

PAULO HENRIQUE BARBOSA GALDINO

**Análise Teórica de uma técnica de aproximação
da velocidade de Darcy utilizando o método
dos elementos finitos mistos e híbridos.**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE MATEMÁTICA
2009

PAULO HENRIQUE BARBOSA GALDINO

Análise Teórica de uma técnica de aproximação da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para obtenção do título de **MESTRE EM MATEMÁTICA**.

Área de Concentração: Matemática.
Linha de Pesquisa: Análise Numérica.

Orientador: Prof. Dr. César Guilherme de Almeida.

UBERLÂNDIA - MG
2009

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

G149a Galdino, Paulo Henrique Barbosa, 1979-
Análise teórica de uma técnica de aproximação da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos / Paulo Henrique Barbosa Galdino. - 2009.
92 f.

Orientador: César Guilherme de Almeida.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Matemática.
Inclui bibliografia.

1. 1. Equações diferenciais parciais - Teses. 2. Método dos elementos finitos - Teses. I. Almeida, César Guilherme de. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Matemática. III. Título.
- 2.

CDU: 517.95

Elaborado pelo Sistema de Bibliotecas da UFU / Setor de Catalogação e Classificação



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA
 Av. João Naves de Ávila, 2121, Bloco 1F, Sala 1F 152
 Campus Santa Mônica, Uberlândia - MG, CEP 38400-902

ALUNO: Paulo Henrique Barbosa Galdino.

NÚMERO DE MATRÍCULA: 86189.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Matemática.

LINHA DE PESQUISA: Análise Numérica.

PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA: Nível Mestrado.

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Análise Teórica de uma técnica de aproximação da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos.

ORIENTADOR: Prof. Dr. César Guilherme de Almeida.

A dissertação foi **APROVADA**, em reunião pública, realizada na Sala Multiuso da Faculdade de Matemática, Bloco 1F, Campus Santa Mônica, em 05 de março de 2009, às 14 horas, com a seguinte Banca Examinadora:

NOME

ASSINATURA

Prof. Dr. César Guilherme de Almeida
UFU - Universidade Federal de Uberlândia

Prof. Ph.D. Alexandre Santos Francisco
UFF - Volta Redonda

Prof. Dr. Luís Cláudio Oliveira Lopes
UFU - Universidade Federal de Uberlândia

Uberlândia, 05 de março de 2009.

Dedicatória

De uma maneira muito grata quero dedicar este trabalho às pessoas que fizeram parte deste sonho realizado.

Ao meu sobrinho Rafael Santana Galdino, à minha irmã Dilourdes Maria, ao meu pai Antero Galdino.

De uma forma muito especial à minha mãe Maria Aparecida Barbosa Galdino, por acreditar que a “educação e o conhecimento” são os melhores caminhos para se progredir na vida (e ela estava certa).

Dedico também ao meu irmão André Luiz Galdino que, por muitas e valiosas vezes, foi muito além de um irmão.

Muito obrigado!

“...nunca deixe que alguém lhe diga que nunca vai conseguir...

...que nada vai dar certo...

...que você nunca vai ser alguém...

...pois, quem acredita sempre alcança!”

Renato Russo.

Agradecimentos

Agradeço:

- Primeiramente a Deus, pela vida e por todas as oportunidades dadas.
 - Aos amigos (“brothers”) que sempre incentivaram e acreditaram em mim.
 - Aos amigos do mestrado Daniel Hilário, Leandro Cruvinel, Juliana Curcino, Wanda Lopes e Wilian Vieira que muito contribuíram para que eu pudesse ampliar os meus conhecimentos e, principalmente, que eu pudesse crescer como pessoa.
 - Aos funcionários da FAMAT pela hospitalidade e incentivo.
 - Aos docentes do Programa de Mestrado-FAMAT que muito contribuíram para a realização deste trabalho.
 - Aos professores Alexandre Santos Francisco e Luís Cláudio Oliveira Lopes por terem aceito o convite para participarem da banca examinadora e, de mesma forma, agradeço aos professores suplentes Simone Sousa Ribeiro e Valdair Bonfim.
 - Com muito carinho aos professores do Programa de Mestrado-FAMAT, Edson Agustini e Rosana Sueli pelas palavras amigas e incentivadoras nos momentos difíceis.
 - E de uma maneira muito especial agradeço ao meu orientador, César Guilherme de Almeida, pela educação, pela paciência, pelo conhecimento transmitido e pela confiança depositada na realização deste trabalho.
 - Aos colegas do Colégio Estadual “Antônio Ferreira Goulart” pelo incentivo e apoio.
 - À Secretaria de Educação do Estado de Goiás pelo incentivo à qualificação profissional.
 - À agência financiadora Capes pelo apoio dado ao longo do curso.
- Certamente não consegui listar aqui todos aqueles que contribuíram, direta ou indiretamente, para que este momento fosse alcançado, mas sou grato a todos.
- Muito obrigado!

GALDINO, P. H. B. *Análise Teórica de uma técnica de aproximação da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos*. 2009. 92 p. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG.

Resumo

O objetivo deste trabalho é apresentar uma técnica de aproximação para a solução de equações elípticas, utilizando espaços de Raviart-Thomas de baixa ordem. Em especial, será considerada a equação que fornece a velocidade de Darcy para escoamentos em meios porosos, levando-se em conta tanto permeabilidades escalares como permeabilidades na forma de tensor, definidas em malhas regulares de um domínio retangular. A técnica empregada é conhecida como o método dos elementos finitos mistos e híbridos. Neste caso, a variável principal do sistema linear oriundo da discretização é denominada Multiplicador de Lagrange e está associada a cada uma das arestas dos elementos finitos (formulação híbrida). Na formulação mista, são considerados dois espaços apropriados: um contém funções escalares e o outro contém funções vetoriais. Assim, pode-se aproximar, simultaneamente, a pressão e o gradiente de pressão. O resultado principal do trabalho é a demonstração, usando argumentos locais, do fato que o sistema linear associado a uma formulação fraca das equações de Darcy, com Multiplicadores de Lagrange relacionados ao fluxo normal e que aproximam a pressão nas arestas, possui matriz simétrica e definida positiva.

Palavras-chave: Elementos finitos, métodos numéricos, equações diferenciais parciais.

GALDINO, P. H. B. *Theoretical analysis of a technique of approach of Darcy's velocities using the method of the mixed and hybrid finite elements*. 2009. 92 p. M. Sc. Dissertation, Federal University of Uberlândia, Uberlândia-MG.

Abstract

The objective of this work is to present one approach technique for the solution of elliptic equations, using Raviart-Thomas spaces of low order. Especially, the equation that supplies Darcy's velocities for flow in porous media it will be considered, taking into account both scalar permeability and permeability in the tensor form, defined in regular meshes of a rectangular domain. The technique used is known as mixed finite and hybrid elements method. In this case, the main variable of the linear system derived from the discretization is named Multiplier of Lagrange that is associated with each edges of the finite elements (hybrid formulation). In the mixed formulation, two appropriate spaces are considered: one contains scalar functions and the other contains vectorial functions. Thus, it can be approached, simultaneously, the pressure and the pressure gradient. The main result of this study is the demonstration, using local arguments, of the fact that the linear system associated to a weak formulation of the Darcy equations, with Lagrange Multipliers related to the normal flow that approach the pressure in the edges, has a matrix symmetric and positive definite.

Key-words: Finite elements, Numerical Methods, Partial Differential Equations.

Lista de Figuras

- Fig. 2.1: Gráfico de funções lineares por partes. p.29
- Fig. 4.1: Elemento E e as funções que geram o espaço de Raviart-Thomas em E . p.44
- Fig. 4.2: Elemento $E = E_{i,j}$ da partição do domínio e seus vizinhos. p.50
- Fig. 4.3: Modelo de numeração das arestas. p.60
- Fig. 4.4: Matriz global associada à numeração dada na Fig.(4.3). p.60
- Fig. 4.5: Malha de elementos associada à numeração dada na Fig.(4.3). p.61
- Fig. 4.6: Malha de Multiplicadores de Lagrange associada à Fig.(4.5). p.62
- Fig. 4.7: Domínio com apenas três Multiplicadores de Lagrange. p.65
- Fig. 4.8: Numeração local dos Multiplicadores de Lagrange. p.66
- Fig. 5.1: Gráfico das funções quadráticas dadas na Eq.(5.1), com $r = 1$, $\Delta_1 = 0$. p.72
- Fig. 5.2: Gráfico das funções quadráticas dadas na Eq.(5.1), com $r = 1$, $\Delta_1 > 0$. p.74
- Fig. 5.3: Gráfico das funções quadráticas dadas na Eq.(5.1), com $r = \frac{1}{2}$. p.74
- Fig. 5.4: Gráfico das funções quadráticas dadas na Eq.(5.2), com $r = 1$. p.74
- Fig. 5.5: Gráfico das funções quadráticas dadas na Eq.(5.2), com $r = \frac{1}{2}$. p.74

Lista de Símbolos

$f^{(m)}(v; \eta)$	derivada direcional de ordem m de f em v na direção de η ;
x, y	variáveis do espaço;
Ω	domínio de definição do problema de valor de contorno em \mathbb{R}^n ;
Γ	fronteira de Ω ;
$\bar{\Omega}$	união de Ω com sua fronteira Γ ;
\tilde{V}	espaço das funções teste;
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	produto interno definido sobre o espaço de $L^2[a, b]$ ou $L^2(\Omega)$;
$\ \cdot\ $	norma associada ao produto interno definido sobre L^2 ;
$\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}$	produto interno energia;
$\ \cdot\ _{\mathcal{E}}$	norma energia associada ao produto interno energia;
$\langle \cdot, \cdot \rangle_k$	produto interno de Sobolev de ordem k ;
$\ \cdot\ _k$	norma de Sobolev de ordem k ;
$d\mathbf{x} = dx dy$	diferencial em \mathbb{R}^2 ;
$d\mathbf{x} = dx dy dz$	diferencial em \mathbb{R}^3 ;
K	permeabilidade da rocha;
M	razão de viscosidade;
∇	gradiente, operador matemático;
$\nabla \cdot$	divergente, operador matemático;
E	elemento retangular da partição de Ω ;
\tilde{E}	elemento vizinho a E com relação a uma aresta qualquer β de E ;

∂E	fronteira do elemento E ;
u_α	componente ortogonal do fluxo através da aresta α na direção da normal exterior;
R, L, U, D	arestas direita, esquerda, de cima, de baixo do elemento E ;
η_α	vetor unitário normal exterior à aresta α do elemento E ;
$\ell_{E,\alpha}$	Multiplicador de Lagrange associado à aresta α do elemento E ;
α^*	aresta conjugada;
α'	aresta oposta;
α^\perp	aresta transversal;
A_E	matriz do sistema linear relativa ao elemento E ;
$A_{\tilde{E}}$	matriz do sistema linear relativa ao elemento vizinho \tilde{E} ;
\mathcal{L}	vetor global formado pelos Multiplicadores de Lagrange.

Sumário

Resumo	vii
Abstract	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Símbolos	x
Introdução	1
1 Métodos Variacionais	3
1.1 Formulação fraca para problemas de valor de contorno - parte I	3
1.2 A equação de Euler-Lagrange para problemas unidimensionais	7
1.3 Condições de contorno naturais e essenciais	10
1.4 Equação de Euler-Lagrange e problemas de valores de contorno de segunda ordem	11
1.5 Formulação fraca para problemas de valor de contorno - parte II	14
1.6 Ampliação do conjunto das funções admissíveis	17
2 Introdução aos espaços de Sobolev e ao método dos elementos finitos	20
2.1 Espaço de Sobolev - unidimensional	20
2.2 Espaço de Sobolev - n-dimensional	21
2.3 O Lema de Lax-Milgram	23
2.4 O método de Ritz	26
2.5 O método de Galerkin	28
2.6 O método dos gradientes conjugados	30
2.7 Pré-condicionamento de matriz	31
2.8 O pré-condicionamento de Cholesky	33
3 Equações diferenciais que governam o escoamento miscível	34
3.1 Discussão do processo físico	34
3.2 Derivação do sistema diferencial, com duas componentes, para o deslocamento miscível incompressível	36
4 Cálculo da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos	41
4.1 Introdução	41
4.2 Lei de Darcy	42
4.3 Formulação fraca para a Velocidade de Darcy	43
4.4 Espaço de Raviart-Thomas de baixa ordem	44
4.5 Relação entre as componentes ortogonais do fluxo, os Multiplicadores de La- grange e a pressão	45
4.6 Relação de continuidade do fluxo	50

4.7	Formulação fraca para a equação elíptica	51
4.8	Formulação híbrida - eliminação da variável pressão	51
4.9	Formulação híbrida usando um tensor de permeabilidade	53
4.10	Construção das matrizes A_E e $(A_E)^{-1}$	54
4.11	Construção da matriz σ_E	58
4.12	Análise do sistema linear dos Multiplicadores de Lagrange	59
4.13	Sistema linear com permeabilidade escalar	63
4.14	Sistema linear com permeabilidade na forma de tensor	67
5	Condições acerca do tensor de permeabilidade para gerar uma matriz simétrica e definida positiva	71
6	Conclusão	76
	Referências Bibliográficas	78

Introdução

O primeiro passo para se iniciar simulações de um reservatório consiste no desenvolvimento de um bom modelo físico, que descreva adequadamente e de forma significativa o fenômeno de escoamento de um fluido. É a natureza do modelo físico que indicará quais os modelos matemáticos e numéricos que são mais convenientes. Em modelos matemáticos para o processo de deslocamento miscível em meios porosos surgem equações diferenciais parciais do tipo convecção-difusão que dependem da velocidade de Darcy. A lei ou correlação mais amplamente usada e que pode ser incorporada em modelos analíticos de escoamento em meios porosos é a lei de Darcy, descoberta em 1856 pelo engenheiro francês Henry D'Arcy. A lei de Darcy afirma que a taxa volumétrica, Q , de um fluido homogêneo em um meio poroso é proporcional ao gradiente de pressão, ou gradiente hidráulico, e à área da seção transversal, A , normal à direção do fluxo e inversamente proporcional à viscosidade μ do fluido. A lei define o conceito de permeabilidade K da rocha, que quantifica a capacidade da rocha em transmitir o fluido. Dessa forma, desprezando-se os efeitos gravitacionais, a velocidade superficial do fluido (velocidade u de Darcy) é dada por:

$$u = \frac{Q}{A} = -\frac{K}{\mu} \nabla p,$$

sendo p a pressão do fluido, K um tensor de permeabilidade absoluta com unidades de darcies (comprimento ao quadrado) e μ a viscosidade do fluido.

O objetivo deste trabalho é apresentar uma técnica de aproximação para a solução de equações elípticas, cuja discretização utiliza os espaços de Raviart-Thomas de baixa ordem. Em especial, para tal aproximação, será considerada a equação que fornece a velocidade de Darcy para escoamentos em meios porosos, levando-se em conta tanto permeabilidades escalares como permeabilidades na forma de tensor, definidas em malhas regulares de um domínio retangular. A técnica utilizada para tal aproximação é conhecida como método dos elementos finitos mistos e híbridos. O sistema linear proveniente desta discretização tem como variável principal os chamados Multiplicadores de Lagrange os quais estão associados a cada uma das arestas dos elementos finitos (formulação híbrida). Na formulação mista, são considerados dois espaços apropriados: um contém funções escalares e o outro contém funções vetoriais. Dessa forma, pode-se aproximar, simultaneamente, a pressão e o gradiente de pressão. O resultado principal do trabalho é a demonstração, usando argumentos locais, do fato que o sistema linear associado a uma formulação fraca das equações de Darcy, com Multiplicadores de Lagrange relacionados ao fluxo normal e que aproximam a pressão nas arestas, possui matriz simétrica e definida

positiva, o que permite concluir que este sistema possui solução única, a qual fornecerá uma aproximação da solução da equação elíptica considerada. A seguir, de modo sucinto, será descrito como este trabalho está organizado.

No Capítulo 1 será feito um estudo introdutório sobre formulação fraca (ou métodos variacionais) de problemas de valores de contorno expondo definições e teoremas que irão garantir a existência e unicidade das soluções de tais problemas; ou, equivalentemente, a existência de mínimos de um dado funcional associado a um dado problema de valor de contorno. Será também, neste Capítulo, evidenciada a equivalência entre achar o mínimo de um dado funcional e resolver a equação de Euler-Lagrange associada a este funcional. Ressaltando que este método não é o ideal (quando se considera a equação que fornece a velocidade de Darcy) devido ao fato que esta equação não satisfaz certas hipóteses necessárias para a obtenção (ou resolução) da equação de Euler-Lagrange e, também, mesmo sabendo que a equação de Euler-Lagrange possui solução, esta pode não ser encontrada de maneira fácil. Ainda neste capítulo será introduzido o conceito de completamento devido à necessidade de se ampliar o domínio de um dado funcional considerado.

No Capítulo 2, devido à necessidade de se ampliar o domínio de um dado funcional, são introduzidos os espaços de Sobolev, em particular o espaço $H^1(\Omega)$, sob o qual está definido a pressão (função escalar). E, também, são lembrados alguns dos mais importantes métodos para minimizar funcionais, que garantem a existência e unicidade deste mínimo, além de permitir encontrá-lo, por exemplo, utilizando o lema de Lax-Milgram, método de Ritz, método de Galerkin e Gradientes Conjugados pré-condicionados. Será descrito também neste Capítulo a idéia de pré-condicionamento por meio da fatoração incompleta de Cholesky. Já o Capítulo 3 apresenta um dos vários ramos importantes da Matemática Aplicada onde se busca resolver um certo problema de valor de contorno que, nesse caso, se trata de escoamento de petróleo. Sendo neste capítulo deduzidas as equações diferenciais que governam o escoamento miscível, no qual é discutido o processo físico com o objetivo de obter o sistema diferencial, com duas componentes, para o deslocamento miscível incompressível fazendo uso da lei de Darcy e da lei de conservação de massa. No Capítulo 4 será visto uma generalização das técnicas apresentadas no artigo de Chavent e Roberts [10], no qual se considera, além da permeabilidade escalar, a permeabilidade na forma de um tensor simétrico e definido positivo; com atenção especial para a demonstração de que a matriz do sistema linear oriundo da formulação fraca da equação da velocidade de Darcy é definida positiva, se o tensor K satisfizer certas restrições que são especificadas no Capítulo 5. Com esta técnica apresenta-se uma outra maneira de se obter uma aproximação da solução de um dado problema de valor de contorno sem o uso da equação de Euler-Lagrange e do lema de Lax-Milgram. Finalmente no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

Capítulo 1

Métodos Variacionais

Introdução

Um dos problemas mais importantes da matemática aplicada à problemas físicos é o problema de valor de contorno, no qual busca-se uma função que satisfaça alguma equação diferencial em uma região Ω e que satisfaça certas condições específicas na fronteira de Ω . Muitos problemas deste tipo possuem a propriedade que a solução minimiza um certo funcional f definido em algum conjunto de funções V , ou, em outras palavras, esta solução é um ponto estacionário do funcional f , conforme a definição (1.5) dada a seguir. Assim, a tarefa de resolver um problema de valor de contorno é equivalente à de encontrar uma função em V que faz f estacionar, o que leva o nome de formulação variacional (ou formulação fraca) do problema de valor de contorno.

1.1 Formulação fraca para problemas de valor de contorno - parte I

Nesta seção, os funcionais são do tipo $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, sendo V algum conjunto de funções reais e contínuas definidas num intervalo fechado $[a, b]$, onde um elemento de V pode ser escrito como sendo $v = v(x)$, $a \leq x \leq b$. O conjunto V é chamado de conjunto das funções admissíveis. As definições e teoremas dados a seguir irão garantir a existência e unicidade de pontos de mínimo dos funcionais em questão e, conseqüentemente, existência e unicidade de soluções dos problemas de valor de contorno associados a estes funcionais.

Definição 1.1 *Dados $v \in V$ e $\varepsilon > 0$ a vizinhança de $v \in V$ de raio $\varepsilon > 0$ é definida como sendo $S(v, \varepsilon) = \{w \in V : 0 \leq \|v - w\| < \varepsilon\}$, onde $\|\cdot\|$ denota a norma definida por:*

$$\|v\| = \left[\int_a^b v(x)^2 dx \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \forall v \in V.$$

Definição 1.2 *Seja o funcional $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$. Então $\hat{v} \in V$ é um mínimo local de f se existe um $\varepsilon > 0$, tal que, $f(\hat{v}) \leq f(v)$, $\forall v \in S(\hat{v}, \varepsilon)$. Se $f(\hat{v}) < f(v)$, $\forall v \in S(\hat{v}, \varepsilon)$, $v \neq \hat{v}$, então \hat{v} é um mínimo local forte de f .*

Definição 1.3 *Seja o funcional $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$. Então $\hat{v} \in V$ é um mínimo global de f se $f(\hat{v}) \leq f(v)$, $\forall v \in V$. Se $f(\hat{v}) < f(v)$, $\forall v \in V$, $v \neq \hat{v}$, então \hat{v} é um mínimo global forte de f .*

Vale ressaltar que V pode ser um espaço linear, ou seja, possui a seguinte propriedade: para quaisquer $v, w \in V$ e quaisquer $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tem-se que $(\alpha v + \beta w) \in V$, mas se V não for um espaço linear o seguinte conjunto pode ser considerado

$$\tilde{V} = \left\{ \eta : \eta = v - w \mid v, w \in V \right\}, \quad (1.1)$$

o qual é um espaço linear, chamado de **espaço das funções teste**. Assim, o conjunto V pode ser reescrito como $V = \left\{ w : w = v^* + \eta ; \eta \in \tilde{V} \right\}$, sendo v^* um elemento arbitrário fixo de V .

Note que a vizinhança $S(v, \varepsilon)$ definida anteriormente é equivalente à seguinte

$$\bar{S}(v, \varepsilon) = \left\{ w \in V \mid w = v + \tau\eta ; \eta \in \tilde{V} ; \|\eta\| = 1 ; \tau \in (-\varepsilon, \varepsilon) \right\}.$$

De fato, seja $w \in S(v, \varepsilon)$, isto é, $0 \leq \|v - w\| < \varepsilon$ e note que $w = v + \frac{w - v}{\|w - v\|} \cdot \|w - v\|$, se $w \neq v$. Assim, tomando $\eta = \frac{w - v}{\|w - v\|}$ tem-se que $\|\eta\| = 1$. Fazendo $\tau = \|w - v\|$ segue-se que $\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)$. Logo, $w = v + \tau\eta$ para todo $v \in V$, $v \neq w$, ou seja, $w \in \bar{S}(v, \varepsilon)$.

Agora, seja $w \in V$ tal que $w = v + \tau\eta$, $v \in V$, $\eta \in \tilde{V}$, $\|\eta\| = 1$, $\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)$. Como $w = v + \tau\eta$ então $w - v = \tau\eta$; assim, $\|w - v\| = \|\tau\eta\| = |\tau| \cdot \|\eta\|$. Observe que $0 \leq \|w - v\| = |\tau| < \varepsilon$. Logo, $w \in S(v, \varepsilon)$. Portanto, as duas vizinhanças anteriores são equivalentes.

Definição 1.4 *Seja o funcional $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$. Sejam $v \in V$ e $\eta \in \tilde{V}$ dados, com $\|\eta\| = 1$, e suponha que para algum $\tau_0 > 0$ a função $f(v + \tau\eta)$, $|\tau| < \tau_0$, tenha derivada de ordem m contínua com relação à τ . Então a derivada direcional de ordem m de f em v na direção de η é:*

$$f^{(m)}(v; \eta) = \left. \frac{d^m f(v + \tau\eta)}{d\tau^m} \right|_{\tau=0}.$$

Definição 1.5 *Seja o funcional $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$ e suponha que para algum $\hat{v} \in V$, $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) = 0$, $\forall \eta \in \tilde{V}$, $\|\eta\| = 1$. Então f é estacionário em \hat{v} ou, equivalentemente, \hat{v} é um ponto estacionário de f .*

Teorema 1.1 *Seja o funcional $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$ e suponha que para algum $\hat{v} \in V$ a derivada direcional de primeira ordem $f^{(1)}(v; \eta)$ exista para todas as direções η . Se \hat{v} é um mínimo local de f então f é estacionário em \hat{v} .*

Demonstração:

De acordo com as hipóteses tem-se a seguinte expansão de Taylor para o funcional f numa

vizinhança de \hat{v} , $f(\hat{v} + \tau\eta) = f(\hat{v}) + \tau f^{(1)}(\hat{v}; \eta) + o(\tau)$, para alguma $\eta \in \tilde{V}$, $\|\eta\| = 1$, $\tau \in (-\varepsilon, \varepsilon)$ e $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau)}{|\tau|} = 0$. Assim, $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) = \frac{f(\hat{v} + \tau\eta) - f(\hat{v})}{\tau} - \frac{o(\tau)}{\tau}$. Note que $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau)}{\tau} = 0$, pois $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau)}{|\tau|} = 0$ e que $f(\hat{v} + \tau\eta) \geq f(\hat{v})$, pois \hat{v} é ponto de mínimo local. Logo, se $\tau > 0$ então $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \geq 0$, pois note que $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \geq -\frac{o(\tau)}{\tau}$ devido ao fato que $\frac{f(\hat{v} + \tau\eta) - f(\hat{v})}{\tau} \geq 0$. Assim, $\lim_{\tau \rightarrow 0} f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \geq -\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau)}{\tau}$, logo $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \geq 0$. Agora, se $\tau < 0$ então $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \leq 0$, pois note que $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \leq -\frac{o(\tau)}{\tau}$ já que $\frac{f(\hat{v} + \tau\eta) - f(\hat{v})}{\tau} \leq 0$. Assim, tem-se que $\lim_{\tau \rightarrow 0} f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \leq -\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau)}{\tau}$, logo $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) \leq 0$. Portanto, tem-se que $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) = 0$, ou seja, \hat{v} é um ponto estacionário de f . ■

Teorema 1.2 *Seja o funcional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$. Seja $\hat{v} \in V$ um ponto estacionário de f e suponha que $f^{(2)}(\hat{v}; \eta)$ exista para todas as direções η . Se \hat{v} é um mínimo local de f então $f^{(2)}(\hat{v}; \eta) \geq 0$ para todas as direções η .*

Demonstração:

Suponha, por absurdo, que $f^{(2)}(\hat{v}; \eta) < 0$. Dessa forma, numa vizinhança de \hat{v} para alguma $\eta \in \tilde{V}$, $\|\eta\| = 1$, tem-se a seguinte expansão de Taylor de f ,

$$f(\hat{v} + \tau\eta) = f(\hat{v}) + \tau f^{(1)}(\hat{v}, \eta) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{v}, \eta) + o(\tau^2),$$

sendo $\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{o(\tau^2)}{|\tau|} = 0$. Então, existe $\tau_0 > 0$, tal que, $\frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{v}, \eta) + o(\tau^2) < 0$ para $0 < \tau < \tau_0$.

Logo, em toda vizinhança $S(\hat{v}, \varepsilon)$ de \hat{v} tem-se um ponto $v = \hat{v} + \tau\eta$, tal que, $f(v) < f(\hat{v})$, pois como $\frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{v}, \eta) + o(\tau^2) < 0$ segue que $f(\hat{v} + \tau\eta) - f(\hat{v}) < 0$, ou seja, $f(\hat{v} + \tau\eta) < f(\hat{v})$, assim, $f(v) < f(\hat{v})$, o que contradiz o fato de \hat{v} ser mínimo local de f .

Portanto, $f^{(2)}(\hat{v}, \eta) \geq 0$. ■

Os teoremas 1.1 e 1.2 dão apenas condições necessárias para \hat{v} ser um mínimo local de f , condições suficientes serão obtidas no caso em que f é um funcional quadrático, conforme definição 1.6 a seguir.

Definição 1.6 *Um funcional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ é quadrático se satisfaz a seguinte identidade*

$$f(v + \tau\eta) = f(v) + \tau f^{(1)}(v; \eta) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(v; \eta) \quad (1.2)$$

$\forall v \in V, \forall \eta \in \tilde{V}, \|\eta\| = 1$ e $\forall \tau \in \mathbb{R}$.

Teorema 1.3 *Considere um funcional quadrático $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$. Então $\hat{v} \in V$ é o único mínimo global forte de f se:*

1. $f^{(1)}(\hat{v}, \eta) = 0, \forall \eta \in \tilde{V}, \|\eta\| = 1;$
2. $f^{(2)}(\hat{v}, \eta) > 0, \forall \eta \in \tilde{V}, \|\eta\| = 1.$

Demonstração:

Como f é quadrático segue que $f(\hat{v} + \tau\eta) = f(\hat{v}) + \tau f^{(1)}(\hat{v}; \eta) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{v}; \eta), \forall \hat{v} \in V, \forall \eta \in \tilde{V}, \|\eta\| = 1$ e $\forall \tau \in \mathbb{R}$. Por hipótese, $f^{(1)}(\hat{v}; \eta) = 0$, assim, $f(\hat{v} + \tau\eta) = f(\hat{v}) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{v}; \eta)$, isto é, $f(\hat{v} + \tau\eta) > f(\hat{v}), \forall \eta \in \tilde{V}, \forall \tau \in \mathbb{R}, \tau \neq 0$. Assim, $f(v) > f(\hat{v}), \forall v \in V, v \neq \hat{v}$, pois $V = \left\{ \hat{v} + \tau\eta \mid \tau \in \mathbb{R}, \eta \in \tilde{V}, \|\eta\| = 1 \right\}$. Logo, \hat{v} é um mínimo global forte de f .

Agora, suponha que \hat{w} seja um mínimo local de f . Então tem-se que $f^{(1)}(\hat{w}; \eta) = 0$ e $f^{(2)}(\hat{w}; \eta) \geq 0$. Como f é quadrático tem-se que $f(\hat{w} + \tau\eta) = f(\hat{w}) + \tau f^{(1)}(\hat{w}; \eta) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{w}; \eta)$, assim, segue que $f(\hat{w} + \tau\eta) = f(\hat{w}) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(\hat{w}; \eta)$, isto é, $f(\hat{w} + \tau\eta) \geq f(\hat{w})$. Logo, tem-se que $f(v) \geq f(\hat{w}), \forall v \in V, v \neq \hat{w}$, ou seja, \hat{w} é mínimo global de f . Mas observe que se \hat{w} for um mínimo global de f diferente de \hat{v} então segue que $f(\hat{w}) \leq f(\hat{v}) < f(\hat{w})$, o que seria um absurdo. Portanto, $\hat{w} = \hat{v}$ é o único mínimo global forte de f . ■

Lema 1.1 *Se $G : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua e se $\int_a^b G(x)\eta(x)dx = 0$ para toda função diferenciável $\eta : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que $\eta(a) = \eta(b) = 0$ então $G(x) = 0, \forall x \in (a, b)$.*

Demonstração:

Suponha, por absurdo, que $G(x') \neq 0$ para algum $x' \in (a, b)$. Sem perda de generalidade suponha que $G(x') > 0$. Pela continuidade de G , existe uma vizinhança de x' , digamos, $c \leq x' \leq d$ na qual $G(x) > 0, \forall x \in [c, d]$. Mas com isso a igualdade abaixo não se verifica para toda função diferenciável η

$$\int_a^b \eta(x)G(x)dx = 0.$$

Por exemplo, considerando-se a função

$$\eta(x) = \begin{cases} 0 & , a \leq x \leq c \\ (x - c)^2(x - d)^2 & , c < x < d \\ 0 & , d \leq x \leq b \end{cases}$$

obtem-se:

$$\int_a^b G(x)\eta(x)dx = \int_c^d (x - c)^2(x - d)^2 G(x)dx$$

e como $G(x) > 0$ para $c \leq x \leq d$ tem-se que

$$\int_a^b \eta(x)G(x)dx \neq 0.$$

O que contradiz a hipótese. O caso $G(x') < 0$ é análogo e assim o Lema está provado. ■

1.2 A equação de Euler-Lagrange para problemas unidimensionais

Será visto agora que resolver um dado problema de valor de contorno é equivalente a encontrar uma função pertencente ao espaço V , no qual o funcional está definido, que satisfaça a equação de Euler-Lagrange, que será definida a seguir. Seja $F(x, r, s)$ uma função real, com $a \leq x \leq b$ e r, s números reais quaisquer. Admita ainda que F possua derivadas parciais contínuas até 2ª ordem. Considere o seguinte problema de valor de contorno

$$V = \left\{ w \in C^2[a, b] : w(a) = \alpha; w(b) = \beta \right\} \text{ e } f(v) = \int_a^b F(x, v(x), v'(x)) dx, \quad v \in V, \quad (1.3)$$

sendo $C^2[a, b]$ o conjunto das funções $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ que possuem derivadas contínuas até 2ª ordem. Note que se $\alpha \neq 0$ ou $\beta \neq 0$ então o conjunto de funções admissíveis V não é um espaço linear. Por exemplo, se $\alpha \neq 0$, segue que

$$v, w \in V \implies (v + w)(a) = v(a) + w(a) = \alpha + \alpha = 2\alpha \neq \alpha, \text{ ou seja, } (v + w) \notin V.$$

Por outro lado, o conjunto \tilde{V} das funções teste definido por (1.1) é o espaço linear definido por $\tilde{V} = \left\{ \eta \in C^2[a, b] : \eta(a) = \eta(b) = 0 \right\}$. Valendo observar que no caso de condições de contorno homogêneas, isto é, $\alpha = \beta = 0$, tem-se que $V = \tilde{V}$.

