

LEAST-SQUARES FORMULATIONS APPLIED TO PARABOLIC EQUATIONS

Regina C. P. Leal-Toledo*, Elson M. Toledo†, and Marcelo S. Vasconcelos*

*Departamento de Ciência da Computação
Instituto de Computação - Universidade Federal Fluminense
Rua Passo da Pátria 156 - CEP 24210-240, Niterói, RJ
e-mail: leal@dcc.ic.uff.br

†Laboratório Nacional de Computação Científica
Av. Getúlio Vargas, 333, 25651-070 - Petrópolis, RJ
e-mail: emtc@lncc.br

Key Words: parabolic problems, least-squares formulations, finite element

Abstract.

During the last decade finite element least-squares formulation has been widely used for solving differential equations. Applied to stationary Poisson problem, written as a first order system, it gives H^1 norm convergence for the scalar field and H_{div} for fluxes without satisfying the compatibility requirements between the spaces used to approximate these variables. Adding non rotational condition we get $H1$ convergence for both fields involved in the problem.

In this work we present least-squares semi-discrete formulations applied to the transient heat equations written in temperature and flux. Three time weight were used in the functional definitions resulting in a totally implicit formulation, a weighted formulation where the evolution equation was weighted by a θ factor between t and $t + \Delta t$ time step and the constitutive equation relating the scalar quantity and its flux posed in time $t + \Delta t$ and a third one named here as θ -least-squares formulation ($\theta EFMQ$).

The three here proposed formulations are applied to an example and convergence errors curves are shown and discussed.

1 INTRODUÇÃO

No contexto da utilização do método dos elementos finitos na resolução de problemas de valor de contorno, as formulações de Galerkin em um campo, têm se mostrado eficientes em aplicações de diversas áreas. Em vários outros problemas de interesse, no entanto, constata-se comportamentos indesejáveis, tais como, oscilações espúrias e trancamento de soluções, e o que se propõe nestes casos, é o uso de formulações mistas baseadas no método de Galerkin ou formulações de Petrov-Galerkin, obtidas pela adição de resíduos de mínimos quadrados de suas equações, à forma variacional do problema.

Paralelamente, tem surgido na literatura propostas de utilização da formulação de mínimos quadrados. Essa formulação que foi estudada por Bramble e Schatz¹ na solução numérica de problemas de valor de contorno elípticos, possui em sua forma clássica a desvantagem de requerer maior grau de regularidade dos espaços de aproximação, se comparada a outras formulações. Entretanto, a transformação da equação diferencial original do problema em um sistema de equações diferenciais equivalentes de primeira ordem, pode ser utilizada para reduzir essa necessidade adicional de regularidade desses espaços de aproximação. Este tipo de abordagem tem sido adotada por diversos autores para tratar problemas tanto estacionários^{3,4,7,9} quanto transientes^{5,8}.

No presente trabalho introduzimos e discutimos formulações deste tipo aplicadas a sistemas parabólicos transientes formulados em dois campos.

Inicialmente, resumimos brevemente os resultados por nós obtidos em trabalhos anteriores^{8,9} para o caso de problemas estacionários, para, em seguida apresentar, para o problema transiente diferentes formulações semi-discretas partindo de funcionais de mínimos quadrados escritos em diferentes instantes de tempo. Apresentamos, então uma formulação totalmente implícita onde todas as variáveis estão no tempo $t + \Delta t$ e uma formulação ponderada, onde a equação evolutiva foi ponderada por um fator θ entre os tempos t e $t + \Delta t$ e a equação constitutiva, relacionando a grandeza escalar a seu fluxo, é escrita no tempo $t + \Delta t$. Uma terceira formulação também considerada que denominamos de θ - mínimos quadrados, onde a equação evolutiva está descrita no tempo $t_{n+\theta}$, com a equação constitutiva interpolada entre os tempos t e $t + \Delta t$. Para cada um desses casos, acrescentamos a condição de irrotacionalidade do fluxo para melhorar suas taxas de convergência. Exemplos numéricos para verificar a convergência dos esquemas propostos são apresentados, analisando-se, em cada caso, a influência do acréscimo da equação do rotacional nulo.

