

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DE REAÇÃO
DIFUSÃO EM DOMÍNIOS ILIMITADOS

GUDELIA GUILLERMINA MORALES BOLUARTE



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

CAMPINAS - SÃO PAULO
BRASIL

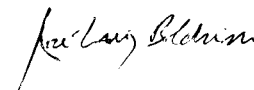
1792r

804/BC

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DE REAÇÃO
DIFUSÃO EM DOMÍNIOS ILIMITADOS

Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida pela Sra. GUDELIA GUILLERMINA MORALES BOLUARTE e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 26 de Fevereiro 1987.


Prof.Dr. JOSÉ LUIZ BOLDRINI
Orientador

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

A minha mãe, Encarnación

e minhas filhas, Catalina e Natalia.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	i
1. PRELIMINARES	1
1.1. Notações e Definições	1
1.2. O Método de Galerkin	5
2. O PROBLEMA	9
2.1. A Formulação do Problema	9
2.2. Construção da Base para o Espaço de Aproximação. . .	12
3. APROXIMAÇÕES COM O MÉTODO DE GALERKIN	21
3.1. O Método de Galerkin em Tempo Contínuo	21
3.2. Considerações sobre o Erro de Aproximação	26
3.3. O Método de Galerkin em Tempo Discreto	46
3.3.1. Procedimento Crank-Nicolson Extrapolado . . .	50
3.3.2. Método de Newton-Galerkin	52
4. ASPECTOS COMPUTACIONAIS	67
4.1. Montagem das Equações a partir dos Elementos Finitos e Infinitos	67
4.2. Descrição dos Programas	86
4.3. Ensaio Numéricos	95
CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS	99
BIBLIOGRAFIA	100

INTRODUÇÃO

A modelagem da dinâmica de fenômenos que ocorrem em Termodinâmica, Química, Biologia, etc. leva, frequentemente, a equações diferenciais parciais parabólicas não lineares, ou seja, equações de reação-difusão.

Estas são equações da forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial}{\partial x} u \right) + f(x,t,u) ,$$

onde o primeiro termo do segundo membro, descreve a difusão espacial do fenômeno estudado e $f(x,t,u)$ descreve as reações e interações envolvidas.

Um dos exemplos mais simples de uma equação de reação-difusão não linear foi obtido por Fisher ao estudar a evolução da frequência, $p(x,t)$, de um gen dominante em uma população determinada. Ele obteve a equação

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + sp(1 - p) ,$$

onde s é uma medida de intensidade da seleção.

Muitas vezes, tais equações aparecem naturalmente em domínios ilimitados e isto causa dificuldades na sua resolução numérica. Uma

das razões para tais dificuldades é que os desenvolvimentos teóricos, como resultados de teoria de aproximação, são usualmente feitos em domínios limitados. Também, do ponto de vista prático, as bases de funções mais utilizadas são polinomiais por partes, o que causa dificuldades no infinito.

Neste trabalho estudamos o caso de uma equação de reação-difusão unidimensional em domínio ilimitado. Propomos uma base de funções adequada ao problema, cuja principal característica é o uso de elementos infinitos e funções de forma sobre eles que simulam o comportamento da solução no infinito. A seguir, utilizamos uma adaptação do método de Galerkin para obter uma solução aproximada do problema.

CAPÍTULO I

PRELIMINARES

Vamos recordar neste capítulo as definições a serem usadas neste trabalho, e apresentar algumas condições que serão adotadas nos capítulos seguintes.

1.1. NOTAÇÕES E DEFINIÇÕES. Todas as funções que aparecerem neste trabalho são funções que assumem valores reais.

Para $1 \leq p \leq \infty$, $L^p(\mathbb{R})$ é o espaço vetorial real de funções u definidas em $\mathbb{R}$ tal que $\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^p dx$ existe e é finito. A norma em $L^p(\mathbb{R})$, com a identificação de que duas funções são iguais se seus valores forem os mesmos para quase todos os pontos, segundo a medida de Lebesgue, será definida por:

$$\|u\|_{L^p(\mathbb{R})} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^p dx \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty.$$

Para qualquer inteiro não negativo r , $C^r(\mathbb{R})$ é o espaço de funções com derivadas de ordem até r , inclusive, contínuas. Chamaremos $C^\infty(\mathbb{R})$ o espaço de funções infinitamente deriváveis em $\mathbb{R}$, isto é, $C^\infty(\mathbb{R}) = \bigcap_{r=1}^{\infty} C^r(\mathbb{R})$.

Dizemos que uma função $u \in C^\infty(\mathbb{R})$ é de decaimento rápido se

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} x^\alpha \frac{d^\beta u}{dx^\beta} = 0 \quad \text{para qualquer } \alpha, \beta \text{ inteiro positivo.}$$

Essas funções formam um espaço vetorial que denotaremos por $S(\mathbb{R})$.

O suporte de uma função u vai ser o complemento do maior conjunto aberto no qual $u = 0$, ou o fecho de $\{x : f(x) \neq 0\}$.

$C_0^\infty(\mathbb{R})$ é o conjunto de todas as funções $C^\infty(\mathbb{R})$ cujo suporte é um conjunto compacto contido em $\mathbb{R}$. O conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R})$ com o critério de convergência que definimos a seguir, vamos chamar de espaço de funções testes e será denotado por $\mathcal{D}(\mathbb{R})$:

Definição - Diz-se que a sequência de funções $(\varphi_i) \subset C_0^\infty(\mathbb{R})$ converge a $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ quando todas as funções φ_i da sucessão possuem seus suportes contidos em um compacto comum e, φ_i e todas as derivadas de φ_i convergem uniformemente à derivada correspondente de φ , isto é $\left| \frac{d^\beta}{dx^\beta} (\varphi_i - \varphi) \right|_\infty \rightarrow 0$, para todo β inteiro positivo. (Entenda-se por

$$\frac{d^0(\varphi_i - \varphi)}{dx^0} = \varphi_i - \varphi).$$

Das definições, acima, dos conjuntos $S(\mathbb{R})$ e $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ é claro que $\mathcal{D}(\mathbb{R}) \subset S(\mathbb{R})$.

Um funcional linear em $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ que é contínua com a noção de convergência definida antes, é denominado uma distribuição sobre $\mathbb{R}$.

O conjunto das distribuições sobre $\mathbb{R}$ é um espaço vetorial, e mais o seguinte critério de convergência de uma sequência de distribuições (T_j) ao T , descrita pela convergência de $T_j(\varphi) \rightarrow T(\varphi)$ para todo $\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$, define o espaço de distribuições sobre $\mathbb{R}$ e representa-se por $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$. No espaço $\mathcal{D}'(\mathbb{R})$ define-se as derivadas de todas as ordens, que são também distribuições sobre $\mathbb{R}$. Prova-se que, em particular, toda função $u \in L^p(\mathbb{R})$, $1 \leq p < \infty$ possui derivada no sentido de distribuições em $\mathbb{R}$, e este fato vai ser usado para definir os espaços de Sobolev que tem larga aplicação no estudo da Análise Matemática e Numérica das equações diferenciais parciais.

Sejam m inteiro positivo e p tal que $1 \leq p < \infty$. W_p^m é o conjunto das funções cujas derivadas no sentido de distribuições até ordem m são elementos de $L^p(\mathbb{R})$. Este conjunto é um espaço vetorial real e é chamado o espaço de Sobolev de ordem m, p sobre $\mathbb{R}$. Quando $p = 2$ o $W_2^m(\mathbb{R})$ denota-se $H^m(\mathbb{R})$. Em $H^m(\mathbb{R})$ define-se a norma

$$\|u\|_{H^m(\mathbb{R})}^2 = \sum_{\beta=0}^m \left\| \frac{d^\beta u}{dx^\beta} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2.$$

Com a definição acima $H^m(\mathbb{R}) = \{w : \frac{d^\beta w}{dx^\beta} \in L^2(\mathbb{R}), \beta \leq m \text{ inteiro positivo}\}$ é um espaço vetorial real normado.

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}$, limitado, então as definições de $C^\infty(\Omega)$, $C_0^\infty(\Omega)$

são similares as definições de $C^\infty(\mathbb{R})$ e $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Também $\mathcal{D}'(\Omega)$ significa o conjunto de funcionais em $\mathcal{D}(\Omega)$, e $\mathcal{D}(\Omega)$ com a topologia relativa, como um subespaço de $\mathcal{D}(\mathbb{R})$. Defina o $H^m(\Omega) =$

$$= \{u : \frac{d^\beta u}{dx^\beta} \in L^2(\Omega) , \beta \leq m , \text{ inteiro positivo} \} \text{ e norma}$$

$$\|u\|_{H^m(\Omega)}^2 = \sum_{\beta=0}^m \left\| \frac{d^\beta u}{dx^\beta} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 .$$

Definimos $H_0^m(\Omega)$ como o fecho de $C_0^\infty(\Omega)$ em $H^m(\Omega)$. Quando $\Omega = \mathbb{R}$, prova-se que $H_0^m(\mathbb{R}) = H^m(\mathbb{R})$. O espaço $H^1(\mathbb{R})$ é um espaço de Hilbert com o produto interno definido por:

$$(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + uv \right) dx .$$

Na análise dos problemas dependentes do tempo a notação seguinte é útil. Seja $L^2(\mathbb{R})$ um espaço com norma $\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R})}$ e $\phi : [0, T] \longrightarrow$

$L^2(\mathbb{R})$, representa-se por $L^p(0, T; L^2(\mathbb{R}))$ o espaço vetorial de funções ϕ tais que para cada $\bar{t}$ fixo $\phi(\bar{t}) \in L^2(\mathbb{R})$. Nestas condições define-se as normas

$$\|\phi\|_{L^p(0, T; L^2(\mathbb{R}))} = \left(\int_0^T \|\phi(\bar{t})\|_{L^2(\mathbb{R})}^p d\bar{t} \right)^{1/p} , \quad 1 \leq p < \infty ,$$

$$\|\phi\|_{L^\infty(0,T;L^2(\mathbb{R}))} = \max_{0 < \bar{t} < T} \|\phi(\bar{t})\|_{L^2(\mathbb{R})}$$

e o produto interno quando $p = 2$

$$(u,v)_{L^2(0,T;L^2(\mathbb{R}))} = \int_0^T \left(\int_{-\infty}^{\infty} u(x,\bar{t})v(x,\bar{t})dx \right) d\bar{t}.$$

Denotemos por $L^\infty(\Omega)$ o conjunto de funções u em Ω tais que

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{x \in \Omega} \text{ess } |u(x)| < \infty.$$

Finalmente com $H^{-1}(\Omega)$ denotamos o espaço dual de $H_0^1(\Omega)$, isto é, o espaço de todos os funcionais lineares em $H_0^1(\Omega)$.

1.2. O MÉTODO DE GALERKIN.

O método de Galerkin é uma técnica poderosa para se obter aproximações de soluções de problemas que envolvem equações integrais e diferenciais.

Para entender a idéia básica do método, vamos antes definir uma solução clássica e uma solução fraca de uma equação operacional.

Consideremos o problema de se encontrar uma função u que satisfaz a equação definida pelo operador diferencial L

$$Lu = f \quad (1.1)$$

com $u(\cdot)$ uma função definida em um conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. A função $u(x)$ que satisfaz a equação (1.1) chamaremos *solução clássica*.

Pode-se escrever uma outra formulação do problema que, sob certas condições, é equivalente a (1.1) e que chamaremos *formulação variacional* de (1.1). Consideremos um espaço vetorial $\mathbf{V}$ de funções com "as características convenientes ao problema", e munido de um produto interno $(\cdot, \cdot)$. Então uma função $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$(Lu, v) = (f, v) \quad \text{para todo } v \in \mathbf{V} \quad (1.2)$$

é chamada uma *solução fraca* ao problema (1.1).

Na condição que $\mathbf{V}$ têm um subconjunto denso em $\mathbf{V}$ e separável, vamos definir os subespaços M_h de $\mathbf{V}$, de dimensão finita N_h , tais que, M_h tenha como uma base o conjunto $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N_h}\}$.

Trabalhando na hipótese de existência de solução de (1.2), podemos definir o problema restrito a M_h (problema discretizado), isto é, achar $U_h \in M_h$ tal que

$$(LU_h, v) = (f, v) \quad \text{para todo } v \in M_h \subset \mathbf{V}. \quad (1.3)$$

Observemos que, por definição, U_h tem a forma $U_h = \sum_{i=1}^{N_h} \alpha_i \varphi_i$. A

função U_h é chamada a aproximação de Galerkin a u no espaço M_h . As incógnitas α_i são determinadas por (1.3).

Quando trabalhamos com problemas dependentes do tempo os coeficientes α_i são funções do tempo enquanto que, nas aplicações usuais do método as funções de base $\{\varphi_i, i = 1, N_h\}$ dependem somente das variáveis do espaço. Neste trabalho teremos que utilizar uma variante desse procedimento.

O sucesso do método está fortemente condicionado à escolha dos subespaços M_h e a construção adequada das funções de base $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N_h}\}$.

Quando $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é limitado é usual tomar M_h como um espaço de funções polinomiais por partes, tal que cada função base pode ser escolhido de suporte compacto contido em Ω . Neste caso o método de Galerkin obtém soluções aproximadas de soluções fracas, os U_h , com boa precisão. Esta aproximação é determinada resolvendo sistemas de equações esparsas cujas soluções podem ser obtidas por técnicas eficientes desenvolvidas especialmente para sistemas esparsos.

Quando $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto ilimitado, a escolha dos espaços de aproximação M_h é mais delicada. Em geral, o comportamento no infinito, requerido para a solução do problema, impede que funções polinomiais sejam utilizadas para a construção de funções básicas no infinito. Uma possível solução prática para este problema é a separação de Ω em duas regiões: uma região limitada, onde

funções polinomiais por partes podem ser usadas, e a "região no in finito" para a qual a montagem das funções básicas tem que levar em consideração o comportamento mais detalhado da solução. Isto implica que tal comportamento no infinito tem que ser obtido através de uma análise prévia do problema particular, que está sendo estudado. Neste trabalho propõe-se que esta análise seja feita utilizando-se expansões assintóticas para a solução. Uma vez obtido tal comportamento assintótico, pode-se construir um espaço de aproximação adequado ao problema. Estas idéias serão expostas mais detalhadamente quando estudarmos o problema que serve de modelo para este trabalho.

CAPÍTULO II

O PROBLEMA

O objetivo deste capítulo é apresentar o problema a ser resolvido numericamente utilizando uma variante do método de Galerkin. Para isto são definidos os elementos finitos e infinitos no domínio de definição do problema e as respectivas funções de base que geram o subespaço de aproximação M_h a ser utilizado no cálculo da solução aproximada.

2.1. A FORMULAÇÃO DO PROBLEMA.

Estamos interessados em equações diferenciais parciais não lineares do tipo parabólico. Estas equações são vistos em modelos matemáticos de fenômenos que ocorrem em problemas de reação-difusão, transporte, ecologia, etc.

