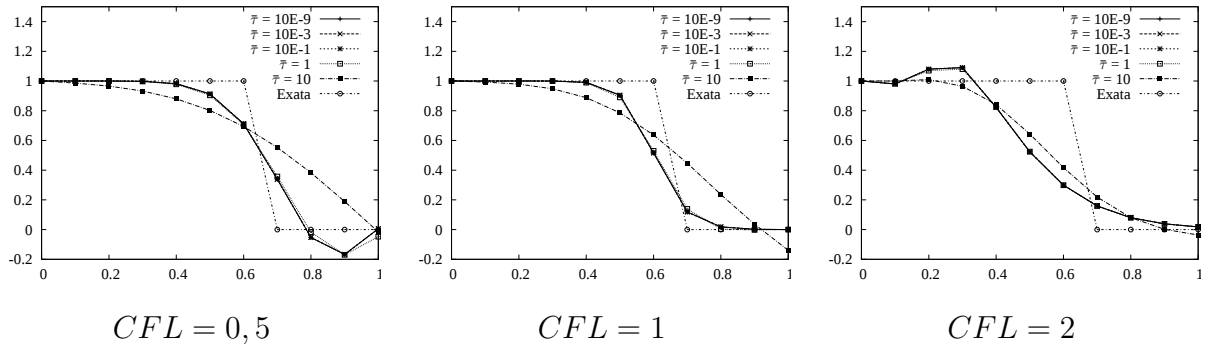


Figura 3.6: Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,55$

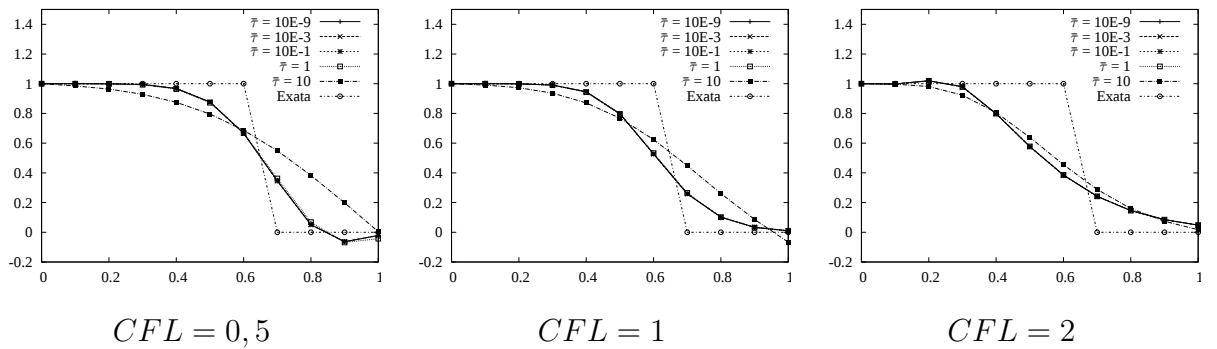


Figura 3.7: Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 0,67$

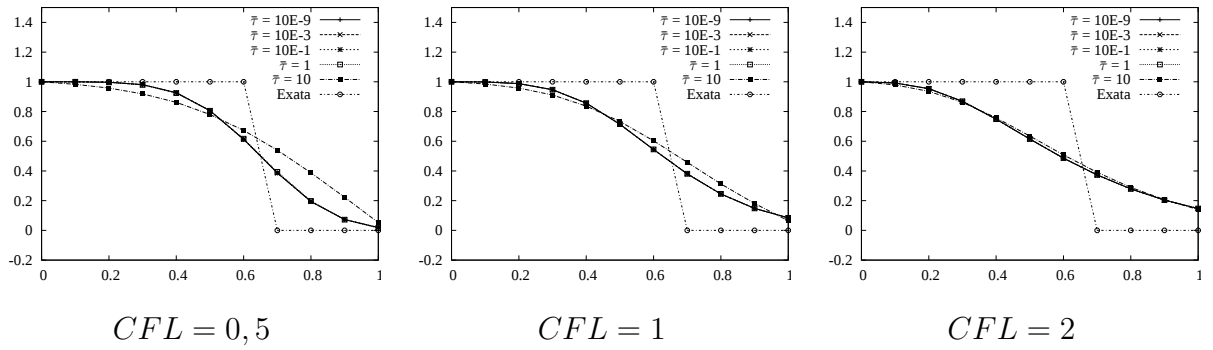


Figura 3.8: Problema unidimensional misto de advecção com $\theta = 1,0$

3.6.2 Exemplo 3: Problema bidimensional de advecção

Para este exemplo, o domínio bidimensional é o quadrado $(0, 1) \times (0, 1)$ discretizado em uma malha de 32×32 elementos isoparamétricos bilineares com condições de contorno apresentado na Figura 3.9. O campo de velocidade é constante, $\|\mathbf{v}\| = 1$, com componentes $v_x = \cos\alpha$ e $v_y = \sin\alpha$ e o termo fonte é $f = 0$.

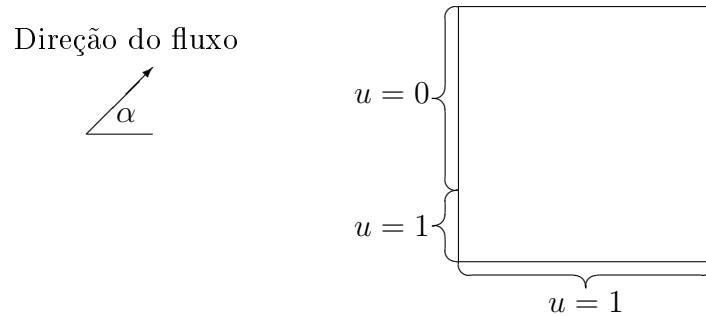


Figura 3.9: Ilustração do Problema bidimensional de advecção

Os valores de α considerados são iguais a 22.5° , 45° e 67.5° . Gráficos de superfícies de soluções do método são exibidos, tanto para o problema escalar, quanto para o sistema de equações, nos instantes $t = 0,8$ e $t = 2,0$, para θ iguais 0,5, 0,55, 0,67 e 1,0, com $\Delta t = 0,02$ e $\Delta t = 0,1$ e $\tau = 0,1$.

Os resultados do problema escalar, apresentados nas figuras a seguir, mostram oscilações espúrias para $\theta = 0,5$, em todos os instantes de tempo, como nos resultados obtidos pela formulação de Galerkin. No entanto, a medida que aumentamos o valor de θ , as soluções numéricas apresentam uma melhora em tais oscilações.

