



Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas

Bacharelado em Matemática

Método de Galerkin descontínuo aplicado a
uma equação de difusão

Leonardo Leite

Florianópolis-SC

2023

Leonardo Leite

**Método de Galerkin descontínuo aplicado a
uma equação de difusão**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Matemática do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito para obtenção do grau de Bacharel em Matemática.

Orientadora: Luciane Inês Assmann Schuh, Dra.

Florianópolis-SC

2023



**Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas**

Coordenação dos Cursos de Graduação em Matemática

A banca examinadora, conforme abaixo assinado, certifica a adequação deste trabalho de conclusão de curso para obtenção do grau de Bacharel em Matemática.

Florianópolis, 30 de novembro de 2023.

Prof. Felipe Lopes Castro, Dr.
Coordenador do Curso de Matemática

BANCA EXAMINADORA

Profa. Luciane Inês Assmann Schuh, Dra.
Orientadora

Prof. Leonardo Koller Sacht, Dr. (Avaliador)
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Wagner Barbosa Muniz, Dr. (Avaliador)
Universidade Federal de Santa Catarina

**Florianópolis-SC
2023**

A Deus, fonte verdadeira da luz e da ciência.
— São Tomás de Aquino

AGRADECIMENTOS

A meus familiares, mãe, esposa e irmão.

À orientadora Luciane, que me propôs um bom desafio, compartilhou ensinamentos e horas valiosas, e foi professora e guia essencial para que este trabalho pudesse ser concluído e esta jornada de graduação finalizada.

A todos os professores do Curso de Matemática da UFSC que cumpriram com o fiel objetivo de ensinar, transmitir conhecimentos e forjar em mim sabedoria que carregarei para o resto da vida.

RESUMO

A matemática tem um papel fundamental na representação de fenômenos da natureza, como na engenharia, na física, na economia etc. Esses fenômenos são comumente modelados por meio de Equações Diferenciais Parciais (EDP's). Essas equações por vezes possuem soluções analíticas altamente complexas e difíceis ou impossíveis de serem encontradas. Neste trabalho abordaremos um problema físico clássico que é representado por uma EDP: a equação de difusão. Esta equação pode, por exemplo, modelar o fluxo de calor em uma superfície, o fluxo de fluídos em uma tubulação, a difusão de partículas e o fluxo de cargas elétricas em um semiconductor, de onde já podemos imaginar a importância de estudá-la.

O objetivo será apresentar uma forma de contornar a dificuldade de obtenção de uma solução analítica, fazendo uso de um método numérico, que na prática fornecerá uma solução aproximada em relação à solução exata do problema. O método, o qual estudaremos teoria e implementação, é chamado de Galerkin Descontínuo. Trabalharemos com uma EDP linear de segunda ordem, com difusividade constante no tempo e domínio em um retângulo no \mathbb{R}^2 . Propositamente adotamos uma equação que sob certas hipóteses possuirá solução exata conhecida com o intuito de validar o método numérico utilizado e analisar os resultados obtidos. Faremos uso do software MATLAB para executar os códigos necessários ao cálculo da solução, apresentando alguns experimentos numéricos para os problemas de difusão estacionários e não estacionários, que ilustram a qualidade das soluções obtidas e comprovam a taxa de convergência teórica do método de Galerkin Descontínuo.

Palavras-chave: Método de Galerkin Descontínuo, Equações Diferenciais Parciais, Equação de Difusão.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Equações Diferenciais Parciais e Processos de Difusão	4
2.1	Equações Diferenciais Parciais	4
2.1.1	Definições Básicas e Exemplos	4
2.1.2	Condições de Contorno e Condições Iniciais	6
2.2	Difusão	7
2.2.1	Primeira Lei de Fick	7
2.2.2	Equação de Continuidade	8
2.2.3	Segunda Lei de Fick - A Equação de Difusão	9
3	Métodos de aproximação	11
3.1	Aproximação de Funções	11
3.1.1	Espaço de Lebesgue L^2	11
3.1.2	Espaços de Polinômios	13
3.2	Métodos de Aproximação de Euler e Taylor	14
4	Método de Galerkin Descontínuo	18
4.1	Problema Modelo	18
4.2	Discretização pelo Método de Elementos Finitos: definição e notações	19
4.3	Formulação Mista	20
4.4	Formulação Fraca ou Variacional	21
4.5	Formulação semi-discreta	22
4.6	Representação das bases locais	23
4.7	Sistema de Equações	25
4.8	Detalhamento das matrizes de área do sistema discreto	26
4.9	Detalhamento das matrizes de fronteira do sistema discreto	27
4.10	Discretização do Tempo	30
5	Implementação Numérica	32
5.1	Transformação ao triângulo de referência	32
5.2	Integração Numérica	34
5.2.1	Regra de Quadratura de Gauss-Legendre nas arestas do Triângulo Referência \hat{T}	34
5.2.2	Regra de Quadratura no Triângulo Referência \hat{T}	36
5.3	Aproximação das funções coeficiente e das condições iniciais	42
5.4	Cálculo do erro de discretização	44
6	Resultados Numéricos	46
6.1	Problema Estacionário	46
6.2	Problema Não-Estacionário	51

7 Conclusões

55

Referências Bibliográficas

56

1. INTRODUÇÃO

Há diversas formas de resolver os enigmas e desafios que surgem na experiência humana. Sejam nas ciências biológicas, econômicas, físicas ou matemáticas, problemas tanto de ordem teórica quanto prática demandam soluções a fim de que o progresso científico possa suceder-se, e melhorias sociais e tecnológicas possam advir. Essas soluções podem atender ao desenvolvimento científico na construção de novas teorias como atender a demandas de utilidade prática da sociedade, visando otimizar processos industriais e econômicos, desenvolver modelos de previsão de pandemias, modelar eventos climáticos para previsão do tempo, encontrar modelos que descrevam a difusão de calor na fuselagem de um avião, o escoamento de fluidos em determinada estrutura etc.

De forma geral, a Matemática apresenta duas abordagens clássicas para solucionar esses problemas desafiadores:

- i) analítica, quando a solução é expressa por uma fórmula matemática bem definida, fornecendo uma solução exata;
- ii) numérica, quando a solução é uma aproximação da resposta do problema, obtida através de uma sucessão de cálculos (com uso de computadores) efetuados com premissas previamente definidas, permitindo controlar o erro obtido nesta aproximação.

Uma solução analítica, por definição, pode parecer em um primeiro momento muito mais atraente que uma solução numérica devido a sua perfeição e exatidão. Entretanto, assim como na natureza, ouro e o diamante são preciosidades escassas e dispendiosas, na natureza da matemática as soluções analíticas podem apresentar duas características análogas:

- i) inexistência de uma solução analítica para um determinado modelo matemático;
- ii) ainda que exista uma solução analítica, ela pode não ser facilmente computada.

Nesses casos, que são muito comuns por sinal, utilizar um método numérico pode ser uma alternativa muito apropriada. Uma miríade de problemas matemáticos podem ser resolvidos por métodos numéricos entre os quais: i) a solução de sistemas de equações; ii) a interpolação de funções; iii) o cálculo de derivadas e integrais; iv) a resolução de equações diferenciais parciais (EDP), entre outros.

Pensemos no seguinte fenômeno físico: se uma gota de tinta é colocada no fundo de uma garrafa cheia de água, sem mexer, a tinta vai vagarosamente espalhar-se pela garrafa e dar cor à água, até que após algum tempo a mistura estará homogeneizada. O processo responsável pelo movimento de mistura é chamado de difusão e é causado pelo movimento Browniano de átomos e moléculas. Este fenômeno pode ser modelado por uma EDP, que é basicamente uma

equação onde existem termos envolvendo derivadas parciais.

Neste trabalho nos dedicaremos à equação de difusão, uma equação diferencial parcial parabólica presente na modelagem de muitos problemas físicos e químicos, da eletrodinâmica à mecânica de fluídos por exemplo. A equação de difusão é assim escrita:

$$\frac{\partial u(r, t)}{\partial t} = \nabla \cdot [D(u, r)\nabla u(r, t)] \quad (1.1)$$

onde $u(r, t)$ é a densidade do material difusor no ponto r e instante de tempo t ; $D(u, r)$ é o coeficiente de difusão coletivo para densidade u no ponto r e; ∇ é o vetor gradiente (operador diferencial). Iremos abordar a forma linear dessa equação, que é o caso onde o coeficiente de difusão D não depende da densidade u , ou seja, $D = D(r)$.

Como é usualmente difícil escrever fórmulas explícitas para soluções de equações diferenciais parciais, vamos lançar mão de uma ferramenta muito útil para encontrar soluções aproximadas da equação (1.1): o método de Galerkin Descontínuo (GD). Essa classe de métodos numéricos combina características do Método de Elementos Finitos (MEF) [4] e o Método de Volumes Finitos (MVF) [23], e tem sido muito bem sucedida na resolução de equações diferenciais hiperbólicas, elípticas e parabólicas [6], [2].

O método de Galerkin Descontínuo foi proposto e analisado no início dos anos 1970. Em 1973 Reed e Hill [19] introduziram o GD na resolução de uma equação hiperbólica de transporte de nêutrons

$$\sigma u + \nabla \cdot (\bar{a}u) = f \quad (1.2)$$

onde σ é um número real e \bar{a} um vetor constante.

Entre as vantagens que nos incentivam a estudar esse método podemos citar o paralelismo de dados (execução paralela de tarefas pelo computador), aplicação a problemas onde o domínio apresenta geometrias irregulares, adaptabilidade à discretização arbitrária de malhas e a alta ordem de aproximação polinomial.

Este trabalho de conclusão de curso foi elaborado através de uma pesquisa descritiva, baseada essencialmente em livros, artigos e sites referenciados na bibliografia. O objetivo principal é estudar a implementação e teoria do Método de Galerkin Descontínuo, aplicando-o à equação de difusão (1.1) com domínio em \mathbb{R}^2 e sujeita a condições iniciais e de fronteira, obtendo assim uma solução numérica aproximada da solução exata do problema. Com o uso do software matemático MATLAB (versão R2017b) foi implementado um ajuste no código disponibilizado no artigo de Frank, Reuter, Azinger e Knabner [11], adaptando-o às necessidades do problema proposto.

Este trabalho está assim estruturado:

- No Capítulo 2, Equações Diferenciais Parciais e Processos de Difusão, apresentam-se definições elementares sobre EDP's e conceitos físicos e matemáticos imprescindíveis para compreensão e contextualização do problema de difusão.
- No Capítulo 3, Métodos de Aproximação, são introduzidos os espaços de Lesbesgue e de

funções polinomiais por partes utilizados para discretização espacial do método de Galerkin Descontínuo, assim como o método de Euler utilizado para discretização temporal.

- No Capítulo 4, Método de Galerkin Descontínuo, o método é propriamente deduzido, apresentando-se definições e aspectos teóricos. São apresentados o problema modelo, a formulação fraca do problema, detalhes de discretização das dimensões espacial e temporal, além do detalhamento das matrizes que compõe o sistema de equações a ser resolvido.
- No Capítulo 5, Implementação Numérica, são fornecidos detalhes importantes para execução do método numérico, tais como integração numérica e quadraturas utilizadas, além da função de transformação dos elementos triangulares da malha discretizada para um triângulo de referência etc.
- No Capítulo 6, Resultados Numéricos, são apresentadas as soluções numéricas obtidas com o método de Galerkin Descontínuo, onde são analisadas e comparadas com a solução exata do problema por meio de gráficos e tabelas a fim de validar o método e o código.
- No Capítulo 7, Conclusões, são apresentadas as considerações finais.

2. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS E PROCESSOS DE DIFUSÃO

Neste capítulo faremos uma breve abordagem a respeito de Equações Diferenciais Parciais com definições elementares, classificações e alguns exemplos. Também deduziremos a 1^a e 2^a *Lei de Fick*, leis que nos introduzirão o problema da equação de difusão.

2.1 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS

2.1.1 DEFINIÇÕES BÁSICAS E EXEMPLOS

Seja $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, onde $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Dado $u = u(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \in \mathbb{R}$, uma função de várias variáveis, denotaremos sua derivada parcial com respeito a x_i como

$$u_{x_i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}. \quad (2.1)$$

Abreviadamente podemos escrever o operador parcial $\frac{\partial}{\partial x_i}$ como ∂_{x_i} . Dada esta notação, podemos escrever as derivadas parciais de maior ordem de u . Por exemplo, se $u = u(x, y, z)$, a derivada parcial de segunda ordem de u com respeito a x e y é escrita como

$$u_{xy} = \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = \partial_y \partial_x u = D_2 D_1 u. \quad (2.2)$$

Podemos então definir uma equação diferencial parcial (EDP). Segundo Iório [14], uma EDP é uma equação envolvendo duas ou mais variáveis independentes $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ e derivadas parciais de uma função $u = u(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$. Uma EDP é uma equação da forma

$$F(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \dots, \frac{\partial^k u}{\partial x_1^k}) = 0 \quad (2.3)$$

onde $x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \in \Omega$, Ω é um domínio em \mathbb{R}^n (aberto conexo), F é uma função dada e $u(x)$ é a solução da equação diferencial. A equação (2.3) pode ainda apresentar-se de forma bastante distinta como por exemplo

$$e^{\frac{\partial u}{\partial x_1} + \frac{\partial u}{\partial x_2}} = 0. \quad (2.4)$$

Podemos classificar as EDP's de acordo com suas características como lineariedade, homo-

geneidade, ordem etc.

A ordem de uma equação é dada pela derivada parcial de ordem mais alta. A ordem de (2.3) é k , caso exista evidentemente a derivada k -ésima.

Exemplo 1.

- $u_t = u_x$ (Equação do Transporte, primeira ordem)
- $u_t = ku_{xx}$ (Equação do Calor, segunda ordem)
- $u_{tt} = c^2u_{xx}$ (Equação do Onda, segunda ordem)
- $u_{xx} + u_{yy} = 0$ (Equação de Laplace, segunda ordem)

Quanto a linearidade, caracterizamos uma EDP como linear caso seja linear em $u(x)$ e em todas suas derivadas parciais, do contrário é dita não-linear.

A forma de uma EDP linear de 1^a ordem é

$$\sum_{j=1}^n a_j(x)D_j u + b(x)u + c(x) = 0 \quad (2.5)$$

tal que algum a_j não é identicamente nulo.

A forma de uma EDP linear de 2^a ordem é

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x)D_i D_j u + \sum_{j=1}^n b_j(x)D_j u + c(x)u + d(x) = 0 \quad (2.6)$$

tal que algum a_{ij} não é identicamente nulo.

Vamos chamar uma EDP linear de homogênea se o termo que não contém a variável dependente é identicamente nulo. A equação (2.5) é homogênea se $c(x) \equiv 0$ e (2.6) é homogênea se $d(x) \equiv 0$. Caso estas condições não sejam satisfeitas, chamamos estas equações de não-homogêneas. Veja exemplos a seguir.

Exemplo 2.

- $u_t = u_x$ (homogênea, linear)
- $u_{xx} + u_{yy} = x^2 + y^2$ (não-homogênea, linear)
- $u_t + u_{xxx} + uu_x = 0$ (homogênea, não-linear)
- $u_{xx} + u_{yy} = 0$ (homogênea, linear)

Estas equações são muito importantes pois permitem modelar matematicamente um problema advindo de outros campos de estudo da natureza, em nosso caso particular, a equação de difusão.

2.1.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS

No intuito de solucionar uma EDP, podemos nos deparar com o fato de não haver soluções [24] ou mesmo haver muitas soluções [12]. Mesmo no caso linear, a solução geral envolverá funções arbitrárias das variáveis independentes, existindo um grau de generalidade grande. Dado um espaço \mathbb{R}^n de variáveis independentes, iremos em busca de soluções em um conjunto aberto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$.

Em uma EDP as condições de contorno são aquelas que especificam os valores que a solução e suas derivadas tomam no contorno do domínio, ou mais especificamente, na fronteira $\partial\Omega$ da região Ω . Problemas deste tipo são chamados de problemas de valores de contorno e surgem comumente na descrição de problemas físicos estacionários (independentes do tempo). Uma condição de contorno que especifica o valor da função $u \in \Omega$ em $\partial\Omega$ é chamada de *condição de Dirichlet*. Já uma condição de contorno que especifica o valor da derivada normal $\partial u/\partial n$ da função $u \in \Omega$ em $\partial\Omega$ é chamada de *condição de Neumann*.

Vejamos a equação a seguir

$$\alpha u(x) + \beta \frac{\partial u}{\partial n} = f(x), \quad x \in \partial\Omega. \quad (2.7)$$

Representamos matematicamente estas condições da seguinte forma: dados α e β constantes, e f uma função dada na fronteira $\partial\Omega$, se $\alpha = 0$ temos uma *condição de Neumann*; se $\beta = 0$ temos uma *condição de Dirichlet*.

Nas EDP's temos várias variáveis independentes, como por exemplo x e t , então comumente fixa-se uma das variáveis, fazendo $t = 0$, por exemplo, e impõe-se o valor da solução e de suas derivadas parciais em relação à variável fixa como função das variáveis restantes, obtendo algo do tipo

$$u(x, 0) = f(x) \quad \text{e} \quad u_t(x, 0) = g(x) \quad (2.8)$$

onde $f(x)$ e $g(x)$ são funções dadas.

No caso em que $x \in \mathbb{R}$ e $t \in \mathbb{R}$, implica definir o valor da solução e das derivadas normais ao longo da curva $t = 0$; no caso em que $x \in \mathbb{R}^2$ e $t \in \mathbb{R}$, teremos o valor da solução e das derivadas normais ao longo de uma superfície $t = 0$. O problema decorrente deste tipo de condição chama-se: *Problema de Cauchy* ou *Problema de valor inicial*.

Ainda de acordo com Iório [14], fenômenos oscilatórios e o de difusão, tema deste trabalho, comumente são dependentes do tempo e é portanto conveniente separar a variável temporal t das demais variáveis independentes x, y, z . Nesses casos ocorre com frequência que o valor da solução e das derivadas em relação ao tempo até a ordem $k - 1$ (supondo uma EDP de ordem k em t) são descritos no instante $t = 0$ em função de x, y, z (condição inicial), e concomitantemente são impostas as condições de contorno $\forall t \geq 0$ em relação as variáveis espaciais x, y, z . Neste caso temos os chamados *problemas mistos*.

2.2 DIFUSÃO

Difusão, segundo Mehrer [17], é o deslocamento ou transporte de matéria ou energia de um ponto para outro, por meio da agitação térmica de átomos ou moléculas. A depender do sistema físico em que ocorre, a velocidade da difusão pode variar, sendo relativamente rápida em gases, lenta em líquidos e muito lenta nos sólidos. A difusão modela uma variedade de fenômenos físicos tais como a mistura de gases e líquidos, a passagem de oxigênio por membranas celulares, a dissolução de chá em uma xícara de água, a difusão de calor em uma chapa metálica etc. As equações responsáveis por governar processos de difusão são conhecidas como as Leis de Fick.

2.2.1 PRIMEIRA LEI DE FICK

Considere o fluxo de difusão de partículas (átomos, íons, moléculas) em uma dimensão (na direção de x). A *1ª Lei de Fick* é escrita como

$$J_x = -D \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (2.9)$$

O termo J_x é o fluxo de partículas (fluxo de difusão), ou a quantidade de material ou energia que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo, e C é a concentração dada em quantidade de certa substância por unidade de volume (Figura 2.1). A constante de proporcionalidade D , chamada de coeficiente de difusão ou difusividade, é uma propriedade física do sistema. A equação (2.9) nos dá uma informação interessante: o fluxo de difusão é proporcional e tem direção oposta ao gradiente de concentração, isto é, uma substância tende a se mover de uma região de alta concentração para uma região de baixa concentração até que haja uma equalização.