Lembrando da Definição 1.4, as derivadas direcionais de f são obtidas pela diferenciação da função $f(v + \tau\eta) = \int_a^b F(x, v + \tau\eta, v' + \tau\eta') dx$ com relação a τ e tomando, em seguida, $\tau = 0$. Assim, derivando sob o sinal da integral e usando a Regra da Cadeia obtém-se

$$f^{(1)}(v; \eta) = \int_a^b \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v'} \eta' \right) dx. \quad (1.4)$$

Dessa forma, f é estacionário em algum $v \in V$ se, e somente se,

$$\int_a^b \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v'} \eta' \right) dx = 0, \quad \forall \eta \in \tilde{V}. \quad (1.5)$$

Observe que não foi usado o fato de $\|\eta\| = 1$, $\eta \in \tilde{V}$, ou seja, vale para toda $\eta \in \tilde{V}$, em particular, quando $\|\eta\| = 1$. Agora, com o objetivo de se eliminar η' da integral acima, usa-se integração por partes e o fato de que $\eta(a) = \eta(b) = 0$, $\forall \eta \in \tilde{V}$, de onde obtém-se que

$$\int_a^b \frac{\partial F}{\partial v'} \eta' dx = - \int_a^b \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) \eta dx.$$

Assim,

$$\int_a^b \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v'} \eta' \right) dx = \int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial v} \eta - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) \eta \right] dx = \int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) \right] \eta dx = 0.$$

Portanto, f é estacionário em $v \in V$ se, e somente se,

$$\int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) \right] \eta dx = 0, \quad \forall \eta \in \tilde{V}. \quad (1.6)$$

Pelo Lema 1.1 segue que f é estacionário em $v \in V$ se, e somente se,

$$\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) = 0, \quad \forall x \in (a, b) \quad (1.7)$$

que é a famosa equação de Euler-Lagrange para o problema de valor de contorno dado na Eq.(1.3), sendo esta uma equação diferencial parcial de segunda ordem para v . O problema de encontrar uma função $v \in V$ que satisfaça a equação de Euler-Lagrange dada na Eq.(1.7) e as condições de contorno $v(a) = \alpha$ e $v(b) = \beta$ é chamado de um problema de valor de contorno de dois pontos.

Então, resolver este problema de valor de contorno é equivalente a encontrar um ponto estacionário do funcional f dado na Eq.(1.3), ou seja, é equivalente a encontrar uma função $v \in V$ que satisfaça a Eq.(1.5). Esta é a formulação fraca (ou método variacional) do problema de valor de contorno de dois pontos.

Exemplo 1.1 Considere a seguinte equação diferencial $u_x(x) = q(x)$ onde $u(x) = -\lambda(x)P_x(x)$ (sendo que $u(x)$ é a velocidade de Darcy no caso escalar, ver seção 4.2 do Capítulo 4), com $P \in C^2[a, b]$, $\lambda \in C^1[a, b]$, $0 < \lambda_1 \leq \lambda(x) \leq \lambda_2$, $|q(x)| \leq T$, $T \geq 0$, para todo $x \in [a, b]$, sendo $u_x = \frac{du}{dx}$, $P_x(x) = \frac{dP}{dx}$, etc. Dessa forma, a formulação fraca para a equação $u_x(x) = q(x)$ é dada por:

$$\int_a^b \frac{d}{dx} \left(-\lambda(x)P_x(x) \right) \varphi(x) dx = \int_a^b q(x) \varphi(x) dx$$

onde $\varphi \in \tilde{V}$, sendo $\tilde{V} = \left\{ \varphi \in C^2[a, b] : \varphi(a) = \varphi(b) = 0 \right\}$.

Agora, usando integração por partes e sabendo $\varphi(a) = \varphi(b) = 0$ obtém-se:

$$\int_a^b \frac{d}{dx} \left(-\lambda(x)P_x(x) \right) \cdot \varphi(x) dx = \int_a^b \lambda(x)P_x(x) \varphi_x(x) dx.$$

Logo, $\int_a^b \lambda(x)P_x(x) \varphi_x(x) dx = \int_a^b q(x) \varphi(x) dx$.

Defina o funcional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ como sendo $f(P) = \int_a^b \left[\frac{1}{2} \lambda(x) P_x^2(x) - q(x) P(x) \right] dx$.

Dessa forma, tem-se o seguinte problema de valor de contorno:

$$V = \left\{ P \in C^2[a, b] : P(a) = P(b) = 0 \right\} \quad e \quad f(P) = \int_a^b \left[\frac{1}{2} \lambda(x) P_x^2(x) - q(x) P(x) \right] dx. \quad (1.8)$$

Com o objetivo de escrever a equação de Euler-Lagrange note que são válidas as igualdades:

$$\frac{dF}{dP} = -q(x), \quad \frac{dF}{dP_x} = \lambda(x)P_x(x) \quad e \quad \frac{d}{dx} \left(\frac{dF}{dP_x} \right) = \lambda_x(x)P_x(x) + \lambda(x)P_{xx}(x),$$

sendo que a função F é dada por $F(x, P, P_x) = \frac{1}{2}\lambda(x)P_x^2(x) - q(x)P(x)$.

Assim, a equação de Euler-Lagrange (ver Eq.(1.7)) é dada por:

$$\lambda(x)P_{xx}(x) + \lambda_x(x)P_x(x) + q(x) = 0, \quad \text{para todo } x \in (a, b). \quad (1.9)$$

Observe que o funcional definido acima é quadrático. De fato, para qualquer $P \in V$ e para todo $\tau \in \mathbb{R}$, $\varphi \in \tilde{V}$ tal que $\|\varphi\| = 1$ tem-se que

$$\begin{aligned} f(P + \tau\varphi) &= \int_a^b \left[\frac{1}{2}\lambda(x) \left(P_x(x) + \tau\varphi_x(x) \right)^2 - q(x) \left(P(x) + \tau\varphi(x) \right) \right] dx \\ &= \int_a^b \left[\frac{1}{2}\lambda(x) \left(P_x^2(x) + 2P_x(x)\tau\varphi_x(x) + \tau^2\varphi_x^2(x) \right) - q(x)P(x) - \tau q(x)\varphi(x) \right] dx \\ &= \int_a^b \left[\frac{1}{2}\lambda(x)P_x^2(x) - q(x)P(x) \right] dx + \tau \int_a^b \left[\lambda(x)P_x(x)\varphi_x(x) - q(x)\varphi(x) \right] dx \\ &\quad + \frac{\tau^2}{2} \int_a^b \lambda(x)\varphi_x^2(x) dx \\ &= f(P) + \tau f^{(1)}(P; \varphi) + \frac{\tau^2}{2} f^{(2)}(P; \varphi), \end{aligned}$$

sendo $f^{(1)}(P; \varphi) = \int_a^b \left[\frac{1}{2}\lambda(x)P_x(x)\varphi_x(x) - q(x)\varphi(x) \right] dx$, $f^{(2)}(P; \varphi) = \int_a^b \lambda(x)\varphi_x^2(x) dx$ e ainda que $f^{(m)}(P; \varphi) = 0$ para todo $m \geq 3$. Logo, o funcional f é quadrático. Supondo que a equação de Euler-Lagrange dada pela Eq.(1.9) tenha \hat{P} como solução e notando que $f^{(2)}(\hat{P}; \varphi) > 0$ para toda direção $\varphi \in \tilde{V}$ tal que $\|\varphi\| = 1$ conclui-se, pelo Teorema 1.3, que o funcional dado no problema de valor de contorno (1.8) possui um único mínimo global forte, isto é, o problema de valor de contorno possui uma única solução.

Observação 1.1 O exemplo acima tem como objetivo mostrar que achar o mínimo de um certo funcional é equivalente a encontrar uma função que satisfaça a equação de Euler-Lagrange associada a este funcional. Neste caso, a velocidade de Darcy (caso escalar) foi dada por $u(x) = -\lambda(x)P_x(x)$, tendo como hipótese que $\lambda \in C^1[a, b]$, o que não acontece no processo físico real, uma vez que λ depende da permeabilidade do meio, que, em geral, não é representada por uma função contínua. Dessa forma, para se resolver o problema real esta hipótese deve ser enfraquecida.

1.3 Condições de contorno naturais e essenciais

Observe que na escolha do espaço das funções admissíveis para o funcional f dado na Eq.(1.3) foi exigido que toda função $v \in V$ satisfizesse as condições de contorno $v(a) = \alpha$ e $v(b) = \beta$. Isto sugere que todo ponto estacionário do funcional f satisfaça estas condições.

A questão que surge agora é a seguinte: se não for imposta nenhuma condição de contorno nas funções admissíveis, qual será a condição de contorno que um ponto estacionário irá satisfazer?

Para responder a esta questão considere o funcional $f(v) = \int_a^b F(x, v(x), v'(x))dx$, com $v \in V$ onde $V = C^2[a, b]$; o espaço das funções teste agora é $\tilde{V} = C^2[a, b]$. Isto não garante que $\eta(a) = \eta(b) = 0, \forall \eta \in \tilde{V}$. Retornando à Eq.(1.6) e integrando por partes, encontra-se a seguinte condição para um ponto estacionário de f

$$\int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) \right] \eta dx + \left[\frac{\partial F}{\partial v'} \eta \right]_a^b = 0, \forall \eta \in \tilde{V}. \quad (1.10)$$

Suponha que a Eq.(1.10) seja satisfeita por alguma função admissível \hat{v} e, já que a Eq.(1.10) se verifica para toda função $\eta \in C^2[a, b]$, segue que a Eq.(1.10) deve ser verificada, em particular, para o subconjunto de $C^2[a, b]$ que satisfaz $\eta(a) = \eta(b) = 0$. Mas, pelo Lema 1.1, isto implica que

$$\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial v'} \right) = 0, \forall x \in (a, b) \quad (1.11)$$

e assim, a Eq.(1.10) é reduzida a

$$\left[\frac{\partial F}{\partial v'} \eta \right]_a^b = 0, \forall \eta \in \tilde{V}, \quad (1.12)$$

o que implica que

$$\frac{\partial F}{\partial v'} = 0 \text{ para } x = a \text{ e } x = b. \quad (1.13)$$

De fato, seja $\frac{\partial F}{\partial v'} \eta(b) - \frac{\partial F}{\partial v'} \eta(a) = \delta, \forall \eta \in \tilde{V}$. Tomando $\eta(b) = \frac{\partial F}{\partial v'}(b)$ e $\eta(a) = -\frac{\partial F}{\partial v'}(a)$, ou seja, $\eta(x)$ é a reta passando pelos pontos $(a, \eta(a))$ e $(b, \eta(b))$, segue-se que

$$\delta = \left[\frac{\partial F}{\partial v'}(b) \right]^2 + \left[\frac{\partial F}{\partial v'}(a) \right]^2.$$

Portanto, se $\frac{\partial F}{\partial v'}(b) \neq 0$ ou $\frac{\partial F}{\partial v'}(a) \neq 0$ segue que $\delta > 0$, o que é uma contradição.

Logo, $\frac{\partial F}{\partial v'}(a) = \frac{\partial F}{\partial v'}(b) = 0, \forall \eta \in \tilde{V}$.

Assim, um ponto estacionário de f deve satisfazer, além da equação de Euler-Lagrange, a condição de contorno dada na Eq.(1.12).

Dessa forma, as condições de contorno que não são impostas nas funções admissíveis são

chamadas de condições de contorno naturais. Em contraste, as condições $v(a) = \alpha$ e $v(b) = \beta$, com α e β sendo números reais dados, são chamadas condições de contorno essenciais. Assim, é conveniente organizar as várias condições de contorno na tabela abaixo, à qual fornece as condições de contorno natural e essencial associadas ao funcional $f(v) = \int_a^b F(x, v(x), v'(x))dx$.

condição de contorno essencial	condição de contorno em η	condição de contorno natural
$v(a) = \alpha$	$\eta(a) = 0$	$\left. \frac{\partial F}{\partial v'} \right _{x=a} = 0$
$v(b) = \beta$	$\eta(b) = 0$	$\left. \frac{\partial F}{\partial v'} \right _{x=b} = 0$

Tabela 1: condições de contorno associadas ao funcional f .

Se uma condição de contorno essencial é imposta nas funções admissíveis então as funções teste devem satisfazer a condição de contorno correspondente mostrada na segunda coluna da Tabela 1 acima. Observe que se alguma condição de contorno essencial não é imposta nas funções admissíveis, então um ponto estacionário deve satisfazer a condição de contorno natural correspondente. Por exemplo, se apenas a primeira condição de contorno essencial é imposta, então segue que:

$$V = \left\{ v \in C^2[a, b] : v(a) = \alpha \right\} \quad \text{e} \quad \tilde{V} = \left\{ \eta \in C^2[a, b] : \eta(a) = 0 \right\}$$

e $\left[\frac{\partial F}{\partial v'} \eta \right]_a^b = 0$, $\forall \eta \in \tilde{V}$, o que implica que $\eta(b) \left[\frac{\partial F}{\partial v'} \right]_{x=b} = 0$, $\forall \eta \in \tilde{V}$. Dessa forma, como existem $\eta \in C^2[a, b]$ tais que $\eta(b) \neq 0$, conclui-se que $\left[\frac{\partial F}{\partial v'} \right]_{x=b} = 0$.

Assim, $\left[\frac{\partial F}{\partial v'} \right]_{x=b} = 0$ é a condição de contorno natural correspondente à condição de contorno essencial omitida.

1.4 Equação de Euler-Lagrange e problemas de valores de contorno de segunda ordem

Nesta seção, a análise feita nas seções anteriores será estendida para espaços de duas variáveis. Para isso considere as seguintes notações:

$x, y \rightsquigarrow$ variáveis do espaço;

$\Omega \rightsquigarrow$ domínio de definição do problema em \mathbb{R}^2 ;

$\Gamma \rightsquigarrow$ fronteira de Ω ;

$v_1, v_2 \rightsquigarrow$ direções ortogonais com relação aos eixos x e y , respectivamente, da normal exterior a Γ ;

$\int_{\Gamma} v ds \rightsquigarrow$ integral de linha de v no sentido anti-horário.

O domínio de definição Ω é um aberto, limitado, simplesmente conexo e sua fronteira Γ é suave; exceto, possivelmente, em um número finito de pontos. Defini-se $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ e denota-se por $C^k(\bar{\Omega})$ o conjunto de todas as funções com derivadas parciais contínuas em $\bar{\Omega}$ de ordem menor do que ou igual a k . Serão úteis também as seguintes identidades de Gauss:

$$\iint_{\Omega} w v_x dx dy = \int_{\Gamma} v_1 w v ds - \iint_{\Omega} w_x v dx dy \quad (1.14)$$

$$\iint_{\Omega} w v_y dx dy = \int_{\Gamma} v_2 w v ds - \iint_{\Omega} w_y v dx dy \quad (1.15)$$

as quais expressam integração por partes de funções $v, w : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ com relação às variáveis x e y .

Os funcionais aqui considerados são do tipo $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, sendo V algum conjunto de funções reais definidas em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. As definições e teoremas da seção 1.1 continuam sendo válidos para o caso de um espaço de duas variáveis. A norma, neste caso, será definida por:

$$\|v\| = \left[\iint_{\Omega} v(x, y)^2 dx dy \right]^{\frac{1}{2}}.$$

O caso bidimensional análogo ao da Eq.(1.3) é dado por

$$V = \left\{ v \in C^2(\bar{\Omega}) : v = \alpha \text{ em } \Gamma \right\} \text{ e } f(v) = \iint_{\Omega} F(x, y, v, v_x, v_y) dx dy, \quad v \in V, \quad (1.16)$$

onde $\alpha = \alpha(x, y)$ uma função contínua em Γ e a função $F(x, y, r, s, t)$ possui derivadas parciais contínuas de ordem menor do que ou igual a 2 para todo ponto $(x, y) \in \bar{\Omega}$, com r, s e t sendo números reais quaisquer.

O espaço das funções teste agora é $\tilde{V} = \dot{V}$ onde

$$\dot{V} = \left\{ \eta \in C^2(\bar{\Omega}) : \eta = 0 \text{ em } \Gamma \right\}. \quad (1.17)$$

Com o objetivo de encontrar a equação de Euler-Lagrange, calcule a derivada direcional de primeira ordem do funcional f , isto é, $f^{(1)}(v, \eta) = \left. \frac{df(v + \tau\eta)}{d\tau} \right|_{\tau=0}$, sendo o funcional f dado da seguinte forma

$$f(v + \tau\eta) = \iint_{\Omega} F(x, y, v + \tau\eta, v_x + \tau\eta_x, v_y + \tau\eta_y) dx dy.$$

Assim,

$$f^{(1)}(v, \eta) = \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta_x + \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta_y \right) dx dy.$$

Portanto, a condição para v ser um ponto estacionário de f é

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta_x + \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta_y \right) dx dy = 0, \quad \forall \eta \in \dot{V}. \quad (1.18)$$

Com o objetivo de eliminar η_x e η_y da integral acima, calcule as seguintes integrais

$$i) \iint_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta_x dx dy \quad \text{e} \quad ii) \iint_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta_y dx dy.$$

Caso i): tomando $w = \frac{\partial F}{\partial v_x}$, $v = \eta$ e fazendo uso da identidade (1.14) obtém-se

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta_x dx dy = \int_{\Gamma} v_1 \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta ds - \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial v_x} \right) \eta dx dy. \quad (1.19)$$

Caso ii): tomando $w = \frac{\partial F}{\partial v_y}$, $v = \eta$ e fazendo uso da identidade (1.15) obtém-se

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta_y dx dy = \int_{\Gamma} v_2 \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta ds - \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \eta dx dy. \quad (1.20)$$

Logo, a partir de (1.19) e (1.20), segue que

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial F}{\partial v} \eta + \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta_x + \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta_y \right) dx dy &= \iint_{\Omega} \frac{\partial F}{\partial v} \eta dx dy + \int_{\Gamma} v_1 \frac{\partial F}{\partial v_x} \eta ds - \\ &\quad \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial v_x} \right) \eta dx dy + \int_{\Gamma} v_2 \frac{\partial F}{\partial v_y} \eta ds - \\ &\quad \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \eta dx dy = 0, \quad \forall \eta \in \dot{V}. \end{aligned}$$

Assim,

$$\iint_{\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial v_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \right] \eta dx dy + \int_{\Gamma} \left(v_1 \frac{\partial F}{\partial v_x} + v_2 \frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \eta ds = 0, \quad \forall \eta \in \dot{V}. \quad (1.21)$$

Mas, como η se anula na fronteira Γ de Ω , segue que

$$\iint_{\Omega} \left[\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial v_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \right] \eta dx dy = 0, \quad \forall \eta \in \dot{V}.$$

Ou seja,

$$\frac{\partial F}{\partial v} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial v_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial v_y} \right) = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (1.22)$$

que é chamada de equação de Euler-Lagrange para problemas de valor de contorno de segunda ordem.

A condição de contorno $u = \alpha$ é uma condição de contorno essencial para o problema. Para encontrar a condição de contorno natural, remove-se a condição de contorno essencial, ou seja,

toma-se $V = \tilde{V} = C^2(\bar{\Omega})$. E, dessa forma, um ponto estacionário deve satisfazer a Eq.(1.21) para a nova escolha do espaço \tilde{V} , mas como $\dot{V} \subset \tilde{V}$, sendo \dot{V} dado em (1.17), conclui-se que a equação de Euler-Lagrange dada na Eq.(1.22) continua sendo válida. Dessa forma,

$$\int_{\Gamma} \left(v_1 \frac{\partial F}{\partial v_x} + v_2 \frac{\partial F}{\partial v_y} \right) \eta dx dy = 0, \quad \forall \eta \in C^2(\bar{\Omega}),$$

o que fornece a seguinte condição de contorno natural $v_1 \frac{\partial F}{\partial v_x} + v_2 \frac{\partial F}{\partial v_y} = 0$, em Γ .

1.5 Formulação fraca para problemas de valor de contorno - parte II

A análise feita nas seções precedentes estabeleceu que o problema de encontrar um ponto estacionário de um funcional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ é equivalente ao de resolver um problema de valor de contorno consistindo da equação de Euler-Lagrange associada a este funcional e certas condições de contorno. Se o funcional possui derivada de ordem até m , então a ordem da equação de Euler-Lagrange é, em geral, $2m$, e por isso exige-se que as funções de V seja um subconjunto de $C^{2m}[a, b]$ ou $C^{2m}(\bar{\Omega})$. Nesta seção será introduzida a idéia de completamento, no qual o conjunto de funções admissíveis V é ampliado para um chamado espaço de Sobolev. A matemática envolvida é a matemática presente nos espaços de Hilbert, por isso serão recordadas algumas propriedades destes espaços usando o espaço $L^2[a, b]$ como modelo. Vale ressaltar que o processo de completamento é de fundamental importância para o método de elementos finitos.

Definição 1.7 *Um espaço normado X é um espaço vetorial munido de uma norma $\|\cdot\|$, denotado por $(X, \|\cdot\|)$.*

Definição 1.8 *Seja $(X, \|\cdot\|)$ um espaço normado. Uma sequência $\{v_n\}_{n=1}^{\infty} \subset X$ é dita ser de Cauchy se $\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\| = 0$.*

Definição 1.9 *Um espaço normado X é dito ser completo se e, somente se, toda sequência de Cauchy em X converge e converge em X .*

Definição 1.10 *Um espaço normado completo $(X, \|\cdot\|)$ é um espaço de Banach.*

Seja $X = C[a, b]$ o espaço vetorial formado por todas as funções reais contínuas em $[a, b]$, este é um espaço normado com relação à norma definida por

$$\|x\|_2 = \left[\int_a^b x(t)^2 dt \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.23)$$

O espaço vetorial $X = C[a, b]$ não é completo com relação à norma dada na Eq.(1.23). De fato, suponha que $a = 0$ e $b = 1$ e considere a sequência de funções $f_n \in C[a, b]$ ($n \geq 2$) dada por:

$$f_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq x \leq 1/2 - 1/n \\ -nx/2 + (n+2)/4 & \text{se } 1/2 - 1/n \leq x \leq 1/2 + 1/n \\ 0 & \text{se } 1/2 + 1/n \leq x \leq 1. \end{cases}$$

Note que (f_n) é uma sequência de Cauchy segundo a norma dada na Eq.(1.23). Veja o que ocorre com $\|f_{n+1} - f_n\|_2$ quando $n \rightarrow \infty$. Suponha que existe uma função $f \in C[a, b]$ tal que se tenha $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_2 = 0$. Note que, neste caso, tem-se

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^{\frac{1}{2}} |f(t) + f_n(t)|^2 dt \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^{\frac{1}{2} - \frac{1}{n}} |f(t) - 1|^2 dt + \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\frac{1}{2} - \frac{1}{n}}^{\frac{1}{2}} |f(t) + f_n(t)|^2 dt \\ &= \int_0^{\frac{1}{2}} |f(t) - 1|^2 dt \end{aligned}$$

pois,

$$0 \leq \int_{\frac{1}{2} - \frac{1}{n}}^{\frac{1}{2}} |f(t) - f_n(t)|^2 dt \leq \frac{1}{n} \left[1 + \sup_{t \in [0, 1/2]} |f(t)| \right]^2 \rightarrow 0.$$

Logo, $f \equiv 1$ em $[0, 1/2]$. Analogamente, mostra-se que $f \equiv 0$ em $[0, 1]$. Ou seja, a função f não é contínua em $[0, 1]$ e isto significa que existe uma sequência de Cauchy em $C[0, 1]$ que não converge em $C[0, 1]$, isto é, o espaço $C[0, 1]$ não é completo com relação à norma dada na Eq.(1.23). Mas sabe-se da Análise Funcional que todo espaço normado admite um completamento (ver [19], Teorema do Completamento, p.69). Assim, o espaço normado $(C[a, b], \|\cdot\|_2)$ admite um completamento o qual é denotado por $L^2[a, b]$.

De maneira geral, para qualquer número real fixo $p \geq 1$, o espaço de Banach $L^p[a, b]$ é o completamento do espaço normado que consiste em todas as funções reais contínuas em $[a, b]$ cuja norma é definida por $\|f\|_p = \left[\int_a^b |f(t)|^p dt \right]^{\frac{1}{p}}$. O subscrito p é importante no sentido de que esta norma depende da escolha de p , o qual é mantido fixo.

Vale ressaltar que o espaço $L^p[a, b]$ também pode ser obtido de um modo direto pelo uso da integral de Lebesgue e funções Lebesgue mensuráveis em $[a, b]$ tais que a integral de Lebesgue de $|f|^p$ sobre $[a, b]$ existe e é finita. Os elementos de $L^p[a, b]$ são classes de equivalência dessas funções, sendo que f é equivalente a g se a integral de Lebesgue de $|f - g|^p$ sobre $[a, b]$ é zero.

Retornando ao caso considerado como modelo, isto é, ao espaço $L^2[a, b]$, tem-se que $L^2[a, b]$ é o conjunto de todas as funções reais integráveis $v(x)$, $-\infty < a \leq x \leq b < +\infty$, tais que, $\int_a^b v^2 dx < +\infty$. Lembrando que a integral aqui é a de Lebesgue; valendo ressaltar também que se uma função é integrável no sentido de Riemann então esta também é integrável no sentido de Lebesgue e as duas integrais têm o mesmo valor. Sempre a $L^2[a, b]$ estarão associados, respectivamente, o produto interno e a norma associada a este produto interno dados abaixo

por

$$\langle v, w \rangle = \int_a^b v w dx, \quad v, w \in L^2[a, b]; \quad (1.24)$$

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle}, \quad v \in L^2[a, b]. \quad (1.25)$$

Será visto agora que uma sequência pertencente a $L^2[a, b]$ que converge para um elemento do próprio $L^2[a, b]$ é uma sequência de Cauchy. Suponha que alguma sequência $\{v_n\}_{n=1}^\infty \subset L^2[a, b]$ converge para $v \in L^2[a, b]$.

Assim, usando a seguinte propriedade de norma, $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$, $\forall v, w \in L^2[a, b]$, segue que $\|v_m - v_n\| = \|v_m - v + v - v_n\| \leq \|v_m - v\| + \|v - v_n\|$, aplicando o limite com $m, n \rightarrow \infty$ segue que

$$\lim_{m, n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\| \leq \lim_{m \rightarrow \infty} \|v_m - v\| + \lim_{n \rightarrow \infty} \|v - v_n\| = 0,$$

ou seja, $\lim_{m, n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\| \leq 0$ o que implica que $\lim_{m, n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\| = 0$.

Logo, $\{v_n\}_{n=1}^\infty \subset L^2[a, b]$ é uma sequência de Cauchy.

Cabe ressaltar que uma propriedade fundamental de $L^2[a, b]$ é que a recíproca é válida, isto é, se $\{v_n\}_{n=1}^\infty \subset L^2[a, b]$ é uma sequência de Cauchy então existe uma única $v \in L^2[a, b]$ tal que $\{v_n\}_{n=1}^\infty$ converge para v .

Em virtude destas propriedades conclui-se que o espaço $L^2[a, b]$ é completo com relação à norma dada na Eq.(1.25), ou seja, toda sequência em $L^2[a, b]$ é de Cauchy e converge para um único elemento de $L^2[a, b]$. Assim, como esta norma provém de um produto interno, dado na Eq.(1.24), tem-se que o espaço $L^2[a, b]$ é um espaço de Hilbert.

Na teoria sobre integral de Lebesgue, o conceito de comprimento de um intervalo é generalizado para o conceito de medida de um conjunto arbitrário de pontos. Certos conjuntos de pontos são tão esparsos que eles têm medida nula. Por exemplo, qualquer conjunto enumerável de pontos tem medida nula (já certos conjuntos não-enumeráveis podem ou não ter medida nula). Se uma função em $L^2[a, b]$ possui uma certa propriedade em todos os pontos de $[a, b]$, exceto possivelmente em um conjunto de medida nula, então é dito que esta função possui a propriedade em “quase todos os pontos” de $[a, b]$, abreviadamente “q.t.p”. Uma propriedade importante da integral de Lebesgue é que se $\int_a^b v(x)^2 dx = 0$ então $v(x) = 0$ em “q.t.p”. Assim, duas funções na mesma classe de equivalência são iguais em “q.t.p”. Se dada alguma função $v \in L^2[a, b]$, determina-se uma nova função w (pela mudança de valores de v em um conjunto de medida nula) que pertencerá à mesma classe de equivalência de v . Assim, por exemplo, se \mathbb{Q} e \mathbb{I} são os conjuntos dos números racionais e irracionais, respectivamente, de $[a, b]$, então as funções

$$v(x) = 1, \quad a \leq x \leq b \quad \text{e} \quad w(x) = \begin{cases} x^2, & \text{se } x \in \mathbb{Q} \\ 1, & \text{se } x \in \mathbb{I} \end{cases}$$

pertencem à mesma classe de equivalência, pois \mathbb{Q} é enumerável e tem medida nula. Claramente, toda classe de equivalência contém funções que são descontínuas em um número infinito de pontos. Para evitar o uso repetitivo da expressão “q.t.p.”, para descrever uma classe de

equivalência, adota-se a convenção de representar uma classe de equivalência por uma função particular da classe, selecionando para este propósito uma função pertencente a $C[a, b]$. Para informações mais detalhadas sobre a integral de Lebesgue consultar [8], [16] e [25].

1.6 Ampliação do conjunto das funções admissíveis

Considere agora um problema de valor de contorno que pode ser representado por um funcional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, sendo V algum conjunto de funções reais definidas em $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ que, por exemplo, se anulam na fronteira de Ω . Suponha que o funcional f em questão possa ser escrito da seguinte forma $f(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - G(v)$, para todo $v \in V$, sendo $G : V \rightarrow \mathbb{R}$ um funcional linear, isto é, para quaisquer $v, w \in V$ e quaisquer $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ vale

$$G(\alpha v + \beta w) = \alpha G(v) + \beta G(w).$$

E que $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ seja uma forma bilinear, isto é, para quaisquer $v, w, z \in V$ e para quaisquer $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ vale

$$a(\alpha v + \beta w, z) = \alpha a(v, z) + \beta a(w, z) \quad \text{e} \quad a(z, \alpha v + \beta w) = \alpha a(z, v) + \beta a(z, w).$$

Além disso, se $a(v, w) = a(w, v)$, para quaisquer $v, w \in V$, diz-se que a é uma forma bilinear simétrica.