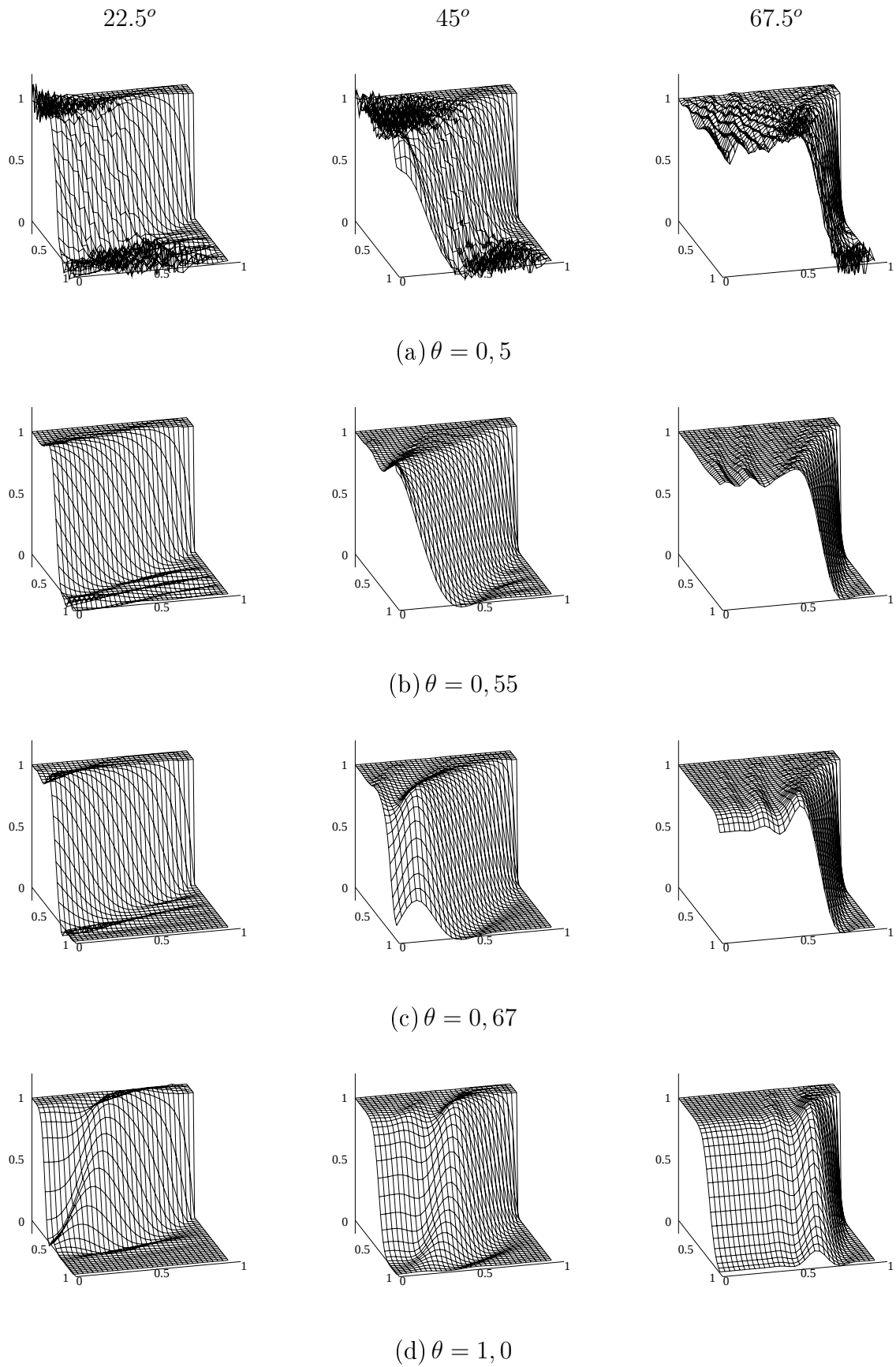


Figura 3.10: Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8

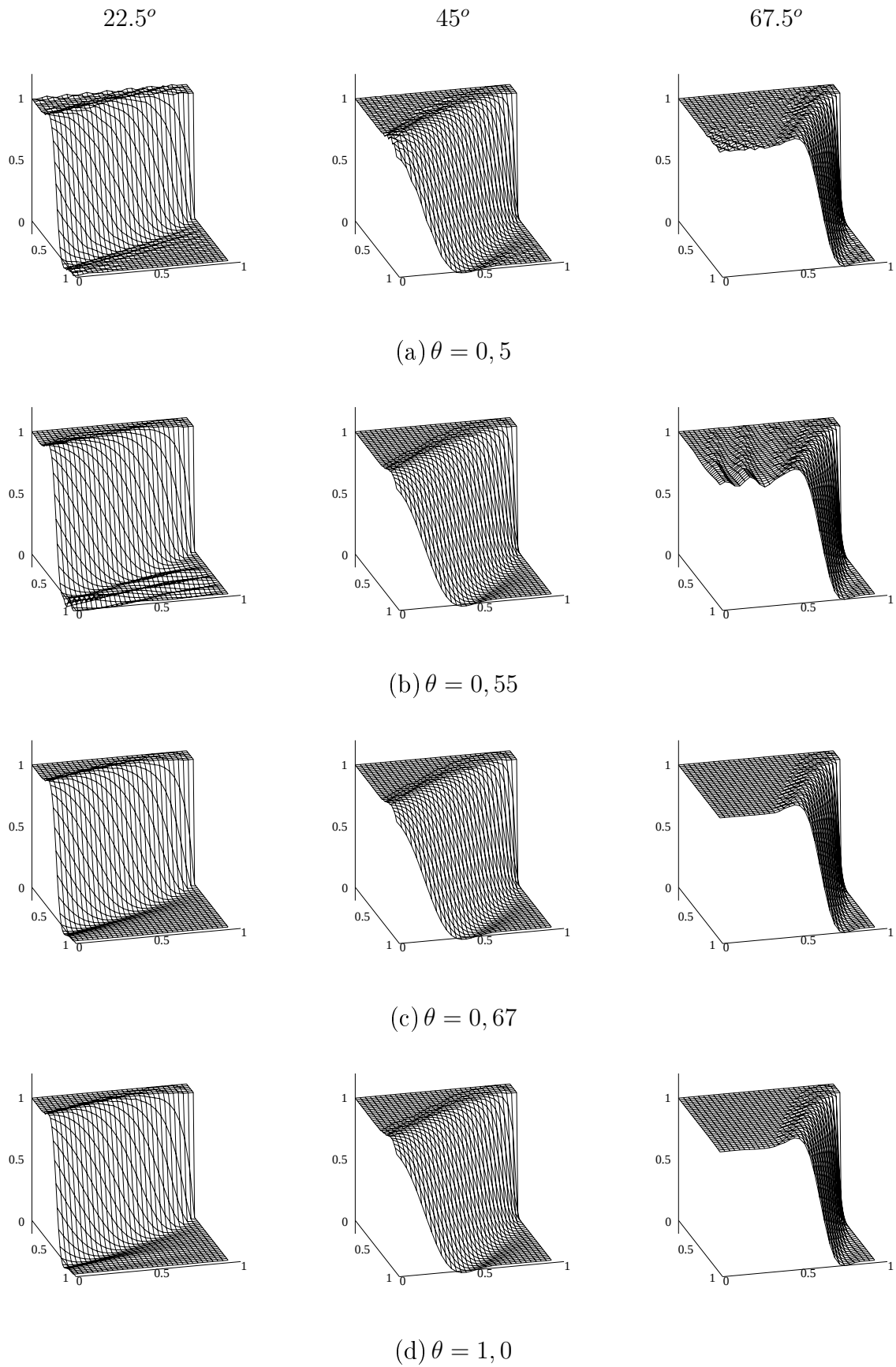


Figura 3.11: Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0

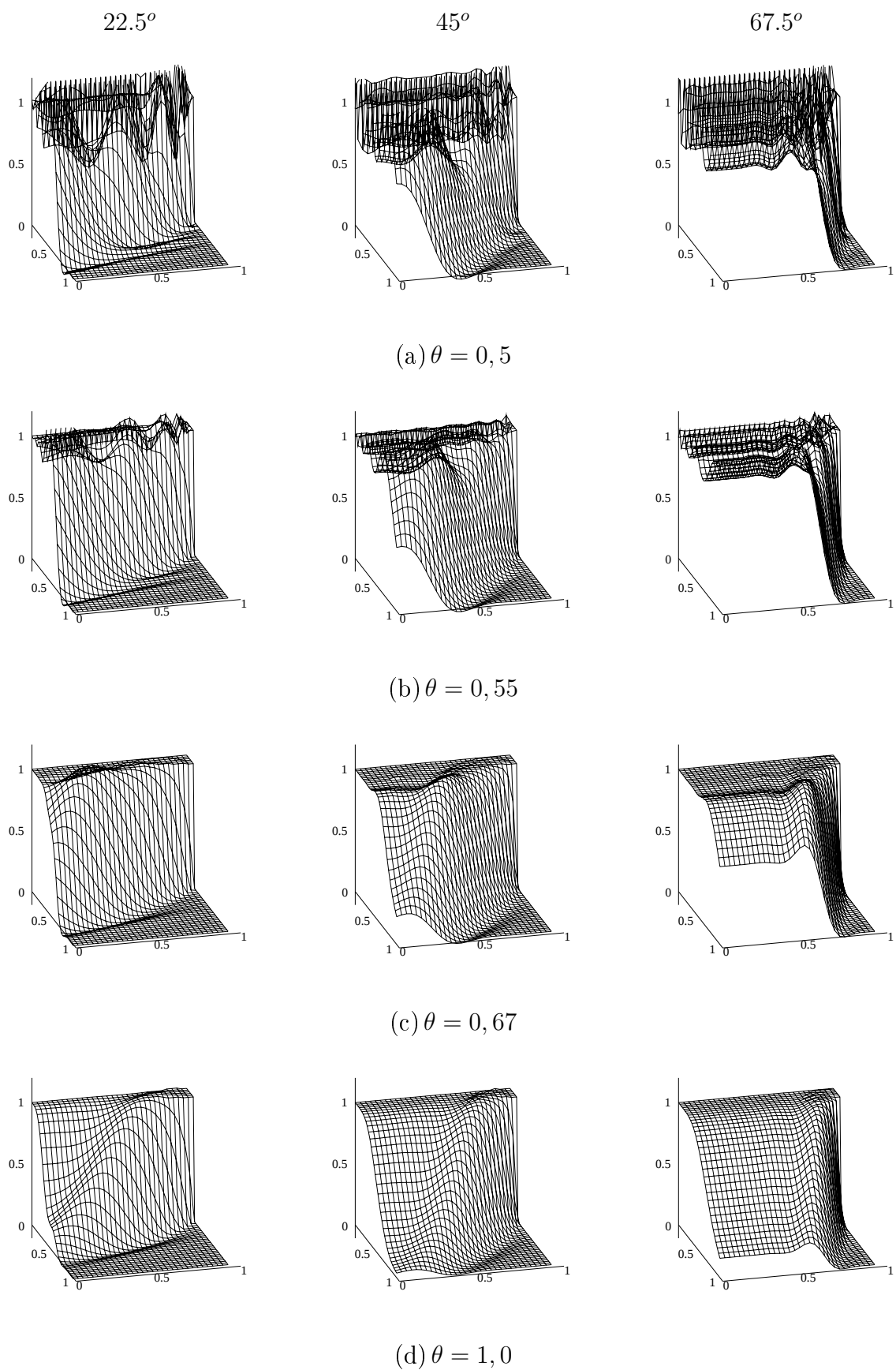


Figura 3.12: Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8

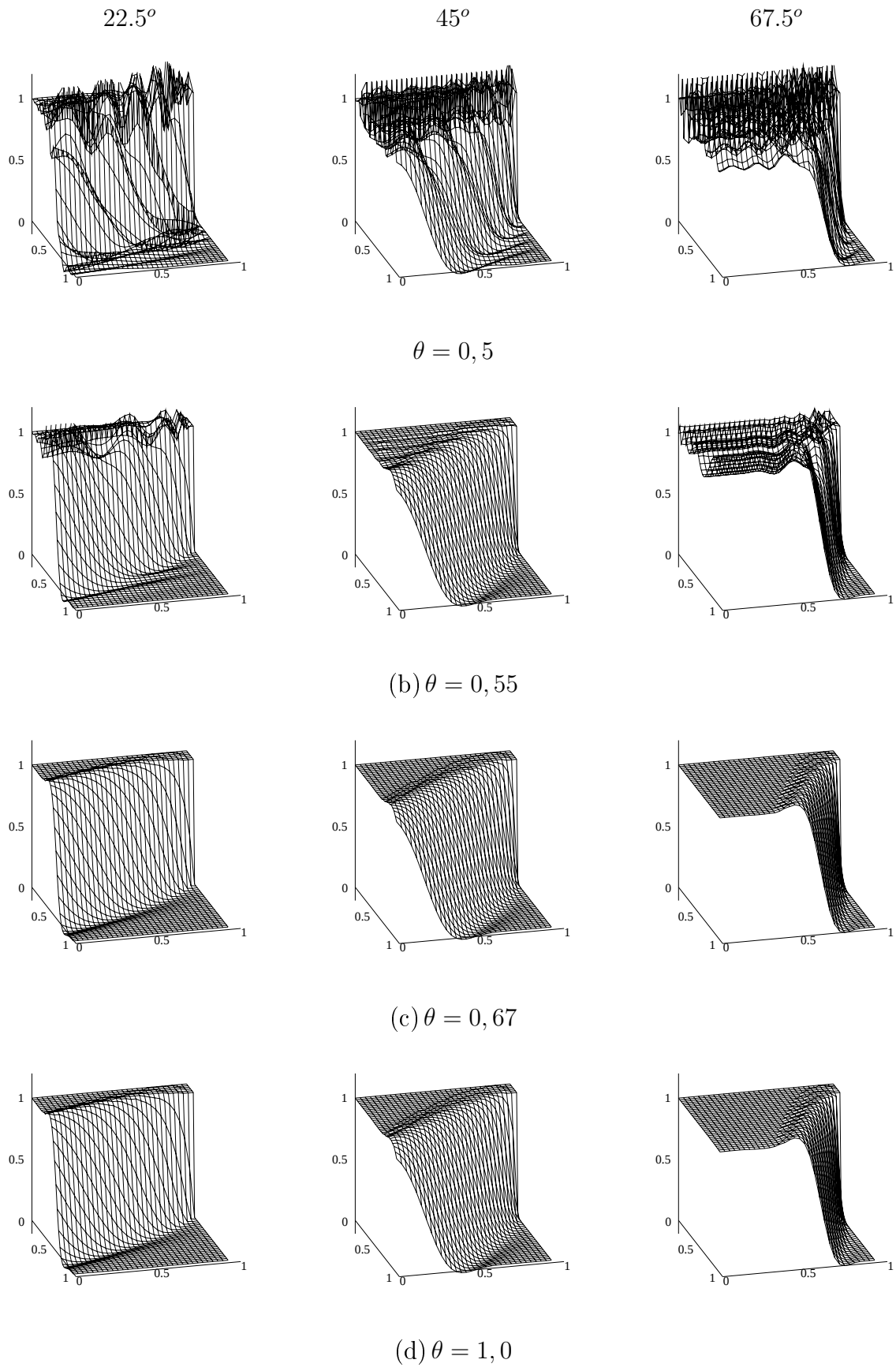


Figura 3.13: Problema escalar de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0

