

Laboratório Nacional de Computação Científica

Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Métodos Submalhas Não Lineares Para o Problema de
Convecção-Difusão-Reação**

Por

Isaac Pinheiro dos Santos

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

OUTUBRO DE 2007

MÉTODOS SUBMALHAS NÃO LINEARES PARA O PROBLEMA DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO

Isaac Pinheiro dos Santos

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO NACIONAL
DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
MODELAGEM COMPUTACIONAL

Aprovada por:

Prof. Regina Célia Cerqueira de Almeida, D.Sc.
(Presidente)

Prof. Augusto César Noronha Rodrigues Galeão, D.Sc.

Prof. Sandra Mara Cardoso Malta, D.Sc.

Prof. Lucia Catabriga, D.Sc.

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D.Sc.

Prof. Alvaro Luiz G. de Azeredo Coutinho, D.Sc.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL
OUTUBRO DE 2007

Santos, Isaac Pinheiro dos

S237m Métodos submalhas não lineares para o problema de convecção-difusão-reação / Isaac Pinheiro dos Santos. Petrópolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2007.

xvi, 149 p. : il.; 29 cm

Orientador: Regina Célia Cerqueira de Almeida

Tese (D.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2007.

1. Método dos Elementos Finitos. 2. Modelagem submalha. 3. Viscosidade submalha não-linear. 4. Equação de convecção-difusão-reação.
I. Almeida, Regina Célia Cerqueira de. II. LNCC/MCT. III. Título.

CDD 518.25

*“It must be admitted that the problems are too vast to
be solved by a direct computational attack.”*

John Von Neumann, 1949.

*“Do que mais gosto de mim, gosto da parte criança
Que na realidade nunca para de sonhar
E de acreditar que tudo pode ser melhor ...”*

Trecho de “*Carta Aos Que Esperam*”, Banda Catedral.

Dedicatória

Dedico este trabalho à memória de meus queridos pais, João Pinheiro dos Santos e Estelina Ferreira dos Santos, que embora sem conhecimento escolar, souberam despertar em mim o interesse pelo saber.

À minha irmã Nelci, sempre presente em minha vida.

À Fernanda, pela compreensão, carinho e motivação.

Agradecimentos

Quero agradecer a Deus pela vida e por ter permitido a conclusão desta tese.

À minha família pelo amor incondicional.

À Fernanda pela força e incentivo constante.

À minha orientadora professora Regina C. Almeida pela brilhante orientação durante o desenvolvimento deste trabalho. Um muito obrigado especialíssimo por seu incentivo, paciência e amizade ao longo desses anos.

À professora Sandra Malta de quem recebi contribuições preciosas e por estar sempre disposta a ajudar. Aos demais professores membros da banca examinadora: Augusto Galeão, Eduardo do Carmo, Lucia Catabriga e Alvaro Coutinho.

Aos professores do LNCC: Abimael Loula, Bidu, Karam e Perla. Aos professores de graduação da UFES/CEUNES: Joccitiel e Luiz Pedro.

Aos mestres do ensino fundamental e médio que contribuíram muito na minha formação, em especial a professora Balbina Machado Feu (minha primeira professora) e o professor Jacques Menezes de Oliveira.

Aos amigos do LNCC e Petrópolis.

Ao apoio financeiro da FAPERJ.

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

MÉTODOS SUBMALHAS NÃO LINEARES PARA O PROBLEMA DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO

Isaac Pinheiro dos Santos

Outubro , 2007

Orientador: Regina Célia Cerqueira de Almeida, D.Sc.

Este trabalho apresenta uma metodologia geral para aproximar equações de convecção-difusão-reação baseada no princípio de separação de escalas. Utiliza-se uma decomposição de dois níveis dos espaços de aproximação e o problema local é modificado, introduzindo-se uma difusão artificial que atua somente nas escalas submalhas. O aspecto chave do método é o controle local dado a partir da decomposição do campo de velocidades em escalas resolvidas e não resolvidas com o requerimento da satisfação do modelo discreto a nível do elemento para uma energia cinética mínima associada às escalas não resolvidas. Este procedimento conduz à um modelo submalha não linear que não depende da escolha/ajuste de nenhum parâmetro de estabilização. Ele pode ser considerado um método auto-adaptativo, de forma que a quantidade de viscosidade submalha é automaticamente introduzida de acordo com o resíduo das escalas resolvidas a nível do elemento. É apresentada uma estimativa de erro a priori com taxas de convergência equivalentes às obtidas para sua contrapartida linear e vários métodos estabilizados. Experimentos numéricos demonstram a habilidade do método desenvolvido em representar problemas predominantemente convectivos e predominantemente reativos.

Abstract of Thesis presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Sciences (D.Sc.)

NONLINEAR SUBGRID METHODS FOR CONVECTION-DIFFUSION-REACTION PROBLEM

Isaac Pinheiro dos Santos

October, 2007

Advisor: Regina Célia Cerqueira de Almeida, D.Sc.

This work presents a general framework for approximating convection-diffusion-reaction equations based on principles of scale separation. A two-level decomposition of the discrete approximation spaces is performed and the local problem is modified introducing an artificial viscosity acting only on the subgrid scales. The key feature is the local control coming from the decomposition of the velocity field into the resolved and unresolved scales and requiring the satisfaction of the discrete model problem at the element level for a minimum kinetic energy associated to the unresolved scales. This procedure leads to a nonlinear subgrid model that acts only on the unresolved scales but does not require any tuned-up parameter. It can be considered a self adaptive method such that the amount of the subgrid viscosity is automatically introduced according to the residual of the resolved scale at element level. We provide an a priori error estimate with convergence rates similar to its linear counterpart and some other stabilized methods, like SUPG. Numerical experiments demonstrate the ability of the method to represent convection and/or reaction dominated problems.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Organização da Tese	8
2	Métodos de Elementos Finitos Para o Problema de Convecção-Difusão-Reação	9
2.1	Notações e Definições	9
2.1.1	Problema Variacional Linear Abstrato	10
2.2	Problema Modelo	13
2.3	Formulação Variacional	15
2.4	Aproximações por Elementos Finitos - Método de Galerkin	19
2.5	Métodos Estabilizados Lineares	20
2.6	Métodos Estabilizados Não Lineares	23
2.6.1	Método CAU (<i>Consistent Approximate Upwind</i>)	26
2.7	Métodos Multiescala	28
3	Métodos Lineares de Estabilização Submalha	33
3.1	Método Linear de Estabilização Submalha - SGS	33
3.1.1	Equações Diferenciais Parciais de Primeira Ordem	34
3.1.2	Equações Diferenciais Parciais de Segunda Ordem	44
3.1.3	Cenários de Discretização	46
3.2	Estabilização Submalha e Métodos Mistos	52
3.3	Estudos Numéricos	55

3.3.1	Exemplo 1 - Problema de Convecção-Difusão	56
3.3.2	Exemplo 2 - Problema de Convecção-Difusão com Termo de Fonte	58
3.3.3	Exemplo 3 - Problema de Difusão-Reação	59
4	Métodos Não Lineares de Estabilização Submalha	69
4.1	Estabilização Submalha + Métodos de Captura de Descontinuidades	72
4.2	Método Não Linear de Estabilização Submalha - NSGS	74
4.3	Processo Iterativo de Solução	77
4.3.1	Montagem do termo de estabilização submalha	78
4.4	Método NSGS com Condições de Dirichlet Impostas Fracamente . .	81
5	Análise Numérica do Método NSGS	88
5.1	Resultados Preliminares	88
5.2	Existência e Unicidade de Solução	93
5.3	Estimativa de Erro <i>a Priori</i>	96
6	Resultados Numéricos	104
6.1	Resolução de Problemas	104
6.1.1	Exemplo 01 - Problema de Convecção-Difusão	105
6.1.2	Exemplo 02 - Problema de Convecção-Difusão com Termo de Fonte	106
6.1.3	Exemplo 03 - Problema de Difusão-Reação com Termo de Fonte Constante	107
6.1.4	Exemplo 04 - Problema de Difusão-Reação com Termo de Fonte Variável	108
6.1.5	Exemplo 05 - Problema de Convecção-Difusão com Velocidade Variável	110
6.1.6	Exemplo 06 - Problema Convecção-Difusão com Solução Suave	112
6.1.7	Exemplo 07 - Problema de Convecção-Difusão-Reação	119
6.2	Estudo de Convergência	119

6.2.1	Exemplo 08 - Problema de Convecção-Difusão-Reação	120
6.2.2	Exemplo 09 - Problema de Convecção-Difusão	120
6.2.3	Exemplo 10 - Problema de Convecção-Reação	121
6.3	Comentários Adicionais	121
7	Conclusões	133
	Referências Bibliográficas	136
	Apêndice	
A		148
A.1	Problema de Minimização	148

Lista de Figuras

Figura

3.1	Função bolha cúbica.	47
3.2	Representação do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$. Espaço macro X_H ($\bullet$,dof). Espaço micro X_h^H ($\circ$,dof) (Guermond, 1999).	48
3.3	Funções de formas associadas à um vértice da malha $\mathcal{T}_H$: $v_H \in X_H$ (cinza), $v_h \in X_h$ (azul) e $v_h^H \in X_h^H$ (vermelho). Figura extraída de (Guermond et al., 2006).	49
3.4	Representação do cenário $\mathbb{P}_1/dois-níveis$. Esquerda: espaço macro X_H ($\blacksquare$,dof); Centro: quatro triângulos de X_h gerados a partir do triângulo macro ($\bullet$,dof). Direita: espaço micro X_h^H ($\circ$,dof) (Guermond et al., 2006).	50
3.5	Definição de P_{X_H} para o cenário $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ (Guermond et al., 2004a).	51
3.6	Representação da malha $\mathcal{T}_H$ com 8 subdivisões em cada direção. . .	56
3.7	Exemplo 1 - solução usando o método SUPG.	58
3.8	Exemplo 1 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$ para vários valores de c_b	61
3.9	Exemplo 1 - soluções u_h usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ para vários valores de c_b	62
3.10	Exemplo 1 - soluções $u_H = P_{X_H}u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-$ $níveis$ para vários valores de c_b	63

3.11	Exemplo 1 - soluções $u_h^H = (I - P_{X_H})u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\textit{dois-níveis}$ para vários valores de c_b	64
3.12	Exemplo 2 - solução usando o método SUPG.	65
3.13	Exemplo 2 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\textit{bolha}$ para vários valores de c_b	65
3.14	Exemplo 2 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\textit{dois-níveis}$ para vários valores de c_b	66
3.15	Exemplo 3 - solução usando o método de Galerkin.	66
3.16	Exemplo 3 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\textit{bolha}$ para vários valores de c_b	67
3.17	Exemplo 3 - soluções $u_H = P_{X_H}u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\textit{dois-}$ $\textit{níveis}$ para vários valores de c_b	68
4.1	Elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$ e seus sub-elementos S_1, S_2, S_3 e $S_4 \in \mathcal{T}_h$: correspondência entre os graus de liberdade em $\mathcal{T}_H$ com os de $\mathcal{T}_h$, resultante do operador projeção P_{X_H}	81
6.1	Exemplo 01 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1. . . .	106
6.2	Exemplo 01 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2. . . .	107
6.3	Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1. . . .	108
6.4	Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1. . . .	109
6.5	Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2. . . .	110
6.6	Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2. . . .	111

6.7	Exemplo 03 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	112
6.8	Exemplo 03 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	113
6.9	Exemplo 04 - Solução obtida com o método de Galerkin.	114
6.10	Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	115
6.11	Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	115
6.12	Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	115
6.13	Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	116
6.14	Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	116
6.15	Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	116
6.16	Exemplo 5 - Solução obtida com o Método de Galerkin.	117
6.17	Exemplo 5 - Método SGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	117
6.18	Exemplo 5 - Método SGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	117
6.19	Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	118
6.20	Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	118
6.21	Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.	118

6.22	Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas (malha com $H = 1/10$).	123
6.23	Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas (malha com $H = 1/20$).	124
6.24	Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas na seção $y = -0.25$.	124
6.25	Exemplo 07 - Soluções exata e de Galerkin.	125
6.26	Exemplo 07 - Soluções utilizando os métodos SGS e NSGS.	126
6.27	Exemplos 08 e 10 - solução exata.	126
6.28	Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-3}$.	127
6.29	Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-5}$.	128
6.30	Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-7}$.	129
6.31	Exemplo 09 - solução exata.	129
6.32	Exemplo 09 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-3}$.	130
6.33	Exemplo 09 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-6}$.	131
6.34	Exemplo 10 - Taxas de convergência.	132

Lista de Tabelas

Tabela

4.1	Elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$ apresentado em (4.1): numeração dos graus de liberdade locais ($i = 1, 2, 3$).	82
4.2	Graus de liberdade locais das funções aproximante e peso para cada sub-elemento S_i , $i = 1, 2, 3, 4$	82

Capítulo 1

Introdução

A evolução da mecânica computacional nas últimas 3 décadas tem provocado impactos positivos na ciência e tecnologia. O seu êxito está na solução de problemas de interesse para a sociedade e no fornecimento de um entendimento profundo dos fenômenos naturais e de engenharia (Oden et al., 2003). Dentre diversos temas de interesse da mecânica computacional destaca-se o estudo de métodos numéricos e computacionais para problemas de transporte, que ocorrem em várias áreas da ciência aplicada. Em particular, problemas de transporte envolvendo processos convectivos, difusivos e reativos em meios fluidos têm uma grande aplicabilidade em engenharia (Gómes et al., 2000), tais como:

- na simulação dos efeitos da poluição em rios, mares e atmosfera;
- na modelagem da evolução das reservas de petróleo e gás natural no subsolo;
- fluxo em meios porosos, simulação de reservatórios, injeção de traçadores;
- transferência de calor, dispersão de poluentes;
- crescimento de populações, irrigação;
- potenciais elétricos em semicondutores.

A resolução destes problemas envolve a solução de equações de transporte do tipo convecção-difusão-reação. Além do interesse prático, essa equação também

representa um modelo adequado para o estudo de métodos numéricos a serem utilizados em problemas mais complexos. Por essas razões, um grande esforço tem sido feito para o desenvolvimento de modelos numéricos e computacionais para resolver de forma precisa e eficiente esta equação (Gómes et al., 2000). Contudo, dificuldades ainda persistem em muitas situações quando o termo de difusão é muito pequeno comparado aos termos de convecção e/ou reação. Nestes casos, o método de aproximação pode apresentar soluções não físicas, conhecidas como instabilidades numéricas.

No contexto dos métodos de elementos finitos, um método numérico clássico para resolver a equação de transporte de convecção-difusão-reação é o método de elementos finitos de Galerkin. Este método é descrito através de uma formulação variacional de uma Equação Diferencial Parcial - EDP (ou um sistema de EDPs) em espaços de dimensão finita gerados por polinômios. É bem conhecido na literatura que essa abordagem é adequada no tratamento de diversos problemas elípticos (Hughes, 2000; Carey e Oden, 1983). Contudo, ela pode falhar na resolução de problemas com convecção dominante e singularmente perturbados, gerando fortes oscilações espúrias em suas soluções aproximadas (Roos et al., 1996; Donea e Huerta, 2003; Cangiani, 2004). Alguns exemplos destes problemas são: convecção-difusão com convecção dominante, reação-difusão com reação dominante, convecção-difusão-reação com convecção dominante, Navier-Stokes com alto número de Reynolds, dentre outros.

Nas últimas 3 décadas, muitas alternativas têm sido propostas para contornar as limitações do método de Galerkin. Algumas das técnicas para obter soluções precisas e estáveis para estes problemas são conhecidas como métodos estabilizados (Roos et al., 1996; Donea e Huerta, 2003; Brooks e Hughes, 1982; Hughes et al., 1989; Franca e Valentin, 2000). Estes métodos consistem em modificar a formulação de Galerkin, sem comprometer a sua consistência, adicionando-lhe termos de perturbação associados ao operador e contendo parâmetros estabilizantes dependentes da malha. A estabilidade e precisão das soluções obtidas por essas

metodologias dependem do projeto adequado dos parâmetros de estabilização. Dentre os métodos estabilizados mais usuais destacam-se: SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) (Brooks e Hughes, 1982; Johnson et al., 1984), GLS (*Galerkin/Least Squares*) (Hughes et al., 1989) e USFEM (*Unusual Finite Element Method*) (Franca e Valentin, 2000).

Apesar de grande parte dos métodos de elementos finitos estabilizados mencionados conduzirem às soluções numéricas globalmente estáveis, eles não evitam a possibilidade de ocorrer oscilações localizadas nas vizinhanças de altos gradientes. A razão para esse comportamento é que esses métodos não preservam a *monotonicidade* (LeVeque, 1992). É conhecido que um método linear que preserva a monotonicidade é no máximo de primeira ordem (LeVeque, 1992). Para a obtenção de um método de alta ordem que evita oscilações espúrias, pode-se recorrer aos métodos de captura de descontinuidades. Em geral, esses métodos são esquemas numéricos não-lineares, mesmo que o problema original seja linear (Galeão e do Carmo, 1988; Codina, 1993; John e Knobloch, 2007).

A idéia básica de todos os métodos de captura de descontinuidades é aumentar a dissipação numérica nas regiões onde a solução não é suave. Em essência, a maioria das formulações com captura de descontinuidades são equivalentes a uma decomposição do termo de estabilização em duas partes. Uma parte é um termo de estabilização linear, como o operador padrão SUPG, que controla o gradiente da solução na direção das linhas de corrente. Como indicado em (Guermond et al., 2004a), é levado em consideração o caráter hiperbólico da equação, evitando o espalhamento das oscilações causadas pela falta de coercividade. A segunda parte é um termo que controla o gradiente em outras direções, impedindo oscilações localizadas próximas às descontinuidades. Este termo, em geral, é dependente da solução aproximada, introduzindo, desta forma, uma não linearidade no processo de solução.

Embora, em geral, os métodos de captura de descontinuidade sejam eficientes na eliminação de oscilações localizadas próximas a regiões de altos gradientes,

nenhuma justificativa teórica está disponível para apoiar a presença deste termo na formulação de Galerkin. Uma das melhores justificativas é apresentada em (Galeão e do Carmo, 1988), onde o operador de captura de descontinuidade aparece naturalmente de um controle adicional baseado num campo de velocidades idealizado e construído de forma a anular o resíduo a nível de elemento. Existe uma vasta literatura disponível sobre esta classe de métodos (Hughes et al., 1986; Tezduyar e Park, 1986; Galeão e do Carmo, 1988; Johnson et al., 1990; Codina, 1993; do Carmo e Galeão, 1991; Burman e Ern, 2005; Knobloch, 2006; John e Knobloch, 2007). Para uma revisão detalhada destes métodos, sugere-se a referência (John e Knobloch, 2007).

Mais recentemente, os métodos estabilizados têm sido reformulados no contexto da formulação variacional multiescala. Na simulação numérica de vários problemas, existem efeitos físicos que ocorrem nas escalas menores do que as representadas pela malha computacional, que têm forte impacto nas grandes escalas. Desta forma, muitos autores têm destacado a relação entre métodos estabilizados e a modelagem submalha utilizada em simulações de grandes escalas - (LES) (Iliescu, 2004; John et al., 2006). A hipótese de Boussinesq de que *“existe uma transferência de energia cinética dos grandes vórtices para os pequenos vórtices onde, então, esta energia é dissipada via viscosidade molecular”* é a base para os modelos submalha (Heitmann, 2003). Devido a incapacidade eventual do modelo numérico em representar precisamente este processo de transferência de energia, podem surgir soluções espúrias. Um procedimento para eliminá-las consiste em introduzir alguma forma de dissipação artificial (*eddy viscosity*). Alguns pesquisadores acreditam que as oscilações espúrias da solução aproximada para problemas de convecção dominante estão associadas à essas pequenas escalas, refletindo-se num acúmulo de energia cinética (Guermond, 1999). Ou seja, as menores escalas da malha não são pequenas o bastante de forma que a dissipação viscosa seja suficiente, gerando um acúmulo de energia cinética. Esse acúmulo de energia pode ser evitado pela introdução de uma viscosidade artificial através

dos métodos de estabilização submalha (Guermond, 1999; Heitmann, 2003), dentre outros.

Os métodos desenvolvidos a partir deste conceito, denominados métodos multiescala, têm se tornado mais populares nos últimos dez anos pela necessidade de tratar problemas que exibem comportamento multiescala. O trabalho de T. J. Hughes (Hughes, 1995) pode ser considerado um marco no desenvolvimento desta nova metodologia, abrindo novas direções de pesquisa. A idéia principal é decompor a variável de interesse (e a função peso) em duas partes: a primeira representada pela discretização utilizada (macro escala - escala resolvida) e a segunda relacionada às escalas menores, submalhas (micro escala - escala não resolvida). Tal decomposição permite dividir a formulação fraca do problema em dois sub-problemas: um para a macro escala e outro para a micro escala. Os efeitos não-locais da micro escala são incorporados na macro escala resultando em um problema enriquecido para as escalas resolvidas, que é então solucionado numericamente. Esta nova metodologia variacional também permite uma interpretação física dos métodos estabilizados, que podem ser vistos como técnicas que capturam na solução a variabilidade da micro escala (Juanes, 2003). Vários métodos variacionais multiescala têm sido desenvolvidos nos últimos anos. Exemplos destes métodos são: RFB (*Residual-Free Bubbles*) (Brezzi e Russo, 1994; Brezzi et al., 1997; Franca et al., 1998; Brezzi et al., 2000; Brezzi e Marini, 2002b; Brezzi et al., 2003; Franca et al., 2006; Cangiani, 2004; Gravemeier, 2003), VMS (*Variational Multiscale*) (Hughes, 1995; Hughes et al., 2004; Hauke e García-Olivares, 2001; Calo, 2004; Scovazzi, 2004; Gravemeier, 2003), MFEM (*Multiscale Finite Element Method*) (Hou e Wu, 1997; Tang et al., 2006) e SGS (*Subgrid Stabilization*) (Guermond, 1999; Brezzi et al., 2000; Guermond, 2001; Layton, 2002; Kaya e Layton, 2003; Heitmann, 2003; Guermond et al., 2004a; Kaya, 2004; John e Kaya, 2005; Guermond et al., 2006; John et al., 2006; Heitmann, 2007).

O método linear de estabilização submalha - SGS (*Subgrid Stabilization*) (Guermond, 2001; Layton, 2002) é a metodologia na qual esta tese se baseia.

O método SGS, desenvolvido por Guermond (1999) e generalizado por Layton (2002) no contexto dos métodos mistos, envolve uma decomposição multiescala do espaço de aproximação e a introdução de uma viscosidade artificial (linear) somente na micro escala da malha de elementos finitos. A viscosidade submalha linear é ajustada por um parâmetro global que precisa ser escolhido de forma adequada a fim de que o método seja preciso. Teoricamente, esta formulação conduz a taxas de convergência similares às obtidas pelos métodos estabilizados, tipo SUPG. Entretanto, assim como os métodos estabilizados, o método SGS apresenta oscilações localizadas próximas a altos gradientes, principalmente se o parâmetro de estabilização não for escolhido adequadamente. Para evitar oscilações indesejáveis, operadores não lineares submalha de captura de descontinuidades são adicionados de forma *ad hoc* à formulação SGS (Guermond, 2001; Guermond et al., 2004a). O procedimento resultante parece ser eficiente em muitas aplicações, mas, infelizmente, não é apresentada nenhuma teoria justificando a presença deste termo não-linear. Além disso, a presença de outro parâmetro de estabilização torna a metodologia ainda mais complicada. Outras abordagens envolvendo operadores não lineares podem ser encontradas em (Iliescu, 2004; Juanes e Patzek, 2002; Scovazzi, 2004).

Recentemente, um controle dinâmico das constantes envolvidas nos modelos de dissipação usados na simulação de grandes escalas (Large Eddy Simulation - LES) tem sido introduzido baseado na noção de separação de escalas. Entretanto, ele é ainda incapaz de tratar ou representar precisamente descontinuidades locais (Meneveau e Katz, 2000). Mesmo que ainda seja limitado o entendimento da inter-relação entre os aspectos numérico e de modelagem (Meneveau e Katz, 2000), foi sugerido em (Chalot et al., 1998) o uso de um elemento finito consistente que inclui termos de dissipação linear e não-linear, resultando na reprodução do espectro de energia turbulenta.

Para melhorar as simulações, os efeitos das escalas não resolvidas devem ser incluídos de alguma forma nas grandes escalas. No mesmo espírito dos

modelos LES e dos métodos SGS, nesta tese é desenvolvido um método baseado numa decomposição multiescala do espaço de aproximação de modo a prevenir oscilações locais e não locais em problemas de convecção-difusão-reação. Este método, denominado de NSGS (*Nonlinear Subgrid Stabilization*), é inspirado nos métodos CAU (*Consistent Approximate Upwind*) (Galeão e do Carmo, 1988) e SGS (Guermond, 1999, 2001). Consiste em adicionar uma viscosidade não linear e não parametrizada somente na micro escala, assumindo que a malha não seja refinada o suficiente para que os efeitos viscosos dissipem os efeitos inerciais. A viscosidade artificial adicionada através desta metodologia é controlada por um processo de minimização da energia cinética acumulada nas escalas não resolvidas. A representação da energia cinética é obtida através de uma representação do campo de velocidades associado à micro escala.

O método desenvolvido mostrou-se estável para uma vasta gama de problemas. Entretanto, observou-se perda de estabilidade na vizinhança de camadas limite externas. Neste contexto, é conhecido na literatura que a imposição forte das condições de contorno de Dirichlet nas fronteiras podem originar oscilações espúrias mesmo para métodos com boas propriedades de estabilização (Bazilevs e Hughes, 2007). Em (Burman, 2005; Bazilevs e Hughes, 2007) é apresentada uma metodologia para estabilização de camadas limite externas através da imposição fraca das condições de contorno de Dirichlet, prática bastante utilizada nos métodos de Galerkin Descontínuo. Apesar das camadas externas serem bem representadas através desse procedimento, as instabilidades localizadas na vizinhança de camadas internas permanecem na solução aproximada (Santos e Almeida, 2007d). Esta abordagem é incorporada ao método NSGS, conduzindo à uma metodologia capaz de estabilizar de forma precisa localmente e globalmente a solução aproximada de problemas de convecção-difusão-reação singularmente perturbados. Assim, enquanto o novo método desenvolvido mantém a simplicidade do modelo de viscosidade submalha linear, a solução não depende de nenhum coeficiente de estabilização adicional.

1.1 Organização da Tese

No Capítulo 2 são apresentados o modelo matemático do problema de transporte convectivo-difusivo-reativo e sua formulação variacional em espaços de elementos finitos. São introduzidas a notação e algumas definições utilizadas na tese. Uma breve revisão dos métodos estabilizados lineares, não-lineares e dos métodos multiescalas, utilizados para resolver o problema de convecção-difusão-reação aproximadamente, também é apresentada.

No Capítulo 3 é apresentado o método linear de estabilização submalha SGS. Inicialmente, o método é descrito para EDPs de primeira ordem. Em seguida, é estendido para EDPs de segunda ordem, abrangendo, desta forma, problemas de convecção-difusão-reação. Uma correspondência entre o método SGS e os métodos mistos é apresentada. Na última seção deste capítulo, são descritos alguns experimentos numéricos que demonstram o comportamento do método SGS.

O Capítulo 4 é dedicado ao desenvolvimento do método NSGS. Inicialmente são apresentados alguns modelos não lineares para aproximar a equação de transporte. Em seguida, a descrição do método NSGS e procedimentos iterativos de solução são descritos. Na última seção deste capítulo, apresenta-se a incorporação do procedimento de imposição fraca das condições de contorno de Dirichlet ao método NSGS.

A análise numérica do método NSGS é apresentada no Capítulo 5. São estabelecidas a existência e unicidade de solução, bem como uma estimativa de erro *a priori* para a solução obtida pelo método NSGS.

Os experimentos numéricos realizados com a nova metodologia são discutidos no Capítulo 6. Os resultados obtidos são comparados com outras abordagens existentes na literatura.

No Capítulo 7, são apresentadas as conclusões e os comentários finais. Os desenvolvimentos complementares são descritos no Apêndice 7.

Capítulo 2

Métodos de Elementos Finitos Para o Problema de Convecção-Difusão-Reação

Neste capítulo são apresentados o modelo matemático do problema de transporte convectivo-difusivo-reativo e sua formulação variacional em espaços de elementos finitos. Introduz-se inicialmente a notação utilizada no decorrer da tese, bem como algumas definições que serão úteis nos capítulos posteriores. Após a descrição do modelo matemático do problema e sua formulação variacional, é feita uma breve revisão de alguns métodos estabilizados lineares, não-lineares e dos métodos multiescalas utilizados para resolver aproximadamente o problema de convecção-difusão-reação.

2.1 Notações e Definições

Nesta seção são apresentadas algumas notações e definições usadas nesta tese. Denota-se por Ω um subdomínio de $\mathbb{R}^d$ ($d = 2$) com contorno $\partial\Omega = \Gamma$ Lipschitz. Seja $\mathcal{E}$ um subdomínio aberto de Ω , de contorno $\partial\mathcal{E}$; então o espaço das funções quadrado-integráveis, no sentido de Lebesgue, em $\mathcal{E}$ é representado por $L^2(\mathcal{E})$. Para um dado inteiro $m \geq 0$, o espaço de Hilbert de ordem m sobre $\mathcal{E}$ formado pelas funções $v \in L^2(\mathcal{E})$ cujas m -ésimas derivadas, no sentido das distribuições, também pertencem ao espaço $L^2(\mathcal{E})$, é dado por

$$H^m(\mathcal{E}) = \{v \in L^2(\mathcal{E}) \mid D^\alpha v \in L^2(\mathcal{E}), |\alpha| \leq m\},$$

onde

$$Dv = \frac{\partial^{|\alpha|} v}{\partial_{x_1}^{\alpha_1} \cdots \partial_{x_d}^{\alpha_d}}; \quad |\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i$$

e $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ é um vetor de índices (números inteiros não negativos). O produto interno em $H^m(\mathcal{E})$ e sua norma associada são dados por

$$(v, w)_{m, \mathcal{E}} = \sum_{|\alpha| \leq m} \int_{\mathcal{E}} D^\alpha v D^\alpha w d\mathcal{E} \quad \text{e} \quad \|v\|_{m, \mathcal{E}} = \sqrt{(v, v)_{m, \mathcal{E}}},$$

respectivamente. Por $H_0^m(\mathcal{E})$ denota-se o subespaço de $H^m(\mathcal{E})$ cujas funções e suas $m - 1$ derivadas se anulam no contorno $\partial\mathcal{E}$.

O produto interno e respectiva norma do espaço $H^0(\mathcal{E}) = L^2(\mathcal{E})$ são

$$(v, w)_{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{E}} v w d\mathcal{E} \quad \text{e} \quad \|v\|_{0, \mathcal{E}} = \sqrt{(v, v)_{\mathcal{E}}}.$$

O produto interno em L^2 no contorno de $\mathcal{E}$ é denotado por $\langle v, w \rangle_{\partial\mathcal{E}} = \int_{\partial\mathcal{E}} v w d\partial\mathcal{E}$.

A norma associada ao espaço $H^1(\mathcal{E})$ é $\|\cdot\|_{1, \mathcal{E}} = \sqrt{\|\cdot\|_{\mathcal{E}}^2 + \|\nabla(\cdot)\|_{\mathcal{E}}^2}$.

Quando o subscrito $\mathcal{E}$ ou $\partial\mathcal{E}$ é omitido, o produto interno e/ou norma é tomado no domínio Ω ou no seu contorno $\partial\Omega$. A mesma idéia de notação se estende para as formas bilineares $a(\cdot, \cdot)_{\mathcal{E}}$, $B(\cdot, \cdot)_{\mathcal{E}}$, etc.

Supondo V um espaço de Hilbert, designa-se sua norma por $\|\cdot\|_V$ e seu espaço dual por V' .

Definem-se por $\mathcal{L}(V \times L; \mathbb{R})$ o espaço das formas bilineares contínuas em $V \times L$, com V e L espaços de Hilbert e por $\mathcal{L}(V; \mathbb{R})$ o espaço dos funcionais lineares contínuos em V , ou seja $V' = \mathcal{L}(V; \mathbb{R})$.

2.1.1 Problema Variacional Linear Abstrato

Considere o seguinte problema variacional linear (abstrato):

$$\begin{cases} \text{Achar } u \in V \text{ tal que} \\ a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in L, \end{cases} \quad (2.1)$$

onde:

- (i) V e L são espaços vetoriais, cujas normas associadas são $\|\cdot\|_V$ e $\|\cdot\|_L$, respectivamente. Em muitas aplicações, V e L são espaços de Hilbert, mas casos mais gerais onde L é um espaço de Banach reflexivo e V um espaço de Banach podem ser considerados. V é chamado de *espaço das funções admissíveis*, e L *espaço das funções peso*;
- (ii) a é uma forma bilinear *contínua* (ou *limitada*) em $V \times L$, isto é, $a \in \mathcal{L}(V \times L; \mathbb{R})$;
- (iii) f é uma forma linear *contínua* em L , isto é, $f \in L' = \mathcal{L}(L; \mathbb{R})$.

Uma primeira análise do problema (2.1) consiste em especificar as condições que o torna bem-posto no sentido de Hadamard, conforme a seguinte definição:

Definição 2.1.1. (*Hadamard*). *O problema (2.1) é bem-posto se ele admite uma única solução $u \in V$ e se a seguinte propriedade se verifica a priori:*

$$\exists c > 0, \forall f \in V', \quad \|u\|_V \leq c \|f\|_{V'}.$$

□

Assim, um problema é bem-posto, no sentido de Hadamard, se ele admite uma única solução e se essa solução depende continuamente dos dados. Dois resultados importantes para estabelecer se um problema é ou não bem-posto são: o Lema de Lax-Milgram (para $V = L$) e o Teorema de Banach-Nečas-Babuška. O primeiro fornece apenas uma condição *suficiente*, enquanto o outro, dependente de hipóteses um pouco mais sofisticadas, fornece condições *necessárias* e *suficientes* para que (2.1) seja bem-posto (Ern e Guermond, 2004).

2.1.1.1 Lema de Lax-Milgram

Considere o caso onde o *espaço das funções admissíveis* e o *espaço das funções peso* são idênticos, ou seja, $V = L$. Então, tem-se o seguinte problema:

$$\begin{cases} \text{Achar } u \in V \text{ tal que} \\ a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in V. \end{cases} \quad (2.2)$$

Para verificar se esse problema é bem-posto, utiliza-se o Lema de Lax-Milgram (Ern e Guermond, 2004; Ciarlet, 1978).

Lema 2.1.1. (*Lax-Milgram*). *Sejam V um espaço de Hilbert, $a \in \mathcal{L}(V \times V; \mathbb{R})$ e $f \in V'$. Assume-se que a forma bilinear é coerciva, isto é,*

$$\exists \alpha > 0, \forall u \in V, \quad a(u, u) \geq \alpha \|u\|_V^2.$$

Então, o problema (2.2) é bem-posto e, ainda, a seguinte estimativa a priori se verifica:

$$\forall f \in V', \quad \|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|_{V'}.$$

□

2.1.1.2 Teorema BNB: condição inf-sup

O Teorema BNB (Banach-Nečas-Babuška) é uma ferramenta mais geral para o estudo de existência e unicidade de solução para problemas do tipo (2.1). Esse teorema, segundo Ern e Guermond (2004), foi apresentado por Nečas em 1962 e popularizado no contexto dos métodos de elementos finitos por Babuška em 1972. Do ponto de vista da análise funcional, este teorema é uma redefinição de dois resultados fundamentais de Banach: o Teorema do gráfico fechado e o Teorema da aplicação aberta. Isto justifica o uso da nomenclatura BNB (Ern e Guermond, 2004).

Teorema 2.1.1. (*Banach-Nečas-Babuška*). *Sejam V um espaço de Banach e L um espaço de Banach reflexivo. Sejam também $a \in \mathcal{L}(V \times L; \mathbb{R})$ e $f \in L'$. Então o problema (2.1) é bem-posto se e somente se:*

$$(BNB1)^1 \quad \exists \alpha > 0, \quad \inf_{u \in V} \sup_{v \in L} \frac{a(u, v)}{\|u\|_V \|v\|_L} \geq \alpha;$$

$$(BNB2) \quad \forall v \in L, (\forall u \in V, a(u, v) = 0) \implies (v = 0).$$

Além disso, a seguinte estimativa a priori se verifica:

$$\forall f \in L', \quad \|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|f\|_{L'}.$$

□

A condição (BNB1) é conhecida como *condição inf-sup*. Ela pode ser representada, alternativamente, da seguinte maneira:

$$\forall u \in V, \quad \alpha \|u\|_V \leq \sup_{v \in L} \frac{a(u, v)}{\|v\|_L}.$$

2.2 Problema Modelo

O problema de convecção-difusão-reação linear estacionário consiste em encontrar a função escalar $u(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ satisfazendo

$$\nabla \cdot (-\epsilon \nabla u + \beta u) + \sigma u = f \quad \text{em } \Omega; \quad (2.3)$$

$$u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Gamma, \quad (2.4)$$

onde $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ é um domínio limitado aberto com uma fronteira Lipschitz $\Gamma = \partial\Omega$.

Os coeficientes desta equação são:

- $\beta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$, o campo de velocidade;
- $\epsilon \geq 0$, o coeficiente de difusão;

¹ Sempre que surgir uma divisão por alguma norma, admite-se que ela é não nula.

- $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, o coeficiente de reação, onde $\sigma > 0$ para dissipação, destruição ou absorção e $\sigma < 0$ para produção;
- $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, o termo de fonte.

Considera-se $\beta \in [L^\infty(\Omega)]^d$, $\epsilon \geq 0$ constante real, $\sigma \in L^\infty(\Omega)$ e $f \in L^2(\Omega)$. Além disso, divide-se a fronteira Γ em:

$$\Gamma_- = \{x \in \Gamma \mid \beta(x) \cdot \boldsymbol{\eta}(x) < 0\}; \quad (2.5)$$

$$\Gamma_0 = \{x \in \Gamma \mid \beta(x) \cdot \boldsymbol{\eta}(x) = 0\}; \quad (2.6)$$

$$\Gamma_+ = \{x \in \Gamma \mid \beta(x) \cdot \boldsymbol{\eta}(x) > 0\}, \quad (2.7)$$

onde Γ_- corresponde à parte da fronteira Γ onde ocorre a entrada de fluxo, Γ_0 refere-se à fronteira característica, Γ_+ representa a parte de saída de fluxo e $\boldsymbol{\eta}$ é o vetor normal unitário externo à fronteira Γ .

Para o caso de transporte em meios incompressíveis, assume-se a hipótese de incompressibilidade, ou seja,

$$\nabla \cdot \beta = 0; \quad (2.8)$$

caso contrário, é assumido que β seja constante. As condições sobre o campo de velocidade permitem reescrever a equação de convecção-difusão-reação da seguinte forma: achar $u(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$\mathcal{L}(u) := -\epsilon \Delta u + \beta \cdot \nabla u + \sigma u = f \quad \text{em } \Omega, \quad (2.9)$$

$$u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Gamma. \quad (2.10)$$

onde $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{dif} + \mathcal{L}_{conv} + \mathcal{L}_{reac}$, representando a soma dos operadores difusivo, convectivo e reativo, respectivamente. Essa equação inclui os seguintes casos particulares:

- Equação convecção-difusão ($\sigma = 0$);
- Equação de Helmholtz ($\beta = 0, \sigma < 0$);

- Equação convecção-reação ($\epsilon = 0$);
- Equação difusão-reação ($\beta = 0$),

que descrevem muitas situações associadas a fenômenos de transporte, tais como transporte de massa e transporte de energia, que podem ser encontrados em vários problemas práticos de engenharia, conforme discutido no Capítulo 1.

Assume-se também que

$$\sigma \geq 0. \quad (2.11)$$

Isso restringe a análise do modelo nesta tese para situações que caracterizam dissipação ou destruição, excluindo-se como objeto de estudo a equação de Helmholtz. A solução da equação (2.9) pode ser classificada de acordo com o discriminante $\kappa = |\beta|^2 + 4\sigma\epsilon$. Se $\kappa < 0$ tem-se o regime de propagação e no caso de $\kappa \geq 0$ obtém-se o regime exponencial. Ver (Hauke, 2002) para mais detalhes.