O problema é o de obter aproximações para a solução generalizada

$$u(x,t) \in V = C(0,T;H^1(\mathbb{R})) \cap C^1(0,T;L^2(\mathbb{R})) \cap L^2(0,T;L^{2p}(\mathbb{R}))$$

(onde p é definido abaixo) da equação:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right) = f(x,t,u) \quad (2.1a)$$

$$\text{para } (x,t) \in \mathbb{R} \times (0,T) ,$$

satisfazendo a condição inicial

$$u(x,0) = u_0(x) , \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.1b)$$

Admitiremos que as seguintes condições são satisfeitas

- i) $k(x,t) \in C^\infty(\mathbb{R} \times [0,T]) \cap C_b^2(\mathbb{R} \times [0,T])$ e existem constantes $c_0, c_1 > 0$ tais que $c_0 \leq k(x,t) \leq c_1$ para todo $(x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]$. Além disso suponhamos que existam constantes positivas k_0^+, k_0^- tais que $k(x,t) = k_0^+ + O(1)/x$ quando $x \rightarrow +\infty$ e $k(x,t) = k_0^- + O(1)/x$ quando $x \rightarrow -\infty$, uniformemente para todo $t \in [0,T]$.

$(C_b^2(\mathbb{R} \times [0,T]))$ indica o conjunto de funções deriváveis duas vezes com tais derivadas limitadas. $O(1)$ segundo a definição: diz-se que uma função $g(x) = O(1)$, com o x em um certo domínio D , se existe uma C tal que $\|g\| \leq C \|1\|$, sendo o 1 a função constante em D .

- ii) $f(x,t,u) \in C^\infty(\mathbb{R} \times (0,T) \times \mathbb{R})$ e existem constantes $p \geq 1$ e $C > 0$ tal que $|f(x,t,u)| \leq C \|u\|^p$ para todo $(x,t,u) \in \mathbb{R} \times (0,T) \times \mathbb{R}$.

iii) $u_0(x) \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R})$ tem suporte compacto.

Observamos que se $u \in \mathbf{V}$ então reescrevendo (2.1a) como

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \right) = f(x,t,u) - \frac{\partial u}{\partial t}(x,t)$$

temos que o segundo membro da última igualdade está em $L^2(0,T;L^2(\mathbb{R}))$ e utilizando resultados da teoria de equações elípticas, conclui-se que

$$u(x,t) \in L^2(0,T;H_{loc}^2(\mathbb{R}))$$

onde por $u(\cdot,t) \in H_{loc}^2(\mathbb{R})$ indicamos que a restrição de u a qualquer compacto $K \subset \mathbb{R}$ pertence a $H^2(K)$.

Como queremos obter aproximações utilizando o método de Galerkin vamos escrever a formulação variacional de (2.1).

Para isto multiplicamos (2.1a) por uma função qualquer $v \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R})$ e integramos com respeito a x entre $-\infty$ a ∞ , obtendo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) v \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t,u) v \, dx ,$$

$$\forall v \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R}) \quad (2.2)$$

e aplicando a integração por partes (identidade de Green quando

trata-se de $\mathbb{R}^n$) obtêm-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx + \int_{-\infty}^{\infty} k(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t, u) v \, dx$$

$$\forall v \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R}) \quad (2.3a)$$

com

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad , \quad (2.3b)$$

a equação (2.3) é a formulação variacional do nosso problema.

2.2. CONSTRUÇÃO DA BASE.

Para aplicar o método de Galerkin é fundamental dividir o domínio da função solução, neste caso $\mathbb{R}$, em subconjuntos que devem satisfazer as condições que mencionaremos a seguir.

Chama-se triangulação τ_h de $\mathbb{R}$ à classe finita de subconjuntos $K \subset \mathbb{R}$ tal que

- $\mathbb{R} = \bigcup_{K \in \tau_h} K$,
- cada $K \in \tau_h$ é fechado e o $\text{int}(K)$ não vazio ,
- para cada $K_1, K_2 \in \tau_h$ distintos $\text{int}(K_1) \cap \text{int}(K_2) = \emptyset$.

Os subespaços de aproximação devem ser de dimensão finita incluídos em $H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R})$ com uma base de funções com suporte pequeno e de fácil descrição.

Vamos separar então, seguindo as pautas anteriores, o conjunto $\mathbb{R}$ em duas regiões: uma região $\Omega \subset \mathbb{R}$ limitada tal que $\text{supp } u_0 \subset \Omega$, e seu complementar Ω^c (ver figura 1).

Consideramos a partição $\pi : \ell = x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1} = L$, onde os x_i serão chamados de nós da partição,

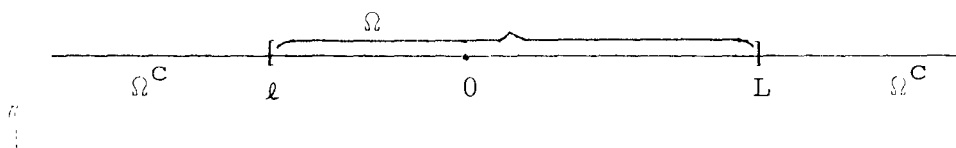
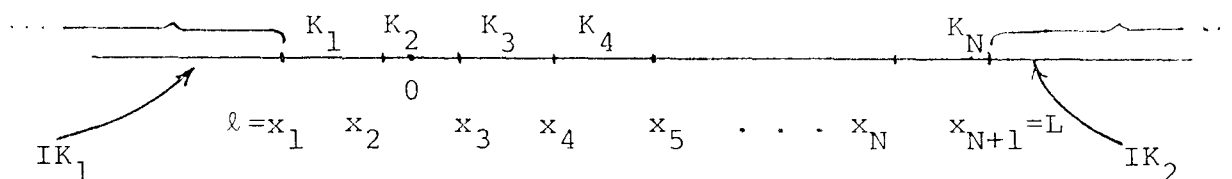


Figura 1

Dividimos a região Ω em intervalos de comprimento h_i sendo $h_i = x_{i+1} - x_i$, $i = 1, 2, \dots, N$ resultando N intervalos, ao fecho desses intervalos chamaremos elementos finitos, que vão ser parte dos conjuntos K da triangulação τ_h de $\mathbb{R}$. A região restante define dois intervalos infinitos os quais fechamos e consideramos mais dois elementos da triangulação τ_h (ver Fig. 2), estes elementos serão chamados de elementos infinitos.

O parâmetro que identifica a triangulação, h , é definida como $h = \max_i h_i$ em caso de partições não uniformes.



IK_i : elementos infinitos , $i=1,2$

K_i : elementos finitos , $i=1,2,\dots,N$

Figura 2

Vamos agora construir o subespaço de aproximação M_h adequado ao nosso problema. Este deve ser de dimensão finita e associado à triangulação τ_h , e tal que tenha uma base de funções que sejam polinômios por partes, de suporte pequeno, quando restritas a Ω e de decaimento rápido em Ω^c . Entretanto, como veremos posteriormente, a taxa de tal decaimento depende do tempo e, portanto, devemos utilizar uma variante do método de Galerkin em que o subespaço de aproximação depende do tempo, adaptando-se ao comportamento da solução. Isto é feito impondo certa dependência temporal em algumas das funções de base.

No nosso caso, para cada $t \in (0,T]$, M_h será o subespaço gerado pelas funções $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N+1}\}$ (ver Fig. 3) onde:

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{quando } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & \text{quando } x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{outro caso} \end{cases} \quad (2.4)$$

$$i = 2, 3, \dots, N-1, N.$$

$$\varphi_1(x, t) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{x_1^2 - x^2}{4k_0^- t}\right) & \text{quando } x \in (-\infty, x_1] \\ \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} & \text{quando } x \in [x_1, x_2] \\ 0 & \text{outro caso} \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\varphi_{N+1}(x, t) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{4k_0^+ t}\right) & \text{quando } x \in [x_{N+1}, \infty) \\ \frac{x - x_N}{x_{N+1} - x_N} & \text{quando } x \in [x_N, x_{N+1}] \\ 0 & \text{outro caso} \end{cases} \quad (2.6)$$

onde k_0^+ e k_0^- são como em (ii) na definição do problema.

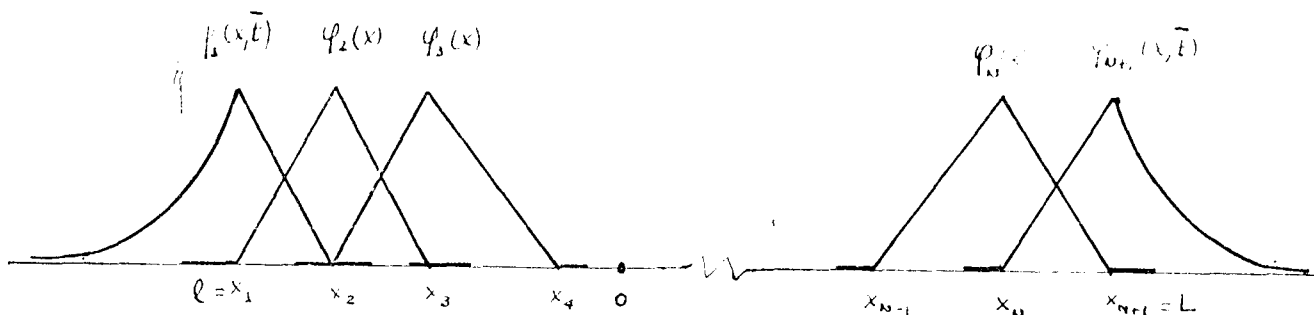


Figura 3

A escolha das funções φ_1 e φ_{N+1} é justificada com os argumentos mencionados abaixo. Utilizaremos desenvolvimento assintótico da solução quando x tende a $\pm\infty$. Para isto observemos que a forma assintótica no infinito, das soluções do problema

$$u_t = (k'(x, t) u_x)_x + f(u), \quad (2.7)$$

onde, por simplicidade, não escrevemos a dependência em x e t das funções envolvidas, $\tilde{e}$: {usando técnicas de Teoria de Perturbações [21]}

$$u(x,t) = u^0 + \frac{0(1)}{x}, \quad x \rightarrow \infty.$$

Recordamos, também, que a forma assintótica de $k(x,t)$ no infinito $\tilde{e}$:

$$k(x,t) = k_0^+ + 0(1)/x, \quad x \rightarrow \infty$$

$$k(x,t) = k_0^- + 0(1)/x, \quad x \rightarrow -\infty.$$

Além disso, observamos que a expansão assintótica no infinito de $f(u(x,t))$ $\tilde{e}$ da forma

$$f(u(x,t)) = \begin{cases} g_0^+(x,t) + \frac{1}{x} g_1^+(x,t) + \frac{1}{x^2} g_2^+(x,t) + \dots & \text{quando } x \rightarrow \infty \\ g_0^-(x,t) + \frac{1}{x} g_1^-(x,t) + \frac{1}{x^2} g_2^-(x,t) + \dots & \text{quando } x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

com

$$g_i^\pm(x,t) = 0(1), \quad i=1,2,3,\dots \text{ quando } x \rightarrow \pm \infty$$

Agora, como $u(x,t) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm \infty$ e $f(0) = 0$ (consequência de (ii)) observamos que:

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} f(u(x,t)) = \begin{cases} g_0^+(x,t) = 0 \\ g_0^-(x,t) = 0 \end{cases}$$

Portanto, a expansão assintótica de $f(u(x,t))$ é tal que

$$f(u(x,t)) = \frac{0(1)}{x} .$$

Colocando estes resultados na equação (2.7)

$$u_t^0 + 0(1)/x = k_0^+ u_{xx}^0 + \frac{0(1)}{x} \quad \text{quando } x \rightarrow \pm \infty ,$$

implicando, que o termo de primeira ordem na expansão assintótica de $u(x,t)$ deve satisfazer

$$u_t^0 = k_0^+ u_{xx}^0 \quad \text{quando } x \rightarrow \infty \quad (2.8)$$

e

$$u_t^0 = k_0^- u_{xx}^0 \quad \text{quando } x \rightarrow -\infty . \quad (2.9)$$

Vamos tomar, portanto, como base referida aos elementos infinitos a solução fundamental das equações (2.8) e (2.9); isto é, estamos tomando como aproximação no infinito o termo da primeira ordem na expansão assintótica, "coladas" ao polinômio por partes que existem, naturalmente no contorno, quando o trabalho é feito com o

método de Galerkin em um domínio limitado de $\mathbb{R}$. O fato de colar a solução de (2.8) e (2.9) significa manter no mínimo a continuidade dessas funções de base.

Como as soluções fundamentais de (2.8) e (2.9) são respectivamente

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi k_0^+ t}} \exp(-x^2/4k_0^+ t) \quad \text{e} \quad \frac{1}{2\sqrt{\pi k_0^- t}} \exp(-x^2/4k_0^- t)$$

a fim de manter a continuidade, com relação à variável x , em cada tempo $t \in (0, T]$ devemos multiplicar por $c/\sqrt{t}$, e assim $\phi_1(x, t)$ é

$$\phi_1(x, t) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{x_1^2 - x^2}{4k_0^- t}\right) & \text{quando } x \in (-\infty, x_1] \\ \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} & \text{quando } x \in [x_1, x_2] \\ 0 & \text{quando } x \in [x_2, \infty) \end{cases}.$$

A obtenção de $\phi_{N+1}(x, t)$ resulta análoga.

Pode-se melhorar as informações assintóticas anteriores se utilizarmos as informações já obtidas. Por exemplo poderíamos propor uma expansão assintótica

$$u(x,t) \sim \exp\left(-\frac{x^2}{4k_0^+ t}\right) \left[u_0(x,t) + \frac{u_1(x,t)}{x} + \frac{u_2(x,t)}{x^2} + \dots \right]$$

para $x \rightarrow +\infty$, onde $u_i(x,t) = O(1)$, $i = 1, 2, 3, \dots$. Neste caso também obteríamos $u_0(x,t) = C/\sqrt{t}$. Expansões análogas podem ser feitas para $x \rightarrow -\infty$.

CAPÍTULO III

APROXIMAÇÃO COM O MÉTODO DE GALERKIN

Neste capítulo descreveremos o uso do método de Galerkin com tempo contínuo e fazemos considerações sobre o erro, a seguir descreveremos o uso do método de Galerkin com tempo discreto, finalmente, aplicamos o método de Newton ao nosso problema e descrevemos sua discretização.

3.1. MÉTODO DE GALERKIN COM TEMPO CONTÍNUO.

Para a aplicação do método de Galerkin com tempo contínuo lembremos a formulação variacional do problema.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u}{\partial t} v dx + \int_{-\infty}^{\infty} k(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t, u) v dx ,$$

$$v \in H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R}), \quad t \in (0, T] \quad (3.1a)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) , \quad x \in \mathbb{R} \quad (3.1b)$$

onde por comodidade não explicitamos a dependência das variáveis x e t em algumas funções. As condições das funções k , f e u_0 que

foram descritas no capítulo I seguem válidas.