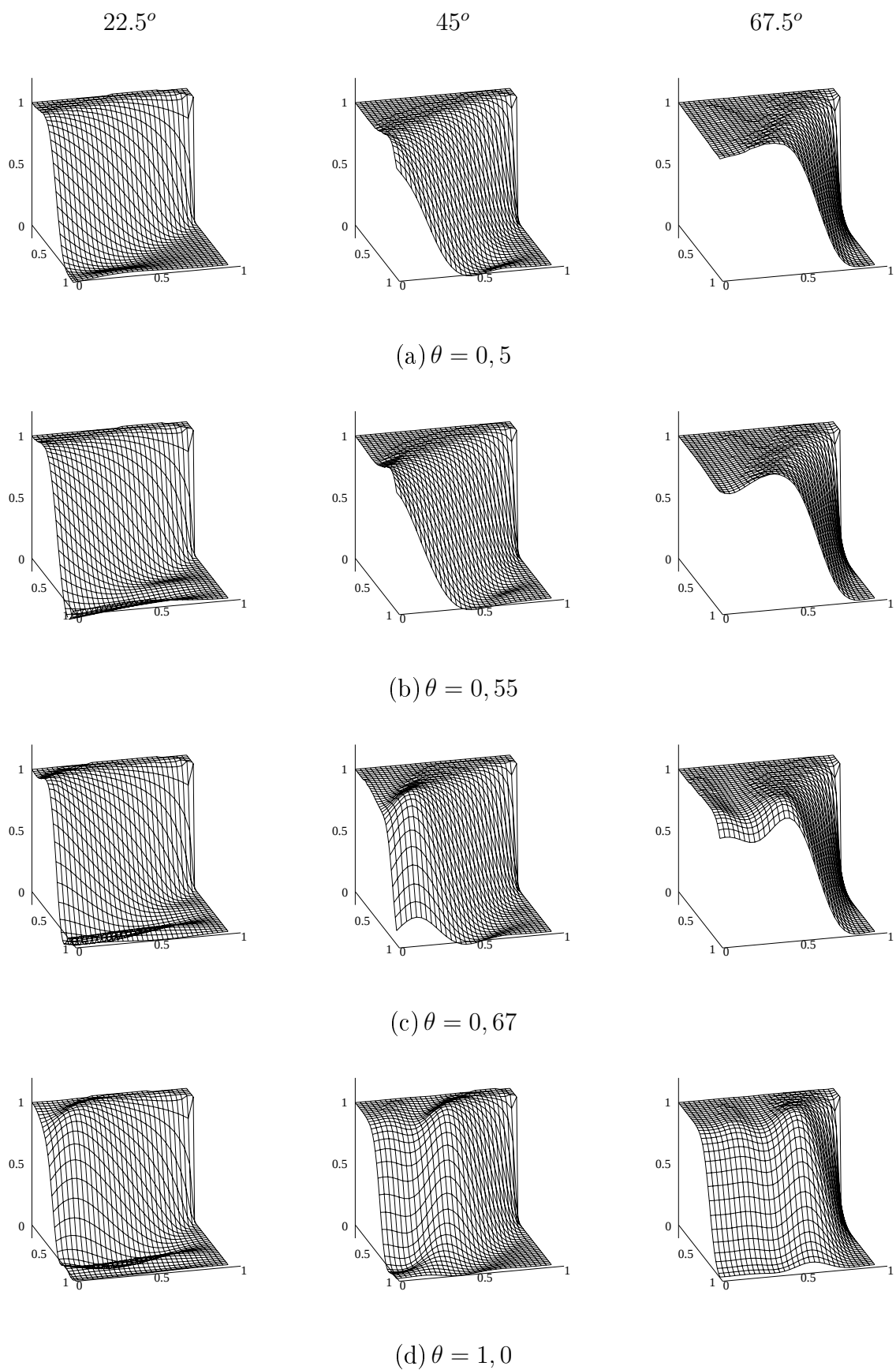


Figura 3.14: Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8

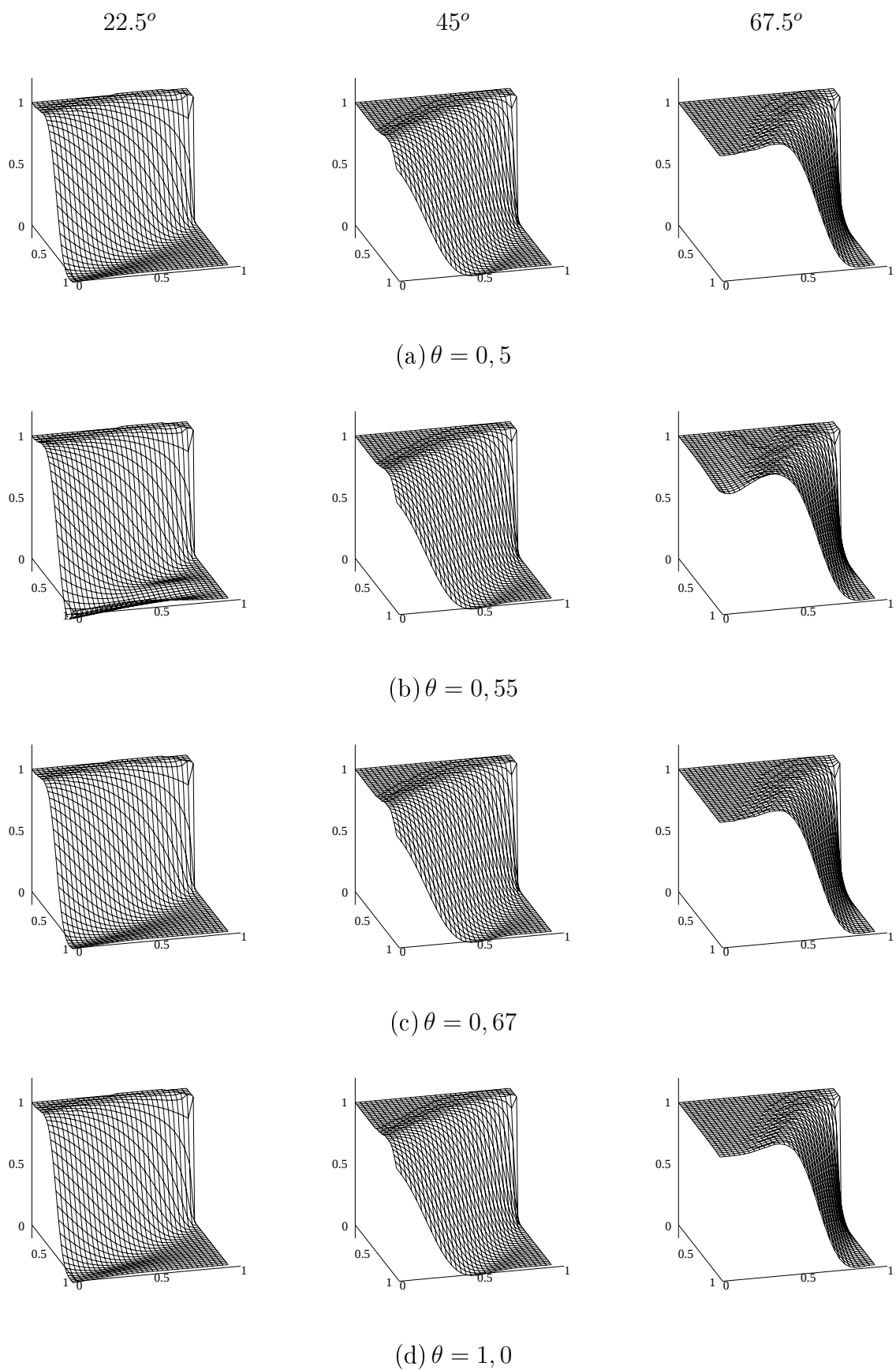


Figura 3.15: Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0

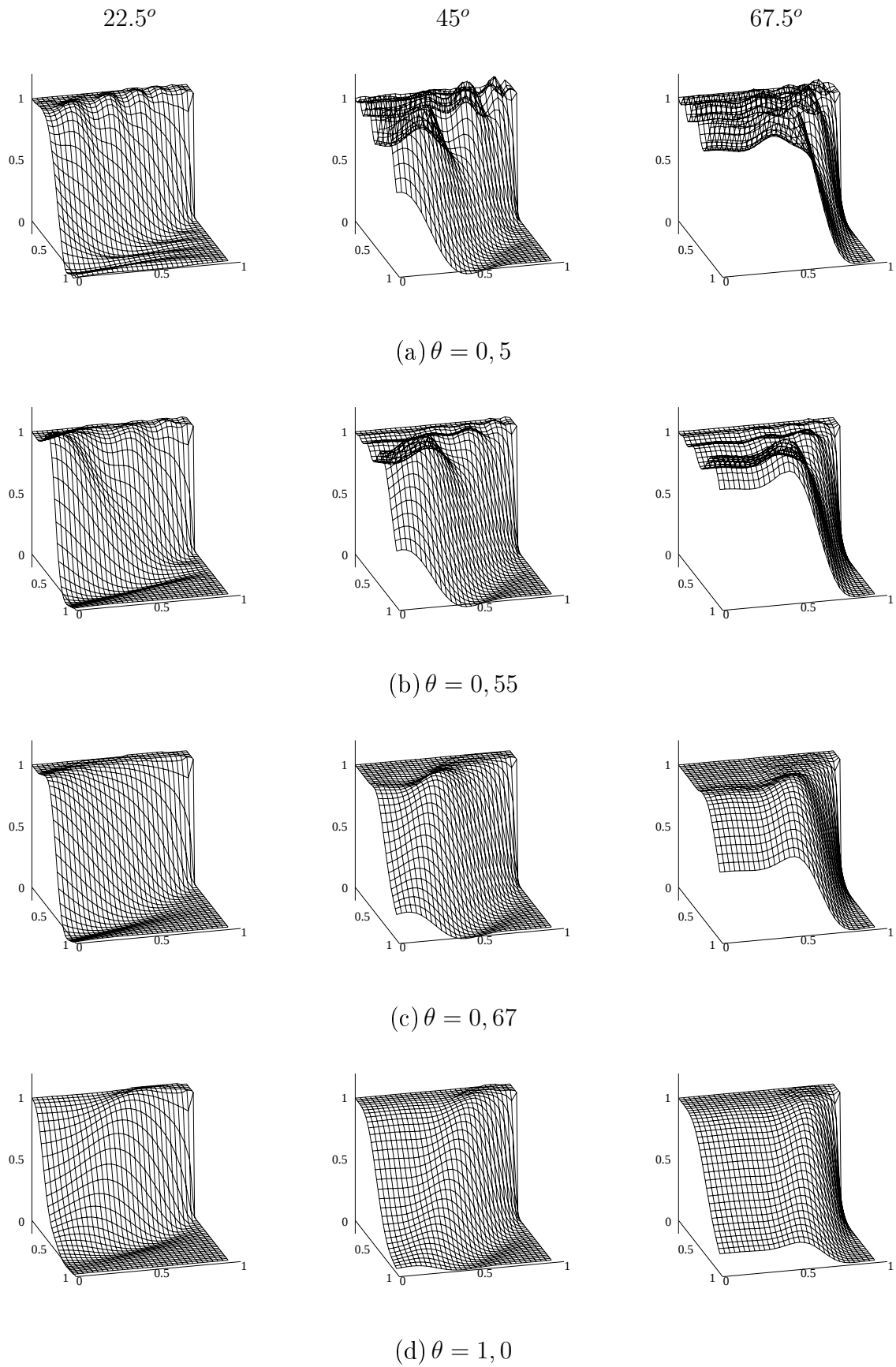


Figura 3.16: Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo $0,8$

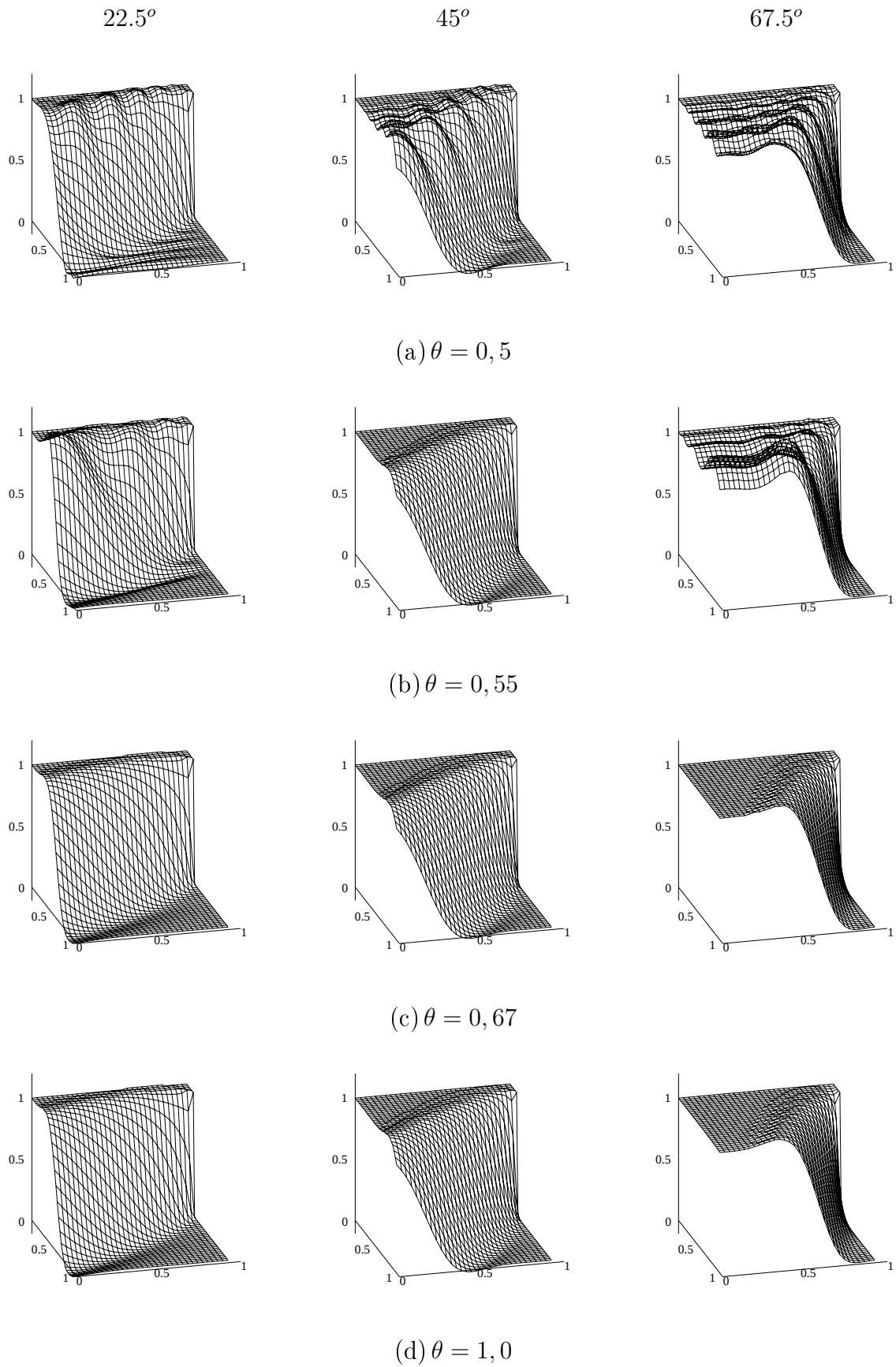


Figura 3.17: Problema misto de advecção para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0

Como observado nos resultados anteriores, os exemplos numéricos do problema misto apresentam uma melhora significativa nas oscilações, quando comparados ao problema escalar. Nos resultados com $\Delta t = 0,02$, a formulação mista apresenta soluções bastante satisfatórias, conseguindo eliminar as oscilações do respectivo problema escalar. Contudo, esta formulação adiciona uma pequena difusão nas camadas limites. Para ilustrar essa característica, apresentamos a seguir os gráficos com cortes das soluções ao longo da linha $x = y$, para o exemplo com $\Delta t = 0,1$, considerando $\theta = 0,5$ e $\theta = 1,0$, no tempo 2,0.

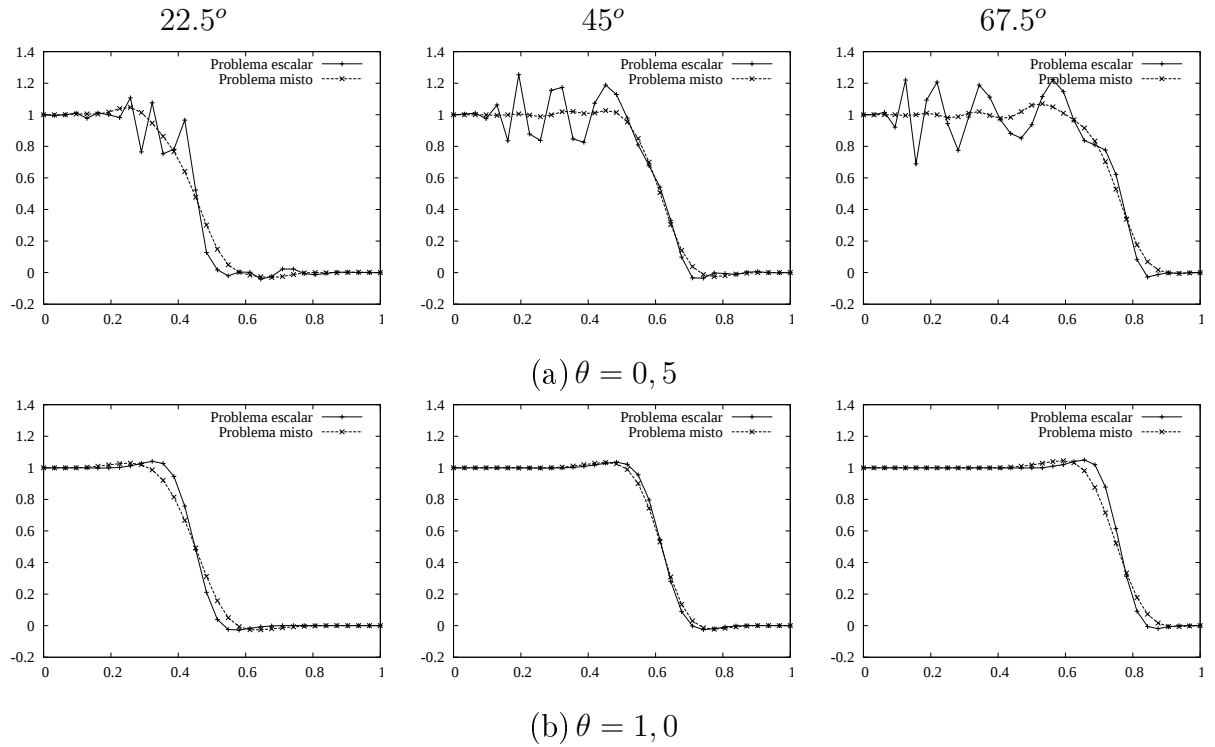


Figura 3.18: Corte ao longo da linha $x = y$ para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0

De um modo geral, podemos notar que à medida que o tempo evolui, a solução apresenta menores oscilações, levando a um estado estacionário, em que os resultados são similares para praticamente todos os valores de θ maiores que 0,5.

Resultados dos problemas anteriores são encontrados em [26], para o problema estacionário, usando a formulação estabilizada SUPG, com integração reduzida e acrescentando também vários operadores de captura de descontinuidade, que são operadores não lineares. Neste trabalho, embora em certos casos, obtenha-se soluções ótimas, de forma geral, os resultados apresentam uma maior frente de onda ou difusão artificial, do que os resultados permanentes da formulação aqui proposta.

Capítulo 4

Equação de Advecção-difusão-reação

4.1 Introdução

A modelagem de diversos problemas físicos e de engenharia envolve a solução de equações de transporte do tipo advecção-difusão-reação. Estes problemas podem apresentar camadas limites quando o termo de difusão é pequeno comparado ao termo advectivo. Devido a esta característica, muitos métodos numéricos obtêm resultados limitados quando são aplicados a esta classe de problemas.

Como é bem conhecido na literatura, do mesmo modo que no problema de advecção-reação, o método clássico de Galerkin, não resolve satisfatoriamente o problema de advecção-difusão-reação, apresentando oscilações espúrias em suas soluções que não correspondem ao problema físico. Em virtude deste fato, diversas alternativas têm sido desenvolvidas, tais como os métodos estabilizados (SUPG e GLS/ST), na tentativa de melhorar a estabilidade e precisão. Uma interessante comparação sobre estes métodos e outros métodos empregados em elementos finitos pode ser encontrada em [27].

Neste capítulo, introduzimos inicialmente o problema na seção 4.2 objetivando sua análise em duas dimensões. Em seguida, na seção 4.3, usando uma variável auxiliar, estendemos o problema original a um sistema de primeira ordem equivalente, onde desenvolvemos a formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo. Uma aproximação constante no tempo é considerada juntamente com um fator θ para possibilitar diferentes aproximações temporais. Na seção 4.4 a equação do rotacional nulo é acrescentada à formulação mista original numa tentativa de melhorar a aproximação da variável vetorial.

A análise de existência e unicidade das formulações expostas são apresentadas e

mostramos suas estimativas de erro. Simulações numéricas são realizadas em exemplos clássicos de transporte por advecção-difusão com velocidade constante, na seção 4.5, tanto para problemas unidimensionais como bidimensionais, a fim de confirmar resultados da análise matemática desenvolvida.

4.2 Definição do Problema

O problema de advecção-difusão-reação transiente consiste em encontrar a função escalar $u = u(\mathbf{x}, t)$, tal que

$$u_t + \mathbf{v} \cdot \nabla u - \operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla u) + \sigma u = f \quad \text{em} \quad \Omega \times (0, T), \quad (4.1)$$

com condições de contorno

$$u = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_D \times (0, T), \quad (4.2)$$

$$\mathbf{n} \cdot (-\mathbf{K} \nabla u) = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_N \times (0, T), \quad (4.3)$$

e condição inicial

$$u = u^0 \text{ em } \Omega \text{ para } t = 0, \quad (4.4)$$

onde

- $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ e $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$;
- $\mathbf{K} = (a_{ij}(x))_{i,j=1,n}$, $x \in \overline{\Omega}$ é o coeficiente de difusão, uma matriz positiva definida com coeficientes a_{ij} limitados, isto é, existe constantes positivas α_1 e α_2 , para todo $\xi \in \mathbb{R}^m$ tais que

$$\alpha_1 \xi^T \xi \leq \xi^T \mathbf{K} \xi \leq \alpha_2 \xi^T \xi; \quad (4.5)$$

- u , σ e f como definidos no problema (3.1).

Neste trabalho o sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem foi descrito como proposto em [14], onde é analisada a estabilidade do método misto de mínimos quadrados para um problema elíptico de segunda ordem. Dessa forma, definimos o fluxo $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ como usual, $\mathbf{p} = -\mathbf{K} \nabla u$, e utilizando $\nabla u = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}$, obtemos o seguinte

sistema de equações diferenciais primeira ordem:

$$\begin{aligned}
u_t - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p} + \operatorname{div} \mathbf{p} + \sigma u &= f & \text{em } \Omega \times (0, T), \\
\mathbf{p} + \mathbf{K} \nabla u &= 0 & \text{em } \Omega \times (0, T), \\
u &= 0 & \text{em } \Gamma_D \times (0, T), \\
\mathbf{n} \cdot \mathbf{p} &= 0 & \text{em } \Gamma_N \times (0, T), \\
u &= u^0 & \text{em } \Omega \text{ para } t = 0.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

4.3 Formulação Variacional

Nesta seção é apresentada a análise da formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo aplicada ao sistema de advecção-difusão-reação (4.6). A definição do funcional de mínimos quadrados para o problema discreto em questão é dada por:

$$\bar{J}(u^h, \mathbf{p}^h) = \int_0^T \int_{\Omega} \left[(u_t^h - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h + \operatorname{div} \mathbf{p}^h + \sigma u^h - f)^2 + (\mathbf{p}^h + \mathbf{K} \nabla u^h)^2 \right] d\Omega dt. \tag{4.7}$$

Como a formulação variacional mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo é resultante da minimização deste funcional em relação as variáveis discretas $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$, fazendo a variação do funcional (4.7), temos

$$\begin{aligned}
\nabla \bar{J}(u^h, \mathbf{p}^h) &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{\Omega} \left[(w_t^h - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h + \operatorname{div} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) \cdot \right. \\
&\quad \left. (u_t^h - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h + \operatorname{div} \mathbf{p}^h + \sigma u^h - f) + \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{q}^h + \mathbf{K} \nabla w^h) (\mathbf{p}^h + \mathbf{K} \nabla u^h) \right] dQ_n = 0, \tag{4.8}
\end{aligned}$$

onde $(w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h$.

Adicionando o termo do salto temporal (2.31) à variação do funcional definido em (4.8), integrando este resultado em relação ao tempo e sabendo que $u_t^h = 0$ e $w_t^h = 0$, obtemos a seguinte formulação variacional mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo:

Problema P3_h : Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ achar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\begin{aligned} \Delta t \left(\operatorname{div} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u^h(t_{n+1}) - f(t_{n+1}^-) \right), \\ \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \Big|_{\Omega} + \\ + \left(|[u^h]|, \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \right)_{\Omega} + \\ + \Delta t \left(\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla w^h(t_{n+1}^-) \right)_{\Omega} = 0, \end{aligned} \quad (4.9)$$

para todo $(w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h$. Equivalentemente, o *Problema P3_h* pode ser escrito como:

Problema P3_t: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, achar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\mathbb{B}_{3_t}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{L}_{3_t}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (4.10)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_t}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = & \Delta t \left(\operatorname{div} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u(t_{n+1}^-) \right), \\ & \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \Big|_{\Omega} + \\ & + (u^h(t_{n+1}^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) \\ & + \Delta t \left(\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla w^h(t_{n+1}^-) \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbb{L}_{3_t}(w^h, \mathbf{q}^h) = & (u^h(t_n^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)) + \\ & + \Delta t (f(t_{n+1}^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-)). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Novamente, para possibilitar diferentes aproximações no intervalo de tempo $I_n = [t_n, t_{n+1}]$, escrevendo a parcela referente a equação evolutiva(4.6) em (3.91) para algum $t = t_{n+\theta}$, com $\theta \in [0, 1]$, definimos as seguintes aproximações:

$$\begin{aligned} u^h &= \theta u^h(t_{n+1}^-) + (1 - \theta) u^h(t_n^-), \\ \mathbf{p}^h &= \theta \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + (1 - \theta) \mathbf{p}^h(t_n^-). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Ponderando a equação do fluxo por um fator $\tau > 0$, obtemos o novo problema variacional no tempo $t_{n+\theta}$:

Problema P3_θ: Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, encontrar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in S_n^h$ tais que

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{L}_{3_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (4.14)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = & \Delta t \theta \left(\operatorname{div} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \sigma u(t_{n+1}^-) \right), \\ & \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) + \\ & + \theta \left(u^h(t_{n+1}^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \right) \\ & + \Delta t \tau \left(\mathbf{p}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla u^h(t_{n+1}^-), \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \mathbf{K} \nabla w^h(t_{n+1}^-) \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbb{L}_{3_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) = & \Delta t (\theta - 1) \left(\operatorname{div} \mathbf{p}^h(t_n^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h(t_n^-) + \sigma u(t_n^-) \right), \\ & \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) + \\ & + \theta \left(u^h(t_n^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \right) + \\ & + \Delta t \left(f(t_{n+\theta}^-), \operatorname{div} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) - \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h(t_{n+1}^-) + \sigma w^h(t_{n+1}^-) \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

A existência e unicidade para a solução do *Problema P3_θ* é assumida pelo Teorema de Lax-Milgram (1). Portanto, devemos mostrar que:

Lema 11 (*Continuidade de P3_θ*)

Existe uma constante $M_3 > 0$ tal que

$$|\mathbb{B}_{3_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq M_3 \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\operatorname{div})} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\operatorname{div})}, \quad (4.17)$$

para todos $(u^h, \mathbf{p}^h), (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h$.

Demonstração: A demonstração é análoga ao Lema 6.