Usando a linearidade de G , tem-se que $G(v + \eta) = G(v) + G(\eta)$ e o fato de a ser uma forma bilinear tem-se que $a(v + \eta, v + \eta) = a(v, v) + 2a(v, \eta) + a(\eta, \eta)$, assim, obtém-se a seguinte identidade

$$f(v + \eta) = f(v) + \left[a(v, \eta) - G(\eta) \right] + \frac{1}{2}a(\eta, \eta), \quad \forall v, \eta \in V. \quad (1.26)$$

Com o objetivo de calcular as derivadas direcionais de f substitua η por $\tau\eta$, com $\|\eta\| = 1$ e $\tau \in \mathbb{R}$, obtendo

$$f(v + \tau\eta) = f(v) + \tau \left[a(v, \eta) - G(\eta) \right] + \frac{\tau^2}{2}a(\eta, \eta)$$

e pela Definição 1.4 segue que

$$f^{(1)}(v; \eta) = a(v, \eta) - G(\eta); \quad f^{(2)}(v; \eta) = a(\eta, \eta); \quad f^{(m)}(v; \eta) = 0, \quad m = 3, 4, \dots$$

Sabe-se que se $v \in V$ é um ponto estacionário de f então $f^{(1)}(v; \eta) = 0$, $\forall \eta \in V$, $\|\eta\| = 1$, ou seja,

$$a(v, \eta) = G(\eta), \quad \forall \eta \in V, \quad (1.27)$$

o que vai fornecer a equação de Euler-Lagrange associada ao funcional f que representa o problema de valor de contorno citado no início desta seção. Se a Eq.(1.27) possui uma única solução \hat{v} tem-se que a Eq.(1.27) é válida para $v = \hat{v}$ e se, ainda, $f^{(2)}(v; \eta) = a(\eta, \eta) > 0$, para qualquer $\eta \in V$, $\eta \neq 0$, segue-se que $\min_{v \in V} f(v) = f(\hat{v})$.

Será visto abaixo um exemplo no qual surge a necessidade de se incluir novas funções no domínio de definição de um dado funcional f , devido à necessidade de se ter (ou manter) determinadas características destas funções que constituem o domínio de definição do funcional em questão.

Exemplo 1.2 *Considere o seguinte problema de valor de contorno*

$$f(v) = \int_a^b \left[\frac{1}{2}p(x)(v')^2 + \frac{1}{2}q(x)v^2 - g(x)v \right] dx \quad e \quad V = \{v \in C^1[a, b] : v(a) = v(b) = 0\}, \quad (1.28)$$

sendo $p \in C^1[a, b]$, $q, g \in C[a, b]$ e $0 < p_0 \leq p(x) \leq p_1$ e $0 \leq q(x) \leq q_1$ para $x \in [a, b]$, $p_0, p_1, q_1 \in \mathbb{R}$. O correspondente conjunto de funções teste é $\tilde{V} = V$. O funcional f pode ser escrito da seguinte maneira

$$f(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - G(v), \quad \forall v \in V$$

sendo que

$$a(v, w) = \int_a^b [p(x)v'w' + q(x)vw] dx, \quad v, w \in V \quad e \quad G(v) = \int_a^b g(x)v dx, \quad v \in V$$

definem, respectivamente, uma forma bilinear simétrica e um funcional linear. Assim, o funcional f pode ser reescrito da seguinte maneira

$$f(v + \eta) = f(v) + [a(v, \eta) - G(\eta)] + \frac{1}{2}a(\eta, \eta), \quad v, \eta \in V \quad (1.29)$$

o que fornece

$$f^{(1)}(v; \eta) = a(v, \eta) - G(\eta); \quad f^{(2)}(v; \eta) = a(\eta, \eta); \quad f^{(m)}(v; \eta) = 0, \quad m = 3, 4, \dots$$

Assim, $v \in V$ é um ponto estacionário de f se, e somente se, $a(v, \eta) = G(\eta)$, $\forall \eta \in V$. Usando integração por partes pode-se reescrever a forma bilinear a da seguinte maneira

$$a(v, \eta) = \int_a^b [\mathcal{L}(v)]\eta dx, \quad v, \eta \in V \quad \text{sendo} \quad \mathcal{L}(v) = -[p(x)v']' + q(x)v, \quad \forall v \in V.$$

Pode-se mostrar que $a(v, \eta) = G(\eta)$, $\forall \eta \in V$ se, e somente se, $\mathcal{L}(v) = g$.

Portanto, $v \in V$ é um ponto estacionário de f se, e somente se, v satisfaz $\mathcal{L}(v) = g$, que é a equação de Euler-Lagrange para o problema de valor de contorno (1.28). Mas note que a expressão $a(v, \eta)$ pode não fazer sentido a não ser que v tenha derivada de 2ª ordem contínua, isto é, a equação de Euler-Lagrange pode não ter solução e, assim, o problema de valor de contorno (1.28) não possui solução. Para maiores detalhes ver [6], pp. 105-107.

Visto o exemplo 1.2 percebe-se a necessidade de se usar o processo de completamento descrito na seção 1.5, que é essencialmente uma expansão do conjunto V , domínio de definição do

funcional f , para um conjunto “maior”, denotado por \bar{V} , a fim de se resolver problemas desta natureza.

Vale ressaltar que uma forma bilinear define em V um produto interno e, conseqüentemente, uma norma associada, dados respectivamente por

$$\langle v, w \rangle_{\mathcal{E}} = a(v, w), \quad v, w \in V \quad (1.30)$$

$$\|v\|_{\mathcal{E}} = \left[\langle v, v \rangle_{\mathcal{E}} \right]^{\frac{1}{2}} = \left[a(v, v) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad v \in V \quad (1.31)$$

sendo chamados produto interno energia, denotado por $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}$, e norma energia, denotada por $\|\cdot\|_{\mathcal{E}}$. Estes nomes estão relacionados ao fato de que em muitas aplicações o funcional f expressa a energia de alguns sistemas físicos.

O espaço V não é completo com relação à norma energia, mas como todo espaço normado admite um completamento (ver [19], Teorema do Completamento, p. 69) segue que o espaço normado $(V, \|\cdot\|_{\mathcal{E}})$ admite um completamento o qual é denotado por \bar{V} , sendo que $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}$ e $\|v\|_{\mathcal{E}}$ estão bem definidos para todo $v \in \bar{V}$. Vale observar que quando completa-se o espaço V , obtendo o espaço \bar{V} , as condições de contorno impostas a V , isto é, condições de contorno essenciais, são levadas para o espaço \bar{V} , o que não se pode afirmar para as condições de contorno naturais.

Agora, considere o funcional quadrático $f : \bar{V} \rightarrow \mathbb{R}$, no qual o espaço V foi substituído pelo seu completamento \bar{V} . Dessa forma, tem-se que a Eq.(1.29) se torna:

$$f(v + \eta) = f(v) + \left[a(v, \eta) - G(\eta) \right] + \frac{1}{2}a(\eta, \eta), \quad \forall v, \eta \in \bar{V}. \quad (1.32)$$

Mas, supondo que a solução \hat{v} do problema variacional $a(\hat{v}, \eta) = G(\eta)$, $\forall \eta \in V$, pertença ao espaço V segue que $a(\hat{v}, \eta) = G(\eta)$, $\forall \eta \in \bar{V}$. Assim, \hat{v} resolve o problema de encontrar uma função $v \in \bar{V}$ que satisfaça:

$$a(v, \eta) = G(\eta), \quad \forall \eta \in \bar{V}. \quad (1.33)$$

Além disso, se $f^{(2)}(v; \eta) = a(\eta, \eta) > 0$ para qualquer $\eta \in \bar{V}$, $\eta \neq 0$ segue do Teorema 1.3 que:

$$\min_{v \in \bar{V}} f(v) = \min_{v \in V} f(v) = f(\hat{v}).$$

Portanto, pode-se concluir que a solução do problema variacional $a(\hat{v}, \eta) = G(\eta)$, para qualquer $\eta \in \bar{V}$ é única.

Será visto no Capítulo 2 seguinte que uma outra maneira de se resolver problemas variacionais (ou problemas de valor de contorno), sem resolver a equação de Euler-Lagrange associada, é fazendo uso do importante Lema de Lax-Milgram.

Capítulo 2

Introdução aos espaços de Sobolev e ao método dos elementos finitos

2.1 Espaço de Sobolev - unidimensional

Nesta e na seção seguinte será apresentado um estudo introdutório sobre os espaços de Sobolev. Inicialmente será tratado os espaços de Sobolev em espaços unidimensionais. Para isso, considere

$$\langle v, w \rangle_1 = \sum_{i=0}^1 \langle v^{(i)}, w^{(i)} \rangle = \int_a^b (vw + v'w') dx, \quad v, w \in V \quad (2.1)$$

$$\|v\|_1 = \left[\langle v, v \rangle_1 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\int_a^b [v^2 + (v')^2] dx \right]^{\frac{1}{2}} \quad v \in V \quad (2.2)$$

sendo $V = \{v \in C^2[a, b]; v(a) = v(b) = 0\}$.

Pode-se mostrar que as expressões (2.1) e (2.2) definem, respectivamente, um produto interno e uma norma em V , chamados de produto interno e norma de Sobolev de ordem 1.

A norma de Sobolev definida em (2.2) e a norma energia definida em (1.31) são equivalentes no sentido de que existem constantes $\rho, \beta > 0$, tais que:

$$\rho \|v\|_1^2 \leq \|v\|_{\mathcal{E}}^2 \leq \beta \|v\|_1^2, \quad \forall v \in V. \quad (2.3)$$

Até este ponto foi visto como completar V com relação à norma energia, conduzindo para um espaço de Hilbert \bar{V} . Seja agora \tilde{V} o espaço obtido pelo completamento de V com relação à norma de Sobolev de ordem 1, sendo que para obter \tilde{V} deve-se considerar sequências de Cauchy $\{v_n\}_{n=1}^{\infty} \subset V$, isto é, sequências tais que $\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\|_1 = 0$.

Dessa forma, tem-se, pela definição da norma de Sobolev, que $\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\|_1 = 0$ implica que $\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\| = 0$. Mas como $L^2[a, b]$ é completo, em relação à norma $\|\cdot\|$, tem-se que existe $v \in L^2[a, b]$, tal que, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|v - v_n\| = 0$. Assim, o espaço \tilde{V} é por definição o conjunto formado por todas as funções $v \in L^2[a, b]$, tais que, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|v - v_n\| = 0$, onde

$\{v_n\}_{n=1}^{\infty} \subset V$ é uma sequência de Cauchy com relação à norma de Sobolev de ordem 1. Assim, $\tilde{V} = \bar{V}$ se, e somente se, para toda sequência $\{v_n\}_{n=1}^{\infty} \subset V$ é verdade que:

$$\lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\|_1 = 0 \Leftrightarrow \lim_{m,n \rightarrow \infty} \|v_m - v_n\|_{\mathcal{L}} = 0. \quad (2.4)$$

Mas como as normas $\|\cdot\|_1$ e $\|\cdot\|_{\mathcal{L}}$ são equivalentes tem-se que (2.4) é válida e, assim, conclui-se que $\tilde{V} = \bar{V}$, valendo ressaltar que o produto interno e a norma de Sobolev estão definidos em todo \bar{V} .

Será introduzido agora uma variedade de espaços de Sobolev dos quais \bar{V} é um caso especial. Para qualquer inteiro k não-negativo seja $C^k(a, b)$ o conjunto das funções definidas em $a < x < b$ com derivadas contínuas de ordem menor do que ou igual a k .

Sejam

$$\tilde{C}^k(a, b) = \left\{ v \in C^k(a, b) : \int_a^b [v^{(i)}]^2 dx < \infty, i = 0, 1, \dots, k \right\}$$

$$\langle v, w \rangle_k = \sum_{i=0}^k \langle v^{(i)}, w^{(i)} \rangle = \int_a^b [vw + v'w' + \dots + v^{(k)}w^{(k)}] dx, \quad v, w \in \tilde{C}^k(a, b)$$

$$\|v\|_k = \langle v, v \rangle_k^{\frac{1}{2}} = \left\{ \int_a^b [(v)^2 + (v')^2 + (v'')^2 + \dots + (v^{(k)})^2] dx \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad v \in \tilde{C}^k(a, b).$$

Dessa forma, $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$ e $\|\cdot\|_k$ definidos acima são, respectivamente, o produto interno e a norma de Sobolev de ordem k . Assim, como já foi visto, o espaço normado $(\tilde{C}^k(a, b), \|\cdot\|_k)$ admite um completamento, produzindo um espaço “maior” que será denotado por $H^k(a, b)$, o qual é chamado de espaço de Sobolev. Ressaltando que o processo de completamento permite estender o domínio de definição do produto interno e da norma de Sobolev de $\tilde{C}^k(a, b)$ para $H^k(a, b)$.

2.2 Espaço de Sobolev - n-dimensional

Seja Ω uma região aberta e limitada de \mathbb{R}^n . Denota-se por $L^2(\Omega)$ o conjunto de todas as funções v definidas na região Ω com a seguinte propriedade:

$$\int_{\Omega} v^2 d\Omega < \infty$$

sendo a integral no sentido de Lebesgue. O conjunto $L^2(\Omega)$ é um espaço de Hilbert com relação ao produto interno e a norma, respectivamente, definidos abaixo:

$$\langle v, w \rangle = \int_{\Omega} v w d\Omega$$

$$\|v\| = \left[\int_{\Omega} v^2 d\Omega \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Se a fronteira de Ω possui medida nula não há uma distinção essencial entre $L^2(\Omega)$ e $L^2(\overline{\Omega})$ e, em particular, entre $L^2(a, b)$ e $L^2[a, b]$. Dessa forma, trabalha-se preferencialmente com Ω ao invés de $\overline{\Omega}$, devido ao fato de que espaços de Sobolev são tradicionalmente definidos em regiões abertas. Ocasionalmente, por conveniência, emprega-se a seguinte notação para derivadas parciais de uma função $v(x_1, x_2, \dots, x_n)$:

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) ; |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i ; D^\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}} ; v^{(\alpha)} = D^\alpha v$$

sendo $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ inteiros não-negativos, α um índice múltiplo, $v^{(\alpha)}$ e $D^\alpha v$ notações de índices múltiplos para uma derivada parcial de ordem $|\alpha|$.

Seja

$$\tilde{C}^k(\Omega) = \left\{ v \in C^k(\Omega) : \int_{\Omega} [v^{(\alpha)}]^2 d\Omega < \infty, \quad 0 \leq |\alpha| \leq k \right\}.$$

O produto interno de Sobolev em $\tilde{C}^k(\Omega)$ é dado por

$$\langle v, w \rangle_k = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq k} \langle v^{(\alpha)}, w^{(\alpha)} \rangle \quad (2.5)$$

sendo o somatório tomado sobre todo α , tal que, $0 \leq |\alpha| \leq k$. A correspondente norma de Sobolev é dada por

$$\|v\|_k = \left[\sum_{0 \leq |\alpha| \leq k} \|v^{(\alpha)}\|^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.6)$$

As Eqs.(2.5) e (2.6) definem os chamados produto interno de Sobolev e a norma de Sobolev, respectivamente, de ordem k . Por exemplo, no caso de um espaço bidimensional tem-se que

$$\|v\|_2^2 = \int_{\Omega} \left[v^2 + v_x^2 + v_y^2 + v_{xx}^2 + v_{xy}^2 + v_{yy}^2 \right] d\Omega.$$

O espaço de Sobolev $H^k(\Omega)$ é o complemento de $\tilde{C}^k(\Omega)$ com relação à norma de Sobolev de ordem k definida na Eq.(2.6). A função $v \equiv v_\alpha$, quando $|\alpha| = 0$ é, por definição, uma função de $H^k(\Omega)$ e cada uma das funções v_α , com $0 < |\alpha| \leq k$ é sua derivada parcial generalizada. Dessa forma, a derivada parcial generalizada de v_α será denotada por $v^{(\alpha)}$. Com esta convenção $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$ e $\|\cdot\|_k$, definidos por (2.5) e (2.6), respectivamente, estão bem definidos para todos $v, w \in H^k(\Omega)$. Além disto, $H^k(\Omega)$ é um espaço de Hilbert com relação a este produto interno e a esta norma.

Assim, para citação posterior, defini-se $H^1(\Omega)$, onde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, como sendo o complemento do espaço

$$\tilde{C}^1(\Omega) = \left\{ v \in C^1(\Omega) : \int_{\Omega} [v^{(\alpha)}]^2 d\Omega < \infty, \quad 0 \leq |\alpha| \leq 1 \right\}$$

com relação à norma de Sobolev de ordem 1 dada por

$$\|v\|_1 = \left[\sum_{0 \leq |\alpha| \leq 1} \|v^{(\alpha)}\|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

sendo o somatório tomado sobre todo α , tal que, $0 \leq |\alpha| \leq 1$. Neste caso, em particular, os valores de α são $\alpha' = (0, 0)$, $\alpha'' = (1, 0)$, $\alpha''' = (0, 1)$, com $|\alpha'| = 0$, $|\alpha''| = 1$ e $|\alpha'''| = 1$.

Para mais informações sobre espaços de Sobolev ver [2], [7], [15] e [20].

2.3 O Lema de Lax-Milgram

Considere V um espaço de Hilbert arbitrário com relação ao produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$ e norma $\|\cdot\|_V = \langle \cdot, \cdot \rangle_V^{\frac{1}{2}}$ definidos sobre V e, ainda, $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ um funcional o qual pode ser escrito da seguinte maneira $f(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - G(v)$, para todo $v \in V$. O lema de Lax-Milgram lida com funcionais desta forma, mas em um nível abstrato.

Dessa forma, considere $a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ e $G : V \rightarrow \mathbb{R}$ aplicações com as seguintes propriedades:

1. $a(\alpha z + \beta v, w) = \alpha a(z, w) + \beta a(v, w)$, $\forall z, v, w \in V$ e $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$;
2. $a(w, \alpha z + \beta v) = \alpha a(w, z) + \beta a(w, v)$, $\forall z, v, w \in V$ e $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$;
3. Existe $\beta \in \mathbb{R}$, tal que, $|a(z, v)| \leq \beta \|z\|_V \|v\|_V$, $\forall z, v, w \in V$;
4. Existe $\rho \in \mathbb{R}$, $\rho > 0$, tal que, $a(z, z) \geq \rho \|z\|_V^2$, $\forall z, v, w \in V$;
5. $G(\alpha z + \beta v) = \alpha G(z) + \beta G(v)$, $\forall z, v \in V$ e $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$;
6. Existe $\delta \in \mathbb{R}$, tal que, $|G(z)| \leq \delta \|z\|_V$, $\forall z \in V$.

Dos itens (1) e (2) tem-se que $a(\cdot, \cdot)$ é uma forma bilinear, do item (3) tem-se que $a(\cdot, \cdot)$ é limitada e pelo item (4) tem-se que $a(\cdot, \cdot)$ é coerciva. E, ainda, se $a(z, v) = a(v, z)$ para todos $z, v \in V$ diz-se que $a(\cdot, \cdot)$ é simétrica. Note que, pelo item (6), G é um funcional linear limitado em V .

Lema 2.1 (*Lema de Lax-Milgram*): *Se valem os itens (1) – (6) acima então existe um único elemento $\hat{v} \in V$, tal que:*

$$a(\hat{v}, v) = G(v) \quad \text{para todo } v \in V. \quad (2.7)$$

Além disso, se $a(\cdot, \cdot)$ é simétrica então \hat{v} é o único mínimo global do funcional

$$f(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - G(v) \quad \text{para todo } v \in V. \quad (2.8)$$

Demonstração: ver [6] p.119.

Teorema 2.1 Seja $W = \{v \in C^1[a, b] : v(a) = 0\}$, então para todo $v \in W$, tem-se

$$\langle v', v' \rangle \geq \frac{2\langle v, v \rangle}{(b-a)^2}.$$

Demonstração:

Note que:

$$v(x) - v(a) = \int_a^x v'(t) dt \implies v(x) = \int_a^x v'(t) dt$$

assim, fazendo uso da desigualdade de Cauchy-Schwarz $|\langle v, z \rangle| \leq \|v\| \cdot \|z\|$, para todo $v, z \in W$,

e do produto interno dado por $\langle v, z \rangle = \left[\int_a^x vz dt \right]^{\frac{1}{2}}$ segue que

$$\begin{aligned} v(x)^2 &= \left[\int_a^x v'(t) dt \right]^2 \\ &\leq \int_a^x dt \int_a^x v'(t)^2 dt \\ &\leq (x-a) \int_a^x v'(t)^2 dt \\ &\leq (x-a) \int_a^b v'(t)^2 dt. \end{aligned}$$

Integrando obtém-se

$$\begin{aligned} \int_a^b v(x)^2 dx &\leq \int_a^b (x-a) dx \int_a^b v'(t)^2 dt \\ \langle v, v \rangle &\leq \frac{1}{2} (b-a)^2 \langle v', v' \rangle \\ \langle v', v' \rangle &\geq \frac{2\langle v, v \rangle}{(b-a)^2} \end{aligned}$$

e o teorema está provado. ■

O teorema acima será útil no exemplo 2.1 abaixo para provar que a forma bilinear $a(., .)$ em questão é coerciva.

Exemplo 2.1 No exemplo 1.1 tome $V = H^1(a, b)$ com a norma $\|\cdot\|_{H^1}$ juntamente com as demais hipóteses e considere o funcional dado neste exemplo

$$f(P) = \int_a^b \left[\frac{1}{2} \lambda(x) P_x^2(x) - q(x) P(x) \right] dx.$$

Observe que este funcional pode ser escrito da seguinte maneira $f(P) = \frac{1}{2} a(P, P) - G(P)$ sendo que

$$a(P, \varphi) = \int_a^b \lambda(x) P_x(x) \varphi_x(x) dx \quad e \quad G(\varphi) = \int_a^b q(x) \varphi(x) dx$$

sendo fácil ver que $a(.,.)$ é uma forma bilinear e simétrica e que $G(.)$ é um funcional linear. Assim,

$$\begin{aligned} |a(P, \varphi)| &= \left| \int_a^b \lambda(x) P_x(x) \varphi_x(x) dx \right| \\ &\leq \int_a^b |\lambda_2| \cdot |P_x(x)| \cdot |\varphi_x(x)| dx \\ &\leq \lambda_2 \sqrt{\int_a^b |P_x(x)|^2 dx} \cdot \sqrt{\int_a^b |\varphi_x(x)|^2 dx} \\ &\leq \lambda_2 \|P\|_{H^1} \cdot \|\varphi\|_{H^1}. \end{aligned}$$

isto é, a forma bilinear simétrica a é limitada. Agora, usando o Teorema 2.1 dado acima, veja que a forma bilinear a é coerciva:

$$\begin{aligned} a(P, P) &= \int_a^b \lambda(x) P_x^2 dx \\ &\geq \lambda_1 \int_a^b P_x^2 dx \\ &= \lambda_1 \int_a^b P_x P_x dx \\ &= \frac{\lambda_1}{2} \int_a^b P_x P_x dx + \frac{\lambda_1}{2} \int_a^b P_x P_x dx \\ &= \frac{\lambda_1}{2} \|P_x\|^2 + \frac{\lambda_1}{2} \langle P_x, P_x \rangle \\ &\geq \frac{\lambda_1}{2} \|P_x\|^2 + \frac{\lambda_1}{(b-a)^2} \langle P, P \rangle \\ &\geq \Upsilon (\|P_x\|^2 + \|P\|^2) \\ &= \Upsilon \|P\|_{H^1}^2, \end{aligned}$$

$$\text{com } \Upsilon = \min \left\{ \frac{\lambda_1}{2}, \frac{\lambda_1}{(b-a)^2} \right\} > 0.$$

Ainda, observe que:

$$|G(\varphi)| = \left| \int_a^b q(x) \varphi(x) dx \right| \leq T \int_a^b |\varphi(x)| dx \leq T \int_a^b |\varphi(x)|^2 dx \leq T \|\varphi\|_{H^1}^2$$

ou seja, o funcional linear $G(.)$ é limitado.

Logo, pelo Lema de Lax-Milgram 2.1 tem-se que o funcional f possui um único mínimo global \hat{v} , isto é, \hat{v} é único tal que $a(\hat{v}, v) = G(v)$ para todo $v \in V = H^1(a, b)$.

Observação 2.1 Com base nas considerações feitas na observação (2.1) nota-se também que quando se considera a velocidade de Darcy este caminho não é o ideal para resolver o problema posto no exemplo acima.

Logo, devido à equivalência entre obter uma solução aproximada para a equação elíptica (considerando a equação que fornece a velocidade de Darcy) e o de minimizar um certo funcional

pode-se seguir por dois caminhos, equação de Euler-Lagrange ou Lema de Lax-Milgram, mas nota-se, pelos exemplos (1.1) e (2.1), que quando se considera a velocidade de Darcy estes caminhos não são os ideais. Dessa forma, no Capítulo 4, tal aproximação será obtida pelo método dos elementos finitos mistos e híbridos.

2.4 O método de Ritz

Nesta seção, será descrito o método de Ritz que consiste em encontrar uma solução aproximada de um problema de valor de contorno. Assuma que o lema de Lax-Milgram seja satisfeito, ou seja, a forma bilinear $a(.,.)$ satisfaz as condições do lema 2.1, $G(.)$ é um funcional linear limitado e ambos definidos em um espaço de Hilbert V tal que a solução do problema de valor de contorno, associado ao funcional f definido por $a(.,.)$ e $G(.)$, seja $\hat{v} \in V$ cuja existência é assegurada pelo lema de Lax-Milgram. Dessa forma, este elemento \hat{v} satisfaz as condições

$$a(\hat{v}, v) = G(v) \quad \forall v \in V \quad (2.9)$$

$$\min_{v \in V} f(v) = f(\hat{v}) \quad (2.10)$$

sendo

$$f(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - G(v) \quad v \in V. \quad (2.11)$$

Todo método utilizado para obter uma solução aproximada de um problema de valor de contorno requer algum tipo de discretização. No caso do método de Ritz, supondo a validade do Lema de Lax-Milgram, isto é feito tomando um subespaço N -dimensional de V . Já que V_N é um espaço de Hilbert então as condições dadas no item (1) até o item (6) do lema de Lax-Milgram são obviamente satisfeitas quando substitui-se V por V_N . Isto conduz imediatamente ao seguinte teorema.

Teorema 2.2 *Considere que as condições (1) até (6) do lema de Lax-Milgram sejam satisfeitas e seja V_N um subespaço N -dimensional de V . Então existe um único elemento $\hat{v}_N \in V_N$ tal que*

$$a(\hat{v}_N, v) = G(v), \quad \forall v \in V_N. \quad (2.12)$$

Além disso, se $a(.,.)$ for simétrica, então

$$\min_{v \in V_N} f(v) = f(\hat{v}_N) \quad (2.13)$$

sendo f dado por (2.11).

O Teorema 2.2 não especifica um procedimento para encontrar \hat{v}_N , mas pode-se facilmente explorar o fato de V_N ter dimensão finita para obter um procedimento. Assim, admita que $a(.,.)$ seja simétrica e seja $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ uma base para V_N , ou seja, qualquer conjunto de N funções

linearmente independentes em V_N . Assim, todo $v \in V_N$ possui uma única expansão da forma

$$v = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i \quad (2.14)$$

com $\alpha_1, \dots, \alpha_N \in \mathbb{R}$. Substituindo (2.14) em (2.11) e usando a bilinearidade de $a(.,.)$ e o fato de $G(.)$ ser linear obtém-se que

$$\begin{aligned} f(v) &= \frac{1}{2} a \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i, \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i \right) - G \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i \right) \\ f(v) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j a(\phi_i, \phi_j) - \sum_{i=1}^N \alpha_i G(\phi_i) \end{aligned}$$

e assim

$$f(v) = \frac{1}{2} \alpha^T H \alpha - \alpha^T G = F(\alpha) \quad (2.15)$$

com

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_N \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} G(\phi_1) \\ G(\phi_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ G(\phi_N) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad H = \begin{bmatrix} a(\phi_1, \phi_1) & a(\phi_2, \phi_1) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_1) \\ a(\phi_1, \phi_2) & a(\phi_2, \phi_2) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_2) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a(\phi_1, \phi_N) & a(\phi_2, \phi_N) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_N) \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

A simetria de $a(.,.)$ implica que a matriz H dada em (2.16) é simétrica. Além disso, o fato de $a(.,.)$ ser coerciva implica que $\alpha^T H \alpha = a(v, v) \geq \rho \|v\|_V^2 \geq 0$ para algum $\rho \geq 0$ independente de v . Observe que $\alpha^T H \alpha = 0$ se, e somente se, $\alpha = \mathbf{0}$ (vetor nulo) o que prova o seguinte teorema.

Teorema 2.3 *Se a forma bilinear $a(.,.)$ é simétrica e coerciva então a matriz H dada em (2.16) é definida positiva.*

Considere o funcional $F(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^T H \alpha - \alpha^T G$, com $\alpha \in \mathbb{R}^n$, dado na Eq.(2.15) e note que o gradiente e a matriz hessiana deste funcional são, respectivamente, dados por $\nabla f(\alpha) = H\alpha - G$ e $H(\alpha) = H$. Observe que um funcional quadrático possui matriz hessiana constante. Vale ressaltar que uma outra definição de ponto estacionário de um funcional é a seguinte:

Definição 2.1 *Seja $f \in C^1(X)$. O funcional f é estacionário em $\hat{\mathbf{x}}$ se o gradiente de f em $\hat{\mathbf{x}}$ se anula, isto é, $\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) = 0$.*

Teorema 2.4 *Seja $f \in C^2(X)$ e seja f estacionário em $\hat{\mathbf{x}} \in X$. Se a matriz hessiana $H(\hat{\mathbf{x}})$ é definida positiva então $\hat{\mathbf{x}}$ é um mínimo local forte de f .*

Demonstração: ver [6] p. 04.

Note que o funcional F definido sobre \mathbb{R}^n dado por (2.15) é quadrático e que $H\alpha = G$, isto é, pela Definição 2.1 tem-se que α é um ponto estacionário de F . Assim, como a matriz H dada na Eq.(2.16) é definida positiva conclui-se, pelo Teorema 2.4, que α é um mínimo local forte de F . Logo, $\min_{v \in V_N} f(v) = \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} F(\alpha)$.

O mínimo \hat{v}_N de f sobre V_N é relacionado a este α pela Eq.(2.14). Assim, segue abaixo o método Ritz para encontrar a solução \hat{v}_N :

1. Escolha uma base $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ para V_N ;
2. Construa H e G definidos em (2.16);
3. Encontre $\alpha \in \mathbb{R}^n$ que minimiza F na Eq.(2.15) ou, de forma equivalente, que satisfaça $H\alpha = G$;
4. Obtenha $\hat{v}_N = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i$.

Este é o método Ritz para encontrar \hat{v}_N .