Queremos chamar a atenção para o fato de que neste trabalho estamos interessados apenas no cálculo de aproximações numéricas, e, portanto, no que segue vamos supor que a solução fraca do problema (3.1) existe e é única. O leitor interessado poderá encontrar teoremas de existência e unicidade das soluções de (3.1) nas seguintes referências Friedman [9], Ladyzenskaja [10] e Lions [11].

Passamos agora a descrever uma adaptação do método de Galerkin ao nosso problema. A diferença essencial é que duas funções de base envolvidas dependem do tempo t .

Seja M_h o subespaço finito em $H^1(\mathbb{R}) \cap L^{2p}(\mathbb{R})$ como foi definido no capítulo anterior. O método de Galerkin com tempo contínuo consiste em achar uma aplicação $U_h : [0, T] \rightarrow M_h$ tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial U_h}{\partial t} v dx + \int_{-\infty}^{\infty} k(x, t) \frac{\partial U_h}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t, U_h) v dx ,$$

$$v \in M_h , \quad t \in (0, T] , \quad (3.2a)$$

$$U_h(x, 0) = u_0(x) \quad \text{pequeno} \quad (3.2b)$$

O valor $U_h(x, 0)$ inicial é usualmente determinado por interpolação de u_0 em M_h ou por projeções de tipo L^2 ou H^1 sobre M_h .

Sendo $M_h = \text{Span}\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N+1}\}$ onde φ_i são linear independentes,

em cada $t \in [0, T]$, escrevemos

$$U_h(x, t) = \alpha_1(t) \varphi_1(x, t) + \sum_{i=2}^N \alpha_i(t) \varphi_i(x) + \alpha_{N+1}(t) \varphi_{N+1}(x, t) \quad (3.3)$$

Substituindo a expressão (3.3) em (3.2a) e fazendo $V = \varphi_j$ escrevemos abreviadamente

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial (\alpha_i(t) \varphi_i)}{\partial t} \varphi_j \, dx + \sum_{i=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} k(x, t) \alpha_i(t) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \, dx = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t, \sum_{i=1}^{N+1} \alpha_i(t) \varphi_i) \varphi_j \, dx \end{aligned} \quad (3.4)$$

com $j = 1, 2, 3, \dots, N+1$ e $t \in (0, T]$.

Assim, (3.2) transforma-se num sistema de equações diferenciais ordinárias não linear, com valor inicial. Em forma matricial tem-se

$$GBK(t) \frac{d\bar{\alpha}(t)}{dt} + GAK(t) \bar{\alpha}(t) = GF(\bar{\alpha}(t)) \quad (3.5a)$$

$$\begin{aligned} [\alpha_1(0) \varphi_1(x, 0) + \sum_{i=2}^N \alpha_i(0) \varphi_i(x) + \alpha_{N+1}(0) \varphi_{N+1}(x, 0) - \\ - u_0(x)] \text{ pequeno} \end{aligned} \quad (3.5b)$$

onde as matrizes GAK e GBK são:

$$GBK(t) = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{x_2} \varphi_1^2(x,t) dx & \int_{x_1}^{x_2} \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx & 0 & \dots & 0 \\ \int_{x_1}^{x_2} \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx & \int_{x_1}^{x_3} \varphi_2^2(x) dx & \int_{x_2}^{x_3} \varphi_2(x) \varphi_3(x) dx & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \int_{x_2}^{x_3} \varphi_2(x) \varphi_3(x) dx & \int_{x_2}^{x_4} \varphi_2^2(x) dx & \int_{x_3}^{x_4} \varphi_3(x) \varphi_4(x) dx & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \int_{x_{N-1}}^{x_N} \varphi_{N-1}(x) \varphi_N(x) dx & \int_{x_{N-1}}^{x_{N+1}} \varphi_N^2(x) dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} \varphi_N(x) \varphi_{N+1}(x) dx \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \int_{x_N}^{x_{N+1}} \varphi_N(x) \varphi_{N+1}(x) dx & \int_{x_N}^{\infty} \varphi_{N+1}^2(x,t) dx \end{bmatrix}$$

$$GAK(t) = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{x_2} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} \varphi_1 + k \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right)^2 \right) dx & \int_{x_1}^{x_2} k \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} dx & 0 & \dots & 0 \\ \int_{x_1}^{x_2} k \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} & \int_{x_1}^{x_3} k \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right)^2 dx & \int_{x_2}^{x_3} k \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} dx & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \int_{x_2}^{x_3} k \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} dx & \int_{x_2}^{x_4} k \left(\frac{\partial \varphi_3}{\partial x} \right)^2 dx & \int_{x_3}^{x_4} k \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} \frac{\partial \varphi_4}{\partial x} dx & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \int_{x_{N-1}}^{x_N} k \frac{\partial \varphi_{N-1}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_N}{\partial x} dx & \int_{x_{N-1}}^{x_{N-1}} k \left(\frac{\partial \varphi_N}{\partial x} \right)^2 dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} k \frac{\partial \varphi_N}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial x} dx \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \int_{x_N}^{x_{N+1}} k \frac{\partial \varphi_N}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial x} dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial t} \varphi_{N+1} + k \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial x} \right)^2 \right) dx \end{bmatrix}$$

e $\bar{\alpha}(t) = (\alpha_1(t), \alpha_2(t), \alpha_3(t), \dots, \alpha_{N+1}(t))^T$

O vetor GF tem por componente j -ésima, $j = 1, 2, \dots, N+1$,

$$GF(\bar{\alpha}(t)) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha_1(t)\varphi_1(x,t) + \sum_{i=2}^N \alpha_i(t)\varphi_i(x) + \right. \\ \left. + \alpha_{N+1}(t)\varphi_{N+1}(x,t))\varphi_j dx \right).$$

Observemos que, pela escolha das funções de base do subespaço M_h , as matrizes GAK e GBK são tridiagonais. Não é difícil provar que as matrizes GAK e GBK são positivas definidas. Com as condições supostas para as funções k e f o sistema de equações ordinárias com valor inicial (3.5) possui solução única. Também pode-se observar que quando a função f é independente de u a solução de (3.5) é

$$\bar{\alpha}(t) = \exp(-tGBK^{-1}GAK)\bar{\alpha}(0) + \int_0^t \exp[(t-\tau)GBK^{-1}GAK]GBK^{-1}GF(\tau)d(\tau) \quad (3.6)$$

onde, como é usual, $\exp(-tC) = \sum_{m=0}^{\infty} (-tC)^m/m!$, sendo C uma matriz quadrada.

3.2. CONSIDERAÇÕES SOBRE O ERRO DE APROXIMAÇÃO.

Neste trabalho tomamos como definição de *erro de aproximação* o valor de $\|u - u_h\|$ onde $\|\cdot\|$ representa uma norma no espaço de funções considerado. A sequência do trabalho esclarecerá qual é a norma considerada.

Inicialmente argumentaremos heurísticamente: uma dificuldade ao se trabalhar com problemas em domínios ilimitados é que os resultados da teoria de aproximação necessários para se estabelecer estimativas do erro, somente são válidos em domínios limitados. Entretanto, pelos resultados da expansão assintótica, sobre o comportamento da solução no infinito e pelo fato da base por nós considerada capturar exatamente tal comportamento, a contribuição para o erro proveniente da parte não limitada deve ser desprezível, com uma escolha conveniente de Ω , em relação à contribuição, para o erro, proveniente da parte limitada.

Esta argumentação implica que, com a escolha conveniente de Ω , uma estimativa a priori para domínios limitados dá informação razoável sobre o erro cometido.

Para isto, damos a seguir resultados sobre estimativa de erro em domínios limitados (sob certas hipóteses) e, ao final da seção, formalizamos a argumentação heurística anterior, derivando uma estimativa a posteriori para o nosso domínio ilimitado.

Começemos com o problema associado a (2.1) em um domínio limitado $\Omega = [-L, L]$, com condições de contorno dadas, em sua formulação fraca:

$$\text{seja } w(x, t) \in \mathbf{V}(\Omega) = C(0, T; H^1(\Omega)) \cap C^1(0, T; L^2(\Omega))$$

a solução de

$$\left(\frac{\partial w}{\partial t}, v\right) + (kVw, Vv) = (f(w), v) \quad , \quad \forall v \in H^1_0(\Omega) \quad (3.8a)$$

$$w(x, 0) = w_0(x) \in H^1(\Omega) \quad , \quad (3.8b)$$

$$w(-L, t) = g_1(t) \quad , \quad w(L, t) = g_2(t) \quad , \quad g_1, g_2 \in C[0, T] \quad (3.8c)$$

onde $(\cdot, \cdot)$ denota o produto interno em $L^2(\Omega)$, definido no capítulo I, e suporemos que as condições sobre $k(x, t)$, $f(x, t, w)$ sejam satisfeitas (em 3.8 por facilidade de notação, sô explicitamos a dependência em w).

Observemos que diferentemente do caso de domínio ilimitado, não é necessário exigir que $w \in L^2(0, T; L^{2p}(\Omega))$, porque como $w \in C(0, T; H^1(\Omega))$, utilizando os teoremas de imersão de Sobolev temos imediatamente

$$w \in C(0, T; L^\infty(\Omega)) \quad , \quad \text{e como } \Omega \text{ é limitado } w \in C(0, T; L^q(\Omega))$$

para qualquer $q \in [1, \infty)$.

Além disso, observamos que (3.8) pode ser reescrito como se segue:

$$\text{seja } w \in \mathbf{V}(\Omega) \text{ tal que } w(x, t) \in h(x, t) + H^1_0(\Omega)$$

onde

$$h(x, t) \in \mathbf{V}(\Omega) \quad , \quad h(-L, t) = g_1(t) \quad \text{e} \quad h(L, t) = g_2(t) \quad ,$$

(posteriormente faremos uma escolha para $h(x,t)$) solução de:

$$\left(\frac{\partial w}{\partial t}, v\right) + (kVw, Vv) = (f(w), v), \quad \forall v \in H_O^1(\Omega) \quad (3.9a)$$

$$w(x, 0) = w_O(x) \quad (3.9b)$$

Agora, dado um subespaço de aproximação, $N_h \subset H_O^1(\Omega)$, de dimensão finita, o problema discretizado tem uma solução $w_h \in V(\Omega)$ tal que $w_h \in h(x,t) + N_h$ satisfazendo

$$\left(\frac{\partial w_h}{\partial t}, v\right) + \left(k \frac{\partial w_h}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial x}\right) = (f(w_h), v), \quad \forall v \in N_h \quad (3.10)$$

$$w_h(x, 0) - w(x, 0) \text{ pequeno.}$$

Para o resultado que apresentaremos a seguir faremos a hipótese adicional de que $f(x,t,u)$ é uniformemente Lipschitziana em u , com constante de Lipschitz L , isto é,

$$|f(x,t,u_1) - f(x,t,u_2)| \leq L \|u_1 - u_2\|_{V(\Omega)}$$

Com estas hipóteses temos o seguinte teorema.

TEOREMA 3.1. Sejam w e w_h como acima. Então existe uma constante C que depende de c_O, c_1, L e T tal que:

$$\|w - w_h\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \|w - w_h\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \quad (3.11)$$

$$\leq C[\|w - z\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \|w - z\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|\frac{\partial(w-z)}{\partial t}\|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))}] \\ + \|w_h - z\|_{L^2(\Omega)}(0)$$

para qualquer $z \in V(\Omega)$ tal que $z \in h(x,t) + N_h$.

DEMONSTRAÇÃO. Denotamos $\eta = w - w_h$, $\xi = w_h - z$ e $\eta = w - z$ e reescrevemos (3.9) como

$$(\frac{\partial z}{\partial t}, V) + (k \nabla z, \nabla V) = (f(w), V) + (k(\nabla z - \nabla w), \nabla V) - (\frac{\partial \eta}{\partial t}, V) \quad (3.12)$$

para todo $V \in N_h$, $t \in (0, T]$.

Subtraindo (3.12) de (3.10) com $V = \xi$ (o que pode ser feito porque $\xi = w_h - z$ é elemento de N_h) obtém-se

$$(\frac{\partial \xi}{\partial t}, \xi) + (k \nabla \xi, \nabla \xi) = (f(w_h) - f(w), \xi) + \\ (k(\nabla w - \nabla z), \nabla \xi) + (\frac{\partial \eta}{\partial t}, \xi). \quad (3.13)$$

Temos agora a seguinte sequência de estimativas

$$\left(\frac{\partial \xi}{\partial t}, \xi\right) = \int_{\Omega} \frac{\partial \xi}{\partial t} \xi dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \xi^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\xi\|_{L^2(\Omega)}^2 ; \quad (3.14)$$

$$(k \nabla \xi, \nabla \xi) \geq c_0 \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c_2 \|\xi\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} (f(w_h) - f(w), \xi) &\leq L \|e\|_{L^2(\Omega)} \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C (\|\eta\|_{L^2(\Omega)} + \|\xi\|_{L^2(\Omega)}) \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C (\|\eta\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\xi\|_{L^2(\Omega)}^2) ; \end{aligned} \quad (3.16)$$

(onde C depende de L).

$$\begin{aligned} (k(\nabla Z - \nabla w), \nabla v) &= (k \nabla \eta, \nabla \xi) \leq c_1 \|\nabla \eta\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C \|\eta\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{c_2}{4} \|\xi\|_{H^1(\Omega)}^2 , \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde a última desigualdade foi obtida usando a desigualdade de Schwartz e a desigualdade

$$ab \leq \varepsilon a^2 + \frac{1}{4\varepsilon} b^2$$

para $a, b \geq 0$. com ε conveniente (c_0 e c_1 foram definidos na seção

(2.1), c_2 é a constante de relação entre as normas de 3.15).

Finalmente,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \eta}{\partial t}, \xi \right) &\leq \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t} \right\|_{H^{-1}(\Omega)} \left\| \xi \right\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq C \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t} \right\|_{H^{-1}(\Omega)}^2 + \frac{C_2}{4} \left\| \xi \right\|_{H^1(\Omega)}^2, \end{aligned} \quad (3.18)$$

obtida como a anterior.