Lema 12 (*Coercividade de P3_θ*)

Seja $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \leq 0$ em Υ_{N_n} . Então, existe uma constante $\delta > 0$ tal que

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \delta \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\operatorname{div})}^2 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (4.18)$$

Demonstração:

Como em [14], provamos a coercividade do *Problema P3_θ*, dividindo a demonstração em dois casos. No primeiro, tenta-se obter a relação da forma bilinear com a norma da variável escalar e, na segunda, partindo deste resultado obtido, inclui-se a variável vetorial.

Caso I: Seja β uma constante. Expandindo $\mathbb{B}_{3_\theta}\{\cdot; \cdot\}$, somando e subtraindo os termos:

$$2\beta \Delta t \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h) \text{ e } \Delta t \theta ((2\beta \sigma - \beta^2) w^h, w^h),$$

temos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\
&\quad + \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\
&\quad + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + K \nabla w^h, \mathbf{q}^h + K \nabla w^h) \\
&= \Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h, \\
&\quad \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h) + \\
&\quad + \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\
&\quad + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + K \nabla w^h, \mathbf{q}^h + K \nabla w^h) + \\
&\quad + 2\beta \Delta t \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \\
&\quad + \Delta t \theta ((2\beta\sigma - \beta^2) w^h, w^h).
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Reagrupando os termos de (4.19), segue

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h, \\
&\quad \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h) + \\
&\quad + (2\beta \Delta t \theta + \theta) (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h) - (2\beta \Delta t \theta + \theta) (w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \\
&\quad + \theta (w^h, \sigma w^h) + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + K \nabla w^h, \mathbf{q}^h + K \nabla w^h) + \\
&\quad + \Delta t \theta ((2\beta\sigma - \beta^2) w^h, w^h).
\end{aligned} \tag{4.20}$$

Aplicando o teorema de Green, assumindo $w^h = 0$ em Υ_{D_n} e $\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}^h = 0$ em Υ_{N_n} , obtemos

$$(w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h) = -(\mathbf{q}^h, \nabla w^h). \tag{4.21}$$

Dessa forma, substituindo (4.21) em (4.20), vem

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h, \\
&\quad \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + (\sigma - \beta) w^h) - \\
&\quad - (2\beta \Delta t \theta + \theta) (\nabla w^h, \mathbf{q}^h) - (2\beta \Delta t \theta + \theta) (w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \\
&\quad + \theta (w^h, \sigma w^h) + \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + K \nabla w^h, \mathbf{q}^h + K \nabla w^h) + \\
&\quad + \Delta t \theta ((2\beta\sigma - \beta^2) w^h, w^h).
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Desprezando a primeira parcela em (4.22), somando e subtraindo os termos:

$$(2\beta \Delta t \theta + \theta) (\nabla w^h, \mathbf{q}^h), (2\beta \Delta t \theta + \theta) (K \nabla w^h, \nabla w^h) \text{ e } \Delta t \tau^{-1} (\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h),$$

segue

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h, \\
& \mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h) - \\
& -(2\beta \Delta t \theta + \theta)(\nabla w^h, \mathbf{q}^h) - (2\beta \Delta t \theta + \theta)(w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \\
& + \theta(w^h, \sigma w^h) + \Delta t \theta ((2\beta \sigma - \beta^2) w^h, w^h) + \\
& + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(\nabla w^h, \mathbf{q}^h) + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h). \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Novamente, reagrupando os termos de (4.23), obtemos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h, \\
& \mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h) - \\
& -(2\beta \Delta t \theta + \theta)(w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \theta(w^h, \sigma w^h) + \\
& + \Delta t \theta ((2\beta \sigma - \beta^2) w^h, w^h) + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h). \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Agora, somando e subtraindo as parcelas:

$$\begin{aligned}
(2\beta \Delta t \theta + \theta)(\mathbf{q}^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}), \quad (2\beta \Delta t \theta + \theta)(\nabla w^h, w^h \mathbf{v}), \quad 2(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) \\
+ \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}),
\end{aligned}$$

segue

$$\begin{aligned}
& \mathbb{B}_{\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \\
& \geq \Delta t \tau (\mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2) w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}, \\
& \mathbf{q}^h + (K - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)I) \nabla w^h - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2) w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) - \\
& -(2\beta \Delta t \theta + \theta)(w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \theta(w^h, \sigma w^h) + \\
& + \Delta t \theta ((2\beta \sigma - \beta^2) w^h, w^h) + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(\mathbf{q}^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) + \\
& + (2\beta \Delta t \theta + \theta)(\nabla w^h, w^h \mathbf{v}) - 2(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) \\
& - \Delta t \tau^{-1}(\beta \Delta t \theta + \theta/2)^2 (w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}). \tag{4.25}
\end{aligned}$$

No Apêndice verificamos que

$$(w^h, \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) = (\mathbf{q}^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}). \tag{4.26}$$

Desse modo, desprezando o primeiro termo em (4.25) e rearrumando os termos restantes, temos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & \theta(w^h, \sigma w^h) + \Delta t \theta((2\beta\sigma - \beta^2)w^h, w^h) + \\ & + (2\beta\Delta t\theta + \theta)(K\nabla w^h, \nabla w^h) - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, \nabla w^h) \\ & + (2\beta\Delta t\theta + \theta)(\nabla w^h, w^h\mathbf{v}) - 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}) \\ & - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + 1/2)^2(w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Isto é,

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(\nabla w^h, w^h\mathbf{v}) - \\ & - 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}) + \\ & + 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ & - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ & - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + 1/2)^2(w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}) + \\ & + 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, \sigma w^h) - \beta^2\Delta t\theta(w^h, w^h). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Pelo teorema de Green, sabemos que

$$(\nabla w^h, w^h\mathbf{v}) = \frac{1}{2}(\nabla((w^h)^2), \mathbf{v}) = \frac{1}{2}\{((w^h)^2, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Upsilon_n} - ((w^h)^2, \operatorname{div} \mathbf{v})\}, \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} (\nabla w^h, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}) &= \frac{1}{2}(\nabla((w^h)^2), (K^{-1})^T\mathbf{v}) = \\ &= \frac{1}{2}\{((w^h)^2, (K^{-1})^T\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Upsilon_n} - ((w^h)^2, \operatorname{div} (K^{-1})^T\mathbf{v})\}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

ou seja,

$$2(\nabla w^h, w^h\mathbf{v}) = (w^h, w^h\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Upsilon_n} - (w^h, w^h \operatorname{div} \mathbf{v}) \quad (4.31)$$

$$2(\nabla w^h, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v}) = (w^h, w^h(K^{-1})^T\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Upsilon_n} - (w^h, w^h \operatorname{div} (K^{-1})^T\mathbf{v}). \quad (4.32)$$

Dessa forma, substituindo as igualdades (4.31) e (4.32) nas primeiras parcelas em (4.28),

obtemos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\{(w^h, w^h \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n} - (w^h, w^h \operatorname{div} \mathbf{v})\} + \\
& -(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2\{(w^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n} - \\
& -(w^h, w^h \operatorname{div} (K^{-1})^T \mathbf{v})\} + 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& -\Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& -\Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + 1/2)^2(w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) + \\
& +2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, \sigma w^h) - \beta^2 \Delta t\theta (w^h, w^h). \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Reagrupando os termos, segue

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(w^h, w^h \operatorname{div} (K^{-1})^T \mathbf{v}) + 2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, \sigma w^h) \\
& -(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, w^h \operatorname{div} \mathbf{v}) - \beta^2 \Delta t\theta (w^h, w^h) - \\
& -\Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + 1/2)^2(w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v}) + \\
& +2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& -\Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& -(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(w^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n} + \\
& +(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, w^h \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n}. \tag{4.34}
\end{aligned}$$

Isto é,

$$\begin{aligned}
& \mathbb{B}_{\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \\
& \geq (\beta\Delta t\theta + \theta/2) (w^h, w^h \{2\sigma + (\beta\Delta t\theta + \theta/2) \operatorname{div} (K^{-1})^T \mathbf{v}\}) - \\
& -(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 \left(w^h, w^h \left\{ \Delta t\tau^{-1} (K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot (K^{-1})^T \mathbf{v} + \frac{\operatorname{div} \mathbf{v}}{\beta\Delta t\theta + \theta/2} + \frac{\beta^2 \Delta t}{(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2} \right\} \right) \\
& +2(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K \nabla w^h, \nabla w^h) - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(\nabla w^h, \nabla w^h) - \\
& +(\beta\Delta t\theta + \theta/2)(w^h, w^h \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n} - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2(w^h, w^h (K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_{\Gamma_n}. \tag{4.35}
\end{aligned}$$

Sejam

$$C_0 = \min \left\{ \inf_{x \in \Omega} (2\sigma + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\operatorname{div} (K^{-1})^T \mathbf{v}), 0 \right\}, \quad (4.36)$$

$$C_1 = \sup_{x \in \Omega} \left\{ \Delta t \tau^{-1} (K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot (K^{-1})^T \mathbf{v} + \frac{\operatorname{div} \mathbf{v}}{\beta\Delta t\theta + \theta/2} + \frac{\beta^2 \Delta t}{(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2} \right\}, \quad (4.37)$$

$$(4.38)$$

$$C_2 = \|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}\|_{L^\infty(\Upsilon_N)}, \quad (4.39)$$

$$C_3 = \|(K^{-1})^T \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}\|_{L^\infty(\Upsilon_N)}. \quad (4.40)$$

Como $w^h = 0$ em Υ_{D_n} e, por hipótese, $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$ em Υ_{N_n} , então

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq (\beta\Delta t\theta + 1/2)C_0(w^h, w^h) - (\beta\Delta t\theta + 1/2)^2 C_1(w^h, w^h) + \\ &\quad + 2(\beta\Delta t\theta + 1/2)(K\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ &\quad - \Delta t \tau^{-1} (\beta\Delta t\theta + 1/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ &\quad - (\beta\Delta t\theta + 1/2)C_2(w^h, w^h)_{\Upsilon_{N_n}} + \\ &\quad + (\beta\Delta t\theta + 1/2)^2 C_3(w^h, w^h)_{\Upsilon_{N_n}}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Considere a desigualdade [28]

$$\|w^h\|_{\Upsilon_n}^2 \leq C^* \|\nabla w^h\|^2 \quad \forall w^h \in V^h. \quad (4.42)$$

Dessa forma, usando a desigualdade de Poincaré-Friedrichs (3.122) e (4.42) nas primeiras parcelas de (4.41) e desprezando o último termo, segue

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq (\beta\Delta t\theta + \theta/2)C_0(w^h, w^h) - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 C_1 C_F^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ &\quad + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K\nabla w^h, \nabla w^h) + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)(K\nabla w^h, \nabla w^h) \\ &\quad - \Delta t \tau^{-1} (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ &\quad - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)C_2 C^*(w^h, w^h). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Usando a desigualdade (4.5) em (4.43), obtemos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq (\beta\Delta t\theta + \theta/2)C_0(w^h, w^h) - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 C_1 C_F^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ &\quad + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\alpha_1 (\nabla w^h, \nabla w^h) + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\alpha_1 (\nabla w^h, \nabla w^h) \\ &\quad - \Delta t \tau^{-1} (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ &\quad - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)C_2 C^*(w^h, w^h). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Agora, usando (3.122) na terceiro termo em (4.44), vem

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & (\beta\Delta t\theta + \theta/2)C_0(w^h, w^h) - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 C_1 C_F^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ & + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\alpha_1 (C_F^{-1})^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) + \\ & + (\beta\Delta t\theta + \theta/2)\alpha_1 (\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ & - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 (\nabla w^h, \nabla w^h) - \\ & - (\beta\Delta t\theta + \theta/2)^2 C_2 C^*(w^h, w^h). \end{aligned} \quad (4.45)$$

Colocando os termos comuns em evidência, em (4.45), temos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & (\beta\Delta t\theta + \theta/2) [\alpha_1 (C_F^{-1})^2 + c_0] (w^h, w^h) + \\ & + (\beta\Delta t\theta + \theta/2) \{ \alpha_1 - C_2 C^* - \Delta t\tau^{-1}(\beta\Delta t\theta + \theta/2) [1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2] \} \cdot \\ & (\nabla w^h, \nabla w^h). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Seja $\beta = \frac{1}{\Delta t\theta} \left[\frac{\alpha_1}{1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2} - \frac{\theta}{2} \right]$.

Assim, substituindo β em (4.46), temos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq & \frac{\alpha_1}{1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2} [\alpha_1 (C_F^{-1})^2 + c_0] (w^h, w^h) + \\ & + \frac{\alpha_1}{1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2} [\alpha_1 - C_2 C^* - \alpha_1 \Delta t\tau^{-1}] (\nabla w^h, \nabla w^h). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Suponhamos $\delta_1 = \alpha_1 (C_F^{-1})^2 + C_0 > 0$ e $\delta_2 = (1 - \Delta t\tau^{-1}) \alpha_1 - C_2 C^* > 0$.

Tomando $\tilde{\delta} = \min\{\delta_1, \delta_2\}$, temos

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \frac{\alpha_1}{1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2} \tilde{\delta} [(w^h, w^h) + (\nabla w^h, \nabla w^h)], \quad (4.48)$$

ou seja,

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \delta \|w^h\|_1^2, \quad (4.49)$$

onde $\delta = \frac{\alpha_1 \tilde{\delta}}{1 + \Delta t\tau C_1 C_F^2}$.

Caso II: Agora, precisamos provar que

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \lambda (\|w^h\|_1^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2). \quad (4.50)$$

Para isso, tome

$$C = \max\{\|\mathbf{v}^T K^{-1}\|, \|\sigma\|, 1/2\}. \quad (4.51)$$

Como $\Delta t > 0$, podemos tomar um $L \in \mathbb{R}$ pequeno e positivo tal que

$$-2L^2C - (1 + 6C\Delta t)L + \Delta t > 0 \text{ e } L < \frac{2\Delta t\tau - \theta}{2(2\Delta t\tau\|K\| + \theta C)} \quad (4.52)$$

Em um ponto do domínio, podemos ter

$$\frac{L^4}{1 + 4L^2}(\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2) < \|w^h\|_1^2 \quad (4.53)$$

ou

$$\frac{L^4}{1 + 4L^2}(\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2) \geq \|w^h\|_1^2. \quad (4.54)$$

1. Suponhamos que valha (4.53). Por (4.49), teremos

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \delta \|w^h\|_1^2 \\ &= \delta \left(\frac{1}{2} \|w^h\|_1^2 + \frac{1}{2} \|w^h\|_1^2 \right) \\ &> \delta \left(\frac{1}{2} \|w^h\|_1^2 + \frac{1}{2} \frac{L^4}{1 + 4L^2} \|\mathbf{q}^h\|^2 + \frac{1}{2} \frac{L^4}{1 + 4L^2} \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \right) \end{aligned}$$

Seja $0 < \lambda_1 < \min \left\{ \frac{\sigma}{2}, \frac{\sigma}{2} \frac{L^4}{1 + 4L^2} \right\}$. Dessa forma,

$$\mathbb{B}_{3\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} > \lambda_1 (\|w^h\|_1^2 + \|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2)$$

2. Suponhamos agora (4.54).

Novamente, vamos trabalhar com duas possibilidades:

$$\|\mathbf{q}^h\| \leq 2L \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| \quad (4.55)$$

ou

$$\|\mathbf{q}^h\| > 2L \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| \quad (4.56)$$

- Supondo (4.55)

Sabemos que

$$\begin{aligned}
\|w^h\|^2 &\leq \|w^h\|_1^2 \\
&\leq \frac{L^4}{1+4L^2}(\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2) \\
&\leq \frac{L^4}{1+4L^2}(4L^2\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2) \\
&= \frac{L^4}{1+4L^2}(1+4L^2)\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \\
&= L^4\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \\
&< L^2\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2,
\end{aligned}$$

ou seja

$$\|w^h\| \leq L\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|. \quad (4.57)$$

Similarmente,

$$\|\nabla w^h\| \leq L\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|. \quad (4.58)$$

Pela definição de $\mathbb{B}_{3_\theta}\{\cdot; \cdot\}$, segue que

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + 2\Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h, -\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\
&\quad + \Delta t \theta \|-\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h\|^2 + \\
&\quad + \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \\
&\quad + \theta (\sigma w^h, w^h) + \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h + K \nabla w^h\|^2. \quad (4.59)
\end{aligned}$$

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz (3.19) em (4.59), obtemos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - 2\Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| \|-\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h\| + \\
&\quad + \Delta t \theta \|-\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h\|^2 - \\
&\quad - \theta \|w^h\| \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\| + \\
&\quad + \theta (\sigma w^h, w^h) + \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h + K \nabla w^h\|^2. \quad (4.60)
\end{aligned}$$

Desprezando a terceira e as duas últimas parcelas, e usando a desigualdade

triangular (3.21) em (4.60), temos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - 2\Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (\|\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\| + \|\sigma w^h\|) + \\
&\quad - \theta \|w^h\| (\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\|) \\
&= \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - 2\Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (\|\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\| + \|\sigma\| \|w^h\|) + \\
&\quad - \theta \|w^h\| \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| - \theta \|w^h\| \|\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\|. \quad (4.61)
\end{aligned}$$