2.5 O método de Galerkin

Suponha agora que a forma bilinear $a(.,.)$ não seja necessariamente simétrica, mas que as condições dadas nos itens (1)-(6) do lema de Lax-Milgram sejam ainda satisfeitas. Pode-se então usar (2.12) para derivar um procedimento para encontrar \hat{v}_N . Se $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ é uma base para V_N e se $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$ são únicos tais que

$$\hat{v}_N = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i \quad (2.17)$$

então (2.12) implica que

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j a(\phi_j, v) = G(v), \quad \forall v \in V_N. \quad (2.18)$$

Em particular, tomando $v = \phi_i$, com $i = 1, 2, \dots, N$ obtém-se

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j a(\phi_j, \phi_i) = G(\phi_i), \quad i = 1, 2, \dots, N$$

ou

$$H\alpha = G \quad (2.19)$$

sendo

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_N \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} G(\phi_1) \\ G(\phi_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ G(\phi_N) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad H = \begin{bmatrix} a(\phi_1, \phi_1) & a(\phi_2, \phi_1) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_1) \\ a(\phi_1, \phi_2) & a(\phi_2, \phi_2) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_2) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a(\phi_1, \phi_N) & a(\phi_2, \phi_N) & \cdot & \cdot & \cdot & a(\phi_N, \phi_N) \end{bmatrix}.$$

Pode-se mostrar que a independência linear da base de funções $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ e a coercividade de $a(\cdot, \cdot)$ implicam que H é não-singular ($\det(H) \neq 0$). Assim, pode-se resolver (2.19) para obter α e então determinar \hat{v}_n por (2.17).

Este é o chamado método de Galerkin para encontrar \hat{v}_N , sendo este, obviamente, idêntico ao método Ritz quando $a(\cdot, \cdot)$ é simétrica. Vale ressaltar que a matriz H é simétrica se a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ é simétrica. Se a forma bilinear $a(\cdot, \cdot)$ não é simétrica este fato dificulta a obtenção da solução numérica do sistema $H\alpha = G$ e, conseqüentemente, a obtenção da solução \hat{v}_N .

Observação 2.2 Vale ressaltar que, como foi citado acima, todo método utilizado para obter uma solução aproximada de um problema de valor de contorno requer algum tipo de discretização, sendo assim, no caso mais simples, isto é, no caso escalar, uma das bases de funções utilizadas nesta discretização é composta por funções lineares por partes do tipo dado a seguir:

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{h_{i-1}} & \text{se } x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ \frac{x_{i+1} - x}{h_i} & \text{se } x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ 0 & \text{se } a \leq x < x_{i-1}, \quad x_{i+1} < x \leq b, \end{cases}$$

onde foi considerada uma malha de elementos finitos sobre o intervalo $[a, b]$ constituída pelos pontos $a = x_1 < x_2 < \dots < x_M = b$ e pelos elementos $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 1, 2, \dots, M - 1$, com $h_i = x_{i+1} - x_i$, $x_0 = x_1$ e $x_{M+1} = x_M$. Tais funções são também chamadas de funções “chapéu” (para mais detalhes ver [6], p.215), que são ilustradas na Fig.(2.1) abaixo:

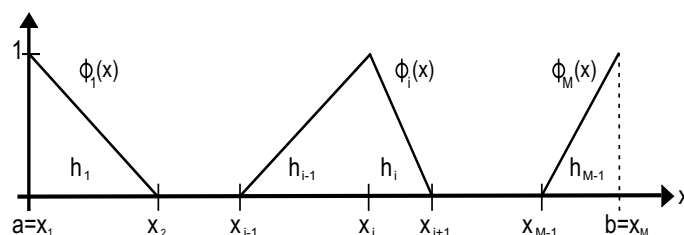


Figura 2.1: Base de funções contínuas lineares por partes.

Cabe salientar que ambos os métodos descritos acima podem ser usados para resolver o problema de valor de contorno dado no Exemplo 1.1, levando-se em consideração as suposições feitas neste exemplo, já que a forma bilinear $a(.,.)$ e o funcional linear $G(.)$ deste exemplo satisfazem as condições do Lema de Lax-Milgram, como mostrado no Exemplo 2.1. Note que a forma bilinear $a(.,.)$ é simétrica o que implica que os métodos de Ritz e de Galerkin coincidem.

Sabendo-se da existência do mínimo de um dado funcional f , seja pela resolução da equação de Euler-Lagrange ou pela aplicação direta do lema de Lax-Milgram, pode-se encontrar este mínimo por meio do método dos Gradientes Conjugados como será visto a seguir.

2.6 O método dos gradientes conjugados

O método dos Gradientes Conjugados é um método iterativo desenvolvido para resolver sistemas de equações lineares do tipo

$$A\mathbf{p} = b, \quad (2.20)$$

sendo A uma matriz simétrica e definida positiva, isto é,

$$A^T = A \text{ e } \mathbf{p}^T A \mathbf{p} > 0, \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{p} \neq \mathbf{0} \text{ (vetor nulo)}. \quad (2.21)$$

Encontrar a solução \mathbf{p} do sistema (2.20) é equivalente a obter o valor de \mathbf{p} que minimiza a função quadrática

$$F(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T A \mathbf{p} - b^T \mathbf{p}, \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n, \quad (2.22)$$

isto é, p^* é solução do sistema linear $A\mathbf{p} = b$ se, e somente se, p^* é ponto de mínimo da função quadrática $F(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T A \mathbf{p} - b^T \mathbf{p}$ para todo $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, sendo n a ordem da matriz A . Ressaltando que na teoria desenvolvida no Capítulo 1, foram dadas todas as condições para existência e unicidade de tal mínimo.

Definição 2.2 *Sejam \mathbf{p} e \mathbf{P} vetores do \mathbb{R}^n . O produto interno canônico entre \mathbf{p} e \mathbf{P} é definido por $\langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle = \mathbf{P}^T \mathbf{p}$.*

Note que no espaço vetorial \mathbb{R}^n é válido que $\langle \mathbf{P}, \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p}^T \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \mathbf{p} = \langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle$.

Definição 2.3 *Seja A uma matriz quadrada de ordem n , simétrica e definida positiva. Sejam \mathbf{p} e \mathbf{P} vetores do \mathbb{R}^n . A seguinte operação define um produto interno em \mathbb{R}^n : $\langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle_A = \mathbf{P}^T A \mathbf{p}$.*

Note pela simetria da matriz A , conforme a Definição 2.3, que $\langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle_A = \langle \mathbf{P}, \mathbf{p} \rangle_A$ ou, equivalentemente, $\langle A\mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle = \langle \mathbf{p}, A\mathbf{P} \rangle$.

Definição 2.4 *Diz-se que \mathbf{P} e \mathbf{p} , em \mathbb{R}^n , são A -conjugados se $\langle \mathbf{p}, \mathbf{P} \rangle_A = 0$.*

Seja um sistema linear $A\mathbf{p} = b$, sendo A uma matriz de ordem n , simétrica e definida positiva; o método dos gradientes conjugados consiste em obter aproximações, $\mathbf{p}^{(k+1)}$, para a

solução do sistema linear, denotada por \mathbf{p}^* , partindo de um vetor inicial $\mathbf{p}^{(0)}$ e seguindo os passos:

i) $r^{(0)} = b - A\mathbf{p}^{(0)}$ (resíduo inicial); $d^{(0)} = r^{(0)}$ (direção inicial);

ii) $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$;

iii) $r^{(k+1)} = b - A\mathbf{p}^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}$;

iv) $d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k d^{(k)}$ onde o escalar α_k minimiza o funcional quadrático F na direção $d^{(k)}$, ou seja, α_k é ponto de mínimo da função $g(\alpha) = F(\mathbf{p}^{(k)} + \alpha d^{(k)})$, logo $\mathbf{p}^{(k+1)}$ é o ponto de mínimo de F na direção $d^{(k+1)}$; a nova direção, $d^{(k+1)}$, depende do parâmetro β_k , que é escolhido de modo que esta direção e a anterior sejam A -conjugadas, ou seja,

v) $\langle d^{(k)}, d^{(k+1)} \rangle_A = 0$.

Com algumas manipulações algébricas chega-se a $\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A}$. Por indução finita, pode-se mostrar que $\langle r^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A = \langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A$, utilizando-se os itens *i* e *iv* anteriores. Assim,

vi) $\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A}$. Dos itens (iii), (iv), (v) e (vi) segue que $\beta_k = \langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle - \frac{\langle r^{k+1}, r^k \rangle}{\langle r^k, r^k \rangle}$.

Por indução finita, pode-se mostrar que $\langle r^{k+1}, r^k \rangle = 0$, utilizando-se (i), (iii), (iv), (v) e (vi) anteriores. Portanto,

vii) $\beta_k = \frac{\langle r^{k+1}, r^{k+1} \rangle}{\langle r^k, r^k \rangle}$.

O lema apresentado a seguir (sem demonstração) garantirá a convergência do método dos gradientes conjugados em n passos.

Lema 2.2 *O conjunto $\{r^{(0)}, r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(k)}\}$ é ortogonal, ou seja, $\langle r^{(i)}, r^{(j)} \rangle = 0$, se $i \neq j$; o conjunto $\{d^{(0)}, d^{(1)}, d^{(2)}, \dots, d^{(k)}\}$ é A -ortogonal, ou seja, $\langle d^{(i)}, d^{(j)} \rangle_A = 0$, se $i \neq j$; para todos os valores inteiros de i e j variando de 0 a k .*

Agora é fácil ver que $r^{(n)} = \mathbf{0}$ (vetor nulo), pois caso contrário $\{r^{(0)}, r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(n-1)}, r^{(n)}\}$ seria um conjunto ortogonal de vetores não-nulos em \mathbb{R}^n e, portanto, linearmente independentes. Assim, o conjunto gerado por estes vetores, $[r^{(0)}, r^{(1)}, r^{(2)}, \dots, r^{(n-1)}, r^{(n)}] \subset \mathbb{R}^n$, teria dimensão $n + 1$, o que seria um absurdo, já que $\dim \mathbb{R}^n = n$.

2.7 Pré-condicionamento de matriz

A técnica de pré-condicionamento utiliza o seguinte procedimento. Dada uma matriz G invertível, os sistemas lineares $A\mathbf{p} = b$ e $G^{-1}A(G^{-1})^T G^T \mathbf{p} = G^{-1}b$ são equivalentes. Tome $C = G^{-1}A(G^{-1})^T$. Se A for simétrica e definida positiva, então C também terá estas mesmas propriedades.

Agora sejam $y = G^T \mathbf{p}$ e $B = G^{-1}b$. Aplicando-se o método dos gradientes conjugados ao sistema $Cy = B$, obtém-se:

$$\text{i')} \quad R^{(0)} = B - Cy^{(0)} \text{ (resíduo inicial); } D^{(0)} = R^{(0)} \text{ (direção inicial);}$$

$$\text{ii')} \quad y^{(k+1)} = y^{(k)} + \alpha_k D^{(k)};$$

$$\text{iii')} \quad R^{(k+1)} = R^{(k)} - \alpha_k CD^{(k)};$$

$$\text{iv')} \quad D^{(k+1)} = R^{(k+1)} + \beta_k D^{(k)};$$

$$\text{v')} \quad \langle D^{(k)}, D^{(k+1)} \rangle_C = 0;$$

$$\text{vi')} \quad \alpha_k = \frac{\langle R^{(k)}, R^{(k)} \rangle_C}{\langle D^{(k)}, D^{(k)} \rangle_C};$$

$$\text{vii')} \quad \beta_k = \frac{\langle R^{(k+1)}, R^{(k+1)} \rangle_C}{\langle R^{(k)}, R^{(k)} \rangle_C}$$

Utilizando as definições da matriz C e dos vetores B e y e lembrando que $r^{(k)} = b - A\mathbf{p}^{(k)}$ conclui-se que $R^{(k)} = B - Cy^{(k)} = G^{-1}y^{(k)}$.

Sejam $z^{(k)} = (GG^T)^{-1} r^{(k)}$ e $D^{(k)} = G^T d^{(k)}$. Note que são válidas as implicações:
 $D^{(0)} = R^{(0)} \implies G^T d^{(0)} = G^{-1}r^{(0)} \implies d^{(0)} = (G^T)^{-1} G^{-1}r^{(0)} = (GG^T)^{-1} r^{(0)} = z^{(0)}$. Assim,

$$\text{vi'')} \quad \alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, z^{(k)} \rangle_A}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A};$$

$$\text{vii'')} \quad \beta_k = \frac{\langle r^{(k+1)}, z^{(k+1)} \rangle_A}{\langle r^{(k)}, z^{(k)} \rangle_A}.$$

Desta forma, obtém-se o seguinte algoritmo:

$$\text{A1)} \quad k = 0; \quad r^{(0)} = b - A\mathbf{p}^{(0)};$$

$$\text{A2)} \quad \text{enquanto } r^{(k)} \neq 0, \text{ resolve } (GG^T) z^{(k)} = r^{(k)};$$

$$\text{A3)} \quad k = k + 1; \text{ se } k = 1, d^{(1)} = z^{(0)} \text{ senão } \beta_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, z^{(k-1)} \rangle}{\langle r^{(k-2)}, z^{(k-2)} \rangle} \text{ e } d^{(k)} = z^{(k-1)} + \beta_k d^{(k-1)};$$

$$\text{A4)} \quad \alpha_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, z^{(k-1)} \rangle}{\langle Ad^{(k)}, d^{(k)} \rangle}, \mathbf{p}^{(k)} = \mathbf{p}^{(k-1)} + \alpha_k d^{(k)}, r^{(k)} = r^{(k-1)} - \alpha_k A\mathbf{p}^{(k)}; \text{ fim};$$

$$\text{A5)} \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}^{(k)}.$$

2.8 O pré-condicionamento de Cholesky

Se uma matriz A de ordem n é simétrica e definida positiva, então existe uma única matriz triangular inferior \tilde{H} de ordem n , com diagonal positiva, tal que $A = \tilde{H}\tilde{H}^T$ (fatoração de Cholesky, veja [22]). Obtido o fator \tilde{H} , o sistema linear $A\mathbf{p} = b$ é decomposto em dois sistemas triangulares: $\tilde{H}y = b$ (triangular inferior) e $\tilde{H}^T\mathbf{p} = y$ (triangular superior), pois $A\mathbf{p} = b$ se, e somente se, $\tilde{H}\tilde{H}^T\mathbf{p} = b$. Dessa forma, o sistema linear para a pressão pode ser resolvido utilizando o método dos Gradientes Conjugados pré-condicionado, com pré-condicionador baseado na decomposição incompleta de Cholesky da matriz dos coeficientes (veja, por exemplo, [6]). Logo, o pré-condicionador é da forma GG^T , onde a matriz G corresponde à fatoração incompleta de Cholesky da matriz A , isto é, se $A_{ij} \neq 0$ então $G_{ij} = \tilde{H}_{ij}$; caso contrário $G_{ij} = 0$, onde \tilde{H} é o fator da decomposição de Cholesky de A .

Capítulo 3

Equações diferenciais que governam o escoamento miscível

3.1 Discussão do processo físico

O deslocamento miscível é um processo de recuperação de petróleo de alto custo, que tem atraído atenção considerável da indústria de petróleo nos últimos anos. Este processo envolve a injeção de um solvente em certos poços num reservatório de petróleo, com a intenção de deslocar o óleo residente para outros poços, chamados de produção. Este óleo pode ter sido deixado para trás depois de uma produção primária devido à pressão existente no reservatório e depois de uma produção secundária por injeção de água no reservatório. A economia do processo é precária porque exige uma etapa química muito cara para separar as componentes da mistura (óleo mais solvente) e, além disso, o sucesso do deslocamento não é garantido. Um comportamento físico complexo determinará se a recuperação de petróleo será suficientemente boa justificando então o alto investimento do processo.

Matematicamente o processo de recuperação terciária é descrito por uma equação diferencial parcial parabólica dominada por convecção, para cada componente química no sistema. Estas equações são não lineares e fortemente acopladas. Somando-se as equações para as componentes pode-se obter uma equação que determina a pressão no sistema. Esta equação não linear é elíptica ou parabólica, dependendo se o sistema é incompressível ou compressível. Então, neste problema encontra-se uma equação elíptica, ou parabólica, acoplada a uma equação aproximadamente hiperbólica, tendo este sistema um comportamento não linear complicado. É um problema de difícil aproximação numérica, e bons modelos numéricos são primordiais para a indústria, pois as previsões de custo de um projeto tem como base simulações numéricas precisas.

Em simulações de um reservatório é essencial o desenvolvimento de um bom modelo físico, que descreva adequadamente e de forma significativa o fenômeno de escoamento de um fluido. É a natureza do modelo físico que indicará quais os modelos matemáticos e numéricos que são mais convenientes. Neste trabalho o modelo matemático para o processo de deslocamento

miscível em meio poroso consiste em equações diferenciais parciais do tipo convecção-difusão, cujas soluções apresentam o movimento das frentes de ondas, que são bem acentuadas, porém contínuas.

A lei ou correlação mais amplamente usada e que pode ser incorporada em modelos analíticos de escoamento em meios porosos é a lei de Darcy, descoberta em 1856 pelo engenheiro francês Henry D'Arcy. Embora os experimentos de D'Arcy tratassem somente de escoamento laminar em vários meios, eles estabeleceram a relação básica entre a taxa de escoamento e o gradiente de pressão. Esta relação pode ser modificada de várias maneiras para modelar uma ampla variedade de escoamentos em diferentes regimes. A lei de Darcy afirma que a taxa volumétrica, Q , de um fluido homogêneo em um meio poroso é proporcional ao gradiente de pressão, ou gradiente hidráulico, e à área da seção transversal, A , normal à direção do fluxo e inversamente proporcional à viscosidade μ do fluido. A lei define o conceito de permeabilidade K da rocha, que quantifica a capacidade da rocha em transmitir fluido. Dessa forma, escreve-se a velocidade de fluido superficial (velocidade u de Darcy) como

$$u = \frac{Q}{A} = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla Z), \quad (3.1)$$

onde p é a pressão do fluido, ρ é a densidade do fluido, g é a magnitude da aceleração da gravidade, a profundidade Z é uma função vetorial de $\mathbf{x} = (x, y, z)$ apontando na direção da gravidade, K é um tensor de permeabilidade absoluta com unidades de darcies (comprimento ao quadrado) e μ é a viscosidade do fluido.

Note que o sinal negativo da Eq.(3.1) é necessário porque o fluido escoar de uma região onde a pressão é mais alta para regiões onde a pressão é mais baixa. Sendo assim, se a pressão cresce na direção negativa do eixo x , então o fluido irá escoar no sentido positivo do eixo x .

O deslocamento miscível, assim como o imiscível, envolve convecção, ou transporte físico, dos fluidos através do meio poroso. A nível macroscópico (escala de laboratório), este processo é governado pela lei de Darcy. Salienta-se que a nível microscópico, na escala de um poro, a convecção é altamente irregular. Na verdade, a lei de Darcy foi derivada rigorosamente a partir das equações de Stokes por um processo de médias sobre amostras de volumes. O comprimento característico desses volumes deve ser muito maior que o comprimento de um poro (em torno de 10^{-4} metros) e muito menor que o comprimento de um reservatório (10^2 a 10^3 metros).

Em um escoamento miscível, a variável de maior interesse é a concentração do solvente na mistura, $c(\mathbf{x}, t)$, $0 \leq c \leq 1$. A viscosidade da mistura depende da concentração e no caso de um escoamento com duas componentes pode-se expressá-la (admitindo que ela obedece a uma lei de potência de ordem quatro) em função da concentração do solvente como

$$\mu(c) = \left\{ (1 - c) + (M)^{1/4} c \right\}^{-4} \mu_o; \quad M = \frac{\mu_o}{\mu_s}, \quad (3.2)$$

sendo μ_s e μ_o as viscosidades do solvente e do óleo, respectivamente. O parâmetro adimensional M é uma razão de viscosidades.

O deslocamento miscível é também caracterizado pelos processos de difusão e dispersão.

Difusão de um fluido sobre o outro, que é causada pelo movimento aleatório de moléculas, é governada pela Lei de Fick

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -d_m A \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (3.3)$$

sendo V o volume de um fluido localizado em uma região onde os valores de “ x ” são positivos. Esta região possui uma área “ A ” de seção transversal que é normal à direção do eixo “ x ”; c é a concentração deste fluido e d_m é o coeficiente de difusão molecular (unidades: *comprimento*²/*tempo*) em um meio não poroso. Em um meio poroso, d_m é multiplicado por F/ϕ , onde F é o fator de resistividade elétrica e ϕ é a porosidade. Em geral F pode ser aproximado por ϕ^2 , assim o coeficiente em meio poroso torna-se ϕd_m , que tipicamente é da ordem de $10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$ ou $10^{-3} \text{pés}^2/\text{dia}$, que é muito pequeno.

Dispersão em nível macroscópico (escala de laboratório) é um mecanismo físico importante para o processo de mistura em nosso estudo. Uma das causas que levam ao surgimento deste fenômeno é a variação macroscópica na permeabilidade da rocha e na porosidade do meio. Neste caso, a dispersão causa variações na velocidade do fluido à medida que ele se move através da rocha. Em meios porosos, quanto maior for a distância percorrida pelo fluido maior será o efeito dispersivo no processo de mistura. Devido à similaridade qualitativa deste processo e o de mistura mecânica em nível microscópico (escala de um poro), é possível representar a dispersão macroscópica por um termo como o da difusão, com coeficiente proporcional à velocidade do fluido. Em geral, observa-se que a mistura mecânica e a dispersão macroscópica, por analogia, têm dois termos: um paralelo (longitudinal) e o outro normal (transversal) ao fluxo. Os coeficientes associados a estes termos são tais que o longitudinal pode ser 30 vezes maior que o transversal.

Mais detalhes sobre dispersão podem ser encontrados em [26].

3.2 Derivação do sistema diferencial, com duas componentes, para o deslocamento miscível incompressível

Para a derivação das equações diferenciais parciais que descrevem o deslocamento miscível, faz-se uso da lei de Darcy e da lei de conservação de massa. Considera-se um sistema com duas componentes (óleo e solvente denotados pelos subscritos “ o ” e “ s ”, respectivamente) que escoam juntas, formando uma única fase. Será utilizada a conservação de massa para cada componente em vez da conservação de massa da fase. O escoamento da mistura deve ser tratado levando-se em conta os efeitos difusivos e dispersivos de uma componente sobre a outra.

Considere um elemento V de volume, que, no mínimo, deve ter a mesma escala que a do comprimento característico de volumes discutido na seção anterior. A porosidade é definida como sendo a relação entre o volume do meio poroso que pode conter um fluido e o volume total do meio, isto é, porosidade é a fração do volume V que está disponível para o escoamento. O elemento de volume poroso, V_{poroso} , é a porção de V onde ocorre a mistura. Denote a porosidade

por $\phi = \frac{V_{poroso}}{V}$. Então a taxa de acúmulo de massa da componente i em V é dada por

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi \rho_i c_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \equiv \frac{d}{dt} \int_V \phi \rho_i c_i(\mathbf{x}, t) dx dy dz, \quad i = o, s, \quad (3.4)$$

onde $c_i \in [0, 1]$ é a concentração da componente i na fase única e ρ_i é a densidade do fluido restrita a esta componente.

A lei de Darcy (3.1) fornece a taxa de escoamento convectivo da mistura por unidade de área de seção transversal. Restringi-se esta lei à componente i da mistura para obter a seguinte relação:

$$u_i = -c_i \frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla Z) = c_i u, \quad i = o, s. \quad (3.5)$$

Note que a seguinte relação deve ser satisfeita:

$$c_o + c_s = 1; \quad (3.6)$$

observe que dessa forma obtém-se

$$u_o + u_s = u. \quad (3.7)$$

Da Lei de Fick, modificada para meios porosos, obtém-se a taxa de escoamento difusivo relativa à componente i da mistura

$$u_{i,dif} = -\phi d_m \nabla c_i. \quad (3.8)$$

Como já foi dito anteriormente, na discussão física do problema, a dispersão possui duas componentes, uma paralela e a outra transversal ao fluxo, que se comportam como um termo difusivo com coeficientes proporcionais à velocidade de Darcy (u). Será usada uma lei de potência de primeira ordem para obter tal proporcionalidade. Sejam as direções longitudinais e transversais ao fluxo indicadas pelos vetores unitários e_ℓ e e_t , respectivamente (em duas dimensões). Então obtém-se a seguinte taxa de fluxo dispersivo, escrita na base ortonormal $\{e_\ell, e_t\}$:

$$u_{i,disp} = -d_\ell |u| \frac{\partial c_i}{\partial e_\ell} e_\ell - d_t |u| \frac{\partial c_i}{\partial e_t} e_t. \quad (3.9)$$

Observe que em três dimensões existiria um termo a mais relacionado com a direção transversal ao fluxo.

Agora o vetor $u_{i,disp}$ será escrito na base usual $\{e_1, e_2\}$ do \mathbb{R}^2 . Para isto, considere as seguintes relações:

$$\begin{aligned} e_\ell &= e_1 \cos\theta + e_2 \sin\theta, \\ e_t &= -e_1 \sin\theta + e_2 \cos\theta, \\ \cos\theta &= \frac{u_1}{|u|}, \\ \sin\theta &= \frac{u_2}{|u|}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

sendo θ o ângulo entre e_ℓ e e_1 , e $u = (u_1, u_2)$. Lembre-se de que $\frac{\partial c_i}{\partial e_\ell} = \nabla c_i \cdot e_\ell$ e $\frac{\partial c_i}{\partial e_t} = \nabla c_i \cdot e_t$. Dessa forma escreve-se

$$u_{i,disp} = -\frac{d_\ell}{|u|} \left[\left(u_1^2 \frac{\partial c_i}{\partial x} + u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) e_1 + \left(u_2^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} + u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) e_2 \right] - \frac{d_t}{|u|} \left[\left(u_2^2 \frac{\partial c_i}{\partial x} - u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) e_1 + \left(u_1^2 \frac{\partial c_i}{\partial y} - u_1 u_2 \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) e_2 \right]. \quad (3.11)$$

Lembrando que conservação de massa implica que a taxa de massa acumulada dentro de um elemento de volume V é igual a taxa de fluxo de massa através da fronteira de V mais a quantidade de massa injetada (ou residente) em V . Desta forma, obtém-se a seguinte relação

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi \rho c_i d\mathbf{x} = - \int_{\partial V} \rho U_i \cdot \nu dS + \int_V \rho \tilde{c}_i q d\mathbf{x}, \quad (3.12)$$

sendo U_i o vetor que combina todas as componentes de velocidade do fluxo

$$U_i = u_i + u_{i,dif} + u_{i,disp}. \quad (3.13)$$

Na Eq.(3.12), ν é o vetor normal exterior à ∂V , \tilde{c}_i é a concentração da componente i especificada no poço de injeção e a concentração residente no poço de produção, q é a taxa de fluxo volumétrico por unidade de volume.

Usando o Teorema da Divergência, a fórmula (3.11) e considerando a incompressibilidade dos fluidos (ρ é constante) e da rocha, reescreve-se a Eq.(3.12) como

$$\int_V \left[\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c_i - u c_i) \right] d\mathbf{x} = \int_V \tilde{c}_i q d\mathbf{x}, \quad i = o, s, \quad (3.14)$$

sendo D um tensor de difusão-dispersão (tensor invertível - seu inverso será denotado por D^{-1}) dado por

$$D = D(u) = \phi d_m I + \frac{d_\ell}{|u|} \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 \\ u_1 u_2 & u_2^2 \end{pmatrix} + \frac{d_t}{|u|} \begin{pmatrix} u_2^2 & -u_1 u_2 \\ -u_1 u_2 & u_1^2 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Para se eliminar o sinal de integração na fórmula (3.14), reduzindo V a um ponto arbitrário, são necessárias algumas justificações, já que V deve ter, no mínimo, a mesma escala que a do comprimento característico de volumes. Os trabalhos [26] e [17], respectivamente, apresentam tais justificativas. Portanto, tem-se o seguinte sistema acoplado

$$\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla c_i - u c_i) = \tilde{c}_i q, \quad i = o, s. \quad (3.16)$$

As variáveis são u , c_o e c_s , com a restrição adicional (3.6). Uma equação é a do óleo e a outra é a do solvente.

Uma manipulação comum com este sistema consiste na troca de uma das equações (a do

óleo, por exemplo) pela soma das duas. Isto nos conduz ao seguinte sistema de equações

$$-\nabla \cdot \left(\frac{K}{\mu(c)} (\nabla p - \rho g \nabla Z) \right) \equiv \nabla \cdot u = q; \quad (\text{equação da pressão}) \quad (3.17)$$

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D(u) \nabla c - uc) = \tilde{c}q, \quad (\text{equação da concentração}) \quad (3.18)$$

onde $c = c_s$, $\tilde{c} = \tilde{c}_s$. A primeira equação acima, (3.17), representa a conservação de massa para o fluido total, enquanto a segunda equação, (3.18), representa a conservação de massa para a componente de solvente. A primeira equação é frequentemente chamada de equação da pressão; seus coeficientes dependem da concentração do solvente. A segunda equação, da concentração, é usualmente uma equação parabólica, dominada por convecção; seus coeficientes dependem da pressão, através da velocidade de Darcy.

O comportamento de μ como função de c é muito importante para entender a formação de canais preferenciais de escoamento. Estes canais assemelham-se a dedos compridos e devido a isto são comumente denominados, em inglês, por *viscous fingering*. O comportamento de μ depende da razão de viscosidades, $M = \frac{\mu_o}{\mu_s}$. Se $M > 1$, o deslocamento é dito ter razão de viscosidades adversa e a formação de *viscous fingering* é esperada (veja, por exemplo, [18]).

O sistema (3.17)-(3.18) está definido sobre um domínio limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (assim, a partir de agora, $\mathbf{x} = (x, y)$), representando um reservatório ou parte de um reservatório, num intervalo de tempo $J = [0, T]$. Este sistema requer condições iniciais e de fronteira. As condições de fronteira que serão usadas são as de fluxo nulo, representando uma fronteira impermeável, que são as mais comuns na prática:

$$u \cdot n = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad \forall t \in J, \quad (3.19)$$

$$(D\nabla c) \cdot n - c(u \cdot n) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad \forall t \in J, \quad (3.20)$$

sendo n é o vetor unitário normal exterior à fronteira de Ω .

Necessita-se de uma condição de compatibilidade que é dada por

$$\int_{\Omega} q \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \nabla \cdot u \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} u \cdot n \, ds = 0. \quad (3.21)$$

A condição inicial é dada por

$$c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.22)$$

enquanto os valores iniciais de p são determinados pela Eq.(3.17) e pela condição inicial (3.22). Se o sistema fosse compressível seria necessário uma condição inicial para p também.

O sistema formado pelas Eqs.(3.17)–(3.19) e (3.22) está na forma divergente. Para certos procedimentos numéricos deve-se considerar uma forma alternativa, do tipo não-divergente. Para isto, note que

$$\nabla \cdot (uc) = u \cdot \nabla c + c(\nabla \cdot u) = u \cdot \nabla c + cq, \quad (3.23)$$

tal que o sistema (2.17)-(2.18) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}\nabla \cdot u &= q, \\ \phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c - \nabla \cdot (D \nabla c) &= (\tilde{c} - c)q.\end{aligned}\tag{3.24}$$

Para qualquer taxa de injeção razoável de solvente o fluxo é essencialmente ao longo da característica associada ao transporte

$$\phi \frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c.\tag{3.25}$$

Então, é apropriado introduzir diferenciação na direção característica. Sendo assim, defina

$$\psi(\mathbf{x}, u) = \left[\phi(\mathbf{x})^2 + |u|^2 \right]^{\frac{1}{2}},\tag{3.26}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} = \psi^{-1} \left\{ \phi \frac{\partial}{\partial t} + u \cdot \nabla \right\}.\tag{3.27}$$

Observe que a direção τ depende do espaço e da velocidade do fluido, que varia tanto no tempo quanto no espaço.

Este trabalho não vai levar em conta os efeitos de gravidade. A inclusão destes efeitos pode ser feita sem maiores dificuldades conceituais, embora determine algumas complicações no que se refere a desenvolvimento de métodos numéricos e códigos computacionais.

A análise matemática do sistema (3.17)–(3.18) foi considerada em [14], no qual mostrou-se a unicidade local e existência global de solução.