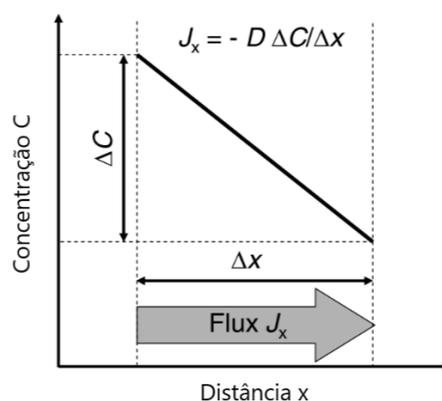


Figura 2.1: Fluxo de Difusão.
Fonte: Mehrer, 2007, p.28

Em duas ou mais dimensões usamos o operador gradiente, que generaliza a primeira derivada, obtendo

$$J = -D \nabla C. \quad (2.10)$$

O operador gradiente ∇ age no campo escalar da concentração $C(x, y, z, t)$ no caso 3D e gera um campo gradiente da concentração. O gradiente de concentração ∇C , em um ponto arbitrário, aponta na direção na qual o campo escalar sofre o aumento mais rápido e sua magnitude é igual a taxa máxima de crescimento neste ponto.

A primeira Lei de Fick descreve o processo de difusão em um regime estacionário, que ocorre quando o fluxo de difusão é constante no tempo, isto é, a massa do componente em difusão que entra numa dada região é a mesma que sai, não havendo acumulação ou perda líquida.

As leis de Fick podem representar as equações de difusão do transporte de partículas, da equação de calor de Fourier (2.11) e da Lei de Ohm de transporte de cargas elétricas (2.12).

$$J_q = -\kappa \nabla T \quad (2.11)$$

onde J_q é o fluxo de calor, T é o campo de temperatura e κ é a condutividade térmica.

$$J_e = -\sigma \nabla V \quad (2.12)$$

onde J_e é a densidade de corrente elétrica, V é o potencial eletrostático e σ é a condutividade elétrica.

2.2.2 EQUAÇÃO DE CONTINUIDADE

Na Física Clássica, a *Lei de Conservação* determina que uma certa propriedade física (quantitativamente mensurável) não muda com o decorrer do tempo dentro de um sistema físico isolado, como é o caso da energia, momento angular, massa, carga elétrica, dentre outras. Leis que governam o transporte dessas quantidades que se conservam são particularmente úteis para descrever uma variedades de fenômenos. Estas leis são chamadas de *Equações de Continuidade* ou *Equações de Transporte*.

De acordo com Mehrer [17], como os processos de difusão em geral obedecem a Lei de Conservação, o número de partículas em difusão é conservado, logo podemos definir uma *equação de transporte* para estas partículas. Para deduzi-la vamos considerar um ponto P arbitrário de coordenadas (x, y, z) e um *volume de teste* ou *volume de controle* (Figura 2.2), de lados Δx , Δy e Δz . O fluxo de difusão J e suas componentes J_x , J_y , J_z variam pelo volume de controle. Se a soma de fluxos entrando e saindo do volume não se iguala, há uma acumulação ou perda líquida. O balanço material pode ser expresso como

Entrada - Saída = Taxa de acumulação ou perda.

Logo, considerando os componentes do fluxo nesta fórmula obtemos

$$\begin{aligned} & [J_x(P) - J_x(P + \Delta x)]\Delta y\Delta z + \\ & [J_y(P) - J_y(P + \Delta y)]\Delta x\Delta z + \\ & [J_z(P) - J_z(P + \Delta z)]\Delta x\Delta y = \end{aligned} \quad (2.13)$$

Taxa de acumulação ou perda.

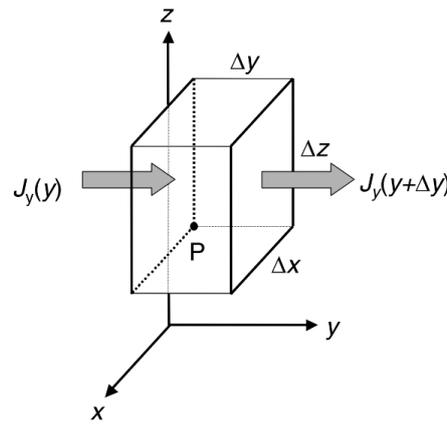


Figura 2.2: Volume de teste infinitesimal.

Fonte: Mehrer, 2007, p.30

Realizando a expansão de Taylor da componente J_x do fluxo em torno de $(P + \Delta x)$ até seus termos lineares temos

$$\begin{aligned} J_x(P) &= J_x(P + \Delta x) + \frac{\partial J_x(P + \Delta x)}{\partial x}(P - (P + \Delta x)) + \epsilon \\ J_x(P) &= J_x(P + \Delta x) + \frac{\partial J_x(P + \Delta x)}{\partial x}(\Delta x) + \epsilon \\ J_x(P) - J_x(P + \Delta x) &= \frac{\partial J_x(P + \Delta x)}{\partial x}(\Delta x) + \epsilon. \end{aligned}$$

Fazendo $\Delta x \rightarrow \infty$ o erro de aproximação $\epsilon \rightarrow 0$. Efetuando o mesmo cálculo analogamente para J_y e J_z , e substituindo em (2.13) obtemos

$$\begin{aligned} - \left[\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z &= \frac{\partial C}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z, \\ -\nabla \cdot J &= \frac{\partial C}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A equação (2.14) é denominada *Equação de Continuidade*.

2.2.3 SEGUNDA LEI DE FICK - A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Combinando 1ª lei de Fick (2.10) e a Equação de Continuidade (2.14) obtemos a chamada 2ª Lei de Fick ou também chamada *Equação da Difusão*

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C). \quad (2.15)$$

Essa é uma EDP de 2ª ordem, linear se D não depende da concentração, ou não-linear se D depende da concentração. Se a difusividade D é independente da concentração C , a equação (2.15) é reduzida a

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C, \quad (2.16)$$

onde Δ denota o *Operador de Laplace*. Esta forma da 2ª Lei de Fick é frequentemente chamada

de equação de difusão linear.

A segunda Lei de Fick descreve o processo de difusão em um regime não estacionário, que ocorre quando o fluxo de difusão e o gradiente de concentração variam no tempo em determinada região, gerando acumulação ou perda líquida do componente em difusão.

A título de exemplo, na física e na química, a Lei de Conservação de Energia determina que a energia total de um sistema isolado permanece constante ao longo do tempo, portanto pode-se deduzir uma equação de continuidade para o fluxo de calor. Combinando-a com a lei de Fourier, assumindo uma constante de condutividade térmica κ , obter-se-á

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho C_V} \Delta T, \quad (2.17)$$

onde $T(x, y, z, t)$ é um campo escalar de temperatura, ρ é a densidade de massa e C_V o calor específico para volume constante. Esta equação para condução de calor que depende do tempo é matematicamente idêntica à equação de difusão linear.

3. MÉTODOS DE APROXIMAÇÃO

Aproximar funções é algo muito interessante pois nos permite encontrar soluções aproximadas quando as exatas (analíticas) são difíceis de serem encontradas. Neste capítulo apresentaremos conteúdos referentes à aproximação polinomial de funções, aos espaços vetoriais e aos métodos de Euler e Taylor, necessários a boa compreensão do método numérico de Galerkin Descontínuo que abordaremos posteriormente.

3.1 APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES

Diferentes abordagens podem ser utilizadas para encontrar soluções de equações algébricas e diferenciais. Essas soluções podem ser tanto escalares ou vetores no primeiro caso como funções escalares ou funções vetoriais no segundo caso. A aproximação por polinômios, especialmente falando, é bastante comum e consiste basicamente em: dada uma função qualquer, encontrar uma combinação linear de um conjunto finito de polinômios (base do espaço polinomial) que melhor aproxime a função dada. Dessas funções de base são geralmente esperadas características interessantes como ortogonalidade, diferenciabilidade e continuidade, pois facilitam e otimizam os cálculos necessários para obtenção das soluções por métodos numéricos. Introduziremos o espaço de funções polinomiais por partes, que é definido pelo conjunto de nós de uma malha de um domínio. Este espaço é de suma importância para a dedução no método numérico em estudo.

Esta seção tomou como referência as notas de aula do curso "*Methods in Scientific Computing (DD2363), 7.5hp, Spring 2017*" do KTH Royal Institute of Technology disponível em [\[22\]](#).

3.1.1 ESPAÇO DE LEBESGUE L^2

Dado um intervalo $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$, definimos o Espaço de Lebesgue $L^2(I)$ como a classe de todas as funções quadrado integráveis $f : I \rightarrow \mathbb{R}$,

$$L^2(I) = \left\{ f : \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \right\}.$$

Definiremos o produto interno em L^2 por

$$(f, g) = (f, g)_{L^2(I)} := \int_a^b f(x)g(x)dx,$$

assim como a norma L^2 associada por

$$\|f\| = \|f\|_{L^2(I)} := (f, f)^{\frac{1}{2}} = \left(\int_a^b |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

para a qual a desigualdade de Cauchy-Schwarz é satisfeita,

$$|(f, g)| \leq \|f\| \|g\|.$$

Este espaço de funções é fechado sob as operações de adição e multiplicação por escalar por meio da desigualdade

$$(a + b)^2 \leq 2(a^2 + b^2), \forall a, b > 0,$$

que é consequência do Teorema 1 (Desigualdade de Young).

Teorema 1 (Desigualdade de Young). *Dado $a, b \geq 0$ e $\varepsilon > 0$,*

$$ab \leq \frac{1}{2\varepsilon}a^2 + \frac{\varepsilon}{2}b^2.$$

Prova. $0 \leq (a - \varepsilon b)^2 = a^2 + \varepsilon^2 b^2 - 2ab\varepsilon.$ □

APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES NO ESPAÇO DE LEBESGUE L^2

Dado um espaço vetorial V (de dimensão infinita) e uma função $f \in V$, iremos aproximar f por uma função $f_n \in S$, onde $S \subset V$ é um subespaço finito de dimensão n . Seja $\{\phi_j\}_{j=1}^n$ um conjunto de elementos linearmente independentes que geram o subespaço S . Definimos este subespaço como

$$S = \{f_n \in V : f_n = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_j(x), \alpha_j \in \mathbb{R}\} \quad (3.1)$$

onde observamos que f_n é uma combinação linear das funções $\{\phi_j\}_{j=1}^n$. Note também que o conjunto $\{\phi_j\}_{j=1}^n$ é uma base do subespaço vetorial S , portanto a aproximação de f no subespaço S é dada por

$$f(x) \approx f_n(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \phi_j(x).$$

PROJEÇÃO L^2

Seja $f \in V$, onde $V = L^2(I)$. A projeção L^2 de f no subespaço $S \subset V = L^2(I)$, denotada por Pf , é a projeção ortogonal de f em S , ou seja,

$$(f - Pf, s) = 0, \forall s \in S. \quad (3.2)$$

Encontrar Pf que satisfaça (3.2) é equivalente a resolver o sistema de equações

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j (\phi_j, \phi_i) = (f, \phi_i) = 0, \forall i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.3)$$

Para isto observe que podemos reescrever (3.2) como

$$\begin{aligned} (f, s) - (Pf, s) &= 0, \forall s \in S \\ (Pf, s) &= (f, s), \forall s \in S. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Para provar que (3.2) \Rightarrow (3.3), basta observar que se (3.4) vale $\forall s \in S$ então vale particularmente para qualquer função de base ϕ_i

$$(Pf, \phi_i) = (f, \phi_i), \forall i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.5)$$

Para provar a recíproca (3.3) \Rightarrow (3.2), basta recorrer a linearidade do produto interno e lembrar que qualquer $s \in S$ pode ser escrita como $s = \sum_{i=1}^n \beta_i \phi_i(x)$, com $\beta_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Resolvendo o sistema de equações (3.3) em sua forma matricial $Ax = b$, onde $a_{ij} = (\phi_j, \phi_i)$, $x_j = \alpha_j$, e $b_i = (f, \phi_i)$, obtemos as constantes α_j necessárias para obter a projeção de Pf no subespaço S .

É interessante observar que se $\{\phi_j\}_{j=1}^n$ é uma base ortonormal, então a matriz A é uma matriz identidade e $\alpha_j = (f, \phi_j)$. Se $\phi_j(x)$ possui suporte local, ou seja, se $\phi_j(x) \neq 0$ somente em um subintervalo de I , então A será uma matriz esparsa.

Destaca-se que podem ser feitas projeções de um espaço vetorial $L^2(\mathbb{R}^n)$ em qualquer subespaço $S \subset L^2(\mathbb{R}^n)$, seguindo raciocínio semelhante ao aqui apresentado. Neste trabalho em particular, faremos a projeção ortogonal do espaço vetorial $L^2(\bar{\Omega})$, com $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, no subespaço vetorial $\mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)$ das funções polinomiais por partes a ser definido na seção 4.2.

3.1.2 ESPAÇOS DE POLINÔMIOS

Vamos denotar por $\mathbb{P}_p(I)$ o espaço das funções polinomiais de grau menor ou igual a p em $I \subset \mathbb{R}$, definido pelo conjunto de polinômios

$$q(x) = \sum_{i=0}^p c_i x^i, \quad x \in I,$$

com funções de base x^i e escalares c^i , além das operações de soma e multiplicação por escalar

$$(q + r)(x) = q(x) + r(x), \quad (\alpha q)(x) = \alpha q(x),$$

para $q, r \in \mathbb{P}_p(I)$ e $\alpha \in \mathbb{R}$. Exemplos de bases para $\mathbb{P}_p(I)$ são o conjunto de monômios $\{x^i\}_{i=0}^p$ e o conjunto $\{(x - c)^i\}_{i=0}^p$, onde $c \in I$, que fornece as séries de potência

$$q(x) = \sum_{i=0}^p a_i (x - c)^i.$$

ESPAÇOS DE POLINÔMIOS POR PARTES

Dada uma partição de $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$,

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_m = b$$

denotamos por $\mathcal{T}_h = \{I_i\}$ a malha, onde $I_i = (x_{i-1}, x_i)$ tem comprimento $h_i = x_i - x_{i-1}$. Para o Método de Galerkin Descontínuo é útil definirmos espaços de funções polinomiais por partes que são contínuas em cada subintervalo, mas são descontínuas globalmente. Para funções com domínio em \mathbb{R} definimos este espaço por $\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h) := \{v : v|_{I_i} \in \mathbb{P}_p(I_i), i = 1, \dots, m\}$. Na seção 4.2 apresentaremos com mais detalhes o espaço das funções polinomiais por partes com domínio em \mathbb{R}^2 , essencial para obtermos a solução aproximada da Equação Diferencial Parcial que iremos resolver.

3.2 MÉTODOS DE APROXIMAÇÃO DE EULER E TAYLOR

Estes métodos serão utilizados para realizar a discretização temporal do sistema (4.10). Como base para descrevê-los enunciamos o importante Teorema de Taylor.

Teorema 2 (Teorema de Taylor). *Suponha $f \in C^m[a, b]$, tal que $f^{(n+1)}$ exista em $[a, b]$, e $x_0 \in [a, b]$. Para todo $x \in [a, b]$, existe um número $\xi(x)$ entre x_0 e x com*

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

onde

$$\begin{aligned} P_n(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k \end{aligned}$$

e

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}.$$

Denotamos $P_n(x)$ o Polinômio de Taylor de ordem n da função f centrada em x_0 , e $R_n(x)$ o erro de truncamento de $P_n(x)$. Quando $n \rightarrow \infty$ em $P_n(x)$ temos a famosa Série de Taylor.

MÉTODO DE EULER EXPLÍCITO

O Método de Euler Explícito [5] é um método de primeira ordem usado para obter soluções numéricas de Equações Diferenciais Ordinárias sujeitas a uma condição inicial. O método obtém aproximações para um problema

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad a \leq t \leq b, \quad y(a) = \alpha. \quad (3.6)$$

Aproximações da solução $y(t)$ serão obtidas em vários pontos do domínio no intervalo $[a, b]$, também podendo ser chamados de pontos de malha ou nós. Em seguida é obtida uma aproximação da solução no restante do intervalo por meio de uma interpolação.

Para deduzir o método supomos inicialmente que os pontos da malha estão igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$, escolhendo um inteiro positivo N de forma que

$$t_i = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N,$$

onde a distância $h = (b - a)/N = t_{i+1} - t_i$ é chamada de **tamanho de passo**.

Através das Séries de Taylor, podemos escrever uma função $g \in C^\infty[a, b]$ como

$$\begin{aligned} g(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n \\ &= g(a) + \frac{g^{(1)}(a)}{1!} (x - a)^1 + \frac{g^{(2)}(a)}{2!} (x - a)^2 + \dots \end{aligned}$$

Dada a equação (3.6) suponha que $y(t) \in C^2$. Logo, para cada $i = 0, 1, 2, \dots, N$, temos pelo Teorema 2 (Teorema de Taylor) uma aproximação de $y(t)$. Truncando $y(t)$ a partir do termo contendo a segunda derivada em sua Expansão de Taylor, obtendo a seguinte aproximação

$$\begin{aligned} y(t_{i+1}) &\cong y(t_i) + hy'(t_i) \\ y(t_{i+1}) &\cong y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)). \end{aligned}$$

O erro de truncamento local deste método é $O(h)$ como veremos adiante.

MÉTODO DE EULER IMPLÍCITO

O Método de Euler Implícito é obtido da mesma equação inicial do Método de Euler Explícito, entretanto é centrado em t_{i+1} . Geometricamente, em vez de usar a reta tangente ao ponto $(t_i, y(t_i))$ o método implícito usa a tangente do próximo ponto $(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$, aumentando a

estabilidade. Podemos derivá-lo integrando (3.6) em ambos lados, de t_{i+1} a t_i ,

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt$$

e aproximando a integral pelo método do retângulo pelo lado direito obtemos

$$\begin{aligned} y(t_{i+1}) - y(t_i) &\cong hf(t_{i+1}, y(t_{i+1})) \\ y(t_{i+1}) &\cong y(t_i) + hf(t_{i+1}, y(t_{i+1})) \\ y(t_{i+1}) &\cong y(t_i) + hy'(t_{i+1}) \end{aligned}$$

onde $h = t_{i+1} - t_i$.

O erro de truncamento local deste método é similar em magnitude ao erro de truncamento local do Método de Euler Explícito e a ordem de convergência também é similar (ver [3], p.51). As duas maiores diferenças entre os métodos são:

- O Método de Euler Implícito é mais custoso computacionalmente em cada passo, pois o termo $y(t_{i+1})$ aparece dos dois lados da equação, sendo que em EDO's não lineares, torna-se necessária a resolução de uma equação não linear em cada passo no tempo.
- Para uma dada Equação Stiff (de maneira geral, uma Equação Stiff é uma equação diferencial na qual certos métodos numéricos são numericamente instáveis), o Método de Euler Explícito necessitará de tamanhos de passos bastante reduzidos para mitigar os erros de aproximação, o que resulta numa discretização mais refinada e, portanto, num substancial número de passos. Já o Método de Euler Implícito é mais estável e requer bem menos passos que o método explícito.

MÉTODO DE TAYLOR DE ORDEM N

O Método de Taylor nada mais é que uma generalização do Método de Euler para diferentes valores de n , ou seja, o Método de Euler é o caso particular do Método de Taylor quando $n = 1$. A seguir apresentamos um importante resultado do erro obtido nestes métodos.

Teorema 3. *Se o Método de Taylor de ordem n é usado para aproximar a solução de*

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad a \leq t \leq b, \quad y(a) = \alpha,$$

com tamanho de passo h e se $y \in C^{n+1}[a, b]$, então o erro de truncamento local é $O(h^n)$.