Utilizando as estimativas (3.14) até (3.18) em (3.13), obtém-se

$$\frac{d}{dt} \left\| \xi \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \xi \right\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \left[\left\| \xi \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \eta \right\|_{H^1(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t} \right\|_{H^{-1}(\Omega)}^2 \right].$$

Integrando em t , de $t = 0$ até $t = \tau \leq T$, vem

$$\begin{aligned} \left\| \xi \right\|_{L^2(\Omega)}^2(\tau) + \int_0^\tau \left\| \xi \right\|_{H^1(\Omega)}^2(s) ds &\leq C \left[\int_0^\tau \left\| \xi \right\|_{L^2(\Omega)}^2(s) ds + \right. \\ &\left. + \left\| \eta \right\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 + \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t} \right\|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))}^2 \right] + \left\| \xi \right\|_{L^2(\Omega)}^2(0). \end{aligned}$$

Aplicando a desigualdade de Gronwall e tomando o supremo em $\tau \in (0, T]$, vem:

$$\begin{aligned} & \| \xi \|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \| \xi \|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 \leq C \| \eta \|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 + \\ & + \| \frac{\partial \eta}{\partial t} \|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))}^2 + \| \xi \|_{L^2(\Omega)}^2(0) , \end{aligned}$$

o que implica (evidentemente com C diferente)

$$\begin{aligned} & \| \xi \|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \| \xi \|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \\ & \leq C \| \eta \|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \| \frac{\partial \eta}{\partial t} \|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))} + \| \xi \|_{L^2(\Omega)}(0) . \end{aligned}$$

Finalmente, usando a desigualdade triangular $\| \xi \| \leq \| \eta \| + \| \xi \|$, onde $\| \cdot \|$ representa as diversas normas da última desigualdade , obtêm-se o resultado enunciado e a demonstração está completa. ■

O teorema 3.1 é uma variante do teorema 4.1 pag. 135 de Fairweather [7]. A diferença é que lá o resultado é enunciado para problemas com condições de contorno homogênea e, para o nosso caso , temos que fazer apenas uma adaptação. Além disso, em Fairweather a constante C depende de $\| \nabla w \|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}$. Tal dependência é devida ao fato de se trabalhar com constante de difusão k dependendo de w . No nosso problema como k depende apenas de x e t , a dependência

de C com relação ao $\|Vw\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}$ não ocorre.

Para os resultados seguintes, precisamos da

DEFINIÇÃO. Uma família de subespaços $\{N_h\}_{0 < h \leq 1}$ de $H^1(\Omega)$ (ou $H^1_0(\Omega)$) é dita uma família de subespaços $S_{k,r}$ (ou S^O_{kr}), para $r \geq 2$, se para todo $h \in (0,1)$, $N_h \subset H^k(\Omega)$, $0 \leq k \leq r$, e para todo $u \in H^s(\Omega)$ com $1 \leq s \leq r$ existe uma constante C independente de h e u tal que

$$\inf_{z \in N_h} \{ \|u - z\|_{L^2(\Omega)} + h \|u - z\|_{H^1(\Omega)} \} \leq Ch^s \|u\|_{H^s(\Omega)}.$$

OBSERVAÇÃO IMPORTANTE. Os subespaços M_h^r ($0 < h \leq 1$) gerados pelas restrições ao intervalo $[x_1, x_{N+1}]$, das funções $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N+1}$ (definidos em Scott [17]) constituem uma família $S_{1,2}$ enquanto que as restrições que pertencem a $H^1_0(\Omega)$, isto é, $\varphi_2, \varphi_3, \dots, \varphi_N$, geram subespaços N_h^r que constituem uma família $S^O_{1,2}$.

Os dois resultados escritos a seguir também são pequenas variantes de resultados de Fairweather [7], com demonstrações que são exatamente as mesmas que lá, uma vez feita a translação por $h(x,t)$ no espaço $V(\Omega)$, e, por isto, não as faremos limitando-nos a enunciar os resultados.

Para isto vamos supor que $N_h^r \subset S^O_{1,r}$, $r \geq 2$, e consideramos

a aplicação $Z : [0, T] \rightarrow N_h^r$ definida como solução de

$$(k(x, t) (w - (h + Z)), V) + (w - (h + Z), V) = 0, \quad \forall V \in N_h^r \quad (3.19)$$

Z é chamada a $H^1(\Omega)$ -projeção, com peso, de w em N_h^r . No caso em que $\Omega = (-L, L)$ vale a condição de regularidade elítica seguinte: se $\phi \in H^s(\Omega)$ onde $s = 0$ ou $s = 1$ e $\psi \in H_0^1(\Omega)$ satisfaz

$$(k(x, t) \nabla \psi, \nabla v) = (\phi, v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega) \quad (3.20)$$

então

$$\|\psi\|_{H^{s+2}(\Omega)} \leq C_s \|\phi\|_{H^s(\Omega)},$$

onde C_s depende de c_0 de $\frac{\partial^2 k(x, t)}{\partial x^2}$. (No caso em que Ω é conjunto em $\mathbb{R}^n$, $n > 1$, então C_s depende também do próprio Ω mas, como nosso caso Ω é um intervalo na reta, isto não acontece). Temos então:

LEMA 3.2. Se as segundas derivadas de $k(x, t)$ são limitadas em $\bar{\Omega} \times [0, T]$ e se $u \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega))$ e $\frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ então existe uma constante C , independente de h , tal que $\eta = w - Z$ satisfaz

$$\begin{aligned} & \| \eta \|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \left\| \frac{\partial \eta}{\partial t} \right\|_{L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))} \\ & \leq Ch^2 \left[\| w \|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))} + \left\| \frac{\partial w}{\partial t} \right\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Usando este lema, deduz-se uma estimativa com a norma $L^\infty(0,T;L^2(\Omega))$.

TEOREMA 3.3. Suponhamos que as hipóteses do lema 3.2 são satisfeitas e que existe uma constante $K > 0$ tal que

$$\| \nabla Z \|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \leq K.$$

Se $w_h(0)$ é escolhido tal que $\| w_h - (h + Z) \| (0) = O(h^2)$, onde Z verifica (3.19), então existe uma constante C tal que

$$\| w - w_h \|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} \leq Ch^2. \quad (3.22)$$

A condição sobre Z imposta no teorema 3.3 está garantida quando escolhemos o subespaço de aproximação formando por polinômios por partes como N_h^r (ver Scott [17]).

Uma observação importante é que a constante C no Teorema 3.3 não depende do tamanho do intervalo $\Omega = [-L, L]$ no caso de problemas de dimensão um, na variável espacial.

Precisamos também do seguinte resultado:

LEMA 3.4. Sejam $u, v \in \mathbf{V}(\Omega)$; com $\Omega = (-L, L)$, $L \geq 1$, soluções fracas de

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t = (k(x,t)u_x)_x + f(x,t,u) \quad , \quad x \in \Omega \quad , \quad t \in (0,T] \\ \\ u(x,0) = q(x) \in H^1(\Omega) \\ \\ (u(-L,t) = g_1(t) \quad , \quad u(L,t) = g_2(t) \quad , \quad g_1, g_2 \in H^1(0,T) \end{array} \right.$$

com a relação de compatibilidade $q(-L) = g_1(0)$, $q(L) = g_2(0)$, e

$$\left\{ \begin{array}{l} v_t = (k(x,t)v_x)_x + f(x,t,v) \quad , \quad x \in \Omega \quad , \quad t \in (0,T] \\ \\ v(x,0) = q(x) \in H^1(\Omega) \\ \\ v(-L,t) = h_1(t) \quad , \quad v(L,t) = h_2(t) \quad , \quad h_1, h_2 \in H^1(0,T) \quad , \end{array} \right.$$

com a relação de compatibilidade $q(-L) = h_1(0)$ e $q(L) = h_2(0)$ respectivamente; $f(x,t,u)$ uniformemente Lipschitziana respeito de u ; e $\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}$ limitada em $(x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]$.

Então, existe uma constante C dependendo do $\max\{|\frac{\partial k(x,t)}{\partial x}|\}$, $(x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]$, da constante de Lipschitz e de T tal que

$$\|u - v\|_{L^2(\Omega)}^2(\tau) \leq C\sqrt{L} \left[\sum_{i=1}^2 \|g_i - h_i\|_{L^2(0,\tau)}^2 + \right. \\ \left. + \|g_i' - h_i'\|_{L^2(0,\tau)}^2 + |g_i(\tau) - h_i(\tau)| \right].$$

DEMONSTRAÇÃO. Defina $w = u - v$. Então w é solução fraca de

$$w_t = (kw_x)_x + g(x, t) \quad (3.23a)$$

$$w(x, 0) = 0 \quad (3.23b)$$

$$w(-L, t) = g_1(t) - h_1(t), \quad w(L, t) = g_2(t) - h_2(t) \quad (3.23c)$$

onde $g(x, t) = f(x, t, u(x, t)) - f(x, t, v(x, t))$ e $w(-L, 0) = w(L, 0) = 0$.

Considere agora a extensão linear das condições de contorno de $w(x, t)$ ao interior de Ω , isto é, a função

$$h(x, t) = \frac{g_2(t) - h_2(t) - (g_1(t) - h_1(t))}{2L} x + \frac{(g_2(t) - h_2(t)) + (g_1(t) - h_1(t))}{2}.$$

Observamos que $h(x, 0) \equiv 0$ (pelas relações de compatibilidade) e também que

$$\|h(x, t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\sqrt{L} \sum_{i=1}^2 |g_i(t) - h_i(t)|, \quad (3.24)$$

$$\|h_t(x,t)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\sqrt{L} \sum_{i=1}^2 |g'_i(t) - h'_i(t)| \quad (3.25)$$

e

$$\|(k(x,t)h_x(x,t))_x\|_{L^2(\Omega)} \leq C/\sqrt{L} \sum_{i=1}^2 |g_i(t) - h_i(t)| \quad (3.26)$$

onde em (3.26) a constante depende de $\max\{k_x(x,t); (x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]\}$.

Seja agora

$$\bar{w}(x,t) = w(x,t) - h(x,t). \quad (3.27)$$

Temos, então, que $\bar{w}(\cdot, t) \in H^1_0(\Omega)$ é solução fraca da equação

$$\bar{w}_t = (k\bar{w}_x)_x + g(x,t) \quad (3.28a)$$

$$\bar{w}(-L,0) = \bar{w}(L,0) = 0 \quad (3.28b)$$

$$\bar{w}(x,0) = 0 \quad (3.28c)$$

onde $\bar{g}(x,t) = f(x,t,u(x,t)) - f(x,t,v(x,t)) +$

$$+ (k(x,t)h_x(x,t))_x - h_t(x,t) \quad (3.29)$$

Multiplicando (3.28a) por $\bar{w}$ e integrando com respeito a x sobre Ω , após uma integração por partes, vem que

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2(t) + (k\bar{w}_x, \bar{w}_x) = (\bar{g}, \bar{w}) \leq \|\bar{g}\|_{L^2(\Omega)}(t) \|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}(t)$$

$$\frac{d}{dt} \|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2(t) \leq \|\bar{g}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2(t) \quad (3.30)$$

Mas, utilizando (3.29), o fato que f é Lipschitziana, (3.24) até (3.27), temos

$$\|\bar{g}\|_{L^2(\Omega)} \leq C[\|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2 + LH(t)]$$

onde $H(t) = \sum_{i=1}^2 \{ |g_i(t) - h_i(t)|^2 + |g'_i(t) - h'_i(t)|^2 \}$.

Dessa forma, utilizando a condição inicial para $\bar{w}$, a integração de (3.30) com respeito a t em $[0, \tau]$ fornece

$$\|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2(\tau) \leq C \left[\int_0^\tau \|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}^2(t) dt + L \int_0^\tau H(t) dt \right]$$

donde, pela desigualdade de Gronwall, obtém-se

$$\|\bar{w}\|_{L^2(\Omega)}(\tau) \leq C\sqrt{L} \left(\int_0^\tau H(t) dt \right)^{1/2}.$$

De (3.24), (3.27) e a última desigualdade obtemos o resultado enunciado. ■

Finalmente temos o seguinte resultado:

TEOREMA 3.5. Seja $u \in \mathbf{V}$ uma solução de (2.1) cujo comportamento assintótico para $x \rightarrow \pm \infty$ seja

$$u(x, t) = \exp\left(\frac{-x^2}{4k_0^+ t}\right) \left[\frac{c_1}{t^{1/2}} + \frac{0(1)}{x} \right] \text{ para } x \rightarrow +\infty$$

uniformemente para $t \in [0, T]$.

$$u(x, t) = \exp\left(\frac{-x^2}{4k_0^- t}\right) \left[\frac{c_2}{t^{1/2}} + \frac{0(1)}{x} \right] \text{ para } x \rightarrow -\infty$$

uniformemente para $t \in [0, T]$.

$$u_t(x, t) = \exp\left(\frac{-x^2}{4k_0^+ t}\right) \left[C_1 \left(\frac{x^2}{4k_0^+ t^{5/2}} - \frac{1}{2t^{3/2}} \right) + \frac{0(1)}{x} \right] \text{ para } x \rightarrow +\infty,$$

uniformemente para $t \in [0, T]$.

$$u_t(x, t) = \exp\left(\frac{-x^2}{4k_0^- t}\right) \left[C_2 \left(\frac{x^2}{4k_0^- t^{5/2}} - \frac{1}{2t^{3/2}} \right) + \frac{0(1)}{x} \right] \text{ para } x \rightarrow -\infty,$$

uniformemente para $t \in [0, T]$.

Se U_h é a solução de (3.1) calculada em $\mathbb{R}$ dividido em $\Omega = [-L, L]$ e Ω^c , $L > 1$ então

$$\|u - U_h\|_{L^2(\mathbb{R})}(\tau) \leq Ch^2 + m(\tau, L) + F(U_h, L)(\tau)$$

onde C é uma constante, $m(\tau, L)$ é uma função independente de h tal que

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m(\tau, L) = 0 \quad \text{uniformemente em } \tau \in [0, T]$$

e

$$\begin{aligned} F(U_h, L) = & \sqrt{L} \left[\|U_h\|_{L^2(\Omega^c)}^2 + \|U_h(-L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)}^2 + \|U_h(L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)}^2 \right. \\ & + \left\| \frac{\partial}{\partial t} U_h(-L, \cdot) \right\|_{L^2(0, \tau)}^2 + \left\| \frac{\partial}{\partial t} U_h(L, \cdot) \right\|_{L^2(0, \tau)}^2 + \\ & \left. + |U_h(-L, \tau)|^2 + |U_h(L, \tau)|^2 \right]; \end{aligned}$$

(onde $\Omega^c = \mathbb{R} - \Omega$).

OBSERVAÇÃO. A dependência de $F(U_h, L)$ em relação a U_h é realmente dos coeficientes de φ_1 e φ_{N+1} .