A interrelação entre os fenômenos convectivos, difusivos e reativos modelados por essa equação pode ser caracterizada pelos seguintes números adimensionais:

- $Pe = |\beta|h/2\epsilon$, número de Peclet local;
- $\gamma = \sigma h/|\beta|$, número de Damköler local,

onde h é o comprimento característico associado à discretização do domínio Ω , adotada no processo de aproximação da solução do problema. Na próxima seção é apresentada a formulação variacional de (2.9), bem como a existência e unicidade de solução.

2.3 Formulação Variacional

Para apresentar a formulação variacional do problema, considere por simplicidade $g(\mathbf{x}) \equiv 0$ e defina o espaço $X = H_0^1(\Omega)$. Então, multiplicando a equação (2.9) pela função peso $v \in X$ e integrando sobre Ω obtém-se a equação

$$-\epsilon(\Delta u, v) + (\beta \cdot \nabla u + \sigma u, v) = (f, v) \quad \forall v \in X,$$

onde $(\cdot, \cdot)$ é o produto interno usual do espaço $L^2(\Omega)$. Aplicando o teorema de Green (Ciarlet, 1978) no primeiro termo, resulta em

$$-(\Delta u, v) = (\nabla u, \nabla v) - (\nabla u \cdot \boldsymbol{\eta}, v)_{\Gamma} = (\nabla u, \nabla v),$$

pois $v = 0$ em Γ .

Então, a formulação variacional clássica do problema (2.9) pode ser dada por: achar $u \in X$ tal que

$$B(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in X, \quad (2.12)$$

onde a forma bilinear $B(\cdot, \cdot)$ é definida por

$$B(u, v) = \epsilon(\nabla u, \nabla v) + a(u, v), \quad (2.13)$$

com

$$a(u, v) = (\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u + \sigma u, v). \quad (2.14)$$

Para mostrar que o problema variacional (2.12) é bem-posto, mesmo em situações mais gerais do problema (sem as hipóteses (2.8) e (2.11)), assume-se a seguinte hipótese: existe uma constante σ_0 tal que

$$\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\beta} \geq \sigma_0 > 0. \quad (2.15)$$

O Lema 2.3.1 a seguir é um importante resultado, utilizado algumas vezes no decorrer dessa tese.

Lema 2.3.1. *Para $u \in X$, tem-se*

$$a(u, u) = \left(\left(\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\beta} \right) u, u \right).$$

□

Demonstração: Considerando o primeiro termo de $a(u, u)$ em (2.14), obtém-se

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u, u) &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \left[\beta_i \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] d\Omega \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \left[\beta_i \frac{\partial}{\partial x_i} (u^2) \right] d\Omega \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (\beta_i (u^2)) - \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \beta_i \right) (u^2) \right] d\Omega \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \nabla \cdot (\boldsymbol{\beta} (u^2)) d\Omega - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} \beta_i \right) (u^2) d\Omega \\
&= \frac{1}{2} \int_{\Gamma} u^2 \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\eta} d\Omega - \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\beta} \right) (u^2) d\Omega.
\end{aligned}$$

Por hipótese, $u \in X$, ou seja, $u = 0$ em Γ . Dessa forma, o primeiro termo do lado direito se anula. Como resultado,

$$a(u, u) = (\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u, u) + (\sigma u, u) = \left(\left(\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\beta} \right) u, u \right).$$

■

O próximo Lema (Lema 2.3.2) mostra que a forma bilinear $B(u, v)$ é contínua e coerciva no espaço $H^1(\Omega)$ e, conseqüentemente, o Lema de Lax-Milgram 2.1.1 garante existência e unicidade de solução para o problema (2.12).

Lema 2.3.2. *A forma bilinear $B(\cdot, \cdot)$ dada por (2.13) é contínua e coerciva em $H^1(\Omega)$, ou seja, existem constantes positivas α_1 e α_2 tais que*

$$B(u, v) \leq \alpha_1 \|u\|_1 \|v\|_1 \quad e \quad (2.16)$$

$$B(v, v) \geq \alpha_2 \|v\|_1^2. \quad (2.17)$$

□

Demonstração: Para continuidade, tem-se

$$\begin{aligned}
B(u, v) &= \epsilon(\nabla u, \nabla v) + (\beta \cdot \nabla u, v) + (\sigma u, v) \\
&\leq \epsilon \|\nabla u\|_0 \|\nabla v\|_0 + |\beta|_\infty \|\nabla u\|_0 \|v\|_0 + |\sigma|_\infty \|u\|_0 \|v\|_0 \\
&\leq \max\{\epsilon, |\beta|_\infty, |\sigma|_\infty\} (\|\nabla u\|_0 + \|u\|_0) (\|\nabla v\|_0 + \|v\|_0).
\end{aligned}$$

Como as normas $(\|\nabla u\|_0 + \|u\|_0)$ e $\|u\|_1$ são equivalentes em $H^1(\Omega)$, segue-se que

$$B(u, v) \leq \alpha_1 \|u\|_1 \|v\|_1, \quad \text{com } \alpha_1 = C \max\{\epsilon, |\beta|_\infty, |\sigma|_\infty\}.$$

Para a coercividade,

$$\begin{aligned}
B(u, u) &= \epsilon \|\nabla u\|_0^2 + a(u, u) \\
&= \epsilon \|\nabla u\|_0^2 + \left(\left(\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \beta \right) u, u \right) \\
&\geq \epsilon \|\nabla u\|_0^2 + \sigma_0 \|u\|_0^2 \\
&\geq \alpha_2 \|u\|_1^2, \quad \text{com } \alpha_2 = \min\{\epsilon, \sigma_0\}
\end{aligned}$$

■

Os Lemas 2.3.2 e de Lax-Milgram 2.1.1 garantem existência e unicidade de solução para o problema variacional (2.12).

Tomando $v = u$ em (2.13) e usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz no lado direito, resulta em

$$\min\{\epsilon, \sigma\} \|u\|_1^2 \leq \epsilon \|\nabla u\|_0^2 + \sigma \|u\|_0^2 = (f, u) \leq \|f\|_0 \|u\|_1.$$

Para $\epsilon = \min\{\epsilon, \sigma\}$, obtém-se

$$\|u\|_1 \leq \frac{1}{\epsilon} \|f\|_0. \quad (2.18)$$

Essa estimativa mostra o problema intrínseco desse modelo matemático. Para valores pequenos de ϵ , pequenas variações em f , podem conduzir a grandes variações na solução u .

Na próxima Seção é apresentado o método de Galerkin para aproximar o problema (2.12), via elementos finitos, enfatizando suas deficiências no tratamento deste tipo de problema.

2.4 Aproximações por Elementos Finitos - Método de Galerkin

Para encontrar uma aproximação u_h da solução u , considere uma partição uniforme $\mathcal{T}_h = \{T_h\}$ do domínio Ω em triângulos ou quadriláteros T_h , indexada por h que representa o comprimento característico de malha. Seja $X_h \subset X$ um espaço de dimensão finita dado por

$$X_h = \{u_h \in H_0^1(\Omega) \mid u_h|_{T_h} \in \mathbb{P}_k(T_h), \quad \forall T_h \in \mathcal{T}_h\},$$

onde $\mathbb{P}_k(T_h)$ representa o espaço das funções polinomiais com coeficientes reais e de grau menor ou igual a k em T_h . Neste trabalho, considera-se $k = 1$, ou seja, o espaço de aproximação é formado somente por funções polinomiais lineares. O método de elementos finitos de Galerkin, para a equação (2.9) é dado por: Achar $u_h \in X_h$ tal que

$$B(u_h, v_h) = (f, v_h) \quad \forall v_h \in X_h. \quad (2.19)$$

Sendo $X_h \subset X$, os resultados de continuidade e coercividade apresentados para a forma bilinear $B(\cdot, \cdot)$ para o modelo contínuo (Lema 2.3.2) são transferidos para o problema discreto (2.19), garantindo desta forma existência e unicidade da solução aproximada $u_h \in X_h$.

Usando (2.16) e (2.17), o Lema de Céa (Ciarlet, 1978) estabelece que

$$\|u - u_h\|_1 \leq \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \inf_{v_h \in X_h} \|u - v_h\|_1. \quad (2.20)$$

Para $\alpha_1 = O(1)$ e $\alpha_2 = O(\epsilon)$, o lado direito de (2.20) torna-se muito grande quando

ϵ decresce substancialmente. Isso explica a causa da deficiência do método de Galerkin no tratamento de problemas de transporte quando a difusão $\epsilon \rightarrow 0$.

Como discutido na introdução, a formulação de Galerkin apresenta sérias deficiências para este problema quando a convecção é dominante em relação a difusão ($\epsilon \ll |\beta|_\infty h$) e/ou quando a reação predomina comparada com a difusão ($\epsilon \ll \sigma h^2$). Neste caso, se a malha não for suficientemente refinada, principalmente nas regiões de camadas limites, a solução numérica pode apresentar oscilações espúrias por todo o domínio (Donea e Huerta, 2003; Ramalho, 2005; Brooks e Hughes, 1982; Johnson, 1990b; Harari e Hughes, 1994). Desta forma, a aplicação do método de Galerkin a problemas reais é comprometida pelo alto custo computacional requerido na discretização do modelo numérico.

As deficiências do método de Galerkin podem ser contornadas através da utilização de métodos estabilizados consistentes, também conhecidos como métodos de Petrov-Galerkin. Nestes métodos, um termo extra agindo no interior da cada elemento é adicionado à formulação de Galerkin. Este termo é definido em função do resíduo da equação diferencial para garantir a consistência do método e é controlado por um parâmetro de estabilização. Na próxima seção é apresentada uma breve revisão dos principais métodos estabilizados existentes na literatura para o problema (2.9).

2.5 Métodos Estabilizados Lineares

Os métodos estabilizados do tipo Petrov-Galerkin tiveram grande desenvolvimento a partir do início dos anos oitenta do século passado, tendo como marco o método SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) introduzido por Brooks e Hughes (1982) para problemas com convecção dominante. Estes métodos são uma combinação da formulação de Galerkin com termos baseados no resíduo, a nível de elementos, da equação diferencial que governa o problema. Estes termos são balanceados por parâmetros de estabilização, resultando em formulações variacionalmente consistentes com propriedades de estabilização superiores às da

aproximação de Galerkin.

Os métodos de elementos finitos estabilizados lineares para a equação (2.9) podem ser definidos por: Achar $u_h \in X_h$ tal que

$$B(u_h, v_h) + E(u_h, v_h) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \quad (2.21)$$

onde $E(u_h, v_h)$ indica os termos de perturbação que são adicionados à formulação variacional padrão (2.19). Como discutido anteriormente, estes termos são adicionados de forma a preservar a consistência do método e a obter estabilidade numérica, tendo a forma geral dada pela expressão

$$E(u_h, v_h) = \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{L}(u_h) - f, \tau \wp(v_h))_{T_h}, \quad (2.22)$$

onde $\mathcal{L}(u_h) - f = R(u_h)$ é o resíduo da equação (2.9), $\wp(v_h)$ é um operador (linear) aplicado ao espaço das funções testes e $\tau \in L^\infty(\Omega)$ é um parâmetro de estabilização local não negativo, que deve ser escolhido apropriadamente para cada método. O operador $\wp(v_h)$ caracteriza os diversos métodos estabilizados existentes. Alguns exemplos de métodos estabilizados, caracterizados pelas diferentes escolhas do operador $\wp(v_h)$, são:

- $\wp(v_h) = \mathcal{L}_{conv}(v_h) = \beta \cdot \nabla v_h$, método SUPG (Brooks e Hughes, 1982; Johnson et al., 1984);
- $\wp(v_h) = \mathcal{L}(v_h)$, método GLS (Hughes et al., 1989);
- $\wp(v_h) = -\mathcal{L}^*(v_h)$, método USFEM (Franca e Valentin, 2000),
onde $\mathcal{L}^* = \mathcal{L}_{dif} - \mathcal{L}_{conv} + \mathcal{L}_{reac}$ é o operador adjunto de $\mathcal{L}$.

O SUPG é um dos métodos mais utilizados para resolver problemas com convecção dominante. Em contraste aos métodos clássicos de difusão artificial, que adicionam difusão extra em toda malha de elementos finitos, o método SUPG adiciona difusão artificial somente na direção das linhas de corrente (Brooks

e Hughes, 1982; Donea e Huerta, 2003). Além disto, esta difusão extra é introduzida de forma consistente, obtendo assim estabilidade e taxas ótimas de convergência (Knobloch, 2006). Isto representou, à época, um avanço em direção ao desenvolvimento de técnicas numéricas para estabilização da equação de convecção-difusão com convecção dominante sobre os métodos clássicos como viscosidade artificial, *upwind*, diferenças finitas centrais, elementos finitos de Galerkin e Petrov-Galerkin com funções pesos contínuas (Hughes et al., 2004). A análise de estabilidade e convergência do método SUPG é apresentada em Johnson et al. (1984).

Outros métodos estabilizados foram desenvolvidos após o SUPG, como o GLS (*Galerkin/Least Squares*) (Hughes et al., 1989), GGLS (*Galerkin Gradient/Least Squares*) (Franca e do Carmo, 1989) e USFEM (*Unusual Finite Element Method*) (Franca e Farhat, 1995; Franca e Valentin, 2000). Nestes dois últimos evidencia-se uma busca para melhorar as aproximações em regimes de reação dominante (Ramalho, 2005). Uma idéia não-usual de formulação é introduzida no método USFEM, onde ao invés da inserção de uma difusão extra no método, reduz-se a intensidade do termo reativo (Ramalho, 2005). Esta idéia baseou-se num procedimento semelhante apresentado por Douglas e Wang (1989) para o problema de Stokes (ver também Franca et al. (1992)).

Como vantagens desta classe de métodos, destacam-se sólida fundamentação matemática e numérica, e o fornecimento de soluções aproximadas precisas e estáveis. Uma desvantagem é sua dependência, em geral, da escolha ou do projeto ótimo do parâmetro de estabilização τ . Existem parâmetros ótimos para alguns casos específicos. Por exemplo, o método SUPG, aplicado ao problema de convecção-difusão estacionário, unidimensional, com $f = 0$, coeficientes constantes e usando interpolação linear, é nodalmente exato utilizando o parâmetro de estabilidade

$$\tau = \frac{h}{2|\beta|}(\coth(Pe) - \frac{1}{Pe}).$$

Em geral, é uma tarefa não trivial determinar um parâmetro que seja

apropriado para uma determinada gama de aplicações. Muita pesquisa tem sido feita em busca do projeto ótimo desses coeficientes e também no desenvolvimento de novos métodos estabilizados. O trabalho de Hauke e García-Olivares (2001) apresenta uma revisão sobre os vários parâmetros de estabilização utilizados para a equação de convecção-difusão-reação. Pode-se citar também os trabalhos de Tezduyar e Osawa (2000) e Tezduyar (2004) no contexto da equação de convecção-difusão.

Os métodos estabilizados conduzem, em geral, à soluções globalmente estáveis. Entretanto, oscilações localizadas na vizinhança de camadas limite internas e/ou externas ainda permanecem. Tais oscilações localizadas podem ser evitadas ou reduzidas através do uso de métodos de captura de descontinuidade, que serão apresentados a seguir.

2.6 Métodos Estabilizados Não Lineares

Apesar de grande parte dos métodos de elementos finitos estabilizados mencionados na seção anterior conduzirem à soluções numéricas globalmente estáveis, eles não evitam a possibilidade de ocorrer oscilações localizadas nas vizinhanças de altos gradientes. A razão para esse comportamento é que esses métodos não preservam a *monotonicidade* (LeVeque, 1992). O teorema de *Godunov* (1959) estabelece que um método linear que preserva a monotonicidade é, no máximo, de primeira ordem de precisão (LeVeque, 1992; Mizukami e Hughes, 1985). Para a obtenção de um método de alta ordem que evite oscilações espúrias, pode-se recorrer aos métodos de captura de descontinuidades, que, em geral, são métodos não-lineares, mesmo que o problema original seja linear (Galeão e do Carmo, 1988; Codina, 1993; John e Knobloch, 2007).

A idéia básica de todo método de captura de descontinuidades é aumentar a dissipação numérica nas regiões onde a solução não é suave. Em essência, a maioria das formulações com captura de descontinuidades são equivalentes a uma decomposição do termo de estabilização em duas partes. Uma parte é um termo de

estabilização linear, como o operador SUPG, que controla o gradiente da solução na direção das linhas de corrente. Como indicado em (Guermond et al., 2004a), é levado em consideração o caráter hiperbólico da equação, evitando o espalhamento das oscilações causadas pela falta de coercividade. A segunda parte é um termo que controla o gradiente em outras direções, impedindo oscilações localizadas próximas às descontinuidades. Esse termo, em geral, tem a forma

$$\sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (D_{cd}(u_h) \nabla u_h, \nabla v_h)_{T_h}, \quad (2.23)$$

onde $D_{cd}(\cdot)$ é um coeficiente de difusão não linear, que depende da solução aproximada, introduzindo desta forma uma não linearidade no processo de solução.

Grande parte dos métodos de captura de descontinuidades satisfazem as seguintes propriedades (Juanes, 2003; Hughes e Mallet, 1986):

- *consistência*: o operador é proporcional ao resíduo das equações de Euler-Lagrange;
- *estabilidade*: adição de um controle extra sobre o gradiente da solução numérica;
- *precisão*: o operador deve se anular rapidamente em regiões onde a solução é suave.

Existe uma vasta literatura disponível sobre esta classe de métodos (Hughes et al., 1986; Tezduyar e Park, 1986; Galeão e do Carmo, 1988; Johnson et al., 1990; Codina, 1993; do Carmo e Galeão, 1991; Burman e Ern, 2005; Knobloch, 2006; John e Knobloch, 2007). Para uma revisão destes métodos, sugere-se a referência (John e Knobloch, 2007).

Segundo John e Knobloch (2007), os métodos de captura de descontinuidades podem ser classificados como:

1 - Técnicas *Upwind*

- Mizukami e Hughes (1985);
- Knobloch (2006) - (IMH - *Improved Mizukami-Hughes*);

2 - Difusão Artificial Ortogonal às Linhas de Correntes

- Hughes et al. (1986);
- Johnson et al. (1987);
- Codina (1993);
- Knopp et al. (2002);
- Burman e Ern (2002);

3 - Estabilização por Arestas

- Burman e Hansbo (2004);
- Burman e Ern (2005);

4 - Difusão Artificial Isotrópica

- Galeão e do Carmo (1988) - (CAU - *Consistent Approximate Upwind*);
- Johnson (1990a);
- do Carmo e Galeão (1991);
- Almeida e Silva (1997);
- Knopp et al. (2002);
- do Carmo e Alvarez (2003).

Outras técnicas presentes na literatura são:

- *Penalização na violação do princípio do máximo* - (Layton e Polman, 1996);
- *Minimização do resíduo em $L^1(\Omega)$* - (Guermond, 2004);
- *Cálculo Finito* - (Õnate, 1998; Õnate et al., 2006).

Embora, em geral, os métodos de captura de descontinuidade sejam eficientes na eliminação de oscilações localizadas na vizinhança de regiões de altos gradientes, nenhuma justificativa teórica está disponível para apoiar a presença desse termo na formulação de Galerkin. Uma das melhores justificativas é apresentada em (Galeão e do Carmo, 1988), onde o operador SUPG e o operador de captura de descontinuidade aparecem a partir da concepção de um campo de velocidade aproximado. Maiores detalhes são apresentados a seguir.

2.6.1 Método CAU (*Consistent Approximate Upwind*)

O CAU é um método de elementos finitos estabilizados que introduz de forma consistente, além da contribuição do SUPG, um termo de captura de descontinuidades não-linear que controla as derivadas na direção do gradiente da solução aproximada (Galeão et al., 2004). Este método baseia-se no conceito de que a direção aproximada das linhas de corrente da solução seja dada por um campo de velocidade modificado β_h . Quando $h \rightarrow 0$, essa direção “aproximada” converge para a direção real das linhas de corrente da solução u , ou seja, $\beta_h \rightarrow \beta$. O método, então, consiste em definir de forma sistemática e consistente a direção ótima de *upwind*, que é construída de maneira auto-adaptativa pelo processo de aproximação. Para tornar claro este procedimento, considere a seguinte direção *upwind* aproximada:

$$\beta_h^{up} = \tau_1 \beta + \tau_2 (\beta - \beta_h), \quad (2.24)$$

onde τ_1 e τ_2 são coeficientes a serem determinados e β_h é um campo de velocidade auxiliar tal que, para cada $T_h \in \mathcal{T}_h$, a solução aproximada u_h satisfaz

$$-\epsilon \Delta u_h + \beta_h \cdot \nabla u_h + \sigma u_h = f, \quad \text{em } T_h. \quad (2.25)$$

Dentre todos os campos β_h que satisfazem (2.25), escolhe-se o que se encontra mais próximo do campo de velocidade real β da solução u , no sentido da norma

em $L^2(T_h)$. As condições anteriores conduzem a

$$\beta_h = \begin{cases} \beta - \frac{R(u_h)}{|\nabla u_h|^2} \nabla u_h, & \text{se } \nabla u_h \neq \mathbf{0}; \\ \beta, & \text{se } \nabla u_h = \mathbf{0}, \end{cases} \quad (2.26)$$

sendo $R(u_h)$ o resíduo da equação (2.9).

O método é então construído usando $\tilde{v}_h$ como função peso, definida por

$$\tilde{v}_h = v_h + \beta_h^{up} \cdot \nabla v_h. \quad (2.27)$$

Desta forma, o método CAU é dado por: achar $u_h \in X_h$ tal que

$$B(u_h, v_h) + E(u_h, v_h) + \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{L}u - f, \tau_2 [\beta - \beta_h] \cdot \nabla v_h)_{T_h} = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \quad (2.28)$$

onde $E(u_h, v_h)$ é o termo de estabilização do SUPG, representado por

$$E(u_h, v_h) = \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{L}u - f, \tau_1 \beta \cdot \nabla v_h)_{T_h}. \quad (2.29)$$

Assim, τ_1 é o parâmetro de *upwind* do SUPG, τ_{supg} , e τ_2 será denotado por τ_{cau} .

O termo não linear em (2.28) equivale a (2.23), com $D_{cd}(\cdot)$ dado por

$$D_{cd}(u_h) = \tau_{cau} [(\beta - \beta_h) \otimes (\beta - \beta_h)]. \quad (2.30)$$

Eventualmente, a direção de $(\beta - \beta_h)$ pode coincidir com a direção das linhas de corrente, conduzindo à uma solução aproximada muito difusiva. Para evitar isto, define-se

$$\tau_{cau} = \max[0, \tau_{cau}^c - \tau_{supg}], \quad (2.31)$$

onde

$$\tau_{cau}^c = \frac{h^c}{2|\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_h|} \left(\coth(Pe^c) - \frac{1}{Pe^c} \right); \quad \tau_{supg} = \frac{h^s}{2|\boldsymbol{\beta}|} \left(\coth(Pe^s) - \frac{1}{Pe^s} \right), \quad (2.32)$$

e

$$h^c = 2 \frac{|\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_h|}{|b^c|}; \quad b_i^c = \sum_{j=1}^d \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} (\beta_j - \beta_{h;j}); \quad Pe^c = \frac{h^c |\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_h|}{2\epsilon}; \quad (2.33)$$

$$h^s = 2 \frac{|\boldsymbol{\beta}|}{|b|}; \quad b_i = \sum_{j=1}^d \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} (\beta_j) \quad Pe^s = \frac{h^s |\boldsymbol{\beta}|}{2\epsilon}. \quad (2.34)$$

Nestas expressões, ξ_i ($i = 1, \dots, d$) é a i -ésima coordenada do sistema local que mapeia um elemento da malha de elementos finitos em um elemento padrão; β_j e $\beta_{h;j}$ são as j -ésimas componentes dos vetores $\boldsymbol{\beta}$ e $\boldsymbol{\beta}_h$, respectivamente, e ϵ é o coeficiente de difusão.

Para detalhes do método CAU com outras escolhas para o parâmetro τ_{cau} sugere-se as seguintes referências: (Galeão e do Carmo, 1988; do Carmo e Galeão, 1991; Almeida e Galeão, 1996; Galeão et al., 2004; Lube e Rapin, 2006; John e Knobloch, 2007). Análises numéricas do método CAU podem ser encontradas em (Shih e Elman, 2000; Knopp et al., 2002; Galeão et al., 2004; Lube e Rapin, 2006), onde são obtidas taxas de convergência similares às do SUPG. Segundo (Knopp et al., 2002; Lube e Rapin, 2006), a unicidade de solução para a classe de métodos de captura de descontinuidades, da qual faz parte o CAU, ainda é um problema em aberto.

2.7 Métodos Multiescala

Na simulação numérica de vários problemas, existem efeitos físicos que ocorrem nas escalas menores do que as representadas pela malha computacional que têm forte impacto nas grandes escalas. Recentemente tem havido certo consenso em se atribuir o aparecimento de instabilidades numéricas à incapacidade do modelo discreto em representar a fenomenologia modelada (Margolin e Rider,

2005; Heitmann, 2007; Adams, 2002; Weinam e Engquist, 2003; Guermond et al., 2004b). Isto baseia-se no fato de que, essencialmente, todos os processos físicos são dissipativos, incluindo o escoamento de fluidos, e que, em muitos casos de interesse, os comprimentos da escala nos quais a energia é dissipada são bastantes inferiores ao resolvido por uma simulação numérica. Isto entretanto não significa que este processo deva ser ignorado (Brezzi e Marini, 2002b). Pelo contrário, em simulações numéricas onde a dissipação não está presente de alguma forma no algoritmo numérico, a energia não dissipada simplesmente se acumula nas menores escalas resolvidas, produzindo oscilações espúrias, as chamadas instabilidades. Argumento análogo vem sendo usado há bastante tempo para justificar a simulação de grandes escalas (Large Eddy Simulation - LES) de fenômenos turbulentos, na qual uma dissipação adicional é inserida de modo a modelar os efeitos submalha não resolvidos (Margolin e Rider, 2005).

Os métodos multiescala tornaram-se mais populares nos últimos dez anos pela necessidade de tratar problemas que envolvem múltiplas escalas ativas e múltiplas físicas. Sob o ponto de vista de múltiplas escalas, ou multiescala, os métodos estabilizados de elementos finitos, por exemplo, podem ser entendidos como técnicas que capturam na solução a variabilidade da micro escala (submalha). A formulação variacional multiescala apresentada em (Hughes, 1995) pode ser considerada um marco para este entendimento e orientou novas direções de pesquisa. A idéia principal destes métodos é decompor a variável de interesse (e a função peso) em duas partes: a primeira representada pela discretização utilizada (macro escala - escala resolvida) e a segunda relacionada às escalas menores, submalhas (micro escala - escala não resolvida). Tal decomposição permite dividir a formulação fraca do problema em dois sub-problemas: um para a macro escala e outro para a micro escala. Os efeitos não-locais da micro escala são incorporados na macro escala resultando em um problema enriquecido para as escalas resolvidas, que é então solucionado numericamente. Esta nova metodologia variacional permite uma interpretação física dos métodos estabilizados, que podem ser vistos

como técnicas que capturam a variabilidade da micro escala na solução. Neste caso, a influência das escalas submalhas nas escalas resolvidas não é desprezada, e, como consequência, o comportamento oscilatório do método de Galerkin é drasticamente reduzido e confinado a uma pequena região próxima a elevados gradientes (Juanes, 2003). Vários métodos variacionais para problemas que exibem comportamento multiescala têm sido desenvolvidos nos últimos anos. Exemplos destes métodos são: RFB (*Residual-Free Bubbles*) (Brezzi e Russo, 1994; Brezzi et al., 1997; Franca et al., 1998; Brezzi et al., 2000; Brezzi e Marini, 2002b; Brezzi et al., 2003; Franca et al., 2006; Cangiani, 2004; Gravemeier, 2003), VMS (*Variational Multiscale*) (Hughes, 1995; Hughes et al., 2004; Hauke e García-Olivares, 2001; Calo, 2004; Scovazzi, 2004; Gravemeier, 2003), MFEM (*Multiscale Finite Element Method*) (Hou e Wu, 1997; Tang et al., 2006) e SGS (*Subgrid Stabilization*) (Guermond, 1999; Brezzi et al., 2000; Guermond, 2001; Layton, 2002; Kaya e Layton, 2003; Heitmann, 2003; Guermond et al., 2004a; Kaya, 2004; John e Kaya, 2005; Guermond et al., 2006; John et al., 2006; Heitmann, 2007).

O método VMS introduzido por Hughes (1995) fornece o suporte teórico para a construção dos modelos submalhas em geral. Este método é baseado na decomposição da solução $u \in X$ na forma

$$u = u_h + u', \quad (2.35)$$

onde u_h é a componente macro, que pode ser resolvida pela malha de elementos finitos considerada, e u' é a componente micro, que é resolvida, de preferência, de forma analítica. Note que a solução associada à micro escala, u' , na verdade representa o erro, $u - u_h$, da componente associada a macro escala. A solução para u' pode ser obtida pelo método das funções de Green.

A decomposição aditiva da solução, $u = u_h + u'$, e da função peso, $v = v_h + v'$, é acompanhada pela correspondente decomposição do espaço de aproximação:

$$X = X_h \oplus X', \quad (2.36)$$

onde X_h é um subespaço de dimensão finita (subespaço macro) e X' é um subespaço de dimensão infinita (subespaço micro). Para o problema de convecção-difusão-reação, a forma variacional (2.12) resulta em

$$B(u_h + u', v_h + v') = (f, v_h + v'),$$

que, devido a independência linear de v_h e v' , é decomposta em dois problemas:

$$B(u_h, v_h) + B(u', v_h) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \quad (2.37)$$

associado às escalas resolvidas e

$$B(u_h, v') + B(u', v') = (f, v'), \quad \forall v' \in X'. \quad (2.38)$$

associado às escalas não resolvidas.

O problema (2.37) é de dimensão finita, enquanto que (2.38) é de dimensão infinita. O objetivo, então, é resolver analiticamente o problema (2.38) como uma função da solução macro u_h . Consequentemente, esta solução u' , em função de u_h , é substituída em (2.37) para obter uma equação para u_h . A técnica das funções de Green é apropriada em alguns problemas para a obtenção da solução u' . Contudo, as funções de Green pertencem a um subespaço de dimensão infinita e são não-locais. É, então, usual impor $u' = 0$ ao longo das arestas dos elementos da malha de elementos finitos para localizar o problema (2.38), associado às escalas pequenas, no interior dos elementos.

A equação de Euler-Lagrange associada ao problema (2.38) é

$$\begin{cases} \Pi \mathcal{L}(u') = -\Pi [\mathcal{L}(u_h) - f], & \text{em } T_h; \\ u' = 0, & \text{em } \partial T_h, \end{cases} \quad (2.39)$$

onde Π é a projeção L^2 em X' . Note que este problema para u' é controlado pelo resíduo da solução macro u_h . A solução do problema (2.39) pelo *método das*

funções de Green (ver Hughes (1995); Brezzi et al. (1997); Hughes et al. (2004)) resulta em

$$u'(y) = - \int_{T_h} g(x, y) (\mathcal{L}(u_h) - f)(x) d\Omega_x, \quad (2.40)$$

onde $g(x, y)$ representa a função de Green. A equação (2.40) pode também ser representada por

$$u' = M [\mathcal{L}(u_h) - f], \quad (2.41)$$

onde $M : L^2(T_h) \rightarrow H_0^1(T_h)$ é um operador linear limitado. Observe agora que

$$B(u', v_h) = \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{L}(u'), v_h)_{T_h} = \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (u', \mathcal{L}^*(v_h))_{T_h}. \quad (2.42)$$

A aproximação (2.41) é substituída em (2.42), que é utilizada para escrever o problema na macro escala (2.37) na forma dos métodos estabilizados:

$$B(u_h, v_h) + \underbrace{\sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} (M [\mathcal{L}(u_h) - f], \mathcal{L}^*(v_h))_{T_h}}_{\text{efeito da micro-escala}} = (f, v_h). \quad (2.43)$$

Note que esta equação corresponde à forma estabilizada padrão (2.21)-(2.22). Escolhendo $M = -\tau I$, o método VMS (*Variational Multiscale*) coincide com o USFEM (*Unusual Finite Element Method*).

Outros métodos multiescala utilizados no contexto da equação de convecção-difusão-reação são RFB (*Residual-Free Bubbles*) e SGS (*Subgrid Stabilization*). Existe uma equivalência entre os métodos multiescala VMS, RFB e SGS. Para maiores detalhes sobre a relação entre os métodos VMS e RFB sugere-se a referência (Brezzi et al., 1997) e para uma equivalência entre o VMS (e consequentemente o RFB) e o SGS sugere-se (Brezzi et al., 2000). Uma interpretação do método SUPG no contexto multiescala pode ser encontrada em (Brezzi et al., 1997). O método SGS (Guermond, 1999, 2001) é descrito em detalhes no próximo capítulo.

Capítulo 3

Métodos Lineares de Estabilização

Submalha

Neste capítulo é apresentado o método linear de estabilização submalha SGS (*Subgrid Stabilization*), também conhecido como método de viscosidade ou difusão artificial submalha. Este método foi desenvolvido por Jean-Luc Guermond (Guermond, 1999, 2001; Ern e Guermond, 2004) e generalizado por Willian J. Layton no contexto dos métodos mistos (Layton, 2002). Inicialmente o método é apresentado para EDPs de primeira ordem. Em seguida, é estendido para EDPs de segunda ordem, abrangendo, desta forma, a equação de convecção-difusão-reação. Na seção seguinte, uma correspondência entre o método SGS e os métodos mistos é apresentada. Na última seção, são descritos alguns experimentos numéricos, mostrando o comportamento do método SGS.

3.1 Método Linear de Estabilização Submalha - SGS

O método SGS envolve uma decomposição multiescala do espaço de aproximação e um termo de viscosidade artificial parametrizado é adicionado somente na micro escala. Esta metodologia foi desenvolvida por Guermond (Guermond, 1999, 2001) e generalizada por Layton no contexto dos métodos mistos (Layton, 2002).

A idéia básica do método SGS (Guermond et al., 2006) consiste em:

- 1 - decompor o espaço de aproximação X_h em escalas resolvidas (espaço X_H) e escalas não resolvidas (submalha) (espaço X_h^H) de forma que a condição *inf-sup discreta*, a ser definida posteriormente (ver (3.15) ou (3.21)), seja satisfeita uniformemente com respeito a esta decomposição;
- 2 - adicionar ao método de Galerkin um termo representando uma viscosidade artificial agindo somente nas escalas não resolvidas.

O método foi desenvolvido, a princípio, para aproximar EDPs de primeira ordem, como a equação de convecção-reação. Esses problemas, caracterizam-se por só possuírem, em geral, propriedades de coercividade em L^2 . Posteriormente, o método foi estendido às EDPs de segunda ordem, abrangendo desta forma, a equação de convecção-difusão-reação, tema de estudo desta tese. Detalhes da concepção do método, extraídos de (Guermond, 1999, 2001; Ern e Guermond, 2004; Guermond et al., 2004a, 2006), são apresentados a seguir.

3.1.1 Equações Diferenciais Parciais de Primeira Ordem

Inicialmente, o método SGS é apresentado no contexto das Equações Diferenciais Parciais - (EDPs) de primeira ordem. Para isso, seja L um espaço de Hilbert e V um subespaço continuamente imerso e denso em L . Introduz-se uma forma bilinear contínua $a \in \mathcal{L}(V \times L; \mathbb{R})$ e assumamos que $a(\cdot, \cdot)$ é monótona; ou seja,

$$a(u, u) \geq 0, \quad u \in V. \quad (3.1)$$

A parte simétrica $a_s : V \times V \longrightarrow \mathbb{R}$ de a é dada por

$$a_s(u, v) = \frac{1}{2}(a(u, v) + a(v, u)), \quad \forall (u, v) \in V \times V. \quad (3.2)$$

Observe que $a_s(u, u) = a(u, u) \geq 0$, $\forall u \in V$. Isto implica que $a_s(\cdot, \cdot)$ é uma forma bilinear monótona simétrica. Uma propriedade importante que as formas bilineares monótonas e simétricas possuem é dada no Lema 3.1.1, a seguir.

Lema 3.1.1. *Seja E um espaço vetorial e $b : E \times E \longrightarrow \mathbb{R}$ uma forma bilinear monótona simétrica; então*

$$b(u, v) \leq \sqrt{b(u, v)} \sqrt{b(v, u)}, \quad \forall (u, v) \in E \times E.$$

□

É assumido também que a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ satisfaça as hipóteses do Teorema BNB 2.1.1. Então, dado $f \in L$, o problema

$$\begin{cases} \text{Achar } u \in V \text{ tal que} \\ a(u, v) = (f, v)_L, \quad \forall v \in L, \end{cases} \quad (3.3)$$

é bem-posto.

Definindo o operador $A : V \longrightarrow L$ de forma que $a(u, v) = (Au, v)_L$, $\forall (u, v) \in V \times L$, implica que A é um isomorfismo, ou seja, o problema forte associado a A é bem-posto (Ern e Guermond, 2004). Quando A é um operador diferencial de primeira ordem, o problema (3.3) é essencialmente um problema de Petrov-Galerkin; isto é, os espaços de funções admissíveis e peso são diferentes. Para exemplificar, considere a equação de convecção-reação, dada no próximo exemplo.

Exemplo 3.1.1. Equação de Convecção-Reação

Considere o problema de convecção-reação:

$$\begin{cases} \beta \cdot \nabla u + \sigma u = f, & \text{em } \Omega, \\ u|_{\Gamma_-} = 0, \end{cases} \quad (3.4)$$

com $\beta \in \mathbb{R}^d$ representando o campo de velocidades e $\sigma \in \mathbb{R}$ o coeficiente de reação.

Assume-se que $\beta \in [L^\infty(\Omega)]^d$, $\nabla \cdot \beta \in L^\infty(\Omega)$, $\sigma \in L^\infty(\Omega)$ e $\Gamma_- = \Gamma - \Gamma_+$.

Define-se o espaço

$$V = \{v \in L^2(\Omega); \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla v \in L^2(\Omega)\} \subset L^2(\Omega).$$

Munido com a norma $\|v\|_V = \|v\|_0 + \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla v\|_0$, V é um espaço de Hilbert.

Assumindo que existe $\sigma_0 > 0$ tal que

$$\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\beta} \geq \sigma_0 > 0, \quad q.s. \text{ em } \Omega;$$

define-se

$$V_0 = \{v \in V; v|_{\Gamma_-} = 0\}.$$

Então, o problema

$$\begin{cases} \text{Achar } u \in V_0 \text{ tal que} \\ a(u, v) \equiv (\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u + \sigma u, v) = (f, v), \quad \forall v \in L^2(\Omega). \end{cases} \quad (3.5)$$

satisfaz as hipóteses do Teorema BNB, e consequentemente (3.5) é um problema bem-posto.