O erro de truncamento local fornece um parâmetro importante para comparar a eficiência de diferentes métodos numéricos. Em um passo específico ele mede a diferença entre a solução exata da equação diferencial e a solução aproximada. Considere o problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), \quad a \leq t \leq b, \quad y(a) = \alpha.$$

O método das diferenças

$$\begin{aligned}w_0 &= \alpha \\w_{i+1} &= w_i + h\phi(t_i, w_i), \quad \text{para cada } i = 0, 1, \dots, N-1,\end{aligned}$$

tem erro de truncamento local dado por

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{y_{i+1} - (y_i + h\phi(t_i, y_i))}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \phi(t_i, y_i),$$

para cada $i = 0, 1, \dots, N-1$, onde y_i e y_{i+1} denotam a solução em t_i e t_{i+1} respectivamente. Este erro é um erro local porque mede a precisão do método em um passo específico, assumindo que o método é exato no passo anterior. Como tal, depende da equação diferencial e do tamanho do passo dado na aproximação. Pelo Teorema de Taylor deduzimos que o Método de Euler tem erro de truncamento local

$$\tau_{i+1}(h) = \frac{h}{2}y''(\xi_i), \quad \text{para algum } \xi_i \in (t_i, t_{i+1}).$$

Quando $y''(t)$ é limitado por uma constante M em $[a, b]$, isto implica

$$|\tau_{i+1}(h)| \leq \frac{h}{2}M,$$

portanto o erro de truncamento local do Método de Euler é $O(h)$.

Entre os métodos numéricos para resolver equações diferenciais ordinárias escolhe-se comumente aquele que tenha a maior ordem do erro de truncamento local $O(h^p)$, ou seja o maior valor de p possível, desde que se mantenha o número e a complexidade dos cálculos dentro de um limite razoável.

Neste trabalho iremos empregar o método de Euler implícito para discretização temporal. Também podemos fazer uso dos métodos de Taylor de ordem n ou de Runge-Kutta de ordem mais alta para a discretização temporal, entretanto tais discretizações necessitam do uso de limitadores para manter a estabilidade do método numérico ([7], [8]) e demandaria um estudo mais aprofundado em tais técnicas. Ademais, os métodos de aproximação de 1^a ordem na discretização temporal utilizados apresentam aproximações suficientemente satisfatórias para o propósito deste trabalho.

Maiores detalhes sobre o método de Runge-Kutta e os algoritmos de implementação podem ser obtidos em [5] e [7].

4. MÉTODO DE GALERKIN DESCONTÍ- NUO

Neste capítulo deduziremos o método numérico de Galerkin Descontínuo para uma equação de difusão em \mathbb{R}^2 , detalharemos o processo de discretização do domínio espacial e temporal, e realizaremos manipulações apropriadas no problema inicial para apresentá-lo em sua forma fraca (variacional). Na sequência, com a discretização do problema, apresentaremos o sistema de equações a ser solucionado computacionalmente para obtenção da solução aproximada da EDP. Atenção especial será dada à descrição e montagem das matrizes e vetores que compõem o sistema de equações.

Este capítulo, com algumas adaptações e inclusões referenciadas no texto, tem como referência fundamental o artigo de Frank, Reuter, Azinger e Knabner [11].

4.1 PROBLEMA MODELO

Seja $J := (0, t_{final})$ um intervalo de tempo finito e $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio poligonal limitado com fronteira $\partial\Omega$ subdividida em partes $\partial\Omega_D$ e $\partial\Omega_N$ sobre as quais as condições de Dirichlet e Neumann são respectivamente impostas. Consideremos a equação de difusão

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} - \nabla \cdot [d(t, x)\nabla c(t, x)] = f(t, x) \quad \text{em } J \times \Omega, \quad (4.1)$$

sendo $c : J \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ a concentração, com coeficientes $d : J \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$ e fonte $f : J \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ conhecidas.

Considere ainda as seguintes condições iniciais e de fronteira:

$$c = c_D \quad \text{em } J \times \partial\Omega_D \quad (4.2a)$$

$$-\nabla c \cdot \nu = g_N \quad \text{em } J \times \partial\Omega_N \quad (4.2b)$$

$$c = c^0 \quad \text{em } \{0\} \times \Omega \quad (4.2c)$$

com as condições iniciais $c^0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ e de fronteira $c_D : J \times \partial\Omega_D \rightarrow \mathbb{R}$, $g_N : J \times \partial\Omega_N \rightarrow \mathbb{R}$, onde ν denota o vetor normal exterior ao contorno $\partial\Omega$.

Iremos aplicar o método de Galerkin Descontínuo na discretização espacial do problema modelo (4.1)-(4.2) através de uma partição/malha formada por triângulos do domínio Ω . Para

discretização temporal em J iremos empregar o método de Euler implícito. Mais detalhes podem ser encontrados em [9], [11] e [21].

Porém, também podem ser utilizadas outras discretizações que separam tempo e espaço, onde discretiza-se a variável espacial usando elementos finitos ou diferenças finitas resultando num problema semi-discreto, tendo um sistema linear de EDO's a solucionar, e um outro método para discretizar a variável temporal será necessário.

4.2 DISCRETIZAÇÃO PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS: DEFINIÇÃO E NOTAÇÕES

Para compreender o Método de Galerkin Descontínuo e fazer sua aplicação em um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, é necessário construir um espaço de dimensão finita ou espaço de elementos finitos.

Segundo Johnson [15], para determinar um espaço de elementos finitos V_h é preciso especificar:

- uma triangulação \mathcal{T}_h do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$;
- a natureza das funções $v \in V_h$ em cada elemento $\tau_k \in \mathcal{T}_h$;
- os parâmetros usados para descrever as funções.

TRIANGULAÇÃO

Uma **triangulação** \mathcal{T}_h do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (discretização da malha em triângulos) é uma partição deste domínio em K triângulos fechados. Formalmente podemos defini-la como $\mathcal{T}_h = \{\tau_k \in \Omega \mid k = 1, 2, \dots, K \text{ e } K \in \mathbb{N}\}$, onde cada τ_k é chamado de **elemento** desta partição. Geometricamente, podemos visualizar os elementos como intervalos quando $\Omega \subset \mathbb{R}$, triângulos quando $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ou tetraedros quando $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Definimos também \mathcal{E}_Ω o conjunto de arestas interiores, $\mathcal{E}_{\partial\Omega}$ o conjunto de arestas de fronteira e $\mathcal{E} := \mathcal{E}_\Omega \cup \mathcal{E}_{\partial\Omega} = \{E\}$ o conjunto de todas as arestas (Figura 4.1). Dividimos ainda as arestas de fronteira em Dirichlet \mathcal{E}_D e Neumann \mathcal{E}_N .

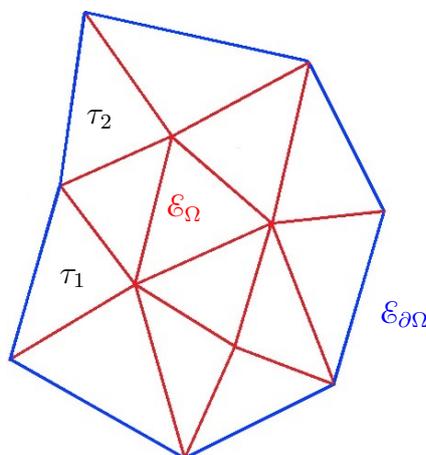


Figura 4.1: Triangulação de um polígono $\Omega \subset \mathbb{R}^2$.

Em um domínio Ω poligonal temos que $\bar{\Omega} = \bigcup_{i=1}^K \tau_i$. Além disso $\forall i \neq j, \tau_i \cap \tau_j = E$ (a interseção de elementos é uma aresta) ou $\tau_i \cap \tau_j = p$ (a interseção de elementos é um vértice p em comum).

Para cada $\tau_k \in \mathcal{T}_h$ definimos:

- $h_{\tau_k} :=$ diâmetro de τ_k , ou seja, é o lado de maior comprimento de τ_k ;
- $h := \max_{\tau_k \in \mathcal{T}_h} h_{\tau_k}$. A quantidade h é a medida de quão refinada é a partição.

Denotaremos por ν_{τ_k} o vetor unitário normal externo ao elemento τ_k em sua fronteira $\partial\tau_k$. Para uma aresta interior $E \in \mathcal{E}_\Omega$ compartilhada por triângulos T^- e T^+ e $\mathbf{x} \in E$, iremos definir os valores laterais de uma função escalar $w = w(\mathbf{x})$ por

$$w^-(\mathbf{x}) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} w(\mathbf{x} - \varepsilon \nu_{T^-}) \quad \text{e} \quad w^+(\mathbf{x}) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} w(\mathbf{x} - \varepsilon \nu_{T^+}).$$

Para uma aresta na borda $E \in \mathcal{E}_{\partial\Omega}$, somente $w^-(\mathbf{x})$ faz sentido. Os valores laterais de uma função vetorial \mathbf{y} são definidos analogamente. A média e o salto de w em E são dados por

$$\{ | w | \} := (w^- + w^+)/2 \quad \text{e} \quad [[w]] := w^- \nu_{T^-} + w^+ \nu_{T^+} = (w^- - w^+) \nu_{T^-}.$$

NATUREZA E PARÂMETRO DAS FUNÇÕES

A natureza das funções usadas para aproximar a solução do problema (4.1) pode ser linear, quadrática, cúbica etc, e reflete, por exemplo, no grau de precisão da solução numérica obtida e no custo computacional do método. Neste trabalho o espaço de elementos finitos será o espaço das funções polinomiais por partes, neste caso, polinomiais quando restritas aos triângulos da triangulação \mathcal{T}_h . Para construir este espaço, primeiramente denotaremos por $\mathbb{P}_p(\tau_k)$, o espaço das funções polinomiais de grau menor ou igual a p em um triângulo $\tau_k \in \mathcal{T}_h$. Em seguida, denotamos o espaço das funções polinomiais por partes na triangulação \mathcal{T}_h por $\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h) := \{w_h : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R} \mid \forall \tau_k \in \mathcal{T}_h, w_h|_{\tau_k} \in \mathbb{P}_p(\tau_k)\}$.

4.3 FORMULAÇÃO MISTA

O método de Galerkin Descontínuo local é resolvido para duas variáveis: a solução e o seu gradiente. Assim temos o que chamamos de uma formulação mista, pois introduziremos uma variável vetorial $\mathbf{z} := -\nabla c$ ao problema inicial que acrescentará uma segunda equação a ser resolvida. Reescreveremos também (4.1) e (4.2) com as mudanças necessárias nas condições de

fronteira:

$$\mathbf{z} = -\nabla c \quad \text{em } J \times \partial\Omega_D \quad (4.3a)$$

$$\partial_t c + \nabla \cdot (d\mathbf{z}) = f \quad \text{em } J \times \partial\Omega_D \quad (4.3b)$$

$$c = c_D \quad \text{em } J \times \partial\Omega_D \quad (4.3c)$$

$$\mathbf{z} \cdot \boldsymbol{\nu} = g_N \quad \text{em } J \times \partial\Omega_N \quad (4.3d)$$

$$c = c^0 \quad \text{em } \{0\} \times \Omega \quad (4.3e)$$

4.4 FORMULAÇÃO FRACA OU VARIACIONAL

É possível transformar os problemas que possuem um operador diferencial em um outro formato, chamado de forma fraca do operador, que nada mais é que a representação do problema através de integrais as quais já englobam as condições de contorno.

Para fazer isto utilizaremos o processo de integração por partes no \mathbb{R}^n mostrado a seguir.

INTEGRAÇÃO POR PARTES EM \mathbb{R}^n

A fim de deduzir este processo de integração, enunciaremos primeiramente o Teorema do Divergente, cuja demonstração pode ser encontrada em [1].

Teorema 4 (Teorema do Divergente). *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e limitado com fronteira C^1 . Se u é uma função de classe C^1 em uma vizinhança aberta O de $\bar{\Omega}$, isto é, $u \in C^1(O)$, então para cada $i \in \{1, 2, \dots, n\}$*

$$\int_{\Omega} u_{x_i} dV = \int_{\partial\Omega} u_i \hat{\mathbf{n}}_i dS,$$

onde $\hat{\mathbf{n}} : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ é o vetor unitário normal exterior à fronteira $\partial\Omega$. Equivalentemente,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot u dV = \int_{\partial\Omega} u \cdot \hat{\mathbf{n}} dS.$$

Apresentado este teorema, suponha $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um subconjunto limitado com fronteira suave por partes $\Gamma = \partial\Omega$, uma função escalar $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ e um função vetorial (campo vetorial) $\mathbf{F} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^n$, ambas funções de classe C^1 em $\bar{\Omega}$. A regra do produto do divergente setencia

$$\nabla \cdot (u\mathbf{F}) = u\nabla \cdot \mathbf{F} + \nabla u \cdot \mathbf{F}.$$

Integrando sobre Ω com respeito a forma de volume padrão de Riemann em \mathbb{R}^n , aqui denotada por $d\Omega$, e aplicando o Teorema 4 (Teorema do Divergente) obtemos

$$\int_{\Gamma} u\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\Gamma = \int_{\Omega} \nabla \cdot (u\mathbf{F}) d\Omega = \int_{\Omega} u\nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{F} d\Omega$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor unitário normal exterior à fronteira Γ , integrado com respeito a forma de volume padrão de Riemann em \mathbb{R}^{n-1} , aqui denotada por $d\Gamma$.

Rearranjando os termos obtemos a fórmula de integração por partes em \mathbb{R}^n

$$\int_{\Omega} u \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \int_{\Gamma} u \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \mathbf{F} d\Omega. \quad (4.4)$$

DEDUÇÃO DA FORMULAÇÃO FRACA OU VARIACIONAL

Para construir a forma fraca, multiplicamos a forma forte, composta pelas equações originais do problema (4.3a) e (4.3b), pelas *funções teste* suaves $\mathbf{y} : T \rightarrow \mathbb{R}^2$ e $w : T \rightarrow \mathbb{R}$ respectivamente. Para (4.3a) obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{z} + \nabla \mathbf{c} &= 0 \\ \mathbf{y} \cdot \mathbf{z}(t) + \mathbf{y} \cdot \nabla \mathbf{c} &= 0. \end{aligned}$$

Em seguida, integra-se a equação em um triângulo arbitrário T

$$\int_T \mathbf{y} \cdot \mathbf{z}(t) dA + \int_T (\mathbf{y} \cdot \nabla \mathbf{c}) dA = 0$$

e pela equação (4.4), deduzida através do Teorema 4 (Teorema do Divergente), obtemos

$$\int_T (\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}(t)) dA - \int_T (c(t) \nabla \cdot \mathbf{y}) dA + \int_{\partial T} (c(t) \mathbf{y} \cdot \boldsymbol{\nu}_T) dS = 0.$$

Analogamente para (4.3b) obtemos

$$\begin{aligned} w \partial_t c(t) + w \nabla \cdot (d\mathbf{z}) &= wf \\ \int_T w \partial_t c(t) dA + \int_T w \nabla \cdot (d\mathbf{z}) dA &= \int_T wf dA \end{aligned}$$

e assim da equação (4.4) obtemos

$$\int_T w \partial_t c(t) dA - \int_T (d(t) \mathbf{z}(t) \cdot \nabla \mathbf{w}) dA + \int_{\partial T} (w d(t) \mathbf{z}(t) \cdot \boldsymbol{\nu}_T) dS = \int_T wf(t) dA.$$

A partir desta seção, os elementos de integral de área dA e integral de linha dS serão omitidos a fim de não sobrecarregar a notação.

4.5 FORMULAÇÃO SEMI-DISCRETA

Por vezes é útil realizar o processo de discretização em dois estágios. No primeiro discretiza-se a equação somente no espaço, deixando o problema contínuo no tempo. Isto levará a um sistema de EDO's no tempo chamado de "equações semi-discretas". No segundo estágio o tempo é discretizado e o sistema é resolvido através de um método numérico para EDO's (conforme

seção 4.10 adiante).

Neste primeiro estágio, de discretização da dimensão espacial, preocupamo-nos com a triangulação \mathcal{T}_h do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ e com a construção do espaço das funções polinomiais por partes $\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h) := \{w_h : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R} \mid \forall \tau_k \in \mathcal{T}_h, w_h|_{\tau_k} \in \mathbb{P}_p(\tau_k)\}$.

Na formulação semi-discreta aproximaremos as funções coeficiente $d(t)$, $f(t)$ e c^0 (dado $t \in J$ fixado) por funções polinomiais por partes, ou seja, $d_h(t)$, $f_h(t)$ e $c_h^0 \in \mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$ (mais detalhes serão apresentados na seção 5.3). Como estas aproximações são feitas usando a projeção ortogonal do espaço vetorial $L^2(\bar{\Omega})$ no subespaço vetorial $\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$, a precisão aumenta de acordo com a ordem polinomial p . Na seção 3.1.1 descrevemos a projeção ortogonal de $L^2(I)$ em um subespaço vetorial S . A projeção ortogonal de $L^2(\bar{\Omega})$ em $\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$ segue a mesma ideia.

Incorporando as condições de fronteira (4.3c) e (4.3d) e adicionando os termos de penalidade para os saltos nas variáveis primárias, a formulação semi-discreta nos leva ao seguinte problema:

Encontrar $(\mathbf{z}_h(t), c_h(t)) \in [\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)]^2 \times \mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$ tal que as equações seguintes sejam satisfeitas para $t \in J$ e $\forall T^- \in \mathcal{T}_h$, $\forall \mathbf{y}_h \in [\mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)]^2$, $\forall w_h \in \mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$:

$$\int_{T^-} \mathbf{y}_h \cdot \mathbf{z}_h(t) - \int_{T^-} c_h(t) \nabla \cdot \mathbf{y}_h + \int_{\partial T^-} \mathbf{y}_h^- \cdot \boldsymbol{\nu}_{T^-} \begin{cases} \{ | c_h(t) | \} & \text{em } \varepsilon_\Omega \\ c_D(t) & \text{em } \varepsilon_D \\ c_h^-(t) & \text{em } \varepsilon_N \end{cases} = 0 \quad (4.5a)$$

$$\int_{T^-} w_h \partial_t c_h(t) - \int_{T^-} d_h(t) \mathbf{z}_h(t) \cdot \nabla w_h + \int_{\partial T^-} w_h^- \begin{cases} \{ | d_h(t) \mathbf{z}_h(t) | \} \cdot \boldsymbol{\nu}_{T^-} + \underbrace{\frac{\eta}{h_{T^-}} [[c_h(t)]] \cdot \boldsymbol{\nu}_{T^-}}_{*} & \text{em } \varepsilon_\Omega \\ d_h^-(t) \mathbf{z}_h^-(t) \cdot \boldsymbol{\nu}_{T^-} + \underbrace{\frac{\eta}{h_{T^-}} (c_h^-(t) - c_D(t))}_{**} & \text{em } \varepsilon_D \\ d_h^-(t) g_N(t) & \text{em } \varepsilon_N \end{cases} \\ = \int_{T^-} w_h f_h(t), \quad (4.5b)$$

onde * e ** são chamados de termos de penalidade, $\eta > 0$ é chamado de coeficiente de penalidade e h_{T^-} é o diâmetro do elemento T^- (neste caso o comprimento da maior aresta do triângulo). Os termos de penalidade $\frac{\eta}{h_{T^-}} [[c_h(t)]] \cdot \boldsymbol{\nu}_{T^-}$ e $\frac{\eta}{h_{T^-}} (c_h^-(t) - c_D(t))$ em (4.5b) garantem uma matriz de posto completo no sistema de equações a ser resolvido, na ausência de derivadas do tempo. Esse resultado é dado no Teorema 5 a seguir, que garante a existência e unicidade da solução para o esquema de equações apresentado. Uma prova deste teorema pode ser encontrada em [[20], Lema 2.15]].