1.1 Definição do Problema

Consideramos aqui a seguinte equação diferencial de segunda ordem:

$$\begin{aligned} u_t - \nabla \cdot (\mathbf{k}\nabla u) &= f(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Omega \\ u &= g(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Gamma_u \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{n} &= h(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Gamma_q \\ u &= u_0(\mathbf{x}) & \text{em } \Omega \text{ para } t = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

onde $\Omega \in R^{nsd}$ ($nsd = 1, 2$) é um domínio aberto de contorno Γ , $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ um ponto em Ω e $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ o vetor normal ao contorno, com $\Gamma_u \cup \Gamma_q = \Gamma$ e $\Gamma_u \cap \Gamma_q = \emptyset$, sendo u a variável escalar do problema, \mathbf{p} seu fluxo, e $f(\mathbf{x}, t) \in L^2(\Omega)$ e $g(\mathbf{x}, t)$ funções dadas.

O problema descrito pelas equações (1) pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} u_t + \text{div} \mathbf{p} &= f(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Omega \\ \mathbf{p} &= -\mathbf{k}\nabla u & \text{em } \Omega \\ u &= g(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Gamma_u \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{n} &= h(\mathbf{x}, t) & \text{em } \Gamma_q \\ u &= u_0(\mathbf{x}) & \text{em } \Omega \text{ para } t = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

sendo ∇ o operador gradiente, $\text{div} \mathbf{p} = \nabla \cdot \mathbf{p}$ o divergente do fluxo e \mathbf{k} é uma matriz dada por $\mathbf{k} = k\mathbf{I}$, sendo \mathbf{I} a matriz identidade e k uma constante.

Alguns espaços de funções e normas associadas, utilizadas no presente trabalho são: $L^2(\Omega)$ o espaço das funções quadrado integráveis em Ω com produto interno definido da forma usual como $(u, v) = \int_{\Omega} (uv) d\Omega$ e norma $\|u\|_0 = \|u\| = (u, u)^{\frac{1}{2}}$; $H^1(\Omega)$ o espaço de Hilbert $H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid \forall \alpha, |\alpha| \leq 1, (\partial^\alpha u) \in L^2(\Omega)\}$. Definimos ainda os seguintes espaços:

$$\begin{aligned} V &= \{v \in H^1 : v = 0 \text{ em } \Gamma_u\} \\ U &= \{\mathbf{q} \in L^2(\Omega)^n : \text{div} \mathbf{q} \in L^2(\Omega)\} \equiv H(\text{div}) \end{aligned}$$

as normas:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{q}\|_{H(\text{div})}^2 &= \|\mathbf{q}\|^2 + \|\text{div} \mathbf{q}\|^2 \\ \|\mathbf{q}\|_{H^1}^2 &= \|\mathbf{q}\|^2 + \|\nabla \mathbf{q}\|^2 \end{aligned} \quad (3)$$

e a norma no espaço produto:

$$\|(\mathbf{q}, v)\|_{H(\text{div}) \times H^1} = (\|\mathbf{q}\|_{H(\text{div})}^2 + \|v\|_{H^1}^2)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

1.2 Resultados para o caso estacionário

Inicialmente, resumimos nesta seção os resultados obtidos^{2,7,8,9} para o caso estacionário. Para este caso, considerando condições de contorno homogêneas de Dirichlet o funcional de mínimos quadrados correspondente é dado por:

$$J_1(\mathbf{q}, v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} [(\operatorname{div} \mathbf{q} - f)^2 + (\mathbf{q} + \mathbf{k} \nabla v)^2] d\Omega$$

Associado à minimização de $J(\mathbf{q}, v)$, temos o seguinte problema variacional:

Problema V_1 : Achar $\{\mathbf{p}, u\} \in U \times V$, tal que:

$$B_1\{(\mathbf{p}, u), (\mathbf{q}, v)\} = L_1(\mathbf{q}, v) \quad \forall \mathbf{q} \in U \quad v \in V$$

com $B_1(\cdot, \cdot)$ e $L_1(\cdot)$, definidas como:

$$\begin{aligned} B_1\{(\mathbf{p}, u), (\mathbf{q}, v)\} &= (\operatorname{div} \mathbf{p}, \operatorname{div} \mathbf{q}) + (\mathbf{p} + \mathbf{k} \nabla u, \mathbf{q} + \mathbf{k} \nabla v) \\ L_1(\mathbf{q}) &= (f, \operatorname{div} \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (5)$$