Capítulo 4

Cálculo da velocidade de Darcy utilizando o método dos elementos finitos mistos e híbridos

4.1 Introdução

Segundo Chavent e Jaffré [11], há duas razões básicas para que os métodos dos elementos finitos tradicionais não sejam adequados para a simulação de reservatórios. O primeiro é que eles foram projetados para problemas com soluções suaves (processos difusivos, mecânica estrutural), enquanto que, na simulação de reservatórios, a solução pode apresentar frentes íngrimes quando as equações são dominadas por efeitos convectivos. A segunda razão é que a velocidade dos fluidos, que é um importante fator de acoplamento nas equações no reservatório, é pobremente aproximada pelas funções lineares por partes (funções “chapéu”, conforme a observação 2.1 no final da seção 2.5 do Capítulo 2) normalmente usadas nas formulações de elementos finitos aplicadas em problemas elípticos e parabólicos suaves.

As formulações mistas de elementos finitos são uma forma de se obter velocidades realmente conservativas por meio da aproximação em separado da pressão (variável principal) e do seu gradiente, ou da própria velocidade, o que é equivalente.

De fato, um grande avanço e uma razão para as formulações mistas (e híbrida) serem mais adequadas para problemas de fluxo é que elas trabalham com funções vetoriais, e com isso conseguem representar com mais liberdade o real comportamento do fenômeno físico.

A principal desvantagem da formulação mista é que ela monta um sistema linear que não é definido-positivo. Esses sistemas são mais difíceis de se resolver, o que exige métodos numéricos muito elaborados e computacionalmente caros para a resolução dos mesmos.

Para contornar este problema será seguida a mesma técnica sugerida por Chavent e Roberts [10], a qual conduz para um sistema linear cuja matriz é simétrica e definida positiva, cuja solução é equivalente à solução da formulação mista. Esta técnica é chamada de formulação híbrida ou técnica de hibridização.

Assim, o objetivo deste capítulo é apresentar uma técnica de aproximação para a solução de equações elípticas, utilizando espaços de Raviart-Thomas de baixa ordem. Em especial, será considerada a equação que fornece a velocidade de Darcy para escoamentos em meios porosos, levando-se em conta malhas regulares e domínio retangular. A técnica empregada é conhecida como o método dos elementos finitos mistos e híbridos já mencionados acima. Neste caso, a variável principal do sistema linear oriundo da discretização é denominada Multiplicador de Lagrange e está associada a cada uma das arestas dos elementos finitos (formulação híbrida). Na formulação mista, são considerados dois espaços apropriados: um contém funções escalares e o outro contém funções vetoriais. Assim, pode-se aproximar, simultaneamente, a pressão e o gradiente de pressão.

A motivação para este trabalho surgiu com a elaboração da dissertação de mestrado de Silva [24], que apresenta um novo algoritmo para o cálculo de permeabilidades equivalentes (veja [13]), considerando um tensor diagonal de permeabilidade. Os códigos desenvolvidos no Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LABTRAN) do IPRJ-UERJ, referentes ao cálculo da velocidade de Darcy, não estavam adaptados para o caso onde K é um tensor de ordem dois. Com o objetivo de realizar tal adaptação foram iniciados os estudos que estão presentes neste trabalho, o qual exhibe uma generalização das técnicas apresentadas no artigo de Chavent e Roberts [10], com atenção especial para a demonstração de que a matriz do sistema linear oriundo da formulação fraca da equação da velocidade é definida positiva, se o tensor K satisfizer certas restrições.

4.2 Lei de Darcy

A lei de Darcy estabelece a relação básica entre a taxa volumétrica do fluxo Q e o gradiente de pressão ∇p , com $p = p(x, y) \equiv p(\mathbf{x})$, afirmando que a taxa volumétrica é diretamente proporcional ao gradiente de pressão do fluido e à área A da seção transversal normal à direção do fluxo e inversamente proporcional à viscosidade $\mu = \mu(\mathbf{x})$ do fluido, o que permite definir o conceito de permeabilidade $K = K(\mathbf{x})$, que quantifica a capacidade do meio poroso em transmitir o fluido. Dessa forma, desprezando-se os efeitos gravitacionais, a velocidade superficial do fluido é dada por

$$u = \frac{Q}{A} = -\frac{K}{\mu} \nabla p, \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (4.1)$$

sendo $\Omega = [0, X] \times [0, Y] \subset \mathbb{R}^2$ é um domínio retangular.

Trabalhos recentes envolvendo simulação de escoamentos em meios porosos (Aquino et al. [5]; Ribeiro, [21]; Abreu et al. [1]; Silva, [24]) continuam utilizando uma simplificação sugerida em Chavent e Roberts [10] para o cálculo da velocidade de Darcy. A técnica emprega elementos finitos mistos e híbridos (veja Brezzi e Fortin [9]) e integração numérica (regra do trapézio) na formulação fraca da equação da velocidade; em geral o comprimento da malha computacional é o mesmo na direção x e na direção y ($h = h_x = h_y$) e a permeabilidade K é um escalar.

Simulações numéricas com alta resolução, envolvendo cálculos acurados da velocidade de Darcy, Eq.(4.1), são essenciais para se obter uma descrição precisa de fenômenos multiescala em escoamentos multifásicos e monofásicos em meios porosos, tais como problemas de contaminação de aquíferos e processos de recuperação secundária e terciária de petróleo. Isto justifica a obtenção de métodos numéricos eficientes, de baixo custo computacional e de rápida convergência.

As técnicas de discretização utilizadas neste trabalho são aplicadas em uma equação elíptica,

$$\nabla \cdot u = q \quad (4.2)$$

onde $q = q(\mathbf{x})$ é um termo de fonte, associada ao deslocamento de dois fluidos miscíveis e incompressíveis; mas também podem ser aplicadas em equações provenientes de outros tipos de escoamento em meios porosos. A metodologia aqui apresentada será útil, por exemplo, na investigação de técnicas numéricas para o cálculo de permeabilidades efetivas (ou equivalentes) em meios porosos heterogêneos. Um estudo sobre este assunto foi desenvolvido no artigo de Durlafsky [13], utilizando um tensor de permeabilidade.

Seguindo a mesma técnica sugerida em Chavent e Roberts [10], mas considerando, também, a possibilidade de se trabalhar com um tensor de permeabilidade K , ao invés de considerar apenas permeabilidade escalar, a discretização da equação da pressão, Eq.(4.2), usará elementos finitos mistos e híbridos. Maiores informações sobre elementos finitos mistos e híbridos podem ser obtidas em [4], [12] e [20].

A matriz do sistema linear proveniente da aproximação da equação elíptica, por elementos finitos mistos e híbridos, será simétrica e definida positiva. Desta forma, os métodos numéricos usuais, como o Método dos Gradientes Conjugados (seção 2.6), poderão ser empregados na resolução deste sistema.

4.3 Formulação fraca para a Velocidade de Darcy

É importante salientar que a função escalar p (pressão) pertence ao, já definido no Capítulo 1, espaço de Sobolev $H^1(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega) : f_x \in L^2(\Omega) \text{ e } f_y \in L^2(\Omega)\}$, sendo que f e suas derivadas parciais de primeira ordem, f_x e f_y , são de quadrado integrável em Ω . Já a função u (velocidade de Darcy) pertence ao espaço $H(\text{div}, \Omega) = \{F = (f, g) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) : \nabla \cdot F \in L^2(\Omega)\}$: espaço das funções vetoriais cujo divergente é de quadrado integrável, com funções coordenadas também de quadrado integrável em Ω .

Em um primeiro momento, considere a permeabilidade uma função escalar. Sendo assim, denote por a o valor de $\frac{K}{\mu} > 0$, na Eq.(4.1). Então, o objetivo é obter uma formulação fraca para a equação $u = -a\nabla p$. Para esta finalidade, será exibido a seguir um espaço vetorial que fornecerá aproximações para o campo de velocidades.

4.4 Espaço de Raviart-Thomas de baixa ordem

Denote, respectivamente, n_x e n_y os números de subintervalos de $[0, X]$ e $[0, Y]$, associados ao domínio retangular Ω , e $h_x = \frac{X}{n_x}$, $h_y = \frac{Y}{n_y}$, os comprimentos desses subintervalos. Então, considerando-se a partição do domínio Ω em elementos retangulares do tipo $E = [x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j]$, onde $x_i = ih_x$, com $1 \leq i \leq n_x$, $y_j = jh_y$, com $1 \leq j \leq n_y$, $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, o espaço vetorial de Raviart-Thomas, sobre tal elemento E , é gerado pelas funções vetoriais:

$$W_R = \frac{1}{h_x h_y} (x - x_{i-1}, 0) \quad W_L = \frac{1}{h_x h_y} (x - x_i, 0) \quad (4.3)$$

$$W_U = \frac{1}{h_x h_y} (0, y - y_{j-1}) \quad W_D = \frac{1}{h_x h_y} (0, y - y_j) \quad (4.4)$$

Observe que as quatro funções base são linearmente independentes, portanto, o espaço vetorial gerado por tais funções possui dimensão quatro.

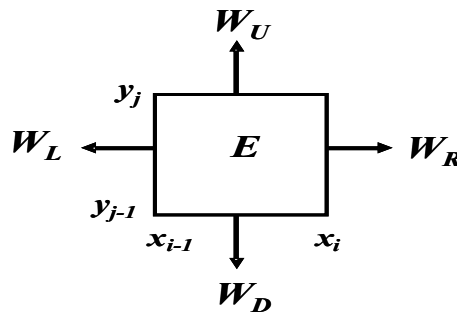


Figura 4.1: Elemento E e as funções que geram o espaço de Raviart-Thomas neste elemento.

É o espaço gerado pelas funções dadas nas Eqs.(4.3) e (4.4) que fornecerá aproximações para o campo de velocidades em E . As letras R , L , U e D são referentes às arestas direita, esquerda, de cima e de baixo, respectivamente, do elemento E . Assim, a velocidade de Darcy, neste elemento E , é aproximada por

$$u = u_R W_R + u_L W_L + u_U W_U + u_D W_D \equiv \sum_{\alpha} u_{\alpha} W_{\alpha} \quad (4.5)$$

sendo u_{α} , com $\alpha \in \{R, L, U, D\}$, denominadas componentes ortogonais do fluxo através das interfaces na direção normal exterior.

Exemplo 4.1 Considere a aresta R na fronteira do elemento E , a qual será denotada por $\partial E = \Gamma_R$, neste caso $x = x_i$, com vetor unitário normal exterior dado por $\eta_R = (1, 0)$. Note

que $W_L \equiv 0$ e que

$$\begin{aligned}
 u &= u_R W_R + u_L W_L + u_U W_U + u_D W_D \\
 &= \frac{u_R}{h_x h_y} (x_i - x_{i-1}, 0) + \frac{u_U}{h_x h_y} (0, y - y_{j-1}) + \frac{u_D}{h_x h_y} (0, y - y_j) \\
 &= \frac{u_R}{h_x h_y} (h_x, 0) + \frac{u_U}{h_x h_y} (0, y - y_{j-1}) + \frac{u_D}{h_x h_y} (0, y - y_j) \\
 &= \frac{u_R}{h_y} (1, 0) + \frac{u_U}{h_x h_y} (0, y - y_{j-1}) + \frac{u_D}{h_x h_y} (0, y - y_j).
 \end{aligned}$$

Assim, $u \cdot \eta_R = \frac{u_R}{h_y}$. Logo,

$$\int_{\partial E} u \cdot \eta_R d\mathbf{y} = \int_{\Gamma_R} u \cdot \eta_R d\mathbf{y} = \int_{\Gamma_R} \frac{u_R}{h_y} d\mathbf{y} = \frac{u_R}{h_y} \int_{\Gamma_R} d\mathbf{y} = \frac{u_R}{h_y} h_y = u_R ;$$

observe que $\int_{\Gamma_R} d\mathbf{y} = h_y$. Portanto, conclui-se que $\int_{\Gamma_R} u \cdot \eta_R d\mathbf{y} = u_R$.

4.5 Relação entre as componentes ortogonais do fluxo, os Multiplicadores de Lagrange e a pressão

Nesta seção, será estabelecida, por meio de uma equação matricial, a relação existente entre as componentes do fluxo, os Multiplicadores de Lagrange e a pressão, no elemento E . Para isso, observe que a formulação fraca para a Eq.(4.1), (velocidade de Darcy), é expressa pela seguinte equação integral

$$\iint_E \frac{1}{a} u \cdot W d\mathbf{x} = - \iint_E \nabla p \cdot W d\mathbf{x}, \quad \forall W \in H(\text{div}, E).$$

A formulação fraca da equação anterior é obtida considerando que: a função a é constante em cada elemento E , assumindo neste elemento o valor a_E ; u pertence ao espaço de Raviart-Thomas, isto é, satisfaz a Eq.(4.5); $W = W_\beta$, com $\beta \in \{R, L, U, D\}$; a função p é constante no interior de cada elemento E , assumindo aí o valor p_E e em cada uma das quatro arestas β , que compõe a fronteira de E , a pressão assume o valor constante $\ell_{E,\beta}$ chamado de Multiplicador de Lagrange, podendo ser distinto para cada β . Se \tilde{E} é o elemento vizinho de E , em relação à aresta β e se β' é a aresta correspondente em \tilde{E} , então, $\ell_{E,\beta} = \ell_{\tilde{E},\beta'}$, o que garante a continuidade da pressão em arestas adjacentes de elementos vizinhos. Desta forma, obtém-se a seguinte equação

$$\iint_E \frac{1}{a} \sum_{\alpha} u_{\alpha} W_{\alpha} \cdot W_{\beta} d\mathbf{x} \equiv \frac{1}{a_E} \sum_{\alpha} u_{\alpha} \iint_E W_{\alpha} \cdot W_{\beta} d\mathbf{x} = - \iint_E \nabla p \cdot W_{\beta} d\mathbf{x}. \quad (4.6)$$

Para obter a forma matricial da Eq.(4.6) acima serão feitas algumas manipulações na mesma. Para facilitar as contas que surgirão no desenvolvimento da Eq.(4.6) far-se-á uso da seguinte

troca de variáveis $x = x_{i-1} + \chi h_x$ e $y = y_{j-1} + \gamma h_y$. Dessa forma, tem-se que

$$W_R = \frac{1}{h_y}(\chi, 0) \quad W_L = \frac{1}{h_y}(\chi - 1, 0). \quad (4.7)$$

$$W_U = \frac{1}{h_x}(0, \gamma) \quad W_D = \frac{1}{h_x}(0, \gamma - 1). \quad (4.8)$$

Seja

$$A_{E,\beta\alpha} = h_x h_y \iint_{\varepsilon} W_{\alpha} \cdot W_{\beta} d\chi d\gamma$$

sendo ε o quadrado $[0, 1] \times [0, 1]$. Com o objetivo de construir a matriz $A_E = (A_{E,\beta\alpha})$, com $\beta, \alpha \in \{R, L, U, D\}$, considere as seguintes definições.

Definição 4.1 (Arestas Conjugadas) *Se $\alpha = L$, então $\alpha^* = D$; se $\alpha = R$, então $\alpha^* = U$; se $\alpha = D$, então $\alpha^* = L$; se $\alpha = U$, então $\alpha^* = R$.*

Definição 4.2 (Arestas Opostas) *Se $\alpha = L$, então $\alpha' = R$; se $\alpha = R$, então $\alpha' = L$; se $\alpha = D$, então $\alpha' = U$; se $\alpha = U$, então $\alpha' = D$.*

Definição 4.3 (Arestas Transversais) *Se $\alpha = R$ ou $\alpha = L$, então $\alpha^{\perp} \in \{U, D\}$; se $\alpha = U$ ou $\alpha = D$, então $\alpha^{\perp} \in \{R, L\}$.*

Agora, observe que a função vetorial $W_{\beta} = (W_{\beta,1}, W_{\beta,2})$ possui a seguinte propriedade:

$$W_{\beta,2} = 0 \text{ se } \beta \in \{R, L\} \text{ e } W_{\beta,1} = 0 \text{ se } \beta \in \{U, D\}. \quad (4.9)$$

Dessa forma, segue-se que

$$A_{E,\beta\beta} = h_x h_y \int_0^1 W_{\beta,1}^2 d\chi \text{ se } \beta \in \{R, L\} \text{ e } A_{E,\beta\beta} = h_x h_y \int_0^1 W_{\beta,2}^2 d\gamma \text{ se } \beta \in \{U, D\}.$$

Em relação às arestas transversais, vale a seguinte propriedade:

$$W_{\beta,i} W_{\beta^{\perp},i} = 0 \text{ com } i \in \{1, 2\}. \quad (4.10)$$

Logo, tem-se que $A_{E,\beta\beta^{\perp}} = 0$, para toda aresta $\beta \in \{R, L, U, D\}$.

Agora, já para arestas opostas vale a seguinte propriedade:

$$W_{\beta,2} = W_{\beta',2} = 0 \text{ se } \beta \in \{R, L\} \text{ e } W_{\beta,1} = W_{\beta',1} = 0 \text{ se } \beta \in \{U, D\}. \quad (4.11)$$

Logo, obtém-se que

$$A_{E,\beta\beta'} = h_x h_y \int_0^1 W_{\beta,1} W_{\beta',1} d\chi \text{ se } \beta \in \{R, L\} \text{ e } A_{E,\beta\beta'} = h_x h_y \int_0^1 W_{\beta,2} W_{\beta',2} d\gamma \text{ se } \beta \in \{U, D\}.$$

É fácil perceber que existe uma similaridade entre os elementos da matriz A_E . Então, calculando-se, por exemplo, $A_{E,RR}$ e $A_{E,RL}$, imediatamente, por analogia, obtém-se os demais

elementos da matriz. A razão $r = \frac{h_x}{h_y}$, ou $r^{-1} = \frac{h_y}{h_x}$, aparece nos cálculos destes elementos. Utilizando esta notação tem-se que

$$A_{E,RR} = h_x h_y \int_0^1 \frac{\chi^2}{h_y^2} d\chi = \frac{r}{3} \quad \text{e} \quad A_{E,RL} = h_x h_y \int_0^1 \frac{\chi(\chi-1)}{h_y^2} d\chi = -\frac{r}{6}.$$

E, assim, dos cálculos anteriores obtém-se as matrizes A_E e A_E^{-1} , respectivamente, dadas por

$$A_E = \begin{bmatrix} \frac{r}{3} & \frac{-r}{6} & 0 & 0 \\ \frac{-r}{6} & \frac{r}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{r^{-1}}{3} & \frac{-r^{-1}}{6} \\ 0 & 0 & \frac{-r^{-1}}{6} & \frac{r^{-1}}{3} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (A_E)^{-1} = \begin{bmatrix} 4r^{-1} & 2r^{-1} & 0 & 0 \\ 2r^{-1} & 4r^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4r & 2r \\ 0 & 0 & 2r & 4r \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Observe que nestas matrizes a primeira, a segunda, a terceira e a quarta linha correspondem às arestas R , L , U e D , respectivamente. O mesmo sendo válido para as colunas. Voltando a atenção para o lado direito da Eq.(4.6) e observando que o divergente da função vetorial pW_β é calculado como $\nabla \cdot (pW_\beta) = p\nabla \cdot W_\beta + \nabla p \cdot W_\beta$ tem-se que $\nabla p \cdot W_\beta = \nabla \cdot (pW_\beta) - p\nabla \cdot W_\beta$. Assim, das Eqs.(4.3) e (4.4) segue que

$$\nabla \cdot W_\beta = \frac{\partial W_{\beta,1}}{\partial x} + \frac{\partial W_{\beta,2}}{\partial y} = \frac{1}{h_x h_y}. \quad (4.13)$$

Lembrando que a função p (pressão) é constante em cada elemento E , assumindo em seu interior o valor p_E , aplique o Teorema da Divergência no campo pW_β e obtenha

$$\iint_E \nabla \cdot (pW_\beta) d\mathbf{x} = \int_{\partial E} pW_\beta \cdot \eta dS,$$

sendo ∂E a fronteira do elemento E , que possui normal exterior unitária denotada por η . Como a integral é efetuada na fronteira da região E , então a diferencial passa a ser denotada por dS . Assim, olhando para o lado direito da Eq.(4.6) observe que

$$\begin{aligned} - \iint_E \nabla p \cdot W_\beta d\mathbf{x} &= \iint_E -(\nabla p \cdot W_\beta) d\mathbf{x} = \iint_E [p\nabla \cdot W_\beta - \nabla \cdot (pW_\beta)] d\mathbf{x} \\ &= \iint_E p\nabla \cdot W_\beta d\mathbf{x} - \iint_E \nabla \cdot (pW_\beta) d\mathbf{x} \\ &= \iint_E p\nabla \cdot W_\beta d\mathbf{x} - \int_{\partial E} pW_\beta \cdot \eta dS \\ &= p_E \iint_E \nabla \cdot W_\beta d\mathbf{x} - \int_{\partial E} pW_\beta \cdot \eta dS \\ &= p_E \iint_E \frac{1}{h_x h_y} d\mathbf{x} - \int_{\partial E} pW_\beta \cdot \eta dS \\ &= p_E - \int_{\partial E} pW_\beta \cdot \eta dS. \end{aligned}$$

Logo, o lado direito da Eq.(4.6) pode ser reescrito como segue

$$-\iint_E \nabla p \cdot W_\beta d\mathbf{x} = p_E - \int_{\partial E} p W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta} dS.$$

Agora com o objetivo de simplificar ainda mais a equação acima observe que a fronteira de E possui quatro arestas, denotadas por Γ_α , com $\alpha \in \{R, L, U, D\}$ e, desta forma, tem-se que

$$\int_{\partial E} p W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta} dS = \sum_\alpha \int_{\Gamma_\alpha} p W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta}_\alpha dS_\alpha.$$

Considere a seguinte notação $h_L = h_R = h_x$ e $h_D = h_U = h_y$. De acordo com as expressões de W_β , Eq.(4.3) e Eq.(4.4), as seguintes propriedades são obtidas

$$W_\beta(\Gamma_{\beta'}) = 0 \quad \text{para toda aresta } \beta; \quad (4.14)$$

$$W_\beta(\Gamma_\beta) = \left(\frac{1}{h_{\beta^*}} \right) \cdot \boldsymbol{\eta}_\beta \quad \text{para toda aresta } \beta; \quad (4.15)$$

$$W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta}_{\beta^\perp} = 0 \quad \text{para toda aresta } \beta; \quad (4.16)$$

sendo o comprimento da aresta Γ_β dado por h_{β^*} .

Assim, observando as propriedades dadas nas Eqs.(4.14), (4.15), (4.16) e sabendo que p é constante na interface Γ_β , com valor $\ell_{E,\beta}$ (Multiplicador de Lagrange) obtém-se que

$$\int_{\partial E} p W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta} dS = \int_{\Gamma_\beta} p W_\beta \cdot \boldsymbol{\eta}_\beta dS_\beta = \ell_{E,\beta}.$$

Lembrando que a Eq.(4.6) é dada por

$$\iint_E \frac{1}{a_E} \sum_\alpha u_\alpha W_\alpha \cdot W_\beta d\mathbf{x} = p_E - \ell_{E,\beta} \quad \text{com } \alpha, \beta \in \{R, L, U, D\}$$

observe que, por exemplo, tomando $\beta = R$ tem-se que

$$\iint_E \frac{1}{a_E} \sum_\alpha u_\alpha W_\alpha \cdot W_R d\mathbf{x} = p_E - \ell_{E,R} \quad \text{com } \alpha, \beta \in \{R, L, U, D\}.$$

Considerando-se as funções dadas nas Eqs.(4.7) e (4.8) e aplicando o teorema de mudança de variáveis na integral dupla tem-se que

$$\frac{1}{a_E} \left\{ \sum_\alpha u_\alpha \iint_\varepsilon |J| W_\alpha \cdot W_R d\mathbf{x} \right\} = p_E - \ell_{E,R}$$

sendo $J = \frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial(\chi, \gamma)}$ a jacobiana da mudança de variáveis, com $\mathbf{x} = x_{i-1} + \chi h_x$ e $\mathbf{y} = y_{j-1} + \gamma h_y$,

assim, tem-se que

$$J = \begin{bmatrix} h_x & 0 \\ 0 & h_y \end{bmatrix} \text{ o que implica que } |J| = h_x h_y.$$

Dessa forma, obtém-se que

$$\frac{1}{a_E} \left\{ \sum_{\alpha} u_{\alpha} h_x h_y \iint_{\varepsilon} W_{\alpha} \cdot W_R d\mathbf{x} \right\} = p_E - \ell_{E,R} \text{ com } \alpha, \beta \in \{R, L, U, D\}$$

o que implica que

$$\frac{1}{a_E} \left\{ \sum_{\alpha} u_{\alpha} A_{E,R\alpha} \right\} = p_E - \ell_{E,R} \text{ com } \alpha, \beta \in \{R, L, U, D\}$$

ou seja,

$$\frac{1}{a_E} \left\{ u_R A_{E,RR} + u_L A_{E,RL} + u_U A_{E,RU} + u_D A_{E,RD} \right\} = p_E - \ell_{E,R}.$$

Assim, tomando sucessivamente $\beta = L$, $\beta = U$, $\beta = D$ e procedendo de modo análogo ao procedimento feito acima obtém-se as seguintes equações

$$\frac{1}{a_E} \left\{ u_R A_{E,LR} + u_L A_{E,LL} + u_U A_{E,LU} + u_D A_{E,LD} \right\} = p_E - \ell_{E,L};$$

$$\frac{1}{a_E} \left\{ u_R A_{E,UR} + u_L A_{E,UL} + u_U A_{E,UU} + u_D A_{E,UD} \right\} = p_E - \ell_{E,U};$$

$$\frac{1}{a_E} \left\{ u_R A_{E,DR} + u_L A_{E,DL} + u_U A_{E,DU} + u_D A_{E,DD} \right\} = p_E - \ell_{E,D};$$

que fornece um sistema de equações lineares e cuja forma matricial para a Eq.(4.6) é dada por

$$\frac{1}{a_E} \begin{bmatrix} A_{E,RR} & A_{E,RL} & A_{E,RU} & A_{E,RD} \\ A_{E,LR} & A_{E,LL} & A_{E,LU} & A_{E,LD} \\ A_{E,UR} & A_{E,UL} & A_{E,UU} & A_{E,UD} \\ A_{E,DR} & A_{E,DL} & A_{E,DU} & A_{E,DD} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{E,R} \\ u_{E,L} \\ u_{E,U} \\ u_{E,D} \end{bmatrix} = p_E \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \ell_{E,R} \\ \ell_{E,L} \\ \ell_{E,U} \\ \ell_{E,D} \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$A_E \left(u_{E,R} \ u_{E,L} \ u_{E,U} \ u_{E,D} \right)^T = a_E \left\{ p_E \left(1 \ 1 \ 1 \ 1 \right)^T - \left(\ell_{E,R} \ \ell_{E,L} \ \ell_{E,U} \ \ell_{E,D} \right)^T \right\} \quad (4.17)$$

onde o sobrescrito T indica a transposta de uma matriz. Observe que ficou evidenciada a dependência das variáveis em relação ao elemento E . Utilizando a inversa da matriz A_E , obtém-se a relação desejada entre as componentes ortogonais do fluxo, a pressão e os Multiplicadores de Lagrange dada por:

$$\left(u_{E,R} \ u_{E,L} \ u_{E,U} \ u_{E,D} \right)^T = a_E \left\{ p_E \left(A_E \right)^{-1} \left(1 \ 1 \ 1 \ 1 \right)^T - \left(A_E \right)^{-1} \left(\ell_{E,R} \ \ell_{E,L} \ \ell_{E,U} \ \ell_{E,D} \right)^T \right\}. \quad (4.18)$$

Com a finalidade de se obter uma expressão mais compacta para a Eq.(4.18), considere a seguinte notação $s_{E,\beta} = \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha}$ para a soma das linhas da matriz $\hat{A}_E \equiv (A_E)^{-1}$. Como a matriz é simétrica, este valor também representa a soma das colunas de \hat{A}_E , ou seja, tem-se que $s_{E,\beta} = \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\alpha\beta}$. Consultando a matriz $(A_E)^{-1}$ dada na Eq.(4.12), obtém-se que

$$s_{E,\beta} = 6r_{\beta} \quad \text{onde} \quad \begin{cases} r_{\beta} = r^{-1}, & \text{se } \beta \in \{R, L\} \\ r_{\beta} = r, & \text{se } \beta \in \{U, D\}. \end{cases}$$

Logo, tem-se que

$$u_{E,\beta} = a_E p_E s_{E,\beta} - a_E \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} \quad \forall \beta \in \{R, L, U, D\}. \quad (4.19)$$

4.6 Relação de continuidade do fluxo

Dado um elemento E da partição do domínio Ω escolha uma aresta β qualquer deste elemento. A notação para o elemento vizinho de E em relação à aresta β é dada por \tilde{E} . De acordo com a seção anterior tem-se que $\ell_{E,\beta} = \ell_{\tilde{E},\beta'}$.

Por exemplo, se na Fig.(4.2), forem considerados $E = E_{i,j}$ e $\beta = L$ em E , então tem-se que $\tilde{E} = E_{i-1,j}$ será o elemento vizinho à esquerda de E e, dessa forma, tem-se que $\ell_{E,L} = \ell_{\tilde{E},R}$.

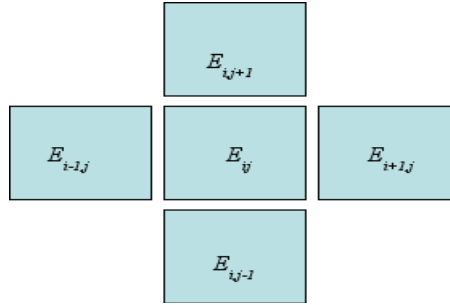


Figura 4.2: Elemento $E = E_{i,j}$ da partição do domínio e seus vizinhos.

Tomando-se uma aresta qualquer β no elemento E e a correspondente aresta β' no elemento vizinho \tilde{E} , por um procedimento análogo à obtenção da Eq.(4.19), pode-se mostrar que

$$u_{\tilde{E},\beta'} = a_{\tilde{E}} p_{\tilde{E}} s_{\tilde{E},\beta'} - a_{\tilde{E}} \sum_{\alpha} \hat{A}_{\tilde{E},\beta'\alpha} \ell_{\tilde{E},\alpha} \quad \forall \beta \in \{R, L, U, D\}. \quad (4.20)$$

O fato anterior pode ser facilmente comprovado. Como exemplo, considere os elementos $E = E_{i,j}$ e $\tilde{E} = E_{i-1,j}$ como na Fig.(4.2). Fazendo a seguinte troca de variáveis $x = x_{i-2} + \chi h_x$ e $y = y_{j-1} + \gamma h_y$, obtém-se que $W_{E,\beta} = W_{\tilde{E},\beta}$ no quadrado $\varepsilon = [0, 1] \times [0, 1]$, veja as Eqs. (4.7) e (4.8). Caso o elemento vizinho fosse $\tilde{E} = E_{i,j+1}$ a troca de variáveis seria dada por $x = x_{i-1} + \chi h_x$ e $y = y_j + \gamma h_y$; dessa forma obtendo-se a mesma igualdade anterior. Portanto,

$$A_{E,\beta\alpha} = h_x h_y \iint_{\varepsilon} W_{E,\alpha} \cdot W_{E,\beta} d\chi d\gamma = h_x h_y \iint_{\varepsilon} W_{\tilde{E},\alpha} \cdot W_{\tilde{E},\beta} d\chi d\gamma = A_{\tilde{E},\beta\alpha},$$

ou seja, $A_E = A_{\tilde{E}}$.