Teorema 5. *Suponha $\delta_1 = \frac{\eta}{h_{T^-}} > 0$. Logo existe uma única solução para o esquema de equações (4.5a)-(4.5b).*

4.6 REPRESENTAÇÃO DAS BASES LOCAIS

A fim de representar as bases locais iniciemos com a definição de suporte de uma função. Seja $f : X \rightarrow V$ uma função definida em um espaço topológico arbitrário X com imagem num

espaço vetorial V . O suporte de uma função é definido como

$$\text{supp}(f) = \overline{\{x \in X : f(x) \neq 0\}},$$

ou seja, é o menor subconjunto fechado de X onde a função é diferente de 0.

Ao contrário dos métodos finitos tradicionais que usam funções de base contínuas globais, o Método do Galerkin Descontínuo não possui exigência de continuidade nas fronteiras dos elementos (triângulos), portanto o suporte de uma função base $\phi_{ki} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ é o triângulo $\tau_k \in \mathcal{T}_h$, ou seja, $\phi_{ki} = 0$ em $\bar{\Omega} \setminus \tau_k$. Essas funções podem ser definidas arbitrariamente, desde que gerem o espaço $\mathbb{P}_p(\tau_k)$, ou seja,

$$\forall k \in 1, 2, \dots, K, \quad \mathbb{P}_p(\tau_k) = \text{span} \{\phi_{ki}\}_{i \in \{1, 2, \dots, N\}}, \quad \text{onde } N := \frac{(p+1)(p+2)}{2} = \binom{p+2}{p}$$

é N é o número de graus de liberdade locais e KN o número de graus de liberdade globais (para mais detalhes ver [13]). Os graus de liberdade no método de Galerkin Discontínuo representam nada mais que a dimensão do espaço vetorial $\mathbb{P}_p(\tau_k)$. O número de graus de liberdade N em cada triângulo pode variar de triângulo para triângulo, a depender da ordem de aproximação polinomial p adotada em cada um, porém neste trabalho N será igual para todo triângulo da malha. As funções de base polinomiais até ordem 2 empregadas no triângulo de referência \hat{T} , definido na seção 5.1, e aplicadas na implementação, são as seguintes:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_1(\hat{x}) &= \sqrt{2}, \\ \hat{\phi}_2(\hat{x}) &= 2 - 6\hat{x}^1, \\ \hat{\phi}_3(\hat{x}) &= 2\sqrt{3}(1 - \hat{x}^1 - 2\hat{x}^2), \\ \hat{\phi}_4(\hat{x}) &= \sqrt{6}((10\hat{x}^1 - 8)\hat{x}^1 + 1), \\ \hat{\phi}_5(\hat{x}) &= \sqrt{3}((5\hat{x}^1 - 4)\hat{x}^1 + (-15\hat{x}^2 + 12)\hat{x}^2 - 1), \\ \hat{\phi}_6(\hat{x}) &= 3\sqrt{5}((3\hat{x}^1 + 8\hat{x}^2 - 4)\hat{x}^1 + (3\hat{x}^2 - 4)\hat{x}^2 + 1), \end{aligned}$$

onde $\mathbb{P}_0(\hat{T}) = \text{span}\{\hat{\phi}_1\}$, $\mathbb{P}_1(\hat{T}) = \text{span}\{\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \hat{\phi}_3\}$ e $\mathbb{P}_2(\hat{T}) = \text{span}\{\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \hat{\phi}_3, \hat{\phi}_4, \hat{\phi}_5, \hat{\phi}_6\}$, ou seja, de forma geral $\mathbb{P}_p(\hat{T}) = \text{span}\{\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \dots, \hat{\phi}_N\}$ e as funções base são ortonormais em relação ao produto escalar em L^2 sobre \hat{T} (ver seção 3.1.1), propriedade que fornece boas vantagens computacionais como será observado posteriormente. Essas funções não fornecem propriedades de interpolação nos nós da malha como as funções de base de Lagrange que são frequentemente usadas nos métodos de Elementos Finitos contínuos.

Soluções locais para c_h e $\mathbf{z}_h(t)$ podem ser representadas em termos das funções de base:

$$c_h(t, \mathbf{x})|_{T_k} := \sum_{j=1}^N C_{kj}(t) \phi_{kj}(\mathbf{x}) \quad (4.6)$$

$$\mathbf{z}_h(t, \mathbf{x})|_{T_k} := \sum_{j=1}^N \left(Z_{kj}^1(t) \begin{bmatrix} \phi_{kj}(\mathbf{x}) \\ 0 \end{bmatrix} + Z_{kj}^2(t) \begin{bmatrix} 0 \\ \phi_{kj}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \right) = \sum_{j=1}^N \begin{bmatrix} Z_{kj}^1(t) \phi_{kj}(\mathbf{x}) \\ Z_{kj}^2(t) \phi_{kj}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Representamos os coeficientes associados as variáveis bidimensionais ϕ_{kj} como vetores $C(t) := C_{kj}$, $Z^1(t) := Z_{kj}^1$ e $Z^2(t) := Z_{kj}^2$. De forma similar expressa-se localmente (em cada T_k) as funções coeficiente como vetores $[C^0]_k$ para c_h^0 , $[D]_k$ para d_h e $[F]_k$ para f_h .

4.7 SISTEMA DE EQUAÇÕES

Na seção 4.5 deduzimos as equações discretizadas (4.5a) e (4.5b). Testando a equação (4.5a) com $\mathbf{y} = [\phi_{ki}, 0]^\top$ e $\mathbf{y} = [0, \phi_{ki}]^\top$; a equação (4.5b) com $w_h = \phi_{ki}$, para $i \in \{1, 2, \dots, N\}$; e utilizando as soluções c_h (4.6) e \mathbf{z}_h (4.7) representadas em termos das funções de base, obtém-se um sistema de equações dependente do tempo

$$\underbrace{\sum_{j=1}^N Z_{kj}^m(t) \int_{T_k} \phi_{ki} \phi_{kj}}_I - \underbrace{\sum_{j=1}^N C_{kj}(t) \int_{T_k} \partial_{x^m} \phi_{ki} \phi_{kj}}_II + \underbrace{\int_{\partial T_k} \phi_{k-i} \boldsymbol{\nu}_{k^-}^m}_{III} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^N C_{k-j}(t) \phi_{k-j} + \sum_{j=1}^N C_{k+j}(t) \phi_{k+j} \right) & \text{em } \xi_\Omega \\ c_D(t) & \text{em } \xi_D \\ \sum_{j=1}^N C_{k-j}(t) \phi_{k-j} & \text{em } \xi_N \end{array} \right\} = 0$$

para $m \in \{1, 2\}$,

$$\underbrace{\sum_{j=1}^N \partial_t C_{kj}(t) \int_{T_k} \phi_{ki} \phi_{kj}}_IV - \underbrace{\sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^2 Z_{kl}^m(t) \int_{T_k} \partial_{x^m} \phi_{ki} \phi_{kl} \phi_{kj}}_V + \underbrace{\int_{\partial T_k} \phi_{k-i}}_VI \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{2} \sum_{m=1}^2 \boldsymbol{\nu}_{k^-}^m \left(\sum_{l=1}^N D_{k-l}(t) \phi_{k-l} \sum_{j=1}^N Z_{k-j}^m(t) \phi_{k-j} + \sum_{l=1}^N D_{k+l}(t) \phi_{k+l} \sum_{j=1}^N Z_{k+j}^m(t) \phi_{k+j} \right) \\ + \frac{\eta}{h_{T_{k^-}}} \left(\sum_{j=1}^N C_{k-j}(t) \phi_{k-j} - \sum_{j=1}^N C_{k+j}(t) \phi_{k+j} \right) & \text{em } \xi_\Omega \\ \sum_{m=1}^2 \boldsymbol{\nu}_{k^-}^m \sum_{l=1}^N D_{k-l}(t) \phi_{k-l} \sum_{j=1}^N Z_{k-j}^m(t) \phi_{k-j} + \frac{\eta}{h_{T_{k^-}}} \left(\sum_{j=1}^N C_{k-j}(t) \phi_{k-j} - c_D(t) \right) & \text{em } \xi_D \\ g_N(t) \sum_{l=1}^N D_{k-l}(t) \phi_{k-l} & \text{em } \xi_N \end{array} \right\}$$

$$= \underbrace{\sum_{l=1}^N F_{kl}(t) \int_{T_k} \phi_{ki} \phi_{kl}}_VII$$

onde $\boldsymbol{\nu}_{T_k} := \boldsymbol{\nu}_k = [\nu_k^1, \nu_k^2]^\top$ e T_k é identificado como T_{k^-} nas integrais de fronteira. Escrevendo o sistema de equações acima em sua forma matricial temos

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ M \partial_t \mathbf{C} \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{0} & -\mathbf{H}^1 + \mathbf{Q}^1 + \mathbf{Q}_N^1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{M} & -\mathbf{H}^2 + \mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}_N^2 \\ -\mathbf{G}^1 + \mathbf{R}^1 + \mathbf{R}_D^1 & -\mathbf{G}^2 + \mathbf{R}^2 + \mathbf{R}_D^2 & \eta(\mathbf{S} + \mathbf{S}_D) \end{bmatrix}}_{:= \mathbf{A}(t)} \begin{bmatrix} \mathbf{Z}^1 \\ \mathbf{Z}^2 \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{J}_D^1 \\ -\mathbf{J}_D^2 \\ \eta \mathbf{K}_D - \mathbf{K}_N + \mathbf{L} \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

com representação pelos vetores

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^m(t) &:= [Z_{11}^m(t) \ \cdots \ Z_{1N}^m(t) \ \cdots \ Z_{K1}^m(t) \ \cdots \ Z_{KN}^m(t)]^\top \text{ para } m \in \{1, 2\}, \\ \mathbf{C}(t) &:= [C_{11}(t) \ \cdots \ C_{1N}(t) \ \cdots \ C_{K1}(t) \ \cdots \ C_{KN}(t)]^\top. \end{aligned}$$

Notamos que a dimensão do sistema de equações (4.9) é dada por $3KN$. As matrizes em bloco e o lado direito deste sistema de equações são detalhados nas seções a seguir.

4.8 DETALHAMENTO DAS MATRIZES DE ÁREA DO SISTEMA DISCRETO

As matrizes descritas nesta seção são aquelas que agrupam os termos com integrais de área \int_{T_k} . Essas matrizes possuem estrutura em bloco esparsa (preenchidas com zeros nas entradas fora dos blocos).

A *matriz massa* $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$ em I e IV é definida em termos de componente como

$$[\mathbf{M}]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \int_{T_k} \phi_{ki} \phi_{kj}.$$

Dado que as funções de base ϕ_{ki} têm suporte apenas em cada triângulo T_k , \mathbf{M} tem uma estrutura de blocos diagonal

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{T_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \mathbf{M}_{T_K} \end{bmatrix} \quad \text{sendo} \quad \mathbf{M}_{T_k} := \int_{T_k} \begin{bmatrix} \phi_{k1} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{k1} \phi_{kN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{kN} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{kN} \phi_{kN} \end{bmatrix}.$$

Como é possível observar, a matriz \mathbf{M} consiste de K matrizes de massa locais $\mathbf{M}_{T_k} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e daqui por diante será escrita com a notação $\mathbf{M} = \text{diag}(\mathbf{M}_{T_1}, \dots, \mathbf{M}_{T_K})$, assim como serão outras matrizes diagonais que surgirem.

As matrizes em bloco $\mathbf{H}^m \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$, $m \in \{1, 2\}$ em II são dadas por

$$[\mathbf{H}^m]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \int_{T_k} \partial_{x^m} \phi_{ki} \phi_{kj}.$$

De forma similar a \mathbf{M} , as matrizes $\mathbf{H}^m = \text{diag}(\mathbf{H}_{T_1}^m, \dots, \mathbf{H}_{T_K}^m)$ são blocadas e diagonais com matrizes locais

$$\mathbf{H}_{T_k}^m := \int_{T_k} \begin{bmatrix} \partial_{x^m} \phi_{k1} \phi_{k1} & \cdots & \partial_{x^m} \phi_{k1} \phi_{kN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{x^m} \phi_{kN} \phi_{k1} & \cdots & \partial_{x^m} \phi_{kN} \phi_{kN} \end{bmatrix}.$$

De fato, todas as matrizes blocadas de integrais de volume (integral da função sobre a área de um triângulo T_k) têm estrutura diagonal blocada devido ao suporte local dos integrandos.

As matrizes blocadas $\mathbf{G}^m \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$, $m \in \{1, 2\}$ em V

$$[\mathbf{G}^m]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \int_{T_k} \partial_{x^m} \phi_{ki} \phi_{kl} \phi_{kj}$$

possuem tanto termos dependentes do tempo quanto não dependentes. As matrizes $\mathbf{G}^m = \text{diag}(G_{T_1}^m, \dots, G_{T_k}^m)$ têm matrizes locais

$$\mathbf{G}_{T_k}^m := \sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \int_{T_k} \begin{bmatrix} \partial_{x^m} \phi_{k1} \phi_{kl} \phi_{k1} & \dots & \partial_{x^m} \phi_{k1} \phi_{kl} \phi_{kN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{x^m} \phi_{kN} \phi_{kl} \phi_{k1} & \dots & \partial_{x^m} \phi_{kN} \phi_{kl} \phi_{kN} \end{bmatrix}.$$

O vetor $\mathbf{L}(t)$ resultante de VII é obtido pela multiplicação do vetor representante de $f_h(t)$ pela matriz massa global \mathbf{M} :

$$\mathbf{L}(t) = \mathbf{M} [F_{11}(t) \quad \dots \quad F_{1N}(t) \quad \dots \quad F_{K1}(t) \quad \dots \quad F_{KN}(t)]^\top.$$

4.9 DETALHAMENTO DAS MATRIZES DE FRONTEIRA DO SISTEMA DISCRETO

Nesta seção estão detalhadas as matrizes que agrupam termos com integrais sobre a fronteira $\int_{\partial T_k}$.

ARESTAS INTERIORES \mathcal{E}_Ω

Nesta seção, consideramos um triângulo fixo $T_k = T_{k^-}$ com aresta interior $E_{k^-n^-} \in \partial T_{k^-} \cap \mathcal{E}_\Omega = \partial T_{k^-} \cap \partial T_{k^+}$ compartilhada entre um triângulo adjacente T_{k^+} e associada com índices de aresta local $n^-, n^+ \in \{1, 2, 3\}$ (Figura 4.2).

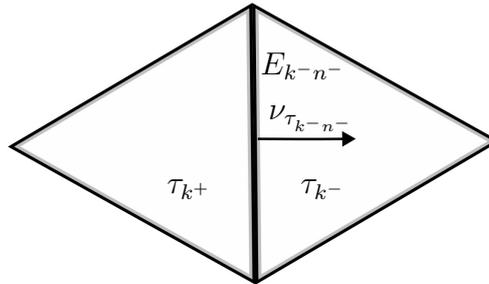


Figura 4.2: Triângulos τ_k adjacentes com aresta em comum $E_{k^-n^-}$.

Primeiro, consideraremos o termo III. Para um $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ fixo, há a contribuição de ϕ_{k^-i} em cada matriz blocada \mathbf{Q}^m , $m \in \{1, 2\}$,

$$\frac{1}{2} \nu_{k^-n^-}^m \sum_{j=1}^N C_{k^-j}(t) \int_{E_{k^-n^-}} \phi_{k^-i} \phi_{k^-j} + \frac{1}{2} \nu_{k^-n^-}^m \sum_{j=1}^N C_{k^+j}(t) \int_{E_{k^-n^-}} \phi_{k^-i} \phi_{k^+j}.$$

As entradas nos blocos da diagonal de $\mathbf{Q}^m \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$ são dadas em termos de componentes

por

$$[\mathbf{Q}^m]_{(k-1)N+i,(k-1)N+j} := \frac{1}{2} \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \boldsymbol{\nu}_{kn}^m \int_{E_{kn}} \phi_{ki} \phi_{kj} = \frac{1}{2} \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \boldsymbol{\nu}_{kn}^m [\mathbf{S}_{E_{kn}}]_{i,j},$$

onde a matriz local $\mathbf{S}_{E_{kn}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ corresponde a aresta interior E_{kn} de T_k , $n \in \{1, 2, 3\}$:

$$\mathbf{S}_{E_{kn}} := \int_{E_{kn}} \begin{bmatrix} \phi_{k1} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{k1} \phi_{kN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{kN} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{kN} \phi_{kN} \end{bmatrix}.$$

As entradas fora das diagonais blocadas em \mathbf{Q}^m são não nulas para os pares de triângulos T_{K^-}, T_{K^+} com $\partial T_{K^-} \cap \partial T_{K^+} \neq \emptyset$. Elas consistem de termos mistos contendo funções de base de ambos os triângulos adjacentes e são dadas por

$$[\mathbf{Q}^m]_{(k^- - 1)N+i,(k^+ - 1)N+j} := \frac{1}{2} \boldsymbol{\nu}_{k^- n^-}^m \int_{E_{k^- n^-}} \phi_{k^- i} \phi_{k^+ j}$$

Observe que o índice de aresta local n^- é dado implicitamente uma vez que $\partial T_{K^-} \cap \partial T_{K^+} \neq \emptyset$ consiste de exatamente uma aresta $E_{k^- n^-} = E_{k^+ n^+}$.