Se adotamos como espaços de aproximações de elementos finitos para o *Problema V_1* , os espaços $H_h^k \subset H(\operatorname{div})$ e $V_h^l \subset H^1$, onde k e l , são os graus dos polinômios de interpolação, para \mathbf{p} e u respectivamente e h , um parâmetro da malha e se consideramos as propriedades de interpolação nos espaços $H(\operatorname{div})$ e H^1 , admitindo-se, ainda, que a solução exata $\{\mathbf{p}, u\}$, seja suficientemente regular com $f \in L^2(\Omega)$, temos para $k = l$, as seguintes estimativas:

$$\|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_{H(\operatorname{div})} + \|u - u_h\|_{H^1} \leq Ch^k$$

Obtemos desta forma, as mesmas ordens de aproximação para \mathbf{p} e para u que as conseguidas pelo método de Petrov-Galerkin¹¹. Resultados semelhantes foram obtidos¹⁰ quando \mathbf{k} é uma matriz diagonal com coeficientes variáveis.

A introdução da condição de irrotacionalidade do fluxo ($\operatorname{rot} \mathbf{p} = 0$), decorrente de $\mathbf{p} = -k \nabla u$ pode ser considerada, de modo a determinar sua influência nas taxas de convergência para este problema. Neste caso o funcional de mínimos quadrados desta formulação passa a ser dado por:

$$\bar{J}_1(\mathbf{q}, v) = J_1(\mathbf{q}, v) + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\operatorname{rot} \mathbf{q})^2 d\Omega$$

Associado à minimização de $\bar{J}_1(\mathbf{q}, v)$ temos o seguinte problema variacional:

Problema \bar{V}_1 : Achar $(\mathbf{p}, u) \in W \times V$, tal que:

$$\bar{B}_1\{(\mathbf{p}, u), (\mathbf{q}, v)\} = L_1(\mathbf{q}, v) \quad \forall \mathbf{q} \in W \quad v \in V$$

com $\bar{B}_1(\cdot, \cdot)$ e $L_1(\cdot)$, definidas a seguir.

$$\bar{B}_1\{(\mathbf{p}, u), (\mathbf{q}, v)\} = B_1\{(\mathbf{p}, u), (\mathbf{q}, v)\} + (\operatorname{rot} \mathbf{p}, \operatorname{rot} \mathbf{q}) \quad (6)$$

$$L_1(\mathbf{q}) = (f, \operatorname{div} \mathbf{q})$$

Obtemos⁹ neste caso as seguintes estimativas:

$$\|(\mathbf{p} - \mathbf{p}_h)\|_0 + h\|\nabla \mathbf{p} - \nabla \mathbf{p}_h\|_0 + \|u - u_h\|_0 + h\|\nabla u - \nabla u_h\|_0 \leq Ch^{k+1}$$

ou

$$\begin{aligned} \|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_1 &\leq Ch^k \\ \|u - u_h\|_1 &\leq Ch^k \end{aligned}$$

Neste caso, para $l = k$, as estimativas na norma de L^2 são da ordem de h^{k+1} .

Os resultados comparativos desta formulações mostram⁹ que a inclusão da parcela devida ao rotacional recupera o fluxo em L^2 que se apresenta com erro na ordem de h^2 .

2 FORMULAÇÕES PARA O PROBLEMA TRANSIENTE

Apresentamos nesta seção três propostas de formulações semi-discretas de mínimos quadrados para o problema transiente: a formulação totalmente implícita, onde todo o sistema (2) está descrito no tempo t_{n+1} , a formulação ponderada na qual utilizamos uma interpolação linear entre os tempos t_n e t_{n+1} para aproximar a equação evolutiva no tempo $t_{n+\theta}$, descrevendo a equação constitutiva no tempo t_{n+1} e a formulação θ - mínimos quadrados onde todo o sistema (2) está descrita no tempo $t_{n+\theta}$ e a equação constitutiva é que é interpolada entre os tempos t_n e t_{n+1} . Nesse caso, o fluxo derivado da grandeza escalar é encontrado em um instante de tempo intermediário entre os tempo t_n e t_{n+1} . A cada uma dessas formulações acrescentamos a parcela devida a irrotacionalidade do fluxo analisando a influência da inclusão desse termo nos resultados obtidos, em termos de taxas de convergência. Consideramos nas subseções em seguida que I é um intervalo de tempo $I = (0, T)$ com partição $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$ sendo $t_{n+\theta}$ um instante de tempo com $t_n < t_{n+\theta} \leq t_{n+1}$ para $n = 0, 1, \dots, N - 1$.