DEMONSTRAÇÃO. Temos

$$\begin{aligned} \|u - U_h\|_{L^2(\mathbb{R})}(\tau) & \leq 2(\|u - U_h\|_{L^2(\Omega)}(\tau) + \|u - U_h\|_{L^2(\Omega^c)}(\tau)) \\ & \leq 2(\|u - U_h\|_{L^2(\Omega)}(\tau) + \|u\|_{L^2(\Omega^c)}(\tau) + \|U_h\|_{L^2(\Omega^c)}(\tau)). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Consideremos agora uma função auxiliar $v \in \mathbf{V}(\Omega)$ que é solução do problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_t = (k(x,t) v_x)_x + f(x,t,v) \quad , \quad x \in \Omega \quad , \quad t \in (0,T] \\ v(x,0) = u_0(x) \quad , \quad x \in \Omega \\ v(-L,t) = U_h(-L,t) \quad , \quad v(L,t) = U_h(L,t) \quad . \end{array} \right.$$

Podemos aplicar o Lema 3.4 e obter:

$$\|u-v\|_{L^2(\Omega)}(\tau) \leq C\sqrt{L}[\|u(-L,\cdot)-U_h(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|u(L,\cdot)-U_h(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} +$$

$$\|u_t(-L,\cdot)-U_{h_t}(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|u_t(L,\cdot)-U_{h_t}(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} +$$

$$|u(-L,\tau) - U_h(-L,\tau)| + |u(L,\tau) - U_h(L,\tau)|]$$

$$\leq C\sqrt{L}[\|u(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|u(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|u_t(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|u_t(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} +$$

$$|u(-L,\tau)| + |u(L,\tau)| + \|U_h(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|U_h(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + \|U_{h_t}(-L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} +$$

$$\|U_{h_t}(L,\cdot)\|_{L^2(0,\tau)} + |U_h(-L,\tau)| + |U_h(L,\tau)|] \quad ,$$

assim, utilizando o comportamento assintótico de u e u_t obtém-se, que existe uma constante C tal que

$$\|u - v\|_{L^2(\Omega)}(\tau) \leq \frac{C}{L^{3/2}} \frac{1}{\tau^3} \exp\left(\frac{-L^2}{4k_0\tau}\right) + F_1(U_h, L)(\tau) \quad (3.32)$$

onde

$$\begin{aligned} F_1(U_h, L)(\tau) = & \sqrt{L} (\|U_h(-L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)} + \|U_h(L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)} + \\ & + \|U_{ht}(-L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)} + \|U_{ht}(L, \cdot)\|_{L^2(0, \tau)} + |U_h(-L, \tau)| + |U_h(L, \tau)|) \end{aligned}$$

Além disso, a restrição de U_h a Ω coincide com a solução w_h de (3.10) que é a aproximação de (3.9), com $g_1(t) = U_h(-L, t)$, $g_2(t) = U_h(L, t)$, $w(x, 0) = u_0(x)$, se tomarmos $h(x, t) = U_h(-L, t)\varphi_1(x, t) + U_h(L, t)\varphi_{N+1}(x, t)$ e $N_h = N_h^k$. Podemos, portanto aplicar o Teorema 3.3 e concluir que existe uma constante C tal que

$$\|v - U_h\|_{L^2(\Omega)}(\tau) \leq Ch^2, \quad \tau \in [0, T]. \quad (3.33)$$

Assim, usando (3.32) e (3.33),

$$\begin{aligned} \|u - U_h\|_{L^2(\Omega)}(\tau) & \leq \|u - v\|_{L^2(\Omega)}(\tau) + \|v - U_h\|_{L^2(\Omega)}(\tau) \\ & \leq \frac{C}{L^{3/2}} \frac{1}{\tau^3} \exp\left(\frac{-L^2}{4k_0\tau}\right) + F_1(U_h, L) + Ch^2. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Utilizando outra vez o comportamento assintótico de u , existe uma constante C tal que

$$\|u\|_{L^2(\Omega^c)}(\tau) \leq C(\tau^{1/2} + \frac{1}{\tau^{1/2}} + 1)^{1/2} [\operatorname{erfc}(\frac{L}{\sqrt{2k_0\tau}})]^{1/2} \quad (3.35)$$

onde $\operatorname{erfc}(p) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_p^\infty e^{-x^2} dx$ é a função erro complementar. (Sabe-se que $\lim_{p \rightarrow +\infty} \operatorname{erfc}(p) = 0$).

Usando (3.33), (3.34) e (3.35) temos:

$$\|u - u_h\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq Ch^2 + m(L, \tau) + F(u_h, L)$$

onde

$$m(L, \tau) = C\left\{\frac{1}{L^{3/2}} \frac{1}{\tau^3} \exp\left(\frac{-L^2}{4k_0\tau}\right) + \left(\tau^{1/2} + \frac{1}{\tau^{1/2}} + 1\right)^{1/2} [\operatorname{erfc}(\frac{L}{\sqrt{2k_0\tau}})]^{1/2}\right\},$$

$$e, \quad F(u_h, L)(\tau) = \|u_h\|_{L^2(\Omega^c)}(\tau) + F_1(u_h, L)(\tau)$$

donde o resultado está provado. ■

O resultado anterior fornece uma estimativa a posteriori, isto é, ela depende da obtenção prévia da aproximação u_h . Entretanto, como observamos logo após o enunciado do Teorema 3.5, se por uma análise do problema discretizado tivéssemos informações

assintóticas sobre os coeficientes de φ_1 e φ_{N+1} poderíamos usá-los e transformar a estimativa a posteriori em uma estimativa a priori. Além disso, espera-se que o comportamento assintótico destes coeficientes para $L \rightarrow +\infty$ seja semelhante ao de u , isto é, com decaimento exponencial.

Estas questões serão temas de futuras investigações.

3.3. MÉTODO DE GALERKIN COM TEMPO DISCRETO.

Com o objetivo de obter soluções aproximadas ao sistema de equações diferenciais ordinárias (3.5) vamos discretizar a variável tempo. Seja $t_s = s\Delta t$, onde $\Delta t = T/M$, s, M são inteiros positivo. A discretização do Método de Galerkin pode ser obtida pelo uso de diferenças finitas na variável temporal em (3.5). Uma primeira discretização é:

$$\text{GBK}(t) \frac{\bar{\alpha}_{s+1} - \bar{\alpha}_s}{\Delta t} + \text{GAK}(t) \bar{\alpha}_{s+1/2} = \text{GF}(\bar{\alpha}_{s+1/2}), \quad s \geq 0 \quad (3.36a)$$

$$\bar{\alpha}_0 = \bar{\alpha}(0) \quad (3.36b)$$

onde $\bar{\alpha}_s$ representa uma aproximação de $\bar{\alpha}(t_s)$ e

$$\bar{\alpha}_{s+1/2} = \frac{\bar{\alpha}_s + \bar{\alpha}_{s+1}}{2}.$$

Aqui a solução aproximada a (3.1) vamos escrever como segue

$$U_{h_s} = \alpha_{s1} \varphi_1(x, t) + \sum_{i=2}^N \alpha_{si} \varphi_i(x) + \alpha_{sN+1} \varphi_{N+1}(x, t) \quad (3.37)$$

e escolhemos U_o com os coeficientes obtidos pela interpolação de u_o em M_h ; assim os α_{oi} são soluções do sistema

$$u_o(x_j) = \alpha_{o1} \varphi_1(x_j, 0) + \sum_{i=2}^N \alpha_{oi} \varphi_i(x_j) + \alpha_{oN+1} \varphi_{N+1}(x_j, 0),$$

$$j = 1, 2, \dots, N+1$$

resultando, pela escolha do conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}$ contendo o suporte da função $u_o(x)$, que os valores de $\alpha_{o1} = \alpha_{oN+1} = 0$ e os restantes $\alpha_{oj} = u_o(x_j)$, $j = 2, \dots, N$.

A discretização (3.36) é também chamado de aproximação Crank-Nicolson Galerkin e a solução desse sistema tem muito a ver com a dependência do vetor GF em relação a $\bar{\alpha}$.

Para facilitar a exposição dividiremos em dois casos:

- CASO DO VETOR GF LINEAR. Neste caso o sistema (3.36) se torna um sistema de equações algébricas lineares, em cada passo do tempo e temos que resolver M sistemas de equações com $N+1$ incógnitas para obter uma aproximação da solução.

Existem para este caso, estimativas a priori do erro da

aproximação Crank-Nicolson-Galerkin, no caso de Ω limitado. Estas estimativas de erro são similares aos Teoremas 3.1 e 3.3, embora aqui, sejam necessárias condições adicionais da suavidade da função u na variável t , pelo fato de substituir a $\frac{\partial u}{\partial t}$ por diferenças. A título de ilustração a seguir apresentamos os teoremas que mostram que a aproximação acima, tem a ordem de convergência dois no tempo, pelo menos para domínios limitados.

Antes, adotaremos as notações seguintes: se $\phi : \{t_s\}_{s=0}^M \rightarrow X$ onde X é um espaço normado, com norma $\|\cdot\|_X$ então

$$\|\phi\|_{L_{\Delta}^{\infty}(0,T;X)} = \max_{0 \leq s \leq M} \|\phi_s\|_X$$

$$\|\phi\|_{L_{\Delta}^2(0,T;X)}^2 = \sum_{s=0}^M \|\phi_s\|_X^2 \Delta t$$

$$\|\phi\|_{\tilde{L}_{\Delta}^2(0,T;X)}^2 = \sum_{s=0}^M \|\phi_{s+1/2}\|_X^2 \Delta t$$

TEOREMA 3.6. Seja u solução de (3.1) e U_s solução aproximada de u segundo (3.36), onde as funções k e f dependem somente da variável x . Supor que $u \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$, $\frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0,T;H^1(\Omega))$ e $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$. Se $\|U_h - u\|(0) = O(h)$ então existe uma constante C independente de h e Δt tal que para Δt suficientemente pequena,

$$\|u - U_h\|_{L^\infty_\Delta(0,T;L^2(\Omega))} + \|u - U_h\|_{L^2_\Delta(0,T;H^1(\Omega))} \leq C(h + (\Delta t)^2) \quad (3.38)$$

Outra estimativa com as hipóteses dadas no Lema 3.2 pode ser obtida, como vem no teorema seguinte.

TEOREMA 3.7. Suponhamos satisfeitas as hipóteses do Lema 3.2 e que

$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$. Se $\|U_h - w\|(0) = O(h^3)$, onde w é definido como em (3.19); então existe uma constante C , independente de h e Δt suficientemente pequeno,

$$\|u - U_h\|_{L^\infty_\Delta(0,T;L^2(\Omega))} \leq C(h^2 + (\Delta t)^2) \quad (3.39)$$

As demonstrações dos dois teoremas anteriores podem-se encontrar em Fairweather [7].

- CASO DO VETOR GF NÃO LINEAR. Quando o GF é não linear o sistema (3.36) é também não linear e poderá ser resolvido pelo método predictor-conector ou o método (que escolhemos para este trabalho) que inclui três níveis do tempo (dois passos em t) e que produz o valor que envolve a incôgnita em (3.36), extrapolando dois valores anteriores desta. Chamaremos a este procedimento de Crank-Nicolson Extrapolado. Outro método desenvolvido neste caso é o Método Newton-Galerkin que será exposto posteriormente.

3.3.1. PROCEDIMENTO CRANK-NICOLSON EXTRAPOLADO.

O sistema (3.36) vai ser substituído pelo sistema

$$\text{GBK}(t) \left(\frac{\bar{\alpha}_{s+1} - \bar{\alpha}_s}{\Delta t} \right) + \text{GAK}(t) \bar{\alpha}_{s+1/2, \theta} = \text{GF}(\hat{\alpha}_{s+1/2}) \quad , \quad s \geq 1 \quad (3.40a)$$

$$\bar{\alpha}_0 = \bar{\alpha}(0) \quad , \quad \bar{\alpha}_1 = \bar{\alpha}(t_1) \quad (\text{obtidas com erro pequeno}) \quad (3.40b)$$

onde o vetor GF vai ser avaliado em $t = (s + 1/2)\Delta t$, e

$$\bar{\alpha}_{s+1/2} = \frac{\bar{\alpha}_{s+1} + \bar{\alpha}_s}{2} \quad (3.41a)$$

$$\bar{\alpha}_{s+1/2, \theta} = \bar{\alpha}_{s+1/2} + \theta(\bar{\alpha}_{s+1} - 2\bar{\alpha}_s + \bar{\alpha}_{s-1}) \quad (3.41b)$$

$$\hat{\alpha}_{s+1/2} = \frac{3\bar{\alpha}_s - \bar{\alpha}_{s-1}}{2} \quad (3.41c)$$

Usando este procedimento é necessário resolver um sistema de equações lineares em cada passo no tempo, já que no vetor GF, de (3.36), usamos o valor extrapolado de $\bar{\alpha}_{s+1}$, que é $\hat{\alpha}_{s+1/2}$ definido em (3.41c). Além disso, precisamos dos valores de $\bar{\alpha}_0$ e $\bar{\alpha}_1$; tomaremos $\bar{\alpha}_0$ como a interpolação de U_0 em M_h , o mesmo que no caso

do GF linear, e o valor de α_1 solução do sistema a seguir

$$\text{GBK}(t) \frac{(\bar{\alpha}_1 - \bar{\alpha}_0)}{\Delta t} + \text{GAK}(t) \bar{\alpha}_{1/2} = \bar{\alpha}_0 \quad (3.42)$$

Aqui θ é um parâmetro que garante a estabilidade do método.

Se escolhermos M_h como elemento de uma família $S_{1,2}^0$, está provada a seguinte estimativa de erro; embora $\bar{\alpha}_1$ seja solução de (3.42), que vale para domínios limitados.

TEOREMA 3.8. Suponhamos θ não negativo. Seja u solução de (3.1) e u_h solução aproximada de u segundo (3.40). Suponhamos também que $u \in C^3(\bar{\Omega} \times [0, T])$, $\frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$ e as estimativas no tempo t_0 e t_1 satisfaz

$$\| (u_h - u)_0 \|_{L^2(\Omega)} + \| (u_h - u)_1 \|_{L^2(\Omega)} \leq C_e ((\Delta t)^2 + h) \quad (3.43)$$

para algum $C_e > 0$ independente de h e Δt .

Então, existe uma constante K , sendo $\xi = u - u_h$, tal que

$$\| \xi \|_{L^\infty_\Delta(0, T; L^2(\Omega))}^2 + \| \xi \|_{\tilde{L}^2_\Delta(0, T; H^1(\Omega))}^2 \leq K(h^2 + (\Delta t)^4). \quad (3.44)$$

A prova do teorema anterior pode-se encontrar em Dupont-Fairweather Johnson [6].

3.3.2. MÉTODO NEWTON-GALERKIN.

Lembremos que o problema com que trabalhamos é o seguinte:

I: Achar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x,t,u) \quad (3.45a)$$

$$(x,t) \in \mathbb{R} \times (0,T] \text{ e } T < \infty \text{ e}$$

com

$$u(x,0) = u_0(x) \text{ , } u_0 \text{ de suporte compacto.} \quad (3.45b)$$

As hipóteses descritas no capítulo II seguem válidas.

Para resolver a equação (3.45) pelo método de Newton vamos definir o operador $P : \mathbf{V} \rightarrow L^2(0,T;L^2(\mathbb{R}))$ por

$$P(u) = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x,t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - f(x,t,u). \quad (3.46)$$

Como $f(x,t,u)$ é em geral não linear em u o operador P é, em geral, não linear.

Escrevendo o problema (3.45) em termos do operador P obtemos o problema

II: Achar $u \in \mathbf{V}$ tal que

$$P(u(x,t)) = 0, \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times (0,T], \quad T < \infty \quad (3.47a)$$

com

$$u(x,0) = u_0(x) \quad \text{de suporte compacto.} \quad (3.47b)$$

Estamos interessados, então, em achar uma raiz u^* do operador P ou ao menos uma aproximação de u^* . Um modo de aproximar a solução do problema II, supondo que ela existe e é única, será utilizar uma equação linear

$$Au = b \quad (3.48)$$

que aproxima (3.47a) em uma vizinhança de u^* ; de tal modo que resolver (3.48) seja simples. Dessa forma obteremos, uma solução aproximada da equação (3.47a) por meio do que chamaremos linearização de (3.47a).