Utilizando Cauchy-Schwartz (3.19), segue

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - 2\Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (\|\mathbf{v}^T K^{-1}\| \|\mathbf{q}^h\| + \|\sigma\| \|w^h\|) - \\
&\quad - \theta \|w^h\| \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| - \theta \|w^h\| \|\mathbf{v}^T K^{-1}\| \|\mathbf{q}^h\|. \quad (4.62)
\end{aligned}$$

Por (4.51), $C \geq \|\mathbf{v}^T K^{-1}\|$ e $C \geq \|\sigma\|$, assim

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - 2\Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (C \|\mathbf{q}^h\| + C \|w^h\|) \\
&\quad - \theta \|w^h\| \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| - \theta C \|w^h\| \|\mathbf{q}^h\| \\
&= \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (2\Delta t C \|\mathbf{q}^h\| + 2\Delta t C \|w^h\| + \|w^h\|) \\
&\quad - \theta C \|w^h\| \|\mathbf{q}^h\|. \quad (4.63)
\end{aligned}$$

Pelas desigualdades (4.55) e (4.57) obtemos:

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - \theta \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| (4L\Delta t C \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| + \\
&\quad + 2\Delta t L C \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| + L \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|) \\
&\quad - 2\theta L^2 C \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \\
&= \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \theta (-2L^2 C - (1 + 6C\Delta t) L + \Delta t) \\
&= D \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2, \quad (4.64)
\end{aligned}$$

onde $D = \theta(-2L^2 C - (1 + 6C\Delta t) L + \Delta t) > 0$ por (4.52). Assim, por (4.49) e (4.64), temos

$$\begin{aligned}
2\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \delta \|w^h\|_1^2 + D \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \\
&= \delta \|w^h\|_1^2 + D \left(\frac{1}{2} \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \frac{1}{2} \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 \right)
\end{aligned} \tag{4.65}$$

Por (4.55), temos

$$2\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \delta \|w^h\|_1^2 + \frac{D}{2} \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \frac{D}{2} \frac{1}{4L^2} \|\mathbf{q}^h\|^2 \tag{4.66}$$

Fazendo

$$\lambda_2 < \min \left\{ \frac{\delta}{2}, \frac{D}{4}, \frac{D}{16L^2} \right\},$$

por (4.66) teremos

$$\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \lambda_2 (\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \|w^h\|_1^2).$$

- Supondo (4.56)

Sabemos que

$$\begin{aligned}
\|w^h\|^2 &\leq \|w^h\|_1^2 \\
&\leq \frac{L^4}{1+4L^2} (\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2) \\
&< \frac{L^4}{1+4L^2} \left(\|\mathbf{q}^h\|^2 + \frac{1}{4L^2} \|\mathbf{q}^h\|^2 \right) \\
&= \frac{L^4}{1+4L^2} \frac{4L^2+1}{4L^2} \|\mathbf{q}^h\|^2 \\
&< L^2 \|\mathbf{q}^h\|^2,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\|w^h\| \leq L \|\mathbf{q}^h\|. \tag{4.67}$$

Similarmente,

$$\|\nabla w^h\| \leq L \|\mathbf{q}^h\| \tag{4.68}$$

Novamente, pela definição de $\mathbb{B}_{3_\theta}\{\cdot; \cdot\}$, temos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &= \Delta t \theta (\operatorname{div} \mathbf{q}^h + \operatorname{div} \mathbf{q}^h, -\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h + \sigma w^h) + \\
&\quad + \theta (w^h, \operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h) + \theta (\sigma w^h, w^h) + \\
&\quad + \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 + 2\Delta t \tau (\mathbf{q}^h, K \nabla w^h) + \Delta t \tau \|K \nabla w^h\|^2
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Dessa forma, usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz (3.19), a desigualdade triangular (3.21) e desprezando a primeira e a última parcela em (4.69), obtemos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq -\theta\|w^h\|\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h - \mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\| + \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 - \\
&\quad - 2\Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\| \|K \nabla w^h\| \\
&\geq \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 - \theta\|w^h\| (\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{v}^T K^{-1} \mathbf{q}^h\|) - \\
&\quad - 2\Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\| \|K \nabla w^h\| \\
&\geq \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 - \theta\|w^h\| (\|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\| + \|\mathbf{v}^T K^{-1}\| \|\mathbf{q}^h\|) - \\
&\quad - 2\Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\| \|K\| \|\nabla w^h\|. \tag{4.70}
\end{aligned}$$

Utilizando as desigualdades (4.56), (4.67) e (4.68) em (4.70), juntamente com o fato de que, por (4.51), $C \geq \|\mathbf{v}^T K^{-1}\|$, obtemos

$$\begin{aligned}
\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \Delta t \tau \|\mathbf{q}^h\|^2 - \theta L \|\mathbf{q}^h\| \left(\frac{1}{2L} \|\mathbf{q}^h\| + C \|\mathbf{q}^h\| \right) - \\
&\quad - 2\Delta t \tau L \|\mathbf{q}^h\|^2 \|K\| \\
&= \left(\frac{2\Delta t \tau - \theta}{2} - (2\Delta t \tau \|K\| + \theta C) L \right) \|\mathbf{q}^h\|^2. \\
&= E \|\mathbf{q}^h\|^2, \tag{4.71}
\end{aligned}$$

onde $E = \frac{2\Delta t \tau - \theta}{2} - (-2\Delta t \tau \|K\| + \theta C) L$. Por (4.52), teremos

$$\begin{aligned}
E &= \frac{2\Delta t \tau - \theta}{2} - (2\Delta t \tau \|K\| + \theta C) L \\
&> \frac{2\Delta t \tau - \theta}{2} - (2\Delta t \tau \|K\| + \theta C) \frac{2\Delta t \tau - \theta}{2(2\Delta t \tau \|K\| + \theta C)} \\
&\geq 0.
\end{aligned}$$

Assim, por (4.49) e (4.71), temos

$$\begin{aligned}
2\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} &\geq \delta \|w^h\|_1^2 + E \|\mathbf{q}^h\|^2 \\
&= \delta \|w^h\|_1^2 + E \left(\frac{1}{2} \|\mathbf{q}^h\|^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{q}^h\|^2 \right) \tag{4.72}
\end{aligned}$$

Por (4.56), temos

$$2\mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \delta \|w^h\|_1^2 + 4L^2 \frac{E}{2} \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \frac{E}{2} \|\mathbf{q}^h\|^2 \tag{4.73}$$

Fazendo

$$\lambda_3 < \min \left\{ \frac{\delta}{2}, L^2, \frac{E}{4} \right\},$$

por (4.73) teremos

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{ (w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \geq \lambda_3 (\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \|w^h\|_1^2).$$

Tome $\lambda = \min\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$. Portanto,

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{ (w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \geq \lambda (\|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \|w^h\|_1^2),$$

ou seja

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{ (w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \geq \lambda \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\operatorname{div})}^2. \quad (4.74)$$

Lema 13 (*Consistência de P_{3_θ}*)

A solução exata $(u, \mathbf{p})$, satisfaz a formulação variacional discreta

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{ (u, \mathbf{p}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = \mathbb{L}_{3_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (4.75)$$

Demonstração: Se substituirmos as variáveis $(u^h, \mathbf{p}^h)$ em (4.14), pela solução exata $(u, \mathbf{p})$, a igualdade continua válida.

Lema 14 (*Ortogonalidade do erro de P_{3_θ}*)

Sejam $e = u - u^h$ e $\mathbf{e} = \mathbf{p} - \mathbf{p}^h$. Então

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{ (e, \mathbf{e}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = 0 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (4.76)$$

Demonstração: De fato,

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{3_\theta} \{ (e, \mathbf{e}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} &= \mathbb{B}_{3_\theta} \{ (u, \mathbf{p}); (w^h, \mathbf{q}^h) \} - \mathbb{B}_{3_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} \\ &= \mathbb{L}_{3_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) - \mathbb{L}_{3_\theta}(w^h, \mathbf{q}^h) = 0. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Lema 15 (*Melhor aproximação de P_{3_θ}*)

Lema de Céa: Existe uma constante β_3 , independente do subespaço produto $V_n^h \times S_n^h$, tal

que

$$\|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})} \leq \beta_3 \|(u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})} \quad \forall (\tilde{u}^h, \tilde{\mathbf{p}}^h) \in V_n^h \times S_n^h, \quad (4.78)$$

onde $\tilde{u}^h$ e $\tilde{\mathbf{p}}^h$ são os interpolantes das variáveis u^h e $\mathbf{p}^h$, respectivamente.

Demonstração: Em (4.74), provamos que

$$\lambda \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}^2 \leq \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u^h, \mathbf{p}^h); (u^h, \mathbf{p}^h)\} \quad \forall (u^h, \mathbf{p}^h) \in V_n^h \times S_n^h. \quad (4.79)$$

Assim,

$$\lambda \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}^2 \leq \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\}. \quad (4.80)$$

Considerando a identidade,

$$\begin{aligned} & \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\} = \\ & = \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\} + \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (\tilde{u}^h - u^h, \tilde{\mathbf{p}}^h - \mathbf{p}^h)\}, \end{aligned} \quad (4.81)$$

e sabendo por (4.76), que

$$\mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (\tilde{u}^h - u^h, \tilde{\mathbf{p}}^h - \mathbf{p}^h)\} = 0, \quad (4.82)$$

substituindo (4.81) em (4.80), obtemos

$$\lambda \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}^2 \leq \mathbb{B}_{3_\theta} \{(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h); (u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\}. \quad (4.83)$$

Dessa forma, por (4.17), concluímos

$$\begin{aligned} \lambda \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}^2 & \leq M_3 \|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})} \times \\ & \|(u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}, \end{aligned} \quad (4.84)$$

ou seja,

$$\|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})} \leq \beta_3 \|(u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}, \quad (4.85)$$

onde $\beta_3 = M_3/\lambda$.

4.4 Formulação Variacional com Rotacional

Para obter uma melhor aproximação para o fluxo, adicionamos ao sistema (4.6) a equação identicamente nula

$$\text{rot} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}) = 0 \quad \text{em} \quad \Omega \times (0, T), \quad (4.86)$$

com condição de contorno

$$\mathbf{n} \wedge \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p} = 0 \quad \text{em} \quad \Gamma_D \times (0, T), \quad (4.87)$$

onde $\wedge$ denota produto externo vetorial.

Considere o espaço de função:

$$W = \{ \mathbf{p} \in H(\text{div}) \cap H(\text{rot}); \mathbf{n} \cdot \mathbf{p}^h = 0 \text{ em } \Gamma_N, \mathbf{n} \wedge \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h = 0 \text{ em } \Gamma_D \}, \quad (4.88)$$

com $H(\text{div})$ e $H(\text{rot})$ definidos em (2.15) e (2.16) respectivamente, e as seguintes normas

$$\|\mathbf{q}^h\|_{H(\text{rot})}^2 \equiv \|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\text{rot} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h\|^2 \quad \forall \mathbf{q} \in H(\text{rot}), \quad (4.89)$$

$$\|\mathbf{q}^h\|_{H(\text{div}, \text{rot})}^2 \equiv \|\mathbf{q}^h\|^2 + \|\text{div} \mathbf{q}^h\|^2 + \|\text{rot} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h\|^2 \quad \forall \mathbf{q} \in W, \quad (4.90)$$

$$\|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})}^2 \equiv \|w^h\|_1^2 + \|\mathbf{q}^h\|_{H(\text{div}, \text{rot})}^2 \quad \forall (u, \mathbf{q}) \in H^1 \times W. \quad (4.91)$$

Definimos o subespaço de elementos finitos como:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_n^h = \{ & \mathbf{p}^h \in [C^0(Q_n)]^m, \mathbf{p}^h|_{Q_n^e} \in [\mathbb{P}_k(Q_n^e)]^m; \mathbf{n} \wedge \mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h = 0 \text{ em } \Upsilon_{Dn} \\ & \text{e } \mathbf{n} \cdot \mathbf{p}^h = 0 \text{ em } \Upsilon_{Nn} \} \subset [L^2(Q_n)]^m. \end{aligned} \quad (4.92)$$

Dessa forma, podemos obter o seguinte problema:

Problema P4_θ: Para $n = 0, 1, \dots, N-1$ achar $u^h \in V_n^h$ e $\mathbf{p}^h \in \tilde{S}_n^h$ tais que

$$\mathbb{B}_{4_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = \mathbb{L}_{4_\theta} (w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h, \quad (4.93)$$

onde

$$\mathbb{B}_{4_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} = \mathbb{B}_{3_\theta} \{ (u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h) \} + (\text{rot} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{p}^h), \text{rot} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h)). \quad (4.94)$$

A existência e unicidade da solução para *Problema P4_θ*, novamente é assumida pelo Teorema de Lax-Milgram (1), fornecendo:

Lema 16 (*Continuidade de P4_θ*)

Existe uma constante $M_4 > 0$ tal que

$$|\mathbb{B}_{4_\theta}\{(u^h, \mathbf{p}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\}| \leq M_4 \|(u^h, \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})}, \quad (4.95)$$

para todos $(u^h, \mathbf{p}^h), (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h$.

Lema 17 (Coercividade de P_{4_θ})

Seja $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \leq 0$ em Υ_{N_n} . Então, existe uma constante $\tilde{\lambda} > 0$ tal que

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \tilde{\lambda} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})}^2 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h. \quad (4.96)$$

Demonstração: Pela definição da forma bilinear (4.94), temos

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{B}_{3_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} + (\text{rot}(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{q}^h), \text{rot}(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{q}^h)). \quad (4.97)$$

Assim, por (4.74), obtemos

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \lambda \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div})}^2 + \|\text{rot}(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{q}^h)\|_{H(\text{rot})}^2. \quad (4.98)$$

Portanto, existe $\tilde{\lambda} > 0$, tal que

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(w^h, \mathbf{q}^h); (w^h, \mathbf{q}^h)\} \geq \tilde{\lambda} \|(w^h, \mathbf{q}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})}^2. \quad (4.99)$$

4.4.1 Análise Numérica

Lema 18 (Consistência de P_{4_θ})

A solução exata $(u, \mathbf{p})$, satisfaz a formulação variacional discreta

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(u, \mathbf{p}); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = \mathbb{L}_\theta(w^h, \mathbf{q}^h) \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h. \quad (4.100)$$

Lema 19 (Ortogonalidade do erro de P_{4_θ})

Sejam $e = u - u^h$ e $\mathbf{e} = \mathbf{p} - \mathbf{p}^h$. Então

$$\mathbb{B}_{4_\theta}\{(e, \mathbf{e}); (w^h, \mathbf{q}^h)\} = 0 \quad \forall (w^h, \mathbf{q}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h. \quad (4.101)$$

Lema 20 (Melhor aproximação de P_{4_θ})

Lema de Céa: Existe uma constante β_4 , independente do subespaço produto $V_n^h \times \tilde{S}_n^h$, tal que

$$\|(u - u^h), (\mathbf{p} - \mathbf{p}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})} \leq \beta_4 \|(u - \tilde{u}^h), (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}}^h)\|_{H^1 \times H(\text{div}, \text{rot})}, \quad (4.102)$$

para todo $(\tilde{u}^h, \tilde{\mathbf{p}}^h) \in V_n^h \times \tilde{S}_n^h$.

Demonstração. Demonstração análoga ao Lema 15.

Assumindo que o domínio Ω é convexo, levando em conta a expressão do Lema de Céa (4.102), usando a equivalência das normas $\|\cdot\|_{H(\text{div}, \text{rot})}$ e $\|\cdot\|_{H^1}$ e utilizando as propriedades de interpolação encontradas no Apêndice e em [29, 13, 14, 17], obtemos

$$\|u - u^h\|_{H^1} + \|\mathbf{p} - \mathbf{p}^h\|_{H(\text{div}, \text{rot})} \leq Ch^k (\|u\|_{k+1} + \|\mathbf{p}\|_{k+1}). \quad (4.103)$$

4.5 Resultados Numéricos

Apresentamos nesta seção alguns exemplos utilizados na literatura para uma avaliação da formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo aplicada à equação de advecção-difusão, com coeficiente de reação é nulo ($\sigma = 0$) para diferentes valores de θ e a influência do fator estabilizador τ .