A seguir, consideremos o item VI contendo os termos de *média e salto* que produzem contribuições às múltiplas matrizes blocadas por $\phi_{k^- i}$,

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\nu}_{k^- n^-}^m \sum_{l=1}^N D_{k^- l}(t) \sum_{j=1}^N Z_{k^- j}^m(t) \int_{E_{k^- n^-}} \phi_{k^- i} \phi_{k^- l} \phi_{k^- j} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\nu}_{k^- n^-}^m \sum_{l=1}^N D_{k^+ l}(t) \sum_{j=1}^N Z_{k^+ j}^m(t) \int_{E_{k^- n^-}} \phi_{k^- i} \phi_{k^+ l} \phi_{k^+ j}$$

e

$$\frac{\eta}{h_{T_{k^-}}} \sum_{j=1}^N C_{k^- j}(t) \int_{E_{k^- n^-}} \phi_{k^- i} \phi_{k^- j} - \frac{\eta}{h_{T_{k^-}}} \sum_{j=1}^N C_{k^+ j}(t) \int_{E_{k^- n^-}} \phi_{k^- i} \phi_{k^+ j}.$$

As primeiras integrais são responsáveis pelas entradas nos blocos da diagonal e fora da diagonal da matriz blocada $\mathbf{R}^m \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$ que terminam na última linha do sistema (4.10). Entradas nos blocos diagonais são dadas em termos de componentes como

$$[\mathbf{R}^m]_{(k-1)N+i,(k-1)N+j} := \frac{1}{2} \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \boldsymbol{\nu}_{kn}^m \sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \int_{E_{kn}} \phi_{ki} \phi_{kl} \phi_{kj} = \frac{1}{2} \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \boldsymbol{\nu}_{kn}^m [\mathbf{R}_{E_{kn}}]_{i,j},$$

com

$$\mathbf{R}_{E_{kn}} := \sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \int_{E_{kn}} \begin{bmatrix} \phi_{k1} \phi_{kl} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{k1} \phi_{kl} \phi_{kN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{kN} \phi_{kl} \phi_{k1} & \cdots & \phi_{kN} \phi_{kl} \phi_{kN} \end{bmatrix}.$$

Mais uma vez, entradas em blocos fora da diagonal não nulos consistem de termos mistos:

$$[\mathbf{R}^m]_{(k-1)N+i, (k+1)N+j} := \frac{1}{2} \nu_{k-n}^m \sum_{l=1}^N D_{k+l}(t) \int_{E_{k-n}} \phi_{k-i} \phi_{k+l} \phi_{k+j}.$$

Todos os blocos fora da diagonal correspondentes aos pares de triângulos que não compartilham uma aresta são nulos. A segunda integral do termo VI resulta em uma matriz blocada $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$ similar à \mathbf{Q}^m . Suas entradas diferem somente no coeficiente e na inexistência da normal. O termo h_{T_k} da definição do termo de penalidade em (4.5b) é substituído aqui pelo comprimento da aresta local $|E_{kn}|$ para garantir unicidade do fluxo sobre a aresta que é necessário para garantir a conservação da massa local. Nos blocos diagonais, pode-se utilizar novamente a matriz $\mathbf{S}_{E_{kn}}$ previamente definida e obter

$$[\mathbf{S}]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \frac{1}{|E_{kn}|} \int_{E_{kn}} \phi_{ki} \phi_{kj} = \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_\Omega} \frac{1}{|E_{kn}|} [\mathbf{S}_{E_{kn}}]_{i,j},$$

enquanto as entradas em blocos fora da diagonal são dadas por

$$[\mathbf{S}]_{(k-1)N+i, (k+1)N+j} := -\frac{1}{|E_{k-n}|} \int_{E_{k-n}} \phi_{k-i} \phi_{k+j}.$$

ARESTAS DE DIRICHLET \mathcal{E}_D

Considere a fronteira de Dirichlet $\partial\Omega_D$. A contribuição do termo III consiste somente de dados $c_D(t)$ prescritos e conseqüentemente entram no lado direito do sistema (4.9) como um vetor $\mathbf{J}_D^m \in \mathbb{R}^{KN}$, $m \in \{1, 2\}$ com

$$[\mathbf{J}_D^m]_{(k-1)N+i} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_D} \nu_{kn}^m \int_{E_{kn}} \phi_{ki} c_D(t).$$

O termo VI contém dependências de $\mathbf{z}_h(t)$, $c_h(t)$, e dos dados prescritos $c_D(t)$, assim produz três contribuições ao sistema (4.9): os blocos do lado esquerdo \mathbf{R}_D^m , $\mathbf{S}_D \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$, $m \in \{1, 2\}$

$$[\mathbf{R}_D^m]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_D} \nu_{kn}^m [\mathbf{R}_{E_{kn}}]_{i,j},$$

$$[\mathbf{S}_D]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_D} \frac{1}{|E_{kn}|} [\mathbf{S}_{E_{kn}}]_{i,j},$$

e o vetor do lado direito $\mathbf{K}_D \in \mathbb{R}^{KN}$

$$[\mathbf{K}_D]_{(k-1)N+i} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_D} \frac{1}{|E_{kn}|} \int_{E_{kn}} \phi_{ki} c_D(t).$$

ARESTAS DE NEUMANN \mathcal{E}_N

Considere a fronteira de Neumann $\partial\Omega_N$. O termo III substitui a média da variável primária sobre a aresta pelo valor interior, resultando na matriz blocada diagonal $\mathbf{Q}_N^m \in \mathbb{R}^{KN \times KN}$ com

$$[\mathbf{Q}_N^m]_{(k-1)N+i, (k-1)N+j} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_N} \nu_{kn}^m [\mathbf{S}_{E_{kn}}]_{i,j}.$$

O termo VI contribui com o lado direito do sistema (4.9) uma vez que contém somente dados já fornecidos. O vetor correspondente $\mathbf{K}_N \in \mathbb{R}^{KN}$ é lido

$$[\mathbf{K}_N]_{(k-1)N+i} := \sum_{E_{kn} \in \partial T_k \cap \mathcal{E}_N} \sum_{l=1}^N D_{kl}(t) \int_{E_{kn}} \phi_{ki} \phi_{kl} g_N(t).$$

4.10 DISCRETIZAÇÃO DO TEMPO

O sistema (4.9) é equivalente a

$$\mathbf{W} \partial_t \mathbf{Y}(t) + \mathbf{A}(t) \mathbf{Y}(t) = \mathbf{V}(t) \quad (4.10)$$

onde $\mathbf{A}(t)$ está definido em (4.9), a solução $\mathbf{Y}(t) \in \mathbb{R}^{3KN}$, o vetor do lado direito $\mathbf{V}(t) \in \mathbb{R}^{3KN}$ e a matriz $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{3KN \times 3KN}$ são definidos como

$$\mathbf{Y}(t) := \begin{bmatrix} \mathbf{Z}^1(t) \\ \mathbf{Z}^2(t) \\ \mathbf{C}(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V}(t) := \begin{bmatrix} -\mathbf{J}_D^1(t) \\ -\mathbf{J}_D^2(t) \\ \eta \mathbf{K}_D(t) - \mathbf{K}_N(t) + \mathbf{L}(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{W} := \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{M} \end{bmatrix}.$$

O sistema (4.10) é discretizado usando o Método de Euler Implícito (ver seção 3.2). Para discretizações do tempo com maior ordem de aproximação polinomial são necessários outros métodos, tais como os métodos de Runge-Kutta tipo TVB (*total variation bounded*) [7], a fim de fazer uso eficiente de discretizações do espaço através de métodos de Galerkin Descontínuo de ordem mais alta. Porém, para obter tais métodos torna-se necessário o uso de limitadores, tema de estudo não abordado neste trabalho.

Dada uma discretização do intervalo de tempo J em pontos não necessariamente equidistantes $0 = t^1 < t^2 < \dots < t_{final}$, definimos o **tamanho do passo** $\Delta t^n := t^{n+1} - t^n$. Logo pelo Método de Euler Implícito

$$[\mathbf{Y}(t^{n+1}) - \mathbf{Y}(t^n)] / \Delta t^n \cong \partial_t \mathbf{Y}(t^{n+1})$$

então

$$\begin{aligned}\mathbf{W}\partial_t\mathbf{Y}^{n+1} + \mathbf{A}^{n+1}\mathbf{Y}^{n+1} &= \mathbf{V}^{n+1} \\ \mathbf{W}[\mathbf{Y}^{n+1} - \mathbf{Y}^n]/\Delta t^n + \mathbf{A}^{n+1}\mathbf{Y}^{n+1} &= \mathbf{V}^{n+1} \\ \mathbf{W}[\mathbf{Y}^{n+1} - \mathbf{Y}^n] + \Delta t^n \mathbf{A}^{n+1}\mathbf{Y}^{n+1} &= \Delta t^n \mathbf{V}^{n+1}\end{aligned}$$

obtendo, portanto, a seguinte fórmula para um passo no tempo

$$[\mathbf{W} + \Delta t^n \mathbf{A}^{n+1}]\mathbf{Y}^{n+1} = \mathbf{W}\mathbf{Y}^n + \Delta t^n \mathbf{V}^{n+1}$$

onde abreviamos $\mathbf{A}^n := \mathbf{A}(t^n)$, $\mathbf{Y}^n := \mathbf{Y}(t^n)$ e $\mathbf{V}^n := \mathbf{V}(t^n)$.

5. IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo abordaremos alguns detalhes importantes e inerentes ao processo de implementação do código numérico. Mais especificamente, definiremos a transformação afim necessária para realizar a integração numérica a partir de um triângulo de referência \hat{T} , forneceremos detalhes das quadraturas utilizadas nos elementos triangulares da discretização, apresentaremos o cálculo do erro de discretização e como foram feitas as aproximações das funções coeficiente $d(t)$, $f(t)$ e das condições iniciais c^0 .

5.1 TRANSFORMAÇÃO AO TRIÂNGULO DE REFERÊNCIA

A geometria das malhas discretizadas e a triangulação feita comumente geram elementos que estão distribuídos de forma irregular, ou seja, não estão alinhados aos eixos cartesianos. Isto pode trazer dificuldades para o cálculo de integrais e dos pontos de quadratura numérica dos elementos da malha. Desta forma, o cálculo das integrais sobre os triângulos e as arestas do sistema de equações discretizado apresentado na seção 4.7 pode se tornar custoso.

Para contornar este problema é interessante buscar uma forma de padronizar as contas e otimizar o tempo computacional do método para obter a solução aproximada. Com tal objetivo transformaremos as integrais sobre os triângulos T_k em integrais sobre o triângulo de referência \hat{T} (Fig. 5.1) e então calcularemos as integrais por quadratura numérica ou analiticamente. Para tal, de acordo com o artigo [11], definimos uma função afim injetiva

$$\mathbf{F}_k : \hat{T} \ni \hat{x} \rightarrow x \in T_k,$$

de forma que qualquer função $w : T_k \rightarrow \mathbb{R}$ pode ser definida como $\hat{w} : \hat{T} \rightarrow \mathbb{R}$ com $\hat{w} = w \circ \mathbf{F}_k$, ou seja, $w(x) = \hat{w}(\hat{x})$. Desta forma, usando a regra da cadeia, podemos reescrever o gradiente como:

$$\hat{\nabla} \hat{w}(\hat{x}) = \hat{\nabla} w \circ \mathbf{F}_k(\hat{x}) = \begin{bmatrix} \partial_{x^1} w(x) \partial_{\hat{x}^1} F_k^1(\hat{x}) + \partial_{x^2} w(x) \partial_{\hat{x}^1} F_k^2(\hat{x}) \\ \partial_{x^1} w(x) \partial_{\hat{x}^2} F_k^1(\hat{x}) + \partial_{x^2} w(x) \partial_{\hat{x}^2} F_k^2(\hat{x}) \end{bmatrix} = (\hat{\nabla} \mathbf{F}_k(\hat{x}))^\top \nabla w(x),$$

onde $\hat{\nabla} = [\partial_{\hat{x}^1}, \partial_{\hat{x}^2}]^\top$, $\mathbf{F}_k = [F_k^1, F_k^2]^\top$. Abreviadamente, $\nabla = (\hat{\nabla} \mathbf{F}_k)^{-\top} \hat{\nabla}$ em T_k . A função afim \mathbf{F}_k pode ser definida em termos dos vértices $\mathbf{a}_{k1}, \mathbf{a}_{k2}, \mathbf{a}_{k3}$ de T_k por

$$\mathbf{F}_k : \hat{T} \ni \hat{x} \rightarrow \mathbf{B}_k \hat{x} + \mathbf{a}_{k1} \in T_k \quad \text{com} \quad \mathbf{B}_k := [\mathbf{a}_{k2} - \mathbf{a}_{k1} \mid \mathbf{a}_{k3} - \mathbf{a}_{k1}] \in \mathbb{R}^{2 \times 2}.$$

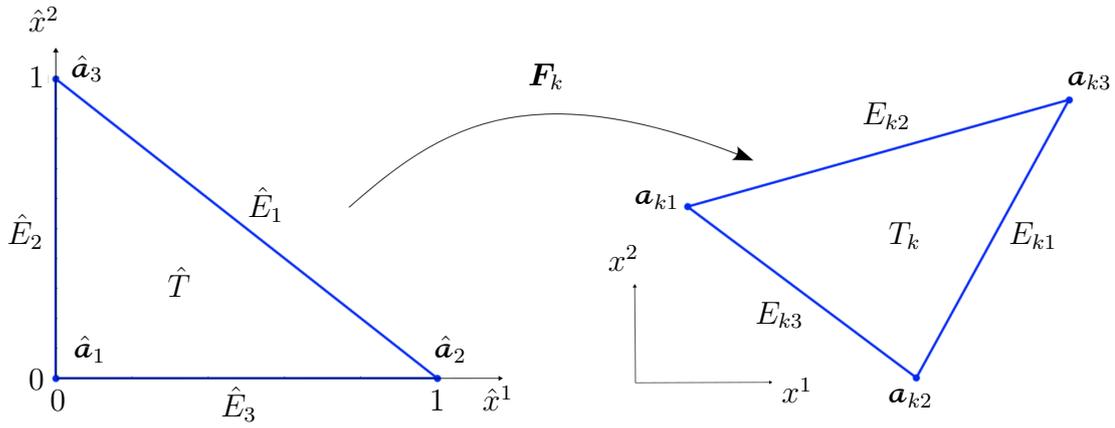


Figura 5.1: Função afim F_k .

Observemos que $\hat{\nabla} F_k = B_k$. A função inversa para F_k é dada por:

$$F_k^{-1} : T_k \ni x \rightarrow B_k^{-1}(x - a_{k1}) \in \hat{T}$$

Dado que os triângulos T_k têm a mesma orientação do triângulo de referência (Fig. 5.1), ou seja, orientação no sentido anti-horário, então $0 < \det B_k = 2|T_k|$, onde $|T_k|$ é área do triângulo T_k . Usando a aplicação afim F_k para uma função $w : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, podemos efetuar uma mudança de coordenadas e escrever a integral sobre o elemento T_k como uma integral sobre o elemento mestre \hat{T}

$$\int_{T_k} w(x) dx = \frac{|T_k|}{|\hat{T}|} \int_{\hat{T}} w \circ F_k(\hat{x}) d\hat{x} = 2|T_k| \int_{\hat{T}} w \circ F_k(\hat{x}) d\hat{x} = 2|T_k| \int_{\hat{T}} \hat{w}(\hat{x}) d\hat{x}. \quad (5.1)$$

De maneira análoga, podemos reescrever a integral sobre uma aresta $E_{kn} \subset T_k$ qualquer da malha como uma integral sobre a aresta correspondente no elemento referência

$$\int_{E_{kn}} w(x) dx = \frac{|E_{kn}|}{|\hat{E}_n|} \int_{\hat{E}_n} w \circ F_k(\hat{x}) d\hat{x} = \frac{|E_{kn}|}{|\hat{E}_n|} \int_{\hat{E}_n} \hat{w}(\hat{x}) d\hat{x}. \quad (5.2)$$

Essa regra é obtida da seguinte forma: Seja $\gamma_{kn} : [0, 1] \ni s \rightarrow \gamma_{kn}(s) \in E_{kn}$ uma parametrização da aresta E_{kn} com derivada γ'_{kn} . Por exemplo $\gamma_{k2}(s) := (1 - s)a_{k3} + sa_{k1}$. Seja $\hat{\gamma}_n : [0, 1] \ni s \rightarrow \hat{\gamma}_n(s) \in \hat{E}_n$ definida analogamente. Como

$$\int_{E_{kn}} w(x) dx = \int_0^1 w \circ \gamma_{kn}(s) |\gamma'_{kn}(s)| ds = \int_0^1 w \circ \gamma_{kn}(s) |E_{kn}| ds \quad (5.3)$$

e

$$\begin{aligned} \int_{\hat{E}_n} w \circ F_k(\hat{x}) d\hat{x} &= \int_0^1 w \circ F_k \circ \hat{\gamma}_n(s) |\hat{\gamma}'_n(s)| ds = |\hat{E}_n| \int_0^1 w \circ \gamma_{kn}(s) ds \\ &\Rightarrow \frac{1}{|\hat{E}_n|} \int_{\hat{E}_n} w \circ F_k(\hat{x}) d\hat{x} = \int_0^1 w \circ \gamma_{kn}(s) ds, \end{aligned} \quad (5.4)$$

substituindo (5.4) em (5.3) obtemos a equação (5.2).

5.2 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Na análise numérica, a integração numérica compõe um vasto campo de algoritmos elaborados para fornecer aproximações numéricas para o valor de uma integral definida. A quadratura numérica, ou simplesmente quadratura, é um sinônimo de integração numérica. O problema elementar a ser resolvido pelas quadraturas é computar um valor aproximado para uma integral

$$\int_a^b g(x)dx$$

com uma precisão dada. Em conformidade com a ideia apresentada na seção anterior, focaremos na obtenção de regras de quadratura definidas para o triângulo de referência \hat{T} na forma

$$\int_{\hat{T}} \hat{g}(\hat{x})d\hat{x} \approx \sum_{r=1}^R \omega_r \hat{g}(\hat{\mathbf{q}}_r), \quad (5.5)$$

com R pontos de quadratura $\hat{\mathbf{q}}_r \in \hat{T}$ e pesos de quadratura $\omega_r \in \mathbb{R}$.

Estas regras de quadratura podem fornecer a solução exata da integração a depender da ordem de quadratura utilizada. Definimos a ordem de quadratura como o maior número inteiro s tal que a aproximação (5.5) torna-se exata para polinômios $\hat{g} \in \mathbb{P}_s(\hat{T})$.

Observando as integrais sobre os elementos T_k na seção 4.7 podemos notar que os integrandos são polinômios de ordem máxima $3p-1$, que ocorre quando temos o produto $\partial_{x^m} \phi_{ki} \phi_{kl} \phi_{kj}$. Já nas integrais sobre as arestas dos elementos T_k os integrandos são polinômios de ordem máxima $3p$, que ocorre quando temos o produto $\phi_{k-i} \phi_{k-j} \phi_{k-l}$.

No decorrer desta seção apresentaremos a regra da quadratura de Gauss que utilizamos para o cálculo numérico das integrais sobre as arestas do triângulo \hat{T} . Deduziremos também uma regra de quadratura de ordem 2 com 3 pontos para o cálculo numérico de integrais de volume sobre a área dos triângulo \hat{T} . Uma visão geral de regras de quadratura para triângulos é encontrada em [10].

5.2.1 REGRA DE QUADRATURA DE GAUSS-LEGENDRE NAS ARESTAS DO TRIÂNGULO REFERÊNCIA \hat{T}

Dada uma função $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ considere a seguinte integral definida

$$\int_a^b f(x)dx.$$

A quadratura de Gauss-Legendre aproximará essa integral por meio da escolha otimizada de n pontos de quadratura x_1, x_2, \dots, x_n no intervalo $[a, b]$ e pesos de quadratura c_1, c_2, \dots, c_n , de

forma que

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i).$$

Segundo Burden [5], estes pontos e pesos de quadratura podem ser obtidos através do conjunto de Polinômios de Legendre formado por $\{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x), \dots\}$ com as seguintes propriedades:

- Para cada n , $P_n(x)$ é um monômio de grau n ;
- $\int_{-1}^1 P(x)P_n(x)dx = 0$ sempre que $P(x)$ for um polinômio de grau menor que n .

A título de exemplo, os primeiros 5 Polinômios de Legendre são

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}, \quad P_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x, \quad P_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}.$$

O Teorema 6 a seguir fornece pontos de quadratura x_i assim como pesos de quadratura c_i que fornecem uma aproximação exata para um polinômio de grau menor que $2n$.

Teorema 6. *Suponha que x_1, x_2, \dots, x_n sejam raízes do n -ésimo polinômio de Legendre $P_n(x)$ e que $\forall i = 1, 2, \dots, n$, os números c_i sejam definidos por*

$$c_i = \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx.$$

Se $P(x)$ é um polinômio qualquer de grau menor que $2n$ então

$$\int_{-1}^1 P(x)dx = \sum_{i=1}^n c_i P(x_i).$$

Alguns pontos e pesos de quadratura gaussianos utilizados para implementação computacional deste trabalho estão fornecidos na Tabela 5.1. Uma lista mais abrangente é encontrada no código “quadRule1D” disponibilizado no artigo [11].

n	Raízes $x_{n,i}$	Coefficientes $c_{n,i}$
2	0.5773502692	1.0000000000
	-0.5773502692	1.0000000000
3	0.7745966692	0.5555555556
	0.0000000000	0.8888888889
	-0.7745966692	0.5555555556
4	0.8611363116	0.3478548451
	0.3399810436	0.6521451549
	-0.3399810436	0.6521451549
	-0.8611363116	0.3478548451

Tabela 5.1: Quadratura de Gauss-Legendre.