□

Considere agora a versão aproximada do problema contínuo (3.3):

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in V_h \subset V \text{ tal que} \\ a(u_h, v_h) = (f, v_h)_L, \quad \forall v_h \in L_h \subset L. \end{cases} \quad (3.6)$$

Este problema discreto é bem-posto se as hipóteses da Proposição 3.1.1 (ver (Ern e Guermond, 2004)) apresentada a seguir, são satisfeitas:

Proposição 3.1.1. Assume-se que $\dim V_h = \dim L_h$ e

$$\exists c_h > 0, \quad \forall u_h \in V_h \quad c_h \|u_h\|_V \leq \sup_{v_h \in L_h} \frac{a(u_h, v_h)}{\|v_h\|_L}.$$

Então, o problema discreto (3.6) é bem-posto e

$$\|u_h\|_V \leq \frac{1}{c_h} \|f\|_L.$$

Para apresentar o método SGS, considere um problema modelado por uma equação diferencial de primeira ordem, a ser aproximado pelo método de elementos finitos de Galerkin. Para isso, assume-se que $X_H = V_H = L_H \subset V$, onde H representa o comprimento característico da malha. A condição inf-sup discreta

$$\inf_{u_H \in X_H} \sup_{v_H \in X_H} \frac{a(u_H, v_H)}{\|u_H\|_V \|v_H\|_L} \geq \alpha$$

para EDPs de primeira ordem não é satisfeita uniformemente em relação a H , em geral. Como consequência, a solução aproximada pelo método de Galerkin pode apresentar oscilações espúrias. Isto significa que usar o método de Galerkin para este tipo de problema não é uma boa escolha. Uma alternativa plausível é aumentar o espaço das funções peso. De fato, como a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ satisfaz as hipóteses do Teorema 2.1.1, então

$$\inf_{u_H \in X_H} \sup_{v \in L} \frac{a(u_H, v)}{\|u_H\|_V \|v\|_L} \geq \alpha$$

é satisfeita uniformemente em relação a H . Esta estimativa sugere que, fixando o espaço de aproximação X_H , existe entre X_H e L uma coleção de espaços de funções peso para a qual a versão discreta da condição inf-sup é satisfeita uniformemente. Assume-se, então, que é possível exibir um espaço de dimensão finita X_h tal que $X_H \subsetneq X_h \subset L$ e

$$\exists c > 0, \quad \inf_{u_H \in X_H} \sup_{v_h \in X_h} \frac{a(u_H, v_h)}{\|u_H\|_V \|v_h\|_L} \geq c \quad (3.7)$$

é satisfeita uniformemente em relação a h . Agora, considere a aproximação de

Petrov Galerkin:

$$\begin{cases} \text{Achar } u_H \in X_H \text{ tal que} \\ a(u_H, v_h) = (f, v_h)_L, \quad \forall v_h \in X_h. \end{cases} \quad (3.8)$$

Claramente, se este problema tem solução, (3.7) assegura que esta solução é uniformemente estável com respeito a H e h . Mas $X_H \subsetneq X_h$, implicando que $\dim X_h > \dim X_H$. Consequentemente, a Proposição 3.1.1 não pode ser usada. Se, para evitar o problema da dimensão, for assumido que $X_h = X_H$, então (3.7) não pode ser satisfeita, retornando à dificuldade original.

Neste ponto, sabe-se que a hipótese (3.7) resulta em um controle sobre $\|u_H\|_V$, mas a formulação de Galerkin em X_h não controla $\|u_h\|_V$. Isso implica que um controle *a priori* sobre $\|u_h - u_H\|_V$ está faltando. Uma forma simples de controlar essa quantidade é adicionar uma viscosidade artificial somente em $u_h - u_H$.

Assume-se, então, a existência de um família de subespaços de dimensão finita $\{X_H, X_h\}_{\{H,h\}}$, satisfazendo às seguintes condições:

- (i) $X_H \subsetneq X_h \subset V$;
- (ii) Existe um subespaço discreto $X_h^H \subset V$ tal que a seguinte decomposição em soma direta se verifica:

$$X_h = X_H \oplus X_h^H \quad (3.9)$$

e o operador projeção $P_{X_H} : X_h \rightarrow X_H$ induzido por essa decomposição é estável em L , isto é,

$$\exists c \geq 0, \forall v_h \in X_h \quad \|P_{X_H} v_h\|_L \leq c \|v_h\|_L. \quad (3.10)$$

Para todo $v_h \in X_h$, tem-se $v_H = P_{X_H} v_h$ e $v_h^H = (I - P_{X_H}) v_h$. Denota-se por X_H o espaço das escalas resolvidas (macro) e por X_h^H o

espaço das escalas não resolvidas (micro ou submalha). O operador P_{X_H} funciona como um filtro que remove as oscilações da solução aproximada v_h localizadas no espaço X_h^H ;

(iii) Estimativa inversa em X_h :

$$\exists c > 0, \forall v_h \in X_h, \quad \|v_h\|_V \leq cH^{-1}\|v_h\|_L. \quad (3.11)$$

Se X_h e X_H são espaços de elementos finitos construídos sobre malhas quase-uniformes de comprimentos característicos h e H , respectivamente, então esta propriedade é válida se h e H forem de mesma ordem, isto é, $c_1h \leq H \leq c_2h$. Nas aplicações do método, utiliza-se, geralmente, $H = 2h$ ou $H = h$;

(iv) Propriedade de aproximação sobre X_H : Existem um subespaço W denso em V , constantes $k > 0$, $c > 0$ e $w_H \in X_H$ tais que

$$\forall u \in W, \quad \|u - w_H\|_L + H\|u - w_H\|_V \leq cH^{k+1}\|u\|_W; \quad (3.12)$$

(v) Existe uma forma bilinear $b_h(\cdot, \cdot) : X_h^H \times X_h^H \rightarrow \mathbb{R}$ (operador de estabilização submalha) satisfazendo às seguintes propriedades de continuidade e coercividade: $\exists c_B, c_b > 0$ tais que

$$\forall u_h^H, v_h^H \in X_h^H, \quad \begin{cases} b_h(u_h^H, v_h^H) \leq c_B H \|u_h^H\|_b \|v_h^H\|_b, \\ b_h(v_h^H, v_h^H) \geq c_b H \|v_h^H\|_b^2, \end{cases} \quad (3.13)$$

onde a norma $\|\cdot\|_b$ é tal que: existem $c_1 > 0$ e $c_2 > 0$ tais que

$$\forall v_h^H \in X_h^H, \quad c_1 \|v_h^H\|_V \leq \|v_h^H\|_b \leq c_2 H^{-1} \|v_h^H\|_L. \quad (3.14)$$

(vi) Condição inf-sup discreta: Existe $c_a > 0$, tal que

$$c_a \|v_H\|_V \leq \sup_{\varphi_h \in X_h} \frac{a(v_H, \varphi_h)}{\|\varphi_h\|_L}. \quad (3.15)$$

As condições (i)-(vi) estabelecidas originam o método de estabilização submalha SGS. A hipótese (3.15) é o cerne desta metodologia, sendo importante para estabelecer estimativas ótimas para o problema. Vale ressaltar, que as condições anteriores são satisfeitas para algumas discretizações de elementos finitos. Ver (Guermond, 1999) para maiores detalhes.

Então, o método de estabilização submalha linear - SGS (Guermond, 1999, 2001) é dado por:

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in X_h \text{ tal que} \\ a(u_h, v_h) + b_h(u_h^H, v_h^H) = (f, v_h)_L, \quad \forall v_h \in X_h. \end{cases} \quad (3.16)$$

Existem muitas possibilidades para se construir a forma bilinear $b_h(\cdot, \cdot)$ que atenda a hipótese (v). Por exemplo, denotando por $(\cdot, \cdot)_V$ o produto interno em V , uma simples escolha para b_h é $b_h(u_h^H, v_h^H) = H(u_h^H, v_h^H)_V$, que imediatamente implica $\|\cdot\|_b = \|\cdot\|_V$. Para o problema de convecção-reação do Exemplo 3.1.1, esta escolha resulta em

$$b_h(u_h^H, v_h^H) = H(\beta \cdot \nabla u_h^H + \sigma u_h^H, \beta \cdot \nabla v_h^H + \sigma v_h^H).$$

Outras possibilidades para $b_h(\cdot, \cdot)$ podem ser encontradas em (Ern e Guermond, 2004).

Observação 3.1.1. *Introduzindo a notação*

$$a_h(u_h, v_h) = a(u_h, v_h) + b_h(u_h^H, v_h^H),$$

tem-se que

$$\begin{aligned} \forall v_h \in X_h, \quad a_h(u_h, v_h) &= a(u, v_h); \\ \forall v_h \in X_h, \quad \forall u_H \in X_H, \quad a_h(u_H, v_h) &= a(u_H, v_h). \end{aligned}$$

A primeira igualdade é obtida subtraindo (3.16) de (3.3). A segunda desigualdade resulta do fato que u_H não possui escalas submalhas.

A forma $a_h(\cdot, \cdot)$ é definida somente no espaço discreto $X_h \times X_h$. Dessa forma, a expressão $a_h(u, v_h)$ não tem sentido para $u \in V$ e $u \notin X_h$, pois u não tem a priori nenhuma decomposição em $X_H \oplus X_h^H$.

O problema (3.16) tem solução única (Guermond, 1999). Um resultado de convergência é dado pelo seguinte teorema :

Teorema 3.1.1. *Se u , a solução de (3.3), está em W , a solução aproximada u_h de (3.16) satisfaz*

$$\begin{cases} a_s(u - u_h, u - u_h)^{1/2} \leq cH^{k+1/2}\|u\|_W; \\ \|u - u_h\|_V + \|u_h^H\|_b \leq cH^k\|u\|_W. \end{cases} \quad (3.17)$$

□

Observação 3.1.2. *Note que a taxa de convergência (3.17) é ótima na norma de V . Por outro lado, se $a_s(\cdot, \cdot)$ é L -coerciva, (3.17) não é ótima na norma de L : um fator de $H^{1/2}$ está faltando.*

□

No caso do problema de convecção-reação (Exemplo 3.1.1), tem-se

- $\|\cdot\|_L = \|\cdot\|_0$;
- $\|\cdot\|_V = \sqrt{\|\cdot\|_0^2 + \|\beta \cdot \nabla(\cdot)\|_0^2}$;
- $a_s(u, u) = ((\sigma - \frac{1}{2}\nabla \cdot \beta)u, u) \geq \sigma_0\|u\|_0^2$, ou seja, $a_s(\cdot, \cdot)$ é $L^2(\Omega)$ -coerciva.

Como $\sigma_0 > 0$, obtém-se a seguinte estimativa em $L^2(\Omega)$:

$$\|u - u_h\|_0 \leq cH^{k+1/2}\|u\|_{k+1}. \quad (3.18)$$

Em V , a estimativa é dada por

$$\|u - u_h\|_V \leq cH^k\|u\|_{k+1}. \quad (3.19)$$

3.1.1.1 Refinamento das Hipóteses

Frequentemente o operador A , associado à uma EDP de primeira ordem, pode ser decomposto em $A = A_0 + A_1$ onde A_0 é o operador de ordem zero e A_1 é o operador diferencial de primeira ordem. Para o operador de convecção-reação considerado no Exemplo 3.1.1, tem-se $A_0u = \sigma u$ e $A_1u = \beta \cdot \nabla u$.

Associada à decomposição do operador A , considere a decomposição $a = a_0 + a_1$ onde $a_0(u, v) = (A_0u, v)_L$ e $a_1(u, v) = (A_1u, v)_L$. As seguintes hipóteses são estabelecidas:

1. Existe uma seminorma em V , denotada por $|\cdot|_V$, tal que $\forall (u, v) \in V \times L$

$$\begin{aligned} \|u\|_V &\leq c(a_s(u, u)^{1/2} + |u|_V); \\ a_0(u, v) &\leq c_0a_s(u, u)^{1/2}\|v\|_L; \\ a_1(u, v) &\leq c_1|u|_V\|v\|_L. \end{aligned} \quad (3.20)$$

2. A hipótese (3.15) é substituída pela seguinte condição mais fraca: $\exists c_{a1} > 0, c_\delta \geq 0$, independentes de H e h , tais que

$$\forall u_h \in X_h, \quad c_{a1}|u_h|_V \leq \sup_{\varphi_h \in X_h} \frac{a_1(u_h, \varphi_h)}{\|\varphi_h\|_0} + c_\delta a_s(u_h, u_h)^{1/2}. \quad (3.21)$$

A razão para o enfraquecimento da hipótese (3.15) é que (3.21), usualmente, é mais simples de ser verificada.

3. A definição da forma bilinear $b_h(\cdot, \cdot)$ também é enfraquecida da seguinte maneira: existe uma seminorma $|\cdot|_b$ tal que $\forall (u_h^H, v_h^H) \in X_h^H \times X_h^H$,

$$c_{e1}|u_h^H|_V \leq |u_h^H|_b \leq c_{e2}H^{-1}\|u_h^H\|_L, \quad (3.22)$$

de modo que

$$b_h(u_h^H, v_h^H) \leq c_B H |u_h^H|_b |v_h^H|_b; \quad (3.23)$$

$$b_h(u_h^H, u_h^H) \geq c_b H |u_h^H|_b^2. \quad (3.24)$$

O enfraquecimento destas hipóteses do método SGS não afetam as taxas de convergência apresentadas em (3.17).

Proposição 3.1.2. *Usando as hipóteses (3.10), (3.11), (3.12), (3.20), (3.21) e (3.23), se a solução para (3.3) está em W então a solução de (3.16) satisfaz a estimativa (3.17).*

□

3.1.1.2 Escolha do Operador Submalha

O relaxamento de algumas hipóteses do método SGS, apresentado na seção anterior, conduz à uma simplificação na escolha do operador submalha $b_h(\cdot, \cdot)$. Para a equação de convecção-reação (Exemplo 3.1.1), assumindo que

$$\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \beta \geq \sigma_0 > 0,$$

a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ associada é $L^2(\Omega)$ -coerciva. Consequentemente, adotando $|u_h^H|_b = \|\nabla u_h^H\|_0$, pode-se usar a seguinte definição para a forma bilinear $b_h(\cdot, \cdot)$:

$$\forall (u_h^H, v_h^H) \in X_h^H \times X_h^H, \quad b_h(u_h^H, v_h^H) = c_b H (\nabla u_h^H, \nabla v_h^H). \quad (3.25)$$

Se, alternativamente, adota-se $|u_h^H|_b = \|\beta \cdot \nabla u_h^H\|_0$, tem-se

$$\forall (u_h^H, v_h^H) \in X_h^H \times X_h^H, \quad b_h(u_h^H, v_h^H) = c_b H(\beta \cdot \nabla u_h^H, \beta \cdot \nabla v_h^H), \quad (3.26)$$

onde c_b é uma constante positiva. Deve-se observar os diferentes efeitos advindos das escolhas anteriores: enquanto (3.25) atua de forma isotrópica, (3.26) atua direcionalmente.

Observação 3.1.3. *Os métodos não-lineares desenvolvidos nesta tese, assim como todos os experimentos realizados com o método SGS, utilizam o operador isotrópico submalha (3.25).*

□

3.1.2 Equações Diferenciais Parciais de Segunda Ordem

O método SGS apresentado na seção anterior foi idealizado sob medida para problemas onde A é um operador diferencial de primeira ordem. Como exemplo, destaca-se a equação de convecção-reação. A equação de convecção-difusão-reação, expressa da forma $\tilde{B}u = Au + \epsilon \tilde{D}u$, onde A é um operador de primeira ordem e $\tilde{D}$ é um operador de segunda ordem, pode ser tratada como uma perturbação do caso anterior. Como A é positivo, o operador $\tilde{B}$ é coercivo, sendo ϵ a constante de coercividade. Se ϵ é da ordem de 1, o problema $\tilde{B}u = f$ pode ser facilmente aproximado pelo método de Galerkin. Por outro lado, se ϵ é pequeno, a coercividade não é forte o bastante para garantir estabilidade do método de Galerkin. De fato, $\tilde{B} \approx A$ quando $\epsilon \rightarrow 0$.

Mostra-se em (Guermond, 2001; Ern e Guermond, 2004) que o método SGS apresentado na Seção 3.1.1 pode ser estendido para equações diferenciais de segunda ordem, com estimativas ótimas de convergência. Para clarear a exposição, repete-se aqui alguns detalhes desta extensão.

Sejam $a(\cdot, \cdot)$, V e L definidos como na Seção 3.1.1. Além disso, introduz-se um novo espaço de Hilbert X e assume-se que $X \subset V$ com imersão contínua e

densa. Define-se $d \in \mathcal{L}(X \times X; \mathbb{R})$ e assume-se que a forma bilinear $a + d$ é X -coerciva, isto é,

$$a(u, u) + d(u, u) \geq \|u\|_X^2.$$

Para $0 \leq \epsilon \leq 1$ e $f \in L$, considere o seguinte problema:

$$\begin{cases} \text{Achar } u \in X \text{ tal que} \\ a(u, v) + \epsilon d(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in X. \end{cases} \quad (3.27)$$

Para determinar uma solução aproximada do problema (3.27), considere $X_H \subsetneq X_h \subset X$ satisfazendo as hipóteses (3.10), (3.11), (3.12), (3.20), (3.21) e (3.23). Assume-se também que existe c , independente de h e H , tal que

$$\forall v_h \in X_h, \quad \|v_h\|_X \leq cH^{-1}\|v_h\|_L. \quad (3.28)$$

Esta hipótese significa que X e V são domínios de operadores diferenciais de mesma ordem. O problema discreto associado - método SGS - é dado por:

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in X_h \text{ tal que} \\ a(u_h, v_h) + \epsilon d(u_h, v_h) + b_h(u_h^H, v_h^H) = (f, v_h)_L, \quad \forall v_h \in X_h. \end{cases} \quad (3.29)$$

Uma estimativa de erro *a priori* para esse problema é estabelecida no seguinte teorema:

Teorema 3.1.2. *Para $u \in W$ e usando as hipóteses (3.10), (3.11), (3.12), (3.20), (3.21), (3.23) e (3.28), a solução aproximada u_h do problema (3.29) satisfaz*

$$\begin{cases} a_s(u - u_h, u - u_h)^{1/2} + \epsilon^{1/2}\|u - u_h\|_X \leq c(H^{k+1/2} + \epsilon^{1/2}H^k)\|u\|_W; \\ \|u - u_h\|_V \leq cH^k\|u\|_W. \end{cases} \quad (3.30)$$

□

Para um problema de convecção-difusão-reação, tem-se:

- $a(u, v) = (\beta \cdot \nabla u + \sigma u, v)$;
- $d(u, v) = (\nabla u, \nabla v)$;
- $X = H_0^1(\Omega)$;
- $V = \{v \in L^2(\Omega); \beta \cdot \nabla v \in L^2(\Omega); v|_{\Gamma_-} = 0\}$;
- $L = L^2(\Omega)$.

A estimativa de erro *a priori* (3.30) para a equação de convecção-difusão-reação resulta em

$$\|u - u_h\|_0 + \sqrt{\epsilon} \|u - u_h\|_1 \leq c(H^{k+\frac{1}{2}} + \epsilon^{\frac{1}{2}} H^k) \|u\|_{k+1}; \quad (3.31)$$

$$\|u - u_h\|_0 + \|\beta \cdot \nabla(u - u_h)\|_0 \leq cH^k \|u\|_{k+1}. \quad (3.32)$$

Estas estimativas são semelhantes às obtidas com os métodos estabilizados, como o SUPG. Um aspecto importante é que a estimativa (3.32) não depende do coeficiente de difusão ϵ , como ocorre com o SUPG.

3.1.3 Cenários de Discretização

Nesta seção são descritos dois cenários de elementos finitos que satisfazem às hipóteses do método SGS. Assume-se então que $\mathcal{T}_H = \{T_H\}$ é uma triangulação regular do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, com $d = 2$. O triângulo de referência é denotado por $\hat{T}$ e $F_H : T_H \rightarrow \hat{T}$ é uma aplicação bijetiva de T_H em $\hat{T}$.

3.1.3.1 Interpolação Polinomial Linear + Bolha

Neste caso, para a construção de uma aproximação polinomial linear $\mathbb{P}_1$, é definido o seguinte espaço:

$$X_H = \{u_H \in [H_0(\Omega)]^d \mid u_H|_{T_H} \in [\mathbb{P}_1(T_H)]^d, \quad \forall T_H \in \mathcal{T}_H\}. \quad (3.33)$$

Para construir o espaço submalha (micro) X_h^H , considera-se $\widehat{\psi} \in H_0^1(\widehat{T})$ com $0 \leq \widehat{\psi} \leq 1$; $\widehat{\psi}$ é denominada função bolha. Esta é uma função polinomial que se anula no contorno do elemento (Figura 3.1). Denotando $\psi_h = \widehat{\psi}(F_H)$, define-se $X_h^H(T_H) = [\text{span}(\psi_h)]^d$ para todo $T_H \in \mathcal{T}_H$ e o espaço X_h^H é dado por:

$$X_h^H = \bigoplus_{T_H \in \mathcal{T}_H} X_h^H(T_H). \quad (3.34)$$

Tomando $X_h = X_H \oplus X_h^H$, o par $\{X_h, X_H\}$ é denominado cenário de aproximação $\mathbb{P}_1/bolha$ (ver Figura 3.2).

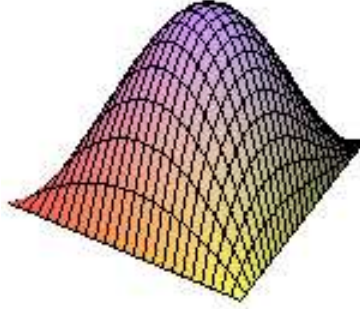


Figura 3.1: Função bolha cúbica.

3.1.3.2 Interpolação Polinomial Linear em Dois Níveis

O cenário de aproximação $\mathbb{P}_1/bolha$ descrito anteriormente não é hierárquico, pois os espaços X_H e X_h^H são definidos sobre a mesma malha, isto é, $h = H$. Uma abordagem alternativa é usar um cenário hierárquico de dois níveis, conforme descrito a seguir.

Segundo Brezzi e Marini (2002a), métodos de dois níveis têm sido utilizados em uma variedade de aplicações, principalmente em formulações de elementos finitos estabilizados para problemas de convecção dominante. Baseado na hipótese de existência dos espaços de dimensão finita X_H e X_h^H , considere uma partição triangular $\mathcal{T}_H = \{T_H\}$ do domínio Ω , onde H denota o comprimento característico da malha. Para cada triângulo (macro) $T_H \in \mathcal{T}_H$, quatro sub-triângulos são criados conectando os pontos médios de suas arestas. Fazendo $h = H/2$, obtém-se uma

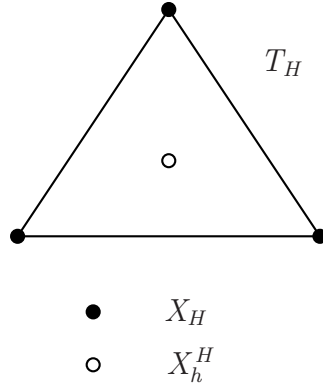


Figura 3.2: Representação do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$. Espaço macro X_H (●,dof). Espaço micro X_h^H (○,dof) (Guermond, 1999).

nova triangulação $\mathcal{T}_h = \{T_h\}$ mais refinada do domínio Ω .

Uma aproximação de elementos finitos lineares por partes de dois níveis é introduzida através da definição dos seguintes espaços:

$$X_H = \{u_H \in [H^1(\Omega)]^d \mid u_{H|_{T_H}} \in [\mathbb{P}_1(T_H)]^d, \quad \forall T_H \in \mathcal{T}_H\}; \quad (3.35)$$

$$X_h = \{u_h \in [H^1(\Omega)]^d \mid u_{h|_{T_h}} \in [\mathbb{P}_1(T_h)]^d, \quad \forall T_h \in \mathcal{T}_h\}; \quad (3.36)$$

$$X_h^H = \{u_h^H \in [H^1(\Omega)]^d \mid u_{h^H|_{T_H}} \in [\mathbb{P}^{(1)}]^d, \quad \forall T_H \in \mathcal{T}_H\}, \quad (3.37)$$

onde $\mathbb{P}^{(1)}$ representa o espaço das funções polinomiais lineares por partes em cada sub-triângulo de T_H e que se anulam nos três vértices de T_H . Uma representação das funções de forma associadas a um vértice da malha $\mathcal{T}_H$, para o cenário $\mathbb{P}_1/dois-níveis$, é mostrada na Figura 3.3 (extraída de Guermond et al. (2006)). O par $\{X_h, X_H\}$ é denominado cenário de aproximação $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ (ver Figura 3.4). Um representação da ação do operador (filtro) $P_{X_H} : X_h \rightarrow X_H$ sobre um elemento macro $T_H \in \mathcal{T}_H$ é mostrada na Figura 3.5.

Observação 3.1.4. *Utiliza-se nesta tese as nomenclaturas $SGS-\mathbb{P}_1/bolha$ e $SGS-\mathbb{P}_1/dois-níveis$ para designar o método SGS usando os respectivos cenários de discretização.*

□

Observação 3.1.5. No cenário $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$, o uso de funções bolhas para aproximar a micro escala não permite que a solução não resolvida u_h^H (“flutuações”) se mova através das fronteiras dos elementos pelo fato da função bolha se anular no contorno de cada elemento $T_H \in \mathcal{T}_H$. Essa restrição implica que as flutuações são quase-estacionárias para o cenário $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ (Kaya e Layton, 2003). No cenário $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$, as flutuações se anulam apenas nos vértices do elemento T_H .

□

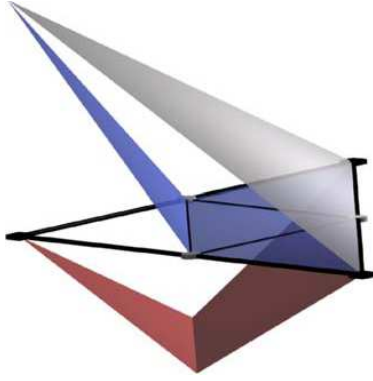


Figura 3.3: Funções de formas associadas à um vértice da malha $\mathcal{T}_H$: $v_H \in X_H$ (cinza), $v_h \in X_h$ (azul) e $v_h^H \in X_h^H$ (vermelho). Figura extraída de (Guermond et al., 2006).

3.1.3.3 Parâmetro de Estabilização

Nos métodos estabilizados, em geral, o parâmetro de estabilização τ em (2.22) é uma função não trivial de h e ϵ ; no método SGS, o parâmetro c_b presente na definição de $b_h(\cdot, \cdot)$ em (3.25) e (3.26) não depende de ϵ . Este é um aspecto interessante quando o método SGS é usado para resolver problemas não-lineares ou problemas vetoriais com matrizes de difusão anisotrópicas (Ern e Guermond, 2004). Na concepção e análise do método não é enfatizada a determinação do coeficiente c_b , mas a qualidade da solução aproximada é fortemente dependente da sua escolha adequada, como pode ser observado nos exemplos numéricos apresentados na Seção 3.3. Em (Brezzi et al., 2000) é proposto um algoritmo para determinar c_b , para problemas de convecção-difusão, baseado na relação entre o método SGS- $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$,

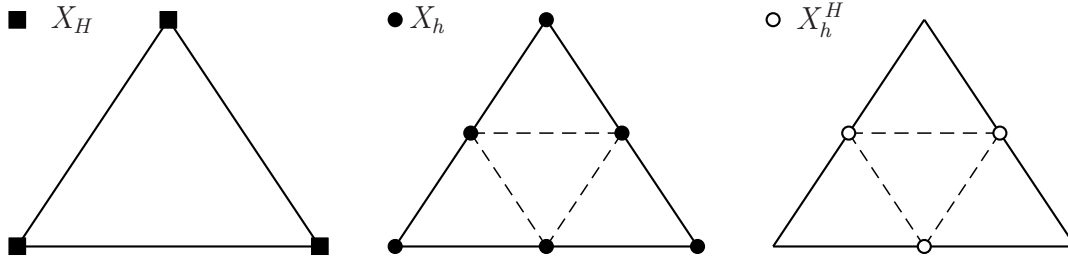


Figura 3.4: Representação do cenário $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$. Esquerda: espaço macro X_H ($\blacksquare$,dof); Centro: quatro triângulos de X_h gerados a partir do triângulo macro ($\bullet$,dof). Direita: espaço micro X_h^H ($\circ$,dof) (Guermond et al., 2006).

usando o operador submalha (3.25) e métodos estabilizados similares ao SUPG. Embora projetado para uma escolha particular do espaço submalha X_h^H (espaço de funções bolhas), o algoritmo utiliza *a priori* informações sobre o problema. Outra proposta é apresentada em Heitmann (2003, 2007) para problemas transientes. Em geral, o critério para a escolha do parâmetro c_b tem sido baseado numa estratégia de tentativa e erro (Guermond et al., 2006). A seguir, define-se a *faixa de variação ótima de c_b* , utilizada no decorrer desta seção e na Seção 3.3.

Definição 3.1.1. (*Faixa de variação ótima de c_b*). *Seja c_b^* o parâmetro associado à melhor solução aproximada do problema, obtida por um determinado método numérico. Define-se a faixa de variação ótima de c_b como o intervalo real $\mathcal{V}(c_b^*, \theta) = (c_b^* - \theta, c_b^* + \theta)$ de centro c_b^* e raio $\theta \in \mathbb{R}_+$, formado por valores de c_b , associados às soluções aproximadas próximas da melhor solução.*

□

Quando $c_b = 0$, o modelo SGS- $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ torna-se um método enriquecido com funções bolhas. Neste caso, como pode ser visto no Exemplo 1, na Seção 3.3, a solução aproximada é bastante difusiva, uma vez que essa bolha não utiliza nenhuma informação do problema original, como ocorre no método multiescala

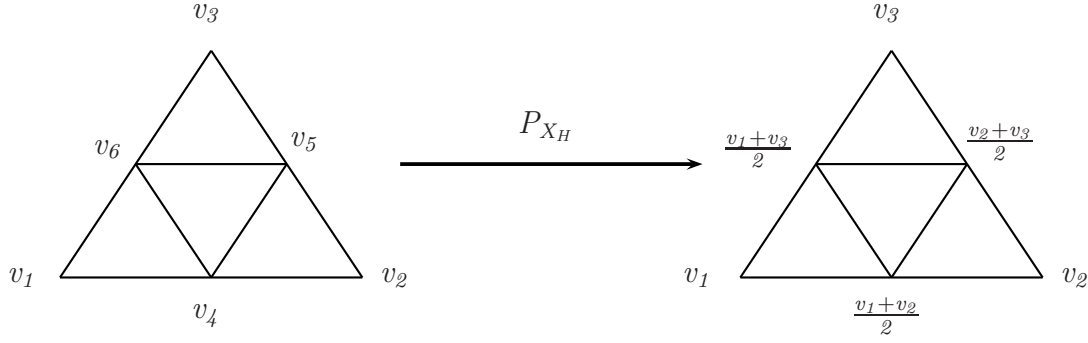


Figura 3.5: Definição de P_{X_H} para o cenário $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$ (Guermond et al., 2004a).

RFB. À medida que c_b cresce até um valor apropriado, digamos c_b^* , a qualidade da solução melhora substancialmente, recuperando em alguns problemas a solução adequada. Quando c_b cresce a partir de c_b^* , a solução começa a se deteriorar, apresentando oscilações espúrias. Este comportamento pode ser analisado de forma mais clara, quando o método $\text{SGS-}\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ é comparado com o método SUPG, no contexto da equação de convecção-difusão. De fato, é mostrado em (Brezzi et al., 2000) que o $\text{SGS-}\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ coincide com o SUPG, com o parâmetro de estabilização dado por:

$$\tau = \frac{1}{\text{meas}(T_h)} \frac{\left(\int_{T_h} b(x, y) d\Omega \right)^2}{(\epsilon + c_b h) \int_{T_h} |\nabla b(x, y)|^2 d\Omega},$$

onde $b(x, y)$ é a função bolha. Isso implica que se ϵ é muito pequeno e $c_b = 0$, então $\tau \gg 0$ e, conseqüentemente, uma quantidade alta de difusão extra é adicionada ao modelo. Por outro lado, se $c_b \rightarrow \infty$ então $\tau \rightarrow 0$ e o método $\text{SGS-}\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ recupera o Galerkin. Nos experimentos numéricos realizados, foi verificado que a faixa de variação ótima $\mathcal{V}(c_b^*, \theta)$ para c_b é bem próxima de zero para o método $\text{SGS-}\mathbb{P}_1/\text{bolha}$.

O comportamento do método $\text{SGS-}\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$ é diferente. Quando $c_b = 0$, o método de Galerkin é recuperado. À medida que o valor de c_b

cresce, as oscilações espúrias provenientes do método de Galerkin diminuem substancialmente, até que uma solução adequada seja obtida, isto é, quando $c_b = c_b^*$. Note que as oscilações espúrias presentes na solução u_h são amenizadas ou excluídas da solução $u_H = P_{X_H} u_h$. Quando c_b cresce a partir de c_b^* , a solução u_h novamente apresenta um comportamento oscilatório. Nos experimentos numéricos realizados, foi verificado que o c_b^* do método SGS- $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$, em geral, é maior do que o c_b^* associado ao método SGS- $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$. Isso pode ser observado nos exemplos apresentados na Seção 3.3.

A idéia de estabilização submalha foi subsequentemente reinterpretada em (Layton, 2002) para problemas de convecção-difusão-reação e em (John e Kaya, 2005) para modelagem em turbulência, em ambos os casos usando um método misto com variáveis auxiliares. Na próxima seção o método SGS é apresentado no contexto dos métodos mistos.

3.2 Estabilização Submalha e Métodos Mistos

O método SGS desenvolvido em (Guermond, 1999, 2001) pode ser reescrito no contexto dos métodos mistos, através da utilização de novas variáveis. A correspondência entre as duas classes de formulações é claramente observada para escolhas apropriadas dos espaços da formulação mista (Layton, 2002; John e Kaya, 2005). Nesta situação e sob a ótica de um método misto mostra-se que a estabilização SGS é consistente.

A seguir, será apresentada a correspondência entre o método SGS e uma formulação mista, conforme extraída de (Layton, 2002). Apesar das diferenças que serão apontadas, esta síntese demonstra que não existe nenhuma relevante incompatibilidade entre as duas formulações, podendo promover desenvolvimentos futuros nestas duas classes de métodos. Isto foi, por exemplo, o que aconteceu com os métodos estabilizados quando vistos sob a abordagem mais abrangente dos métodos variacionais multiescala (Hughes, 1995).

Assim, para estabelecer a conexão entre a modelagem submalha e os métodos

mistos, considere a formulação clássica do problema (2.12) reescrita da seguinte forma: encontrar $u \in X$ tal que

$$(\epsilon + \alpha)(\nabla u, \nabla v) - \alpha(\nabla u, \nabla v) + a(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in X, \quad (3.38)$$

onde $\alpha = \alpha(h) > 0$. Introduzindo-se novas variáveis $\mathbf{l}$ e $\mathbf{q} \equiv \nabla u \in L \equiv [L^2(\Omega)]^d$, a formulação anterior pode ser reescrita na seguinte forma equivalente: achar $(u, \mathbf{q}) \in (X, L)$ tais que

$$(\epsilon + \alpha)(\nabla u, \nabla v) - \alpha(\mathbf{q}, \nabla v) + a(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in X; \quad (3.39)$$

$$(\mathbf{q} - \nabla u, \mathbf{l}) = 0, \quad \forall \mathbf{l} \in L. \quad (3.40)$$

Para o problema contínuo, essa formulação não é interessante. Contudo, para o problema discreto, pode-se obter diferentes tipos de aproximações para o problema. Da mesma forma utilizada na seção anterior, sejam h e H ($h < H$) dois comprimentos característicos de malhas e sejam $L_H \subset L$ e $X_h \subset X$ espaços de elementos finitos. Considere, então, a contrapartida discreta da formulação anterior: encontrar $(u_h, \mathbf{q}_H) \in (X_h, L_H)$ satisfazendo

$$(\epsilon + \alpha)(\nabla u_h, \nabla v_h) - \alpha(\mathbf{q}_H, \nabla v_h) + a(u_h, v_h) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h; \quad (3.41)$$

$$(\mathbf{q}_H - \nabla u_h, \mathbf{l}_H) = 0 \quad \forall \mathbf{l}_H \in L_H. \quad (3.42)$$

Diferentes escolhas de L_H originam diferentes métodos. Em particular, se L_H é escolhido de forma que $L_H \supset \nabla X_h$, então (3.42) conduz a $\mathbf{q}_H \equiv \nabla u_h$. Substituindo este resultado em (3.41), a aproximação de Galerkin é recuperada, como esperado. Por outro lado, se $L_H = \{0\}$ então $\mathbf{q}_H = \mathbf{0}$ e conseqüentemente, $\alpha(\mathbf{q}_H, \nabla v_h) = 0$ em (3.41), obtendo-se o método de difusão artificial clássico.

A questão chave é selecionar o espaço L_H através de uma análise precisa, de forma a encontrar um método com melhores propriedades de estabilização. Para se obter o efeito desejado do termo extra em (3.41), utiliza-se (3.42) para eliminar

a variável $\mathbf{q}_H$ em (3.41). De fato, seja P_{L_H} o operador projeção ortogonal de $[L^2(\Omega)]^d$ em L_H . Então, em (3.42) tem-se $\mathbf{q}_H = P_{L_H} \nabla u_h$ e, como consequência da decomposição e ortogonalidade em $L^2(\Omega)$, tem-se

$$\begin{aligned}
(\mathbf{q}_H - \nabla u_h, \mathbf{l}_H) &= (P_{L_H} \nabla u_h - \nabla u_h, \mathbf{l}_H) \\
&= (P_{L_H} \nabla u_h - (P_{L_H} \nabla u_h + (I - P_{L_H}) \nabla u_h), \mathbf{l}_H) \\
&= ((I - P_{L_H}) \nabla u_h, \mathbf{l}_H) \\
&= 0,
\end{aligned}$$

onde I é o operador identidade. Por outro lado, o primeiro termo da equação (3.41) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
(\epsilon + \alpha)(\nabla u_h, \nabla v_h) &= \epsilon(\nabla u_h, \nabla v_h) + \alpha(P_{L_H} \nabla u_h, \nabla v_h) + \alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, \nabla v_h) \\
&= \epsilon(\nabla u_h, \nabla v_h) + \alpha(\mathbf{q}_H, \nabla v_h) + \alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, P_{L_H} \nabla v_h) + \\
&\quad + \alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, (I - P_{L_H}) \nabla v_h) \\
&= \epsilon(\nabla u_h, \nabla v_h) + \alpha(\mathbf{q}_H, \nabla v_h) + \\
&\quad + \alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, (I - P_{L_H}) \nabla v_h).
\end{aligned}$$

Então, substituindo este resultado em (3.41), obtém-se o seguinte problema: achar $u_h \in X_h$ tal que

$$B(u_h, v_h) + \alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, (I - P_{L_H}) \nabla v_h) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h. \quad (3.43)$$

Pode-se observar que esta formulação adiciona à formulação de Galerkin o termo

$$\alpha((I - P_{L_H}) \nabla u_h, (I - P_{L_H}) \nabla v_h),$$

similar, mas não equivalente, ao termo estabilizante do método SGS, cujo termo

estabilizante é

$$\alpha(\nabla(I - P_{X_H})u_h, \nabla(I - P_{X_H})v_h),$$

onde $\alpha = c_b h$ e o operador P_{X_H} , estável em $L^2(\Omega)$, é definido por $P_{X_H} : X_h \longrightarrow X_H$. Se, em particular, X_H é um espaço conforme linear, X_h^H é o espaço gerado por bolhas cúbicas com um grau de liberdade por triângulo, $X_h = X_H \oplus X_h^H$ e $L_H = \nabla X_H$, então (3.43) reproduz o método SGS.

3.3 Estudos Numéricos

Nesta seção são realizados alguns estudos numéricos com o objetivo de mostrar o comportamento dos métodos SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$ e SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ em relação às suas dependências com a escolha do parâmetro c_b . No método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$, com exceção do Exemplo 1, a solução aproximada analisada é aquela associada à macro escala, a saber, u_H . Comparações entre o SGS, Galerkin e o SUPG também são realizadas. Vale ressaltar que o método SGS foi implementado utilizando o operador submalha definido por (3.25), ou seja,

$$b_h(u_h^H, v_h^H) = c_b \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} \sqrt{|T_h|} \int_{T_h} \nabla u_h^H \cdot \nabla v_h^H, \quad (3.44)$$

onde $|T_h|$ representa a área do elemento T_h .

A função bolha utilizada no cenário $\mathbb{P}_1/bolha$ é definida por

$$b(x, y) = 27N_1(x, y)N_2(x, y)N_3(x, y),$$

onde $N_i(\cdot, \cdot)$ representa a função de forma local do método de Galerkin associada ao ponto nodal i , para $i = 1, 2, 3$. O domínio computacional utilizado é $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ e $\mathcal{T}_H$ é uma malha estruturada com 20 subdivisões em cada direção (Figura 3.6).