As matrizes A_0, A_1, A_2 e B que descrevem o sistema de equações, para o problema misto de advecção-difusão, são dadas por:

$$A_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.104)$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \Delta t \tau k_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.105)$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ \Delta t \tau k_y & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.106)$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & -v_x k_x^{-1} & -v_y k_y^{-1} \\ 0 & \Delta t \tau & 0 \\ 0 & 0 & \Delta t \tau \end{bmatrix}, \quad (4.107)$$

para

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}. \quad (4.108)$$

4.5.1 Exemplo 1: Problema unidimensional de advecção-difusão

Apresentamos inicialmente, o problema de advecção-difusão definido no domínio unidimensional $[0, 1]$ com o campo de velocidade constante $v = 1$ e coeficiente de difusão k dado por:

$$\begin{aligned} u_t + v k^{-1} q + \operatorname{div} q &= 0, \\ q + k u_x &= 0, \end{aligned} \quad (4.109)$$

com condições de contorno

$$\begin{aligned} u(0, t) &= 1, \\ k u_x(1, t) &= 0, \end{aligned} \quad (4.110)$$

e condição inicial

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1, & \text{para } x = 0 \\ 0, & \text{para } x \in (0, 1]. \end{cases} \quad (4.111)$$

A Figura 4.1 mostra os resultados para uma discretização com 10 elementos lineares, com diferentes constantes de difusividade, para $\Delta t = 0, 1$, θ iguais a 0,5; 0,55; 0,67 e 1,0 e $\tau = 1000$.

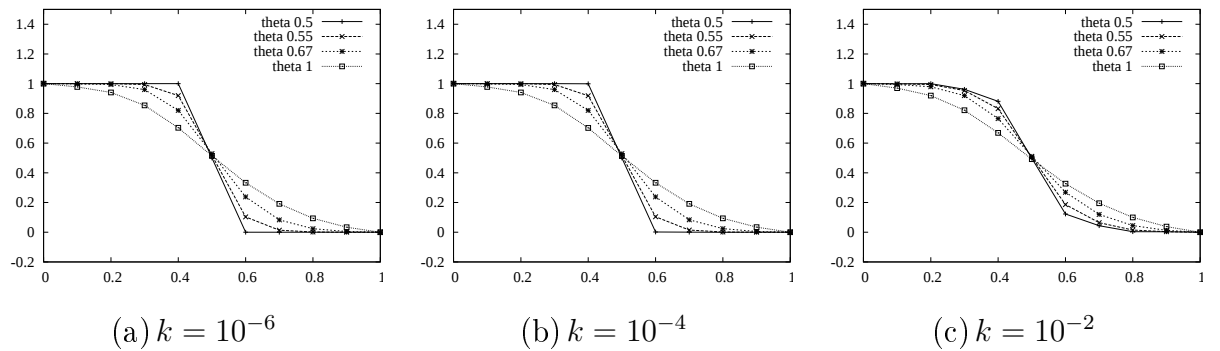


Figura 4.1: Problema 1 advecção-difusão em $t = 0, 5$

4.5.2 Exemplo 2: Problema unidimensional de advecção-difusão

Considere o exemplo unidimensional proposto em [30] descrito no domínio unidimensional $[0, 150]$, definido pelas seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= \frac{2.5}{l} e^{-(1/2)X^2} \\ u(0, t) &= 0, \\ u(150, t) &= \frac{2.5}{l_1} e^{-(1/2)L^2}, \end{aligned} \quad (4.112)$$

onde $X = (x - x_0)/l$, $l = 3, 5$, $L = (150 - x_0 - t)/l_1$, $l_1 = l\sqrt{1 + 2kt/l^2}$ e $x_0 = 20$ para $Pe = 5$. O campo de velocidade é constante, $v = 1$, o termo fonte é nulo e $h = 1$. Apresentamos nas Figuras 4.2 e 4.3, resultados para valores de θ iguais a 0,5, 0,55, 0,67 e 1,0 com $\Delta t = 0,1$ e $\tau = 100$. Para $Pe = 5$ são exibidos, em cada gráfico, resultados nos instantes de tempo $t = 20, 60, 100$ e para $Pe = 0,1$ apresentamos resultados nos instantes $t = 2, 6, 20$.

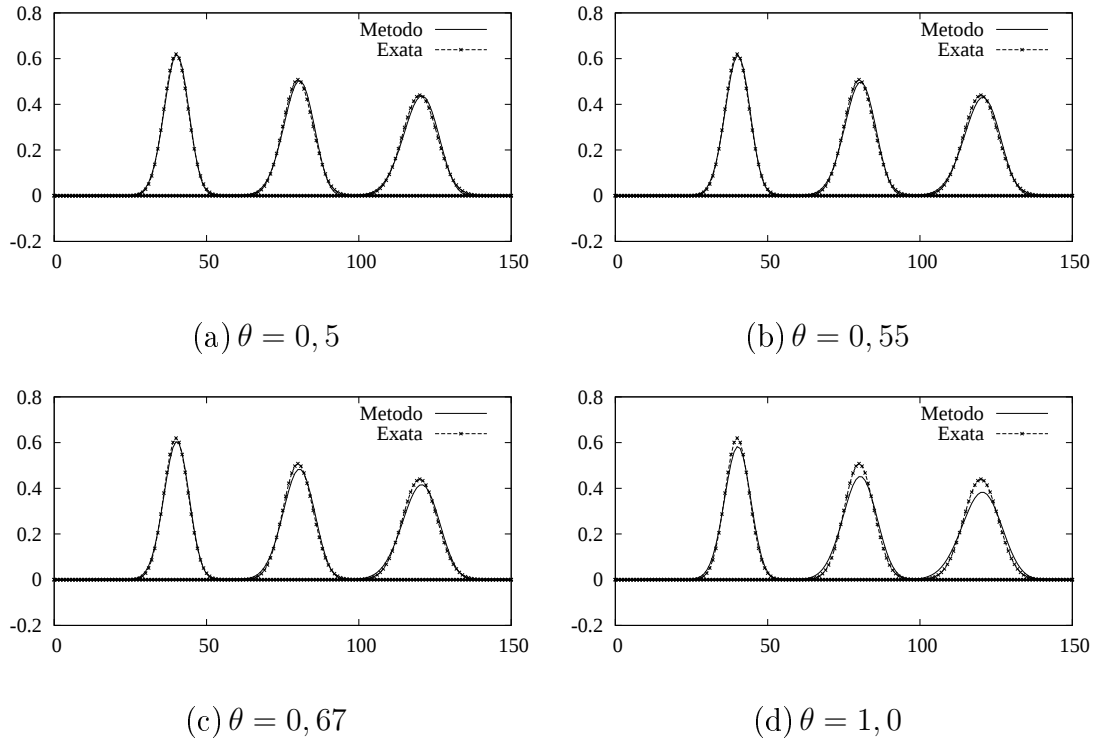


Figura 4.2: Exemplo 1 de advecção-difusão com $Pe=5$ em $t=20, 60, 100$

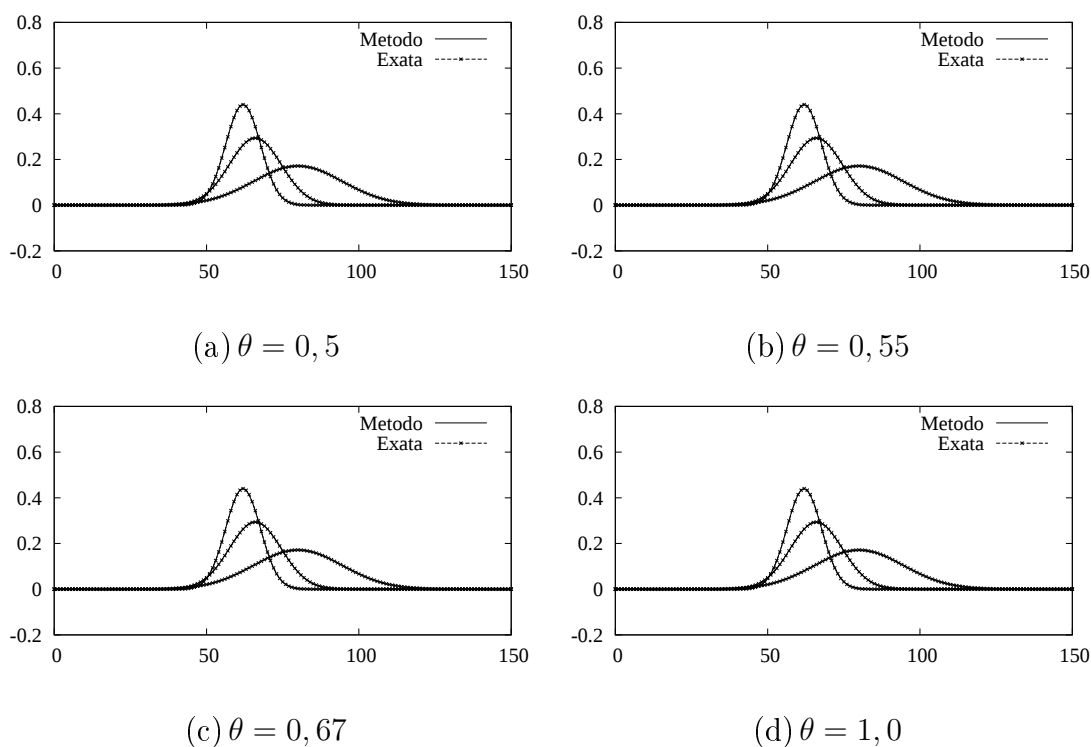


Figura 4.3: Problema 2 de advecção-difusão com $Pe=0,1$ em $t=2, 6, 20$

4.5.3 Exemplo 3: Problema bidimensional de advecção-difusão

A seguir apresentamos o problema de advecção-difusão com velocidade inclinada à malha. Para esse exemplo o domínio espacial é o quadrado $(0,1) \times (0,1)$ discretizado em uma malha de 32×32 elementos isoparamétricos bilineares com condições de contorno apresentado na Figura 4.4. O campo de velocidade é constante, $\|\mathbf{v}\| = 1$, com componentes $v_x = \cos \alpha$ e $v_y = \sin \alpha$, o termo fonte é nulo e a constante de difusividade é igual a 10^{-5} .

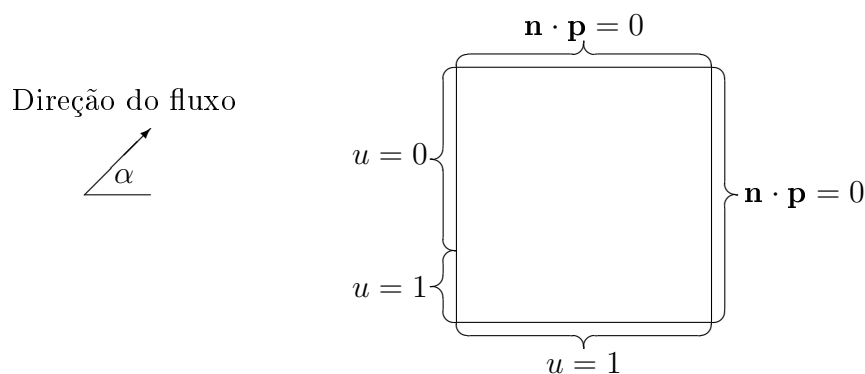


Figura 4.4: Ilustração do problema bidimensional de advecção-difusão

Os valores de α são 22.5° , 45° e 67.5° . Gráficos de superfícies de solução do método são exibidos nas , nos instantes $t = 0,8$ e $t = 2,0$, com θ iguais $0,5$, $0,55$, $0,67$ e $1,0$. Consi-

deremos $\Delta t = 0,02$ com $\tau = 50000$ e $\Delta t = 0,1$ com $\tau = 10^4$. Resultados também são obtidos para a formulação com o rotacional.

Como vimos no Capítulo 3, à medida que o tempo evolui, a solução é levada a um estado estacionário, apresentado resultados similares para quase todos valores de θ . Dessa forma, como os resultados numéricos no regime permanente para θ iguais a 0,55; 0,67 e 1,0, são similares, optamos por exibir no tempo 2,0, apenas soluções com $\theta = 0,5$ e $\theta = 0,55$ e para as soluções incluindo o rotacional à formulação, apresentamos os gráficos com resultados apenas para $\theta = 0,5$ e $\theta = 0,55$.