5.2.2 REGRA DE QUADRATURA NO TRIÂNGULO REFERÊNCIA \hat{T}

O objetivo aqui é deduzir uma regra de quadratura para o triângulo de referência \hat{T} . Tomaremos como base o conteúdo disponível em [18].

Para deduzi-la devemos iniciar pela integração analítica de polinômios sobre este triângulo. No caso de uma quadratura em \mathbb{R}^2 , que envolve duas variáveis, as contas são um pouco mais complexas que as quadraturas de uma única variável, pois no segundo caso surge apenas uma equação para cada ordem p adicional de aproximação, enquanto no primeiro caso surgem $\sum_{i=1}^{p+1} i$ equações devido à contabilização dos termos cruzados. Além disso como os elementos triangulares estão distribuídos em \mathbb{R}^2 , a simetria desejada em certas direções nem sempre está bem orientada em relação ao plano cartesiano. Outro detalhe é que o número de pontos necessários para obter a simetria nem sempre é compatível com o número de pontos que precisamos para obter determinada ordem de quadratura. Em um triângulo com dimensão $d = 2$ são necessários $d + 1$ pontos de quadratura para definir unicamente suas posições e pesos.

As malhas discretizadas geralmente apresentam elementos irregularmente distribuídos pelo domínio, porém não é necessário criar regras de quadratura para cada elemento. Podemos simplesmente definir uma regra de quadratura para um triângulo de referência e depois definir uma transformação de coordenadas entre eles.

Iniciemos este processo realizando a integração analítica de um termo de um polinômio sobre o triângulo retângulo de referência (Fig. 5.1) com catetos de comprimento 1 passando pela origem do plano cartesiano com área igual a $\frac{1}{2}$.

$$\int_0^1 \int_0^{1-x} x^a y^b dy dx = \int_0^1 \frac{x^a (1-x)^{b+1}}{b+1} dx = \int_0^1 \frac{\sum_{k=0}^{b+1} \binom{b+1}{k} (-1)^k x^{k+a}}{b+1} dx = \frac{\sum_{k=0}^{b+1} \binom{b+1}{k} \frac{(-1)^k}{k+a+1}}{b+1}$$

onde $\binom{b+1}{k}$ é o coeficiente binomial, $a, b \in \mathbb{Z}$ e x e y são coordenadas. Os termos do vetor residual serão portanto

$$R_j = \sum_{i=1}^n (w_i x_i^{a_j} y_i^{b_j}) - \frac{\sum_{k=0}^{b_j+1} \binom{b_j+1}{k} \frac{(-1)^k}{k+a_j+1}}{b_j+1} \quad \forall j \in \left\{ 1, 2, \dots, \sum_{l=1}^{o+1} l \right\}$$

onde $x^{a_j} y^{b_j} = \{x^0 y^0, x^1 y^0, x^0 y^1, x^2 y^0, x^1 y^1, x^0 y^2, x^3 y^0, x^2 y^1, x^1 y^2, x^0 y^3, \dots\}$.

Para um único ponto as equações são

$$R = \begin{bmatrix} w_1 - \frac{1}{2} \\ w_1 x_1 - \frac{1}{6} \\ w_1 y_1 - \frac{1}{6} \end{bmatrix} = 0$$

que nos fornece a primeira regra de quadratura $w_1 = \frac{1}{2}, x_1 = \frac{1}{3}, y_1 = \frac{1}{3}$. Poderíamos tentar obter uma regra de quadratura de segunda ordem usando dois pontos, pois dois pontos nos dão

o número necessário de equações, mas o sistema resultante é inconsistente

$$R = \begin{bmatrix} w_1 + w_2 - \frac{1}{2} \\ w_1x_1 + w_2x_2 - \frac{1}{6} \\ w_1y_1 + w_2y_2 - \frac{1}{6} \\ w_1x_1^2 + w_2x_2^2 - \frac{1}{12} \\ w_1x_1y_1 + w_2x_2y_2 - \frac{1}{24} \\ w_1y_1^2 + w_2y_2^2 - \frac{1}{12} \end{bmatrix} = 0$$

então escolhemos usar três pontos e obtemos o seguinte sistema subdeterminado

$$R = \begin{bmatrix} w_1 + w_2 + w_3 - \frac{1}{2} \\ w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 - \frac{1}{6} \\ w_1y_1 + w_2y_2 + w_3y_3 - \frac{1}{6} \\ w_1x_1^2 + w_2x_2^2 + w_3x_3^2 - \frac{1}{12} \\ w_1x_1y_1 + w_2x_2y_2 + w_3x_3y_3 - \frac{1}{24} \\ w_1y_1^2 + w_2y_2^2 + w_3y_3^2 - \frac{1}{12} \end{bmatrix} = 0. \quad (5.6)$$

Tentar incorporar termos de ordem superior poderia formar outro sistema inconsistente. É mais interessante escolher pontos simétricos em relação às linhas que unem o vértice ao ponto médio do lado oposto num triângulo equilátero. Depois iremos deduzir uma transformação de coordenadas deste triângulo equilátero (onde definiremos a simetria) para o triângulo retângulo de referência \hat{T} .

COORDENADAS DE ÁREA DE UM TRIÂNGULO

Para o propósito de obter uma transformação de coordenadas entre triângulos da malha e um triângulo de referência, precisaremos em primeiro lugar definir o conceito de coordenada de área e como calculá-la, objetivo que alcançaremos tomando como base o conteúdo disponível em [16].

Considere um triângulo (Figura 5.2) com nós 1, 2 e 3 localizados nos vértices e numerados em ordem anti-horária. Um ponto $p(x, y)$ localizado arbitrariamente neste triângulo gera subtriângulos A_i . Uma coordenada de área Γ_i é uma "coordenada não-dimensional", definida como a razão da área de um subtriângulo A_i em relação à área total A do elemento, ou seja, $\Gamma_i = \frac{A_i}{A}$.

O cálculo da área de um triângulo pode ser feito através da divisão do determinante da matriz dos seus vértices por 2. Portanto, para A_1

$$2A_1 = \text{Det} \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix}.$$

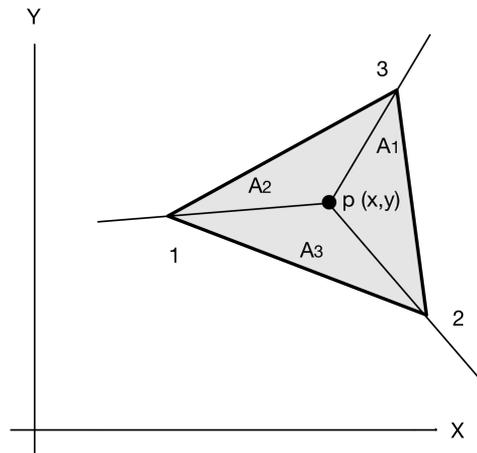


Figura 5.2: Subtriângulos A_i em um triângulo A .

Realizando os cálculos temos

$$\begin{aligned} 2A_1 &= (x_2y_3 - x_3y_2) - (xy_3 - yx_3) + (xy_2 - yx_2) \\ 2A_1 &= (x_2y_3 - x_3y_2) + x(y_2 - y_3) + y(x_3 - x_2) \\ 2A_1 &= a_1 + b_1x + c_1y, \end{aligned}$$

onde

$$a_1 = (x_2y_3 - x_3y_2), \quad b_1 = (y_2 - y_3), \quad c_1 = (x_3 - x_2).$$

Portanto, a coordenada de área Γ_1 é uma função linear de x e y dada por

$$\Gamma_1 = \frac{A_1}{A} = \frac{1}{2A}(a_1 + b_1x + c_1y),$$

e analogamente

$$\begin{aligned} \Gamma_2 &= \frac{A_2}{A} = \frac{1}{2A}(a_2 + b_2x + c_2y), \\ \Gamma_3 &= \frac{A_3}{A} = \frac{1}{2A}(a_3 + b_3x + c_3y). \end{aligned}$$

As coordenadas de área possuem valor mínimo igual a 0 e máximo igual a 1. Por exemplo, se p estiver localizado no nó 1, temos $x = x_1, y = y_1$ e $A_1 = 1, A_2 = A_3 = 0$. Logo,

$$\Gamma_1(x_1, y_1) = 1, \quad \Gamma_2(x_1, y_1) = 0, \quad \Gamma_3(x_1, y_1) = 0.$$

TRANSFORMAÇÃO DE COORDENADAS DO TRIÂNGULO

Nesta parte obteremos uma forma de transformar as coordenadas entre um triângulo equilátero, onde a simetria é fácil de definir com ângulos, para o triângulo de referência \hat{T} . Observe que as coordenadas cartesianas deste triângulo de referência são iguais às coordenadas de área, ou

seja, $x = \Gamma_2$, $y = \Gamma_3$, desde que rotulemos os nós em relação à origem no sentido anti-horário, semelhante ao que fizemos anteriormente. Observemos que $\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 = 1$. Para converter as coordenadas globais de um triângulo para coordenadas de área usaremos um sistema de equações lineares. Usaremos somente Γ_2 e Γ_3 pois podemos obter Γ_1 como $\Gamma_1 = 1 - \Gamma_2 - \Gamma_3$.

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

onde c e m são coeficientes. Movendo c para dentro da matriz de coeficientes obtemos

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & c_1 \\ m_{21} & m_{22} & c_2 \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Por meio de algumas manipulações algébricas isolamos a matriz de coeficientes

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & c_1 \\ m_{21} & m_{22} & c_2 \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{vec} \left(\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix}^T \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{vec} \left(\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & c_1 \\ m_{21} & m_{22} & c_2 \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \right)$$

$$\text{vec} \left(\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & c_1 \\ m_{21} & m_{22} & c_2 \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \right) = \left(\begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix}^T \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \text{vec} \left(\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} \right)$$

O operador $\text{vec}()$ empilha as colunas da matriz para formar um vetor coluna, enquanto o operador \otimes representa o produto de Kronecker. Substitua os pontos conhecidos para obter a matriz de coeficientes. Os nós do triângulo são pontos conhecidos, pois a coordenada da área correspondente ao nó é igual a um e as outras duas coordenadas da área são iguais a zero.

$$\begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{21} \\ m_{31} \\ m_{12} \\ m_{22} \\ m_{32} \\ c_1 \\ c_2 \\ m_{33} \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ 1 \\ x_2 \\ y_2 \\ 1 \\ x_3 \\ y_3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Os pontos x_i e y_i para $i \in \{1, 2, 3\}$ correspondem a localização dos nós do triângulo e o primeiro nó é usado para transladar o triângulo. Fazendo o produto de Kronecker acima obtemos

$$\begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{21} \\ m_{31} \\ m_{12} \\ m_{22} \\ m_{32} \\ c_1 \\ c_2 \\ m_{33} \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ 1 \\ x_2 \\ y_2 \\ 1 \\ x_3 \\ y_3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ 1 \\ x_2 \\ y_2 \\ 1 \\ x_3 \\ y_3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Ao final encontramos uma transformação afim de coordenadas de área em coordenadas cartesianas

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

e sua transformação inversa que obtém as coordenadas cartesianas a partir das coordenadas de área

$$\begin{bmatrix} \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 & x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 & y_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix}.$$

USANDO A TRANSFORMAÇÃO

Para convertermos as coordenadas (x, y) do triângulo equilátero de vértices $(0,0)$, $(1,0)$ e $(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$, nas coordenadas (\hat{x}, \hat{y}) do triângulo de referência \hat{T} faremos

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{3}}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Para manter a simetria da regra de quadratura, os três pontos serão definidos em termos do raio r e do ângulo de rotação θ a partir do centro do triângulo

$$\begin{aligned} \hat{x}_1 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{2}, & \hat{y}_1 &= r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6}, \\ \hat{x}_2 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{1}{2}, & \hat{y}_2 &= r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6}, \\ \hat{x}_3 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{1}{2}, & \hat{y}_3 &= r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6}, \end{aligned}$$

onde \hat{x}_i e \hat{y}_i para $i \in \{1, 2, 3\}$ são os pontos de quadratura que tentamos resolver para r e θ .

Aplicando a transformação de coordenadas a estes pontos obtemos

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right), & y_1 &= \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \\ x_2 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right), & y_2 &= \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right) \\ x_3 &= r \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right), & y_3 &= \frac{2\sqrt{3}}{3} \left(r \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2} + \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{\sqrt{3}}{6} \right). \end{aligned}$$

Substituindo estes pontos no resíduo de quadratura de três pontos calculados em (5.6), obteremos seis equações com cinco variáveis r, θ, w_1, w_2 e w_3 . Os valores obtidos para estas variáveis são $w_1 = w_2 = w_3 = \frac{1}{6}$, $r = \pm \frac{1}{2\sqrt{3}}$ e θ pode ser qualquer valor. Será escolhido $\theta = 0$ a fim de obter simetria. Os pontos de integração são obtidos substituindo o raio e o ângulo nas fórmulas acima para obter $x_1 = x_2 = y_2 = y_3 = \frac{1}{6}$ e $x_3 = y_1 = \frac{2}{3}$.

Uma visualização geométrica da posição dos pontos de quadratura de um triângulo retângulo para diferentes ordens pode ser verificada na Figura 5.3. A representação numérica aproximadas destes pontos e seus pesos é apresentada na Tabela 5.2. Nesta tabela, e geralmente nas referências bibliográficas da literatura, os pesos da quadratura são normalizados de modo que sua soma totalize 1, conseqüentemente é necessário multiplicar a integração por $\frac{1}{2}$, que é a área do triângulo de referência, ao passo que os pesos acima deduzidos $w_1 = w_2 = w_3 = \frac{1}{6}$,

podem ser diretamente aplicados na integração de uma função. Uma lista com pesos e pontos de quadratura para triângulos em diferentes ordens é encontrada no código “quadRule2D” disponibilizado no artigo [11]. Regras de quadratura de ordens mais altas seguem ideia semelhante à apresentada.

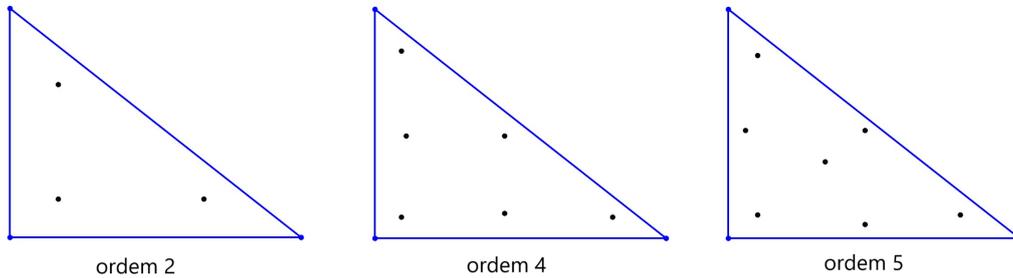


Figura 5.3: Ordens de Quadratura.

Ordem2		
Peso	Coordenada x	Coordenada y
0.3333333333333333	0.1666666666666667	0.6666666666666667
0.3333333333333333	0.1666666666666667	0.1666666666666667
0.3333333333333333	0.6666666666666667	0.1666666666666667
Ordem 4		
Peso	Coordenada x	Coordenada y
0.223381589678011	0.445948490915965	0.108103018168070
0.223381589678011	0.445948490915965	0.445948490915965
0.223381589678011	0.108103018168070	0.445948490915965
0.109951743655322	0.091576213509771	0.816847572980459
0.109951743655322	0.091576213509771	0.091576213509771
0.109951743655322	0.816847572980459	0.091576213509771
Ordem 5		
Peso	Coordenada x	Coordenada y
0.225	0.3333333333333333	0.3333333333333333
0.132394152788506	0.470142064105115	0.059715871789770
0.132394152788506	0.470142064105115	0.470142064105115
0.132394152788506	0.059715871789770	0.470142064105115
0.125939180544827	0.101286507323456	0.797426985353087
0.125939180544827	0.101286507323456	0.101286507323456
0.125939180544827	0.797426985353087	0.101286507323456

Tabela 5.2: Ordem, Peso e Pontos de Quadratura de um Triângulo Retângulo.

5.3 APROXIMAÇÃO DAS FUNÇÕES COEFICIENTE E DAS CONDIÇÕES INICIAIS

Com intuito de facilitar o processo de integração numérica e permitir a otimização dos cálculos computacionais, as funções coeficiente e as condições iniciais são projetadas no espaço de funções polinomiais por partes, por exemplo, $d_h(t) \in \mathbb{P}_p(\mathcal{T}_h)$ para $t \in J$. Dada uma expressão

algébrica para o coeficiente d , procuraremos a uma matriz de representação $\mathbf{D}(t) \in \mathbb{R}^{K \times N}$ satisfazendo

$$d_h(t, \mathbf{x})|_{\tau_k} = \sum_{j=1}^N D_{kj}(t) \phi_{kj}(\mathbf{x}),$$

tal que $d_h(t)$ seja uma aproximação para a função $d(t)$ no espaço $\mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)$. Essa aproximação será efetuada através da projeção L^2 definida localmente para $\tau_k \in \mathcal{J}_h$ por

$$\int_{\tau_k} w_h d_h(t) = \int_{\tau_k} w_h d(t), \quad \forall w_h \in \mathbb{P}_p(\tau_k).$$

Escolhendo $w_h = \phi_{ki}$ para $i \in \{1, \dots, N\}$ e usando a função afim \mathbf{F}_k obtemos

$$\sum_{j=1}^N D_{kj}(t) \int_{\tau_k} \phi_{ki}(x) \phi_{kj}(x) dx = \int_{\tau_k} \phi_{ki}(x) d(t, x) dx \leftrightarrow \sum_{j=1}^N D_{kj}(t) \int_{\hat{T}} \hat{\phi}_i(\hat{x}) \hat{\phi}_j(\hat{x}) d\hat{x} = \int_{\hat{T}} \hat{\phi}_i(\hat{x}) d(t, \mathbf{F}_k(\hat{x})) d\hat{x},$$

onde o fator $2|\tau_k|$ foi simplificado. Escrito na forma matricial temos

$$\hat{\mathbf{M}} \begin{bmatrix} D_{k1} \\ \vdots \\ D_{kN} \end{bmatrix} = \int_{\hat{T}} \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1(\hat{x}) d(t, \mathbf{F}_k(\hat{x})) \\ \vdots \\ \hat{\phi}_N(\hat{x}) d(t, \mathbf{F}_k(\hat{x})) \end{bmatrix} d\hat{x}, \quad \text{com } \hat{\mathbf{M}} := \int_{\hat{T}} \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_1 & \dots & \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\phi}_N \hat{\phi}_1 & \dots & \hat{\phi}_N \hat{\phi}_N \end{bmatrix},$$

onde $\hat{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é representação da matriz de massa local no triângulo de referência \hat{T} . Este sistema de equações $N \times N$ pode ser resolvido localmente para todo $k \in \{1, \dots, K\}$. Aproximando o lado direito através de quadratura numérica e transpondo as equações obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(t) \hat{\mathbf{M}} &= \sum_{r=1}^R \omega_r \begin{bmatrix} d(t, \mathbf{F}_1(\hat{\mathbf{q}}_r)) \\ \vdots \\ d(t, \mathbf{F}_K(\hat{\mathbf{q}}_r)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1(\hat{\mathbf{q}}_r), & \dots, & \hat{\phi}_N(\hat{\mathbf{q}}_r) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} d(t, \mathbf{F}_1(\hat{\mathbf{q}}_1)) & \dots & d(t, \mathbf{F}_1(\hat{\mathbf{q}}_R)) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d(t, \mathbf{F}_K(\hat{\mathbf{q}}_1)) & \dots & d(t, \mathbf{F}_K(\hat{\mathbf{q}}_R)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \hat{\phi}_1(\hat{\mathbf{q}}_1) & \dots & \omega_1 \hat{\phi}_N(\hat{\mathbf{q}}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_R \hat{\phi}_1(\hat{\mathbf{q}}_R) & \dots & \omega_R \hat{\phi}_N(\hat{\mathbf{q}}_R) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Este é um sistema de equações com variável $\mathbf{D}(t) \in \mathbb{R}^{K \times N}$ e lado direito com dimensão $K \times N$. A rotina correspondente para o cômputo desta matriz é encontrada no código “projectFunc-Cont2DataDisc” disponibilizado no artigo [11].