2.1 Formulação Totalmente Implícita

Considerando-se o sistema (2) no tempo t_{n+1} e discretizando-se a derivada no tempo pelo método das diferenças finitas temos:

Problema P₂: Para $n = 1, 2, \dots, N - 1$ e para um dado campo escalar f , encontrar os campos \mathbf{p} e u que satisfaçam a:

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{p}^{n+1} &= f^{n+1} \text{ em } \Omega \\ \mathbf{p}^{n+1} &= -\mathbf{k} \nabla u^{n+1} \end{aligned} \quad (7)$$

com $u = g(\mathbf{x}, t)$ em $\Gamma_u = \Gamma$ e $u = u_0(\mathbf{x})$ em Ω para $t = 0$.

O funcional de mínimos quadrados para este sistema de equações é dado por:

$$J_2(\mathbf{q}, v) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+1} - f^{n+1}, \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+1} - f^{n+1} \right) + \right.$$

$$(\mathbf{k}\nabla v^{n+1} + \mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{k}\nabla v^{n+1} + \mathbf{q}^{n+1}) \quad (8)$$

Substituindo v e \mathbf{q} por suas aproximações v_h e \mathbf{q}_h respectivamente e minimizando-se o funcional resultante em relação a v_h^{n+1} e a \mathbf{q}_h^{n+1} temos o seguinte problema variacional:
Problema V_{2h} : Para $n = 0, 1, \dots, N-1$, encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h)_n \in V_h \times U_h$, onde $V_h \subset V$ e $U_h \subset U$, tal que:

$$B_{2n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = L_{2n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$\begin{aligned} B_{2n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} &= \left(\frac{u_h^{n+1}}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{p}_h^{n+1}, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} \right) + \\ &+ (\mathbf{k}\nabla u_h^{n+1} + \mathbf{p}_h^{n+1}, \mathbf{k}\nabla v_h^{n+1} + \mathbf{q}_h^{n+1}) \\ L_{2n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n &= \left(\frac{u_h^n}{\Delta t} + f^{n+1}, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} \right) \end{aligned}$$

Baseado nos resultados encontrados para o problema estacionário, acrescentamos a condição de irrotacionalidade do fluxo no tempo t_{n+1} a esta formulação. Dessa forma, o novo funcional de mínimos quadrados é definido como:

$$\bar{J}_2(\mathbf{q}_h, v_h) = J_2(\mathbf{q}_h, v_h) + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\operatorname{rot} \mathbf{q}_h^{n+1})^2 d\Omega \quad (9)$$

O problema variacional resultante da minimização do funcional (9) com relação a u_h^{n+1} e a \mathbf{p}_h^{n+1} é então, dado por:

Problema \bar{V}_{2h} : Para $n = 0, 1, \dots, N-1$ encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h)_n \in V_h \times W_h$, onde $V_h \subset V$ e $W_h \subset W$, tal que:

$$\bar{B}_{2n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = L_{2n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$\bar{B}_{2n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = B_{2n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} + (\operatorname{rot} \mathbf{p}_h^{n+1}, \operatorname{rot} \mathbf{q}_h^{n+1})$$

2.2 Formulação Ponderada de Mínimos Quadrados

Para esta formulação, discretizamos a equação evolutiva no tempo $t_{n+\theta}$, pelo método das diferenças finitas, e a equação constitutiva é mantida no instante de tempo $n+1$. Dessa forma temos:

Problema P_3 : Para $n = 1, 2, \dots, N-1$ e $\theta \in (0, 1]$ e para um dado campo escalar f , encontrar os campos \mathbf{p} e u que satisfaçam a:

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{p}^{n+\theta} &= f^{n+\theta} \text{ em } \Omega \\ \mathbf{p}^{n+1} &= -\mathbf{k}\nabla u^{n+1} \end{aligned} \quad (10)$$

com $u = g(\mathbf{x}, t)$ em $\Gamma_u = \Gamma$ e $u = u_0(\mathbf{x})$ em Ω para $t = 0$. O funcional de mínimos quadrados para este sistema de equações é dado por:

$$J_3(\mathbf{q}, v) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+\theta} - f^{n+\theta}, \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+\theta} - f^{n+\theta} \right) + \right. \\ \left. + (\mathbf{k} \nabla v^{n+1} + \mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{k} \nabla v^{n+1} + \mathbf{q}^{n+1}) \right] \quad (11)$$

Para permitir aproximações em diferentes instantes de tempo $t_{n+\theta}$, substituímos em (11) v e \mathbf{q} por suas aproximações v_h e \mathbf{q}_h respectivamente, utilizando uma interpolação linear para aproximar $\mathbf{p}_h^{n+\theta}$ e $f^{n+\theta}$ na equação evolutiva. Definimos então as seguintes ponderações:

$$\mathbf{q}_h^{n+\theta} = \theta \mathbf{q}_h^{n+1} + (1 - \theta) \mathbf{q}_h^n \quad (12)$$

$$f^{n+\theta} = \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n \quad (13)$$

Dessa forma, o funcional de mínimos quadrados obtido é dado por:

$$J_3(\mathbf{q}_h, v_h) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v_h^{n+1} - v_h^n}{\Delta t} + \theta \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} + (1 - \theta) \operatorname{div} \mathbf{q}_h^n - \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n, \right. \right. \\ \left. \left. \frac{v_h^{n+1} - v_h^n}{\Delta t} + \theta \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} + (1 - \theta) \operatorname{div} \mathbf{q}_h^n - \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n \right) + \right. \\ \left. + (\mathbf{k} \nabla v_h^{n+1} + \mathbf{q}_h^{n+1}, \mathbf{k} \nabla v_h^{n+1} + \mathbf{q}_h^{n+1}) \right] \quad (14)$$

Observamos que para $\theta = 0.5$ obtemos um esquema do tipo Crank Nicolson e para $\theta = 1.0$, um esquema totalmente implícito. A minimização do funcional (14) em relação a v_h^{n+1} e a \mathbf{q}_h^{n+1} conduz ao seguinte problema variacional:

Problema V_{3h} : Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h)_n \in V_h \times U_h$, onde $V_h \subset V$ e $U_h \subset U$, tal que:

$$B_{3n} \{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = L_{3n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$B_{3n} \{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = \left(\frac{u_h^{n+1}}{\Delta t} + \theta \operatorname{div} \mathbf{p}_h^{n+1}, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \theta \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} \right) + \\ + (\mathbf{k} \nabla u_h^{n+1} + \mathbf{p}_h^{n+1}, \mathbf{k} \nabla v_h^{n+1} + \mathbf{q}_h^{n+1}) \\ L_{3n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n = \left(\frac{u_h^n}{\Delta t} + (1 - \theta) \operatorname{div} \mathbf{p}_h^n + \theta f^{n+1} + (1 - \theta) f^n, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \theta \operatorname{div} \mathbf{q}_h^{n+1} \right) +$$

Para esta formulação também acrescentamos a condição de irrotacionalidade do fluxo no tempo $t_{n+\theta}$. Dessa forma, o novo funcional de mínimos quadrados, definido utilizando-se a aproximação

$$\operatorname{rot} \mathbf{q}_h^{n+\theta} = \theta \operatorname{rot} \mathbf{q}_h^{n+1} + (1 - \theta) \operatorname{rot} \mathbf{q}_h^n$$

é dado por:

$$\bar{J}_3(\mathbf{q}_h, v_h) = J_3(\mathbf{q}_h, v_h) + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\theta \operatorname{rot} \mathbf{q}_h^{n+1} + (1 - \theta) \operatorname{rot} \mathbf{q}_h^n)^2 d\Omega \quad (15)$$

O problema variacional resultante da minimização do funcional (15) com relação a u_h^{n+1} e a \mathbf{p}_h^{n+1} é então, dado por:

Problema \bar{V}_{3h} : Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h)_n \in V_h \times W_h$, onde $V_h \subset V$ e $W_h \subset W$, tal que:

$$\bar{B}_{3n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = \bar{L}_{3n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{B}_{3n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} &= B_{3n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} + (\theta \operatorname{rot} \mathbf{p}^{n+1}, \theta \operatorname{rot} \mathbf{q}^{n+1}) \\ \bar{L}_{3n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n &= L_{3n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n - ((1 - \theta) \operatorname{rot} \mathbf{p}^n, \theta \operatorname{rot} \mathbf{q}^{n+1}) \end{aligned}$$

2.3 Formulação θ -Mínimos Quadrados

Para essa formulação, que apresenta excelentes características de estabilidade, todo o sistema está descrito no tempo $t_{n+\theta}$ e a equação constitutiva é que é ponderada por um fator θ para interpolar o fluxo entre os tempos t_n e t_{n+1} . Dessa forma, definimos o problema P_4 como:

Problema P_4 : Para $n = 1, 2, \dots, N - 1$ e $\theta \in (0, 1]$ e para um dado campo escalar f , encontrar os campos \mathbf{p} e u que satisfaçam a:

$$\begin{aligned} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{p}^{n+\theta} &= f^{n+\theta} \text{ em } \Omega \\ \mathbf{p}^{n+\theta} &= -\mathbf{k} \nabla u^{n+\theta} \end{aligned} \quad (16)$$

O funcional de mínimos quadrados para este sistema de equações é dado por:

$$\begin{aligned} J_4(\mathbf{q}, v) &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+\theta} - f^{n+\theta}, \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + \operatorname{div} \mathbf{q}^{n+\theta} - f^{n+\theta} \right) + \right. \\ &\quad \left. (\mathbf{k} \nabla v^{n+\theta} + \mathbf{q}^{n+\theta}, \mathbf{k} \nabla v^{n+\theta} + \mathbf{q}^{n+\theta}) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

Substituindo v e \mathbf{q} por suas aproximações v_h e \mathbf{q}_h respectivamente e definindo:

$$u_h^{n+\theta} = \theta u_h^{n+1} + (1 - \theta) u_h^n \quad (18)$$

temos o seguinte funcional de mínimos quadrados:

$$J_{4n}(v_h, \mathbf{q}_h) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{v_h^{n+1} - v_h^n}{\Delta t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_h^{n+\theta} - f^{n+\theta}, \frac{v_h^{n+1} - v_h^n}{\Delta t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_h^{n+\theta} - f^{n+\theta} \right) + \right.$$

$$+ (k (\theta \nabla v_h^{n+1} + (1 - \theta) \nabla v_h^n) + \mathbf{q}_h^{n+\theta}, k (\theta \nabla v_h^{n+1} + (1 - \theta) \nabla v_h^n) + \mathbf{q}_h^{n+\theta}) \quad (19)$$

Podemos dizer que para $\theta = 0.5$ temos “indiretamente” uma formulação de Crank-Nicolson e para $\theta = 1$, a formulação totalmente implícita. A minimização do funcional J_{4n} com relação a v_h^{n+1} e $\mathbf{q}_h^{n+\theta}$ nos fornece o seguinte problema:

Problema V_{4h} : Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h) \in V_h \times W_h$, onde $V_h \subset V$ e $W_h \subset W$, tal que:

$$B_{4n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = L_{4n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$\begin{aligned} B_{4n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} &= \left(\frac{u_h^{n+1}}{\Delta t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_h^{n+\theta}, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \nabla \cdot \mathbf{p}_h^{n+\theta} \right) + \\ &+ (k\theta \nabla u_h^{n+1} + \mathbf{p}_h^{n+\theta}, k\theta \nabla v_h^{n+1} + \mathbf{q}_h^{n+\theta}) \\ L_{4n}\{(\mathbf{q}_h, v_h)_n\} &= \left(\frac{u_h^n}{\Delta t} + f^{n+\theta}, \frac{v_h^{n+1}}{\Delta t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_h^{n+\theta} \right) - \\ &((1 - \theta)k \nabla u_h^n, \theta k \nabla v_h^{n+1} + \mathbf{p}_h^{n+\theta}) \end{aligned} \quad (20)$$