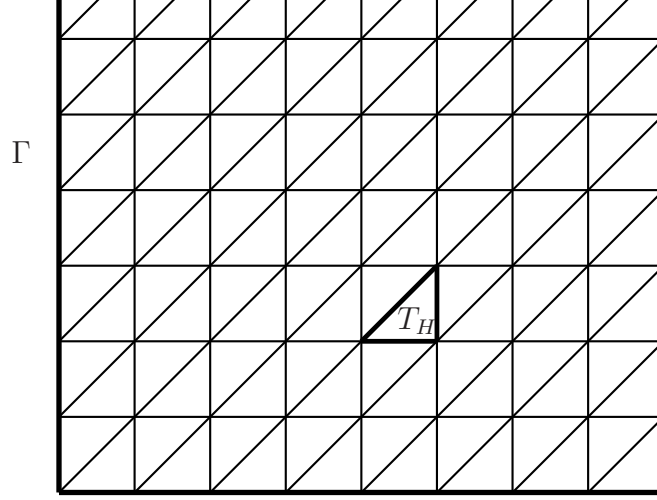


Figura 3.6: Representação da malha $\mathcal{T}_H$ com 8 subdivisões em cada direção.

3.3.1 Exemplo 1 - Problema de Convecção-Difusão

Este exemplo refere-se à um problema bidimensional de convecção-difusão com convecção dominante. Os valores dos coeficientes da equação são dados por:

$$\epsilon = 10^{-12}; \quad \beta = (\beta_x, \beta_y), \text{ com } \beta_x = \beta_y = 1 \text{ e } f = 0.$$

As condições de contorno são:

$$u(0, y) = u(1, y) = u(x, 1) = 0$$

e

$$u(x, 0) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0,3; \\ 1, & \text{se } x > 0,3. \end{cases}$$

Essas condições resultam em uma solução com uma camada limite no interior do domínio Ω , na direção do campo de velocidades que se inicia em $(0,3,0)$ e em uma camada externa exponencial em $x = 1$.

A solução obtida com o SUPG é apresentada na Figura 3.7. Note que, a solução aproximada apresenta algumas oscilações na vizinhança da camada

externa. A camada interna é bem representada pois o campo de velocidade está alinhado com a malha.

Na Figura 3.8 são apresentadas as soluções do método SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$ para vários valores de c_b . A solução aproximada com $c_b = 0$ é bastante difusiva. À medida que o valor de c_b cresce, a qualidade da solução melhora. A faixa de variação ótima para c_b se encontra aproximadamente entre o intervalo $(0,02,0,03)$. Note que a solução aproximada usando $c_b = 0,02$ é livre de oscilações, mas apresenta um comportamento um pouco difusivo na camada externa em $x = 1$. Para $c_b \geq 0,03$ a solução aproximada se deteriora cada vez mais, proporcionalmente ao crescimento de c_b , conforme mostrado nas soluções numéricas utilizando $c_b = 0,1$ e $c_b = 1,0$.

As soluções u_h obtidas pelo método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ são apresentadas na Figura 3.9. Quando c_b se aproxima de zero, o comportamento do método se assemelha ao método de Galerkin. Desta forma, a solução aproximada apresenta oscilações em todo domínio ($c_b = 0,002$ e $c_b = 0,1$). Para $c_b = 0,4$ e $c_b = 1$, a solução u_h apresenta oscilações nas camadas interna e externa. À medida que c_b cresce essas oscilações se expandem para todo o domínio ($c_b = 2,5$ e $c_b = 5$).

As soluções $u_H = P_{X_H}u_h$ e $u_h^H = (I - P_{X_H})u_h$ obtidas pelo método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ são mostradas nas Figuras 3.10 e 3.11, respectivamente. A maior parte das oscilações da solução u_h provém da solução u_h^H , associada à micro escala. Quando $c_b = 0,002$ a solução u_H é totalmente espúria, combinando um comportamento oscilatório, proveniente de u_h , e difusivo ao mesmo tempo. Para $c_b = 0,1$, a solução u_H é bastante difusiva na camada externa e oscila na camada interna. Neste caso, a maior parte das oscilações estão localizadas em u_h^H . Quando $c_b = 0,4$, a solução u_H apresenta apenas uma pequena difusão nas camadas interna e externa. À medida que c_b cresce a partir do valor $0,4$ a solução aproximada torna-se oscilatória ($c_b = 1$, $c_b = 2,5$ e $c_b = 5$).

Observando as soluções u_H e u_h^H do método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$, conjectura-se que c_b deve ser uma medida local e não global, como proposto no método SGS. Isto significa que estabelecer o valor de c_b a nível de elemento pode ser uma boa

estratégia para a obtenção de soluções mais precisas. É sob esta ótica que o método NSGS, apresentado no próximo capítulo, foi desenvolvido.

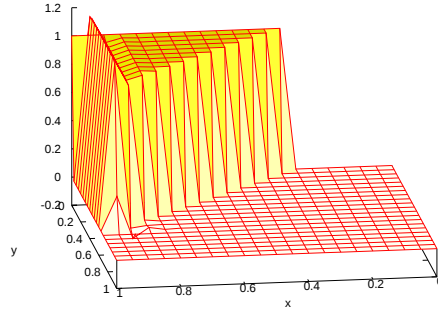


Figura 3.7: Exemplo 1 - solução usando o método SUPG.

3.3.2 Exemplo 2 - Problema de Convecção-Difusão com Termo de Fonte

Este exemplo refere-se a um problema de convecção-difusão, com convecção dominante e com termo de fonte constante. Os valores dos coeficientes da equação são dados por:

$$\epsilon = 10^{-9}; \quad \boldsymbol{\beta} = (\beta_x, \beta_y), \text{ com } \beta_x = 1 \text{ e } \beta_y = 0 \text{ e } f = 1.$$

As condições de contorno são homogêneas, isto é,

$$u(x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \Gamma.$$

A solução exata desse problema é dada por um plano inclinado a 45° , possuindo camadas parabólicas em $y = 0$ e $y = 1$ e uma camada exponencial em $x = 1$.

A solução obtida pelo método SUPG (Figura 3.12), apresenta oscilações na vizinhança das camadas externas em $y = 0$ e $y = 1$. A camada em $x = 1$ é bem

representada, uma vez que o campo de velocidade está alinhado com a direção do gradiente de solução.

Os métodos SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$ e SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ não foram capazes de representar bem as camadas externas em $y = 0$ e $y = 1$. No método SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$, quando $c_b = 0$ a solução é extremamente difusiva, enquanto que com $c_b = 0,01$ oscilações aparecem nas camadas parabólicas e um comportamento bastante difusivo é apresentado na camada em $x = 1$. À medida que c_b cresce as oscilações se espalham para fora da camada, poluindo a solução em todo o domínio ($c_b = 0,1$ e $c_b = 0,5$). No método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$, quando $c_b = 0,1$, a solução é bastante difusiva em $x = 1$ e oscilatória em $y = 0$ e $y = 1$. Para $c_b = 0,5$ a solução aproximada não representa de forma adequada as camadas externas. Para os outros valores de c_b ($c_b = 1$ e $c_b = 2$) um comportamento oscilatório é observado nas respectivas soluções aproximadas.

3.3.3 Exemplo 3 - Problema de Difusão-Reação

Neste exemplo é simulado um problema de difusão-reação com reação dominante. Os dados do problema são:

$$\epsilon = 10^{-12}; \quad \sigma = 1 \quad \text{e} \quad f = 0,5.$$

As condições de contorno são dadas por:

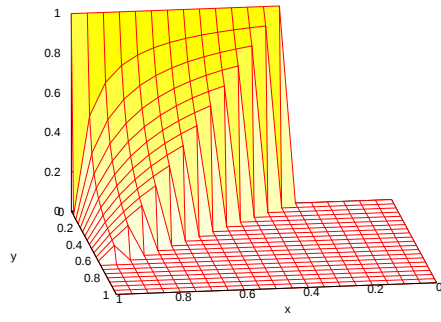
$$u(x, 0) = 0 \text{ para } x < 1, u(0, y) = 0 \text{ para } y < 1 \text{ e } u(x, 1) = u(1, y) = 1.$$

A solução exata deste problema é uma função constante igual a 0,5 no domínio Ω , com camadas limites em toda fronteira Γ .

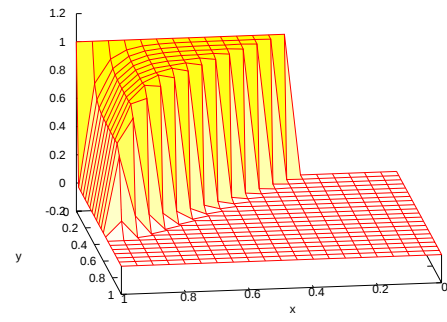
A solução obtida pelo método de Galerkin é apresentada na Figura 3.15. Como este problema é predominantemente reativo, sem convecção, o método de Galerkin apresenta oscilações somente na vizinhança da camada externa.

A Figura 3.16 apresenta as soluções obtidas pelos métodos SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$,

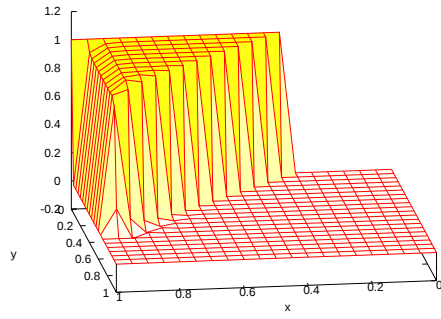
para vários valores do coeficiente c_b . Observe que o método tem um comportamento análogo ao método de Galerkin quando c_b é da ordem de 1. As oscilações que aparecem na camada limite externa diminuem bastante quando $c_b = 10^{-4}$ ou $c_b = 10^{-5}$. Isto está de acordo com as características do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$ descrito na Seção 3.1.3.3. As soluções u_H obtidas pelo método SGS- $\mathbb{P}_1/dois-níveis$ são mostradas na Figura 3.17. Para $c_b = 0,1$ e $c_b = 1$, as soluções se assemelham às soluções obtidas pelos métodos de Galerkin e SGS- $\mathbb{P}_1/bolha$. As oscilações que aparecem na camada limite externa são reduzidas quando $c_b = 0,05$ ou $c_b = 0,01$.



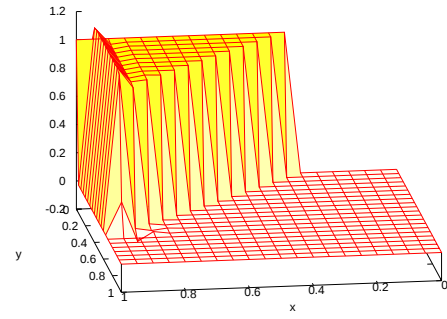
(a) $c_b = 0$



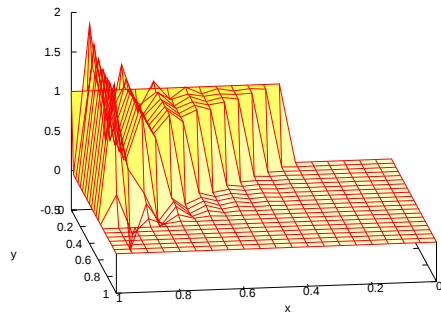
(b) $c_b = 0,01$



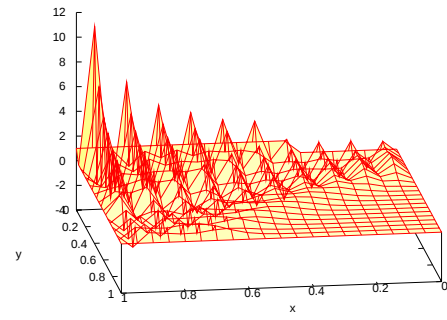
(c) $c_b = 0,02$



(d) $c_b = 0,03$

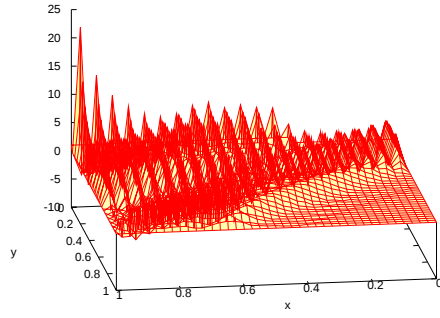


(e) $c_b = 0,1$

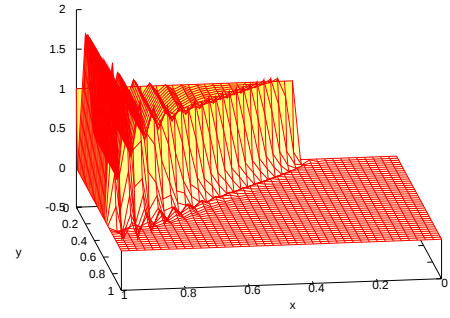


(f) $c_b = 1$

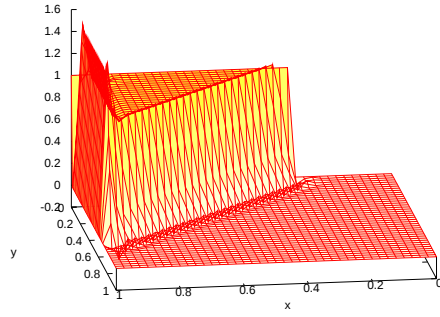
Figura 3.8: Exemplo 1 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*bolha* para vários valores de c_b .



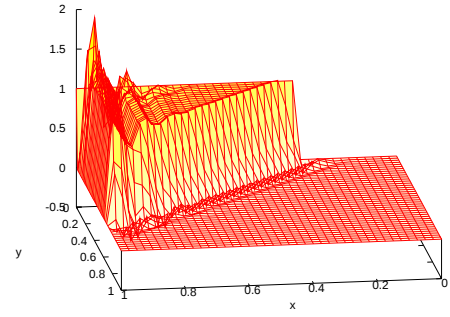
(a) $c_b = 0,002$



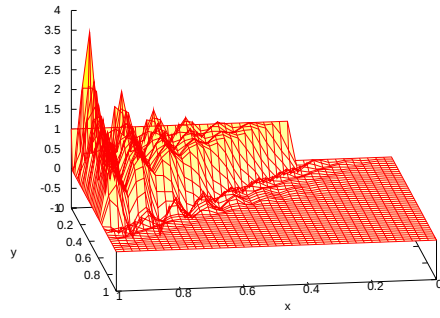
(b) $c_b = 0,1$



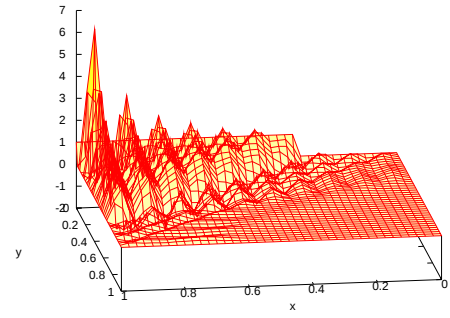
(c) $c_b = 0,4$



(d) $c_b = 1$

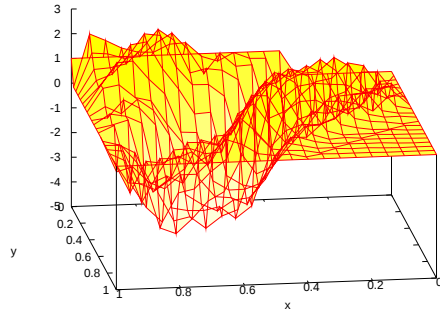


(e) $c_b = 2,5$

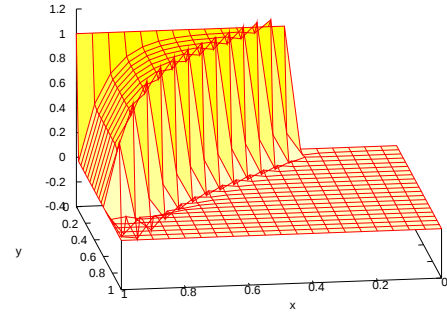


(f) $c_b = 5$

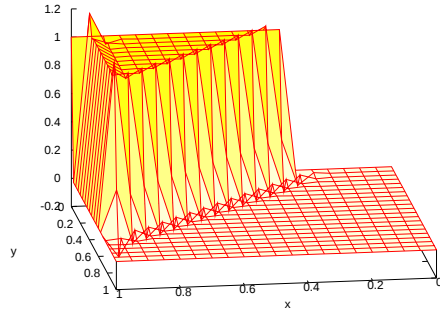
Figura 3.9: Exemplo 1 - soluções u_h usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*dois-níveis* para vários valores de c_b .



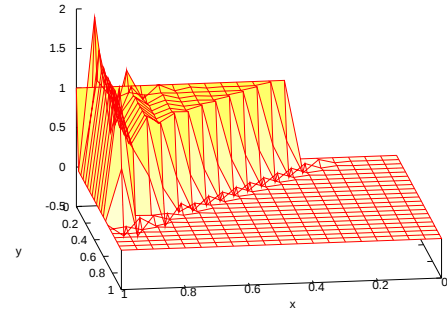
(a) $c_b = 0,002$



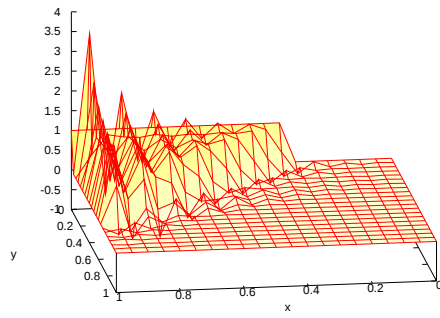
(b) $c_b = 0,1$



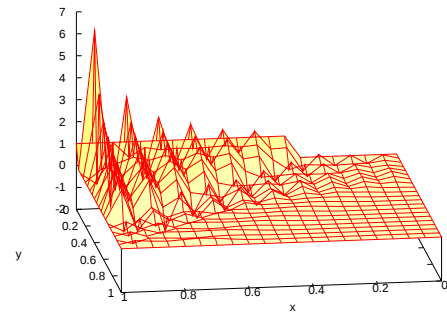
(c) $c_b = 0,4$



(d) $c_b = 1$

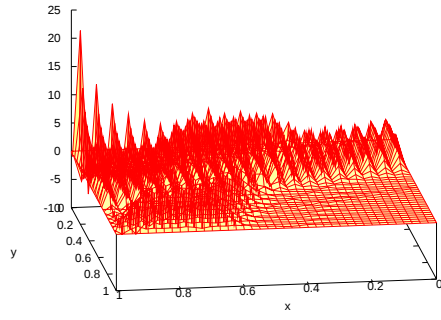


(e) $c_b = 2,5$

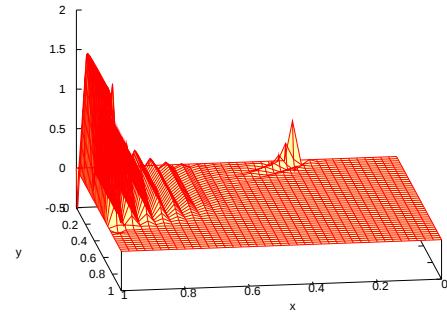


(f) $c_b = 5$

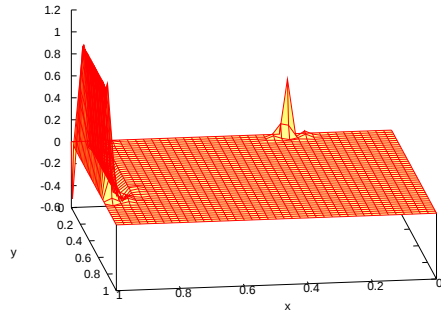
Figura 3.10: Exemplo 1 - soluções $u_H = P_{X_H} u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$ para vários valores de c_b .



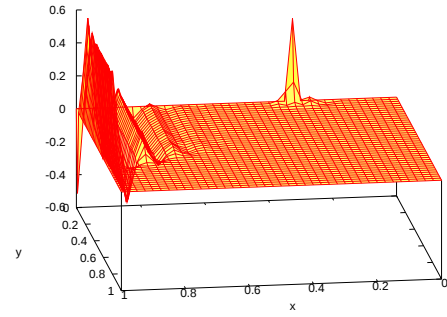
(a) $c_b = 0,002$



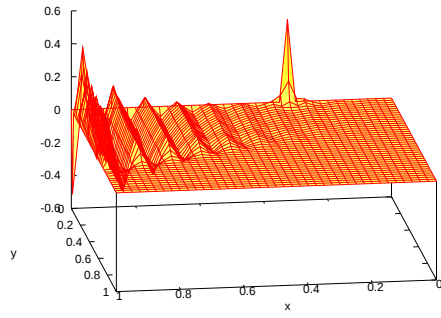
(b) $c_b = 0,1$



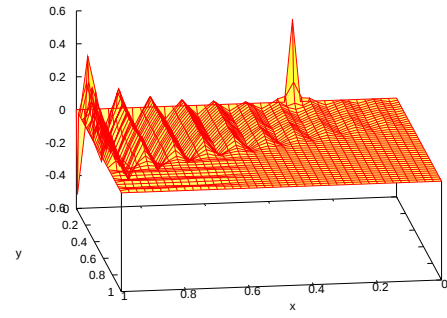
(c) $c_b = 0,4$



(d) $c_b = 1$



(e) $c_b = 2,5$



(f) $c_b = 5$

Figura 3.11: Exemplo 1 - soluções $u_h^H = (I - P_{X_H})u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*dois-níveis* para vários valores de c_b .

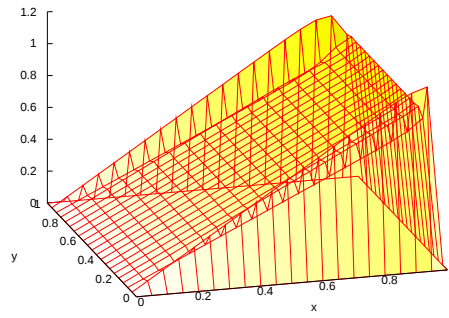
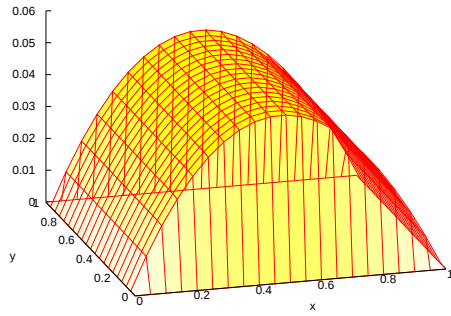
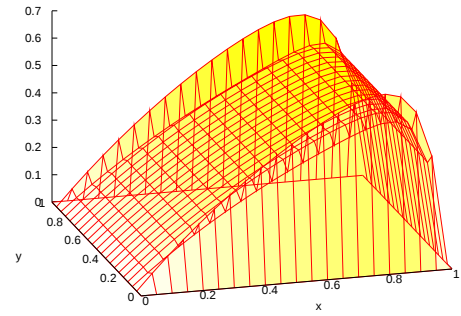


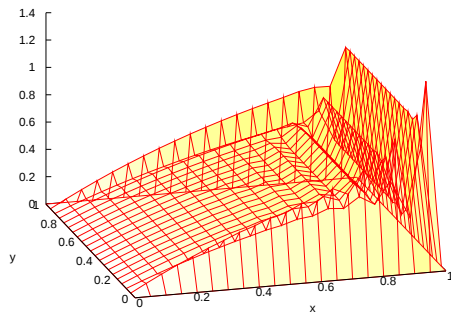
Figura 3.12: Exemplo 2 - solução usando o método SUPG.



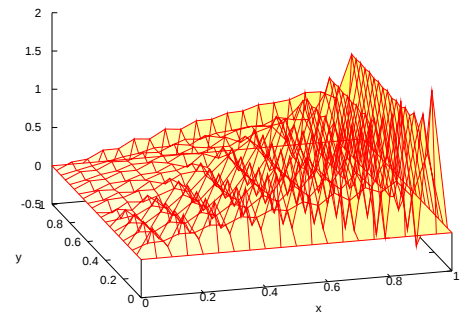
(a) $c_b = 0$



(b) $c_b = 0,01$

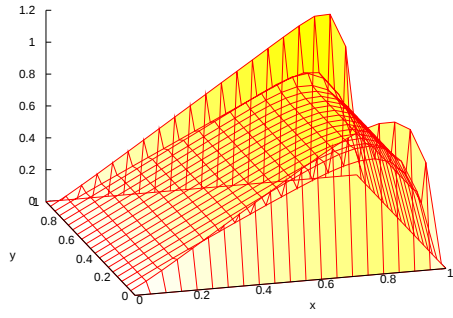


(c) $c_b = 0,1$

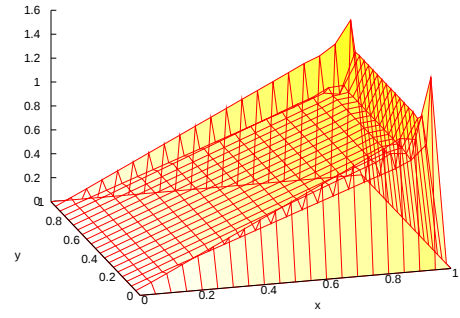


(d) $c_b = 0,5$

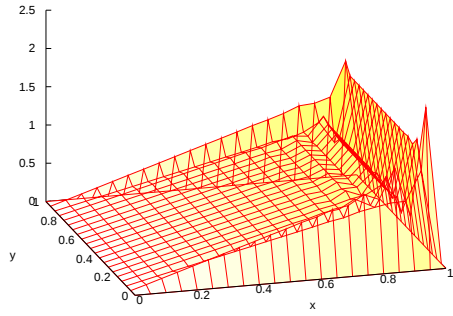
Figura 3.13: Exemplo 2 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*bolha* para vários valores de c_b .



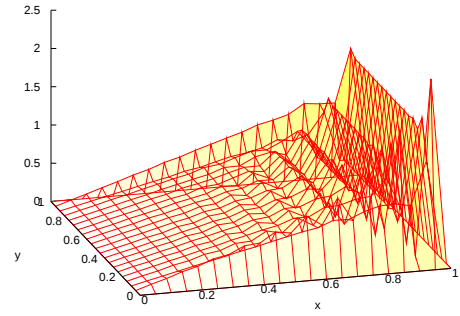
(a) $c_b = 0, 1$



(b) $c_b = 0, 5$



(c) $c_b = 1$



(d) $c_b = 2$

Figura 3.14: Exemplo 2 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*dois-níveis* para vários valores de c_b .

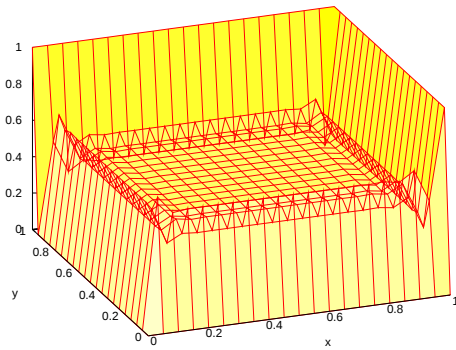
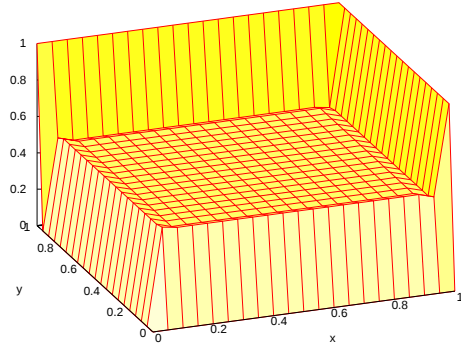
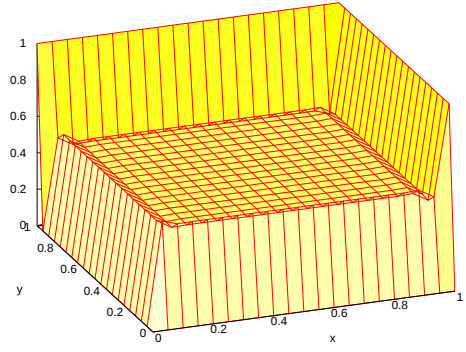


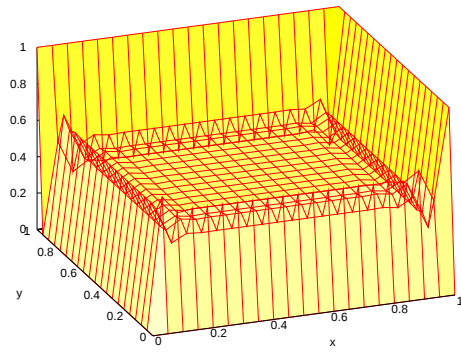
Figura 3.15: Exemplo 3 - solução usando o método de Galerkin.



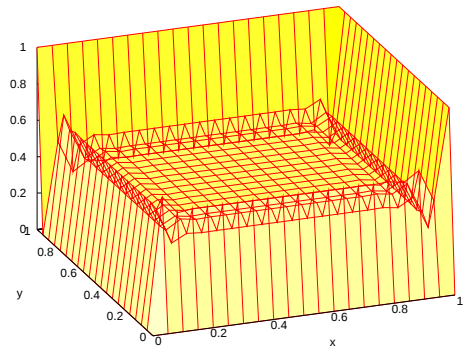
(a) $c_b = 10^{-5}$



(b) $c_b = 10^{-4}$

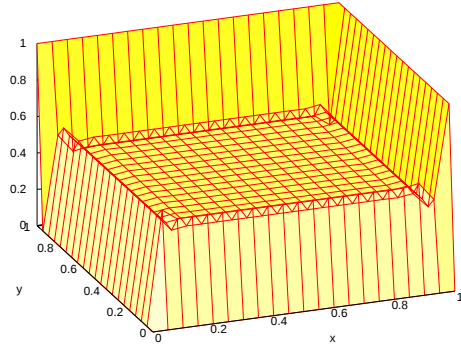


(c) $c_b = 0, 1$

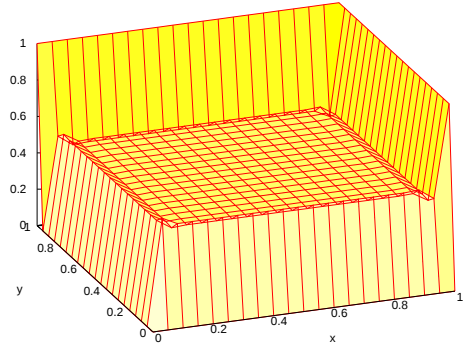


(d) $c_b = 1$

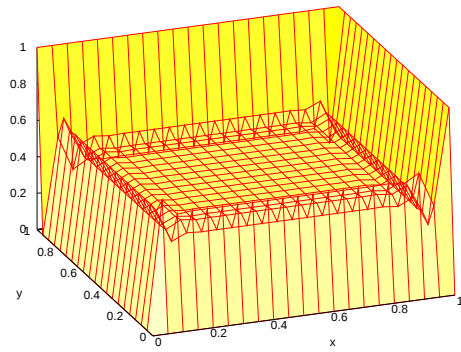
Figura 3.16: Exemplo 3 - soluções usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*bolha* para vários valores de c_b .



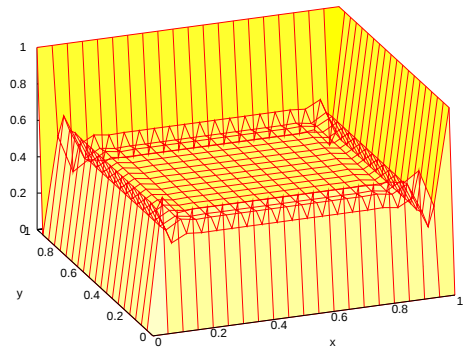
(a) $c_b = 0,01$



(b) $c_b = 0,05$



(c) $c_b = 0,1$



(d) $c_b = 1$

Figura 3.17: Exemplo 3 - soluções $u_H = P_{X_H} u_h$ usando o método SGS- $\mathbb{P}_1$ /*dois-níveis* para vários valores de c_b .

Capítulo 4

Métodos Não Lineares de Estabilização Submalha

Neste capítulo é apresentado o método de estabilização submalha não linear, denotado por NSGS (Nonlinear Subgrid Scale Method), para problemas lineares e estacionários de convecção-difusão-reação, proposto neste trabalho. Este método, baseado no conceito de estabilização submalha estabelecido em Guermond (1999), ajusta automaticamente a viscosidade artificial a partir do resíduo da solução resolvida. Diferencia-se dos métodos propostos na literatura em dois aspectos principais. Em primeiro lugar, a formulação variacional é construída adicionando ao método de Galerkin apenas um operador submalha não-linear. Tal abordagem não segue o paradigma usual de combinar efeitos estabilizadores de dois operadores adicionais, um linear e outro não-linear. No conceito dos métodos estabilizados, conforme apresentado no Capítulo 2, a estabilização linear atua sobre o caráter hiperbólico da equação, evitando o espalhamento das oscilações causadas pela falta de coercividade do operador original, enquanto que a estabilização não linear atua localmente, regularizando as instabilidades locais remanescentes. Estes comportamentos podem explicar o porquê dos operadores lineares e não-lineares estarem juntos para a obtenção de métodos totalmente estáveis, prática também adotada na concepção de grande parte dos métodos multiescala. Entretanto, como será apresentado neste capítulo, ela não é necessária para os problemas tratados. Em segundo lugar, conseguiu-se desenvolver um método totalmente independente

de parâmetros. A partir da decomposição em duas escalas do campo de velocidades, a viscosidade artificial submalha é automaticamente ajustada pela qualidade da solução resolvida (resíduo), sem a necessidade de qualquer ajuste adicional. Em outras palavras, a estabilidade e precisão da solução obtida deve-se à escolha apropriada, e localizada, da difusão artificial submalha.

Os métodos numéricos multiescala não lineares presentes na literatura usualmente baseiam-se no paradigma mencionado, no qual as oscilações locais indesejáveis são evitadas com a utilização de métodos de captura de descontinuidades submalhas (Guermond, 2001; Ern e Guermond, 2004; Guermond et al., 2004a) (ver Seção 4.1). Na abordagem descrita em Guermond (2001), um operador não linear é adicionado ao método de estabilização submalha linear SGS. Este operador atua sobre a escala resolvida e é ajustado pela solução não resolvida ponderada por um novo parâmetro *livre*. O método não linear construído desta forma passa, então, a requerer a definição de dois parâmetros, aumentando substancialmente sua complexidade. No contexto dos métodos multiescala com captura de descontinuidades, destacam-se também os trabalhos de Juanes e Patzek (2002), para problemas de escoamento em meios porosos com convecção dominante, e Scovazzi (2004), para problemas de hidrodinâmica Lagrangeana. Uma outra classe de modelos não lineares de viscosidade submalha para resolver o problema de transporte é baseada nos métodos p -Laplacianos, utilizados em LES (*Large Eddy Simulation*). Dentre esses métodos, destaca-se o modelo não linear de viscosidade artificial limitada, desenvolvido por Iliescu (2004).

A pesquisa desenvolvida nesta tese foi motivada por um aspecto importante do método SGS: as oscilações espúrias localizadas podem diminuir substancialmente se o coeficiente c_b for escolhido de forma adequada (Santos e Almeida, 2007a), conforme mostrado nos experimentos numéricos do Capítulo 3. Além disso, tais experimentos indicaram que este coeficiente deve ser introduzido de forma local. Isso significa que existe uma dependência do parâmetro de estabilização c_b em relação a solução do problema. Surge então um questão crucial:

como obter de forma adequada o valor do coeficiente c_b ?

Denotando por L e T as escalas de comprimento e tempo associadas à micro escala, a compatibilidade dimensional entre $b_h(\cdot, \cdot)$ e $B(\cdot, \cdot)$ em (3.44) e (2.13), respectivamente, implica que o coeficiente c_b tem dimensão de velocidade ($[c_b] = LT^{-1}$) e inverso da velocidade ($[c_b] = L^{-1}T$) para os operadores lineares submalha (3.25) e (3.26), respectivamente. Assim, para o operador (3.25), a viscosidade artificial submalha $c_b meas(T_h)^{1/2}$ deve ser a menor possível de modo que seja capaz de dissipar a energia contida nas escalas não resolvidas. Para este fim, a representação do campo de velocidades associado às pequenas escalas é uma questão primordial. É sob esse panorama que é desenvolvido o método de estabilização submalha não linear NSGS. Em sua concepção, a decomposição multiescala é estendida ao campo de velocidades. Consequentemente, ter-se-ão um campo de velocidades associado às escalas macro (resolvida) e outro associado às escalas micro (submalha), através do qual obtém-se a representação da energia cinética associada às escalas não resolvidas. O campo de velocidades submalha é determinado de modo que o resíduo da escala resolvida, associado ao campo de velocidades da escala resolvida, seja nulo. À esta condição sobre a escala resolvida agrega-se a hipótese de energia cinética mínima para a escala não resolvida. Estas hipóteses podem ser vistas como contrapartidas multiescala daquelas estabelecidas no método estabilizado de captura de descontinuidades CAU (do Carmo e Galeão, 1986; do Carmo, 1988; Galeão e do Carmo, 1988) para a determinação do campo aproximado de velocidades *upwind*. Como resultado, o campo de velocidades submalha é obtido em função da solução aproximada associada à macro escala. Este procedimento conduz a um modelo não linear submalha (método NSGS) que adiciona difusão artificial somente nas escalas não resolvidas.

Assim, o método NSGS é um modelo não linear, composto apenas pelo operador linear associado ao método de Galerkin e um operador adicional não linear submalha, que não depende de nenhum parâmetro de estabilização. Nesta tese, este método é apresentado no contexto do cenário de discretização $\mathbb{P}_1/$ *dois-*

níveis, conforme será explicado posteriormente. Este método conduz à soluções globalmente estáveis e é capaz de evitar as oscilações localizadas próximas às camadas limites. Ele pode ser considerado um método auto adaptativo, pois a quantidade de viscosidade submalha é automaticamente determinada em função da solução aproximada associada à macro escala.

Cabe ainda mencionar que a imposição forte das condições de contorno de Dirichlet na fronteira de saída em problemas singularmente perturbados pode originar oscilações espúrias mesmo para métodos com boas propriedades de estabilização (Bazilevs e Hughes, 2007). Este comportamento foi observado em algumas situações de aplicação do método NSGS. Em (Burman, 2005; Bazilevs e Hughes, 2007) é apresentada uma metodologia para estabilização de camadas limites externas através da imposição fraca das condições de contorno de Dirichlet, prática utilizada nos métodos de Galerkin Descontínuo. Apesar das camadas externas serem bem representadas através deste procedimento, as instabilidades localizadas na vizinhança de camadas internas permanecem na solução aproximada (Santos e Almeida, 2007d). Assim, esta abordagem é incorporada ao método NSGS, conduzindo à uma metodologia eficiente capaz de estabilizar de forma precisa localmente e globalmente a solução aproximada do problema de convecção-difusão-reação.

4.1 Estabilização Submalha + Métodos de Captura de Descontinuidades

De forma análoga aos métodos estabilizados, o método SGS não se comporta de forma eficaz quando a solução do problema exhibe gradientes altos se o parâmetro livre c_b não for escolhido de forma apropriada. Oscilações espúrias são apresentadas na solução aproximada nas vizinhanças das regiões de gradientes elevados. Guermond (2001), Ern e Guermond (2004) e Guermond et al. (2004a, 2006) atribuíram estas oscilações à incapacidade do método SGS em representar corretamente a solução e não à escolha inapropriada de c_b . Assim, adotando a

mesma estratégia dos métodos estabilizados, é proposta a inclusão de mais um termo ao modelo (3.29) da forma de um operador de captura de descontinuidades não linear.