5.4 CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

Conhecer o erro cometido no processo de discretização é de suma relevância pois nos permite medir a eficiência do método adotado. Este erro de discretização num dado instante $t \in J$ é dado pela norma L^2 da diferença entre a solução discreta $c_h(t)$ do esquema de equações (4.5a)-(4.5b), e solução analítica $c(t)$, ou seja, $\|c_h(t) - c(t)\|_{L^2(\Omega)}$. Por razões de performance, usamos integração numérica para calcular esse erro e a rotina do método faz a vetorização dos somatórios que surgem. Ocultando a variável tempo temos

$$\begin{aligned} \|c_h(t) - c(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \sum_{\tau_k \in \mathcal{J}_h} \int_{\tau_k} (c_h(x) - c(x))^2 dx = 2 \sum_{\tau_k \in \mathcal{J}_h} |\tau_k| \int_{\hat{T}} \left(\sum_{l=1}^N C_{kl} \hat{\phi}_l(\hat{x}) - c \circ \mathbf{F}_k(\hat{x}) \right)^2 d\hat{x} \\ &\approx 2 \sum_{\tau_k \in \mathcal{J}_h} |\tau_k| \sum_{r=1}^R \omega_r \left(\sum_{l=1}^N C_{kl} \hat{\phi}_l(\hat{\mathbf{q}}_r) - c \circ \mathbf{F}_k(\hat{\mathbf{q}}_r) \right)^2 \\ &= 2 \begin{bmatrix} |\tau_1| \\ \vdots \\ |\tau_K| \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} C_{11} & \dots & C_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{K1} & \dots & C_{KN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1(\hat{\mathbf{q}}_1) & \dots & \hat{\phi}_1(\hat{\mathbf{q}}_R) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\phi}_N(\hat{\mathbf{q}}_1) & \dots & \hat{\phi}_N(\hat{\mathbf{q}}_R) \end{bmatrix} - c(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2) \right)^2 \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_R \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

onde os argumentos de c , $[\mathbf{X}^m]_{k,r} := \mathbf{F}_k^m(\hat{\mathbf{q}}_r)$, $k \in \{1, \dots, K\}$, $r \in \{1, \dots, R\}$, podem ser montados usando o produto de Kronecker. Com certo abuso de notação, $c(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2)$ é a matriz $K \times R$ com entradas $c([\mathbf{X}^1]_{k,r}, [\mathbf{X}^2]_{k,r})$ na k -ésima linha e r -ésima coluna. Este cálculo é utilizado para calcular a ordem α de convergência do método como mostramos a seguir.

ESTIMATIVAS DE ERRO A PRIORI

Primeiramente vamos definir o espaço de Hilbert por

$$H^{s+2}(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid \partial^n u \in L^2(\Omega), |n| \leq s + 2\}.$$

O teorema a seguir, apresentado em [20], fornece estimativas para o erro que a solução aproximada $(\mathbf{z}_h(t), c_h(t)) \in [\mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)]^2 \times \mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)$ obtida do sistema (4.5a)-(4.5b) deve satisfazer em relação a solução exata do problema (4.1)-(4.2).

Teorema 7. *Seja $c \in H^{s+2}(\Omega)$ com $s \geq 0$. Suponha também que $(\mathbf{z}_h(t), c_h(t)) \in [\mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)]^2 \times \mathbb{P}_p(\mathcal{J}_h)$ e $\sigma_1 = \frac{\eta}{h}$, $\eta > 0$. Então se $s \geq 0$ e $p \geq 1$, temos as seguintes estimativas de erro:*

$$\begin{aligned} \|c - c_h\|_{L^2(\Omega)} &\leq M h^{\min(s+1, p)+1} \|c\|_{H^{s+2}(\Omega)} \\ \|\mathbf{z} - \mathbf{z}_h\|_{L^2(\Omega)} &\leq M h^{\min(s+1, p)} \|c\|_{H^{s+2}(\Omega)}. \end{aligned}$$

Logo se a solução exata c for suficientemente suave, pelo Teorema 7 teremos $\min(s+1, p) =$

p , portanto

$$\|c - c_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Mh^{p+1}\|c\|_{H^{s+2}(\Omega)}, \quad (5.7)$$

$$\|z - z_h\|_{L^2(\Omega)} \leq Mh^p\|c\|_{H^{s+2}(\Omega)}, \quad (5.8)$$

da onde deduzimos a ordem de convergência $p + 1$ do método para a concentração c e ordem p para o gradiente $z = -\nabla c$.

De (5.7) temos para 2 malhas $\mathcal{T}_{h_{j-1}}$ e \mathcal{T}_h com diâmetros h_{j-1} e h_j

$$\begin{aligned} \|c - c_{h_{j-1}}\|_{L^2(\Omega)} &\approx (h_{j-1})^\alpha \xi \\ \|c - c_{h_j}\|_{L^2(\Omega)} &\approx (h_j)^\alpha \xi \end{aligned}$$

onde $\xi = M\|c\|_{H^{s+2}(\Omega)}$. Logo

$$\begin{aligned} \left(\frac{h_{j-1}}{h_j}\right)^\alpha &\approx \frac{\|c - c_{h_{j-1}}\|_{L^2(\Omega)}}{\|c - c_{h_j}\|_{L^2(\Omega)}} \\ \ln\left(\frac{h_{j-1}}{h_j}\right)^\alpha &\approx \ln\left(\frac{\|c - c_{h_{j-1}}\|_{L^2(\Omega)}}{\|c - c_{h_j}\|_{L^2(\Omega)}}\right) \\ \Rightarrow \alpha &\approx \ln\left(\frac{\|c_{h_{j-1}} - c\|_{L^2(\Omega)}}{\|c_{h_j} - c\|_{L^2(\Omega)}}\right) / \ln\left(\frac{h_{j-1}}{h_j}\right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Espera-se portanto que quando $j \rightarrow \infty$, ou seja, quando $h_j \rightarrow 0$ tenhamos $\alpha \rightarrow p + 1$, onde h_j é o diâmetro da malha \mathcal{T}_h . Maiores detalhes sobre as estimativas de erro a priori podem ser verificados em [20].

O procedimento para o cálculo de α está disponibilizado no código “computeL2Error” disponibilizado no artigo [11].

6. RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com a execução dos códigos existentes no artigo [11], como cálculos de erro de discretização, gráficos das soluções c_h obtidas, tabelas comparativas de resultados, exemplos de refinamentos de malha etc. Apresentaremos problemas de caráter estacionário e não estacionário.

As soluções foram geradas no software MATLAB (versão R2017b) e as imagens geradas no software ParaView (versão 5.11.2).

6.1 PROBLEMA ESTACIONÁRIO

Quando o fluxo de difusão J não varia com o tempo, como definido na 1^{a} Lei de Fick (2.9), a concentração c também não varia com o tempo, e temos o que chamamos de Difusão em Estado Estacionário ou Difusão em Regime Permanente.

PROBLEMA E CONDIÇÕES INICIAIS

Primeiramente apresentaremos resultados numéricos para um problema onde a solução exata é conhecida para permitir o estudo da taxa de convergência do método.

Seja $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ um quadrado unitário com fronteira $\partial\Omega$ subdividida em partes Dirichlet $\partial\Omega_D$ e Neumann $\partial\Omega_N$ como apresentado na Figura 6.1.

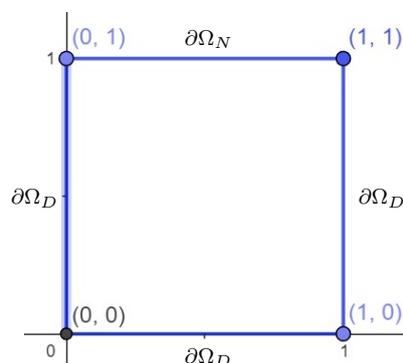


Figura 6.1: Domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$.

Considere a equação de difusão:

$$-\nabla \cdot [d(x_1, x_2) \nabla c(x_1, x_2)] = f(x_1, x_2) \quad \text{em } \Omega$$

onde

$$\begin{aligned}
 f(x_1, x_2) &= e^{x_1+x_2} \cdot 98 \cos(7x_1) \cos(7x_2) + 7e^{x_1+x_2} \cos(7x_2) \sin(7x_1) \\
 &\quad + 7e^{x_1+x_2} \cos(7x_1) \sin(7x_2) \quad (\text{fonte}) \\
 d(x_1, x_2) &= e^{x_1+x_2} \quad (\text{coeficiente de difusão}) \\
 c(0, x_2) &= \cos(7x_2) \quad (\text{cond. Dirichlet}) \\
 c(1, x_2) &= \cos(7) \cos(7x_2) \quad (\text{cond. Dirichlet}) \\
 c(x_1, 0) &= \cos(7x_1) \quad (\text{cond. Dirichlet}) \\
 -\nabla c(x_1, 1) \cdot \nu &= 7 \cos(7x_1) \sin(7) \quad (\text{cond. Neumann})
 \end{aligned}$$

Neste caso a solução exata do problema é

$$\begin{aligned}
 c(x_1, x_2) &= \cos(7x_1) \cos(7x_2) \\
 \mathbf{z}(x_1, x_2) &= (7 \sin(7x_1) \cos(7x_2), 7 \cos(7x_1) \sin(7x_2))
 \end{aligned}$$

GRÁFICOS E TRIANGULAÇÃO

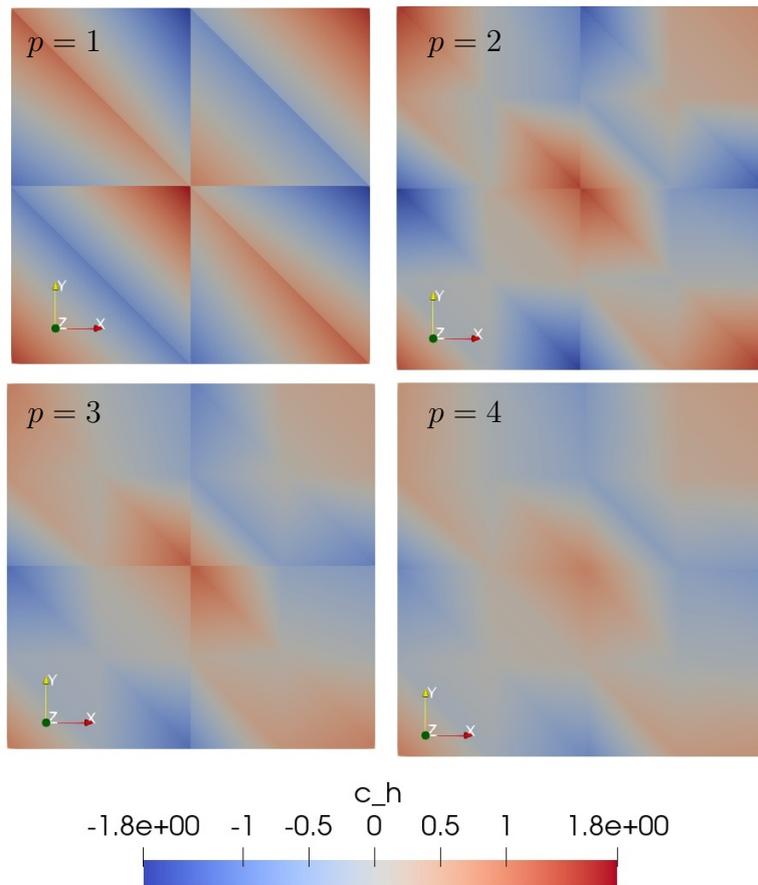


Figura 6.2: Soluções aproximadas c_h para diferentes ordens de aproximação polinomial p e nível de refinamento da malha $j = 1$ com 8 elementos.

Na Figura 6.2 apresentamos as soluções aproximadas $c_h(x_1, x_2)$ geradas com uma discretização do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ com 8 triângulos e ordem de aproximação polinomial $p \in \{1, 2, 3, 4\}$. O número de elementos (triângulos) da malha discretizada é dado por $K = 2^{2j+1}$. Ao comparar os resultados apresentados na Figura 6.2 com o gráfico da solução exata apresentado na Figura 6.3 percebemos que a qualidade das soluções aumenta à proporção que p aumenta, tornando o gradiente de cores mais suave, da mesma forma como é observado no gráfico da solução exata. Entretanto, mesmo nos experimentos de ordem maior é possível observar que algumas regiões possuem contraste de cores acentuado nas interseções das arestas dos elementos, como no ponto central das malhas por exemplo.

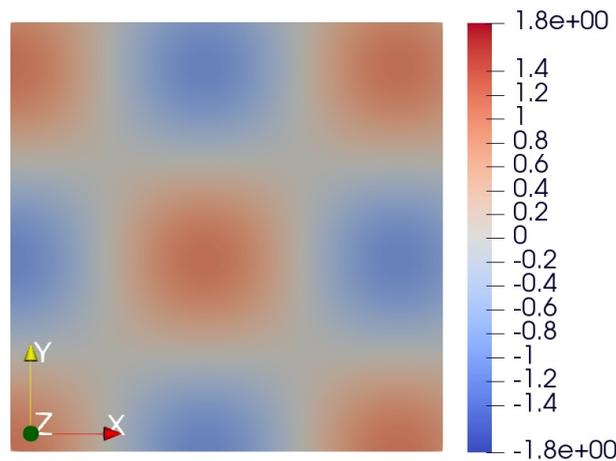


Figura 6.3: Solução exata c .

No experimento a seguir, plotado na Figura 6.4, já é possível observar soluções bem mais precisas quando comparadas com o gráfico da solução exata apresentada na Figura 6.3, além de observarmos gradientes de cores com maior suavidade em virtude de um número maior de elementos na malha (nível $j = 3$ com 128 elementos). Essa melhora visual na qualidade das soluções pode ser comprovada numericamente com a análise das tabelas na seção seguinte, onde tabulamos o erro de discretização $\|c_h - c\|_{L^2}$ para diferentes configurações do número de elementos e grau de aproximação polinomial. As soluções de ambas as Figuras 6.2 e 6.4 foram geradas com termo de penalidade $\eta = 1000 \cdot p^2 \cdot e^2$.

Para fins didáticos plotamos a Figura 6.5 com diferentes refinamentos de malha.

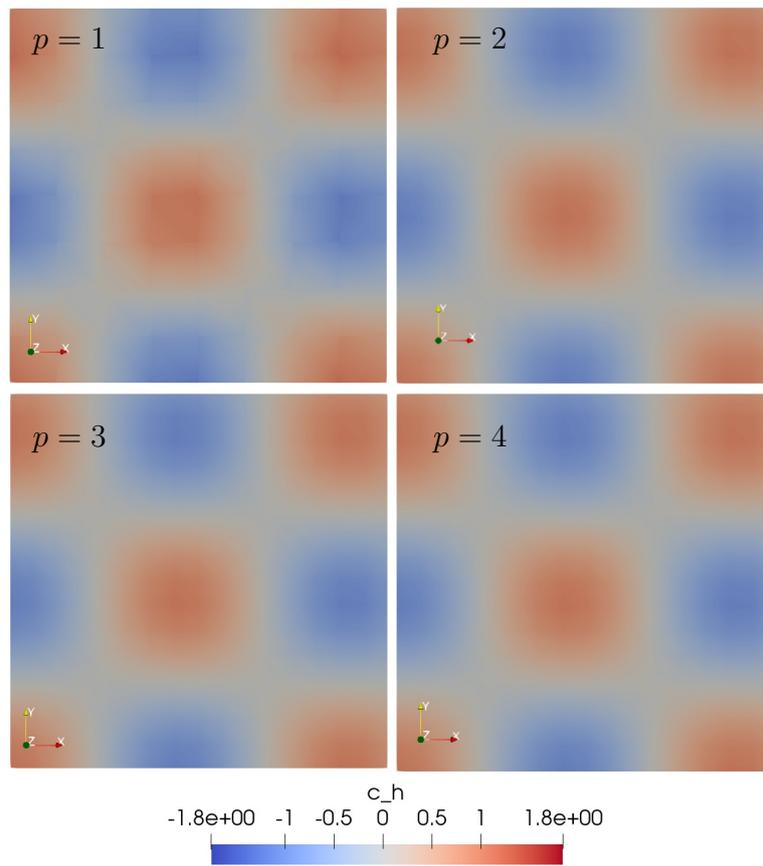


Figura 6.4: Soluções aproximadas c_h para diferentes ordens de aproximação polinomial p e nível de refinamento da malha $j = 3$ com 128 elementos.

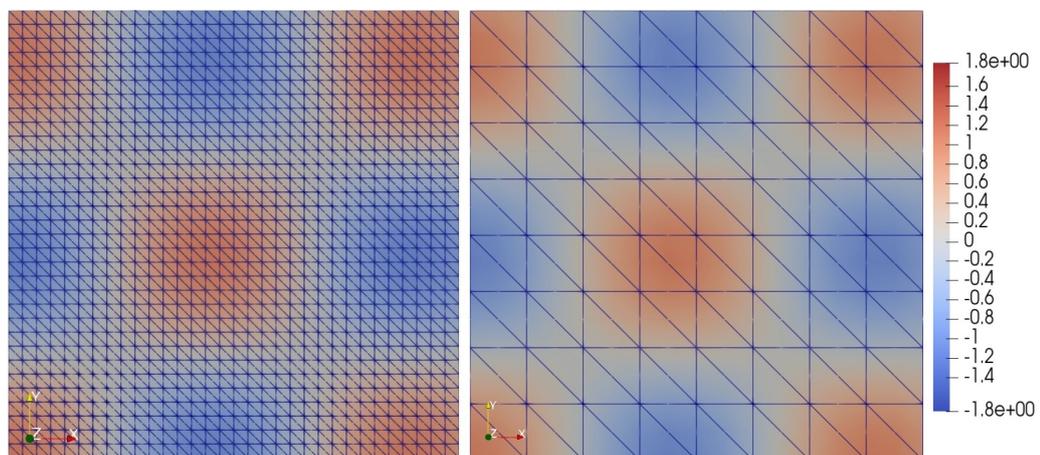


Figura 6.5: Malhas com 2048 e 128 elementos com solução aproximada c_h obtida com $p = 4$.

ERRO DE DISCRETIZAÇÃO

A seguir, nas Tabelas 6.1, 6.2 e 6.3, disponibilizamos os resultados obtidos com a execução do código "testConvergence", que nos fornece os erros de aproximação $\|c_h - c\|_{L^2}$ e a ordem de convergência α obtida pelo método para diferentes parâmetros de entrada: j define o refinamento da malha, p é a ordem de aproximação polinomial e η é o coeficiente de penalidade.

De acordo com a estimativa de erro *a priori*, apresentada no Teorema 7, temos que a ordem de convergência numérica α esperada para o Método de Galerkin Descontínuo Local é dada por (5.9), com $\alpha \rightarrow (p + 1)$ à medida que $h \rightarrow 0$.