A continuidade do fluxo na aresta β do elemento E , e conseqüentemente na aresta β' do elemento vizinho \tilde{E} , é garantida impondo-se a seguinte condição $u_{\tilde{E},\beta'} + u_{E,\beta} = 0$. Então, utilizando as duas equações anteriores, Eq.(4.19) e Eq.(4.20), obtém-se que

$$a_{\tilde{E}} p_{\tilde{E}} s_{\tilde{E},\beta'} + a_E p_E s_{E,\beta} = a_{\tilde{E}} \sum_{\alpha} \hat{A}_{\tilde{E},\beta'\alpha} \ell_{\tilde{E},\alpha} + a_E \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha}. \quad (4.21)$$

4.7 Formulação fraca para a equação elíptica

Agora, o interesse é obter uma formulação fraca para a equação elíptica, Eq.(4.2), considerando-se a seguinte formulação variacional

$$\iint_E v \nabla \cdot u d\mathbf{x} = \iint_E v q d\mathbf{x} \quad \forall v \in L^2(E). \quad (4.22)$$

A formulação fraca associada à Eq.(4.22) leva em consideração que: u pertence ao espaço de Raviart-Thomas construído anteriormente (veja a Eq.(4.5)); v e q são constantes no elemento E , assumindo aí os valores v_E e q_E , respectivamente. A partir daí, lembrando que o divergente de W_β é o inverso da área de E , Eq.(4.13), obtém-se que

$$\sum_{\beta} u_{E,\beta} \iint_E \nabla \cdot W_\beta d\mathbf{x} = q_E h_x h_y.$$

Assim, a formulação fraca desejada é dada por

$$\sum_{\beta} u_{E,\beta} = q_E h_x h_y \equiv \Phi_E. \quad (4.23)$$

Utilizando as expressões das componentes ortogonais do fluxo dadas na Eq.(4.19), a equação anterior torna-se

$$\sum_{\beta} \left\{ a_E p_E s_{E,\beta} - a_E \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} \right\} = \Phi_E \quad \text{ou} \quad a_E p_E \sum_{\beta} s_{E,\beta} - a_E \sum_{\beta} \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} = \Phi_E.$$

Denote por S_E o somatório $\sum_{\beta} s_{E,\beta}$ e considere os comentários feitos antes da Eq.(4.19), para obter

$$a_E p_E S_E - a_E \sum_{\alpha} s_{E,\alpha} \ell_{E,\alpha} = \Phi_E. \quad (4.24)$$

4.8 Formulação híbrida - eliminação da variável pressão

Com a finalidade de se eliminar a variável pressão p_E do sistema de equações, defina a matriz $\sigma_E = (\sigma_{E,\beta\alpha})$, com $\beta, \alpha \in \{R, L, U, D\}$, onde $\sigma_{E,\beta\alpha} = s_{E,\alpha} s_{E,\beta} (S_E)^{-1}$. Observe que tal

matriz é simétrica. Sabendo que $s_{E,\beta} = 6r_\beta$ (veja o parágrafo após a Eq.(4.18)), tem-se então que:

$$S_E = 12 \cdot (r + r^{-1}) = 12 \cdot \left[\frac{r^2 + 1}{r} \right]. \text{ Assim, obtém-se que}$$

$$(\sigma_{E,\beta\alpha}) = \left[\frac{3r}{r^2 + 1} \right] r_\alpha r_\beta \text{ onde } \begin{cases} r_\alpha r_\beta = (r_\beta)^2, & \text{se } \alpha = \beta \text{ ou } \alpha = \beta' \\ r_\alpha r_\beta = 1, & \text{se } \alpha = \beta^\perp. \end{cases}$$

Desta forma, segue que

$$\sigma_E = 3 \cdot \left(\frac{r}{r^2 + 1} \right) \cdot \begin{bmatrix} r^{-2} & r^{-2} & 1 & 1 \\ r^{-2} & r^{-2} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & r^2 & r^2 \\ 1 & 1 & r^2 & r^2 \end{bmatrix}.$$

Com a notação anterior, pode-se escrever a Eq.(4.24) da seguinte forma

$$a_E p_{E S_{E,\beta}} = a_E \sum_{\alpha} \left\{ s_{E,\alpha} s_{E,\beta} (S_E)^{-1} \ell_{E,\alpha} \right\} + \Phi_{E S_{E,\beta}} (S_E)^{-1} = a_E \sum_{\alpha} \sigma_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} + \Phi_{E S_{E,\beta}} (S_E)^{-1}.$$

Seja \tilde{E} o elemento vizinho de E em relação a uma aresta β qualquer. Então, substituindo-se os valores de $a_E p_{E S_{E,\beta}}$ e $a_{\tilde{E}} p_{\tilde{E} S_{\tilde{E},\beta'}}$ na Eq.(4.21) (continuidade do fluxo) obtém-se que

$$a_{\tilde{E}} \sum_{\alpha} \sigma_{\tilde{E},\beta' \alpha} \ell_{\tilde{E},\alpha} + \Phi_{\tilde{E} S_{\tilde{E},\beta'}} (S_{\tilde{E}})^{-1} + a_E \sum_{\alpha} \sigma_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} + \Phi_{E S_{E,\beta}} (S_E)^{-1} = a_{\tilde{E}} \sum_{\alpha} \hat{A}_{\tilde{E},\beta' \alpha} \ell_{\tilde{E},\alpha} + a_E \sum_{\alpha} \hat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha}.$$

Ou seja, tem-se que

$$a_E \sum_{\alpha} \left(\hat{A}_{E,\beta\alpha} - \sigma_{E,\beta\alpha} \right) \ell_{E,\alpha} + a_{\tilde{E}} \sum_{\alpha} \left(\hat{A}_{\tilde{E},\beta' \alpha} - \sigma_{\tilde{E},\beta' \alpha} \right) \ell_{\tilde{E},\alpha} = \Phi_{E S_{E,\beta}} (S_E)^{-1} + \Phi_{\tilde{E} S_{\tilde{E},\beta'}} (S_{\tilde{E}})^{-1}. \quad (4.25)$$

De acordo com as definições anteriores é fácil mostrar que $S_E = S_{\tilde{E}}$ e que $\sigma_E = \sigma_{\tilde{E}}$.

Se β for uma aresta na fronteira do domínio denominada do tipo Neumann, na qual se conhece a componente ortogonal do fluxo $u_{E,\beta}$ (condição de fronteira do tipo Neumann), então a equação envolvendo apenas os Multiplicadores de Lagrange é obtida substituindo-se o valor de $a_E p_{E S_{E,\beta}}$ na Eq.(4.19). Ou seja,

$$a_E \sum_{\alpha} \left(\hat{A}_{E,\beta\alpha} - \sigma_{E,\beta\alpha} \right) \ell_{E,\alpha} = \Phi_{E S_{E,\beta}} (S_E)^{-1} - u_{E,\beta}. \quad (4.26)$$

Impondo uma condição de Dirichlet na fronteira direita do domínio Ω , $p = 0$, por exemplo, e uma condição de fluxo nulo ($u_{E,\beta} = 0$, se β for uma aresta do tipo Neumann) nas demais fronteiras do domínio, obtém-se um sistema linear com matriz simétrica e definida positiva. As

incógnitas deste sistema são os Multiplicadores de Lagrange, conforme as Eqs.(4.25) e (4.26).

Resolvendo-se o sistema linear, os Multiplicadores de Lagrange são obtidos e a partir deles é possível calcular, em cada elemento E , a pressão (através da Eq.(4.24)) e, também, as componentes ortogonais do fluxo (através da Eq.(4.19)).

4.9 Formulação híbrida usando um tensor de permeabilidade

O objetivo agora é utilizar um tensor $K = K(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} k_{11} & k \\ k & k_{22} \end{bmatrix}$, simétrico e definido positivo, na Eq.(4.1) e seguir os mesmos passos desenvolvidos nas seções anteriores para se obter a formulação fraca desta equação. Neste caso, é melhor considerar a lei de Darcy como segue

$$\mu K^{-1}u = -\nabla p, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.27)$$

O inverso do tensor K é dado por $K^{-1} = \begin{bmatrix} k_{22} & -k \\ -k & k_{11} \end{bmatrix} \frac{1}{\det(K)}$.

Considerando o mesmo espaço de Raviart-Thomas construído anteriormente, a formulação fraca da Eq.(4.27) é dada abaixo, antes, porém, note que μ é constante no elemento E , assumindo aí o valor μ_E

$$\mu_E \sum_{\alpha} u_{\alpha} \iint_E \left[K^{-1}(W_{\alpha})^T \right] \cdot W_{\beta} d\mathbf{x} = - \iint_E \nabla p \cdot W_{\beta} d\mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.28)$$

A troca de variável apresentada anteriormente (logo após a Eq.(4.6)) é utilizada novamente na integral do lado esquerdo da Eq.(4.28). Neste caso, a integral é resolvida no quadrado $\varepsilon = [0, 1] \times [0, 1]$ e, conseqüentemente, os vetores W_{α} correspondem àqueles das Eqs.(4.7) e (4.8). Observe que o lado direito da Eq.(4.28) é o mesmo da Eq.(4.6).

A relação entre as componentes ortogonais do fluxo, os Multiplicadores de Lagrange e a pressão é obtida por um procedimento análogo ao usado na Eq.(4.6). Para obter tal relação, lembre-se de que $W_{\alpha} = (W_{\alpha,1}, W_{\alpha,2})$ e considere as notações

$$k_2 = \frac{k_{22}}{\det(K)}; \quad k_1 = \frac{k_{11}}{\det(K)} \quad \text{e} \quad \mathbf{k} = \frac{k}{\det(K)}.$$

Assim, tem-se que $K^{-1}(W_{\alpha})^T = (k_2 W_{\alpha,1} - \mathbf{k} W_{\alpha,2}, k_1 W_{\alpha,2} - \mathbf{k} W_{\alpha,1})^T$. Desta forma, segue que

$$\left[K^{-1}(W_{\alpha})^T \right] \cdot W_{\beta} = k_2 W_{\alpha,1} W_{\beta,1} - \mathbf{k} W_{\alpha,2} W_{\beta,1} + k_1 W_{\alpha,2} W_{\beta,2} - \mathbf{k} W_{\alpha,1} W_{\beta,2}. \quad (4.29)$$

Na formulação fraca da Eq.(4.28), os elementos do tensor K^{-1} são considerados funções

constantes em cada elemento E , cujos valores destas constantes são indicados por $k_{E,2}$; $k_{E,1}$ e k_E . Para simplificar a notação foi suprimido o subscrito E na Eq.(4.29). Daqui para frente este subscrito será suprimido até o momento em que for fundamental a sua utilização.

4.10 Construção das matrizes A_E e $(A_E)^{-1}$

Nesta seção, os elementos da matriz A_E são dados por $A_{E,\beta\alpha} = h_x h_y \iint_{\varepsilon} \left[K^{-1}(W_\alpha)^T \right] \cdot W_\beta d\chi d\gamma$, onde tem-se que $\varepsilon = [0, 1] \times [0, 1]$. A construção da matriz A_E vai se basear nas definições referentes às arestas de um dado elemento E , feitas na seção (4.5), e nas propriedades subsequentes expressas nas Eqs.(4.9), (4.10) e (4.11). Os passos abaixo conduzirão à matriz desejada.

Passo 1 - Elementos da diagonal. Para a construção dos elementos $A_{E,\beta\beta}$, considere os seguintes casos:

i) $\beta = R$ ou $\beta = L$;

ii) $\beta = U$ ou $\beta = D$.

No primeiro caso (i), tem-se que $W_{\beta,2} = 0$. No segundo caso (ii), tem-se que $W_{\beta,1} = 0$. Assim, utilizando a Eq.(4.29) juntamente com as informações anteriores, conclui-se que

$$A_{E,\beta\beta} = h_x h_y k_2 \iint_{\varepsilon} (W_{\beta,1})^2 d\chi d\gamma = h_x h_y k_2 \int_0^1 (W_{\beta,1})^2 d\chi, \quad \text{se } \beta = R \text{ ou } \beta = L;$$

$$A_{E,\beta\beta} = h_x h_y k_1 \iint_{\varepsilon} (W_{\beta,2})^2 d\chi d\gamma = h_x h_y k_1 \int_0^1 (W_{\beta,2})^2 d\gamma, \quad \text{se } \beta = U \text{ ou } \beta = D.$$

Passo 2 - Elementos da forma $A_{E,\beta\beta^\perp}$. Considerando arestas transversais pode-se afirmar pela Eq.(4.10) que $W_{\beta,i} W_{\beta^\perp,i} = 0$ com $i \in \{1, 2\}$. Usando novamente a Eq.(4.29), segue-se que

$$A_{E,\beta\beta^\perp} = -h_x h_y \mathbf{k} \iint_{\varepsilon} \left[W_{\beta^\perp,2} W_{\beta,1} + W_{\beta^\perp,1} W_{\beta,2} \right] d\chi d\gamma.$$

Observe que, se $\beta = R$ ou $\beta = L$ então $W_{\beta,2} = 0$. Desta forma, tem-se que

$$\beta^\perp = U \implies A_{E,\beta\beta^\perp} = -h_x h_y \mathbf{k} \iint_{\varepsilon} \left[\left(\frac{\gamma}{h_x} \right) W_{\beta,1} \right] d\chi d\gamma = -h_y \mathbf{k} \iint_{\varepsilon} \gamma W_{\beta,1} d\chi d\gamma;$$

$$\beta^\perp = D \implies A_{E,\beta\beta^\perp} = -h_x h_y \mathbf{k} \iint_{\varepsilon} \left[\left(\frac{\gamma - 1}{h_x} \right) W_{\beta,1} \right] d\chi d\gamma = -h_y \mathbf{k} \iint_{\varepsilon} (\gamma - 1) W_{\beta,1} d\chi d\gamma;$$

Agora, se $\beta = U$ ou $\beta = D$ então $W_{\beta,1} = 0$. Assim, segue-se que

$$\beta^\perp = R \implies A_{E,\beta\beta^\perp} = -h_x h_y \mathbf{k} \iint_\varepsilon \left[\left(\frac{\chi}{h_y} \right) W_{\beta,2} \right] d\chi d\gamma = -h_x \mathbf{k} \iint_\varepsilon \chi W_{\beta,2} d\chi d\gamma;$$

$$\beta^\perp = L \implies A_{E,\beta\beta^\perp} = -h_x h_y \mathbf{k} \iint_\varepsilon \left[\left(\frac{\chi-1}{h_y} \right) W_{\beta,2} \right] d\chi d\gamma = -h_x \mathbf{k} \iint_\varepsilon (\chi-1) W_{\beta,2} d\chi d\gamma.$$

Passo 3 - Elementos da forma $A_{E,\beta\beta'}$. Consultando a Eq.(4.11) tem-se que para arestas opostas vale a seguinte propriedade

$$\begin{cases} W_{\beta,2} = W_{\beta',2} = 0, & \text{se } \beta \in \{R, L\} \\ W_{\beta,1} = W_{\beta',1} = 0, & \text{se } \beta \in \{U, D\}. \end{cases}$$

Logo, pela Eq.(4.29) tem-se

$$A_{E,\beta\beta'} = h_x h_y k_2 \iint_\varepsilon W_{\beta',1} W_{\beta,1} d\chi d\gamma = h_x h_y k_2 \int_0^1 W_{\beta',1} W_{\beta,1} d\chi, \quad \text{se } \beta = R \text{ ou } \beta = L$$

$$A_{E,\beta\beta'} = h_x h_y k_1 \iint_\varepsilon W_{\beta',2} W_{\beta,2} d\chi d\gamma = h_x h_y k_1 \int_0^1 W_{\beta',2} W_{\beta,2} d\chi, \quad \text{se } \beta = U \text{ ou } \beta = D.$$

De acordo com os cálculos anteriores, e observando os comentários feitos após a Eq.(4.12), existe uma analogia entre os elementos da matriz A_E associados às linhas que correspondem às arestas R e L e os elementos associados às linhas correspondentes às arestas U e D . É fácil perceber, portanto, que as integrais que aparecem no desenvolvimento dos três passos anteriores são dos seguintes tipos:

Passo 1:

$$\int_0^1 \chi^2 d\chi = \frac{1}{3}$$

$$\int_0^1 (\chi-1)^2 d\chi = - \int_1^0 x^2 dx = \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3} \quad \text{com troca de variável } x = 1 - \chi.$$

Passo 2:

$$\int_0^1 \int_0^1 \chi \gamma d\chi d\gamma = \frac{1}{4};$$

$$\int_0^1 \int_0^1 \chi(\gamma-1) d\chi d\gamma = - \int_0^1 \int_0^1 \chi y d\chi dy = -\frac{1}{4} \quad \text{com troca de variável } y = 1 - \gamma;$$

$$\int_0^1 \int_0^1 (\chi-1)\gamma d\chi d\gamma = - \int_0^1 \int_0^1 x y dx dy = -\frac{1}{4} \quad \text{com troca de variáveis } x = \gamma \text{ e } y = \chi;$$

$$\int_0^1 \int_0^1 (\chi-1)(\gamma-1) d\chi d\gamma = \int_0^1 \int_0^1 x y dx dy = \frac{1}{4} \quad \text{com troca de variáveis } x = 1 - \chi \text{ e } y = 1 - \gamma.$$

Passo 3:

$$\int_0^1 \chi(\chi - 1)d\chi = -\frac{1}{6}.$$

Com estas considerações e lembrando que $r = \frac{h_x}{h_y}$ a matriz A_E é dada por

$$A_E = \begin{bmatrix} r(k_2/3) & -r(k_2/6) & -\mathbf{k}/4 & \mathbf{k}/4 \\ -r(k_2/6) & r(k_2/3) & \mathbf{k}/4 & -\mathbf{k}/4 \\ -\mathbf{k}/4 & \mathbf{k}/4 & r^{-1}(k_1/3) & -r^{-1}(k_1/6) \\ \mathbf{k}/4 & -\mathbf{k}/4 & -r^{-1}(k_1/6) & r^{-1}(k_1/3) \end{bmatrix}. \quad (4.30)$$

Observe que esta matriz pode ser escrita na forma de blocos $A_E = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$, onde tem-se que

$$B_{11} = k_2 \left(\frac{r}{6}\right) \cdot M \quad \text{e} \quad B_{22} = k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) \cdot M$$

$$M = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B_{12} = B_{21} = \left(-\frac{\mathbf{k}}{4}\right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Agora com o objetivo de construir a matriz $(A_E)^{-1}$ observe que a identidade $(A_E)(A_E)^{-1} = I_4$ (matriz identidade de ordem 4) permite calcular a matriz $(A_E)^{-1}$ através da resolução de quatro sistemas lineares de ordem quatro. Porém, a estrutura de blocos da matriz A_E conduzirá a uma simplificação na obtenção da matriz inversa e, de fato, um único sistema de ordem três será resolvido. Primeiramente, observe que $(A_E)^{-1}$ é simétrica, já que a matriz A_E é simétrica. Desta forma, pode-se escrever

$$(A_E)^{-1} = \begin{bmatrix} B_1 & B \\ B & B_2 \end{bmatrix}, \quad \text{onde} \quad B_1 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ y_3 & y_4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}.$$

Seguindo as notações anteriores tem-se que $(A_E)(A_E)^{-1} = I_4$ dá origem aos quatro sistemas lineares seguintes:

$$k_2 \left(\frac{r}{6}\right) \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.31)$$

$$\left(-\frac{\mathbf{k}}{4}\right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} + k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.32)$$

$$k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ y_3 & y_4 \end{bmatrix} - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.33)$$

$$\left(-\frac{\mathbf{k}}{4}\right) \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ y_3 & y_4 \end{bmatrix} + k_2 \left(\frac{r}{6}\right) \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.34)$$

Observe que os sistemas lineares dados nas Eqs.(4.31) e (4.32) são análogas aos dados nas Eqs.(4.33) e (4.34); basta identificar k_2 com k_1 , r com r^{-1} e x_i com y_i , com $i \in \{1, 2, 3, 4\}$. O sistema linear com incógnitas x_1 , x_3 , a e c tem as seguintes equações

$$(2x_1 - x_3)k_2 \left(\frac{r}{6}\right) - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) (a - c) = 1; \quad (4.35)$$

$$(-x_1 + 2x_3)k_2 \left(\frac{r}{6}\right) - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) (-a + c) = 0; \quad (4.36)$$

$$(x_1 - x_3)(-1) \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) + k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) (2a - c) = 0; \quad (4.37)$$

$$(-x_1 + x_3)(-1) \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) + k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) (-a + 2c) = 0. \quad (4.38)$$

Somando as Eqs.(4.37) e (4.38) obtém-se que $a + c = 0$, ou seja, $a = -c$. Assim, o sistema anterior é equivalente ao sistema

$$(2x_1 - x_3)k_2 \left(\frac{r}{6}\right) - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) (-2c) = 1; \quad (4.39)$$

$$(-x_1 + 2x_3)k_2 \left(\frac{r}{6}\right) - \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) (2c) = 0; \quad (4.40)$$

$$(x_1 - x_3)(-1) \left(\frac{\mathbf{k}}{4}\right) + k_1 \left(\frac{r^{-1}}{6}\right) (-3c) = 0. \quad (4.41)$$

As equações envolvendo as incógnitas x_2 , x_4 , b e d são análogas às Eqs.(4.35), (4.36), (4.37) e (4.38). Utilizando o mesmo procedimento anterior (e concluindo que $b = -d$), um sistema de equações similares às Eqs.(4.39), (4.40) e (4.41) pode ser obtido fazendo a seguinte identificação: $x_2 = x_3$; $x_4 = x_1$; $d = -c$. Desta forma, se um dos sistemas lineares for resolvido, a solução do outro é imediata.

A solução dos sistemas envolvendo a Eq.(4.31) até a Eq.(4.41) é obtida conforme o procedimento a seguir. Some as Eqs.(4.39) e (4.40) e obtenha $x_1 = 6(k_2r)^{-1} - x_3$; substitua este valor na Eq.(4.40) e determine $x_3 = (k_2r)^{-1}(2 + \mathbf{k}c)$. Substitua os dois valores anteriores na Eq.(4.41) e conclua que $c = -\frac{\mathbf{k}}{\det(K^{-1})} = -\mathbf{k}\det(K)$, ou seja, $c = -k$ (lembre-se de que K é o tensor dado no início da seção (4.9)). Desta forma, tem-se que $x_3 = (k_2r)^{-1} \left[2\det(K) - k^2 \right]$ e que $x_1 = (k_2r)^{-1} \left[4\det(K) + k^2 \right]$ e, por analogia, conforme as observações anteriores, tem-se $d = -c = k$; $b = -d$; $x_2 = x_3$ e $x_4 = x_1$. Além disto, $y_1 = (k_{11}r^{-1})^{-1} \left[4\det(K) + k^2 \right]$; $y_3 = (k_{11}r^{-1})^{-1} \left[2\det(K) - k^2 \right]$; $y_2 = y_3$ e $y_4 = y_1$.

Assim, a matriz $(A_E)^{-1} = \begin{bmatrix} B_1 & B \\ B & B_2 \end{bmatrix}$ tem a seguinte estrutura

$$B_1 = r^{-1}(k_{22})^{-1}\mathbb{G}; \quad B = k \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$B_2 = r(k_{11})^{-1}\mathbb{G}, \quad \text{onde } \mathbb{G} = \begin{bmatrix} 4\det(K) + k^2 & 2\det(K) - k^2 \\ 2\det(K) - k^2 & 4\det(K) + k^2 \end{bmatrix}.$$

Utilizando a mesma notação da seção (4.5) e recordando que $s_{E,\beta} = \sum_{\alpha} \widehat{A}_{E,\beta\alpha}$ é a soma das linhas (colunas) da matriz $\widehat{A}_E \equiv (A_E)^{-1}$, obtém-se a relação entre as componentes ortogonais do fluxo, a pressão e os Multiplicadores de Lagrange

$$u_{E,\beta} = (\mu_E)^{-1} p_E s_{E,\beta} - (\mu_E)^{-1} \sum_{\alpha} \widehat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha} \quad \forall \beta \in \{R, L, U, D\}.$$

Assim, tem-se que $s_{E,\beta} = 6\det(K)(k_{\beta\beta})^{-1}r_{\beta}$, onde $(k_{\beta\beta})^{-1}r_{\beta} = \begin{cases} (k_{22})^{-1}r^{-1}, & \text{se } \beta \in \{R, L\} \\ (k_{11})^{-1}r, & \text{se } \beta \in \{U, D\}. \end{cases}$

O mesmo procedimento que foi feito considerando-se o elemento E pode ser feito para o elemento vizinho \widetilde{E} (veja a seção (4.6)), porém, neste caso $A_E \neq A_{\widetilde{E}}$, pois o tensor K pode sofrer alterações de um elemento para outro. Isto é, a seguinte situação pode ocorrer $k_{2,E} \neq k_{2,\widetilde{E}}$; $k_{1,E} \neq k_{1,\widetilde{E}}$ e $\mathbf{k}_E \neq \mathbf{k}_{\widetilde{E}}$.

Desta forma, a partir da equação da continuidade do fluxo, $u_{\widetilde{E},\beta'} + u_{E,\beta} = 0$, a seguinte equação é obtida

$$(\mu_{\widetilde{E}})^{-1} p_{\widetilde{E}} s_{\widetilde{E},\beta'} + (\mu_E)^{-1} p_E s_{E,\beta} = (\mu_{\widetilde{E}})^{-1} \sum_{\alpha} \widehat{A}_{\widetilde{E},\beta'\alpha} \ell_{\widetilde{E},\alpha} + (\mu_E)^{-1} \sum_{\alpha} \widehat{A}_{E,\beta\alpha} \ell_{E,\alpha}.$$

4.11 Construção da matriz σ_E

De acordo com a seção (4.7), a formulação fraca da equação elíptica é dada por

$$(\mu_E)^{-1} p_E S_E - (\mu_E)^{-1} \sum_{\alpha} s_{E,\alpha} \ell_{E,\alpha} = \Phi_E$$

onde $S_E = \sum_{\beta} s_{E,\beta} = 12\det(K)(rk_{11}k_{22})^{-1}(k_{22}r^2 + k_{11})$. Analogamente à seção (4.8), a matriz σ_E possui elementos $\sigma_{E,\beta\alpha} = s_{E,\alpha} s_{E,\beta} (S_E)^{-1} = 3\det(K)(rk_{11}k_{22})(k_{22}r^2 + k_{11})^{-1}(k_{\alpha\alpha})^{-1}r_{\alpha}(k_{\beta\beta})^{-1}r_{\beta}$. Note que:

$$(k_{\alpha\alpha})^{-1}r_{\alpha}(k_{\beta\beta})^{-1}r_{\beta} = \begin{cases} (k_{\beta\beta})^{-2}(r_{\beta})^2, & \text{se } \alpha = \beta \text{ ou } \alpha = \beta' \\ (k_{11}k_{22})^{-1}, & \text{se } \alpha = \beta^{\perp} \end{cases}$$

Sejam $R_K = rk_{22} + r^{-1}k_{11}$ e $\theta = \frac{\det(K)}{R_K}$, desta forma, obtém-se:

$$\sigma_E = 3\theta \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix},$$

onde os blocos dois por dois são dados por:

$$C_{11} = r^{-2}k_{11}(k_{22})^{-1}.N; \quad C_{22} = r^2k_{22}(k_{11})^{-1}.N; \quad C_{12} = C_{21} = N, \quad \text{onde } N = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

A eliminação da variável pressão do sistema de equações deduzidas até o momento é feita de modo análogo ao procedimento utilizado na seção (4.8). Ou seja, considerando-se \tilde{E} o elemento vizinho de E em relação a uma aresta β qualquer; substituindo-se os valores deduzidos na formulação fraca da equação elíptica, $(\mu_E)^{-1}p_E s_{E,\beta}$ e $(\mu_{\tilde{E}})^{-1}p_{\tilde{E}} s_{\tilde{E},\beta'}$, na equação de continuidade do fluxo e obtendo-se

$$(\mu_E)^{-1} \sum_{\alpha} \left(\hat{A}_{E,\beta\alpha} - \sigma_{E,\beta\alpha} \right) \ell_{E,\alpha} + (\mu_{\tilde{E}})^{-1} \sum_{\alpha} \left(\hat{A}_{\tilde{E},\beta'\alpha} - \sigma_{\tilde{E},\beta'\alpha} \right) \ell_{\tilde{E},\alpha} = \Phi_{E s_{E,\beta}} (S_E)^{-1} + \Phi_{\tilde{E} s_{\tilde{E},\beta'}} (S_{\tilde{E}})^{-1}.$$

De acordo com as observações feitas no final da seção anterior, o tensor K pode variar de um elemento para outro; logo, em geral, tem-se que $A_E \neq A_{\tilde{E}}$; $S_E \neq S_{\tilde{E}}$ e $\sigma_E \neq \sigma_{\tilde{E}}$.

4.12 Análise do sistema linear dos Multiplicadores de Lagrange

Esta seção é dedicada à análise dos sistemas lineares oriundos das técnicas de discretização utilizadas na formulação fraca das equações diferenciais parciais associadas ao cálculo da velocidade de Darcy. Nesta análise, a permeabilidade K será considerada um escalar ou um tensor. O objetivo é apresentar um estudo que garantirá que as matrizes dos sistemas lineares que têm como incógnitas os Multiplicadores de Lagrange são simétricas e definidas positivas.

A Fig.(4.3) abaixo exhibe um exemplo de numeração das arestas correspondentes à partição do domínio em malhas retangulares. E, associada a esta numeração, obtém-se a matriz global dos Multiplicadores de Lagrange, Fig.(4.4), na qual somente a diagonal e a parte inferior são exibidas, pois a matriz é simétrica, sendo que \mathbf{X} corresponde aos elementos não nulos da matriz e os espaços em branco representam elementos nulos.

	13	17	21
7	12 8	16 9	20
4	11 5	15 6	19
1	10 2	14 3	18

Figura 4.3: Modelo de numeração das arestas.

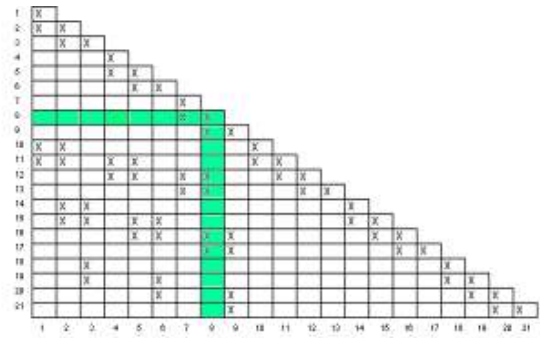


Figura 4.4: Matriz global associada à numeração dada na Fig.(4.3).

Para efeitos computacionais, a matriz global é armazenada em submatrizes construídas da seguinte forma: para cada tipo de aresta, associa-se uma matriz que vai armazenar os elementos da matriz global pertencentes à parte triangular inferior e à diagonal. As arestas são dos seguintes tipos:

Definição 4.4 (α_L) : numeração das arestas que pertencem à fronteira vertical esquerda do domínio retangular.

Definição 4.5 (α_R) : numeração das arestas verticais que estão no interior do domínio, exceto aquelas (arestas 3, 6 e 9, na Fig.(4.3)) correspondentes à última interface vertical antes da fronteira direita do domínio.

Definição 4.6 (α_{FR}) : numeração das arestas verticais que pertencem à última interface antes da fronteira direita do domínio.

Definição 4.7 (α_D) : numeração das arestas que pertencem à fronteira inferior do domínio retangular.

Definição 4.8 (α_U) : numeração das arestas horizontais que estão no interior do domínio retangular.

Definição 4.9 (α_{FU}) : numeração das arestas horizontais que pertencem à fronteira superior do domínio retangular.

Na fronteira direita do domínio é imposta a condição de Dirichlet, isto é, $\ell_R = 0$ (pressão nula) e nas demais fronteiras a condição imposta é a de fluxo nulo.