O termo proposto em (Guermond, 2001) é definido como:

$$c_h(u_h^H, u_h, v_h) = c_{cd} \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} meas(T_h)^{1/2} \int_{T_h} |u_h^H| (\nabla u_h \cdot \nabla v_h) d\Omega. \quad (4.1)$$

O termo proposto em (Ern e Guermond, 2004; Guermond et al., 2006) é

$$c_h(u_h^H, u_h, v_h) = c_{cd} \sum_{T_h \in \mathcal{T}_H} meas(T_h)^{1/2} \frac{\|\nabla u_h^H\|_{0,T_h}}{\|\nabla u_h\|_{0,T_h}} \int_{T_h} \nabla u_h \cdot \nabla v_h d\Omega \quad (4.2)$$

enquanto que o operador

$$c_h(u_h^H, u_h, v_h) = c_{cd} \sum_{T_h \in \mathcal{T}_h} meas(T_h)^{1/2} \int_{T_h} \frac{|\nabla u_h^H|}{|\nabla u_h|} \nabla u_h \cdot \nabla v_h d\Omega \quad (4.3)$$

foi proposto em (Guermond et al., 2004a). A introdução dos termos (4.2) e (4.3) é justificada pelo fato de que, nas regiões de gradientes altos, $\nabla u_h^H = \nabla(u_h - P_{X_H} u_h)$ é da mesma ordem de ∇u_h e, desta forma, a viscosidade adicionada é $O(H)$. Nenhuma justificativa é dada para o termo (4.1) além do fato de que o termo de captura deve ser ajustado pela solução das escalas não resolvidas u_h^H . Deve-se notar que todos estes operadores introduzem na solução, de forma não consistente, uma dissipação artificial isotrópica que é ponderada de alguma forma pela solução submalha.

O modelo resultante é dado por:

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in X_h \text{ tal que} \\ B(u_h, v_h) + b_h(u_h^H, v_h^H) + c_h(u_h^H, u_h, v_h) = (f, v_h)_L, \quad \forall v_h \in X_h. \end{cases} \quad (4.4)$$

A determinação adequada dos parâmetros c_b e c_{cd} é uma questão importantíssima em termos práticos e, assim como sua contrapartida linear, não existe nenhum

procedimento para determinar o coeficiente c_{cd} . Vale ressaltar também que não se conhece na literatura nenhuma análise numérica do método (4.4).

No contexto dos métodos multiescala com captura de descontinuidades, destacam-se também os trabalhos de Juanes e Patzek (2002) e Juanes (2003), para problemas de escoamento em meios porosos com convecção dominante. Nestes trabalhos foi proposto um novo operador de captura de descontinuidades para uma equação não linear de convecção-difusão, o qual tem a mesma estrutura do operador de captura usual. É definido pela expressão (2.23) com

$$D_{cd}(u_H; u_h^H) = C_{cd} \frac{|u_h^H|}{U_{cd}} h |\beta|,$$

onde U_{cd} é um valor característico da solução próximo às regiões de forte gradiente de modo que ∇u_H é aproximado por U_{cd}/h e C_{cd} é um coeficiente constante. Neste modelo, a difusão numérica adicionada será significativa somente onde o valor absoluto da solução associada às escalas submalhas e a convecção são importantes (Juanes e Patzek, 2002).

4.2 Método Não Linear de Estabilização Submalha - NSGS

O ponto chave da concepção do método NSGS é a decomposição multiescala em dois níveis do campo de velocidade, isto é, (Santos e Almeida, 2007a,c)

$$\beta = \beta_H + \beta_h^H,$$

onde β_H e β_h^H são os campos de velocidades associados às escalas resolvida (macro) e submalha (micro), respectivamente. Para simplificar a notação, o elemento macro será representado por T , ao invés de T_H .

Uma vez determinada a velocidade β_h^H , é possível determinar a energia cinética associada às micro escalas, dada por

$$E_c = \frac{1}{2} |\beta_h^H|^2,$$

onde $|\cdot|$ denota a norma Euclidiana. Se o comprimento característico da escala submalha é denotado por $\mu(h)$, é possível determinar a escala de tempo na qual os efeitos inerciais estão ocorrendo como $\mu(h)/|\beta_h^H|$. Assim, a quantidade de viscosidade artificial submalha necessária para dissipar a energia cinética E_c pode ser definida como

$$\xi_c(u_H) = \frac{1}{2}\mu(h) |\beta_h^H|. \quad (4.5)$$

Para determinar β_h^H são agregadas hipóteses tendo como inspiração o método de captura de descontinuidades CAU (do Carmo e Galeão, 1986; Galeão e do Carmo, 1988). A primeira corresponde a exigir que a equação de transporte na escala resolvida (usando β_H) seja satisfeita em cada elemento $T \in \mathcal{T}_H$. Além disso, dentre todos os possíveis campos de velocidade submalha, β_h^H está associado àquele que conduz à energia cinética mínima. Estas condições conduzem ao seguinte problema de otimização:

$$\begin{cases} \text{minimizar} & E_c = \frac{1}{2} |\beta_h^H|^2 \\ \text{sujeito a} & \\ -\epsilon \Delta u_H + \beta_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H = f & \text{em } T \in \mathcal{T}_H. \end{cases} \quad (4.6)$$

A solução de (4.6) é equivalente a determinar o par (β_h^H, λ) que torna estacionário o funcional:

$$\mathbf{J}(\beta_h^H, \lambda) = \int_T \left[\frac{1}{2} |\beta_h^H|^2 + \lambda (-\epsilon \Delta u_H + \beta_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f) \right] d\Omega. \quad (4.7)$$

Assume-se que as funções β_h^H , β_H e u_H possuem regularidade suficiente em cada $T \in \mathcal{T}_H$ de forma que o funcional $\mathbf{J}(\beta_h^H, \lambda)$ tenha sentido. Da condição de estacionaridade de $\mathbf{J}(\beta_h^H, \lambda)$ (ver Apêndice 7), obtém-se:

$$\beta_h^H = \begin{cases} \frac{R(u_H)}{|\nabla u_H|^2} \nabla u_H, & \text{se } |\nabla u_H| \neq 0; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.8)$$

onde

$$R(u_H) = -\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\nabla} u_H + \sigma u_H - f \quad (4.9)$$

é o resíduo da solução aproximada u_H em T .

Para o cenário $\mathbb{P}_1/\textit{dois-níveis}$ (Figura 3.4), pode-se definir a escala de comprimento característico submalha como $\mu(h) = h/2$, enquanto que para o cenário $\mathbb{P}_1/\textit{bolha}$ (Figura 3.2), não está claro qual deva ser o valor adequado para a representação de $\mu(h)$. Nesta tese, o método NSGS será apresentado no contexto $\mathbb{P}_1/\textit{dois-níveis}$. Com a representação da escala de tempo como $\frac{h}{2|\boldsymbol{\beta}_h^H|}$, a quantidade de viscosidade submalha necessária para dissipar a energia cinética E_c é dada por

$$\xi_c(u_H) = \frac{1}{4} h |\boldsymbol{\beta}_h^H|. \quad (4.10)$$

Assim, o operador de regularização não linear

$$D : X_H \times X_h^H \times X_h^H \longrightarrow \mathbb{R},$$

é definido como

$$D(u_H, u_h^H, v_h^H) = \int_{T \in \mathcal{T}_H} \xi_c(u_H) \boldsymbol{\nabla} u_h^H \cdot \boldsymbol{\nabla} v_h^H d\Omega. \quad (4.11)$$

A partir destas definições, o método de viscosidade submalha não linear NSGS consiste em:

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in X_h \text{ tal que} \\ B(u_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, u_h^H, v_h^H) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h. \end{cases} \quad (4.12)$$

A formulação não linear (4.12) ajusta, automaticamente, a viscosidade artificial submalha sem necessidade de introdução de qualquer parâmetro livre. A difusão artificial é adicionada em função do resíduo da solução macro u_H e, além disso, ela não é constante para todos os elementos da malha, como ocorre

no método SGS. Observe que para $\xi_c(u_H) = c_b h$, com c_b constante, obtém-se o método SGS. No caso em que $\nabla u_H = \mathbf{0}$, tem-se $\xi_c(u_H) = 0$, ou seja, recupera-se a formulação de Galerkin. Um procedimento iterativo para a solução do problema (4.12) é apresentado na Seção 4.3. A existência e unicidade de solução para o problema (4.12), bem como uma estimativa de erro *a priori*, são apresentadas no próximo capítulo.

Observação 4.2.1. *A primeira versão do método NSGS foi construída com o objetivo de recuperar o método SGS quando $\nabla u_H = 0$, mantendo-se nestes casos a estabilização linear submalha adicional. Esta formulação, descrita em (Santos e Almeida, 2007a) para problemas de convecção-difusão, é dada por:*

$$\begin{cases} \text{Achar } u_h \in X_h \text{ tal que} \\ B(u_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D_1(u_H, u_h^H, v_h^H) = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \end{cases} \quad (4.13)$$

com

$$D_1(u_H, u_h^H, v_h^H) = \begin{cases} \int_{T \in \mathcal{T}_H} \xi_c(u_H) \nabla u_h^H \cdot \nabla v_h^H d\Omega, & \text{se } \nabla u_H \neq \mathbf{0}; \\ \mu(h) \int_{T \in \mathcal{T}_H} \nabla u_h^H \cdot \nabla v_h^H d\Omega, & \text{se } \nabla u_H = \mathbf{0}, \end{cases} \quad (4.14)$$

com $\mu(h) = \sqrt{|T_h|}$, onde $|T_h|$ é a área do elemento $T_h \in \mathcal{T}$.

Como será apresentado posteriormente, esta abordagem conduziu a soluções extremamente difusivas em algumas situações.

□

4.3 Processo Iterativo de Solução

As formulações não-lineares (4.12) e (4.13) são resolvidas utilizando um procedimento iterativo simples, com solução inicial obtida através do método SGS (com $c_b = 1$) e $\xi_c(u_H)$ atrasada uma iteração. Cabe ressaltar que a solução final do processo iterativo independe do valor de c_b utilizado para obter a solução inicial.

O processo iterativo de solução é definido como: Dado u_h^{n-1} , achar u_h^n satisfazendo

$$B(u_h^n, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_h^{H;n} \cdot \nabla v_h^H d\Omega = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h.$$

Este algoritmo conduz à um sistema linear da forma $Ax = b$, onde A é uma matriz não-simétrica. A convergência é avaliada em todos os graus de liberdade da solução resolvida a menos de uma tolerância prescrita (tol). Para a primeira versão do método, problema (4.13), observou-se que a taxa de convergência pode decrescer com o aumento da distância entre $\mu(h)$ e $\xi_c(u_H)$. Para contornar este inconveniente, um procedimento para melhorar a convergência do processo iterativo é apresentado no Algoritmo 1 (Santos e Almeida, 2007a). Para o método NSGS (4.12), a taxa de convergência pode decrescer com o aumento da distância entre os valores de $\xi_c(u_H)$ de duas iterações consecutivas. Neste caso, a viscosidade artificial a ser introduzida a cada iteração é igual à metade da soma entre os valores calculados pelo modelo na presente iteração e na imediatamente anterior (bissecção), conforme descrito no Algoritmo 2 (Santos e Almeida, 2007b). Nestes algoritmos, u_H^n e $\beta_h^{H;n}$ são a solução aproximada nas escalas resolvidas e o campo de velocidade submalha, respectivamente, em cada iteração n ; $maxiter$ é o número máximo de iterações e tol é a tolerância prescrita. Os dois algoritmos apresentados determinam o valor de $c_{b,T}$ em cada iteração, para cada elemento $T \in \mathcal{T}_H$. Então, o problema resolvido em cada iteração n , é dado por: Dado $u_h^{n-1} \in X_h$, achar $u_h^n \in X_h$ tal que

$$B(u_h^n, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}} c_{b,T} \mu(h) \int_T \nabla u_h^{H;n} \cdot \nabla v_h^H d\Omega = (f, v_h). \quad (4.15)$$

4.3.1 Montagem do termo de estabilização submalha

O termo de estabilização pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\sum_{T \in \mathcal{T}_H} \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_h^{H;n} \cdot \nabla v_h^H d\Omega = \sum_{T \in \mathcal{T}_H} (I - II - III + IV), \quad (4.16)$$

Algoritmo 1

Entrada: Este algoritmo recebe como entrada u_h^0 - calculada usando o método SGS com $c_b = 1$

Saída: A saída é a solução aproximada u_H

```
1:  $n \leftarrow 0$ 
2: repita
3:    $n \leftarrow n + 1$ 
4:   para (cada sub-elemento  $T \in \mathcal{T}_H$ ) faça
5:     determine  $\beta_h^{H;n-1}$ 
6:     se  $\left(1 > \frac{1}{2} \left| \beta_h^{H;n-1} \right| \right)$  então
7:        $c_{b,T} \leftarrow 1 - \frac{1}{2} \left| \beta_h^{H;n-1} \right|$ 
8:     senão
9:        $c_{b,T} \leftarrow \frac{1}{2} \left| \beta_h^{H;n-1} \right|$ 
10:    fim se
11:  fim para
12:  determine  $u_h^n$  usando (4.15)
13:  determine  $u_H^n = P_{X_H} u_h^n$ 
14: até ( $n \leq \maxiter$  ou  $\max_{j=1,\dots,dof} |u_{H;j}^n - u_{H;j}^{n-1}| \leq tol$ )
```

Algoritmo 2

Entrada: Este algoritmo recebe como entrada u_h^0 - calculada usando o método SGS com $c_b = 1$

Saída: A saída é a solução aproximada u_H

```
1: {Inicialização do vetor  $\mathbf{c}_T$ }
2: para (cada sub-elemento  $T \in \mathcal{T}_H$ ) faça
3:    $c_T^0 \leftarrow c_b$ 
4: fim para
5:  $n \leftarrow 0$ 
6: repita
7:    $n \leftarrow n + 1$ 
8:   para (cada elemento  $T \in \mathcal{T}_H$ ) faça
9:     determine  $c_b \leftarrow \frac{1}{2} \left| \beta_h^{H;n-1} \right|$ 
10:     $c_T^n \leftarrow \frac{1}{2} [c_{T_h}^{n-1} + c_b]$ 
11:     $c_{b,T} \leftarrow c_T^n$ 
12:  fim para
13:  determine  $u_h^n$  usando (4.15)
14:  determine  $u_H^n = P_{X_H} u_h^n$ 
15: até ( $n \leq \maxiter$  ou  $\max_{j=1,\dots,dof} |u_{H;j}^n - u_{H;j}^{n-1}| \leq tol$ )
```

onde

$$\begin{aligned} I &= \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_h^n \cdot \nabla v_h d\Omega; \\ II &= \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_h^n \cdot \nabla v_H d\Omega; \\ III &= \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_H^n \cdot \nabla v_h d\Omega; \end{aligned}$$

e

$$IV = \int_T \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla u_H^n \cdot \nabla v_H d\Omega.$$

Este termo é construído a partir das contribuições de cada elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$, as quais por sua vez resultam das contribuições dos 4 sub-elementos $S_i \subset T$, $i = 1, 2, 3, 4$, que dele fazem parte. A matriz local associada à cada elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$ tem dimensão 6×6 . As matrizes locais dos sub-elementos têm dimensão 3×3 e são construídas a partir dos quatro termos resultantes da decomposição (4.16). O primeiro termo (I) é similar ao termo difusivo da forma bilinear associada ao método de Galerkin. Os outros três termos (II, III e IV) associam graus de liberdade tanto da malha fina $\mathcal{T}_h$ quanto da macro $\mathcal{T}_H$. Assim, para cada um dos quatro sub-elementos $S_i \subset T$, $i = 1, 2, 3, 4$, os graus de liberdade da malha $\mathcal{T}_h$ são projetados no elemento macro usando o operador projeção P_{X_H} definido em (3.10) e ilustrado nas Figuras 3.5 e 4.1. A tabela 4.1 apresenta os graus de liberdade das malhas $\mathcal{T}_h$ e $\mathcal{T}_H$ restritos à T .

Para exemplificar, considere a matriz A cujos coeficientes são

$$A_{ij} = \int_{T_h} \xi_c(u_H^{n-1}) \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega ,$$

onde $N_i, i = 1, 2, 3$ são as funções de forma lineares usuais associadas à cada T_h . Para cada sub-elemento as contribuições dos quatro termos em (4.16), denotados por I, II, III e IV , consistem em restringir A para os graus de liberdade das funções aproximante e peso conforme a numeração indicada na tabela 4.1. Este mapeamento é apresentado na tabela 4.2 para cada sub-elemento e respectivo

termo.

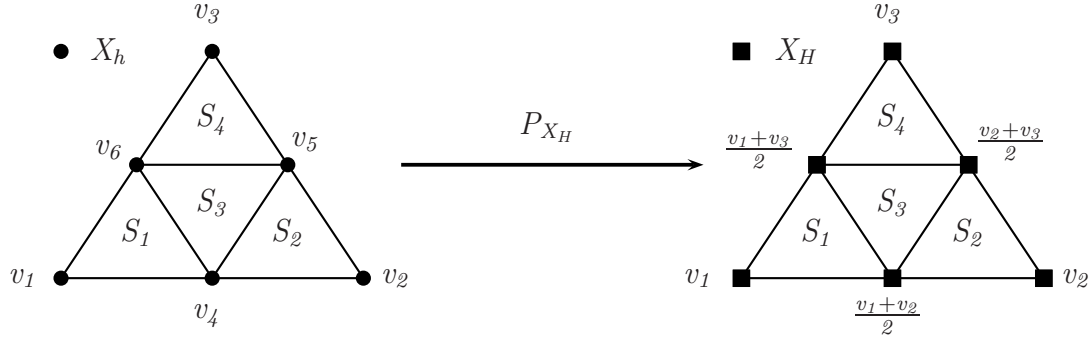


Figura 4.1: Elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$ e seus sub-elementos S_1, S_2, S_3 e $S_4 \in \mathcal{T}_h$: correspondência entre os graus de liberdade em $\mathcal{T}_H$ com os de $\mathcal{T}_h$, resultante do operador projeção P_{X_H} .

4.4 Método NSGS com Condições de Dirichlet Impostas Fracamente

Na solução de diversos problemas de transporte singularmente perturbados resolvidos utilizando-se o método NSGS, observa-se a permanência de oscilações espúrias na vizinhança de camadas limite externas. Relatos similares têm sido feitos na literatura, mesmo para métodos com boas propriedades de estabilização (Bazilevs e Hughes, 2007). A causa deste comportamento tem sido atribuída à imposição forte das condições de contorno do tipo Dirichlet, que pode forçar uma brusca mudança no valor da grandeza transportada, contrariando a física que rege o sistema na maior parte do domínio considerado. Neste contexto, uma alternativa para relaxar esta restrição consiste em introduzir estas condições de forma fraca.

Em (Burman, 2005; Bazilevs e Hughes, 2007) é apresentada uma metodologia eficiente para estabilização de camadas limites externas através da imposição fraca das condições de contorno do tipo Dirichlet. Essa abordagem é inspirada nos métodos de Galerkin Descontínuo e tem suas raízes no método de penalização de Nitsche (1971). Este procedimento tem-se mostrado eficaz na eliminação das

Tabela 4.1: Elemento macro $T \in \mathcal{T}_H$ apresentado em (4.1): numeração dos graus de liberdade locais ($i = 1, 2, 3$).

Sub- elemento	Malha $\mathcal{T}_h$			Malha $\mathcal{T}_H$		
	1	2	3	1	2	3
S_1	v_1	v_4	v_6	v_1	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
S_2	v_4	v_2	v_5	$\frac{v_1+v_2}{2}$	v_2	$\frac{v_2+v_3}{2}$
S_3	v_4	v_5	v_6	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
S_4	v_6	v_5	v_3	$\frac{v_1+v_3}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	v_3

Tabela 4.2: Graus de liberdade locais das funções aproximante e peso para cada sub-elemento S_i , $i = 1, 2, 3, 4$.

Sub- elementos	Termo em (4.16)	Função Aproximante			Função Peso		
S_1	I	u_1	u_4	u_6	v_1	v_4	v_6
	II	u_1	u_4	u_6	v_1	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
	III	u_1	$\frac{u_1+u_2}{2}$	$\frac{u_1+u_3}{2}$	v_1	v_4	v_6
	IV	u_1	$\frac{u_1+u_2}{2}$	$\frac{u_1+u_2}{2}$	v_1	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
S_2	I	u_4	u_2	u_5	v_4	v_2	v_5
	II	u_4	u_2	u_5	$\frac{v_1+v_2}{2}$	v_2	$\frac{v_2+v_3}{2}$
	III	$\frac{u_1+u_2}{2}$	u_2	$\frac{u_2+u_3}{2}$	v_4	v_2	v_5
	IV	$\frac{u_1+u_2}{2}$	u_2	$\frac{u_2+u_3}{2}$	$\frac{v_1+v_2}{2}$	v_2	$\frac{v_2+v_3}{2}$
S_3	I	u_4	u_5	u_6	v_4	v_5	v_6
	II	u_4	u_5	u_6	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
	III	$\frac{u_1+u_2}{2}$	$\frac{u_2+u_3}{2}$	$\frac{u_1+u_3}{2}$	v_4	v_5	v_6
	IV	$\frac{u_1+u_2}{2}$	$\frac{u_2+u_3}{2}$	$\frac{u_1+u_3}{2}$	$\frac{v_1+v_2}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	$\frac{v_1+v_3}{2}$
S_4	I	u_6	u_5	u_3	v_6	v_5	v_3
	II	u_6	u_5	u_3	$\frac{v_1+v_3}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	v_3
	III	$\frac{u_1+u_3}{2}$	$\frac{u_2+u_3}{2}$	u_3	v_6	v_5	v_3
	IV	$\frac{u_1+u_3}{2}$	$\frac{u_2+u_3}{2}$	u_3	$\frac{v_1+v_3}{2}$	$\frac{v_2+v_3}{2}$	v_3

oscilações localizadas nas camadas limite externas, enquanto que as instabilidades localizadas na vizinhança de camadas internas permanecem (Santos e Almeida, 2007d). Obviamente, a estabilidade da solução nestas regiões pode ser obtida através da formulação multiescala proposta. Estendendo, então, esta abordagem para o método NSGS, obtivemos uma eficiente metodologia para resolver numericamente problemas de convecção-difusão-reação singularmente perturbados, para uma larga faixa de parâmetros.

Para a descrição do método, associada à partição $\mathcal{T}_h = \{T_h\}$, considere uma partição da fronteira Γ em n_{ae} arestas, a saber:

$$\Gamma = \bigcup_a \Gamma_a \cap \Gamma, \quad a = 1, \dots, n_{ae}. \quad (4.17)$$

Nesta abordagem, nenhuma condição de contorno de Dirichlet é imposta nos espaços de aproximação X_h e X_H , sendo introduzidas na formulação variacional de forma fraca. As condições de contorno de Dirichlet podem ser introduzidas *a posteriori* através de um pós-processamento da solução aproximada obtida (isto é, os valores da solução aproximada no contorno Γ são substituídos pelo respectivos valores prescritos). Mais detalhes sobre esta metodologia podem ser encontrados em (Bazilevs e Hughes, 2007).

Por simplicidade na apresentação, assume-se que toda a fronteira Γ é prescrita com condições de Dirichlet, ou seja, $u|_{\Gamma} = g$. Obviamente, o método se estende aos casos em que somente uma parte de Γ é prescrita (Bazilevs e Hughes, 2007) e/ou condições de Neumann também são impostas (ver Hughes et al. (2006)). Assim, a idéia básica desta metodologia, consiste em adicionar termos de ponderação agindo somente no contorno Γ de Ω . Esses termos têm a forma:

$$\sum_{a=1}^{n_{ae}} \langle u_h - g, \Psi(v_h) \rangle_{\Gamma_a}, \quad (4.18)$$

onde $\Psi(v_h)$ é um operador de penalização adicionado, ou não, por um termo de fluxo, definidos no espaço das funções testes. Quando $\Psi(v_h)$ representa um

operador de fluxo, sua definição é dada em função da presença dos termos de convecção e/ou difusão no modelo. Quando o modelo não possui difusão, como é o caso da equação de convecção-reação, as condições de contorno de Dirichlet são prescritas somente no contorno de entrada Γ_- . Se o modelo possui termo de difusão, condições de Dirichlet podem ser impostas em toda fronteira Γ . Na fronteira de entrada, Γ_- , os fluxos difusivo e convectivo contribuem para a determinação de $\Psi(\cdot)$. Desta forma, define-se em Γ_-

$$\Psi(v_h) = -\gamma\epsilon \nabla v_h \cdot \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\eta} v_h, \quad (4.19)$$

onde γ é uma constante adimensional. Na fronteira de saída Γ_+ e em Γ_0 , somente o fluxo difusivo deverá atuar sobre v_h de modo a não violar a condição na saída no caso de um problema de primeira ordem. Portanto, define-se em $(\Gamma_+ \cup \Gamma_0)$

$$\Psi(v_h) = -\gamma\epsilon \nabla v_h \cdot \boldsymbol{\eta}. \quad (4.20)$$

Deve-se notar que no caso de convecção dominante essa estrutura variacional pondera mais fortemente as condições de contorno de Dirichlet na fronteira de entrada, Γ_- .

Quando $\Psi(\cdot)$ representa um termo de penalização, este termo é definido em todo contorno Γ , da seguinte forma

$$\Psi(v_h) = \frac{\epsilon K}{h} v_h, \quad (4.21)$$

onde K é uma constante adimensional que funciona como um parâmetro de penalização. O uso de formulações com penalização para imposição das condições de contorno de Dirichlet teve início no final dos anos 60. Em 1968, conforme relatado em (Arnold et al., 2002), o matemático Lions apresentou uma abordagem para aproximar problemas elípticos, substituindo a condição de contorno de Dirichlet por uma condição de fronteira aproximada, através de um procedimento

de penalização. Por exemplo, para o problema

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f, & \text{em } \Omega; \\ u &= g, & \text{em } \Gamma, \end{aligned}$$

onde $f \in L^2(\Omega)$ e $g \in H^{-1/2}(\Gamma)$, a condição de contorno de Dirichlet foi *enfraquecida* pela substituição pela condição aproximada, $w + \frac{1}{\mu} \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\eta}} = g$, com μ sendo um parâmetro suficientemente grande. Lions provou que, para cada $\mu > 0$, este problema tem uma única solução w e quando $\mu \rightarrow \infty$ a solução w converge para a solução u do problema original. Com esta modificação das condições de contorno, a forma fraca do problema regularizado é: achar $u \in H^1(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega + \int_{\Gamma} (u - g) \mu v d\Gamma = \int_{\Omega} f v d\Omega, \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

Assim, um termo de penalização é adicionado, forçando a satisfação da condição de contorno quando μ tende a infinito. Outros trabalhos nessa linha foram propostos no início dos anos 70. Cabe entretanto ressaltar os métodos de Nitsche (1971) e Babuška (1973). O método de Nitsche, com $g = 0$, determina uma solução aproximada u_h no contexto dos elementos finitos, em um subespaço de $H^1(\Omega)$, tal que, para todo v no mesmo subespaço, tem-se

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\eta}} v d\Gamma - \int_{\Gamma} \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\eta}} u d\Gamma + \int_{\Gamma} \mu u v d\Gamma = \int_{\Omega} f v d\Omega,$$

para alguma função de ponderação μ . O segundo termo do lado esquerdo surge da integração por partes do operador de segunda ordem e assegura a consistência do método. O terceiro termo torna o método simétrico e, conseqüentemente, garante a propriedade de *consistência adjunta*. O último termo do lado esquerdo é um termo de penalização, necessário para garantir estabilidade. Nitsche mostrou que se μ é da ordem de $\frac{\nu}{h}$ (com h representando o comprimento característico da malha e ν uma constante suficientemente grande), então a solução aproximada converge para

a solução exata com taxas ótimas em H^1 e L^2 . Babuška (1973) apresentou uma abordagem semelhante, também para o caso $g = 0$, distinguindo-se por conduzir à um método não-consistente. Estas idéias de impor as condições de contorno de Dirichlet fracamente através de penalizações inspiraram o surgimento dos métodos de penalização interior Jr. e Dupont (1976); Percell e Wheeler (1978); Wheeler (1978), atualmente estendidos no contexto dos métodos Galerkin Descontínuos.

Usando integração por partes, nos termos convectivo e difusivo de $B(\cdot, \cdot)$, tem-se:

$$B(u_h, v_h) = (\beta u_h - \epsilon \nabla u_h, -\nabla v_h) + (\sigma u_h, v_h) + \sum_{a=1}^{n_{ae}} \langle -\epsilon \nabla u_h \cdot \boldsymbol{\eta} + \beta \cdot \boldsymbol{\eta} u_h, v_h \rangle_{\Gamma_a \cap \Gamma}.$$

Portanto, o método NSGS com condições de contorno de Dirichlet impostas fracamente, consiste em: Achar $u_h \in X_h$ tal que

$$\begin{aligned} & (\beta u_h - \epsilon \nabla u_h, -\nabla v_h) + (\sigma u_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H; u_h^H, v_h^H) \\ & + \sum_{a=1}^{n_{ae}} (-\epsilon \nabla u_h \cdot \boldsymbol{\eta} + \beta \cdot \boldsymbol{\eta} u_h, v_h)_{\Gamma_a \cap \Gamma} \\ & + \sum_{a=1}^{n_{ae}} (u_h - g, -\gamma \epsilon \nabla v_h \cdot \boldsymbol{\eta} - \beta \cdot \boldsymbol{\eta} v_h)_{\Gamma_a \cap \Gamma_-} \\ & + \sum_{a=1}^{n_{ae}} (u_h - g, -\gamma \epsilon \nabla v_h \cdot \boldsymbol{\eta})_{\Gamma_a \cap (\Gamma_+ \cup \Gamma_0)} \\ & + \sum_{a=1}^{n_{ae}} (u_h - g, \frac{\epsilon K}{h_a} v_h)_{\Gamma_a \cap \Gamma} = (f, v_h), \quad \forall v_h \in X_h, \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde h_a é o comprimento característico da malha, tomado como o mínimo entre os comprimentos característicos dos elementos adjacentes que contêm a aresta a .

As constantes adimensionais γ e K presentes no modelo merecem considerações adicionais. Bazilevs e Hughes (2007) sugerem usar $\gamma = 1$ ou $\gamma = -1$. A escolha $\gamma = -1$ conduz a uma melhor estabilidade da forma bilinear quando a difusão é importante, mas torna a formulação *adjunta-inconsistente* e o método pode apresentar apenas convergência sub-ótima em normas de baixa ordem como L^2 (ver Arnold et al. (2002)). Além disso, $\gamma = -1$ produz comportamento não-

monótono nas camadas limite. Escolhendo $\gamma = 1$, o método torna-se adjunto-consistente e monótono. Neste caso, taxas ótimas em L^2 são obtidas. O termo de penalização caracterizado por (4.21) torna a formulação não-singular na ausência da convecção e produz um efeito estabilizante necessário para o caso $\gamma = 1$. A potência inversa de h é necessária para obtenção de taxas ótimas de convergência. Quando $\gamma = 1$, a constante K precisa ser maior do que a constante $\tilde{K}$ da estimativa inversa local,

$$\|\nabla v_h \cdot \boldsymbol{\eta}\|_{L^2(\Gamma_a)} \leq \frac{\tilde{K}}{2h} \|v_h\|_{L^2(\Gamma_a)}, \quad \forall v_h \in X_h. \quad (4.23)$$

A constante $\tilde{K}$ depende da ordem de interpolação utilizada e do tipo de elemento (Ciarlet, 1978). Quando $\gamma = -1$, K deve ser estritamente maior do que zero para assegurar estabilidade. Observe também que o termo de penalização (4.21) em (4.22) decresce à medida que a difusão diminui. Para problemas sem difusão, este termo desaparece. Nos experimentos numéricos foram utilizados $\gamma = 1$ e $K = 4$, conforme sugerido em (Bazilevs e Hughes, 2007).

Capítulo 5

Análise Numérica do Método NSGS

Neste capítulo é estabelecida a análise numérica do método NSGS (4.12). Inicialmente, são apresentados alguns resultados preliminares importantes (hipóteses e Lemas) a serem usados na análise. Em seguida, são estabelecidas a existência e unicidade da solução aproximada u_h para o problema (4.12) e a estimativa de erro *a priori* para u_h é desenvolvida. Esta análise é feita considerando $|\nabla u_H| \neq 0$, caracterizando dessa forma o modelo não-linear. Quando $|\nabla u_H| = 0$, a formulação de Galerkin é recuperada, assim como suas propriedades. Ao longo deste capítulo utiliza-se $c > 0$ como uma constante genérica que não depende de nenhum parâmetro da discretização ou do problema e cujo valor pode mudar em diferentes situações.

5.1 Resultados Preliminares

Algumas das hipóteses (i)-(vi) feitas no desenvolvimento do método SGS (Capítulo 3) são reescritas a seguir no contexto da equação de convecção-difusão-reação, pois serão úteis na análise do método NSGS.

- Propriedade de aproximação sobre X_H : Dado $u \in H^{k+1}(T)$, com $k > 0$, existe $w_H \in X_H$ tal que

$$\|u - w_H\|_{0,T} + H\|\beta \cdot \nabla(u - w_H)\|_{0,T} \leq cH^{k+1}\|u\|_{k+1,T}; \quad (5.1)$$

- Estimativa inversa em X_h :

$$\forall v_h \in X_h; \quad \forall T \in \mathcal{T}_H \quad \|\beta \cdot \nabla v_h\|_{0,T} + \|\nabla v_h\|_{0,T} \leq cH^{-1}\|v_h\|_{0,T}; \quad (5.2)$$

- Condição inf-sup discreta: *Existem $c_a > 0$ e $c_\delta \geq 0$, tais que $\forall T \in \mathcal{T}_H$*

$$c_a \|\beta \cdot \nabla u_H\|_{0,T} \leq \sup_{v_h \in X_h(T)} \frac{(\beta \cdot \nabla u_H, v_h)|_T}{\|v_h\|_{0,T}} + c_\delta a_s(u_h, u_h)^{1/2}, \quad (5.3)$$

onde $a_s(u, v)$ é definida em (3.2).

Um aspecto importante do método NSGS é sua capacidade em evitar oscilações espúrias próximas a elevados gradientes, pela introdução do operador não linear de viscosidade artificial submalha $D(u_H, u_h^H, v_h^H)$. Este operador depende da quantidade $|\beta_h^H|$, que é assumida satisfazer à seguinte desigualdade:

$$q_0 \leq |\beta_h^H| \leq q_1 \quad (5.4)$$

com $q_0, q_1 > 0$. No caso em que $|\beta_h^H| = 0$, o método de Galerkin é automaticamente recuperado.

Observação 5.1.1. *Uma hipótese similar a (5.4) é utilizada em (Shih e Elman, 2000) para provar a convergência do método de captura de descontinuidades desenvolvido em (Codina, 1993). É mencionado que o limite inferior q_0 é tão pequeno quanto ε/h , embora nenhuma prova seja apresentada. Na prática, a condição (5.4) é violada em algumas situações onde as características numéricas e camadas limite são pequenas. Estes casos são tratados escolhendo o valor do parâmetro de estabilização igual a zero, de forma que o método resultante é localmente definido como um método de difusão nas linhas de correntes.*

□

A hipótese (5.4) implica em

$$\xi_c(u_H) = \frac{1}{4}h |\beta_h^H| \geq \frac{h}{4}q_0 = \sigma_1 H, \quad \text{com } \sigma_1 > 0, \quad (5.5)$$

e

$$\xi_c(u_H) = \frac{1}{4}h |\beta_h^H| \leq \frac{h}{4}q_1 = \sigma_2 H, \quad \text{com } \sigma_2 > 0. \quad (5.6)$$

O próximo lema demonstra duas propriedades importantes que o operador não linear $D(u_H, u_h^H, v_h^H)$ satisfaz, a saber, coercividade e continuidade em $H^1(T)$.

Lema 5.1.1. *Supõe-se que as desigualdades (5.5) e (5.6) sejam válidas. Então, o operador não linear $D(\cdot, \cdot, \cdot)$, definido em (4.11), satisfaz para cada $T \in \mathcal{T}_H$, as seguintes propriedades de continuidade e coercividade:*

$$\begin{aligned} D(u_H, u_h^H, v_h^H) &\leq \sigma_2 H \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|\nabla v_h^H\|_{0,T}; \\ D(v_H, v_h^H, v_h^H) &\geq \sigma_1 H \|\nabla v_h^H\|_{0,T}^2, \end{aligned}$$

onde σ_1 e σ_2 são constantes reais positivas.

□

Demonstração: Para demonstrar a continuidade, parte-se da definição do operador, a saber

$$D(u_H, u_h^H, v_h^H) = (\xi_c(u_H) \nabla u_h^H, \nabla v_h^H)_T.$$

Usando (5.6) e a desigualdade de Cauchy-Schwartz, segue que

$$D(u_H, u_h^H, v_h^H) \leq \sigma_2 H \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|\nabla v_h^H\|_{0,T}.$$

Usando (5.5), a coercividade resulta em

$$\begin{aligned} D(v_H, v_h^H, v_h^H) &= (\xi_c(v_H) \nabla v_h^H, \nabla v_h^H)_T \\ &\geq \sigma_1 H \|\nabla v_h^H\|_{0,T}^2. \end{aligned}$$

■

Definição 5.1.1. (*Norma Tripla*) De (2.15) e do Lema (5.1.1), define-se a seguinte norma

$$|||v_h|||^2 = \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \sigma_0 \|v_h\|_{0,T}^2 + \epsilon \|\nabla v_h\|_{0,T}^2 + \sigma_1 H \|\nabla v_h^H\|_{0,T}^2. \quad (5.7)$$

□

O dois próximos lemas são importantes para estabelecer a estimativa de erro do método NSGS.

Lema 5.1.2. *Existe $\alpha > 0$ tal que*

$$\forall (H, h), \quad \forall u_h^H \in X_h^H, \quad \forall T \in \mathcal{T}_H \quad \sup_{v_h \in X_h} \frac{D(u_H, u_h^H, v_h^H)}{\|v_h\|_{0,T}} \leq \alpha \|\nabla u_h^H\|_{0,T}.$$

□

Demonstração: Usando o Lema 5.1.1, resulta que

$$D(u_H, u_h^H, v_h^H) \leq \sigma_2 H \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|\nabla v_h^H\|_{0,T}.$$

A hipótese (3.22) implica que $|v_h^H|_{b,T} = \|\nabla v_h^H\|_{0,T} \leq c_{e2} H^{-1} \|v_h^H\|_{0,T}$. Logo

$$\begin{aligned} D(u_H, u_h^H, v_h^H) &\leq c_{e2} \sigma_2 \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|v_h^H\|_{0,T} \\ &\leq c_{e2} \sigma_2 \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|(I - P_{X_H})v_h\|_{0,T} \\ &\leq c_{e2} \sigma_2 \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|I - P_{X_H}\| \|v_h\|_{0,T} \\ &\leq \alpha \|\nabla u_h^H\|_{0,T} \|v_h\|_{0,T}. \end{aligned}$$

Como resultado, tem-se

$$\sup_{\varphi_h \in X_h} \frac{D(w_H, u_h^H, v_h^H)}{\|v_h\|_{0,T}} \leq \alpha \|\nabla u_h^H\|_{0,T}.$$

■

Lema 5.1.3. *Existe $c_0 \geq 0$ tal que*

$$\forall u_h, v_h \in X_h \quad (\sigma u_h, v_h) \leq c_0 a_s(u_h, u_h)^{1/2} \|v_h\|_0.$$

□

Demonstração:

Supõe-se que $a_s(\cdot, \cdot)$ é L^2 -coerciva. Segue do Lema 2.3.1 e de (2.15) que

$$a_s(u_h, u_h) = a(u_h, u_h) = \left(\left(\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \beta \right) u_h, u_h \right) \geq \sigma_0 \|u_h\|_0^2$$

com $\sigma_0 > 0$, ou seja,

$$\|u_h\|_0 \leq \frac{1}{\sqrt{\sigma_0}} a_s(u_h, u_h)^{1/2}.$$

Então, aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, tem-se

$$(\sigma u_h, v_h) \leq |\sigma|_\infty \|u_h\|_0 \|v_h\|_0 \leq \frac{|\sigma|_\infty}{\sqrt{\sigma_0}} a_s(u_h, u_h)^{1/2} \|v_h\|_0,$$

onde $c_0 = \frac{|\sigma|_\infty}{\sqrt{\sigma_0}}$.

Para o caso em que $\sigma = \nabla \cdot \beta = 0$, a desigualdade é válida para $c_0 = 0$.

■

Para estabelecer a existência de solução, recorre-se ao Lema 5.1.4 que é uma extensão do teorema do ponto fixo de Brouwer. A demonstração deste lema encontra-se em (Temam (1979), Lema 1.4 -pags. 164-166).