Para a construção do operador A , o método de Newton utiliza o conceito de derivada do operador. Assim, a título de recordação, vamos definir a derivada de Fréchet de um espaço de Banach em outro espaço de Banach.

DEFINIÇÃO. Seja P um operador que aplica um espaço X , de Banach, em um outro Y também de Banach. Se existe um operador linear limitado, L , de X em Y tal que

$$\lim_{\|\Delta x\| \rightarrow 0} \frac{\|P(x_0 + \Delta x) - P(x_0) - L\Delta x\|_Y}{\|\Delta x\|_X} = 0 ,$$

então P é dito fortemente diferenciável em x_0 e o operador linear limitado $P'(x_0) = L$ será chamado derivada forte ou derivada de Fréchet de P em x_0 .

Observemos que a diferencial de Fréchet

$$\delta P(x_0, \Delta x) = P'(x_0) \Delta x$$

é uma boa aproximação de $P(x_0 + \Delta x) - P(x_0)$, relativa a $\|\Delta x\|$, para $\|\Delta x\|$ suficientemente pequeno.

Se o operador é diferenciável, então é fácil construir uma equação linear (3.48) que aproxima a equação não linear. Obtém-se

$$P(u^0 - (u - u^0)) = P(u^0) + P'(u^0)(u - u^0) + \eta(u, u^0) \quad (3.49)$$

onde $\|\eta(u, u^0)\| = o(\|u - u^0\|)$ quando $\|u - u^0\| \rightarrow 0$.

A notação $o(\lambda)$ quando $\lambda \rightarrow 0$ corresponde a qualquer função escalar $f(\lambda)$ tal que $\lim_{\lambda \rightarrow 0} f(\lambda)/\lambda = 0$.

Se $P(u^*) = 0$, isto é u^* é solução à equação (3.47), de (3.43) vem

$$P(u^0) + P'(u^0)(u^* - u^0) = -\eta(u^*, u^0). \quad (3.50)$$

Se u^* estiver próximo a u^0 , desprezamos uma quantidade extremamente pequena, por hipótese, e obtemos a equação linear

$$P'(u^0)(u^* - u^0) = -P(u^0). \quad (3.51)$$

Espera-se que a solução $u = u^1$ desta equação, se existe e é única, seja uma boa aproximação de u^* com $P(u^1) = \eta(u^1, u^0)$ a partir de (3.49). A equação (3.51) vai ter uma solução única, u^1 , se $[P'(u^0)]^{-1}$ existe. Assim, podemos escrever

$$P'(u^0)(u^1 - u^0) = -P(u^0)$$

na forma

$$u^1 = u^0 - [P'(u^0)]^{-1}P(u^0). \quad (3.52)$$

Se chamamos $\Delta u^0 = u^1 - u^0$, chegamos à equação linear

$$P'(u^0)\Delta u^0 = -P(u^0) \quad \text{e} \quad u^1 = u^0 + \Delta u^0 \quad (3.53)$$

Então, no suposto que existe $[P'(u^m)]^{-1}$ para $m = 1, 2, \dots$, definimos a sequência de Newton: $u^{m+1} = u^m + \Delta u^m$, onde Δu^m é solução do sistema

$$P'(u^m) \Delta u^m = -P(u^m) \quad , \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.54)$$

A norma do Δu^m nos fornece uma estimativa do erro cometido ao tomarmos u^m como uma aproximação da solução u^* da equação (3.47), como fica explícito na demonstração do teorema de convergência do Método, Teorema de Kanforović (ver Rall [16]).

Resta, então, assegurar que o operador P é diferenciável, tanto como estabelecer as condições para a convergência do método de Newton.

TEOREMA 3.9. Seja $P : \mathbf{V} \rightarrow L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))$ o operador definido em 3.46. Então P é diferenciável em $u \in \mathbf{V}$ e o operador linear

$$L = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{\partial f(x, t, u)}{\partial u} I \quad (3.55)$$

é a derivada de Fréchet do operador P em $u \in \mathbf{V}$.

DEMONSTRAÇÃO. Temos que provar que

$$\lim_{\|v\|_{\mathbf{V}} \rightarrow 0} \frac{\|P(u+\Delta u) - P(u) - \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \right) (x, t, u) I \right) \Delta u\|_{L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))}}{\|\Delta u\|_{\mathbf{V}}} = 0 .$$

Para isto fazamos as seguintes observações:

i) Como $f \in C^\infty(\mathbb{R} \times (0, T) \times \mathbb{R})$

$$|f(x, t, u + \Delta u) - f(x, t, u) - \frac{\partial f}{\partial u}(u) \Delta u| \leq \frac{1}{2} \max_{\bar{u} \in B(r)} \left| \frac{\partial^2 f(x, t, \bar{u})}{\partial u^2} \right| |\Delta u|^2$$

onde $B(r)$ é uma bola de raio r contendo u e $u + \Delta u$.

ii) Usando os teoremas de imersão de Sobolev e a definição do espaço $\mathbf{V}$

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in \mathbb{R}} |u(x, t)| \leq C \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq C \|u\|_{\mathbf{V}} < +\infty$$

e como $\|\Delta u\|_{\mathbf{V}} \rightarrow 0$, podemos tomar $\|\Delta u\|_{\mathbf{V}} \leq d < +\infty$, e, analogamente,

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in \mathbb{R}} |\Delta u(x, t)| \leq Cd. \text{ Portanto}$$

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \sup_{x \in \mathbb{R}} |u(x, t) - u(x, t)| \leq C(\|u\|_{\mathbf{V}} + d) < +\infty.$$

De (i) e (ii), concluímos que

$$\begin{aligned} |f(x, t, u(x, t)) - f(x, t, u(x, t)) - \frac{\partial f}{\partial u}(x, t, u(x, t)) \Delta u(x, t)| &\leq \\ &\leq \frac{1}{2} \max_{\bar{u} \in B(r)} \left| \frac{\partial^2 f(x, t, \bar{u})}{\partial u^2} \right| |\Delta u(x, t)|^2 \end{aligned}$$

com a escolha $r = \mathbb{T}(\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{V}} + d) < +\infty$.

Pelas propriedades de $f(\cdot)$, existe então uma constante C tal que para todo $(x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]$

$$\begin{aligned} & |f(x, t, u(x, t) + \Delta u(x, t)) - f(x, t, u(x, t)) - \frac{\partial f}{\partial u}(x, t, u(x, t)) \Delta u(x, t)| \\ & \leq C |\Delta u(x, t)|^2. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} & \frac{\|f(x, t, u + \Delta u) - f(x, t, u) - \frac{\partial f}{\partial u}(x, t, u) \Delta u\|_{L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))}}{\|\Delta u\|_{\mathbf{V}}} \\ & \leq \frac{(\int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} C |\Delta u(x, t)|^4 dx dt)^{1/2}}{\|\Delta u\|_{\mathbf{V}}} \leq \frac{CT^{1/2} (\sup_{0 \leq t \leq T} \|\Delta u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})})^2}{\|\Delta u\|_{\mathbf{V}}} \end{aligned}$$

Mas outra vez usando a definição de $\mathbf{V}$, a definição de norma em um espaço normado que é a interseção de outros (soma das normas) e a imersão contínua $H^1(\mathbb{R}) \subset L^4(\mathbb{R})$ (Sobolev) temos

$$\|\Delta u\|_{\mathbf{V}} \geq \|\Delta u\|_{C^0(0, T; H^1(\mathbb{R}))} = \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, T)\|_{H^1(\mathbb{R})} \geq C \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})}.$$

Assim, como $\|\Delta u\|_{\mathbf{V}} \rightarrow 0$ temos $\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})} \rightarrow 0$ e

$$\frac{\|f(x, t, u + \Delta u) - f(x, t, u) - \frac{\partial f}{\partial u}(x, t, u) \Delta u\|_{L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))}}{\|\Delta u\|_{\mathbf{V}}}$$

$$\leq \frac{CT^{1/2} \left(\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})} \right)^2}{\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})}} = CT^{1/2} \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(\cdot, t)\|_{L^4(\mathbb{R})} \quad (3.56)$$

que vai para zero quando $\|\Delta u\|_{\mathbf{V}} \rightarrow 0$ e o resultado está provado. ■

Para falar da convergência da sequência $\{u^m\}$ gerada pelo método de Newton, começando de algum ponto u^0 , suponha-se primeiro que $[P'(u^0)]^{-1}$ existe. Assim pode-se calcular o próximo ponto, $u^1 = u^0 - [P'(u^0)]^{-1} P(u^0)$ e as constantes B_0 e η_0 , tal que

$$\|[P'(u^0)]^{-1}\|_{\mathcal{L}(\mathbf{V}, L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))} \leq B_0$$

$$\|u^1 - u^0\| \leq \eta_0,$$

onde $\mathcal{L}(\mathbf{V}, L^2(0, T; L^2(\mathbb{R})))$ é o espaço de operadores lineares de $\mathbf{V}$ em $L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))$ e I é o operador inclusão neste espaço.

A seguir descreveremos um teorema que assegura a existência e a convergência da sequência gerada pelo método de Newton em espaços de Banach como foi formulada por Kantorovič.

TEOREMA 3.10. Se $\|P''(u^0)\| < K$ em alguma bola fechada $\bar{U}(u^0, r)$ e $h^0 = B_0 \eta_0 K < 1/2$ então a sequência (3.54) que começa em u^0 converge à solução u^* de (3.47) que existe no $\bar{U}(u^0, r)$ sempre que

$$r > r_0 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h_0}}{h_0} \eta_0.$$

A prova deste teorema fornece um método de cálculo da solução de (3.47), porque dá, não só as condições de existência de u^* , mas também dá informação sobre regiões onde a existência e unicidade de u^* são asseguradas e uma estimativa do erro, cometido, ao calcular os termos u^m da sequência gerada pelo método. Do ponto de vista prático a escolha de u^0 determina, de fato, a existência de $[P'(u^0)]^{-1}$. Quando $[P'(u^0)]^{-1}$ existe, então calculam-se as constantes B_0, η_0 ; logo seria necessário conhecer alguma coisa com respeito ao comportamento de $\|P''(u^0)\|$ em uma vizinhança de u^0 , e assim completariamos as condições do teorema. Dependendo do problema a estimativa da $\|P''(u^0)\|$ não é difícil. Para o operador (3.46), por exemplo, a partir de sua derivada, $P'(u^0) = \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (k(x, t) \frac{\partial}{\partial x}) - f'(u^0)I\right)$ temos $P''(u^0) = -f''(u^0)I$

$$\|P''(u^0)\| = \|-f''(u^0)I\| \leq |f''(u^0)| \quad (3.57)$$

que depende sô da função forçante; trabalhando em uma vizinhança de u^0 , de raio 1. A norma do operador $P''(u^0)$ que se usa é a do espaço de operadores lineares $\mathcal{L}(\mathbf{V}, \mathcal{L}(\mathbf{V}, L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}))))$. Aqui, e a seguir f' e f'' indicam derivadas parciais de f com respeito a u .

Voltando ao nosso problema de aplicação, adotaremos que $k(x, t)$ é constante e que $f(x, t, u)$ vai depender somente de u ; então os operadores P e $P'(u^0)$ são

$$P(u) = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - f(u)$$

$$P'(u^0) = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - f'(u^0)I.$$

A fim de gerar a sequência de aproximações sucessivas $\{u^m\}$ a u^* colocaremos primeiro a equação linear que devemos resolver

$$P'(u^m)(u^{m+1} - u^m) = -P(u^m), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

com $u^0(x, t)$ escolhido tal que seja a solução de

$$\frac{\partial u}{\partial t} - k \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T] \quad (3.58a)$$

$$u(x,0) = u_0(x) ; x \in \mathbb{R} . \quad (3.58b)$$

Definamos $w^{m+1}(x,t) = u^{m+1}(x,t) - u^m(x,t)$ com isto, (3.58) pode-se escrever

$$\frac{\partial w^{m+1}}{\partial t} - k \frac{\partial^2 w^{m+1}}{\partial x^2} - f'(u^m) w^{m+1} = - \left(\frac{\partial u^m}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u^m}{\partial x^2} - f(u^m) \right) \quad (3.59a)$$

Pelo fato, que devemos ter $u^m(x,0) = u^{m+1}(x,0) = u_0(x)$, com $m = 0, 1, 2, \dots$, a relação que define a condição inicial da equação (3.59a) é:

$$w^{m+1}(x,0) = 0 , m = 1, 2, 3, \dots . \quad (3.59b)$$

A equação (3.59) é uma equação linear parabólica, que resolveremos usando o método de Crank-Nicolson-Galerkin que foi estudado no início da seção 3.3.

Descreveremos a seguir a aplicação da aproximação Crank - Nicolson-Galerkin para a equação (3.59). De (3.59a) tem-se

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial w^{m+1}}{\partial t} v dx + \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{\partial w^{m+1}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f'(u^m) w^{m+1} v dx - \\
- \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial u^m}{\partial t} v - k \frac{\partial u^m}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} - f(u^m) v \right) dx .
\end{aligned} \quad (3.61)$$

As equações (3.60) e (3.61) vão ser chamadas equações da iteração $m+1$ do método Newton-Galerkin, com $m = 0, 1, 2, \dots$.

Para calcular a solução da iteração 1 ($m = 0$) vamos precisar de $u^0(x, t)$, solução da equação (3.58). Ao cálculo da solução de (3.58) chamaremos iteração zero.