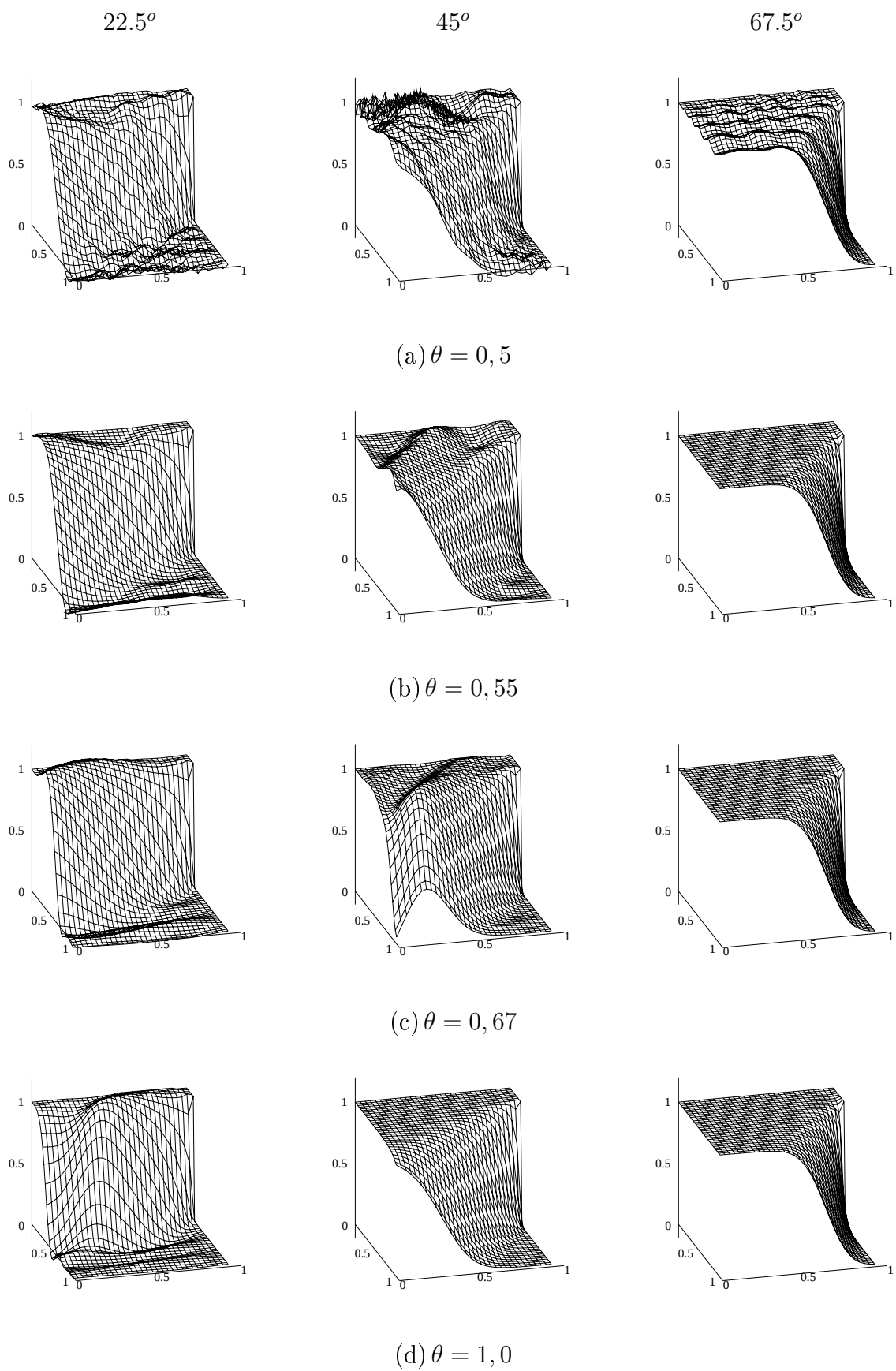


Figura 4.5: Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8

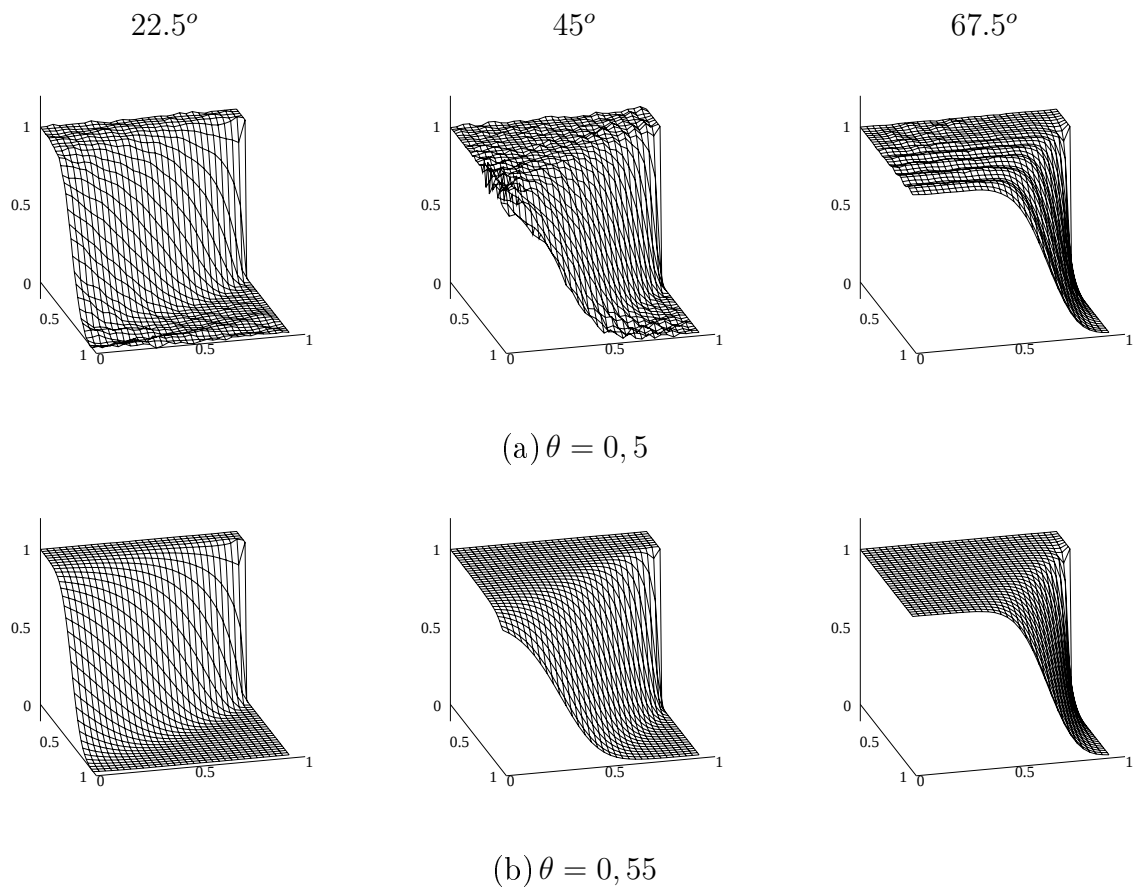


Figura 4.6: Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0

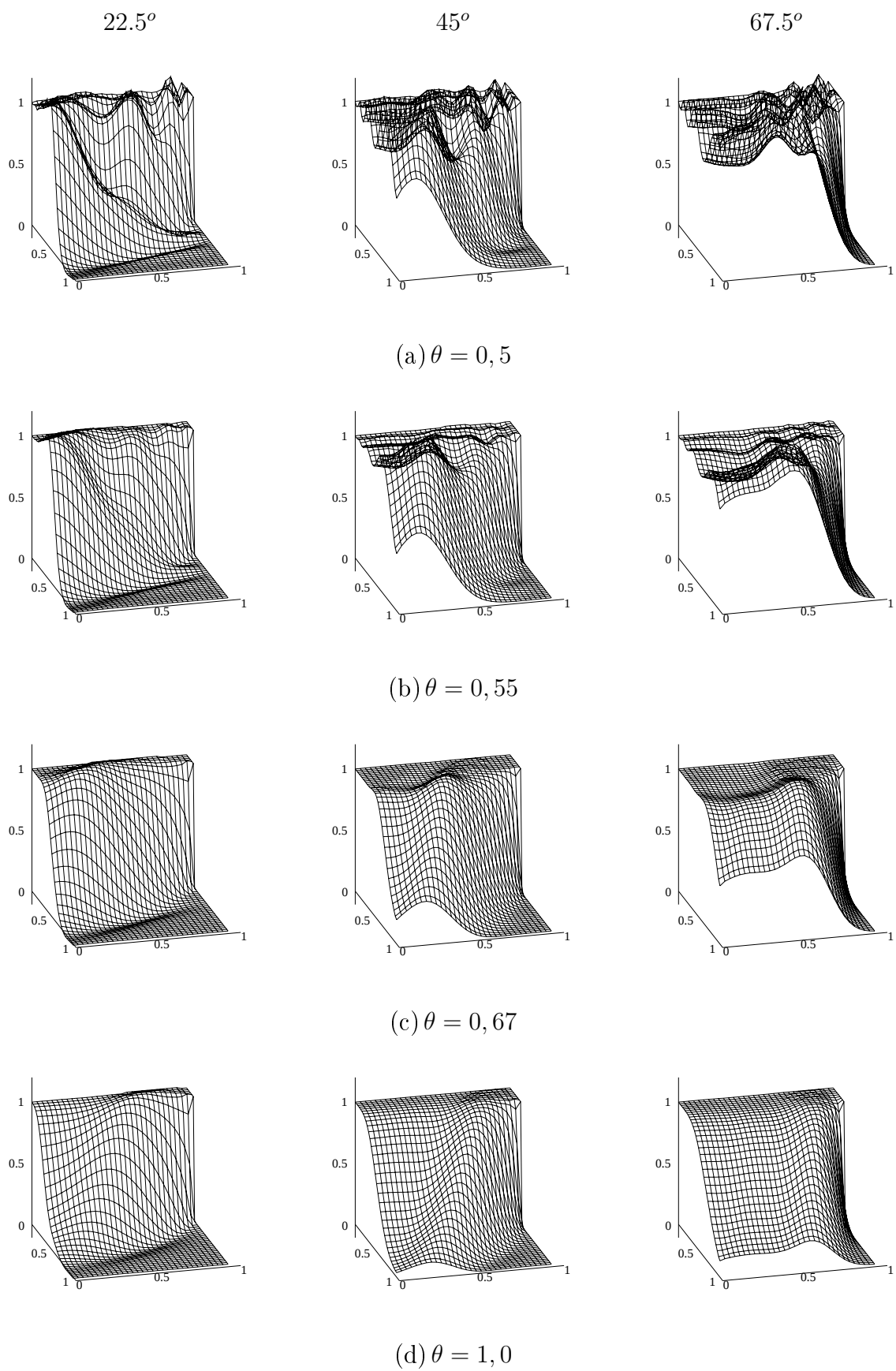


Figura 4.7: Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8

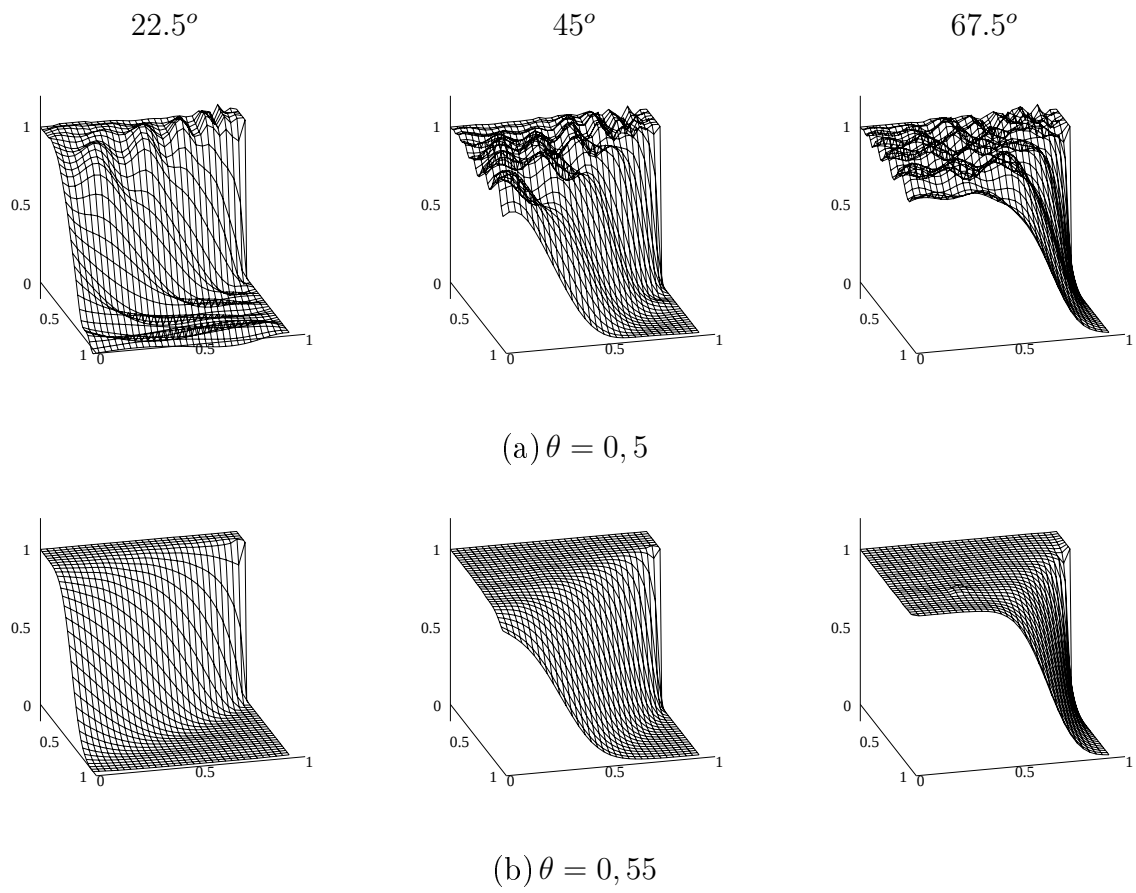


Figura 4.8: Problema de advecção-difusão para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0

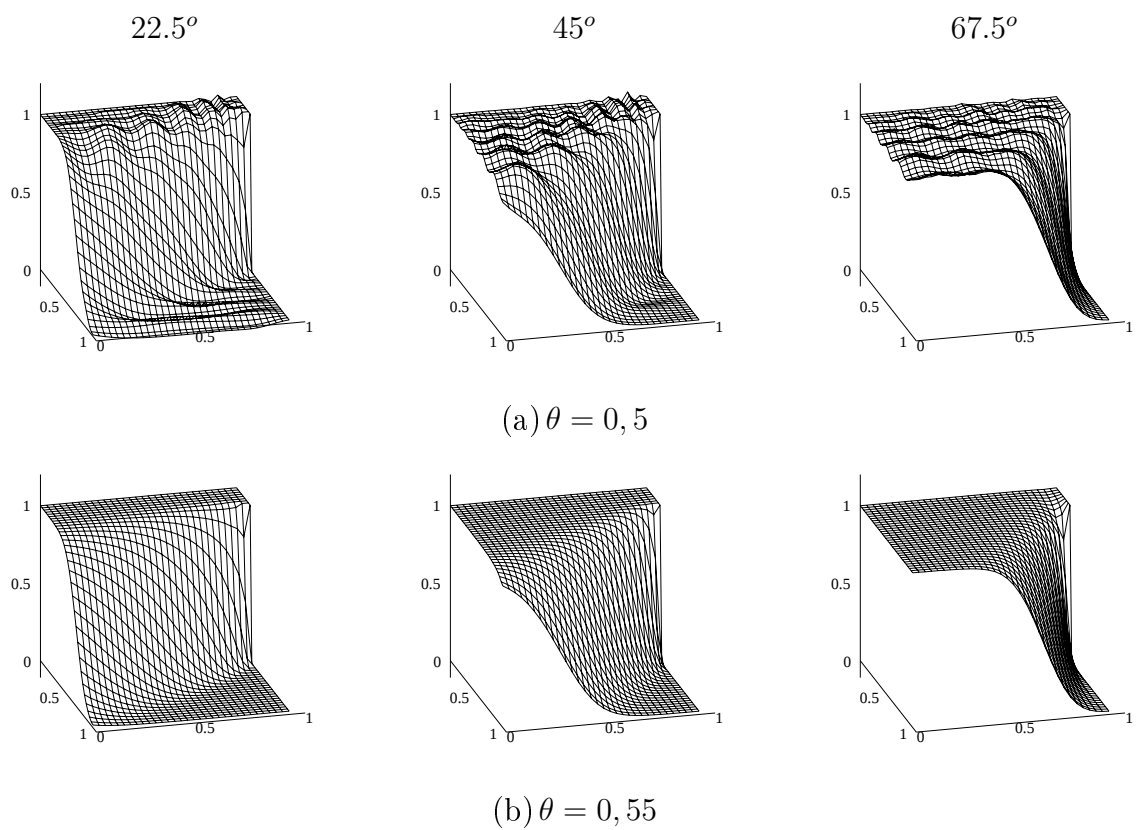


Figura 4.9: Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,02$ no tempo 0,8

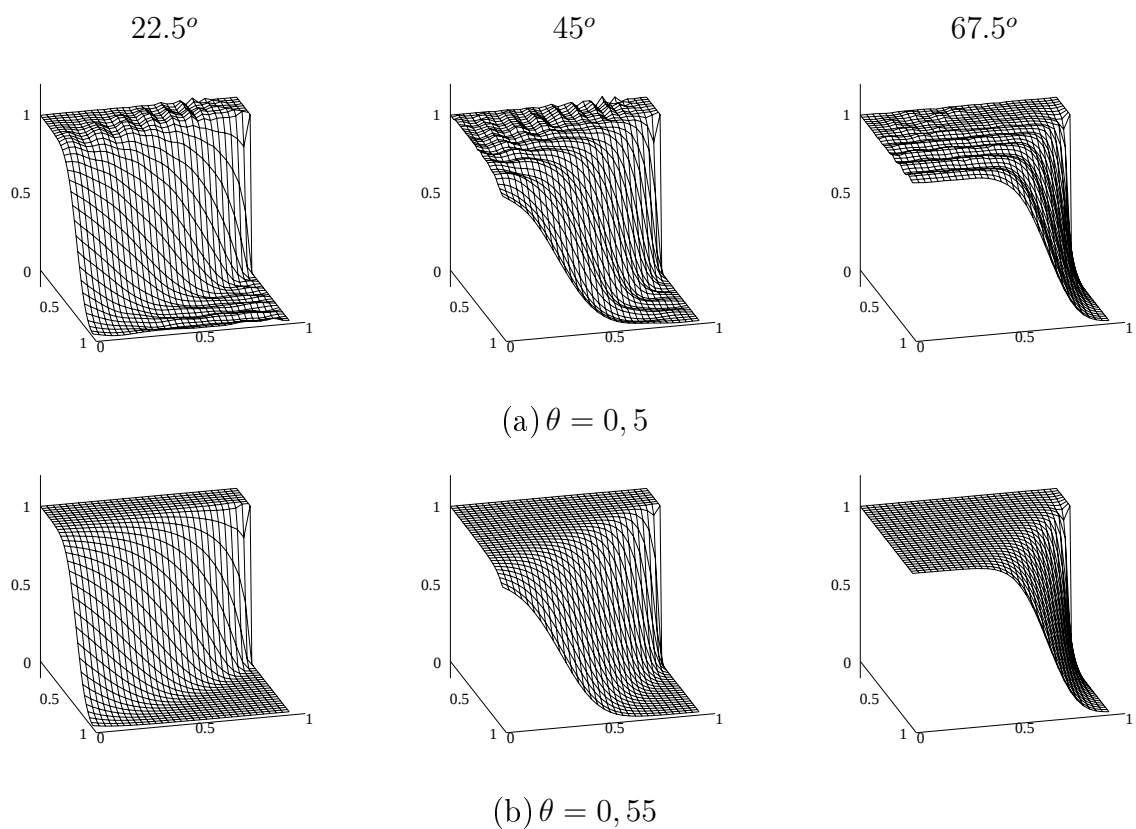


Figura 4.10: Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,02$ no tempo 2,0