Lema 5.1.4. *Sejam X_h um espaço de Hilbert de dimensão finita com produto escalar $[\cdot, \cdot]$ e norma $[\cdot]$ e P uma função contínua de X_h em X_h tal que*

$$[P(u), u] > 0 \quad \text{para} \quad [u] = k > 0.$$

Então existe $u \in X_h$, $[u] \leq k$, tal que

$$P(u) = 0.$$

□

Um hipótese importante para provar a unicidade da solução aproximada u_h , para a qual requer-se que a viscosidade artificial submalha seja mínima, é apresentada a seguir: Se $u_h \in X_h$ é solução do problema (4.12), então

$$|\beta_h^H(u_H)| \leq |\beta_h^H(w_H)|, \quad \forall w_H \in X_H, \quad (5.8)$$

ou seja,

$$\xi_c(u_H) \leq \xi_c(w_H) \quad \forall w_H \in X_H.$$

Observação 5.1.2. *Vale ressaltar que essa hipótese é apenas uma conjectura, de modo que sua prova permanece ainda em aberto. Esta hipótese é utilizada para a demonstração da unicidade da solução aproximada u_h . Isso significa que o resultado de unicidade de solução apresentado neste trabalho está condicionado a satisfação da hipótese (5.8).*

□

5.2 Existência e Unicidade de Solução

Nesta seção são estabelecidas existência e unicidade de solução para o método NSGS. A existência de solução é mostrada no Lema 5.2.1, enquanto que a unicidade é apresentada no Lema 5.2.2.

Para demonstrar a existência de solução para o método NSGS, utiliza-se o Lema 5.1.4.

Lema 5.2.1. (*Existência de u_h*) *Assume-se que $\beta \in [L^\infty(\Omega)]^d$, $\sigma \in L^\infty(\Omega)$ e que (2.17) e (5.4) são satisfeitas. Então, existe uma solução u_h para o problema (4.12).*

Demonstração:

Definem-se um produto interno em $X_h \subset H_0^1(\Omega)$ por $[u, v] = (\nabla u, \nabla v)$, com

respectiva norma denotada por $[u] = |u|_1$, e um operador $P : X_h \rightarrow X_h$ por

$$[Pu_h, v_h] = (R(G_u), v_h).$$

O operador

$$R : X_h^* \rightarrow X_h$$

é tal que

$$R(G_u) = (R \circ G_u)(u_h),$$

com

$$\begin{aligned} G_u : \quad X_h &\rightarrow X_h^* \\ u_h &\mapsto \langle G_u, v_h \rangle = B(u_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, u_h^H, v_h^H) - (f, v_h) \in X_h^*, \end{aligned}$$

onde R é o operador de Riesz e X_h^* é o espaço dual de X_h .

Então, pela coercividade de $B(\cdot, \cdot)$ e positividade de $D(\cdot, \cdot, \cdot)$, tem-se que

$$\begin{aligned} [Pu_h, u_h] &= B(u_h, u_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, u_h^H, u_h^H) - (f, u_h) \\ &\geq \alpha |u_h|_1^2 - \|f\|_0 |u_h|_1 \\ &\geq |u_h|_1 (\alpha |u_h|_1 - \|f\|_0). \end{aligned}$$

Segue que $[Pu_h, u_h] > 0$ para $[u_h] = k$ e k suficientemente grande; mais precisamente, $k > \frac{1}{\alpha} \|f\|_0$. O operador P é contínuo, pois $B(\cdot, \cdot)$, $D(\cdot, \cdot, \cdot)$ e $(f, \cdot)$ são formas contínuas. Portanto, as hipóteses do Lema 5.1.4 são satisfeitas e conclui-se que existe uma solução u_h para o problema (4.12). ■

O próximo Lema mostra que o método NSGS (4.12) possui uma única solução. Este resultado é baseado na hipótese (5.8).

Lema 5.2.2. (*Unicidade de u_h*) Assume-se que as hipóteses (5.8) e do Lema 5.2.1 sejam verdadeiras. Então, existe uma única solução u_h para o problema

(4.12).

□

Demonstração: Supõe-se que existem duas soluções aproximadas $u_h, w_h \in X_h$ para o problema (4.12). Então, subtraindo as duas equações correspondentes obtém-se

$$B(u_h - w_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} (\xi_c(u_H) \nabla u_h^H - \xi_c(w_H) \nabla w_h^H, \nabla v_h^H)_T = 0.$$

Escolhendo $v_h = u_h - w_h$, e usando (2.15) e Lema 2.3.1 na equação anterior, resulta

$$(\xi_c(u_H) \nabla u_h^H - \xi_c(w_H) \nabla w_h^H, \nabla u_h^H - \nabla w_h^H) + \epsilon \|\nabla(u_h - w_h)\|_0^2 + \sigma_0 \|u_h - w_h\|_0^2 \leq 0. \quad (5.9)$$

Agora, como u_h e w_h são soluções de (4.12), segue da hipótese (5.8) que

$$\xi_c(u_H) \leq \xi_c(w_H) \quad \text{e} \quad \xi_c(w_H) \leq \xi_c(u_H),$$

ou seja, $\xi_c(u_H) = \xi_c(w_H) = \alpha \geq 0$. Dessa forma, tem-se

$$(\xi_c(u_H) \nabla u_h^H - \xi_c(w_H) \nabla w_h^H, \nabla u_h^H - \nabla w_h^H) = \alpha (\nabla(u_h^H - w_h^H), \nabla(u_h^H - w_h^H)) \geq 0. \quad (5.10)$$

Consequentemente, (5.9) e (5.10) conduzem a

$$\epsilon \|\nabla(u_h - w_h)\|_0^2 + \sigma_0 \|u_h - w_h\|_0^2 \leq 0.$$

Entretanto, como $\epsilon > 0$, $\sigma_0 > 0$ e $u_h - w_h \in X_h$, obtém-se

$$u_h = w_h.$$

■

Observação 5.2.1. *(Contrapartida para o NSGS da Observação 3.1.1)*

$$B_h(u_h, v_h) = B(u_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, u_h^H, v_h^H),$$

tem-se que

$$\begin{aligned} \forall v_h \in X_h, \quad B_h(u_h, v_h) &= B(u, v_h); \\ \forall v_h \in X_h, \quad \forall u_H \in X_H, \quad B_h(u_H, v_h) &= B(u_H, v_h). \end{aligned}$$

A primeira igualdade é obtida subtraindo (4.12) de (2.12). A segunda desigualdade resulta do fato que u_H não possui escalas submalhas.

A forma $B_h(\cdot, \cdot)$ é definida somente no espaço discreto $X_h \times X_h$. Dessa forma, a expressão $B_h(u, v_h)$ não tem sentido para $u \in X$ e $u \notin X_h$, pois u não tem a priori nenhuma decomposição em $X_H \oplus X_h^H$.

Uma estimativa de erro *a priori* para o problema (4.12) é apresentada na próxima seção.

5.3 Estimativa de Erro *a Priori*

A estimativa de erro *a priori* para o problema (4.12) é estabelecida pelo Teorema 5.3.1. A análise segue a abordagem utilizada em (Guermond, 2001) e (Cawood et al., 2002).

Teorema 5.3.1. *Sejam $k > 0$ e $u \in H^{k+1}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ a solução do problema (2.9)-(2.10), com $g = 0$. Assume-se que a hipótese (5.4) é satisfeita e que $\epsilon < H < 1$. Se u_h é a solução aproximada obtida por (4.12), então*

$$\left[\sum_{T \in \mathcal{T}_H} \epsilon \|\nabla(u - u_h)\|_{0,T}^2 + a_s(u - u_h, u - u_h)|_T + \sigma_1 H \|u_h^H\|_{0,T}^2 \right]^{1/2} \leq c H^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}. \quad (5.11)$$

Assumindo que (2.15) seja satisfeita, ou seja, a forma $a_s(\cdot, \cdot)|_T$ é $L^2(T)$ -

coerciva, então

$$|||u - u_h||| \leq cH^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}, \quad (5.12)$$

onde a norma $||| \cdot |||$ é definida em (5.7).

Além disso, tem-se as seguintes estimativas para a solução u_H :

$$\|u - u_H\|_0 \leq cH^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} & e \\ \|\nabla(u - u_H)\|_0 & \leq c \left[1 + \left(\frac{H}{\epsilon} \right)^{1/2} \right] H^k \|u\|_{k+1}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

□

Demonstração: Seja $w_H \in X_H$ a interpolante de u em T e introduz-se as seguintes definições:

$$\eta_h = u - w_H; \quad e_h = w_H - u_h; \quad u - u_h = \eta_h + e_h.$$

Subtraindo (4.12) de (2.12) obtém-se a equação que controla e_h , dada por

$$B(e_h, v_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, u_h^H, v_h^H) = -B(\eta_h, v_h), \quad \forall v_h \in X_h. \quad (5.15)$$

Como X_H é um espaço invariante pelo operador linear $P_{X_H} : X_h \rightarrow X_H$, então

$$\begin{aligned} u_h^H &= u_h - P_{X_H} u_h \\ &= u_h - w_H - P_{X_H}(u_h - w_H) \\ &= -e_h + P_{X_H} e_h \\ &= -(I - P_{X_H}) e_h \\ &= -e_h^H. \end{aligned}$$

Portanto, usando este resultado e tomando e_h como função teste, a equação (5.15)

pode ser reescrita como

$$B(e_h, e_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} D(u_H, e_h^H, e_h^H) = -B(\eta_h, e_h). \quad (5.16)$$

Usando (2.13), (2.14) e Lema 5.1.1, resulta

$$\epsilon \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\nabla e_h\|_{0,T}^2 + a_s(e_h, e_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \sigma_1 H \|\nabla e_h^H\|_{0,T}^2 \leq -B(\eta_h, e_h). \quad (5.17)$$

Como $a_s(\eta_h, e_h) = \frac{1}{2} [a(\eta_h, e_h) + a(e_h, \eta_h)]$ (ver (3.2)), então

$$a(\eta_h, e_h) = 2a_s(e_h, \eta_h) - a(e_h, \eta_h)$$

e desta forma, $-B(\eta_h, e_h)$ pode ser escrito como

$$-B(\eta_h, e_h) = -\epsilon(\nabla e_h, \nabla \eta_h) - 2a_s(e_h, \eta_h) + a(e_h, \eta_h). \quad (5.18)$$

Desta forma, o lado direito de (5.17) dado por (5.18) pode ser limitado conforme mostrado a seguir.

Para o primeiro termo, usando as desigualdades de Cauchy-Schwartz e de Young, obtém-se

$$-\epsilon(\nabla e_h, \nabla \eta_h) \leq \mu_1 \epsilon \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\nabla e_h\|_{0,T}^2 + \frac{\epsilon}{4\mu_1} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\nabla \eta_h\|_{0,T}^2.$$

Para o segundo termo, utilizam-se o Lema 3.1.1 e a desigualdade de Young,

obtendo-se

$$\begin{aligned}
-2a_s(e_h, \eta_h) &\leq \mu_2 a(e_h, e_h) + \frac{1}{\mu_2} a(\eta_h, \eta_h) \\
&\leq \mu_2 a(e_h, e_h) + \frac{1}{\mu_2} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\beta \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + \frac{|\sigma|_\infty}{\mu_2} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\eta_h\|_{0,T}^2 \\
&\leq \mu_2 a(e_h, e_h) + \frac{\mu'_2}{\mu_2} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} H \|\beta \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T}^2 \\
&\quad + \left(\frac{H^{-1}}{4\mu'_2\mu_2} + \frac{|\sigma|_\infty}{\mu_2} \right) \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\eta_h\|_{0,T}^2.
\end{aligned}$$

Finalmente, para o terceiro termo usa-se o Lema 5.1.3 e a desigualdade de Young para obter

$$\begin{aligned}
a(e_h, \eta_h) &\leq (\beta \cdot \nabla e_h, \eta_h) + c_0 a_s(e_h, e_h)^{1/2} \|\eta_h\|_0 \\
&\leq (\beta \cdot \nabla e_h, \eta_h) + \mu_3 a_s(e_h, e_h) + \frac{c_0^2}{4\mu_3} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\eta_h\|_{0,T}^2.
\end{aligned}$$

Introduzindo estas três desigualdades em (5.17), obtém-se

$$\begin{aligned}
\epsilon(1 - \mu_1) \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\nabla e_h\|_{0,T}^2 + (1 - \mu_2 - \mu_3) a_s(e_h, e_h) + \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \sigma_1 H \|\nabla e_h^H\|_{0,T}^2 &\leq \\
(\beta \cdot \nabla e_h, \eta_h) + \frac{\epsilon}{4\mu_1} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\nabla \eta_h\|_{0,T}^2 + \frac{\mu'_2}{\mu_2} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} H \|\beta \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T}^2 &+ \\
+ \left(\frac{H^{-1}}{4\mu'_2\mu_2} + \frac{|\sigma|_\infty}{\mu_2} + \frac{c_0^2}{4\mu_3} \right) \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\eta_h\|_{0,T}^2. & \quad (5.19)
\end{aligned}$$

Agora, considera-se o termo restante, $(\beta \cdot \nabla e_h, \eta_h)$, isto é,

$$\begin{aligned}
(\beta \cdot \nabla e_h, \eta_h) &\leq \sum_{T \in \mathcal{T}_H} \|\beta \cdot \nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} \\
&\leq \sum_{T \in \mathcal{T}_H} (\|\beta \cdot \nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + \|\beta \cdot \nabla e_h^H\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T}). \quad (5.20)
\end{aligned}$$

Para limitar o termo $\|\beta \cdot \nabla e_h\|_{0,T}$, utiliza-se a condição inf-sup discreta (5.3). Note

que

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_H, v_h) &= -(\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_h^H, v_h) - \epsilon(\nabla e_h, \nabla v_h) - (\sigma e_h, v_h) - D(u_H; e_h^H, v_h^H) \\
&\quad - \epsilon(\nabla \eta_h, \nabla v_h) - a(\eta_h, v_h).
\end{aligned}$$

Então, usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz, estimativa inversa (5.2) e Lemas (5.1.1) e (5.1.3), obtém-se

$$\begin{aligned}
c_a \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_H\|_{0,T} &\leq \sup_{v_h \in X_h(T)} \frac{(\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_H, v_h)|_T}{\|v_h\|_{0,T}} + c_\delta a_s(e_h, e_h)^{1/2}|_T \\
&\leq \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_h^H\|_{0,T} + c\epsilon H^{-1} \|\nabla e_h\|_{0,T} + c_0 a_s(e_h, e_h)^{1/2}|_T + \alpha \|\nabla e_h^H\|_0 \\
&\quad + c\epsilon H^{-1} \|\nabla \eta_h\|_{0,T} + \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T} + |\sigma|_\infty \|\eta\|_{0,T} + c_\delta a_s(e_h, e_h)^{1/2}|_T \\
&\leq c\epsilon H^{-1} \|\nabla \eta_h\|_{0,T} + \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T} + |\sigma|_\infty \|\eta\|_{0,T} \\
&\quad + c\epsilon H^{-1} \|\nabla e_h\|_{0,T} + (\alpha + |\boldsymbol{\beta}|_\infty) \|\nabla e_h^H\|_{0,T} + (c_0 + c_\delta) a_s(e_h, e_h)^{1/2}|_T.
\end{aligned}$$

Consequentemente, o termo $\|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T}$ em (5.20) é limitado por

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} &\leq c \left(\epsilon H^{-1} \|\nabla \eta_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + \|\eta_h\|_{0,T}^2 \right. \\
&\quad \left. + \epsilon H^{-1} \|\nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + \|\nabla e_h^H\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} + a_s(e_h, e_h)^{1/2}|_T \|\eta_h\|_{0,T} \right).
\end{aligned}$$

Aplicando a desigualdade de Young em cada termo obtém-se

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla e_h\|_{0,T} \|\eta_h\|_{0,T} &\leq c \left(\frac{1}{2} \epsilon^2 H^{-1} \|\nabla \eta_h\|_{0,T}^2 + \frac{1}{2} H^{-1} \|\eta_h\|_{0,T}^2 + \frac{1}{2} H \|\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T}^2 + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{2} H^{-1} \|\eta_h\|_{0,T}^2 + \|\eta_h\|_{0,T}^2 + \mu_4 \epsilon \|\nabla e_h\|_{0,T}^2 + \frac{1}{4\mu_4} \epsilon H^{-2} \|\eta_h\|_{0,T}^2 \right. \\
&\quad \left. + \mu_5 H \|\nabla e_h^H\|_{0,T}^2 + \frac{1}{4\mu_5} H^{-1} \|\eta_h\|_{0,T}^2 + \mu_6 a_s(e_h, e_h)|_T + \frac{1}{4\mu_6} \|\eta_h\|_{0,T}^2 \right).
\end{aligned}$$

Agora, retornando para (5.20) e (5.19), e escolhendo $\mu_1 = \mu_4 = \mu_3 = 1/4$, $\mu_2 =$

$\mu_6 = 1/8$, $\mu'_2 = 1/16$ e $\mu_5 = \sigma_1/2$, resulta

$$\begin{aligned} \sum_{T \in \mathcal{T}_H} [\epsilon \|\nabla e_h\|_{0,T}^2 + a_s(e_h, e_h)|_T + \sigma_1 H \|\nabla e_h^H\|_{0,T}^2] &\leq c \sum_{T \in \mathcal{T}_H} [(\epsilon^2 H^{-1} + \epsilon) \|\nabla \eta_h\|_{0,T}^2 \\ &\quad + H \|\beta \cdot \nabla \eta_h\|_{0,T}^2 + (1 + H^{-1} + \epsilon H^{-2}) \|\eta_h\|_{0,T}^2]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Usando a desigualdade triangular, a propriedade de aproximação (5.1) e considerando $\epsilon \leq H$, obtém-se a estimativa (5.11) dada por

$$\left[\sum_{T \in \mathcal{T}_H} \epsilon \|\nabla(u - u_h)\|_{0,T}^2 + a_s(u - u_h, u - u_h)|_T + \sigma_1 H \|\nabla u_h^H\|_{0,T}^2 \right]^{1/2} \leq c H^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}.$$

Para o caso em que $a_s(\cdot, \cdot)$ é $L^2(T)$ -coerciva, ou seja,

$$a_s(e_h, e_h) \geq \sigma_0 \|e_h\|_0^2,$$

obtém-se

$$|||e_h||| \leq c H^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}, \quad (5.22)$$

onde a norma $||| \cdot |||$ é definida em (5.7). Usando a desigualdade triangular, a estimativa (5.11) é obtida, ou seja,

$$|||u - u_h||| \leq |||e_h||| + |||\eta_h||| \leq c H^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}.$$

Para obter a estimativa (5.13) observe que

$$\begin{aligned} \|u - u_H\|_0 &\leq \|u - u_h\|_0 + \|u_h^H\|_0 \\ &\leq \|u - u_h\|_0 + \|e_h^H\|_0 \\ &\leq \|u - u_h\|_0 + \|e_h\|_0 + \|e_H\|_0 \\ &\leq 2\|e_h\|_0 + \|\eta_h\|_0 + \|e_H\|_0. \end{aligned}$$

Como P_{X_H} é estável em L^2 , então $\|e_H\|_0 \leq c\|e_h\|_0$. Logo

$$\|u - u_H\|_0 \leq c\|e_h\|_0 + \|\eta_h\|_0.$$

Usando a propriedade de aproximação (5.1) e (5.22) obtém-se

$$\|u - u_H\|_0 \leq cH^{k+\frac{1}{2}}\|u\|_{k+1}. \quad (5.23)$$

Finalmente, observando que

$$\begin{aligned} \|\nabla(u - u_H)\|_0 &\leq \|\nabla(u - u_h)\|_0 + \|\nabla u_h^H\|_0 \\ &\leq \|\nabla e_h\|_0 + \|\nabla \eta_h\|_0 + \|\nabla u_h^H\|_0 \end{aligned}$$

e usando a propriedade de aproximação (5.1), a hipótese $\epsilon < H$ e (5.21), obtém-se a estimativa (5.14), ou seja,

$$\|\nabla(u - u_H)\|_0 \leq c \left[1 + \left(\frac{H}{\epsilon} \right)^{1/2} \right] H^k \|u\|_{k+1}.$$

■

No caso em que $a_s(\cdot, \cdot)$ é L^2 -coerciva, obtém-se a seguinte estimativa em $L^2(\Omega)$ para a solução u_h :

$$\|u - u_h\|_0 \leq cH^{k+\frac{1}{2}}\|u\|_{k+1}. \quad (5.24)$$

Para o gradiente da solução submalha obtém-se

$$\|\nabla u_h^H\|_0 \leq cH^k\|u\|_{k+1} \quad (5.25)$$

e para o gradiente da solução aproximada u_h , a estimativa é

$$\|\nabla u - \nabla u_h\|_0 \leq \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} H^{k+\frac{1}{2}} \|u\|_{k+1}. \quad (5.26)$$

Pode-se observar que a estimativa em $L^2(\Omega)$ é similar a dos métodos estabilizados, tais como SUPG e o próprio método SGS. O estudo de convergência do método NSGS, através de experimentos numéricos, é apresentado no próximo capítulo.

Capítulo 6

Resultados Numéricos

Neste capítulo são apresentados os resultados dos experimentos realizados com a metodologia proposta nesta tese. Alguns resultados são comparados com outros métodos, tais como os métodos de Galerkin, SUPG, SGS e CAU. Na Seção 6.1, vários problemas são resolvidos de forma a caracterizar o comportamento do método NSGS em relação à outros métodos. Na Seção 6.2 são realizados três experimentos numéricos para estudar a convergência do método NSGS. Em todos os experimentos foram utilizados métodos diretos para a resolução dos sistemas lineares. Para a malha utilizada (Figura 3.6), o comprimento característico é dado por $\mu(h) = \frac{2 |T_h|^{1/2}}{3} \approx \frac{h}{2}$, onde $|T_h|$ é a área do elemento T_h .

6.1 Resolução de Problemas

Nesta seção são realizados sete experimentos numéricos com o método NSGS. Alguns resultados são comparados com os métodos de Galerkin, SUPG, SGS e CAU. Os exemplos 01 e 02 são resolvidos usando os Algoritmos 1 e 2 apresentados no Capítulo 5. Nos exemplos restantes utiliza-se somente o Algoritmo 2. O número máximo de iterações para ambos algoritmos é 50. A convergência é avaliada em todos os graus de liberdade da escala resolvida através de uma tolerância prescrita $tol = 10^{-3}$.

6.1.1 Exemplo 01 - Problema de Convecção-Difusão

Neste exemplo, o método NSGS é utilizado para resolver o problema apresentado no Exemplo 1 da Seção 3.3 - Capítulo 3, que representa um problema de convecção-difusão predominantemente convectivo. As soluções obtidas pelos métodos SUPG e SGS são mostradas nas Figuras 3.7, 3.8 e 3.10 do Capítulo 3. A Figura 6.1 mostra as soluções (u_H) com condições de contorno impostas fortemente e fracamente, utilizando o Algoritmo 1. A solução obtida com a imposição forte das condições de contorno apresenta oscilações na camada interna e uma pequena oscilação na camada externa, enquanto que impondo as condições de contorno de Dirichlet fracamente, a camada limite externa é bem representada. Entretanto, observa-se um aumento das oscilações na camada limite interna.

As soluções obtidas usando o Algoritmo 2 são apresentadas na Figura 6.2. A camada limite interna é bem representada, restando pequenas oscilações na região de saída do fluxo, quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas fortemente. Assim como a solução obtida com o Algoritmo 1, a camada limite externa é representada precisamente quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas fracamente.

O Algoritmo 1 conduz a soluções menos precisas do que o Algoritmo 2, visto que mantém o SGS (com $c_b = 1$) nas regiões de solução regular. A convergência dos procedimentos iterativos definidos pelos algoritmos depende do tipo de imposição das condições de contorno Dirichlet utilizada. A solução obtida usando condições de contorno forte convergiu em 5 iterações para o Algoritmo 1 e em 47 iterações para o Algoritmo 2. Quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas fracamente, observa-se que a convergência dos dois algoritmos é acelerada. Neste exemplo, os Algoritmos 1 e 2 convergiram em 3 e 20 iterações, respectivamente.

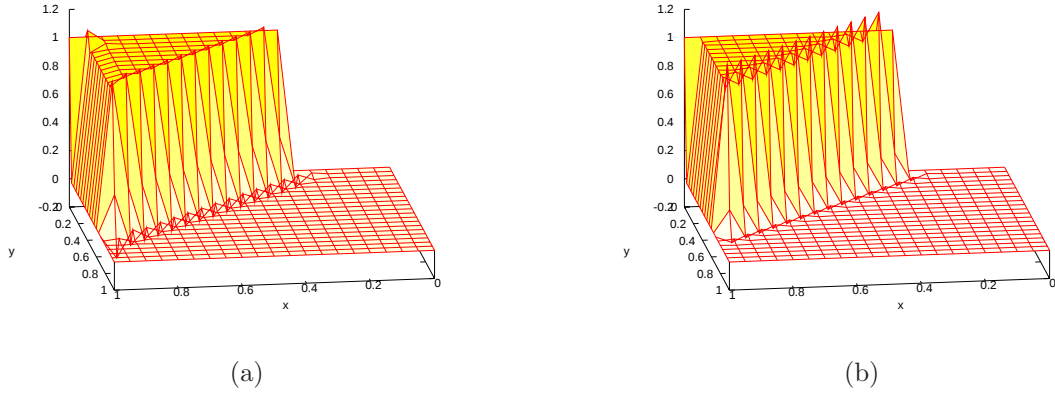


Figura 6.1: Exemplo 01 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1.

6.1.2 Exemplo 02 - Problema de Convecção-Difusão com Termo de Fonte

Neste exemplo, o método NSGS é utilizado para resolver o problema apresentado no Exemplo 2 da Seção 3.3 - Capítulo 3, que consiste num problema de convecção-difusão com convecção dominante e termo de fonte diferente de zero.

As soluções obtidas pelos métodos SUPG e SGS são mostradas nas Figuras 3.12, 3.13 e 3.14 do Capítulo 3. As soluções (u_H) obtidas pelo método NSGS são mostradas nas Figuras 6.3 e 6.5, usando os Algoritmos 1 e 2, respectivamente. Na Figura 6.3-(a), a solução obtida com imposição forte das condições de contorno apresenta oscilações em toda camada externa. O método usando o Algoritmo 1 estagna. Impondo as condições de contorno de Dirichlet fracamente, as camadas limite externas são bem representadas (Figura 6.3-(b)) e a convergência do procedimento iterativo ocorreu em 2 iterações.

A solução obtida com o Algoritmo 2 também estagna quando a imposição forte das condições de Contorno de Dirichlet é usada e apresenta oscilações espúrias nas camadas limite externas em $y = 0$ e $y = 1$ (Figura 6.5-(a)). Essas oscilações desaparecem completamente quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas fracamente (Figura 6.5-(b)) e o algoritmo iterativo convergiu em 4 iterações.

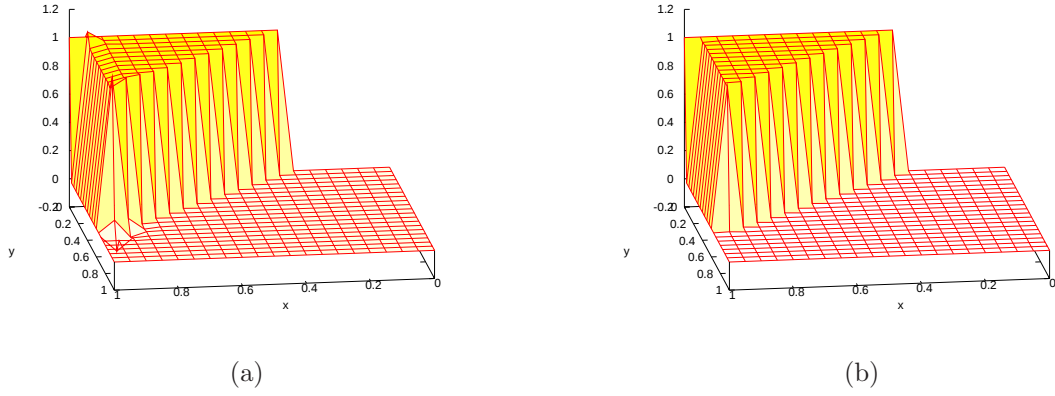


Figura 6.2: Exemplo 01 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2.

As soluções u_h^H associadas às escalas submalhas são apresentadas nas Figuras 6.4 e 6.6, usando os Algoritmos 1 e 2, respectivamente. Observa-se que estas soluções identificam precisamente as regiões que apresentam fortes gradientes.

Os exemplos anteriores mostram que o NSGS, utilizando o Algoritmo 2, conduz à soluções mais precisas do que quando utiliza o Algoritmo 1. Assim, para os exemplos apresentados a seguir, as soluções obtidas com o método NSGS utilizam apenas o Algoritmo 2.

6.1.3 Exemplo 03 - Problema de Difusão-Reação com Termo de Fonte Constante

Considere neste exemplo o problema apresentado no Exemplo 3 da Seção 3.3 - Capítulo 3, cuja solução exata é um patamar em todo o domínio e apresenta camadas limite em todo o contorno. As Figuras 3.15, 3.16 e 3.17 do Capítulo 3 exibem as soluções obtidas pelos métodos de Galerkin e SGS. A Figura 6.7 apresenta as soluções u_h obtida usando o método NSGS com condições de contorno impostas fortemente e fracamente. A solução obtida com imposição forte das condições de contorno não representa de forma adequada a camada limite externa (Figura 6.7-(a)), enquanto que, impondo as condições de contorno de Dirichlet fracamente, a camada limite externa é precisamente representada, estando livre de

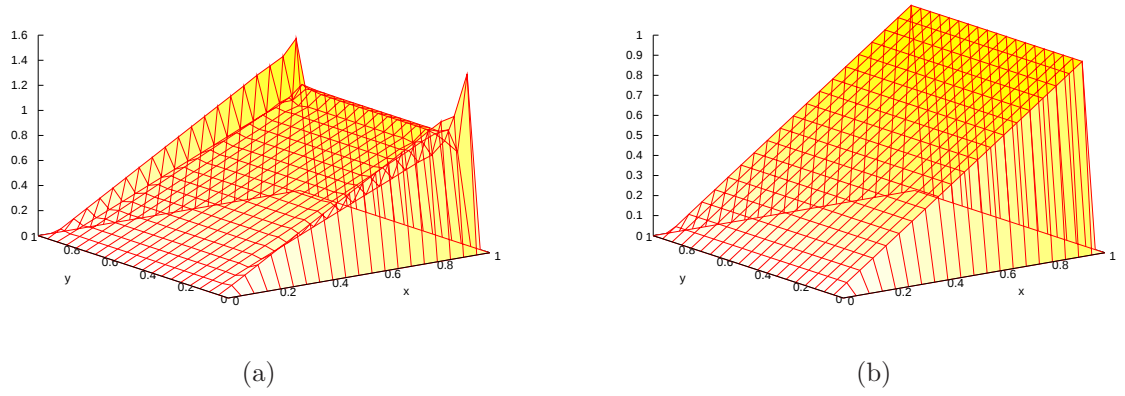


Figura 6.3: Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1.

oscilações (Figura 6.7-(b)). As soluções u_H (NSGS) são apresentadas na Figura 6.8. Da mesma forma, com a imposição forte das condições de contorno de Dirichlet, pequenas oscilações numéricas permanecem na camada limite externa.

6.1.4 Exemplo 04 - Problema de Difusão-Reação com Termo de Fonte Variável

Neste exemplo é simulado um problema de difusão-reação com

$$\epsilon = 10^{-6}, \quad \sigma = 1,$$

em um domínio $\Omega =]0, 1[\times]0, 1[$, com termo de fonte f dado por:

$$f = \begin{cases} x, & \text{se } x \leq 0.5 ; \\ 1 - x, & \text{se } x > 0.5. \end{cases}$$

O campo de velocidades é nulo de modo que este problema caracteriza-se pela dominância dos efeitos reativos sobre os difusivos. As condições de contorno são

$$u(0, y) = u(x, 1) = 1 \text{ e } u(x, 0) = u(1, 0) = 0.$$

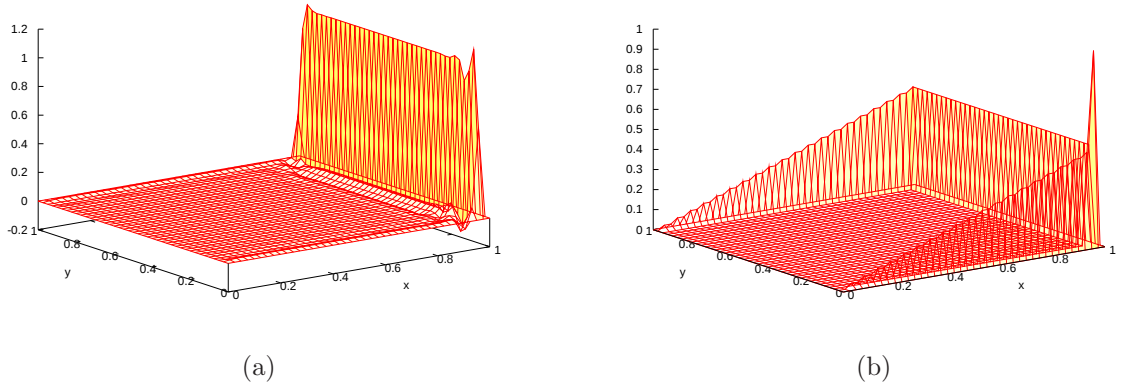


Figura 6.4: Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 1.

A solução aproximada obtida pelo método de Galerkin apresenta oscilações espúrias localizadas na fronteira do domínio (Figura 6.9). Os resultados numéricos mostrando o comportamento dos métodos SGS- $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$ (usando $c_b = 1$) e NSGS (Algoritmo 2) são apresentados nas Figuras 6.10-6.12 e 6.13-6.15, respectivamente. Estes experimentos foram realizados usando uma malha de elementos finitos com $H = 1/10$.

As soluções u_h obtidas pelos métodos SGS e NSGS apresentam um comportamento bastante oscilatório na camada limite externa quando condições de contorno de Dirichlet são impostas fortemente (Figuras 6.10-(a) e 6.13-(a)). Essas oscilações são amenizadas nas soluções u_H conforme podem ser observadas nas Figuras 6.11-(a) e 6.14-(a), respectivamente. A representação das camadas externas melhora substancialmente quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas fracamente, conforme apresentado nas Figuras 6.10-(b), 6.11-(b), 6.13-(b) e 6.14-(b). Neste caso, as soluções obtida por ambos métodos são completamente livres de oscilações espúrias.

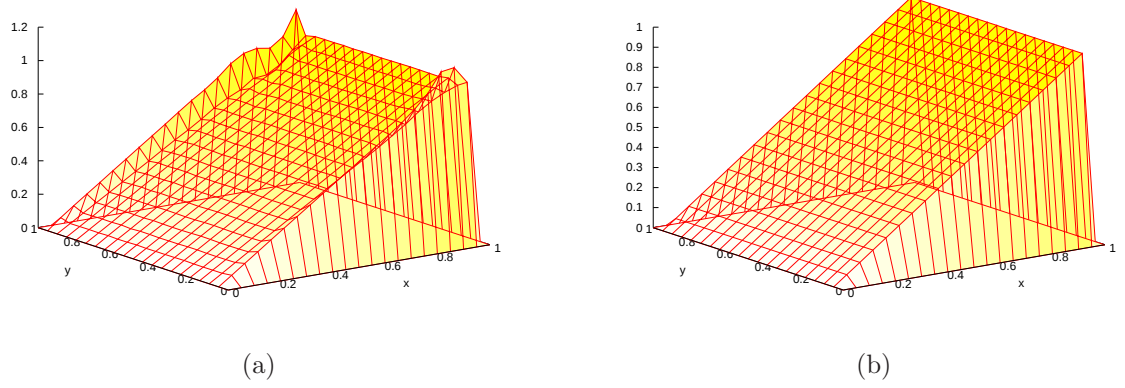


Figura 6.5: Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2.

6.1.5 Exemplo 05 - Problema de Convecção-Difusão com Velocidade Variável

Considere o problema de convecção-difusão com coeficiente de difusão $\epsilon = 10^{-6}$ e termo de fonte $f = 0$. O domínio é definido pela região retangular

$$\Omega = \{(x, y); \quad -1 < x < 1, 0 < y < 1\}$$

e o campo de velocidades é

$$\beta = (2y(1 - x^2), -2x(1 - y^2)).$$

Neste exemplo são consideradas condições de contorno de Dirichlet e Neumann.

As fronteiras de entrada Γ_- e saída Γ_+ são definidas pelos seguintes intervalos

$$\Gamma_- = \{(x, 0); -1 \leq x \leq 0\}$$

e

$$\Gamma_+ = \{(x, 0); 0 < x < 1\},$$

respectivamente. Na fronteira Γ_+ é prescrita a condição de contorno de Neumann

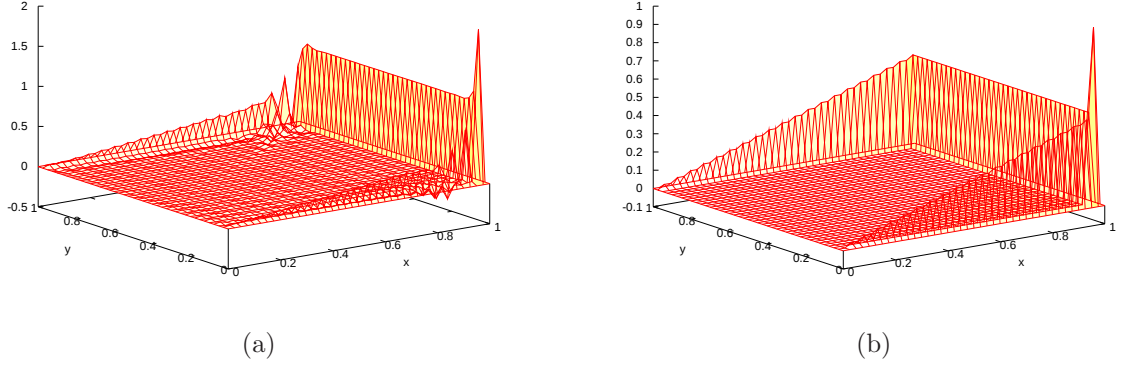


Figura 6.6: Exemplo 02 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet, utilizando Algoritmo 2.

homogênea

$$\frac{\partial u(x, 0)}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad 0 < x < 1.$$

Condições de Dirichlet são prescritas no restante de Γ . Na fronteira de entrada, a grandeza transportada apresenta uma descontinuidade definida por

$$u(x, 0) = \begin{cases} 0, & -1 \leq x < -0,5 ; \\ 1, & -0,5 \leq x \leq 0 . \end{cases}$$

Nas demais regiões da fronteira, prescreve-se

$$u(-1, y) = u(x, 1) = 0 \quad \text{e} \quad u(1, y) = 1.$$

A descontinuidade em Γ_- introduz uma estreita camada limite que se propaga para o interior de Ω . Nos experimentos numéricos foi utilizada uma malha com $H = 1/15$.