Vamos chamar a função $w^{m+1} : [0, T] \rightarrow M_h$ de função aproximada de w^{m+1} no espaço M_h e U^{m+1} , de solução aproximada de u^{m+1} (onde M_h e U^{m+1} como foram definidos no Capítulo II), portanto

$$\begin{aligned}
w^{m+1}(x, t) = \alpha_1^{m+1}(t) \varphi_1(x, t) + \sum_{i=2}^N \alpha_i^{m+1}(t) \varphi_i(x) + \\
+ \alpha_{N+1}^{m+1}(t) \varphi_{N+1}(x, t)
\end{aligned} \quad (3.62)$$

Substituindo (3.62) em (3.61) obteremos um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\text{GBK}(t) [\bar{\alpha}^{m+1}(t)]' + \text{GAK}(t) \bar{\alpha}^{m+1}(t) = \overline{\text{GAK}}(t) \bar{\alpha}^{m+1}(t) + \text{GF}(t) \quad (3.63)$$

onde as matrizes GAK e GBK são as mesmas que, no caso do vetor GF linear, na secção 3.3, e na subsecção anterior 3.3.1. Sendo que a matriz $\overline{\text{GAK}}$ é:

$$\overline{GAK}(t) = \begin{bmatrix} \int_{-\infty}^{x_2} f'(U^m) \varphi_1^2(x, t) dx & \int_{x_1}^{x_2} f'(U^m) \varphi_1 \varphi_2 dx & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \int_{x_1}^{x_2} f'(U^m) \varphi_1 \varphi_2 dx & \int_{x_1}^{x_3} f'(U^m) \varphi_2^2(x) dx & \int_{x_2}^{x_3} f'(U^m) \varphi_2 \varphi_3 dx & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \int_{x_2}^{x_3} f'(U^m) \varphi_2 \varphi_3 dx & \int_{x_2}^{x_4} f'(U^m) \varphi_3^2(x) dx & \int_{x_3}^{x_4} f'(U^m) \varphi_3 \varphi_4 dx & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \int_{x_{N-1}}^{x_N} f'(U^m) \varphi_{N-1} \varphi_N dx & \int_{x_{N-1}}^{x_{N+1}} f'(U^m) \varphi_N^2 dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} f'(U^m) \varphi_N \varphi_{N+1} dx \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \int_{x_N}^{x_{N+1}} f'(U^m) \varphi_{N+1} dx & \int_{x_N}^{\infty} f'(U^m) \varphi_{N+1}(x, t) dx \end{bmatrix}$$

e o vetor GF é como segue:

$$GF(t) = \begin{bmatrix} - \int_{-\infty}^{x_2} (f'(U^m) \varphi_1(x,t) - \frac{\partial U^m}{\partial t} \varphi_1(x,t) - k \frac{\partial U^m}{\partial x} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x}(x,t)) dx \\ \\ - \int_{x_1}^{x_3} (f(U^m) \varphi_2(x) - \frac{\partial U^m}{\partial t} \varphi_2(x) - k \frac{\partial U^m}{\partial x} \frac{\partial \varphi_2}{\partial x}(x)) dx \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ - \int_{x_{N-1}}^{x_{N+1}} (f(U^m) \varphi_N(x) - \frac{\partial U^m}{\partial t} \varphi_N(x) - k \frac{\partial U^m}{\partial x} \frac{\partial \varphi_N}{\partial x}(x)) dx \\ \\ - \int_N^\infty (f'(U^m) \varphi_{N+1}(x,t) - \frac{\partial U^m}{\partial t} \varphi_{N+1}(x,t) - k \frac{\partial U^m}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial x}(x,t)) dx \end{bmatrix}$$

Finalmente, discretizando no tempo para resolver (3.63), usando diferenças finita, segundo Crank-Nicolson, obtém-se

$$GBK(t) (\bar{\alpha}_{k+1}^{m+1} - \bar{\alpha}_k^{m+1}) / \Delta t + (GAK(t) - \overline{GAK}(t)) \bar{\alpha}_{k+1/2}^{m+1} = GF(t_{k+1/2}) \quad (3.64)$$

onde $\bar{\alpha}_k^{m+1}$ é a aproximação do vetor $\bar{\alpha}(t)$ na iteração $m+1$ e no tempo t_k ,

$$\bar{\alpha}_{k+1/2}^{m+1} = \left(\frac{\bar{\alpha}_{k+1}^{m+1} - \bar{\alpha}_k^{m+1}}{2} \right) \quad \text{e} \quad t_{k+1/2} = \frac{t_{k+1} - t_k}{2}$$

Com os resultados anteriores estamos em condições de fazer os cálculos a fim de obter a solução aproximada para o problema.

CAPÍTULO IV

ASPECTOS COMPUTACIONAIS

Neste capítulo descreveremos os aspectos relacionados com o cálculo da solução aproximada do problema. Isto será feito aproveitando a vantagem que o método de elementos finitos tem, e que, de forma breve, consiste em estabelecer o problema em cada elemento, para logo juntá-los e obter a forma final da aproximação do problema. Este último procedimento será chamado montagem. Finalmente, apresentaremos alguns detalhes da implementação computacional dos métodos descritos na seção anterior e uma breve descrição das rotinas mais importantes.

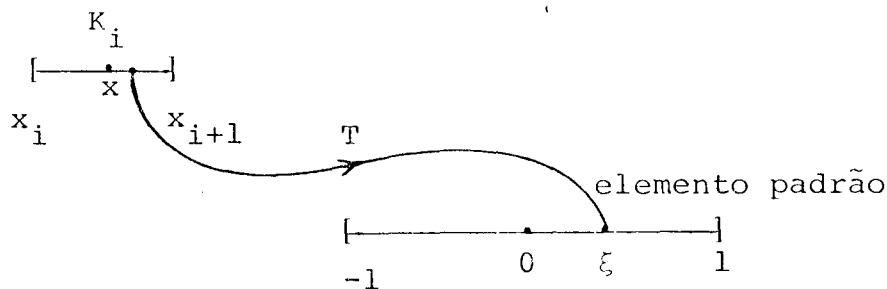
4.1. MONTAGEM DAS EQUAÇÕES A PARTIR DOS ELEMENTOS FINITOS E INFINITOS

A fim de obter as equações por elemento, vamos supor um domínio X , uma triangulação $\tau_h = \{\hat{K}_i, i=1,2,\dots,N_h\}$ de X e que o espaço de aproximação M_h associado, de dimensão finita seja um elemento de uma família $S_{k,r}$. Com $1 \leq k \leq r$ com as condições acima o problema (2.2), em qualquer elemento $\hat{K}_i$ e todo $v_h \in M_h$ escreve-se

$$\int_{\hat{K}_i} \frac{\partial U_h^e}{\partial t} v_h^e dx + \int_{\hat{K}_i} k(x,t) \frac{\partial U_h^e}{\partial x} \frac{\partial v_h^e}{\partial x} dx = \int_{\hat{K}_i} f(U_h^e) v_h^e dx \quad (4.1)$$

onde v_h^e e U_h^e são restrições de v_h e U_h ao elemento $\hat{K}_i$ respectivamente.

Nas integrais em (4.1) estamos usando coordenadas x originais para explicar como as contribuições de cada elemento serão usadas para gerar as matrizes finais e o vetor forçante final. Os cálculos dessas contribuições serão, na prática, feitos sobre um elemento padrão (referencial) em termos de coordenadas normalizadas locais ξ , ver fig. 4, e logo serão transformadas às coordenadas apropriadas para cada elemento.



$$\xi = T(x) = \frac{2x - (x_i + x_{i+1})}{x_{i+1} - x_i}$$

Figura 4 .

Lembremos agora que, pelo método escolhido, U_h^e em (3.1) tem a forma

$$U_h^e = \sum_{j=1}^{N_e} \alpha_j^e(t) \varphi_j^e(x) \quad (4.2)$$

onde N_e é o número de nós em $\hat{K}_i$ e as funções φ_i^e são as funções de forma para o elemento $\hat{K}_i$ ($N_e = 2$ neste trabalho, com exceção dos elementos $\hat{K}_1$ e $\hat{K}_{N+1}$ que são elementos especiais) e os valores de $\alpha_j^e(t)$ são os valores de $U_h^e(x_j, t)$ com $j = 1, 2, \dots, N_e$.

Substituindo (4.2) em (4.1) e escolhendo $V_h^e = \varphi_i^e$ chegamos a um sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\hat{K}_i} \frac{\partial (\varphi_j^e \varphi_j^e)}{\partial t} \varphi_i^e dx + \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\hat{K}_i} k(x, t) \frac{\partial (\alpha_j^e \varphi_j^e)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_i^e}{\partial x} dx = \\ = \int_{\hat{K}_i} f \left(\sum_{j=1}^{N_e} \alpha_j^e \varphi_j^e \right) \varphi_i^e dx \end{aligned} \quad (4.3)$$

ou escrito, matricialmente

$$EBK(\bar{\alpha}^e)' + EAK \bar{\alpha}^e = EF(\bar{\alpha}^e), \quad (4.4)$$

onde as matrizes, que chamaremos de matrizes elementares, são

$$EBK = \left(\int_{\hat{K}_i} \varphi_i^e \varphi_j^e dx \right), \quad EAK = \left(\int_{\hat{K}_i} k(x,t) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx \right),$$

e os vetores

$$\bar{\alpha}^e = (\alpha_1^e(t), \alpha_2^e(t), \dots, \alpha_{N_c}^e(t)) \quad e$$

$$F(\bar{\alpha}^e) = \left(\int_{\hat{K}_i} f \left(\sum_{j=1}^{N_e} \alpha_j^e(t) \varphi_j(x) \right) \varphi_i(x) dx \right).$$

Os cálculos numéricos são feitos supondo $k(x,t)$ constante e normalizando o tempo final ao valor de 1. Assim o cálculo das integrais que formam os sistemas são feitas usando integração numérica, especificamente a regra de quadratura de Gauss; nos elementos finitos usamos três pontos de Gauss e, nos elementos infinitos usamos sete pontos de Gauss.

No que segue vamos justificar, basicamente, o fato de trabalhar elemento a elemento. Para isto vamos dar algumas definições: sejam $X = \mathbb{R}$, $\Omega = [l, L]$, uma partição π_c de $\mathbb{R}$, $\pi_c : -\infty = x_0 < l = x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_N < x_{N+1} = L < x_{N+2} = \infty$ onde N é o número de elementos da triangulação de Ω . Além disso, denotemos $\hat{K}_1 = K_1 \cup K_2$, $\hat{K}_2 = K_3, \dots, \hat{K}_i = K_{i+1}, \dots, \hat{K}_N = K_{N+1} \cup K_{N+2}$ e $K_i = [x_{i-1}, x_i]$.

Vamos agora descrever a montagem das matrizes finais a partir das matrizes associadas a cada elemento. Para facilitar a

exposição separemos em dois casos:

CASO 1: FORÇANTE INDEPENDENTE DA SOLUÇÃO u.- Usando as notações acima e o sistema (3.4), vamos ver como resultam os sistemas por elemento apresentado em (4.3), e com isto ter uma idéia de como fazer a montagem final do problema.

Escrevemos a linha $i \neq 1, N+1$ do sistema da equação (3.4)

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_{i-1}(x) \varphi_i(x) \alpha'_{i-1} dx + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \varphi_i^2(x) \alpha'_i(t) dx + \\
 & + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) \varphi_{i+1}(x) \alpha'_{i+1}(t) dx + \int_{x_{i-1}}^{x_i} k \frac{\partial \varphi_{i-1}(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x} \alpha_{i-1}(t) dx \\
 & + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x} \right)^2 \alpha_i(t) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{i+1}(x)}{\partial x} \alpha_{i+1}(t) dx = \\
 & = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, t) \varphi_i(x) dx .
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Façamos agora as seguintes observações:

i) o lado esquerdo de (4.5) é igual a:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_{i-1} \varphi_i \alpha'_{i-1}(t) + \int_{x_{i-1}}^{x_i} (\varphi_i)^2 \alpha'_i(t) + \int_{x_{i-1}}^{x_i} k \frac{\partial \varphi_{i-1}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \alpha_{i-1}(t) + \int_{x_{i-1}}^{x_i} k \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right) \alpha_i(t) +$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i^2 \alpha'_i(t) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i \varphi_{i+1} \alpha'_{i+1} + \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right)^2 \alpha_i(t) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{i+1}}{\partial x} \alpha_{i+1}$$

ii) o lado direito de (4.5) torna-se

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x,t) \varphi_i dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x,t) \varphi_i dx ,$$

a esquematização feita nas observações acima dá uma idéia da relação que existe entre os cálculos dessas integrais com o elemento associado. Logo as matrizes elementares EAK, EBK e o vetor EF do elemento $\hat{K}_i$, $i \neq 1, N$ que concordando com (4.4), são

$$EBK = \begin{bmatrix} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i^2 dx & \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i \varphi_{i+1} dx \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i \varphi_{i+1} dx & \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\varphi_{i+1})^2 dx \end{bmatrix} \quad (4.6a)$$

$$EAK = \begin{bmatrix} \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right)^2 dx & \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \varphi_{i+1}}{\partial x} \right) dx \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right) \left(-\frac{\partial \varphi_{i+1}}{\partial x} \right) dx & \int_{x_i}^{x_{i+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_{i+1}}{\partial x} \right)^2 dx \end{bmatrix} \quad (4.6b)$$

$$EF = \begin{bmatrix} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, t) \varphi_i \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, t) \varphi_{i+1} \end{bmatrix} \quad (4.6c)$$

Pelas formas das matrizes elementares, podemos concluir que a montagem das matrizes finais (ou matrizes globais) GAK, GBK e o vetor GF, podem ser feitas seguindo o esquema da figura 5. Estes resultados indicam que devemos reservar espaços na memória de um computador para duas matrizes de $(N+1) \times (N+1)$, duas matrizes (2×2) e também para dois vetores de tamanhos $N+1$ e 2 , tais que seus conteúdos vão variar pela dependência da variável tempo que a função f e as funções φ_1, φ_{N+1} tem.

Em síntese, essa montagem, algebricamente significará, em nosso exemplo, mexer com as entradas diagonais, somando a segunda

entrada da diagonal da matriz elementar do elemento $\hat{K}_{i-1}$ à primeira entrada diagonal da matriz elementar do elemento $\hat{K}_i$. Para o vetor forçante, neste caso, deve somar-se a segunda componente do vetor elementar $\hat{K}_{i-1}$ à primeira componente do vetor elementar $\hat{K}_i$.

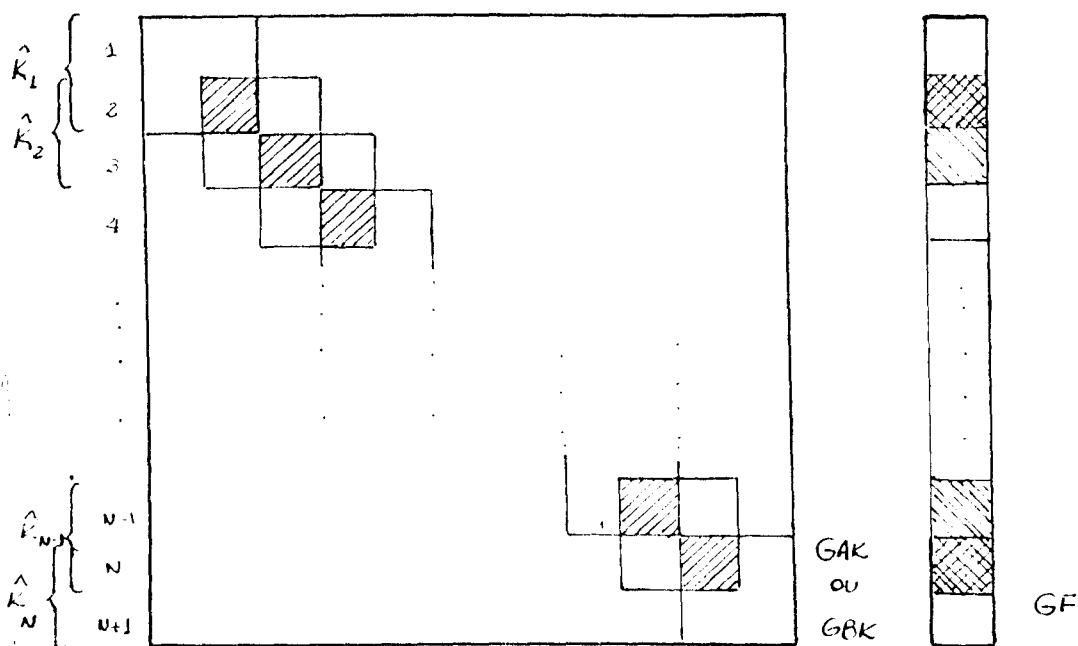


Figura 5

Finalmente o primeiro e o último elementos, $\hat{K}_i$, $i=1$ e N , vão ter um tratamento especial pelo fato de nosso problema não ter fronteiras. Os cálculos das primeiras entradas diagonais das matrizes EAK, EBK e EF, associada a elementos $\hat{K}_1$, e das segundas entradas diagonais dessas mesmas matrizes, associadas ao elemento $\hat{K}_N$ são explicados a seguir.