Podemos observar que o fluxo é determinado em uma malha alternada no tempo, e caso haja necessidade de se encontrar o valor de \mathbf{p}_h^n este pode ser obtido por pós-processamento interpolando-se os valores entre $\mathbf{p}_h^{n+\theta-1}$ e $\mathbf{p}_h^{n+\theta}$. Para essa formulação, a equação de irrotacionalidade é incluída no tempo $t_{n+\theta}$, ou seja:

$$\bar{J}_{4n}(\mathbf{q}_h, v_h) = J_{4n}(\mathbf{q}_h, v_h) + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\text{rot} \mathbf{q}_h^{n+\theta})^2 d\Omega \quad (21)$$

O problema resultante da minimização de (21) com relação a v_h^{n+1} e $\mathbf{q}_h^{n+\theta}$ é:

Problema \bar{V}_{4h} : Para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ encontrar $(\mathbf{p}_h, u_h)_n \in V_h \times W_h$, onde $V_h \subset V$ e $W_h \subset W$, tal que:

$$\bar{B}_{4n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = L_{4n}(\mathbf{q}_h, v_h)_n$$

onde

$$\bar{B}_{4n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} = B_{4n}\{(\mathbf{p}_h, u_h)_n, (\mathbf{q}_h, v_h)_n\} + (\theta \text{rot} \mathbf{p}_h^{n+\theta}, \text{rot} \mathbf{q}_h^{n+\theta})$$

com L_{4n} conforme anteriormente definido.

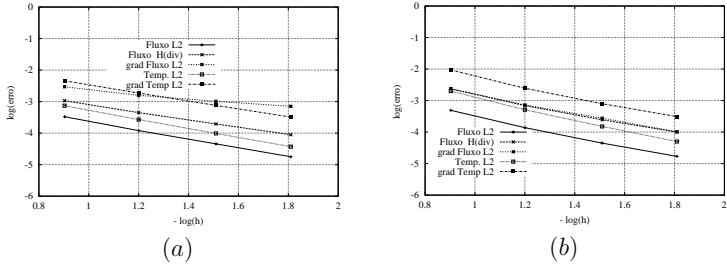


Figura 1: Formulação totalmente implícita (a) Formulação sem rotacional; (b) Formulação com rotacional

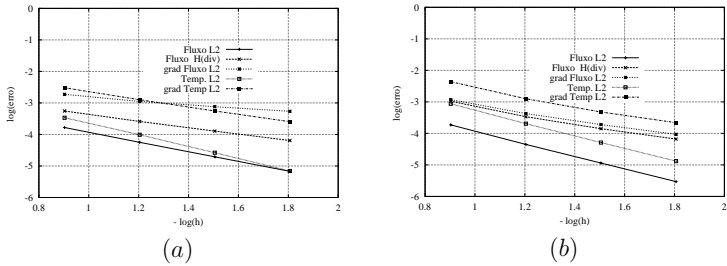


Figura 2: Formulação ponderada (a) Formulação sem rotacional; (b) Formulação com rotacional

3 RESULTADOS NUMÉRICOS

Consideramos aqui como exemplo numérico um problema num domínio $[0, 1] \times [0, 1]$ cuja solução exata é $u = e^{-k\pi^2 t} \text{sen}\pi x \text{sen}\pi y$ utilizado para testar a convergência das formulações propostas. Foram utilizados elementos isoparamétricos bilineares com interpolação de igual ordem ($l = k = 1$) e malhas de 8×8 , 16×16 , 32×32 e 64×64 elementos e $\Delta t = \Delta x$.

Nas figuras que se seguem apresentamos os erros para a variável escalar nas normas de L^2 e na norma do gradiente e para o fluxo os erros nas normas de L^2 , na norma do gradiente e na norma de $H(\text{div})$ definida por (3). Na Figura 1 apresentamos resultados das taxas de convergência para a formulação totalmente implícita ($\theta = 1$) em $t = 5$ e na Figura 2 resultados da formulação ponderada ($\theta = 0.5$) com e sem a inclusão da condição de irrotacionalidade do fluxo. Na Figura 3 comparamos as taxas de convergência obtidas com a formulação θ -mínimos quadrados para o problema aqui considerado.