Considere, por exemplo, a aresta de número 8 na Fig.(4.3), (veja o destaque na Fig.(4.4)), trata-se de uma aresta interna do tipo α_R . Observe que esta aresta está relacionada com as seguintes arestas: 7, 8, 9, 12, 13, 16, 17, as quais pertencem aos elementos que contém a aresta 8. As equações dos sistemas lineares associadas à aresta 8 (fórmula de sete pontos) são dadas por:

$$\begin{aligned} & \ell_{E,L} r^{-1} a_E \left\{ 2 - \left[\frac{3}{r^2 + 1} \right] \right\} + \ell_{E,R} r^{-1} (a_E + a_{\tilde{E}}) \left\{ 4 - \left[\frac{3}{r^2 + 1} \right] \right\} + \ell_{\tilde{E},R} r^{-1} a_{\tilde{E}} \left\{ 2 - \left[\frac{3}{r^2 + 1} \right] \right\} - \\ & \ell_{E,D} a_E \left[\frac{3r}{r^2 + 1} \right] - \ell_{E,U} a_E \left[\frac{3r}{r^2 + 1} \right] - \ell_{\tilde{E},D} a_{\tilde{E}} \left[\frac{3r}{r^2 + 1} \right] - \ell_{\tilde{E},U} a_{\tilde{E}} \left[\frac{3r}{r^2 + 1} \right] = (q_E + q_{\tilde{E}}) \left[\frac{h_x h_y}{2(r^2 + 1)} \right]. \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} & (\mu_E)^{-1} \left\{ \ell_{E,L} \left[(k_{22} r)^{-1} \left(2 \det(K) - k^2 \right) - 3 \theta r^{-2} k_{11} (k_{22})^{-1} \right] + \ell_{E,R} \left[(k_{22} r)^{-1} \left(4 \det(K) + k^2 \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. 3 \theta r^{-2} k_{11} (k_{22})^{-1} \right] - \ell_{E,D} \left[k + 3 \theta \right] + \ell_{E,U} \left[k - 3 \theta \right] \right\} + (\mu_{\tilde{E}})^{-1} \left\{ \ell_{\tilde{E},L} \left[(k_{\tilde{E},22} r)^{-1} \left(4 \det(K_{\tilde{E}}) + (k_{\tilde{E}})^2 \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. 3 \theta \tilde{r}^{-2} k_{\tilde{E},11} (k_{\tilde{E},22})^{-1} \right] + \ell_{\tilde{E},R} \left[(k_{\tilde{E},22} r)^{-1} \left(2 \det(K_{\tilde{E}}) - (k_{\tilde{E}})^2 \right) - 3 \theta \tilde{r}^{-2} k_{\tilde{E},11} (k_{\tilde{E},22})^{-1} \right] + \right. \\ & \left. \ell_{\tilde{E},D} \left[k_{\tilde{E}} + 3 \theta_{\tilde{E}} \right] - \ell_{\tilde{E},U} \left[k_{\tilde{E}} - 3 \theta_{\tilde{E}} \right] \right\} = \left(\frac{1}{2} \right) h_x h_y \left[\frac{q_E k_{11}}{r^2 k_{22} + k_{11}} + \frac{q_{\tilde{E}} k_{\tilde{E},11}}{r^2 k_{\tilde{E},22} + k_{\tilde{E},11}} \right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

A Eq.(4.42) foi obtida considerando-se K um escalar (veja a Eq.(4.25)); a Eq.(4.43) foi obtida considerando-se K um tensor. Observe que $\ell_{E,R} = \ell_{\tilde{E},L}$.

Com a finalidade de se construir a matriz global do sistema linear dos Multiplicadores de Lagrange, considere a numeração como a da Fig.(4.3) para as arestas. Sejam $n = n_x$ e $m = n_y$ (veja a seção (4.4)), então o vetor global de incógnitas será composto por blocos de vetores do tipo

$$\left(\ell_{L,1j}, \ell_{R,1j}, \ell_{R,2j}, \dots, \ell_{R,(n-1)j} \right)^T \text{ e do tipo } \left(\ell_{D,i1}, \ell_{U,i1}, \ell_{U,i2}, \dots, \ell_{U,im} \right)^T,$$

com $1 \leq j \leq n_y$ e $1 \leq i \leq n_x$, respectivamente. A notação $\ell_{\alpha,ij}$ refere-se ao multiplicador $\ell_{E,\alpha}$ associado ao elemento $E = E_{ij}$, conforme a Fig.(4.2).

Exemplo 4.2 Considere o modelo de numeração das arestas dada na Fig.(4.3), para esta numeração obtém-se a seguinte partição do domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, dada na Fig.(4.5) abaixo, constituída pelos elementos $E = E_{i,j}$ com $i, j \in \{1, 2, 3\}$.

$E_{1,3}$	$E_{2,3}$	$E_{3,3}$
$E_{1,2}$	$E_{2,2}$	$E_{3,2}$
$E_{1,1}$	$E_{2,1}$	$E_{3,1}$

Figura 4.5: Malha de elementos associada à numeração dada na Fig.(4.3).

Observe que ao elemento $E = E_{i,j}$ estão associados os Multiplicadores de Lagrange $\ell_{\alpha,ij}$ com $\alpha \in \{L, R, U, D\}$ e $i, j \in \{1, 2, 3\}$. Por exemplo, associado ao elemento $E = E_{3,2}$ tem-se os seguintes Multiplicadores de Lagrange: $\ell_{L,32}$, $\ell_{R,32}$, $\ell_{U,32}$, $\ell_{D,32}$, ressaltando que $\ell_{L,32} = \ell_{R,22}$, $\ell_{U,32} = \ell_{D,33}$, $\ell_{D,32} = \ell_{U,31}$, pois $E_{2,2}$, $E_{3,1}$, $E_{3,3}$ são elementos vizinhos de $E_{3,2}$ e que $\ell_{R,32} = 0$, pois $E_{3,2}$ pertence à fronteira direita do domínio Ω na qual foi imposta a condição de Dirichlet (pressão nula).

Associada à malha de elementos dada na Fig.(4.5) tem-se os Multiplicadores de Lagrange dados na Fig.(4.6) abaixo. Valendo ressaltar que devido à continuidade da pressão em arestas adjacentes de elementos vizinhos e à condição de Dirichlet imposta na fronteira direita do domínio, valem as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} \ell_{R,11} &= \ell_{L,21}, \quad \ell_{R,21} = \ell_{L,31}, \quad \ell_{R,31} = 0; \\ \ell_{U,11} &= \ell_{D,12}, \quad \ell_{U,21} = \ell_{D,22}, \quad \ell_{U,31} = \ell_{D,32}, \quad \ell_{R,32} = 0; \\ \ell_{R,12} &= \ell_{L,22}, \quad \ell_{R,22} = \ell_{L,32}, \quad \ell_{R,32} = 0; \\ \ell_{U,12} &= \ell_{D,13}, \quad \ell_{U,22} = \ell_{D,23}, \quad \ell_{U,32} = \ell_{D,33}, \quad \ell_{R,32} = 0; \\ \ell_{R,13} &= \ell_{L,23}, \quad \ell_{R,23} = \ell_{L,33}, \quad \ell_{R,33} = 0, \end{aligned}$$

como podem ser observadas abaixo

Ω	$\ell_{U,13}$	$\ell_{U,23}$	$\ell_{U,33}$
$\ell_{L,13}$	$\ell_{R,13}$	$\ell_{L,23}$	$\ell_{R,23}$
	$\ell_{D,13}$	$\ell_{D,23}$	$\ell_{D,33}$
	$\ell_{U,12}$	$\ell_{U,22}$	$\ell_{U,32}$
$\ell_{L,12}$	$\ell_{R,12}$	$\ell_{L,22}$	$\ell_{R,22}$
	$\ell_{D,12}$	$\ell_{D,22}$	$\ell_{D,32}$
	$\ell_{U,11}$	$\ell_{U,21}$	$\ell_{U,31}$
$\ell_{L,11}$	$\ell_{R,11}$	$\ell_{L,21}$	$\ell_{R,21}$
	$\ell_{D,11}$	$\ell_{D,21}$	$\ell_{D,31}$

Figura 4.6: Malha de Multiplicadores de Lagrange associada à malha de elementos dada na Fig.(4.5).

Dessa forma, o vetor global \mathcal{L} formado pelos Multiplicadores de Lagrange associado à numeração dada na Fig.(4.3) é formado pelos dois blocos de vetores

$$\left(\ell_{L,11}, \ell_{R,11}, \ell_{R,21}, \ell_{L,12}, \ell_{R,12}, \ell_{R,22}, \ell_{L,13}, \ell_{R,13}, \ell_{R,23} \right)^T,$$

$$\left(\ell_{D,11}, \ell_{U,11}, \ell_{U,12}, \ell_{U,13}, \ell_{D,21}, \ell_{U,21}, \ell_{U,22}, \ell_{U,23}, \ell_{D,31}, \ell_{U,31}, \ell_{U,32}, \ell_{U,33} \right)^T.$$

Seja $A_{\beta,\alpha}$ um elemento da matriz global; nesta notação, β e α dizem respeito tanto à numeração da aresta como também ao tipo de aresta (L , R , D ou U) associada ao elemento

que a contém. Considerando a Fig.(4.3), por exemplo, $A_{1,10}$ está associado às arestas $\alpha_L = 1$ e $\alpha_D = 10$, ambas contidas no elemento $E_{1,1}$; $A_{8,8}$ está associado à aresta $\alpha_R = 8$, que está contida tanto no elemento $E_{1,3}$ (aresta direita, associada ao multiplicador ℓ_R) quanto no $E_{2,3}$ (aresta esquerda, associada ao multiplicador ℓ_L). Assim, os elementos da matriz global podem ser escritos como $A_{\beta,\alpha} = \sum_E (\mu_E)^{-1} \left(\widehat{A}_{E,\beta\alpha} - \sigma_{E,\beta\alpha} \right)$; o somatório é realizado em todos os elementos E que contêm ambas as arestas α e β . Como as matrizes $\widehat{A}_E = (A_E)^{-1}$ e σ_E são simétricas então $A_{\beta,\alpha} = A_{\alpha,\beta}$, ou seja, a matriz global dos Multiplicadores é simétrica.

Seja \mathcal{L} o vetor global de incógnitas composto por blocos de vetores, conforme explicado anteriormente. Baseado nas Eqs.(4.42) e (4.43) tem-se que o produto da matriz global, A , pelo vetor \mathcal{L} é um vetor composto pelos blocos de vetores do tipo:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha,1j} \ell_{\alpha,1j}, \sum_{\alpha} d_{\alpha,1j} \ell_{\alpha,1j} + \sum_{\alpha} d_{\alpha,2j} \ell_{\alpha,2j}, \dots, \sum_{\alpha} d_{\alpha,ij} \ell_{\alpha,ij} + \sum_{\alpha} d_{\alpha,(i+1)j} \ell_{\alpha,(i+1)j}, \dots, \right. \\ & \left. \sum_{\alpha} d_{\alpha,(n-2)j} \ell_{\alpha,(n-2)j} + \sum_{\alpha} d_{\alpha,(n-1)j} \ell_{\alpha,(n-1)j}, \sum_{\alpha} e_{\alpha,(n-1)j} \ell_{\alpha,(n-1)j} + \sum_{\alpha} e_{\alpha,nj} \ell_{\alpha,nj} \right)^T; \\ & \left(\sum_{\alpha} f_{\alpha,i1} \ell_{\alpha,i1}, \sum_{\alpha} g_{\alpha,i1} \ell_{\alpha,i1} + \sum_{\alpha} g_{\alpha,i2} \ell_{\alpha,i2}, \dots, \sum_{\alpha} g_{\alpha,ij} \ell_{\alpha,ij} + \sum_{\alpha} g_{\alpha,i(j+1)} \ell_{\alpha,i(j+1)}, \dots, \right. \\ & \left. \sum_{\alpha} g_{\alpha,i(m-1)} \ell_{\alpha,i(m-1)} + \sum_{\alpha} g_{\alpha,im} \ell_{\alpha,im}, \sum_{\alpha} w_{\alpha,im} \ell_{\alpha,im} \right)^T; \end{aligned}$$

com $1 \leq j \leq n_y$ e $1 \leq i \leq n_x$. Note que c_{α} , d_{α} , e_{α} , f_{α} , g_{α} e w_{α} são os coeficientes de ℓ_{α} referentes a um elemento $E = E_{ij}$.

Desta forma, o produto $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ é dado por:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^m \left\{ \ell_{L,1j} \sum_{\alpha} c_{\alpha,1j} \ell_{\alpha,1j} + \sum_{i=1}^{n-2} \ell_{R,ij} \left(\sum_{\alpha} d_{\alpha,ij} \ell_{\alpha,ij} + \sum_{\alpha} d_{\alpha,(i+1)j} \ell_{\alpha,(i+1)j} \right) + \dots + \right. \\ & \left. \ell_{R,(n-1)j} \left(\sum_{\alpha} e_{\alpha,(n-1)j} \ell_{\alpha,(n-1)j} + \sum_{\alpha} e_{\alpha,nj} \ell_{\alpha,nj} \right) \right\} + \sum_{i=1}^n \left\{ \ell_{D,i1} \sum_{\alpha} f_{\alpha,i1} \ell_{\alpha,i1} + \right. \\ & \left. \sum_{j=1}^{m-1} \ell_{U,ij} \left(\sum_{\alpha} g_{\alpha,ij} \ell_{\alpha,ij} + \sum_{\alpha} g_{\alpha,i(j+1)} \ell_{\alpha,i(j+1)} \right) + \dots + \ell_{U,im} \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha,im} \ell_{\alpha,im} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

4.13 Sistema linear com permeabilidade escalar

Considerando o sistema linear resultante da formulação fraca da equação de Darcy com permeabilidade escalar, demonstrar-se-á que o produto $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ é positivo. Isto será feito utilizando-se a Eq.(4.44) e o lado esquerdo de equações análogas à Eq.(4.42), que estão associadas aos diferentes tipos de arestas. Antes, porém, observe que

$$\frac{r^{-1}}{r(r^2 + 1)^{-1}} = 1 + r^{-2} \quad \text{e} \quad \frac{r}{r(r^2 + 1)^{-1}} = 1 + r^2.$$

Os diferentes tipos de arestas são:

Arestas Verticais do tipo α_L . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos (veja a equação (4.42)) para arestas verticais do tipo α_L é dado por:

$$a_E \left\{ \left[4r^{-1} - \left(\frac{3r}{r^2+1} \right) r^{-2} \right] \ell_{E,L} + \left[2r^{-1} - \left(\frac{3r}{r^2+1} \right) r^{-2} \right] \ell_{E,R} - \left(\frac{3r}{r^2+1} \right) \ell_{E,D} - \left(\frac{3r}{r^2+1} \right) \ell_{E,U} \right\} =$$

$$a_E r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ \left[4 + r^{-2} \right] \ell_{E,L} + \left[2 - r^{-2} \right] \ell_{E,R} - 3\ell_{E,D} - 3\ell_{E,U} \right\}.$$

Arestas Verticais do tipo α_R . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas verticais do tipo α_R é dado por:

$$a_E r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ \left[2 - r^{-2} \right] \ell_{E,L} + \left[4 + r^{-2} \right] \ell_{E,R} - 3\ell_{E,D} - 3\ell_{E,U} \right\} + a_{\tilde{E}} r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ \left[4 + r^{-2} \right] \ell_{\tilde{E},L} + \left[2 - r^{-2} \right] \ell_{\tilde{E},R} - 3\ell_{\tilde{E},D} - 3\ell_{\tilde{E},U} \right\}.$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},L} = \ell_{E,R}$.

Arestas Verticais do tipo α_{FR} . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas verticais do tipo α_{FR} é dado por:

$$a_E r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ \left[2 - r^{-2} \right] \ell_{E,L} + \left[4 + r^{-2} \right] \ell_{E,R} - 3\ell_{E,D} - 3\ell_{E,U} \right\} + a_{\tilde{E}} r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ \left[4 + r^{-2} \right] \ell_{\tilde{E},L} - 3\ell_{\tilde{E},D} - 3\ell_{\tilde{E},U} \right\}.$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},R} = 0$, pois o Multiplicador encontrar-se-á na fronteira direita do domínio e neste caso é válida a condição de Dirichlet (pressão nula).

Arestas Horizontais do tipo α_D . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_D é dado por:

$$a_{E^*} r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ -3\ell_{E,L} - 3\ell_{E,R} + \left[4 + r^2 \right] \ell_{E,D} + \left[2 - r^2 \right] \ell_{E,U} \right\}.$$

Observe que se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então $\ell_{E,R} = 0$, pois o Multiplicador estará na fronteira direita do domínio, na qual se considera condição de Dirichlet nula para a pressão.

Arestas Horizontais do tipo α_U . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_U é dado por:

$$a_{E^*} r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ -3\ell_{E,L} - 3\ell_{E,R} + \left[2 - r^2 \right] \ell_{E,D} + \left[4 + r^2 \right] \ell_{E,U} \right\} + a_{\tilde{E}} r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ -3\ell_{\tilde{E},L} - 3\ell_{\tilde{E},R} + \right.$$

$$\left[4 + r^2\right] \ell_{\tilde{E},D} + \left[2 - r^2\right] \ell_{\tilde{E},U} \}.$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},D} = \ell_{E,U}$ e se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então $\ell_{E,R} = 0$ e $\ell_{\tilde{E},R} = 0$, porque neste caso não existirá elemento vizinho.

Arestas Horizontais do tipo α_{FU} . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_{FU} é dado por:

$$a_{Er} \left(r^2 + 1\right)^{-1} \left\{ -3\ell_{E,L} - 3\ell_{E,R} + \left[2 - r^2\right] \ell_{E,D} + \left[4 + r^2\right] \ell_{E,U} \right\}.$$

Observe que se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então tem-se que $\ell_{E,R} = 0$.

Para motivar as contas que garantirão que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} > 0$, considere o exemplo com apenas três incógnitas: ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 conforme a Fig.(4.7) abaixo:

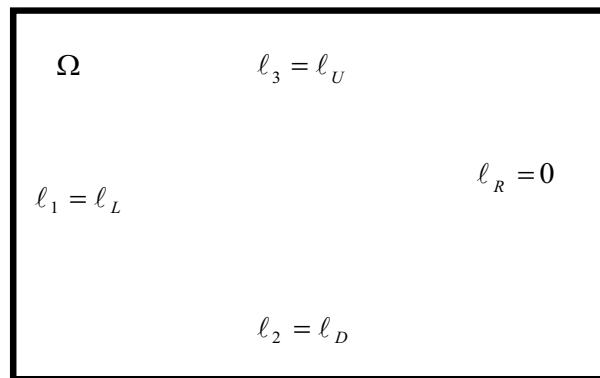


Figura 4.7: Domínio com apenas três Multiplicadores de Lagrange.

Para este problema a matriz global é dada por

$$A = a_E \cdot \begin{bmatrix} 4r^{-1} - \frac{3r^{-1}}{r^2+1} & \frac{-3r}{r^2+1} & \frac{-3r}{r^2+1} \\ \frac{-3r}{r^2+1} & 4r - \frac{3r^3}{r^2+1} & 2r - \frac{3r^3}{r^2+1} \\ \frac{-3r}{r^2+1} & 2r - \frac{3r^3}{r^2+1} & 4r - \frac{3r^3}{r^2+1} \end{bmatrix}.$$

Assim, tem-se que

$$\mathcal{L}^T A \mathcal{L} = a_{Er} \left(r^2 + 1\right)^{-1} \left\{ 4(\ell_1)^2 + r^{-2}(\ell_1)^2 - 6\ell_1\ell_2 - 6\ell_1\ell_3 + 4\ell_2\ell_3 - 2\ell_2\ell_3r^2 + r^2(\ell_2)^2 + 4(\ell_2)^2 + r^2(\ell_3)^2 + 4(\ell_3)^2 \right\}.$$

Portanto, após algumas manipulações na equação acima, tem-se que:

$$\mathcal{L}^T A \mathcal{L} = a_E r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ 2 \left[\ell_1 - (\ell_2 + \ell_3) \right]^2 + (\ell_1 - \ell_2)^2 + (\ell_1 - \ell_3)^2 + (\ell_2)^2 + (\ell_3)^2 + r^2 (\ell_3 - \ell_2)^2 + r^{-2} (\ell_1)^2 \right\}.$$

Como o vetor \mathcal{L} é não-nulo, segue que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} > 0$, isto é, a matriz A , dada acima, é definida positiva.

Com relação ao problema geral, o cálculo de $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ será realizado da seguinte forma:

1. considere a Eq.(4.44) e localize os cálculos em um elemento $E = E_{ij}$, isto é, coloque em evidência o valor de a_E ;
2. obtenha os valores dos coeficientes $c_\alpha, d_\alpha, e_\alpha, f_\alpha, g_\alpha$ e w_α , utilizando as expressões (obtidas no início desta seção) referentes ao lado esquerdo da fórmula de sete pontos;
3. use a notação: $\ell_{E,L} = \ell_1$; $\ell_{E,R} = \ell_2$; $\ell_{E,D} = \ell_3$ e $\ell_{E,U} = \ell_4$, conforme a Fig.(4.8) abaixo.

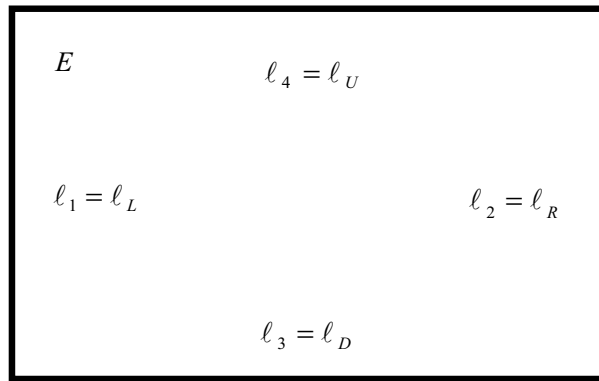


Figura 4.8: Numeração local dos Multiplicadores de Lagrange.

Desta forma, o cálculo de $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ referente ao elemento E terá a seguinte expressão:

$$a_E r (r^2 + 1)^{-1} \left\{ 2 \left[(\ell_1 + \ell_2) - (\ell_3 + \ell_4) \right]^2 + (\ell_1 - \ell_3)^2 + (\ell_1 - \ell_4)^2 + (\ell_2 - \ell_3)^2 + (\ell_2 - \ell_4)^2 + r^{-2} (\ell_1 - \ell_2)^2 + r^2 (\ell_3 - \ell_4)^2 \right\}.$$

Daí segue que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} \geq 0$. Mas note, pela expressão acima, que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} = 0$ se, e somente se, $\ell_1 = \ell_2 = \ell_3 = \ell_4$ em todo elemento E . Mas para $E = E_{ij}$, com $i = n_x$, tem-se que $\ell_2 = \ell_{E,R} = 0$, devido à condição de Dirichlet. Isto conduz a $\ell_1 = \ell_{E,L} = 0$. Como $\ell_{E,L} = \ell_{\tilde{E},R}$, então $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} = 0$ implica que $\mathcal{L} = \mathbf{0}$ (vetor nulo).

Portanto, $\mathcal{L} \neq \mathbf{0}$ implica que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} > 0$.

4.14 Sistema linear com permeabilidade na forma de tensor

Considerando um tensor de permeabilidade, com propriedades que serão especificadas adiante, será demonstrado, como na seção anterior, que a matriz global do sistema linear oriundo da formulação fraca da equação de Darcy é definida positiva, ou seja, o produto $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ é positivo. Isto será feito utilizando-se a Eq.(4.44) e o lado esquerdo de equações análogas à Eq.(4.43), que estão associadas aos diferentes tipos de arestas. Antes, porém, observe que dados $R_K = rk_{22} + r^{-1}k_{11}$ e $\theta = \frac{\det(K)}{R_K}$, já definidos anteriormente, são válidas as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} \frac{r^{-1} [2\det(K) - k^2]}{k_{22}} - \frac{3\theta r^{-2}k_{11}}{k_{22}} &= \frac{r^{-1}}{k_{22}} \left\{ \frac{2\det(K)rk_{22} + 2\det(K)r^{-1}k_{11} - 3\det(K)r^{-1}k_{11}}{R_K} \right\} \\ &\quad - \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \\ &= 2\theta - \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} - \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{r^{-1} [4\det(K) + k^2]}{k_{22}} - \frac{3\theta r^{-2}k_{11}}{k_{22}} &= \frac{r^{-1}}{k_{22}} \left\{ \frac{4\det(K)rk_{22} + 4\det(K)r^{-1}k_{11} - 3\det(K)r^{-1}k_{11}}{R_K} \right\} \\ &\quad + \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \\ &= 4\theta + \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} + \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{r [2\det(K) - k^2]}{k_{11}} - \frac{3\theta r^2k_{22}}{k_{11}} &= \frac{r}{k_{11}} \left\{ \frac{2\det(K)rk_{22} - 3\det(K)rk_{22} + 2\det(K)r^{-1}k_{11}}{R_K} \right\} \\ &\quad - \frac{rk^2}{k_{11}} \\ &= 2\theta - \frac{r^2k_{22}\theta}{k_{11}} - \frac{rk^2}{k_{11}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{r [4\det(K) + k^2]}{k_{11}} - \frac{3\theta r^2k_{22}}{k_{11}} &= \frac{r}{k_{11}} \left\{ \frac{4\det(K)rk_{22} - 3\det(K)rk_{22} + 4\det(K)r^{-1}k_{11}}{R_K} \right\} \\ &\quad + \frac{rk^2}{k_{11}} \\ &= 4\theta + \frac{r^2k_{22}\theta}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}}. \end{aligned}$$

Neste caso, os diferentes tipos de arestas são:

Arestas Verticais do tipo α_L . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos (veja a Eq.(4.43)) para arestas verticais do tipo α_L é dado por:

$$(\mu_E)^{-1} \left\{ \left[4\theta + \frac{r^{-2}k_{11}\theta + r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,L} + \left[2\theta - \frac{r^{-2}k_{11}\theta + r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,R} + [k - 3\theta] \ell_{E,D} - [k + 3\theta] \ell_{E,U} \right\}.$$

Arestas Verticais do tipo α_R . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas verticais do tipo α_R é dado por:

$$\begin{aligned} & (\mu_E)^{-1} \left\{ \left[2\theta - \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} - \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,L} + \left[4\theta + \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} + \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,R} - [k + 3\theta] \ell_{E,D} + [k - 3\theta] \ell_{E,U} \right\} + \\ & (\mu_{\tilde{E}})^{-1} \left\{ \left[4\theta_{\tilde{E}} + \frac{r^{-2}k_{\tilde{E},11}\theta_{\tilde{E}}}{k_{\tilde{E},22}} + \frac{r^{-1}(k_{\tilde{E}})^2}{k_{\tilde{E},22}} \right] \ell_{\tilde{E},L} + \left[2\theta_{\tilde{E}} - \frac{r^{-2}k_{\tilde{E},11}\theta_{\tilde{E}}}{k_{\tilde{E},22}} - \frac{r^{-1}(k_{\tilde{E}})^2}{k_{\tilde{E},22}} \right] \ell_{\tilde{E},R} + [k_{\tilde{E}} - 3\theta_{\tilde{E}}] \ell_{\tilde{E},D} - \right. \\ & \left. [k_{\tilde{E}} + 3\theta_{\tilde{E}}] \ell_{\tilde{E},U} \right\}. \end{aligned}$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},L} = \ell_{\tilde{E},R}$.

Arestas Verticais do tipo α_{FR} . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas verticais do tipo α_{FR} é dado por:

$$\begin{aligned} & (\mu_E)^{-1} \left\{ \left[2\theta - \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} - \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,L} + \left[4\theta + \frac{r^{-2}k_{11}\theta}{k_{22}} + \frac{r^{-1}k^2}{k_{22}} \right] \ell_{E,R} - [k + 3\theta] \ell_{E,D} + [k - 3\theta] \ell_{E,U} \right\} + \\ & (\mu_{\tilde{E}})^{-1} \left\{ \left[4\theta_{\tilde{E}} + \frac{r^{-2}k_{\tilde{E},11}\theta_{\tilde{E}}}{k_{\tilde{E},22}} + \frac{r^{-1}(k_{\tilde{E}})^2}{k_{\tilde{E},22}} \right] \ell_{\tilde{E},L} + [k_{\tilde{E}} - 3\theta_{\tilde{E}}] \ell_{\tilde{E},D} - [k_{\tilde{E}} + 3\theta_{\tilde{E}}] \ell_{\tilde{E},U} \right\}. \end{aligned}$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},R} = 0$, pois o multiplicador encontrar-se-á na fronteira direita do domínio e neste caso é válida a condição de Dirichlet (pressão nula).

Arestas Horizontais do tipo α_D . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_D é dado por:

$$(\mu_E)^{-1} \left\{ [k - 3\theta] \ell_{E,L} - [k + 3\theta] \ell_{E,R} + \left[4\theta + \frac{r^2k_{22}\theta}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,D} + \left[2\theta - \frac{r^2k_{22}\theta}{k_{11}} - \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,U} \right\}.$$

Observe que se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então $\ell_{E,R} = 0$, pois o Multiplicador estará na fronteira direita do domínio.

Arestas Horizontais do tipo α_U . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_U é dado por:

$$\begin{aligned}
& (\mu_E)^{-1} \left\{ - \left[k + 3\theta \right] \ell_{E,L} + \left[k - 3\theta \right] \ell_{E,R} + \left[2\theta - \frac{r^2 k_{22} \theta}{k_{11}} - \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,D} + \left[4\theta + \frac{r^2 k_{22} \theta}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,U} \right\} + \\
& (\mu_{\tilde{E}})^{-1} \left\{ \left[k_{\tilde{E}} - 3\theta_{\tilde{E}} \right] \ell_{\tilde{E},L} - \left[k_{\tilde{E}} + 3\theta_{\tilde{E}} \right] \ell_{\tilde{E},R} + \left[4\theta_{\tilde{E}} + \frac{r^2 k_{\tilde{E},22} \theta_{\tilde{E}}}{k_{\tilde{E},11}} + \frac{r(k_{\tilde{E}})^2}{k_{\tilde{E},11}} \right] \ell_{\tilde{E},D} + \left[2\theta_{\tilde{E}} - \frac{r^2 k_{\tilde{E},22} \theta_{\tilde{E}}}{k_{\tilde{E},11}} - \frac{r(k_{\tilde{E}})^2}{k_{\tilde{E},11}} \right] \ell_{\tilde{E},U} \right\}.
\end{aligned}$$

Observe que $\ell_{\tilde{E},D} = \ell_{E,U}$ e se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então $\ell_{E,R} = 0$ e $\ell_{\tilde{E},R} = 0$, porque neste caso não existirá elemento vizinho.

Arestas Horizontais do tipo α_{FU} . O lado esquerdo da fórmula de sete pontos para arestas horizontais do tipo α_{FU} é dado por:

$$(\mu_E)^{-1} \left\{ - \left[k + 3\theta \right] \ell_{E,L} + \left[k - 3\theta \right] \ell_{E,R} + \left[2\theta - \frac{r^2 k_{22} \theta}{k_{11}} - \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,D} + \left[4\theta + \frac{r^2 k_{22} \theta}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] \ell_{E,U} \right\}.$$

Observe que se o elemento for do tipo E_{ij} , com $i = n_x$, então $\ell_{E,R} = 0$.