A solução obtida pelo método de Galerkin (Figura 6.16) é completamente poluída por oscilações espúrias, como esperado, visto que o problema caracteriza-se pela dominância dos fenômenos convectivos. O método SGS não é capaz de

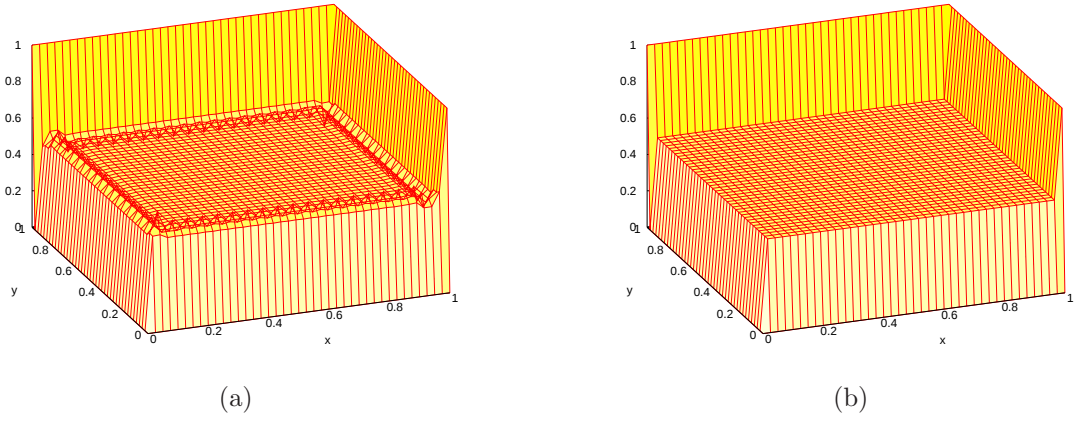


Figura 6.7: Exemplo 03 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

representar de forma adequada a solução deste problema (Figuras 6.17 e 6.18) . As soluções u_h e u_H obtidas com a imposição forte das condições de contorno de Dirichlet apresentam um comportamento bastante oscilatório nas regiões próximas às camadas limites. As oscilações presentes na camada externa são eliminadas quando as condições de contorno de Dirichlet são impostas de forma fraca.

As soluções u_h e u_H obtidas pelo método NSGS com imposição forte das condições de contorno de Dirichlet (Figuras 6.19 e 6.20) apresentam ainda pequenas oscilações próximas às camadas circular interna e externa (lado direito do contorno). Impondo as condições de contorno de Dirichlet fracamente, as oscilações presentes na camada externa são eliminadas completamente. A Figura 6.21 apresenta as soluções submalha u_h^H . Observe como as regiões de altos gradientes ficam evidenciadas, as quais representam aquelas regiões onde o termo de estabilização submalha atua.

6.1.6 Exemplo 06 - Problema Convecção-Difusão com Solução Suave

Este problema simula o transporte, em um problema de convecção-difusão, de uma função seno em um campo de velocidades rotativo. Os dados do problema são:

$$\epsilon = 10^{-8}, \quad f = 0, \quad \Omega =] - 0,5, 0,5[^2$$

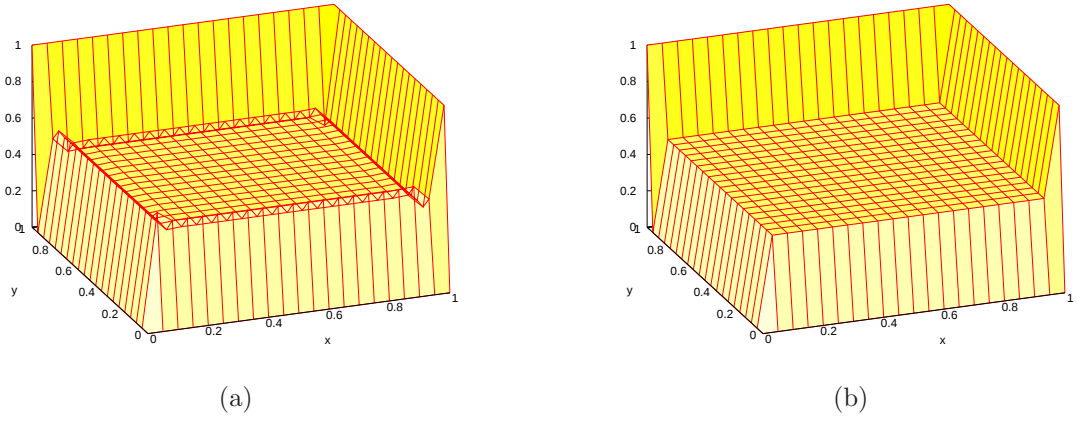


Figura 6.8: Exemplo 03 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

e o campo de velocidades é dado por

$$\beta = (-y, x)$$

As condições de contorno são homogêneas, isto é,

$$u(x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \Gamma.$$

Na fronteira interna $\{(0, y); y \in [-0, 5, 0]\}$ é prescrita a função

$$u(0, y) = -\text{sen}(2\pi y).$$

As soluções aproximadas obtidas com os métodos SUPG, CAU e NSGS são apresentadas nas Figuras 6.22 e 6.23, utilizando malhas com $H = 1/10$ e $H = 1/20$, respectivamente, e utilizando a imposição forte das condições de contorno. Devido à dominância dos efeitos convectivos, a condição de contorno imposta na fronteira interna deve ser propagada ao longo do domínio sem perda em sua amplitude, isto é, os efeitos difusivos sobre o transporte são mínimos. Esta solução é bem representada pelo método SUPG, tomado neste exemplo como referência. Observa-se que a solução obtida com o método CAU introduz uma difusão efetiva que

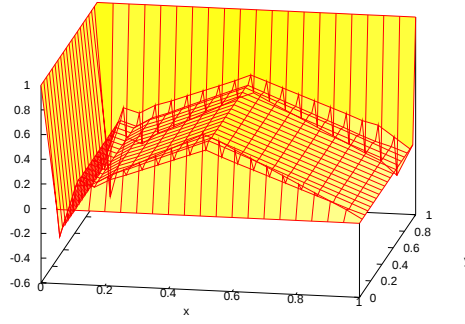
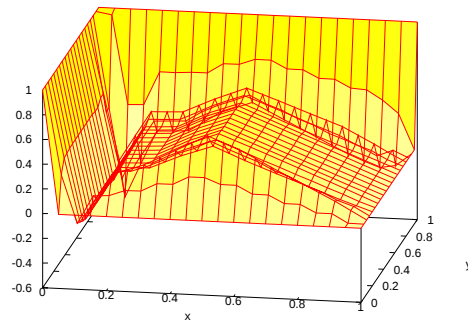
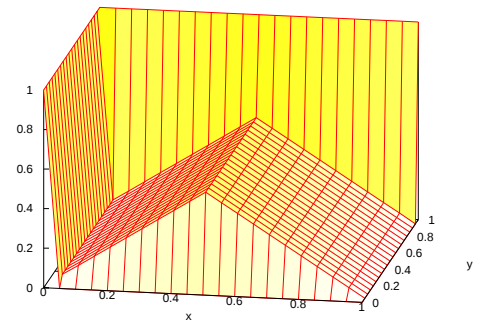


Figura 6.9: Exemplo 04 - Solução obtida com o método de Galerkin.

provoca uma dissipação não física. A solução obtida pelo método NSGS tem um comportamento idêntico ao método SUPG, não apresentando dessa forma nenhuma dissipação não-física relevante. O mesmo comportamento é observado na solução das escalas resolvidas, as quais, por construção, são as que devem estar livres das flutuações restritas idealmente às escalas submalha. A Figura 6.24 evidencia esta observação. Nela são apresentadas as soluções aproximadas na seção $y = -0,25$ obtidas com os métodos SUPG, CAU e NSGS. Na Figura 6.24-(b) são comparadas as soluções (com resolução da malha de $h = 1/40$) obtidas com os métodos SUPG e CAU com a solução das escalas resolvidas (u_H) obtida pelo método NSGS e, portanto, de menor resolução ($H = 2h = 1/20$). Como mencionado anteriormente, a solução obtida pelo método NSGS é qualitativamente similar à solução obtida pelo método SUPG. A Figura 6.24-(a) apresenta uma comparação mais justa, na qual se compara as soluções obtidas com a malha menos refinada na seção $y = -0,25$. Isto é, todas as soluções comparadas foram obtidas com a mesma resolução ($h = 1/20$). Nesta situação, fica mais evidenciada a distinção entre as duas metodologias não-lineares. Observa-se também que a solução u_h obtida com a malha mais esparsa apresentou pequenas flutuações não-físicas próximas à fronteira externa, as quais são filtradas na solução resolvida. Deve-se ressaltar que elas são totalmente eliminadas através da imposição fraca, apenas na fronteira externa, das condições de contorno de Dirichlet.

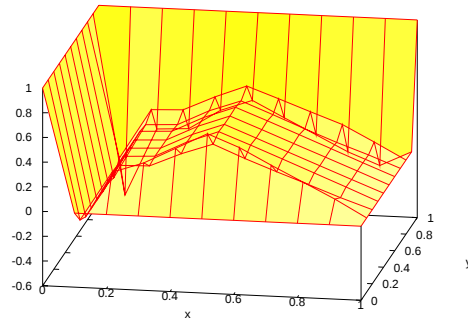


(a)

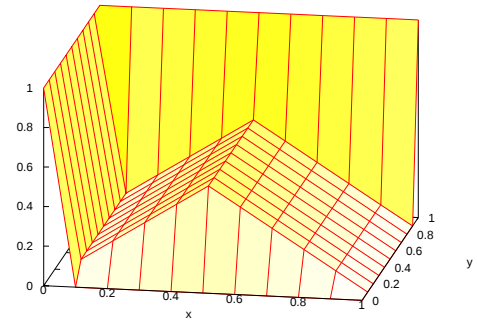


(b)

Figura 6.10: Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

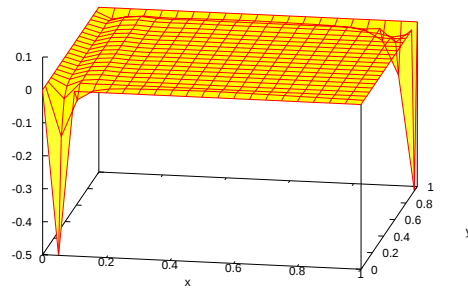


(a)

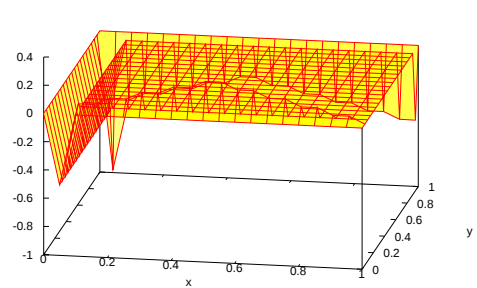


(b)

Figura 6.11: Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

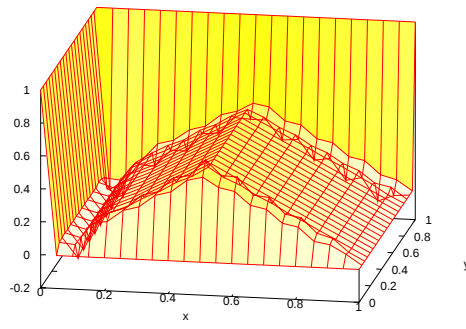


(a)

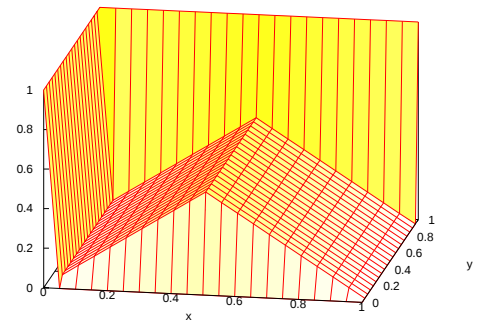


(b)

Figura 6.12: Exemplo 04 - Método SGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

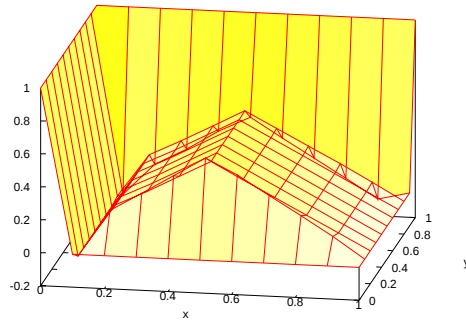


(a)

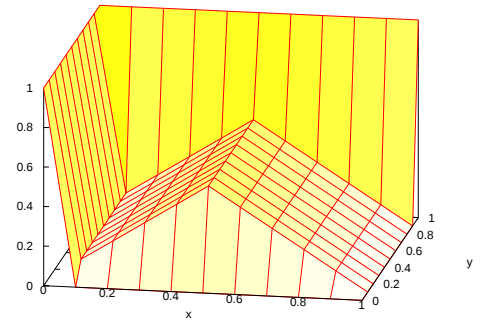


(b)

Figura 6.13: Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

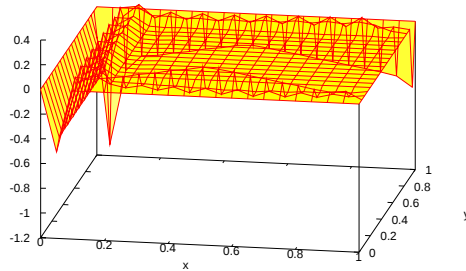


(a)

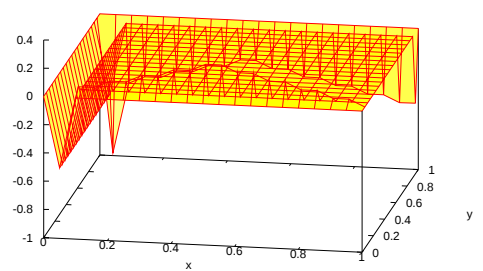


(b)

Figura 6.14: Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.



(a)



(b)

Figura 6.15: Exemplo 04 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

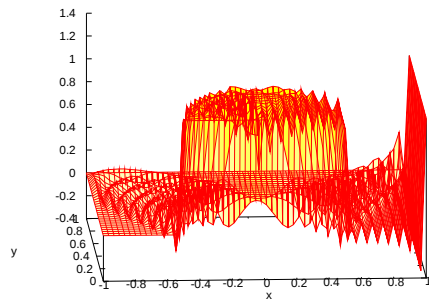
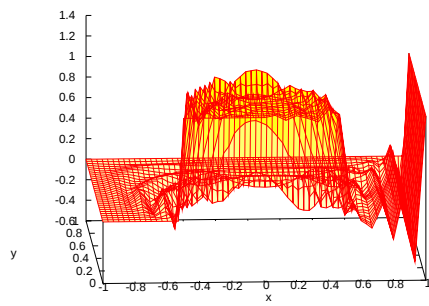
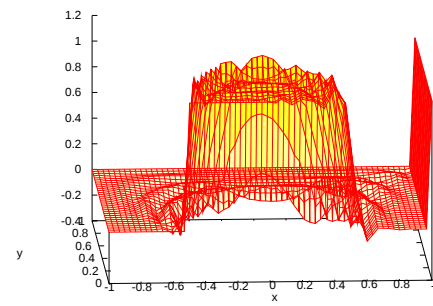


Figura 6.16: Exemplo 5 - Solução obtida com o Método de Galerkin.

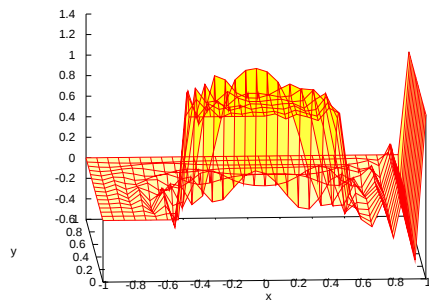


(a)

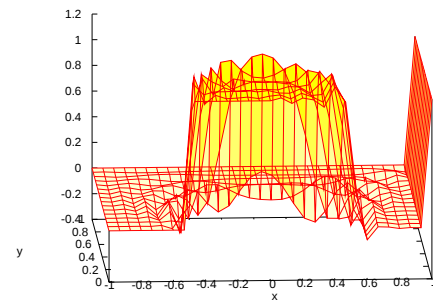


(b)

Figura 6.17: Exemplo 5 - Método SGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

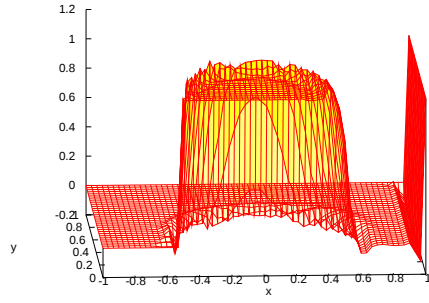


(a)

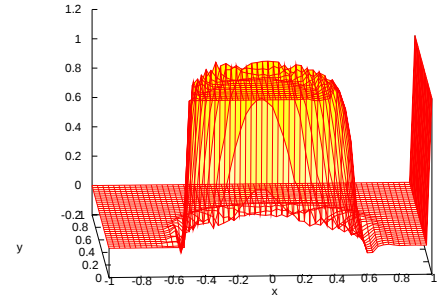


(b)

Figura 6.18: Exemplo 5 - Método SGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

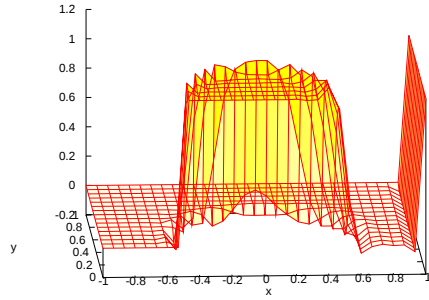


(a)

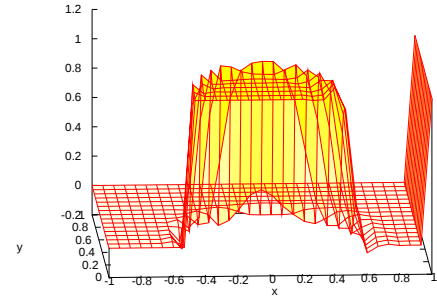


(b)

Figura 6.19: Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_h com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

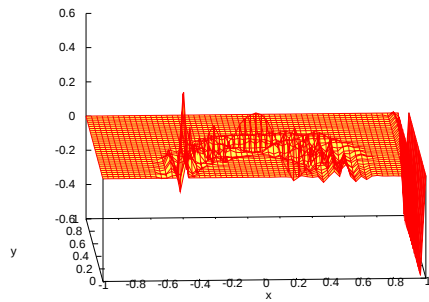


(a)

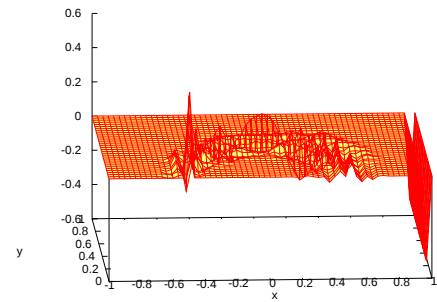


(b)

Figura 6.20: Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.



(a)



(b)

Figura 6.21: Exemplo 5 - Método NSGS: soluções u_h^H com imposição forte (a) e fraca (b) das condições de contorno de Dirichlet.

6.1.7 Exemplo 07 - Problema de Convecção-Difusão-Reação

Neste exemplo é considerado um problema de convecção-difusão-reação, cuja solução exata e respectiva curva de nível são apresentadas na Figura 6.25-(a)-(b). Os coeficientes de difusão e reação da equação são $\epsilon = 10^{-4}$ e $\sigma = 2$, respectivamente. O campo de velocidades é definido por

$$\beta = (-(2y - 1)(r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2), (2x - 1)(r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2),$$

para $0 \leq (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2 \leq r_0^2$ e $\beta = (0, 0)$ caso contrário. O termo de força e as condições de contorno de Dirichlet são escolhidas de forma que

$$u(x, y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg [a(r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2)],$$

com $x_0 = y_0 = 0.5$, $r_0 = 0.25$ e $a = 1000$, é a solução exata do problema.

As soluções aproximadas, utilizando-se uma malha com $H = 1/30$, juntamente com suas curvas de nível, usando os métodos de Galerkin, SGS e NSGS são mostradas nas Figuras 6.25 e 6.26. Esta solução é bem representada pelo método de Galerkin. A solução obtida pelo método NSGS (solução u_h) (ver Figuras 6.26-(c) e 6.26-(d)) é mais precisa que a obtida pelo método SGS (Figuras 6.25-(c) e 6.26-(d)).

6.2 Estudo de Convergência

Nesta seção são apresentados três experimentos para avaliação das taxas de convergência do método NSGS, utilizando a norma usual do espaço L^2 e a semi-norma usual do espaço H^1 . Utilizou-se aqui a segunda versão do método NSGS (Algoritmo 2) com condições de contorno do tipo Dirichlet impostas fortemente. Os resultados são comparados com as taxas de outros métodos tais como Galerkin, SUPG e SGS- $\mathbb{P}_1$ /*dois-níveis*. Todos os experimentos numéricos foram realizados no domínio $\Omega =]0, 1[^2$ e foram utilizadas malhas estruturadas como a apresentada na Figura 3.6 com 5, 8, 10, 16, 20 e 24 partições da escala resolvida em cada direção.

Em todos os casos, foi utilizada a regra de integração numérica por quadratura gaussiana com 7 pontos de integração.

6.2.1 Exemplo 08 - Problema de Convecção-Difusão-Reação

Considere o problema de convecção-difusão-reação com $\beta = (1, 0)$, $\sigma = 1$ e o coeficiente de difusão dado por $\epsilon = 10^{-3}, 10^{-5}$ e 10^{-7} . O termo de fonte f e as condições de contorno de Dirichlet são escolhidas de forma que a solução exata (Figura 6.27) seja

$$u(x, y) = \exp\left(-\frac{(x - 0.5)^2}{a} - \frac{b(y - 0.5)^2}{a}\right), \quad a = 0.2 \quad \text{e} \quad b = 3.$$

As taxas de convergência para os vários valores de ϵ são apresentadas nas Figuras 6.28, 6.29 e 6.30. Taxa de convergência ótima $O(h^2)$ para as normas $\|u - u_h\|_0$ e $\|u - u_H\|_0$ são obtidas para os métodos NSGS e SGS (com $c_b = 1$) em todos os experimentos realizados. Isto acontece também com o método de Galerkin e SUPG para a norma $\|u - u_h\|_0$. Na norma $\|\nabla u - \nabla u_h\|_0$, todos os métodos apresentam taxas de convergência aproximadamente $O(h)$. Para a norma $\|\nabla u - \nabla u_H\|_0$ calculada para os métodos NSGS e SGS obteve-se taxa $O(h)$. Observa que as taxas obtidas pelo NSGS usando a solução u_H apresentam comportamento mais estável quando comparadas às obtidas com a solução u_h . A taxa ótima $O(h^2)$ na norma do espaço L^2 era esperada apenas para o método de Galerkin, uma vez que os métodos NSGS, SGS e SUPG de acordo com a análise numérica, apresentam taxa $O(h^{1.5})$.

6.2.2 Exemplo 09 - Problema de Convecção-Difusão

Neste estudo de convergência é considerado um problema de convecção-difusão com campo de velocidades definido por $\beta = (1, 0)$. Experimentos são realizados com coeficientes de difusão iguais a $\epsilon = 10^{-3}$ e $\epsilon = 10^{-6}$. O termo de fonte e condições de contorno de Dirichlet são escolhidos de forma que a solução

exata seja expressa por

$$u(x, y) = \text{sen}(\pi x) \text{sen}(\pi y),$$

conforme apresentada na Figura 6.31. As Figuras 6.32 e 6.33 apresentam as taxas de convergência nas normas consideradas.

Quando $\epsilon = 10^{-3}$, os resultados apresentados na Figura 6.32 indicam que taxas de convergência ótima $O(h^2)$ para a norma $\|u - u_H\|_0$ e próxima a $O(h^2)$ para $\|u - u_h\|_0$ são obtidas para os métodos NSGS e SGS ($c_b = 1$). Os métodos de Galerkin e SUPG têm taxa ótima, $O(h^2)$, para a norma $\|u - u_h\|_0$. Na norma $\|\nabla u - \nabla u_h\|_0$, todos os métodos apresentam taxa $O(h)$. Na norma $\|\nabla u - \nabla u_H\|_0$, calculada apenas para os métodos NSGS e SGS, ambos os métodos apresentam taxa $O(h)$. Para $\epsilon = 10^{-6}$, existe um relevante deterioramento das taxas de convergência para o método de Galerkin, em ambas as normas. Os métodos NSGS, SGS e SUPG apresentam taxas $O(h^2)$ na norma do espaço L^2 e $O(h)$ na semi-norma do espaço H^1 .

6.2.3 Exemplo 10 - Problema de Convecção-Reação

Considere o problema de convecção-reação com $\beta = (1, 0)$ e $\sigma = 1$. O termo de fonte f e as condições de contorno de Dirichlet são definidas de forma que a solução exata seja a mesma do Exemplo 08. As taxas de convergência são apresentadas na Figura 6.34.

Neste experimento, avalia-se o comportamento das taxas do método SGS com diferentes coeficientes, a saber $c_b = 1$ e $c_b = 0, 1$. Todos os métodos (NSGS, SGS, SUPG e Galerkin) apresentam taxas de convergência ótima $O(h^2)$ para a norma $\|\cdot\|_0$ e taxa $O(h)$ para a semi-norma de H^1 .

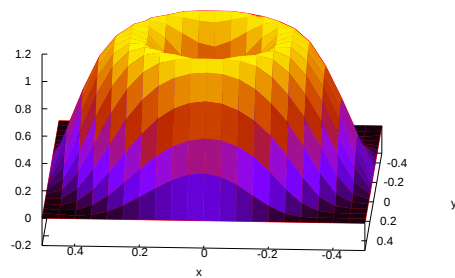
6.3 Comentários Adicionais

O método NSGS proposto nesta tese, assim como o SGS, é baseado na decomposição dos espaços de aproximação em duas escalas, a resolvida e a submalha. Para a aproximação em dois níveis utilizada nesta tese, o custo

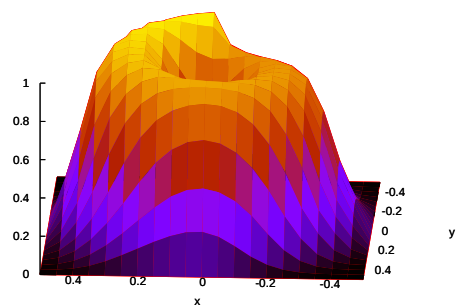
computacional advindo desta estratégia é claro: é necessário resolver uma malha com resolução h para obter a solução resolvida na resolução $H = 2h$. Neste contexto, é essencial o desenvolvimento de estratégias para a resolução eficiente da metodologia proposta. Isto engloba o desenvolvimento tanto de estruturas de dados eficientes para o armazenamento e gerenciamento dos dados, quanto o de métodos apropriados para a resolução de sistemas de equações algébricas. A identificação dos operadores espaciais que estabelecem as correspondências entre escalas pode vir a contribuir nesta direção. Note que as variáveis resolvidas e não resolvidas estão relacionadas umas com as outras por um operador de compressão (que atua da micro para a macro escala) e por um operador de reconstrução (definido da macro para a micro). Assim, a identificação destes operadores pode vir a permitir o estabelecimento, por exemplo, da correspondência entre diversos métodos de projeção tais como o de múltiplos níveis e multigrid com os métodos estabilizados e multiescalas.

A segunda versão do método NSGS (Algoritmo 2), a qual recupera o método de Galerkin quando a solução é regular o suficiente, mostrou-se menos difusiva que a primeira versão, conforme desejado. Entretanto, a estagnação da solução aproximada foi observada em algumas situações. Este comportamento também é observado em alguns métodos de captura de discontinuidades, como o CAU. Nos métodos estabilizados, a estagnação é resolvida congelando-se a difusão efetiva introduzida pelo método de captura quando a estagnação é verificada. No presente caso multiescala, este comportamento, assim como as técnicas para contorná-lo e para aceleração de convergência, devem ser investigados em trabalhos futuros.

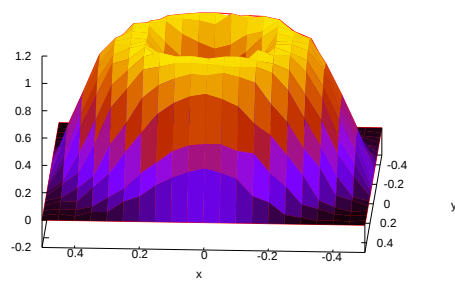
Finalmente, a incorporação no método NSGS (Algoritmo 2) da metodologia de introdução fraca das condições de contorno de Dirichlet conduziu à uma metodologia precisa para a resolução de problemas de transporte predominantemente convectivos ou reativos. Observou-se ainda uma aceleração da convergência do processo iterativo em relação ao procedimento usual de introdução de forma forte das condições de contorno do tipo Dirichlet.



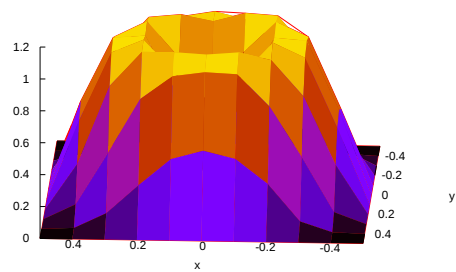
(a) Método SUPG



(b) Método CAU



(c) Método NSGS - (u_h)



(d) Método NSGS - (u_H)

Figura 6.22: Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas (malha com $H = 1/10$).

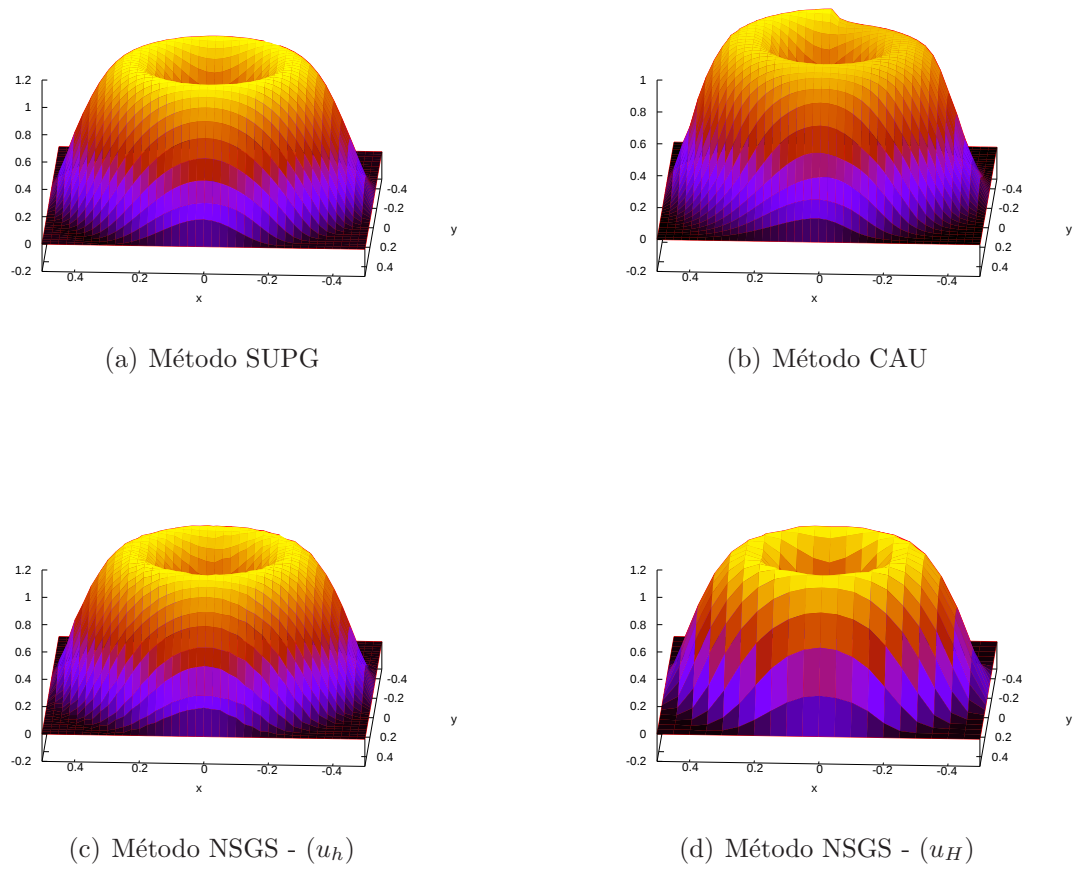


Figura 6.23: Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas (malha com $H = 1/20$).

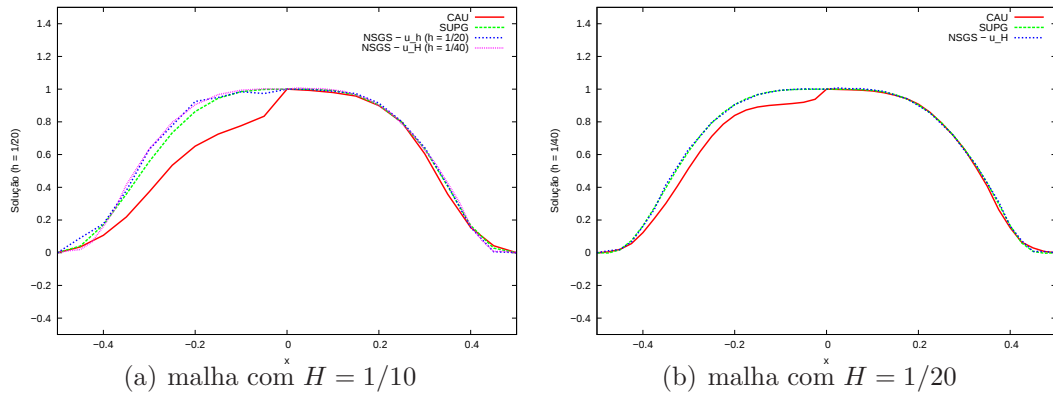
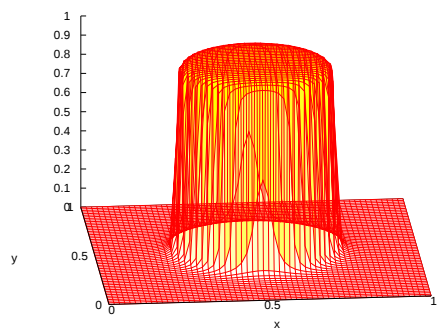
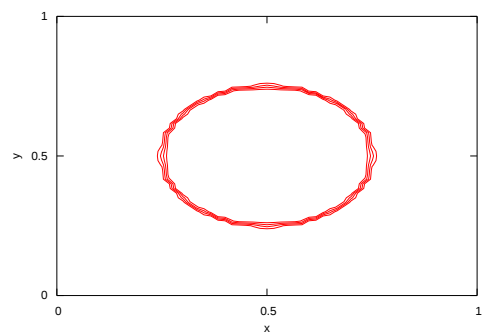


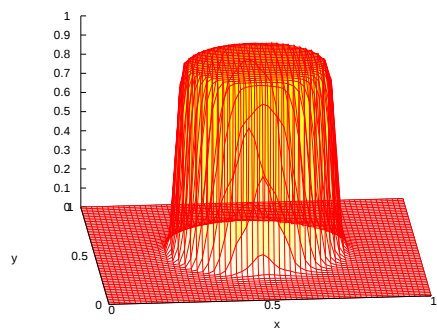
Figura 6.24: Exemplo 06 - Transporte rotativo: soluções aproximadas na seção $y = -0.25$.



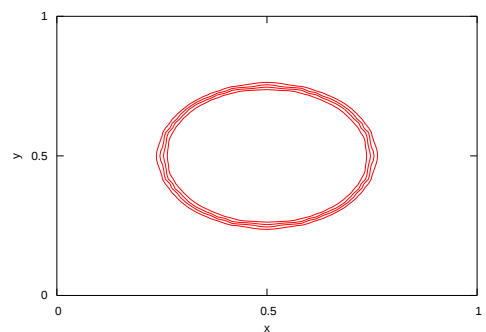
(a) Solução exata



(b) Curvas de Nível da solução exata

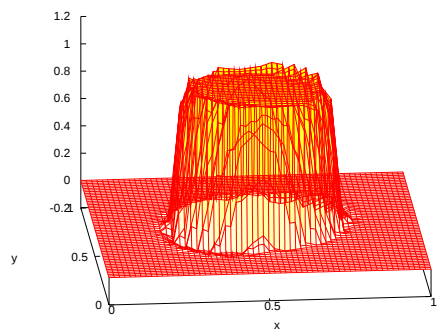


(c) Método de Galerkin

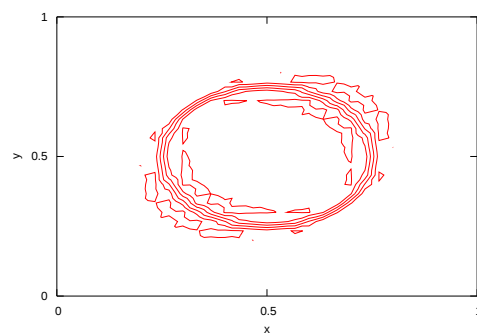


(d) Curvas de Nível da solução de Galerkin

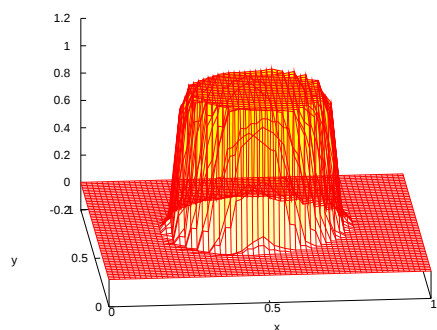
Figura 6.25: Exemplo 07 - Soluções exata e de Galerkin.



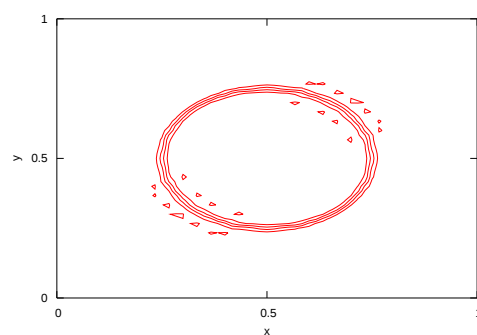
(a) Método SGS ($c_b = 1$)



(b) Curvas de Nível da solução SGS



(c) Método NSGS - (u_h)



(d) Curvas de Nível da solução NSGS

Figura 6.26: Exemplo 07 - Soluções utilizando os métodos SGS e NSGS.

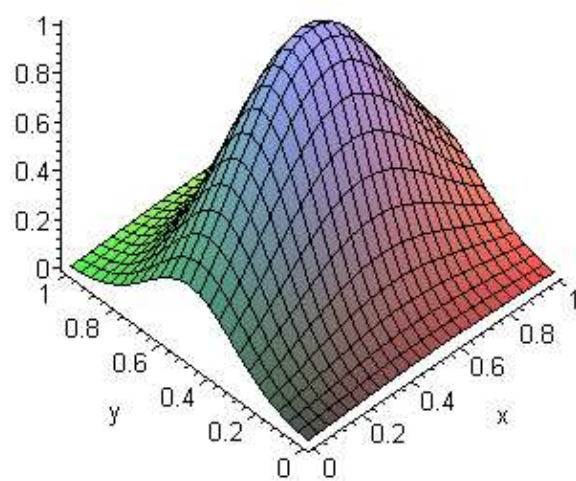


Figura 6.27: Exemplos 08 e 10 - solução exata.