O valor ótimo de η é obtido pela fórmula $\eta = \beta \cdot p^2 \cdot \max_{x_1, x_2 \in \Omega} d(x_1, x_2)$, com $\beta > 0$ suficientemente grande para garantir a estabilidade do método. Mais detalhes a respeito do coeficiente de penalidade η podem ser encontrados na referência [20].

$\eta = 10 \cdot p^2 \cdot e^2$								
	$p = 1$		$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$	
j	$\ c_h - c\ _{L^2}$	α						
0	5.49e-01	-	5.71e-01	-	5.75e-01	-	2.82e-01	-
1	3.98e-01	0.465	1.71e-01	1.736	1.16e-01	2.315	1.76e-02	4.006
2	1.64e-01	1.278	3.42e-02	2.324	7.75e-03	3.898	1.18e-03	3.901
3	5.14e-02	1.673	3.52e-03	3.281	4.99e-04	3.958	8.19e-05	3.844
4	1.29e-02	1.999	3.51e-04	3.325	5.91e-05	3.078	2.53e-05	1.697
5	3.00e-03	2.102	5.65e-05	2.638	1.80e-05	1.712	8.90e-06	1.505

Tabela 6.1: Erros de discretização e taxa de convergência numérica na norma L^2 .

$\eta = 100 \cdot p^2 \cdot e^2$								
	$p = 1$		$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$	
j	$\ c_h - c\ _{L^2}$	α						
0	8.08e-01	-	6.21e-01	-	5.74e-01	-	2.89e-01	-
1	4.75e-01	0.768	1.84e-01	1.752	1.18e-01	2.282	1.79e-02	4.014
2	2.29e-01	1.048	3.91e-02	2.237	8.19e-03	3.851	1.17e-03	3.933
3	7.85e-02	1.548	4.76e-03	3.037	5.04e-04	4.021	4.08e-05	4.846
4	2.04e-02	1.942	5.58e-04	3.094	3.06e-05	4.041	2.97e-06	3.781
5	4.74e-03	2.108	6.21e-05	3.168	2.69e-06	3.509	9.41e-07	1.657

Tabela 6.2: Erros de discretização e taxa de convergência numérica na norma L^2 .

$\eta = 1000 \cdot p^2 \cdot e^2$								
	$p = 1$		$p = 2$		$p = 3$		$p = 4$	
j	$\ c_h - c\ _{L^2}$	α						
0	8.53e-01	-	6.27e-01	-	5.74e-01	-	2.90e-01	-
1	4.86e-01	0.811	1.86e-01	1.753	1.18e-01	2.278	1.80e-02	4.014
2	2.42e-01	1.004	3.98e-02	2.223	8.25e-03	3.844	1.17e-03	3.934
3	8.60e-02	1.494	5.03e-03	2.986	5.09e-04	4.018	4.04e-05	4.862
4	2.36e-02	1.866	6.33e-04	2.990	3.04e-05	4.068	1.33e-06	4.922
5	5.95e-03	1.988	7.84e-05	3.012	1.87e-06	4.022	1.05e-07	3.668

Tabela 6.3: Erros de discretização e taxa de convergência numérica na norma L^2 .

É possível observar que a medida que refinamos a malha, aumentando os valores de j e portanto aumentando o número de elementos da malha, a precisão do método é melhorada. De maneira análoga, o aumento da ordem de aproximação polinomial p também fornece melhores aproximações.

O custo computacional em contrapartida aumenta significativamente devido ao aumento considerável de variáveis a calcular, ocasionando crescimento gradativo do tempo computacional, fatores que devem ser relevados no âmbito prático visando à otimização dos recursos disponíveis e buscando o equilíbrio apropriado entre precisão e custo computacional. O número de variáveis a ser calculada pelo método é igual ao número total de *graus de liberdade* do sistema que é $3KN$.

Podemos notar também que à medida que aumentamos o valor de β , o método apresenta ordem de convergência numérica igual a $p + 1$, o que está em concordância com os resultados teóricos previstos em [20].

6.2 PROBLEMA NÃO-ESTACIONÁRIO

A maior parte das situações práticas que envolvem um processo de difusão acontece em condições de Estado Não-Estacionário, também chamado Regime Transitório ou Condições Transientes.

Na difusão em estado não-estacionário, o fluxo de difusão e o gradiente de concentração numa dada posição x variam com o tempo t . Como resultado, ocorre um acúmulo ou esgotamento líquido do componente que se encontra em difusão.

PROBLEMA E CONDIÇÕES INICIAIS

Analogamente ao caso estacionário, apresentaremos resultados numéricos para um problema onde a solução exata é conhecida. Adotaremos o mesmo domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$, um quadrado unitário com fronteira $\partial\Omega$ subdividida em partes Dirichlet $\partial\Omega_D$ e Neumann $\partial\Omega_N$ conforme Figura 6.1.

Considere a equação de difusão

$$\frac{\partial c(t, x_1, x_2)}{\partial t} - \nabla \cdot [d(t, x_1, x_2) \nabla c(t, x_1, x_2)] = f(t, x_1, x_2) \quad \text{em } \Omega$$

onde

$$f(t, x_1, x_2) = -e^{-x_1^2 - x_2^2} \sin(t) + 4e^{-x_1^2 - x_2^2} \cos(t) - 4e^{-x_1^2 - x_2^2} \cos(t)(x_1^2 + x_2^2) \quad (\text{fonte})$$

$$d(t, x_1, x_2) = 1 \quad (\text{coeficiente de difusão})$$

$$c(0, x_1, x_2) = e^{-x_1^2 - x_2^2} \quad (\text{cond. Inicial})$$

$$c(t, 0, x_2) = e^{-x_2^2} \cos(t) \quad (\text{cond. Dirichlet})$$

$$c(t, 1, x_2) = e^{-1 - x_2^2} \cos(t) \quad (\text{cond. Dirichlet})$$

$$c(t, x_1, 0) = e^{-x_1^2} \cos(t) \quad (\text{cond. Dirichlet})$$

$$-\nabla c(t, x_1, 1) \cdot \nu = 2e^{-x_1^2 - 1} \cos(t) \quad (\text{cond. Neumann})$$

Neste caso a solução exata do problema é

$$c(t, x_1, x_2) = e^{-x_1^2 - x_2^2} \cos t$$

$$z(x_1, x_2) = (2x_1 e^{-x_1^2 - x_2^2} \cos t, 2x_2 e^{-x_1^2 - x_2^2} \cos t)$$

GRÁFICOS E TRIANGULAÇÃO

Para obtenção dos resultados numéricos apresentados nas figuras 6.6 e 6.7 rodamos o código com discretização temporal pelo Método de Euler Implícito (ver seção 3.2) com 160 passos no tempo, tal que $t^0 = 0$ e $t^{160} = \frac{\pi}{2}$, portanto com **tamanho do passo** $\Delta t^n := t^{n+1} - t^n = \frac{\pi}{320}$. Utilizamos um passo no tempo suficientemente pequeno para que o erro de discretização temporal não interfira no erro da solução.

A Figura 6.6 representa experimentos com ordem de aproximação polinomial $p = 1$, $p = 3$ e nível de refinamento da malha $j = 3$ com 128 triângulos. A terceira coluna representa a solução exata do experimento nos respectivos instantes de tempo. Pela comparação entre as imagens é possível observar que o Método de Galerkin Descontínuo com Euler Implícito apresentou boas aproximações para o problema proposto.

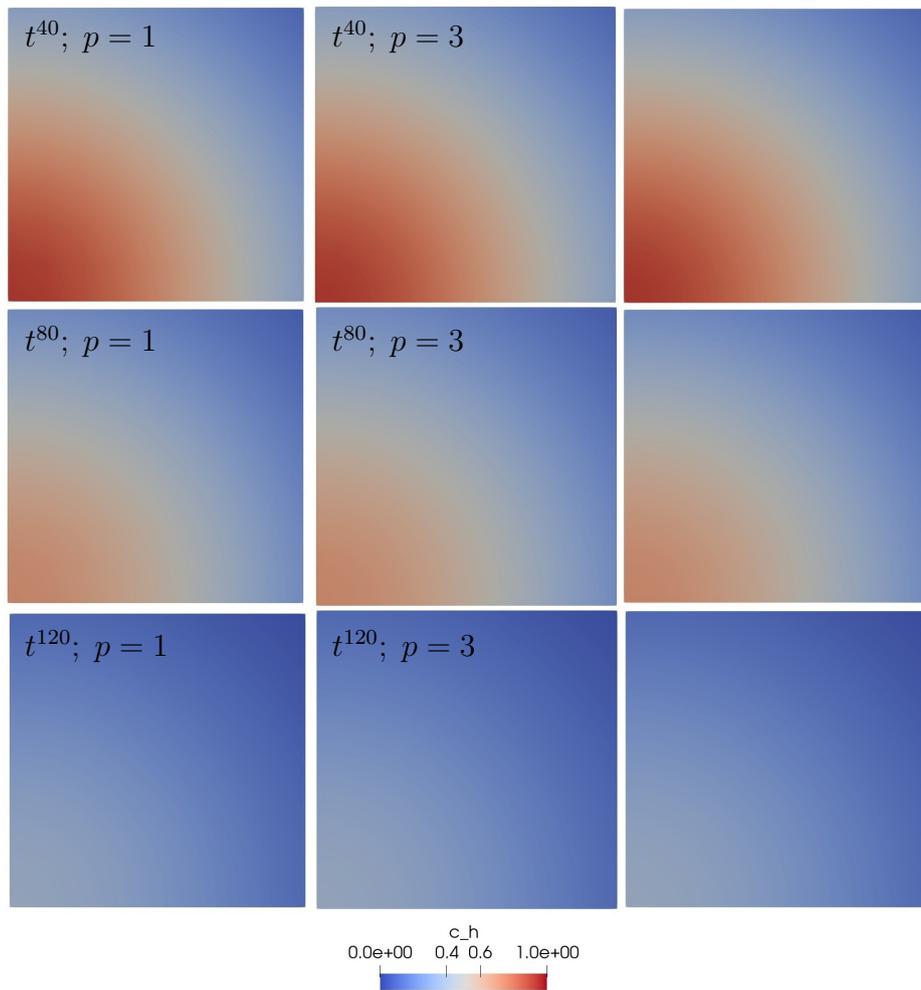


Figura 6.6: Soluções aproximadas c_h em diferentes instantes de tempo t e $j = 3$

Na Figura 6.7 a seguir estão representados experimentos com ordem de aproximação polinomial $p = 1$, $p = 3$ e nível de refinamento da malha $j = 5$ com 2048 triângulos. Assim como na figura anterior, a terceira coluna representa a solução exata do problema. É possível observar em relação à Figura 6.6 uma leve diferença no gradiente de cores em função de melhores aproximações obtidas pelo aumento substancial do refinamento.

O código apresentado na referência base do artigo não oferece uma rotina especificamente desenvolvida para comparação de erros de aproximação na discretização temporal, como aqueles apresentados nas tabelas da seção do problema estacionário. Sua elaboração demandaria um aprofundamento teórico do método que fugiria do escopo deste trabalho, optando-se portanto por apresentar os resultados do problema não-estacionário graficamente.

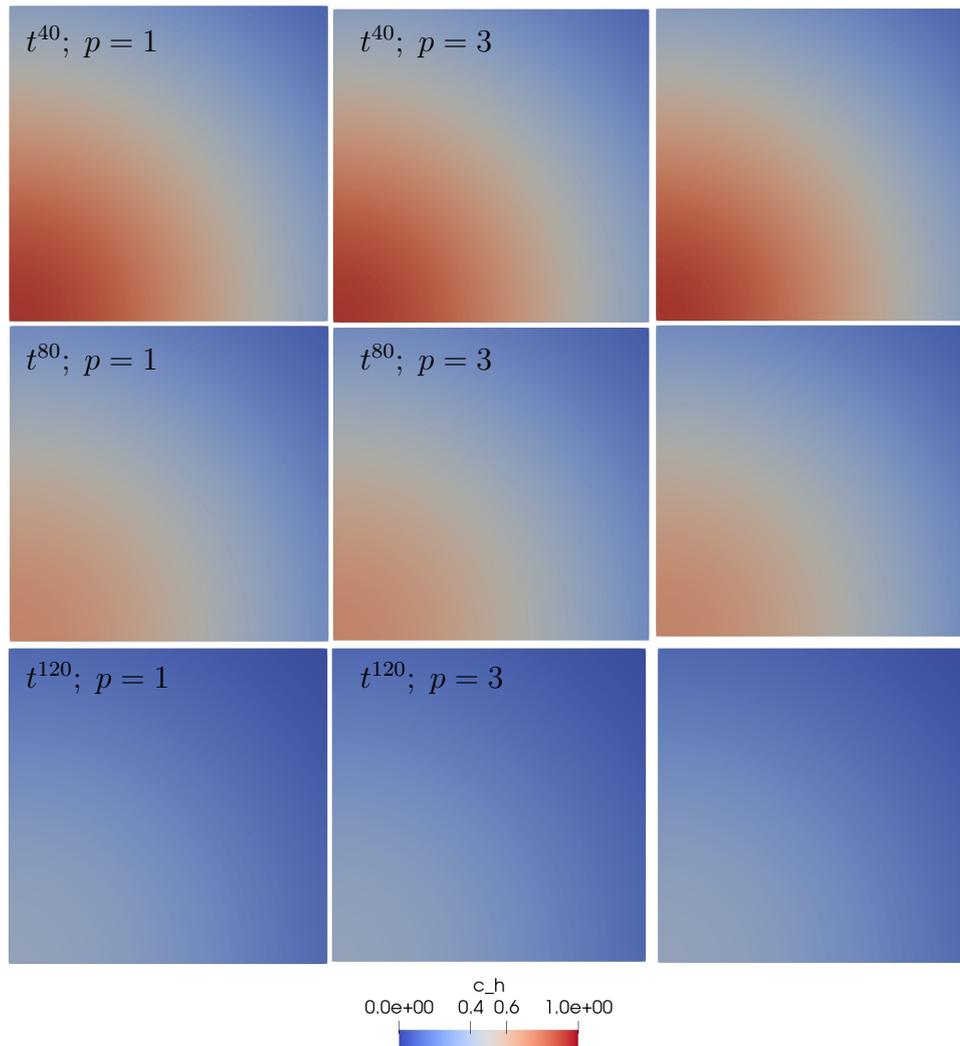


Figura 6.7: Soluções aproximadas c_h em diferentes instantes de tempo t e $j = 5$.

7. CONCLUSÕES

Durante o desenvolvimento deste Trabalho de Conclusão de Curso foi possível revisitar uma série de conteúdos importantes aprendidos durante o curso de graduação em Matemática. Entre eles destacamos: definições e propriedades de EDP's; aproximações polinomiais; os métodos de Euler, de Taylor e de Runge-Kutta; quadraturas numéricas; espaços vetoriais como o espaço de Lebesgue L^2 etc. Agregando a esses conteúdos o estudo das leis de Fick, da equação de difusão e do Método de Galerkin Descontínuo, foi possível atingir o objetivo inicialmente proposto: estudar, compreender e implementar o Método de Galerkin Descontínuo aplicado a uma Equação de Difusão.

Os resultados obtidos trouxeram, como era previsto pela teoria, excelentes aproximações para o problema proposto. Como partimos de um problema com solução exata conhecida foi possível validar o método e o código, ilustrando o potencial dos métodos numéricos na solução de problemas da matemática aplicada.

Como proposta para um futuro trabalho sugerimos estudar a utilização de limitadores para permitir a discretização temporal por métodos Runge-Kutta tipo TVB (*total variation bounded*) e assim fazê-la com maior ordem de aproximação polinomial, a fim de fazer uso eficiente de discretizações do espaço através de métodos de Galerkin Descontínuo de ordem mais alta.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Alt, H. W.: *Linear functional analysis*. An Application-oriented Introduction, 2016.
- [2] Arnold, D. N., Brezzi, F., Cockburn, B. e Marini, L. D.: *Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 39(5):1749–1779, 2002.
- [3] Ascher, U. M. e Petzold, L. R.: *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, vol. 61. Siam, 1998.
- [4] Boffi, D., Brezzi, F., Fortin, M. *et al.*: *Mixed finite element methods and applications*, vol. 44. Springer, 2013.
- [5] Burden, R. L. e Faires, J. D.: *Numerical Analysis*. Brooks/Cole, Cengage Learning, 9^a ed., 2011.
- [6] Cockburn, B., Karniadakis, G. E. e Shu, C. W.: *Discontinuous Galerkin methods: theory, computation and applications*, vol. 11. Springer Science & Business Media, 2012.
- [7] Cockburn, B. e Shu, C. W.: *TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws. II. General framework*. Mathematics of computation, 52(186):411–435, 1989.
- [8] Cockburn, B. e Shu, C. W.: *The Runge–Kutta discontinuous Galerkin method for conservation laws V: multidimensional systems*. Journal of computational physics, 141(2):199–224, 1998.
- [9] Cockburn, B., Shu, C. W., Johnson, C., Tadmor, E. e Cockburn, B.: *An introduction to the discontinuous Galerkin method for convection-dominated problems*. Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations: Lectures given at the 2nd Session of the Centro Internazionale Matematico Estivo (CIME) held in Cetraro, Italy, June 23–28, 1997, pp. 150–268, 1998.
- [10] Cools, R.: *An encyclopaedia of cubature formulas*. Journal of complexity, 19(3):445–453, 2003.
- [11] Frank, F., Reuter, B., Aizinger, V. e Knabner, P.: *FESTUNG: A MATLAB/GNU Octave toolbox for the discontinuous Galerkin method, Part I: Diffusion operator*. Computers & Mathematics with Applications, 70(1):11–46, 2015.

- [12] Friedman, A.: *On the uniqueness of the Cauchy problem for parabolic equations*. American Journal of Mathematics, 81(2):503–511, 1959.
- [13] Hesthaven, J. S. e Warburton, T.: *Nodal discontinuous Galerkin methods: algorithms, analysis, and applications*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [14] Iório, V. M.: *EDP, Um Curso de Graduação*. IMPA, 3ª ed., 2012.
- [15] Johnson, C.: *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Dover Books on Mathematics Series. Dover Publications, Incorporated, 2012, ISBN 9780486131597. <https://books.google.com.br/books?id=PYXjyoqy5qMC>.
- [16] Lawrence, K. L.: *Area Coordinates*, 2023. http://mae.uta.edu/~lawrence/me5310/course_materials/me5310_notes/7_Triangular_Elements/7-4_Area_Coordinates/7-4_Area_Coordinates.htm, acessado em 15/10/2023.
- [17] Mehrer, H.: *Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials, diffusion-controlled processes*, vol. 155. Springer Science & Business Media, 2007.
- [18] Nothing, M. F.: *Triangle Quadrature Rules*, 2023. <https://mathsfromnothing.au/triangle-quadrature-rules/?i=1>, acessado em 15/10/2023.
- [19] Reed, W. H. e Hill, T.: *Triangularmesh methodsfor the neutrontransportequation*. Los Alamos Report LA-UR-73-479, 1973.
- [20] Rivière, B.: *Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation*. SIAM, 2008.
- [21] Shu, C. W.: *Discontinuous Galerkin methods: general approach and stability*. Numerical solutions of partial differential equations, 201, 2009.
- [22] Technology, K. R. I. of: *Vector spaces and linear transformations*, 2023. <https://www.kth.se/social/files/58b80a0df2765450a4abfd21/DD2363-LectureNotes.pdf>, acessado em 01/11/2023.
- [23] Versteeg, H. K. e Malalasekera, W.: *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson education, 2007.
- [24] Wikipedia: *Equação de Fokker–Planck*, 2023. https://pt.wikipedia.org/wiki/Equa%C3%A7%C3%A3o_de_Fokker%E2%80%93Planck, acessado em 20/11/2023.