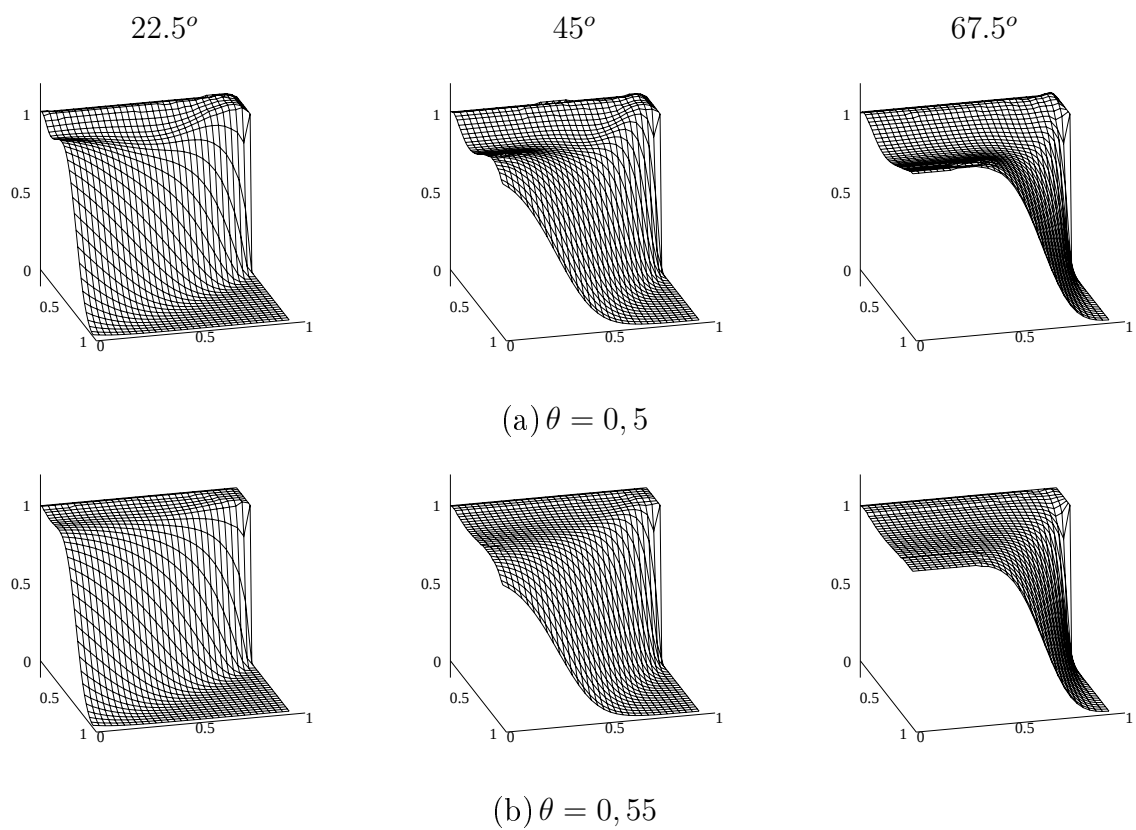


Figura 4.11: Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,1$ no tempo 0,8

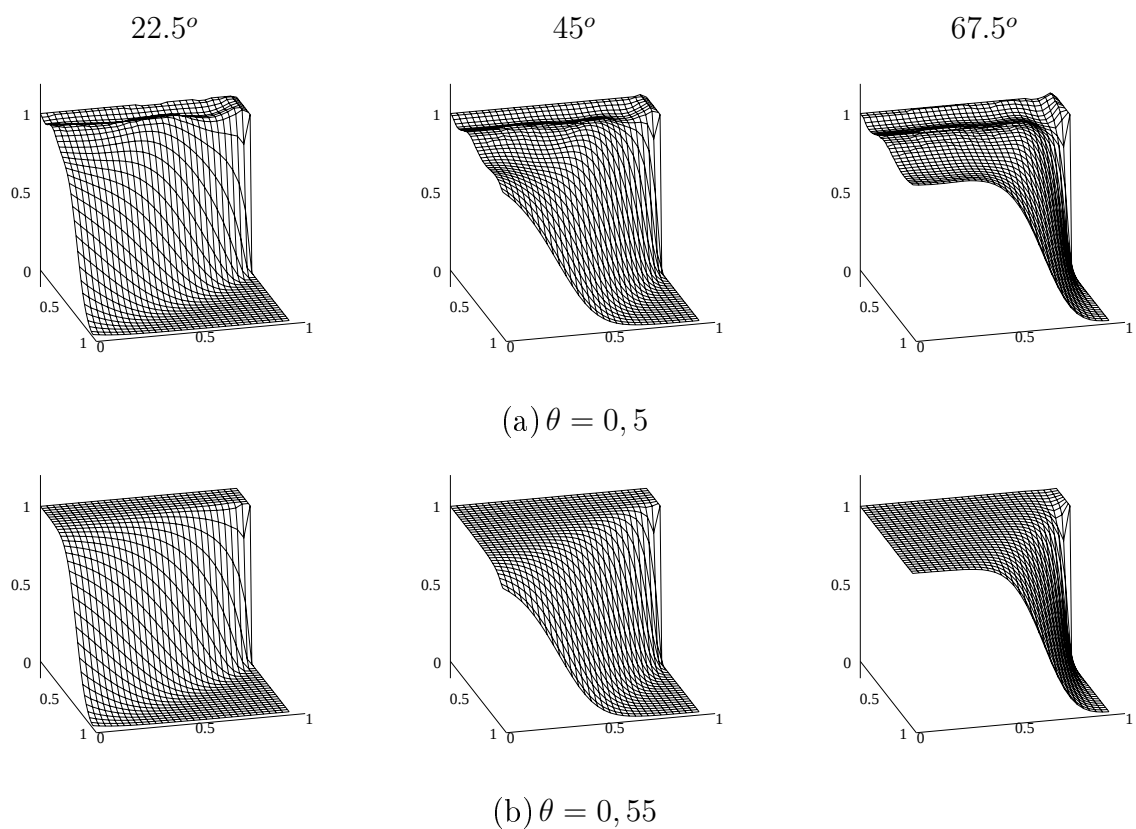


Figura 4.12: Problema de advecção-difusão com rot para $\Delta t = 0,1$ no tempo 2,0

De um modo geral, os resultados numéricos da formulação mista de mínimos quadrados espaço-tempo descontínuo aplicada à equação de advecção-difusão apresentam características semelhantes as soluções numéricas da formulação mista aplicada à equação de advecção. Os resultados incluindo a equação do rotacional nulo comprovam a análise de estabilidade e convergência realizadas na seção 4.4.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho apresentamos uma formulação de mínimos quadrados espaço-tempo descontinuo para problemas de transporte.

Inicialmente aplicamos a formulação ao problema escalar de advecção-reação bidimensional. Para problemas unidimensionais puramente advectivos, propostos inicialmente em [16], apesar da formulação perder a simetria, uma de suas características, sua análise mostrou excelentes propriedades de precisão e estabilidade. No entanto, a aplicação desta formulação ao problema escalar bidimensional aqui apresentado, não reproduziu os bons resultados encontrados no trabalho mencionado, conseguindo somente alcançar as mesmas taxas de convergência obtidas pela formulação semi-discreta de Galerkin.

Assim propomos, como na formulação de mínimos quadrados, a transformação da equação diferencial parcial que rege o problema, em um sistema equivalente de primeira ordem. Apesar deste procedimento aumentar o número de incógnitas nodais e transformar o problema escalar em um problema misto, a análise de convergência apresentou melhores taxas mostrando uma estabilidade extra, quando comparada ao problema escalar, reduzindo consideravelmente as oscilações apresentadas nas soluções numéricas da formulação aplicada ao caso escalar. Vale ressaltar que, mesmo se tratando de um problema misto, não há necessidade de compatibilidade entre os espaços de aproximação, podendo ser utilizadas aproximações de igual ordem para as variáveis envolvidas no problema.

A equação de advecção-difusão-reação também foi analisada descrevendo o problema original como um sistema equivalente de primeira ordem. Nos exemplos analisados, o método fornece soluções numéricas estáveis, não apresentado nem a frente de onda nem a difusão artificial da ordem das verificadas na formulação semi-discreta de mínimos quadrados [15]. Para melhorar a taxa de erro encontrada para a variável vetorial, com a aplicação

da formulação mista a este problema, adicionamos a equação do rotacional nulo. Resultados numéricos comprovam que há melhora nas soluções dos problemas avaliados.

Nos problemas analisados, incluímos ainda uma ponderação da equação transiente do sistema por um fator θ , permitindo aproximar as variáveis desta equação no tempo $t_{n+\theta}$. Além disso, ponderamos a equação constitutiva, que relaciona a variável vetorial por um fator τ , a fim avaliar a influência dessa equação na precisão da solução do problema.

Para as simulações numéricas do problema de advecção-difusão-reação, apresentadas na seção 4.5, só se conseguiu bons resultados para grandes valores de τ . É possível que exista um outro sistema equivalente que consiga melhores resultados para outras variações deste parâmetro. No entanto, em todos exemplos analisados, a formulação apresentou uma boa aproximação para a solução à medida que o tempo evolui a um estado estacionário, para praticamente todos os valores de θ maiores que 0,5.

Dessa forma, acreditamos que a formulação aqui apresentada pode ser uma opção para as formulações clássicas e para as formulações estabilizadas, justificando a continuidade desta pesquisa, como por exemplo, descrevendo diferentemente o sistema equivalente de primeira ordem, bem como avaliar o efeito da ponderação de todas as equações do sistema pelo mesmo fator θ . Além disso, pode-se também avaliar a construção do parâmetro τ , a fim de diminuir a difusão ainda presente nesta formulação.

Referências

- [1] LUBE, G.; RAPIN, G. Residual-based stabilized higher-order fem for advection-dominated problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 195, p. 4124–4138, 2006.
- [2] BROOKS, A. N.; HUGHES, T. J. R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 32, p. 199–259, 1982.
- [3] A.C., G.; CARMO, E. G. Dutra do. A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 68, p. 83–95, 1988.
- [4] CARMO, E. G. Dutra do; ALVAREZ, G. B. A new stabilized finite element formulation for scalar convection-diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov-Galerkin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 192, p. 3379–3396, 2003.
- [5] CASTRO, R. G. S. Análise numérica de formulações de elementos finitos espaço-tempo para escoamentos miscíveis. Universidade Federal do Rio de Janeiro - Tese de Doutorado, 1999.
- [6] JOHNSON, C.; NAVERT, U.; PITKARANTA, J. Finite elements methods for linear hyperbolic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 45, p. 285–312, 1984.
- [7] NAVERT, U. A finite element method for convection-diffusion problems. Department of Computer Science, Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden, Ph. D. thesis, 1982.
- [8] YANG, D. Some least-squares Galerkin procedures for first-order time-dependent convection-diffusion system. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 180, p. 81–95, 1999.
- [9] LEAL-TOLEDO, R. C. P. Estudo de uma formulação de mínimos quadrados para o método dos elementos finitos. Universidade Federal do Rio de Janeiro - COPPE - Tese de Doutorado, 1992.
- [10] POTANZA, J.; REDDY, J. Space-time coupled spectral/Hp least-squares finite element formulation for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 197, p. 418–459, 2004.

- [11] NOVO, C. et al. Discontinuous mixed space-time least-square formulation for transient advection-diffusion-reaction equations. XV Congresso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, Santa Fé – Argentina – 2006.
- [12] CAREY, G.; JIANG, B. Least-squares finite elements for first order hyperbolic systems. *Internation Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 24, p. 1–13, 1987.
- [13] PEHLIVANOV, A. I.; CAREY, G. F. Error estimates for least-squares mixed finite elements. *Mathematical Modeling and Numerical Analysis*, v. 28, n. 5, p. 499–516, 1994.
- [14] KIM, Y.; LEE, S. Least-squares mixed method for second-order elliptic problems. *Applied Mathematics and Computation*, v. 115, p. 89–100, 2000.
- [15] VASCONCELOS, M. dos S. Formulação semi-discreta de mínimos quadrados aplicada a problemas de difusão pura e de advecção. Universidade Federal Fluminense - Tese de Mestrado, 2001.
- [16] BARRETO, M. de F. S. M. Formulação de mínimos quadrados aplicada a problemas de advecção-difusão. Universidade Federal Fluminense - Dissertação de Mestrado, 1999.
- [17] GIRAULT, V.; RAVIART, P. Finite element methods for Navier-Stokes equations. Springer-Verlag, 1986.
- [18] DONEA, J.; HUERTA, A. Finite element methods for flow problems. Wiley, 2003.
- [19] JIANG, B. N. *The Least-Squares Finite Element Method*. [S.l.]: Springer, 1998.
- [20] DONEA, J.; QUARTAPELLE, L. An introduction to finite element methods for transient advection problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 95, p. 169–203, 1992.
- [21] NGUYEN, H.; REYNEN, J. A space-time least-square finite element scheme for advection-diffusion equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, North-Holland, v. 42, p. 331–342, 1984.
- [22] LEAL-TOLEDO, R. C. P. et al. Discontinuous mixed space-time least-square formulation for transient transport equations. Proceedings XXVII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE, Belém/PA – 2006.
- [23] AZIZ, A. K.; KELLOG, R.; STEPHENS, A. B. Least squares methods for elliptic systems. *Mathematics of Computation*, v. 44, n. 169, p. 53–70, 1985.
- [24] LEAL-TOLEDO, R.; TOLEDO, E. M. Least-squares finite element for 2-d advective transporte modeling. Proceedings XXII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE, Campinas/SP – 2001.
- [25] JOHNSON, C. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1987.
- [26] HENAO, C. A. A. Um estudo sobre operadores de captura de descontinuidades para problemas de transporte advectivos. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE - Tese de Doutorado, 2004.

-
- [27] CODINA, R. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 156, p. 185–210, 1997.
- [28] LARSSON, S.; V, T. *Partial Differential Equations with Numerical Methods*. [S.l.]: Springer-Verlag - Germany, Berlin, 2003.
- [29] CIARLET, P. *The Finite Element for Elliptic Problems*. [S.l.]: North - Holland, Amsterdam, 1978.
- [30] DONEA, J.; ROIG, L.; A., H. High-order accurate time-stepping schemes for convection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 182, p. 249–275, 2000.

Apêndice

(i) Resultados da teoria de interpolação

• Interpolação em H^1

Seja S_h^k o espaço de elementos finitos lagrangeanos de grau $k \geq 1$ em cada variável espacial para elementos quadrilaterais:

$$Q_h^k(\Omega) = \{\phi_h \in C^0(\Omega); \phi_h|_{\Omega^e} \in \mathbb{P}_{k,k}(\Omega^e)\}, \quad (1)$$

onde $\mathbb{P}_{k,k}(\Omega^e)$ é o conjunto dos polinômios definidos em Ω^e , com graus menores ou iguais a k nas variáveis x_1 e x_2 , respectivamente. Além deste espaço, utiliza-se também o espaço de elementos finitos lagrangianos descontínuos de grau $l \geq 0$ dado por:

$$S_l^k(\Omega) = \{\phi_h \in L^2(\Omega); \phi_h|_{\Omega^e} \in \mathbb{P}_{l,l}(\Omega^e)\}. \quad (2)$$

Para os espaços $Q_h^k(\Omega)$ e $S_h^l(\Omega)$ são válidas as seguintes propriedades de interpolação, cuja prova pode ser encontrada em [29]:

Teorema A (Interpolação em $H^1(\Omega)$) *Para qualquer $\psi \in H^{m+1}(\Omega)$ e $\phi \in H^{n+1}(\Omega)$ existem constantes C_1 e C_2 e projeções $\tilde{\psi}_h \in Q_h^k(\Omega)$ e $\tilde{\phi}_h \in S_h^l(\Omega)$ tais que*

$$\|\psi - \tilde{\psi}_h\|_0 + h\|\nabla\psi - \nabla\tilde{\psi}_h\|_0 \leq C_1 h^{m+1} |\psi|_{m+1}, \quad 1 \leq m \leq k, \quad (3)$$

$$\|\phi - \tilde{\phi}_h\|_0 + h\|\nabla\phi - \nabla\tilde{\phi}_h\|_0 \leq C_2 h^{n+1} |\phi|_{n+1}, \quad 1 \leq n \leq l. \quad (4)$$

• Interpolação em $H(\text{div})$

Os espaços de Raviart-Thomas de ordem k , $W_h^k \times M_h^k$, são tais que M_h^k é idêntico a Q_h^{k-1} , e

$$W_h^k = \{B_h \in H(\text{div}), B_h|_{\Omega^e} \in P_{k,k-1}(\Omega^e) \times P_{k-1,k}(\Omega^e)\}$$

para elementos retangulares. Esses espaços W_h^k e M_h^k de elementos finitos possuem as seguintes propriedades de interpolação, cujas provas podem ser encontradas em [17]:

Teorema B (Interpolação em $\mathbf{H}(\text{div})$) *Existe uma constante C e uma projeção $\tilde{B}_h \in W_h^k$ tal que*

$$\|B - \tilde{B}_h\|_0 \leq Ch^m |B|_m \quad \forall B \in (H^m(\Omega))^2, \quad 1 \leq m \leq k,$$

$$\|\text{div}(B - \tilde{B}_h)\|_0 \leq Ch^m |\text{div} B|_m \quad \forall B \in (H^1(\Omega))^2,$$

com

$$\text{div} B \in H^m(\Omega), \quad 0 \leq m \leq k.$$

(ii) Cálculos utilizados no trabalho

- Cálculo usado na seção 4.3

$$\begin{aligned} (w^h, \mathbf{v} \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h) &= (\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h, w^h) \\ &= \int_{\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h) w^h d\Omega \\ &= \int_{\Omega} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h \cdot \mathbf{v}) w^h d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \langle \mathbf{K}^{-1} \mathbf{q}^h, \mathbf{v} \rangle w^h d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \langle \mathbf{q}^h, (\mathbf{K}^{-1})^T \mathbf{v} \rangle w^h d\Omega \\ &= (\mathbf{q}^h, (\mathbf{K}^{-1})^T \mathbf{v} w^h), \end{aligned}$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno em $\mathbb{R}^2$.