Podemos observar que mesmo para o problema transiente o método converge quando aproximamos u e \mathbf{p} com interpolações de igual ordem, e que a inclusão da condição de irrotacionalidade, assim como ocorre no caso estacionário também nestes casos, melhora as taxas de convergência para o fluxo.

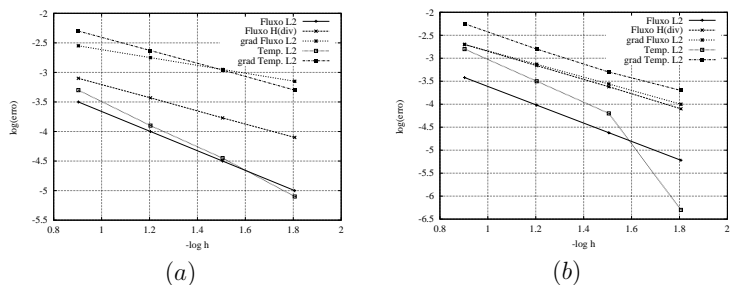


Figura 3: Formulação θ -mínimos quadrados (a) Formulação sem rotacional; (b) Formulação com rotacional

4 CONCLUSÕES

A formulação de mínimos quadrados é uma alternativa quando se necessita trabalhar com formulações mistas. Neste caso, tanto para o problema estacionário, quanto para o transiente não há necessidade de compatibilidade entre os espaços de aproximação das variáveis escalar e vetorial, podendo acomodar interpolações de igual ordem. As formulações propostas mostraram-se convergentes, e constatamos, nos casos analisados, que tanto no problema estacionário quanto no problema transiente a inclusão da parcela devida a irrotacionalidade do fluxo não altera o número de incógnitas do problema discretizado, melhorando as taxas de convergência para essa variável.

A formulação ponderada, onde a equação evolutiva está aproximada no tempo $t_{n+\theta}$, com $\theta = 0.5$ apresenta resultados mais precisos que a formulação totalmente implícita, embora esta última apresente excelentes características de estabilidade.

REFERÊNCIAS

- [1] J. Bramble, A. Schatz, On the numerical solution of elliptic boundary-value problems by least-squares approximation, "Numerical Solution of P.D.E.", Vol. II, pp. 107-133, Academic Press, New York, 1970.
- [2] Z. Cai, T. A. Manteuffel, S. F. McCormick, First-order system least squares for second-order partial differential equations: Part II, *SIAM J. Numer. Anal.*, **34**, (1997), 425-454.
- [3] G. F. Carey, "Finite element modeling of environmental problems", John Wiley - Sons, 1995.
- [4] G. F. Carey, B. N. Jiang, Least square finite element method and preconditioned conjugate gradient solution, *Int. J. Numer. Met. Eng.*, **24**, (1987), 1283-1296.
- [5] T. F. Chen, Semidiscrete least-squares methods for linear convection-diffusion problem, *Comput. Math. Applic.*, **24**, (1992), 29-44.
- [6] B. N. Jiang, Optimal least-squares finite element method for elliptic problems. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **102**, (1998), 199-212.

- [7] R. C. P. Leal-Toledo, M. F. S. S. Menna Barreto, E. M. Toledo, A finite element least squares formulation for stationary and transient advection-diffusion problems, “ Anais do XX Congresso Ibero - Latino - Americano de Métodos Computacionais em Engenharia”, São Paulo, SP, 1999.
- [8] R. C. P. Leal-Toledo, A. F. D. Loula, E.M. Toledo, N. F. F. Ebecken, Aplicação do método dos elementos finitos a uma formulação de mínimos quadrados, “ Anais do XIV Congresso Ibero - Latino - Americano de Métodos Computacionais em Engenharia”, São Paulo, SP, 1993.
- [9] R. C. P. Leal-Toledo, “ Estudo de uma formulação de mínimos quadrados para o método dos elementos finitos mistos ” , Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1992.
- [10] A. I. Pehlivanov, G. F. Carey, R. D. Lazarov, Least squares mixed finite elements for second order elliptic problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, **31**, (1994), 1368-1377.
- [11] E. M. Toledo, “ Novas formulações mistas de elementos finitos mistos com pós-processamento” , Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1990.