O cálculo de $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$, referente ao elemento E , será realizado de forma análoga ao procedimento utilizado na seção anterior:

1. considere a Eq.(4.44) e localize os cálculos em um elemento $E = E_{ij}$, isto é, coloque em evidência o valor de $(\mu_E)^{-1}$;
2. obtenha os valores dos coeficientes c_α , d_α , e_α , f_α , g_α e w_α , utilizando as expressões referentes ao lado esquerdo da fórmula de sete pontos;
3. use a notação: $\ell_{E,L} = \ell_1$; $\ell_{E,R} = \ell_2$; $\ell_{E,D} = \ell_3$ e $\ell_{E,U} = \ell_4$, conforme a Fig.(4.8).

Desta forma, o cálculo de $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ referente ao elemento E terá a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
& (\mu_E)^{-1} \left\{ \ell_1 \left[\ell_1 \left(4\theta + \frac{r^{-2} \theta k_{11}}{k_{22}} + k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} \right) + \ell_2 \left(2\theta - \frac{r^{-2} \theta k_{11}}{k_{22}} - k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} \right) + \ell_3 (k - 3\theta) - \right. \right. \\
& \left. \left. \ell_4 (k + 3\theta) \right] + \ell_2 \left[\ell_1 \left(2\theta - \frac{r^{-2} \theta k_{11}}{k_{22}} - k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} \right) + \ell_2 \left(4\theta + \frac{r^{-2} \theta k_{11}}{k_{22}} + k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} \right) - \ell_3 (k + 3\theta) + \right. \right. \\
& \left. \left. \ell_4 (k - 3\theta) \right] + \ell_3 \left[\ell_1 (k - 3\theta) - \ell_2 (k + 3\theta) + \ell_3 \left(4\theta + \frac{r^2 \theta k_{22}}{k_{11}} + k^2 r (k_{11})^{-1} \right) + \ell_4 \left(2\theta - \frac{r^2 \theta k_{22}}{k_{11}} - \right. \right. \\
& \left. \left. k^2 r (k_{11})^{-1} \right) \right] + \\
& \left. \ell_4 \left[- \ell_1 (k + 3\theta) + \ell_2 (k - 3\theta) + \ell_3 \left(2\theta - \frac{r^2 \theta k_{22}}{k_{11}} - k^2 r (k_{11})^{-1} \right) + \ell_4 \left(4\theta + \frac{r^2 \theta k_{22}}{k_{11}} + k^2 r (k_{11})^{-1} \right) \right] \right\} = \\
& (\mu_E)^{-1} \left\{ 2\theta \left[(\ell_1 + \ell_2) - (\ell_3 + \ell_4) \right]^2 + \theta \left[(\ell_1 - \ell_3)^2 + (\ell_1 - \ell_4)^2 + (\ell_2 - \ell_3)^2 + (\ell_2 - \ell_4)^2 \right] + \right. \\
& \left. \left[\frac{r^{-2} \theta k_{11}}{k_{22}} + \frac{r^{-1} k^2}{k_{22}} \right] (\ell_1 - \ell_2)^2 + \left[\frac{r^2 \theta k_{22}}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] (\ell_3 - \ell_4)^2 + 2k (\ell_1 - \ell_2) (\ell_3 - \ell_4) \right\}.
\end{aligned}$$

Se $k \geq 0$ então a expressão anterior fica igual a:

$$(\mu_E)^{-1} \left\{ 2\theta \left[(\ell_1 + \ell_2) - (\ell_3 + \ell_4) \right]^2 + \theta \left[(\ell_1 - \ell_3)^2 + (\ell_1 - \ell_4)^2 + (\ell_2 - \ell_3)^2 + (\ell_2 - \ell_4)^2 \right] + \right. \\ \left. \left[-k + \frac{r^{-2}\theta k_{11}}{k_{22}} + \frac{k^2 r^{-1}}{k_{22}} \right] (\ell_1 - \ell_2)^2 + \left[-k + \frac{r^2\theta k_{22}}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] (\ell_3 - \ell_4)^2 + k \left[(\ell_1 - \ell_2) + (\ell_3 - \ell_4) \right]^2 \right\}.$$

Se $k < 0$ então a expressão, referida acima, fica igual a:

$$(\mu_E)^{-1} \left\{ 2\theta \left[(\ell_1 + \ell_2) - (\ell_3 + \ell_4) \right]^2 + \theta \left[(\ell_1 - \ell_3)^2 + (\ell_1 - \ell_4)^2 + (\ell_2 - \ell_3)^2 + (\ell_2 - \ell_4)^2 \right] + \right. \\ \left. \left[k + \frac{r^{-2}\theta k_{11}}{k_{22}} + \frac{k^2 r^{-1}}{k_{22}} \right] (\ell_1 - \ell_2)^2 + \left[k + \frac{r^2\theta k_{22}}{k_{11}} + \frac{rk^2}{k_{11}} \right] (\ell_3 - \ell_4)^2 - k \left[(\ell_1 - \ell_2) + (\ell_3 - \ell_4) \right]^2 \right\}.$$

As condições dadas a seguir são suficientes para garantir que o produto $\mathcal{L}^T A \mathcal{L}$ seja não-negativo:

$$\text{se } k \geq 0 \text{ tem-se que } \frac{r^{-2}\theta k_{11}}{k_{22}} + k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} - k \geq 0 \text{ e } \frac{r^2\theta k_{22}}{k_{11}} + k^2 r (k_{11})^{-1} - k \geq 0;$$

ou

$$\text{se } k < 0 \text{ tem-se que } \frac{r^{-2}\theta k_{11}}{k_{22}} + k^2 r^{-1} (k_{22})^{-1} + k \geq 0 \text{ e } \frac{r^2\theta k_{22}}{k_{11}} + k^2 r (k_{11})^{-1} + k \geq 0.$$

Utilizando os fatos que $R_K = rk_{22} + r^{-1}k_{11}$ e $\theta = \frac{\det(K)}{R_K}$ as seguintes condições são obtidas após algumas manipulações.

Para $k \geq 0$ tem-se que:

$$r^{-2}(k_{11})^2 + k^2 \geq k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}); \quad (4.45)$$

$$r^2(k_{22})^2 + k^2 \geq k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}). \quad (4.46)$$

Analogamente, para $k < 0$, obtém-se que:

$$r^{-2}(k_{11})^2 + k^2 \geq -k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}); \quad (4.47)$$

$$r^2(k_{22})^2 + k^2 \geq -k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}). \quad (4.48)$$

Admitindo que as condições impostas nas Eqs.(4.45) e (4.46), ou nas equações análogas Eqs.(4.47) e (4.48) para $k < 0$, sejam satisfeitas, então segue que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} \geq 0$.

Portanto, $\mathcal{L} \neq \mathbf{0}$ (vetor nulo) implica que $\mathcal{L}^T A \mathcal{L} > 0$, conforme as considerações feitas no final da seção anterior, o que permite concluir que a matriz A é definida positiva.

Capítulo 5

Condições acerca do tensor de permeabilidade para gerar uma matriz simétrica e definida positiva

O objetivo deste capítulo é investigar as restrições que deverão ser impostas no tensor de permeabilidades de modo a garantir que o sistema linear associado a uma formulação fraca das equações de Darcy, com Multiplicadores de Lagrange relacionados ao fluxo normal e que aproximam a pressão nas arestas, possua matriz simétrica e definida positiva. Assim, reescrevendo as desigualdades presentes nas Eqs.(4.45) e (4.46) dadas no capítulo anterior obtém-se:

$$k^2 - k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}) + r^{-2}(k_{11})^2 \geq 0 \quad e \quad k^2 - k(rk_{22} + r^{-1}k_{11}) + r^2(k_{22})^2 \geq 0.$$

Ou seja, usando o fato de que $R_K = rk_{22} + r^{-1}k_{11}$ tem-se as seguintes funções quadráticas

$$k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 \geq 0 \quad e \quad k^2 - kR_K + r^2(k_{22})^2 \geq 0 \quad (5.1)$$

cujos gráficos podem ser vistos nas Figs.(5.1), (5.2) e (5.3).

Considere a Eq.(5.1) e defina, $\Delta_1 = (R_K)^2 - 4r^{-2}(k_{11})^2$ e $\Delta_2 = (R_K)^2 - 4r^2(k_{22})^2$, respectivamente, e lembre-se de que $|k| < (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}}$, pois o tensor K é definido positivo; logo $\det(K) > 0$.

Apenas duas possibilidades podem ocorrer com Δ_1 e Δ_2 , são elas: ou Δ_1 e Δ_2 são ambos nulos ou possuem sinais contrários.

Com efeito, primeiramente admita que $\Delta_1 \geq 0$ e que $\Delta_2 \geq 0$. Como $\Delta_1 \geq 0$ tem-se as seguintes implicações:

$$(R_K)^2 - 4r^{-2}(k_{11})^2 \geq 0 \implies (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 - 4r^{-2}(k_{11})^2 \geq 0 \implies (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 \geq 4r^{-2}(k_{11})^2$$

$$(rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 \geq (2r^{-1}k_{11})^2 \implies rk_{22} + r^{-1}k_{11} \geq 2r^{-1}k_{11}$$

assim, tem-se que $rk_{22} \geq r^{-1}k_{11}$.

Mas, por outro lado, tem-se que $\Delta_2 \geq 0$ o que leva às seguintes implicações:

$$(R_K)^2 - 4r^2(k_{22})^2 \geq 0 \implies (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 - 4r^2(k_{22})^2 \geq 0 \implies (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 \geq 4r^2(k_{22})^2$$

$$(rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 \geq (2rk_{22})^2 \implies rk_{22} + r^{-1}k_{11} \geq 2rk_{22} \implies r^{-1}k_{11} \geq rk_{22}$$

assim, tem-se que $r^{-1}k_{11} \geq rk_{22}$.

Dessa forma, tem-se que $rk_{22} \geq r^{-1}k_{11}$ e $r^{-1}k_{11} \geq rk_{22}$, assim, para evitar contradições, deve-se ter que $rk_{22} = r^{-1}k_{11}$ ou, equivalentemente, é o mesmo que $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$. Pois, observe que

$$\Delta_1 = 0 \iff (R_K)^2 - 4r^{-2}(k_{11})^2 = 0 \iff (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 = 4r^{-2}(k_{11})^2 \iff$$

$$(rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 = (2r^{-1}k_{11})^2 \iff rk_{22} + r^{-1}k_{11} = 2r^{-1}k_{11} \iff rk_{22} = r^{-1}k_{11}$$

o que de maneira análoga se verifica que $\Delta_2 = 0 \iff rk_{22} = r^{-1}k_{11}$.

Analogamente, a primeira possibilidade citada acima se verifica se for admitido que $\Delta_1 \leq 0$ e que $\Delta_2 \leq 0$. Desta forma, as desigualdades dadas na Eq.(5.1) são satisfeitas (veja a Fig.(5.1)), pois neste caso tem-se

$$k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 = k^2 - kR_K + r^2(k_{22})^2 = (k - 0,5R_K)^2 > 0,$$

já que a equação acima se anula somente quando $k = 0,5R_K$ e $rk_{22} = r^{-1}k_{11}$, mas isto conduz a $2k = 2(k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}}$, ou seja, $\det(K) = k_{11}k_{22} - k^2 = 0$, o que contradiz o fato de que $\det(K) > 0$.

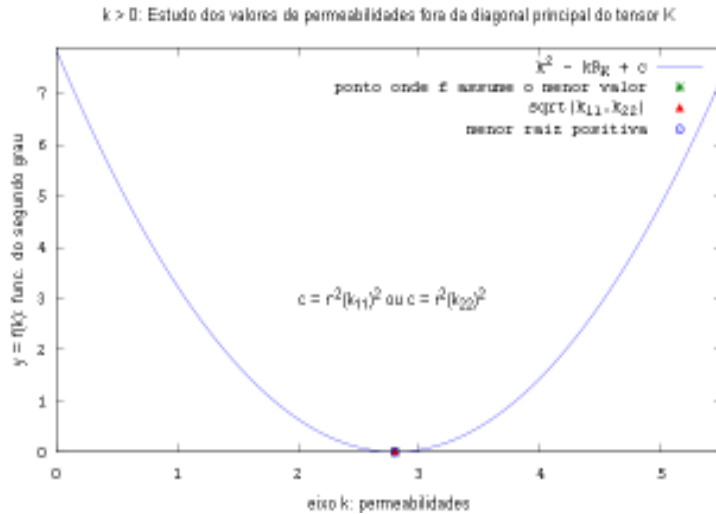


Figura 5.1: gráfico associado às funções quadráticas que aparecem na Eq.(5.1), com $r = 1$, $\Delta_1 = 0$ e $k_{11} = k_{22}$.

Por outro lado, se Δ_1 e Δ_2 possuem sinais contrários, isto é, se $\Delta_1\Delta_2 < 0$, então uma das desigualdades dada na Eq.(5.1) será sempre satisfeita. Por exemplo, se $\Delta_1 > 0$ e $\Delta_2 < 0$ então o gráfico da função quadrática $k^2 - kR_K + r^2(k_{22})^2$ será uma parábola com concavidade voltada para cima e que não intersecta o eixo horizontal, pois a equação do segundo grau referente a Δ_2 não possuirá raízes reais devido ao fato de que $\Delta_2 < 0$, ou seja, $k^2 - kR_K + r^2(k_{22})^2 > 0$.

Agora, com a finalidade de se investigar quais são os valores de k que satisfazem a outra desigualdade (dada na Eq.(5.1)) referente à função quadrática $k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2$, denote a menor raiz da equação do segundo grau $k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 = 0$ por $\delta_1 = 0,5 \left[R_K - (\Delta_1)^{\frac{1}{2}} \right]$, e observe que $\delta_1 > 0$, denote, também, por $k_{min} = 0,5R_K$ o ponto no qual a função quadrática $k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2$ assume valor mínimo (consulte as Figs.(5.2) e (5.3) para um melhor entendimento). Note também que:

$$\begin{aligned} (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} < k_{min} &\Leftrightarrow (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} < \frac{R_K}{2} \Leftrightarrow 4k_{11}k_{22} < (R_K)^2 \Leftrightarrow \\ 4k_{11}k_{22} < (rk_{22} + r^{-1}k_{11})^2 &\Leftrightarrow 4k_{11}k_{22} < r^2(k_{22})^2 + 2k_{11}k_{22} + r^{-2}(k_{11})^2 \Leftrightarrow \\ r^2(k_{22})^2 - 2k_{11}k_{22} + r^{-2}(k_{11})^2 > 0 &\Leftrightarrow (rk_{22} - r^{-1}k_{11})^2 > 0. \end{aligned}$$

Além disto, observe que valem as seguintes desigualdades

$$\delta_1 < r^{-1}k_{11} < (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}}.$$

Com efeito, primeiramente note que:

$$\Delta_1 > 0 \Leftrightarrow rk_{22} > r^{-1}k_{11} \Leftrightarrow k_{22} > r^{-2}k_{11}.$$

Dessa forma, tem-se que $k_{11}k_{22} > r^{-2}(k_{11})^2 \Leftrightarrow (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} > r^{-1}k_{11}$, o que mostra a segunda desigualdade. Agora, para mostrar a primeira desigualdade, note que:

$$\begin{aligned} 0,5 \left[R_K - (\Delta_1)^{\frac{1}{2}} \right] < r^{-1}k_{11} &\Leftrightarrow R_K - (\Delta_1)^{\frac{1}{2}} < 2r^{-1}k_{11} \Leftrightarrow R_K < (\Delta_1)^{\frac{1}{2}} + 2r^{-1}k_{11} \Leftrightarrow \\ (R_K)^2 < (R_K)^2 - 4r^{-2}(k_{11})^2 + 4(\Delta_1)^{\frac{1}{2}}r^{-1}k_{11} + 4r^{-2}(k_{11})^2 &\Leftrightarrow 4(\Delta_1)^{\frac{1}{2}}r^{-1}k_{11} > 0 \Leftrightarrow \Delta_1 > 0 \end{aligned}$$

o que se verifica. Mas como $0 \leq k < (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}}$, então a outra desigualdade na Eq.(5.1) é satisfeita se $0 \leq k \leq \delta_1$.

O caso em que $\Delta_1 < 0$ e $\Delta_2 > 0$ é completamente análogo ao caso estudado anteriormente e, assim, uma das desigualdades na Eq.(5.1) será sempre válida e a outra será satisfeita se $0 \leq k \leq \delta_2$, onde tem-se que $\delta_2 = 0,5 \left[R_K - (\Delta_2)^{\frac{1}{2}} \right]$ e $\delta_2 < rk_{22} < (k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} < k_{min}$, como já visto acima.

Considerando $k < 0$ e utilizando um raciocínio análogo ao início deste capítulo, são obtidas as desigualdades a seguir:

$$k^2 + kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad k^2 + kR_K + r^2(k_{22})^2 \geq 0. \quad (5.2)$$

cujos gráficos podem ser vistos nas Figs.(5.4) e (5.5) dados abaixo.

Com a mesma notação usada anteriormente, se $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, as desigualdades dadas na Eq.(5.2) são satisfeitas por que:

$$k^2 + kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 = k^2 + kR_K + r^2(k_{22})^2 = (k + 0,5R_K)^2 > 0;$$

pois $k = -0,5R_K$ e $rk_{22} = r^{-1}k_{11}$ conduziriam a $\det(K) = k_{11}k_{22} - k^2 = 0$, mas tem-se que $\det(K) > 0$.

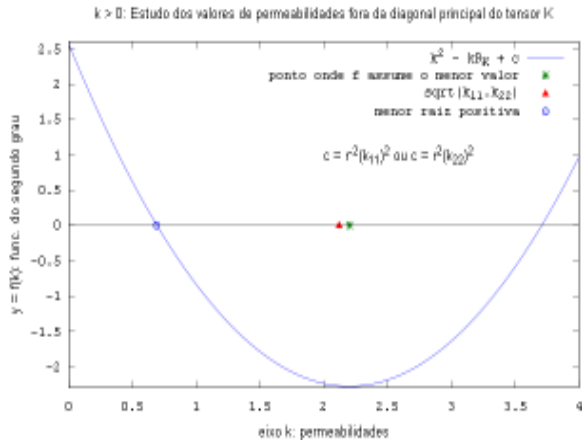


Figura 5.2: gráfico associado às funções quadráticas dadas na Eq.(5.1), com $r = 1$ e $\Delta_1 > 0$.

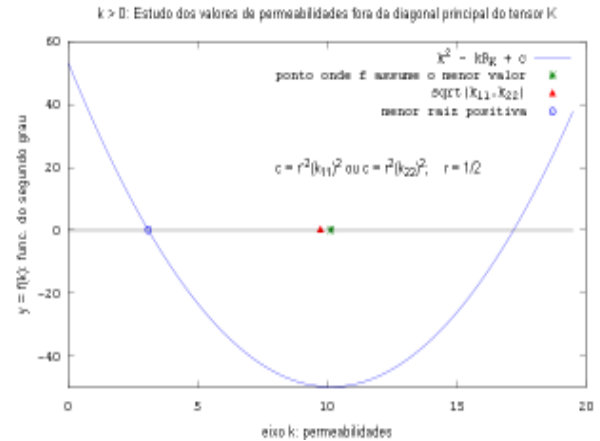


Figura 5.3: gráfico associado às funções quadráticas dadas na Eq.(5.1), com $r = \frac{1}{2}$.

Se $\Delta_1 > 0$ e $\Delta_2 < 0$ então, pelo já visto, $k^2 + kR_K + r^2(k_{22})^2 > 0$, pois $\Delta_2 < 0$. Considerando a equação do segundo grau $k^2 + kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 = 0$ (para um melhor entendimento ver Figs.(5.4) e (5.5)), observe que $\rho_1 = 0,5 \left[-R_K + (\Delta_1)^{\frac{1}{2}} \right] = -\delta_1$, isto é, $\rho_1 = -\delta_1$ é a maior raiz negativa e ainda $-0,5R_K = -k_{min}$ é o ponto onde a função assume valor mínimo. Assim, tem-se as seguintes desigualdades $-k_{min} < -(k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} < -r^{-1}k_{11} < \rho_1$. Como $-(k_{11}k_{22})^{\frac{1}{2}} < k < 0$, então a outra desigualdade na Eq.(5.2) é satisfeita se $0 > k \geq -\delta_1$. O caso em que $\Delta_1 < 0$ e $\Delta_2 > 0$ é completamente análogo ao caso estudado anteriormente e, assim, uma das desigualdades na Eq.(5.2) será sempre válida e a outra será satisfeita se $0 > k \geq -\delta_2$.

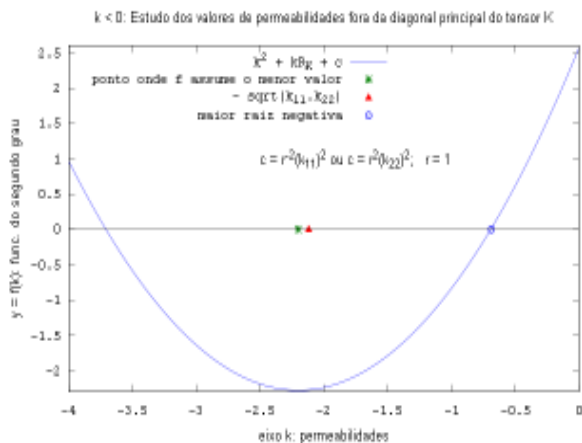


Figura 5.4: gráfico associado às funções quadráticas que aparecem na Eq.(5.2), com $r = 1$.

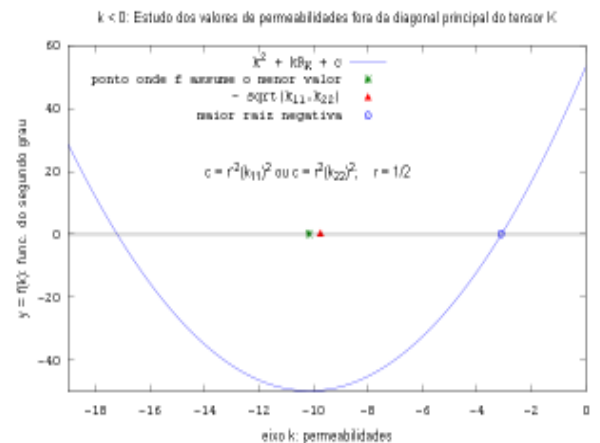


Figura 5.5: gráfico associado às funções quadráticas que aparecem na Eq.(5.2), com $r = \frac{1}{2}$.

Este capítulo será finalizado considerando-se algumas observações a respeito dos valores de k que aparecem fora da diagonal principal do tensor K de permeabilidades. Lembre-se de que as condições impostas nas Eqs.(5.1) e (5.2) devem ser satisfeitas para garantir que o sistema linear oriundo da formulação fraca das equações de Darcy possua matriz simétrica definida positiva. Concentrando a atenção no caso em que $k > 0$ (pois, para $k < 0$, a análise será

análoga), considere as equações do segundo grau dadas abaixo:

$$k^2 - kR_K + r^{-2}(k_{11})^2 = 0 \quad \text{e} \quad k^2 - kR_K + r^2(k_{22})^2 = 0. \quad (5.3)$$

Como demonstrado anteriormente, as condições apresentadas na Eq.(5.1) são satisfeitas quando $0 \leq k \leq \delta$, sendo δ a menor raiz positiva de uma das equações do segundo grau dadas na Eq.(5.3) acima. Esta raiz pode ser reescrita como $\delta = \delta_1 = \frac{2r^{-2}k_{11}}{R_K + (\Delta_1)^{\frac{1}{2}}}$ ou, ainda, como $\delta = \delta_2 = \frac{2r^2k_{22}}{R_K + (\Delta_2)^{\frac{1}{2}}}$. Fixado o valor de k_{22} , é fácil ver que Δ_1 tende a $-\infty$ (logo, $\Delta_2 > 0$) e δ_2 tende a zero, quando k_{11} tende a $+\infty$. Analogamente, fixado o valor de k_{11} , é fácil ver que Δ_2 tende a $-\infty$ (logo, $\Delta_1 > 0$) e δ_1 tende a zero, quando k_{22} tende a $+\infty$. Ou seja, em resumo tem-se que:

1. fixado o valor de k_{22} segue que $\Delta_1 \longrightarrow -\infty$ e $\delta_2 \longrightarrow 0$ quando $k_{11} \longrightarrow +\infty$;
2. fixado o valor de k_{11} segue que $\Delta_2 \longrightarrow -\infty$ e $\delta_1 \longrightarrow 0$ quando $k_{22} \longrightarrow +\infty$.

Desta forma, se os valores da diagonal do tensor K forem muito diferentes em relação à ordem de grandeza, ou seja, se $k_{11} \gg k_{22}$ ou $k_{22} \gg k_{11}$, então os valores k deverão ser nulos ou muito próximos de zero.

Portanto, nas condições descritas acima, o sistema linear associado à matriz global formada pelos Multiplicadores de Lagrange A referida acima pode ser resolvido, por exemplo, pelo método dos gradientes conjugados dado na seção 2.6 do Capítulo 2.

Capítulo 6

Conclusão

O cálculo da velocidade de Darcy produzido com a metodologia apresentada neste trabalho não sofrerá imprecisões relativas a erros de integração numérica, pois as integrais que aparecem na Eq.(4.6) são resolvidas analiticamente e não são aproximadas, por exemplo, pela regra do trapézio, conforme os trabalhos de Almeida, Douglas e Pereira [4]; Douglas, Furtado e Pereira [12] e Aquino et al. [5]. A regra do trapézio, por exemplo, facilita muito a resolução do sistema para a pressão; porém, a solução do sistema sofre influência do erro de integração e, portanto, torna-se imprecisa. Utilizando a mesma malha computacional (os mesmos valores de h_x e h_y), o método proposto aproximará esta solução, de maneira mais precisa, sem a necessidade de se fazer refinamentos de malha (diminuições dos valores de h_x e h_y), que acarretariam no aumento do esforço computacional.

O método dos elementos finitos mistos e híbridos vai gerar um sistema linear, associado à equação da pressão, que possui matriz simétrica e definida positiva (se K for um tensor as condições exibidas, por exemplo, nas Eqs. (4.45) e (4.46) são suficientes para garantir tal propriedade da matriz). Estas propriedades da matriz garantem a existência e a unicidade da solução do sistema linear, além de permitir que o método dos Gradientes Conjugados seja utilizado na resolução do mesmo.

Com base no Capítulo 5, pode-se concluir que se os elementos da diagonal principal do tensor K forem iguais ou forem da mesma ordem de grandeza, então a condição sobre k , o elemento fora da diagonal principal, não será tão restrita quanto à condição do caso em que os elementos k_{11} e k_{22} diferem muito em relação à sua ordem de grandeza. Neste último caso, a condição suficiente para garantir que a matriz global do sistema linear estudado seja definida positiva será satisfeita se os valores de k forem nulos ou estiverem muito próximos de zero.

A formulação desenvolvida neste trabalho será útil, por exemplo, na investigação de técnicas numéricas para o cálculo de permeabilidades efetivas (ou equivalentes) em meios porosos heterogêneos.

A continuação natural deste trabalho é o desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos miscíveis incompressíveis em meios porosos heterogêneos (veja Russel e Wheeler [23]). Para isto será preciso fazer o acoplamento da equação elíptica (que fornece

a velocidade de Darcy) com uma equação diferencial do tipo convecção-difusão (veja Russel e Wheeler [23]). Dois tipos de problemas serão investigados: o problema linear do Traçador Passivo (Almeida [3]) e o problema não-linear (Almeida [3]), em que as equações diferenciais parciais que governam o escoamento não são lineares.

Referências Bibliográficas

- [1] ABREU, E.; FURTADO, F.; PEREIRA, F. E RIBEIRO, S. *Central schemes for porous media flow*”(Paper to be submitted).
- [2] ADAMS, R. A. *Sobolev Spaces*. Academic Press. New York, 1975.
- [3] ALMEIDA, C. G. *Escoamentos miscíveis em formações heterogêneas: novos métodos numéricos e modelagem estocástica*. Tese de Doutorado em Matemática Aplicada, IMECC/Unicamp, Campinas, 2000.
- [4] ALMEIDA, C. G., DOUGLAS, J. JR., PEREIRA, F. *A new characteristics-based numerical method for miscible displacement in heterogeneous formations*. Computational and Applied Mathematics, vol. 21, fascículo 2, 573-605, 2002.
- [5] AQUINO, J.; PEREIRA, F.; SOUTO, H. P. A. E. FRANCISCO, A. S. *A forward tracking scheme for solving radionuclide advective problems in unsaturated porous media*. International Journal of Nuclear Energy Science and Technology, vol. 3, n. 2, pp. 196-205. 2007.
- [6] AXELSSON, O. E BARKER, V. A. *Finite element solution of boundary value problems. Theory and computation*. Academic Press, Orlando, Flórida, 1984.
- [7] BARROS-NETO, J. *An Introduction to the Theory of Distributions*. Marcel Dekker. New York, 1973.
- [8] BARTLE, R. G. *The Elements of Integration and Lebesgue Measure*. Wiley. New York, 1995.
- [9] BREZZI, F. E FORTIN, M. *Mixed and hybrid finite element methods* Springer-Verlag, New York, vol. 15, Texts in Applied Mathematics.1991.
- [10] CHAVENT, G. E ROBERTS, J. E. *A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite element and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems*. Adv. Water Resources, vol. 14, 6, 329-348, 1991.
- [11] CHAVENT, G. E JAFFRE, J. *Mathematical Model and Finite Elements for Reservoir Simulation*. Amsterdam, Holland, North-Holland, Chap.5, 1986.
- [12] DOUGLAS, J. JR., FURTADO, F. E PEREIRA, F. *On the numerical simulation of waterflooding of heterogeneous petroleum reservoirs*. Computational Geosciences, vol. 2, nº1, 155-190, 1997.
- [13] DURLOFSKY, L. J. *Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media*. Water resources research, 27(5), 699-708, 1991.
- [14] FENG, X. *On Miscible Fluids in Porous Media and Absorbing Boundary Conditions for Eletromagnetic Wave Propagation and on Nearly Elastic Waves in the Frequency Domain*. PH.D. Thesis, Purdue University, 1992.

- [15] FRIEDMAN, A. *Partial Differential Equations*. Holt, New York, 1969.
- [16] GOFFMAN, C. E PEDRICK, G. *First Course in Functional Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1965.
- [17] GRAY, W. G. *A derivation of the equations for multiphase transport*. Chem. Eng. Sci., 30, pp. 229-233. 1975.
- [18] HOMS, G. M. *Viscous Fingering in Porous Media*. Ann. Rev. Fluid Mech., 271-311, 1987.
- [19] KREYSZIG, E. *Introduction Functional Analysis With Applications*. Wiley, New York, 1989.
- [20] ODEN, J. T. E REDDY, J. N. *An introduction to the mathematical theory of finite elements*. Wiley, New York, 1976.
- [21] RIBEIRO, S. *Novos Esquemas Centrais de Diferenças Finitas para a Simulação de Escoamentos Multifásicos em Reservatórios de Petróleo*. Tese de Doutorado, Instituto Politécnico-UERJ, Nova Friburgo, Rio de Janeiro, Brasil. 2007.
- [22] RUGGIERO, M. A. G., LOPES, V. L. DA ROCHA. *Cálculo Numérico: aspectos teóricos e computacionais*. MAKRON., São Paulo. 2ª edição. 1997.
- [23] RUSSEL, T. F. E WHEELER, M. F. *Finite Element and finite difference methods for continuous flows in porous media*. Frontiers in applied mathematics-SIAM, The mathematics of reservoir simulation, 35-106, 1983.
- [24] SILVA, C. A. *Um novo algoritmo, naturalmente paralelizável, para o cálculo de permeabilidades equivalentes em reservatórios*. Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico-UERJ. Nova Friburgo, Rio de Janeiro, Brasil, 2008.
- [25] TITCHMARSH, E. C. *The Theory of Functions*. 2nd ed. Oxford Univ., Press., London, 1939.
- [26] WHITAKER, S. *Diffusion and dispersion in porous media*. AIChE J., 13, pp. 420-427. 1967.