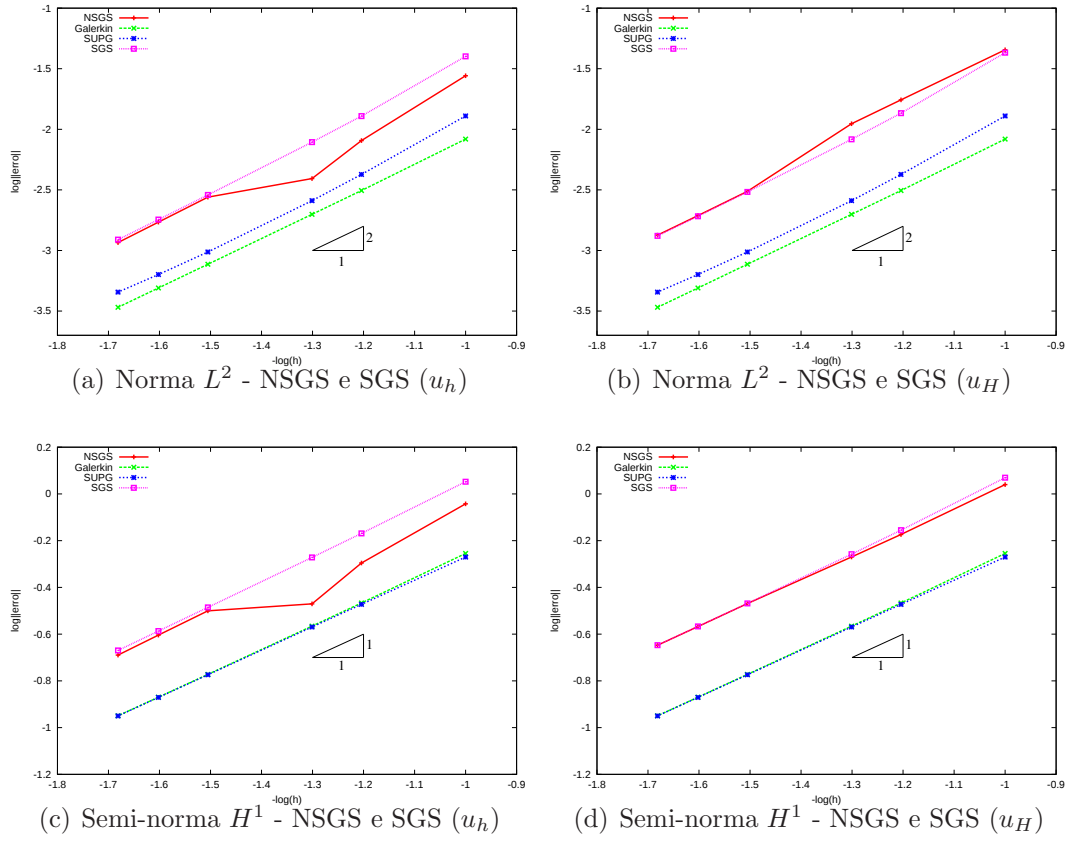


Figura 6.28: Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-3}$.

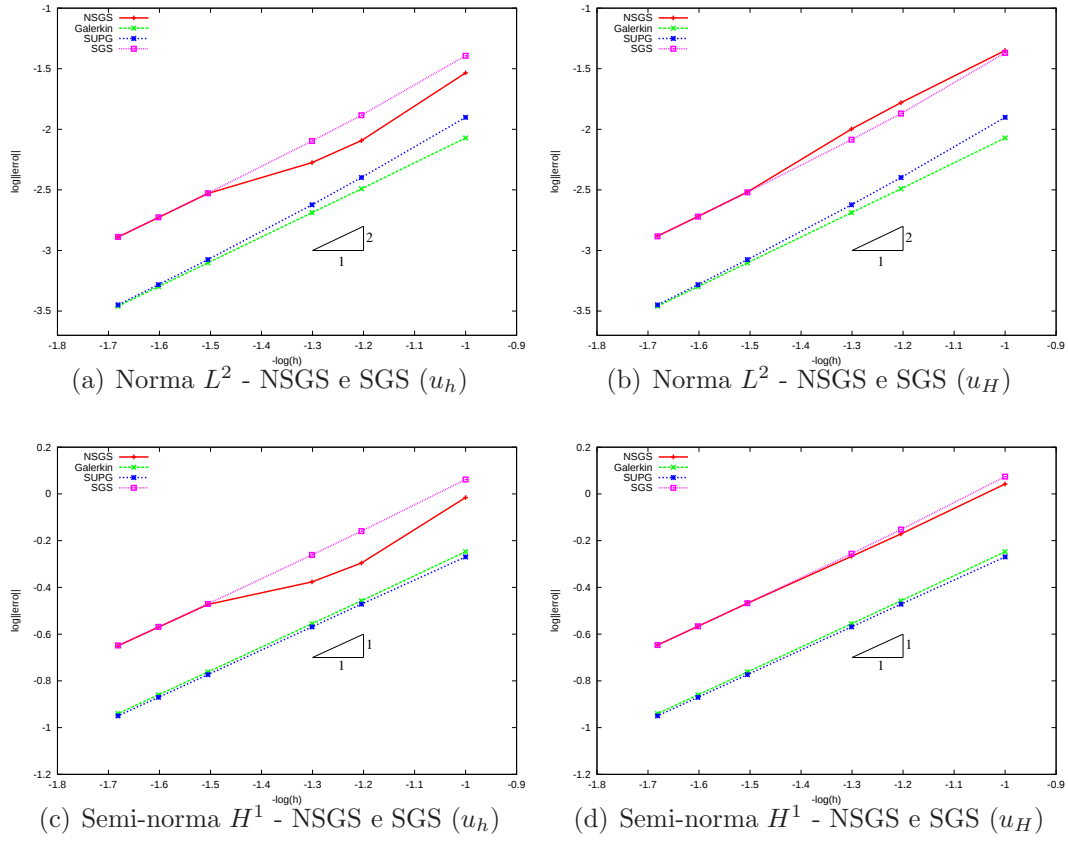


Figura 6.29: Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-5}$.

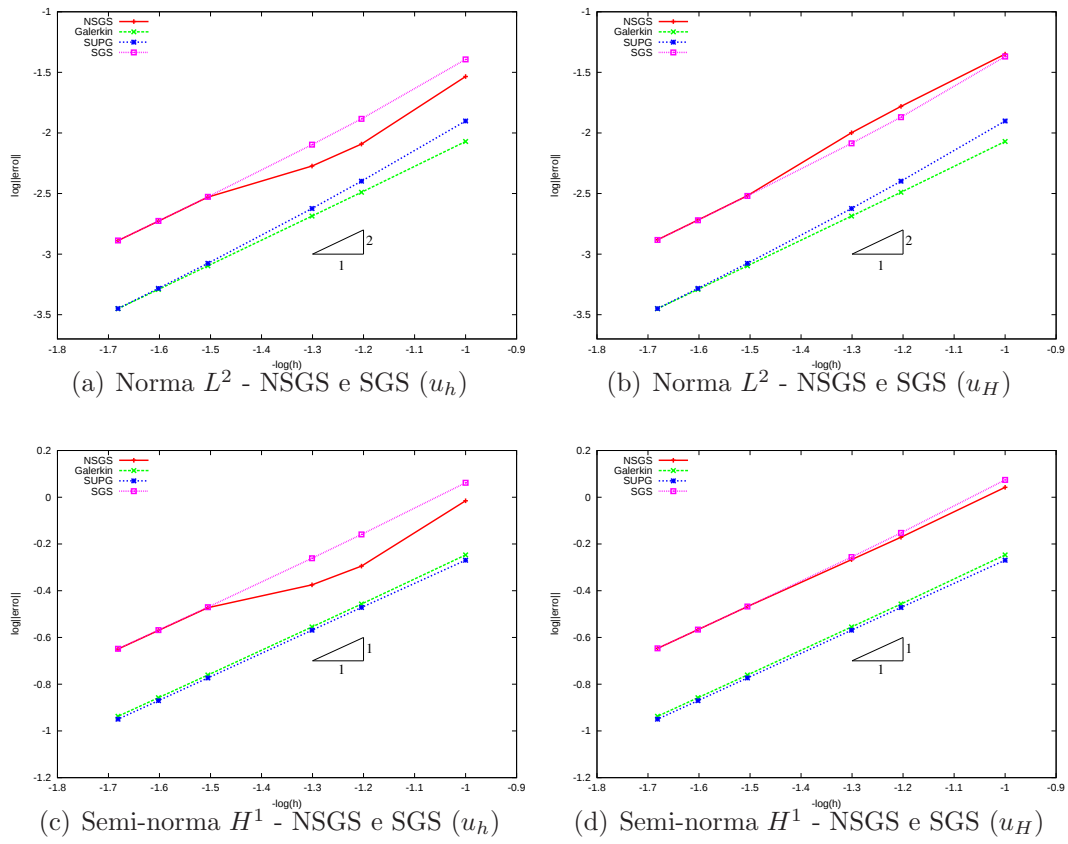


Figura 6.30: Exemplo 08 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-7}$.

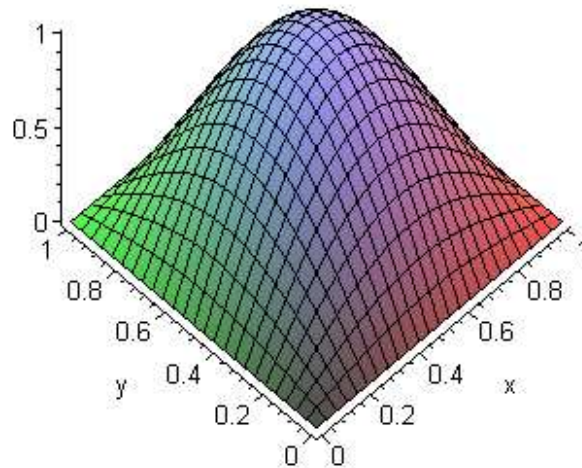
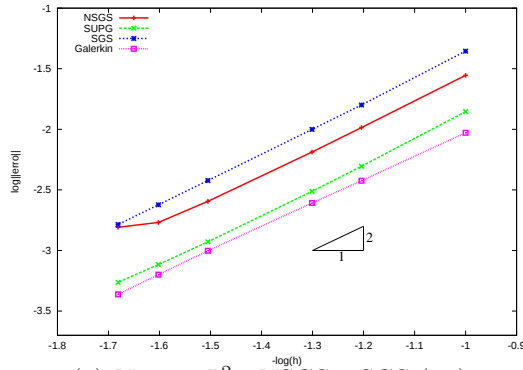
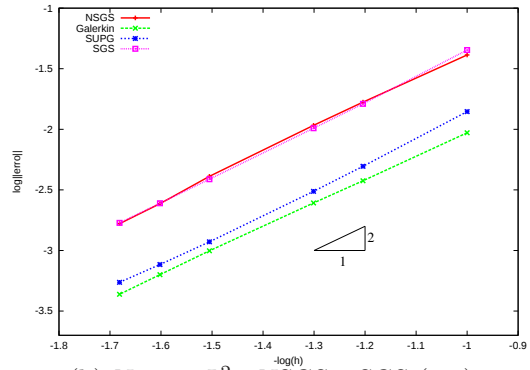


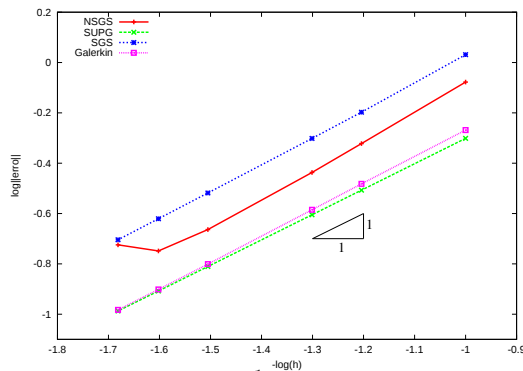
Figura 6.31: Exemplo 09 - solução exata.



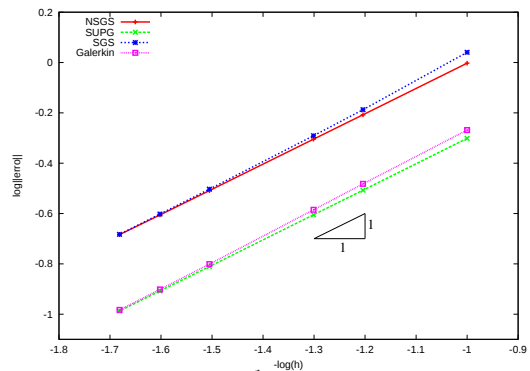
(a) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_h)



(b) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_H)

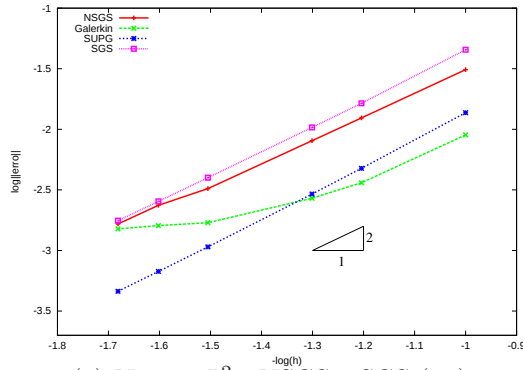


(c) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_h)

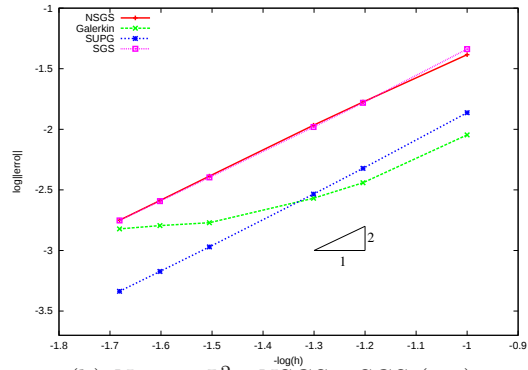


(d) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_H)

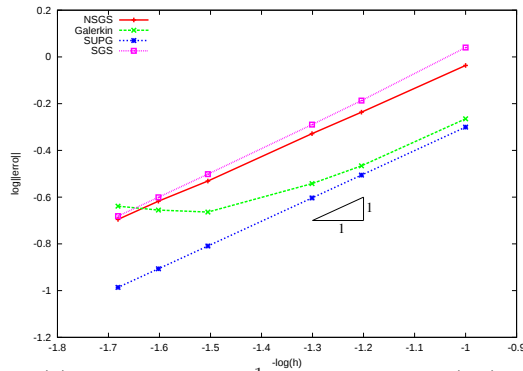
Figura 6.32: Exemplo 09 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-3}$.



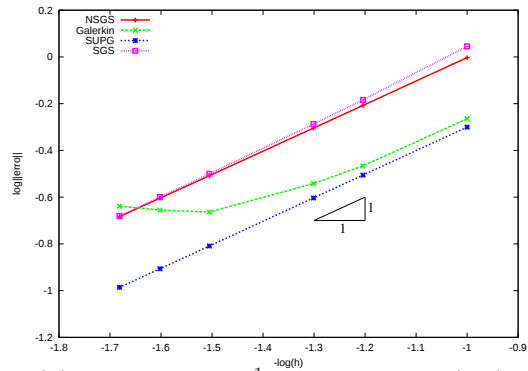
(a) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_h)



(b) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_H)

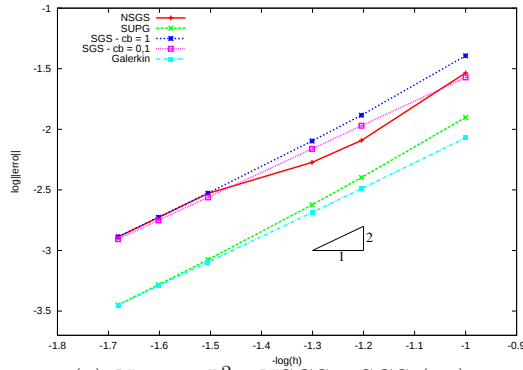


(c) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_h)

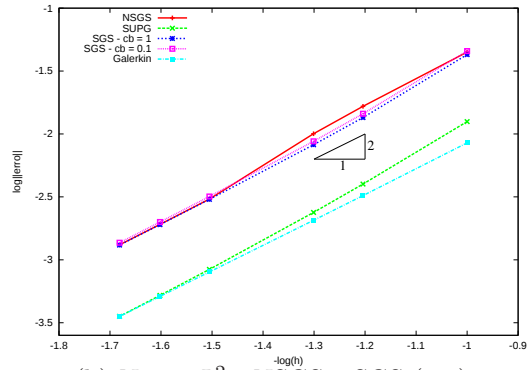


(d) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_H)

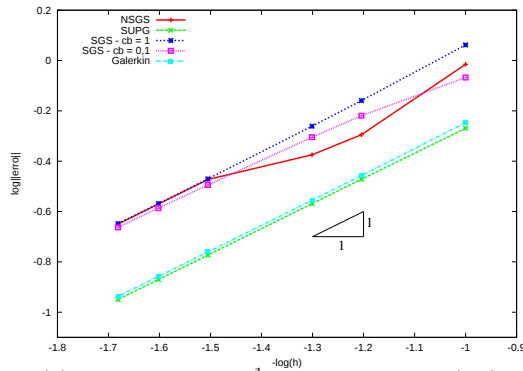
Figura 6.33: Exemplo 09 - Taxas de convergência - $\epsilon = 10^{-6}$.



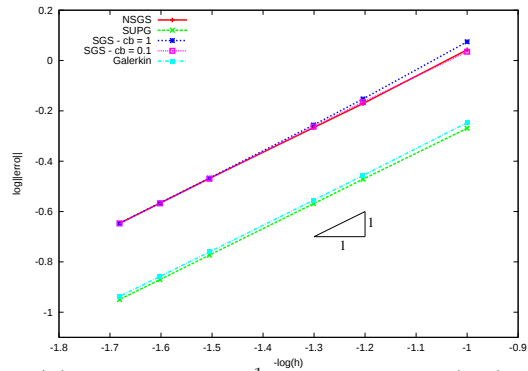
(a) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_h)



(b) Norma L^2 - NSGS e SGS (u_H)



(c) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_h)



(d) Semi-norma H^1 - NSGS e SGS (u_H)

Figura 6.34: Exemplo 10 - Taxas de convergência.

Capítulo 7

Conclusões

Nesta tese é desenvolvido e analisado um método não linear submalha para problemas de convecção-difusão-reação lineares e estacionários. O método, denominado NSGS (*Nonlinear Subgrid Stabilization*), é baseado em uma decomposição em duas escalas dos espaços de aproximação e do campo de velocidades. Uma viscosidade artificial não linear agindo somente na micro escala é adicionada. A quantidade de viscosidade submalha é automaticamente introduzida de acordo com o resíduo da equação associada às escalas resolvidas, à nível de elemento. Neste sentido, ele pode ser considerado um método auto-adaptativo, com a vantagem de ser livre de parâmetro de estabilização.

A metodologia proposta é baseada no método de estabilização linear submalha SGS (Guermond, 1999, 2001) e no método de captura de descontinuidades CAU (Galeão e do Carmo, 1988). O método NSGS, formulado com a imposição fraca das condições de contorno de Dirichlet, mostrou-se adequado na solução de problemas de transporte para uma larga faixa de parâmetros, conduzindo à soluções estáveis, tanto local quanto globalmente.

O método desenvolvido diferencia-se dos métodos propostos na literatura em dois aspectos principais. Em primeiro lugar, a formulação variacional é construída adicionando ao método de Galerkin apenas um operador submalha não-linear. Em segundo lugar, conseguiu-se desenvolver um método totalmente independente de parâmetros. A partir da decomposição em duas escalas do campo de velocidades,

a viscosidade artificial submalha é automaticamente ajustada pela qualidade da solução resolvida (resíduo), sem a necessidade de qualquer ajuste adicional. Em outras palavras, a estabilidade e precisão da solução obtida deve-se à escolha apropriada, e localizada, da difusão artificial submalha.

A análise numérica do método com estimativas de erro *a priori* é apresentada. Estas estimativas são equivalentes às obtidas para o método linear SGS e vários métodos estabilizados.

O método desenvolvido nesta tese mostrou-se bastante promissor, apresentando várias perspectivas para desenvolvimentos futuros. Por ser uma metodologia bastante recente, muitos aspectos importantes pertinentes a qualquer desenvolvimento de um método numérico, são temas de investigações futuras.

Um primeiro tema refere-se às extensões naturais do método desenvolvido para problemas transientes e não lineares. A utilização de diferentes espaços de elementos finitos deve ser avaliada e a dependência do método com a malha deve também ser investigada para uma futura utilização do método no contexto de malhas não estruturadas. Além disso, como observamos que a componente submalha da solução traz consigo informações relevantes sobre a qualidade da solução resolvida, tais indicações podem ser incorporadas em um processo de adaptação de malha na busca de soluções precisas com custo mínimo.

Um outro aspecto importantíssimo para garantir a usabilidade futura da metodologia desenvolvida refere-se às suas características computacionais. A resolução de métodos submalha pressupõe que os espaços de elementos finitos sejam decompostos em dois níveis. Uma possível escolha para estes espaços (adotada nesta tese) está associada à construção de duas discretizações (aninhadas), havendo a necessidade do desenvolvimento de estruturas de dados tais que a manipulação de dados seja eficiente do ponto de vista computacional. Neste contexto, é fundamental o estudo e análise de estruturas de dados eficientes para manipular os dados das escalas macro e micro. Este aspecto está intrinsicamente associado ao método de solução do sistema de equações algébricas resultante e aos

precondicionadores utilizados.

Finalmente, mas não menos importante, a metodologia desenvolvida, que unifica idéias da modelagem física e da aproximação numérica, pode ser estendida para a solução de problemas (acoplados ou não) de transporte e circulação com presença de efeitos turbulentos.

Referências Bibliográficas

- N. A. Adams. The use of les subgrid-scale models for shock capturing. **Int. J. for Num. Meth. in Fluids**, 39:783–397, 2002.
- R. C. Almeida e A. C. Galeão. An adaptive Petrov-Galerkin formulation for the compressible Euler and Navier-Stokes equations. **Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering**, páginas 157–176, 1996.
- R. C. Almeida e R. S. Silva. A stable Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, páginas 291–304, 1997.
- D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, e L. D. Marini. Unifield analysis of discontinuous galerkin methods for elliptic problems. **SIAM J. Numer. Anal.**, 39:1749–1779, 2002.
- I. Babuška. The finite element method with penalty. **Math. Comp.**, 27:221–228, 1973.
- Y. Bazilevs e T. J. R. Hughes. Weak imposition of dirichlet boundary conditions in fluid mechanics. **Computers & Fluids**, 36:12–26, 2007.
- F. Brezzi, L. P. Franca, T. J. R. Hughes, e A. Russo. $b = \int g$. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 145:329–339, 1997.
- F. Brezzi, P. Houston, D. Marini, e E. Suli. Modeling subgrid viscosity for advection-diffusion problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 190:1601–1610, 2000.

- F. Brezzi e L. D. Marini. Augmented spaces, two-level methods and stabilizing subgrids. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 40: 31–46, 2002a.
- F. Brezzi e L. D. Marini. Subgrid phenomena and numerical schemes. **Computational Science and Engineering (I. Babüska, P.G. Ciarlet and T. Miyoshi eds.)**, 19:73–90, 2002b.
- F. Brezzi, L. D. Marini, e G. Sangalli. Link-cutting bubbles for the stabilization of convection-diffusion-reaction problems. **Mathematical Models and Methods in Applied Science**, 13:445–461, 2003.
- F. Brezzi e A. Russo. Choosing bubbles for advection-diffusion problems. **Math. Models Methods Appl. Sci.**, 4:571–587, 1994.
- A. N. Brooks e T. J. R. Hughes. 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**, 32:199–259, 1982.
- E. Burman. A unifold analysis for conforming and nonconforming stabilized finite element methods using interior penalty. **SIAM J. Numer. Anal.**, 43:2012–2033, 2005.
- E. Burman e A. Ern. Nonlinear diffusion and discrete maximum principle for stabilized galerkin approximations of the convection-diffusion-reaction equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 191:3833–3855, 2002.
- E. Burman e A. Ern. Stabilized Galerkin approximation of convection-diffusion-reaction equations: Discrete maximum principle and convergence. **Mathematics of Computation**, 74:1637–1652, 2005.
- E. Burman e P. Hansbo. Edge stabilization for galerkin approximations of

- convection-diffusion-reaction problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 193:1435–1453, 2004.
- V. M. Calo. **Residual-Based Multiscale Turbulence Modeling: Finite Volume Simulation of Bypass Transition**. Phd thesis, Civil and Environmental Engineering Department, Stanford University, 2004.
- A. Cangiani. **The Residual-Free Bubble Method for Problems with Multiple Scales**. Phd thesis, St Hugh’s College, University of Oxford, 2004.
- G. F. Carey e J. T. Oden. **Finite elements: an introduction**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- M. E. Cawood, V. J. Ervin, e W. J. Layton. A nonlinear subgrid-scale model for convection dominated, convection diffusion problems. Relatório Técnico TR2002-12-CEL, Clemson University, 2002.
- F. Chalot, B. Marquez, M. Ravachol, F. Ducros, F. Nicoud, e T. Poinso. Consistent finite element approach to large eddy simulation. In **29th AIAA Fluid Dynamics Conference**, Albuquerque, New Mexico, USA, 1998.
- P. G. Ciarlet. **The Finite Element Method for Elliptic Problems**. North Holland, 1978.
- R. Codina. A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection-diffusion equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 110:325–342, 1993.
- E. G. D. do Carmo e G. D. Alvarez. 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**, 192:3379–3396, 2003.
- E. G. Dutra do Carmo. **Novos Métodos de Elementos Finitos para**

- Problemas Difusivos-Convectivos.** Phd thesis, COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1988.
- E. G. Dutra do Carmo e A. C. Galeão. Uma formulação consistente do método de elementos finitos para problemas de transporte difusivo-convectivo. **Revista Brasileira de Ciências Mecânicas**, 4:309–340, 1986.
- E. G. Dutra do Carmo e A. C. Galeão. Feedback Petrov-Galerkin methods for convection dominated problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 88:1–16, 1991.
- J. Donea e A. Huerta. **Finite Element Methods for Flow Problems.** John Wiley & Sons, Chichester, 2003.
- J. Douglas e J.P. Wang. An absolutely stabilized finite element method for the stokes problem. **Math. Comp.**, 52:495–508, 1989.
- Alexandre Ern e Jean-Luc Guermond. **Theory and Practice of Finite Elements.** Springer-Verlag, New York, 2004.
- L. P. Franca e E. G. Dutra do Carmo. The Galerkin gradient least-squares method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 74:41–54, 1989.
- L. P. Franca e C. Farhat. Bubble functions prompt unusual stabilized finite element methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 123:299–308, 1995.
- L. P. Franca, S. L. Frey, e T. J. R. Hughes. Stabilized finite element methods: I. application to the advective-diffusive model. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 95:253–276, 1992.
- L. P. Franca, A. Nesliturk, e M. Stynes. On the stability of residual-free bubbles for convection-diffusion problems and their approximation by a two-

- level finite element method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 166:35–49, 1998.
- L. P. Franca, J. V. A. Ramalho, e F. Valentin. Enriched finite element methods for unsteady reaction-diffusion problems. **Communications in Numerical Methods in Engineering**, 22:619–625, 2006.
- L. P. Franca e F. Valentin. On an improved unusual stabilized finite element method for the advective-reactive-diffusive equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 190:1785–1800, 2000.
- A. C. Galeão, R. C. Almeida, S. M. C. Malta, e A. F. D. Loula. Finite element analysis of convection dominated reaction - diffusion problems. **Applied Numerical Mathematics**, 48:205–222, 2004.
- A. C. Galeão e E. G. Dutra do Carmo. A consistent approximate upwind Petrov-Galerkin method for convection-dominated problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 68:83–95, 1988.
- H. Gómez, I. Colominas, F. Navarrina, e M. Casteleiro. A generalized statement for advective-diffusive phenomena. finite element model and applications. **International Journal For Numerical Methods In Engineering**, 00:1–6, 2000.
- V. Gravemeier. **The Variational Multiscale Method for Laminar and Turbulent Incompressible Flow**. Phd thesis, Institut fur Baustatik der Universitat Stuttgart, 2003.
- J.-L. Guermond. Stabilization of galerkin approximations of transport equation by subgrid modeling. **Mathematical Modelling and Numerical Analysis**, 33:1293–1316, 1999.
- J.-L. Guermond. Subgrid stabilization of galerkin approximations of linear monotone operators. **IMA Journal of Numerical Analysis**, 21:165–197, 2001.

- J.-L. Guermond. A finite element technique for solving first-order pdes in lp. **SIAM J. Numer. Anal.**, 42:714–727, 2004.
- J.-L. Guermond, A. Marra, e L. Quartapelle. Subgrid stabilized projection method for 2D unsteady flows at high Reynolds numbers. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195:5857–5876, 2006.
- J.-L. Guermond, J. T. Oden, e S. Prudhomme. Mathematical perspectives on large eddy simulation models for turbulent flows. **J. Math. Fluid mech.**, 6:194–248, 2004a.
- J.-L. Guermond, J. T. Oden, e S. Prudhomme. Mathematical perspectives on large eddy simulation models for turbulent flows. **J. Math. Fluid mech.**, 6:194–248, 2004b.
- I. Harari e T. J. Hughes. Stabilized finite element methods for steady advection-diffusion with production. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 115:165–191, 1994.
- G. Hauke. A simple subgrid scale stabilized method for the advection-diffusion-reaction equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 191:2925–2947, 2002.
- G. Hauke e A. García-Olivares. Variational subgrid scale formulations for the advection-diffusion-rreaction equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 190:6847–6865, 2001.
- N. Heitmann. **Subgrid Stabilization of Evolutionary Diffusive Transport Problems**. Phd thesis, Faculty of Arts and Science, University of Pittsburgh, 2003.
- N. Heitmann. Subgridscale stabilization of time-dependent convection dominated diffusive transport. **J. Math. Anal. Appl.**, 331:38–50, 2007.

- T. Y. Hou e X. H. Wu. A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. **Journal OF Computational Physics**, 134:169–189, 1997.
- T. J. R. Hughes. Multiscale phenomena: Green’s functions, the dirichlet-to-neumann formulation, sugrid scale models, bubbles and the origin of stabilized methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 127:387–401, 1995.
- T. J. R. Hughes. **The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis**. Dover Publications, Inc., 2000.
- T. J. R. Hughes, L. P. Franca, e G. M. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: Viii. the galerkin-least-squares method for advective-diffusive equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 73:173–189, 1989.
- T. J. R. Hughes e M. Mallet. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: Iv. a discontinuity-capturing operator for multidimensional advective-difusive systems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 58:329–336, 1986.
- T. J. R. Hughes, M. Mallet, e A. Mizukami. A new finite element formulation for computational fluid dinamics: Ii beyond SUPG. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 54:341–355, 1986.
- T. J. R. Hughes, G. Scovazzi, e L. P. Franca. **Multiscale and Stabilized Methods, Encyclopedia of Computational Mechanics**. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.
- T. J.R. Hughes, G. Scovazzi, e P. B. Bochev. A multiscale discontinuous galerkin method with the computational structure of a continuous galerkin method. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195:2761–2787, 2006.

- T. Iliescu. Genuinely nonlinear models for convection-dominated problems. **Computers and mathematics with Applications**, 48:1677–1692, 2004.
- V. John e S. Kaya. A finite element variational multiscale method for the navier-stokes equations. **SIAM J. Sci. Comput.**, 26(5):1485–1503, 2005.
- V. John, S. Kaya, e W. Layton. A two-level variational multiscale method for convection-dominated convection-diffusion equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195:4594–4603, 2006.
- V. John e P. Knobloch. On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: Part I - A review. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 197:2197–2215, 2007.
- C. Johnson. Adaptive finite element methods for diffusion and convection problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 82:301–322, 1990a.
- C. Johnson. **Numerical solution of partial differential equations by the finite element method**. Cambridge University Press, 1990b.
- C. Johnson, U. Nävert, e J. Pitkaranta. Finite element methods for linear hyperbolic problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 45:285–312, 1984.
- C. Johnson, A. H. Shatz, e L. B. Wahlbin. Crosswind smear and pointwise errors in streamline diffusion finite element methods. **Math. Comput.**, 49:25–38, 1987.
- C. Johnson, A. Szepessy, e P. Hansbo. On the convergence of shock-capturing streamline diffusion finite element methods for the hyperbolic conservation laws. **Mathematics of Computations**, 54(189):107–129, 1990.
- J. Douglas Jr. e T. Dupont. Interior penalty procedures for elliptic and parabolic galerkin methods. **Lecture Notes in Physics, Springer, Berlim**, 58, 1976.

- R. Juanes. **Displacement theory and multiscale numerical modeling of three-phase flow in porous media**. Phd thesis, Engineering - Civil and Environmental Engineering, University of California, Berkeley, 2003.
- R. Juanes e T. W. Patzek. Multiple scale stabilized finite elements for the simulation of tracer injections and waterflood. In **SPE/DOE Thirteenth Symposium on Improved Oil Recovery**, página (SPE 75231). Submitted to Soc. Pet. Eng. J., Tulsa, OK, 2002.
- S. Kaya. **Numerical Analysis of a Variational Multiscale Method for Turbulence**. Phd thesis, Faculty of Arts and Science, University of Pittsburgh, 2004.
- S. Kaya e W. Layton. Subgrid-scale eddy viscosity models are variational multiscale methods. Relatório Técnico TR-MATH 03-05, University of Pittsburgh, 2003.
- P. Knobloch. Improvements of the mizukami-hughes method for convection-diffusion equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 196:579–594, 2006.
- T. Knopp, G. Lube, e G. Rapin. Stabilized finite element methods with shock capturing for advection-diffusion problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 191:2997–3013, 2002.
- W. J. Layton. A connection between subgrid scale eddy viscosity and mixed methods. **Appl. Math. and Comput.**, 133:147–157, 2002.
- W. J. Layton e B. Polman. Oscillation absorption finite element methods for convection–diffusion problems. **SIAM Journal on Scientific Computing**, 17:1328–1346, 1996.
- R. J. LeVeque. **Numerical Methods for Conservation Laws**, volume second ed. Birkhäuser Verlag, Berlin, 1992.

- G. Lube e G. Rapin. Residual-based stabilized higher-order fem for advection-dominated problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195:4124–4138, 2006.
- L.G. Margolin e W. J. Rider. The design and construction of implicit les models. **Int. J. for Num. Meth. in Fluids**, 47:1173–1179, 2005.
- Ch. Meneveau e J. Katz. Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation. **Annu. Rev. Fluid Mech.**, 32:1–32, 2000.
- A. Mizukami e T. J. R. Hughes. A petrov-galerkin finite element method for convection-dominated flows: An accurate upwinding technique for satisfying the maximum principle. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 50:181–193, 1985.
- E. Ñate. Derivation of stabilized equations for numerical solution of advective-diffusive transport and fluid flow problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 151:233–265, 1998.
- E. Ñate, F. Zárate, e S. R. Idelsohn. Finite element formulation for convective-diffusive problems with sharp gradients using finite calculus. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195:1793–1825, 2006.
- J. Nitsche. Über ein variationsprinzip zur losung von dirichlet-problemen bei der verwendung von teilräumen, die keinen randbedingungen unterworfen sind. **Math. Sem. Univ. Hamburg**, 36:9–15, 1971.
- J. T. Oden, T. Belytschko, I. Babuska, e T. J. R. Hughes. Research directions in computational mechanics. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 192:913–922, 2003.
- P. Percell e M. F. Wheeler. A local residual finite element procedure for elliptic equations. **SIAM J. Numer. Anal.**, 15 (4):705–714, 1978.

- J. V. A. Ramalho. **New Methods of Enriching Finite Elements Applied to Unsteady Reaction-Advection-Diffusion Models**. Phd thesis (in portuguese), Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC/MCT, 2005.
- H. G. Roos, M. Stynes, e L. Tobisca. **Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations: Convection Diffusion and Flow Problems**. Springer-Verlag, New York, 1996.
- I. P. Santos e R. C. Almeida. A nonlinear subgrid method for advection-diffusion problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 196:4771–4778, 2007a.
- I. P. Santos e R. C. Almeida. A nonlinear subgrid model for transport problems. In **Proceedings of the XXVIII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering CILAMCE - Congress on Numerical Methods in Engineering CMNE**, Porto, Portugal, 2007b.
- I. P. Santos e R. C. Almeida. Nonlinear subgridscale stabilization of convection-diffusion-reaction models. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (to appear)**, 2007c.
- I. P. Santos e R. C. Almeida. Um modelo subgrid para a equação de transporte com imposição fraca das condições de contorno de dirichlet. In **XXX CNMAC - Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2007**, Florianópolis - SC, Brasil, 2007d.
- G. Scovazzi. **Multiscale Methods in Science and Engineering**. Phd thesis, Mechanical Engineering Department, Stanford University, 2004.
- Y.-T. Shih e H. C. Elman. Iterative methods for stabilized discrete convection-diffusion problems. **IMA Journal of Numerical Analysis**, 20:333–358, 2000.
- S.Q. Tang, T.Y. Hou, e W.K. Liu. A mathematical framework of the bridging scale

- method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 65:1688–1713, 2006.
- R. Temam. **Navier-Stokes Equations, Theory and Numerical Analysis**. North Holland, 1979.
- T. E. Tezduyar. **Finite Element Methods for Fluid Dynamics with Moving Boundaries and Interfaces**. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.
- T. E. Tezduyar e Y. Osawa. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 190:411–430, 2000.
- T. E. Tezduyar e Y. J. Park. Discontinuity-capturing finite element formulations for nonlinear convection-diffusion-reaction equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 59:307–325, 1986.
- E. Weinan e B. Engquist. The heterogeneous multiscale methods. **Comp. Math. Sci.**, 1:87–132, 2003.
- M. F. Wheeler. An elliptic collocation-finite element method with interior penalties. **SIAM J. Numer. Anal.**, 15 (1):152–161, 1978.

Apêndice A

A.1 Problema de Minimização

O problema de minimização é definido por:

$$\begin{cases} \text{minimizar} & E_c = \frac{1}{2} |\boldsymbol{\beta}_h^H|^2 \\ \text{sujeito a} & \\ -\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H = f & \text{em } T \in \mathcal{T}_H. \end{cases}$$

Este problema pode ser resolvido via a técnica dos multiplicadores de Lagrange.

Dado $u_H \in X_H$, solucionar o problema de minimização é equivalente a determinar o par $(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda)$ que torna estacionário o funcional:

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda) = \int_T \left[\frac{1}{2} |\boldsymbol{\beta}_h^H|^2 + \lambda (-\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f) \right] d\Omega.$$

Primeiro, demonstra-se que $\boldsymbol{\beta}_h^H \cdot \nabla u_H = R(u_H)$. De fato, tem-se

$$-\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f = R(u_H)$$

e

$$-\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f = 0.$$

Subtraindo estas equações uma da outra, obtém-se o resultado desejado.

Como $u_H \in X_H$, definido em (3.35), as funções $\boldsymbol{\beta}_h^H$, $\boldsymbol{\beta}_H$, u_H , e f possuem regularidade suficiente em cada $T \in \mathcal{T}_H$ de forma que o funcional $\mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda)$ seja

bem definido.

A condição de estacionaridade $\delta \mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda) = 0$, implica que

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda) &= \int_T [\boldsymbol{\beta}_h^H \cdot \delta \boldsymbol{\beta}_h^H - \delta \boldsymbol{\beta}_h^H \cdot \lambda \nabla u_H + \delta \lambda (-\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f)] d\Omega \\ &= \int_T [(\boldsymbol{\beta}_h^H - \lambda \nabla u_H) \cdot \delta \boldsymbol{\beta}_h^H + \delta \lambda (-\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f)] d\Omega \\ &= 0. \end{aligned}$$

Assim, obtém-se

$$\delta \mathbf{J}(\boldsymbol{\beta}_h^H, \lambda) = 0 \implies \begin{cases} \boldsymbol{\beta}_h^H - \lambda \nabla u_H = 0, \\ -\epsilon \Delta u_H + \boldsymbol{\beta}_H \cdot \nabla u_H + \sigma u_H - f = 0. \end{cases}$$

Considerando $\nabla u_H \neq \mathbf{0}$ tem-se

$$\boldsymbol{\beta}_h^H - \lambda \nabla u_H = 0 \implies (\boldsymbol{\beta}_h^H - \lambda \nabla u_H) \cdot \nabla u_H = 0$$

$$\implies \boldsymbol{\beta}_h^H \cdot \nabla u_H - \lambda |\nabla u_H|^2 = 0.$$

Então,

$$\lambda = \frac{\boldsymbol{\beta}_h^H \cdot \nabla u_H}{|\nabla u_H|^2} = \frac{R(u_H)}{|\nabla u_H|^2} \quad \text{se } |\nabla u_H| \neq 0.$$

Por outro lado, para $\nabla u_H = \mathbf{0}$, define-se $\lambda = 0$. Dessa forma, encontra-se $\boldsymbol{\beta}_h^H = \mathbf{0}$.

Segue-se, então, o resultado desejado:

$$\boldsymbol{\beta}_h^H = \begin{cases} \frac{R(u_H)}{|\nabla u_H|^2} \nabla u_H, & \text{se } \nabla u_H \neq \mathbf{0}; \\ 0; & \text{caso contrário.} \end{cases}$$