Consideremos, por exemplo para o último elemento $\hat{K}_N$, as matrizes EAK, EBK e o vetor EF que são

$$EAK = \begin{bmatrix} \int_{x_N}^{x_{N+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_N(x)}{\partial x} \right)^2 dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} \frac{\partial \varphi_{N+1}(x)}{\partial x} dx \\ \int_{x_N}^{x_{N+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_N(x)}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}(x)}{\partial x} \right) dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} k \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int_{x_N}^{\infty} \frac{\partial \varphi_{N+1}(x,t)}{\partial t} \varphi_{N+1}(x,t) dx \end{bmatrix}$$

$$EBK = \begin{bmatrix} \int_{x_N}^{x_{N+1}} (\varphi_N(x))^2 dx & \int_{x_N}^{x_{N+1}} (\varphi_{N+1}(x)) (\varphi_N(x)) dx \\ \int_{x_N}^{x_{N+1}} (\varphi_{N+1}(x)) (\varphi_N(x)) dx & \int_{x_N}^{\infty} (\varphi_{N+1}(x,t))^2 dx \end{bmatrix}$$

$$EF = \begin{bmatrix} \int_{x_N}^{x_{N+1}} f(x,t) \varphi_N(x) \\ \int_{x_N}^{\infty} f(x,t) \varphi_{N+1}(x,t) \end{bmatrix}$$

Pela conformação das entradas nas matrizes acima, lembrando a definição de função básica $\varphi_{N+1}(x,t)$ em (2.6), os cálculos diferentes aos anteriores, que precisamos fazer são:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad \int_{x_N}^{\infty} \frac{\partial \varphi_{N+1}(x,t)}{\partial t} \varphi_{N+1} dx &= \int_{x_{N+1}}^{\infty} \frac{x^2 - x_{N+1}^2}{4k^+ t^2} \exp\left(\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k^+ t}\right) dx + \\ &+ \int_{x_N}^{x_{N+1}} 0 \cdot \varphi_{N+1}(x) dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ii)} \quad \int_{x_N}^{\infty} \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}(x,t)}{\partial x}\right)^2 dx &= \int_{x_{N+1}}^{\infty} \frac{x^2}{4(k^+)^2 t^2} \exp\left(\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k^+ t}\right) dx + \\ &+ \int_{x_N}^{x_{N+1}} \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}}{\partial x}\right)^2 dx \end{aligned}$$

$$\text{iii)} \quad \int_{x_N}^{\infty} (\varphi_{N+1}(x,t))^2 dx = \int_{x_{N+1}}^{\infty} \exp\left(\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k^+ t}\right) dx + \int_{x_N}^{x_{N+1}} (\varphi_{N+1}(x))^2 dx$$

As integrais em i) e ii) formam a segunda entrada de EAK, que integrando por partes, transforma-se em

$$\begin{aligned}
(i)+(ii) = & \frac{2k_0^+ t - x_{N+1}^2}{4k_0^+ t} \int_{x_{N+1}}^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx + \\
& + \frac{x_{N+1} k_0^+ t}{4k_0^+ t^2} + \int_{x_N}^{x_{N+1}} \left(-\frac{\partial \varphi_{N+1}(x)}{\partial x}\right)^2 dx \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Em (iii), em (4.7) e as outras entradas necessárias com integrais relativas ao intervalo $[x_N, x_{N+1}]$, o valor é calculado na mesma forma que no caso dos elementos diferentes de 1 e N usando quadratura gaussiana (de três pontos). Mas as integrais definidas em $[x_{N+1}, \infty)$ são obtidas fazendo uma aproximação à integral da função $\exp\left(\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right)$ somente, pelo resultado obtido em (4.7).

A aproximação mencionada acima é estimada como segue. Observe que

$$\begin{aligned}
\int_{x_{N+1}}^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx &= \int_{x_{N+1}}^a \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx + \\
&+ \int_a^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx \quad (4.8)
\end{aligned}$$

portanto, se o valor do segundo termo de (4.8) fosse menor que 10^{-7} para todo $t \in (0,1]$, então

$$\int_{x_{N+1}}^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) \approx \int_{x_{N+1}}^a \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx. \quad (4.9)$$

Falta somente saber, para que valor de a a integral restante satisfaz a condição do erro, mencionado acima; majorando obtemos

$$\int_a^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx \leq \int_a^{\infty} \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right) dx = 2k_0^+ t \exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - a^2}{2k_0^+ t}\right). \quad (4.10)$$

Fazendo avaliações para o lado direito de (4.10), com valores de $t \in (0, T]$, obtemos o valor de a que faz que este seja menor do que 10^{-7} , o que para o trabalho resultou $a = x_{N+1}^2 + 26$; e foi o valor que colocamos na rotina que avalia a aproximação em (4.9).

Os cálculos das integrais para o primeiro elemento são feitos em forma similar, ao acima exposto, aproveitando que a função $\exp\left(-\frac{x_1^2 - x^2}{2k_0^- t}\right)$ é uma função simétrica, o mesmo que a $\exp\left(-\frac{x_{N+1}^2 - x^2}{2k_0^+ t}\right)$.

Lembramos ao leitor que normalizamos o tempo final T para $T = 1$.

CASO 2. FORÇANTE DEPENDENTE DA SOLUÇÃO u .— Neste caso a montagem das matrizes globais vão ter algumas modificações, só no método de Newton-Galerkin, mas as maiores modificações caem no cálculo do

vetor forçante. O cálculo desse vetor tem de ser feito componente a componente, significando rotinas diferentes segundo o método adotado.

Para a montagem das matrizes GAK e GBK, usando o método Galerkin com o procedimento Crank-Nicolson extrapolado, usaremos as mesmas rotinas que para o caso 1. Mas para calcular o vetor forçante construímos a rotina FORÇANTE que calcula o componente a componente, ou seja, elemento por elemento. Assim por exemplo a componente $i \neq 1$ e N do vetor GF, pela equação (3.40) tem-se:

$$GF(\hat{\alpha}_{s,i}) = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(\hat{U}_s) \varphi_i dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(\hat{\alpha}_{s+1/2,i} \varphi_{i-1} + \hat{\alpha}_{s+1/2,i} \varphi_i) \varphi_i dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(\hat{\alpha}_{s+1/2,i} \varphi_i + \hat{\alpha}_{s+1/2,i} \varphi_{i+1}) \varphi_i dx \quad (4.11)$$

onde $\hat{U} = \hat{\alpha}_{s+1/2,1} \varphi_1(x,t) + \sum_{i=2}^N \hat{\alpha}_{s+1/2,i} \varphi_i + \hat{\alpha}_{s+1/2,N+1} \varphi_{N+1}(x,t)$ e $\hat{\alpha}_{s+1/2,i}$ definido em (3.41c) e, $\hat{\alpha}$ é o valor extrapolado do α_i no tempo t_{s+1} .

Finalmente, a primeira e última entrada do vetor GF são calculadas mediante

$$GF(\hat{\alpha}_{s+1/2})_1 = \int_{-\infty}^{x_1} f(\hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_1(x,t)) \varphi_1(x,t) dx +$$

$$+ \int_{x_1}^{x_2} f(\hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_1 + \hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_2) \varphi_1(x) dx$$

$$GF(\hat{\alpha}_{s+1/2})_{N+1} = \int_{x_N}^{x_{N+1}} f(\hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_N + \hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_{N+1}) \varphi_{N+1}(x) dx +$$

$$+ \int_{x_{N+1}}^{\infty} f(\hat{\alpha}_{s+1/2} \varphi_{N+1}(x,t)) \varphi_{N+1}(x,t) dx .$$

Pelas expressões acima, também são feitas estimativas para as integrais ao infinito como no caso 1.

A montagem no método Newton-Galerkin das matrizes GAK e GBK é feita como no caso 1. Embora observando a equação (3.63) encontramos uma outra matriz, $\overline{GAK}$ que depende da primeira derivada da função forçante e vai ser calculada em cada elemento usando as rotinas LINEAK e QGAUSLI. Mas da equação (3.64) as matrizes $\overline{GAK}$ e GAK juntam-se a fim de calcular a solução aproximada. Alguns detalhes desta montagem são apresentados a seguir.

Na montagem da matriz $\overline{GAK}$ precisamos definir matrizes elementares $\overline{EAK}$, que tem a forma:

$$\overline{\text{EAK}}_1 = \begin{bmatrix} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \text{Df}(\alpha_{ki}^m \varphi_i + \alpha_{ki+1}^m \varphi_{i+1}) \varphi_i \varphi_i dx - \int_{x_i}^{x_{i+1}} \text{Df}(\alpha_{ki}^m \varphi_i + \alpha_{ki+1}^m \varphi_{i+1}) \varphi_i \varphi_{i+1} dx & \\ \text{igual ao (1,2)} & \int_{x_i}^{x_{i+1}} \text{Df}(\alpha_{ki}^m \varphi_i + \alpha_{ki+1}^m \varphi_{i+1}) \varphi_{i+1} \varphi_{i+1} dx \end{bmatrix}$$

definido para os $N-2$ elementos da região limitada $\Omega = [-L, L]$ ou seja $i = 2, 3, \dots, N-1$, e onde α_{ki}^m é o coeficiente da solução aproximada na iteração m , no nó x_i e no tempo $k\Delta t$. O Df representa a derivada da função forçante.

Também a matriz elementar $\overline{\text{EAK}}$ relacionado ao primeiro e último elementos precisam ser completados com as integrais ao infinito. Com respeito ao primeiro elemento a entrada $\overline{\text{EAK}}_1(1,1)$ é incrementada com o valor de

$$\int_{-\infty}^{x_1} \text{Df}(\alpha_{k1}^m \varphi_1(x,t)) \varphi_1(x,t) dx, \text{ e com respeito ao último elemento, a entrada } \overline{\text{EAK}}_N(2,2) \text{ é somada o valor}$$

$$\int_{x_{N+1}}^{\infty} \text{Df}(\alpha_{kN+1}^m \varphi_{N+1}(x,t)) \varphi_{N+1}(x,t) dx.$$

O resultado das matrizes elementares $\overline{\text{EAK}}$ é diretamente agregado à matriz GAK na montagem, assim não precisamos um espaço, a mais, na memória do computador para a matriz $\overline{\text{GAK}}$.

O vetor forçante, no método Newton-Galerkin, é calculado

componente a componente mediante a rotina FORÇANEW. A fim de apresentar algumas peculiaridades de rotina FORÇANEW explicaremos uma aproximação que foi preciso fazer.

Considerar a componente GF_j , $j = 1, N+1$, que segundo a equação (3.63) é de forma

$$GF_j(t) = - \left(\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{\partial U^m}{\partial t} \varphi_j dx - \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{\partial U^m}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx - \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f(U^m) \varphi_j dx \right) \quad (4.12)$$

onde

$$U^m = \alpha_1^m(t) \varphi_1(x, t) + \sum_{i=2}^N \alpha_i^m(t) \varphi_i(x) + \alpha_{N+1}^m(t) \varphi_{N+1}(x, t). \quad (4.13)$$

Assim substituindo (4.13) em (4.12) obtêm-se

$$GF_j(t) = - \left(\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{\partial (\alpha_i^m \varphi_i)}{\partial t} \varphi_j dx - \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \sum_{i=j-1}^{j+1} \alpha_i^m \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} dx - \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f \left(\sum_{i=j-1}^{j+1} \alpha_i^m \varphi_i \right) \varphi_j dx \right) \quad (4.14)$$

onde precisamos calcular $\frac{d\alpha_i^m}{dt}$. O valor desta derivada vai ser estimada usando a aproximação seguinte:

$$\frac{d\alpha_i^m(t)}{dt} \approx \frac{\alpha_i^m(t + \Delta t) - \alpha_i^m(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (4.15)$$

que, segundo sua expansão de Taylor, assegura uma aproximação de ordem $(\Delta t)^2$.

O computo de GF_j , na prática, fica então aproximado por

$$\begin{aligned} GF_j(t_k) = & - \int_{x_{j-1}}^{x_j} \left(\frac{\alpha_{k+1,j-1}^m - \alpha_{k-1,j-1}^m}{2\Delta t} \varphi_{j-1} + \right. \\ & \left. + \frac{\alpha_{k+1,j}^m - \alpha_{k-1,j}^m}{2\Delta t} \varphi_j \right) \varphi_j dx + \\ & + \int_{x_{j-1}}^{x_j} k(\alpha_{k,j-1}^m \frac{\partial \varphi_{j-1}}{\partial x} + \alpha_{kj}^m \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}) \varphi_j + \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(\alpha_{kj-1}^m \varphi_{j-1} + \alpha_{kj}^m \varphi_j) \varphi_j dx \\ & + \text{aprox} \left[- \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{kj}^m \varphi_j + \alpha_{kj+1}^m \varphi_{j+1}) \varphi_j dx - \right. \right. \\ & \left. \left. - \int_{x_j}^{x_{j+1}} k(\alpha_{kj}^m \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \alpha_{kj+1}^m \frac{\partial \varphi_{j+1}}{\partial x}) \varphi_j + \dots \right) \right]. \end{aligned}$$

Por último, damos alguns detalhes do cálculo da componente GF_1 ; a componente GF_{N+1} tem um cálculo análogo ao de GF_1 . O GF_1 é avaliado segundo a expressão

$$\begin{aligned}
 & - \int_{-\infty}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1^m \varphi_1(x, t) + \alpha_2^m \varphi_2(x, t)) dx + \int_{-\infty}^{x_2} k (\alpha_1^m \frac{\partial \varphi_1(x, t)}{\partial x} + \\
 & + \alpha_2^m \frac{\partial \varphi_2(x, t)}{\partial x}) \frac{\partial \varphi_1(x, t)}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{x_2} f (\alpha_1^m \varphi_1(x, t) + \alpha_2^m \varphi_2(x, t)) dx ,
 \end{aligned}$$

isto divide-se em duas partes, uma

$$\begin{aligned}
 & - \left\{ \int_{x_1}^{x_2} \left[\left(\frac{d\alpha_1^m}{dt} \varphi_1 + \frac{d\alpha_2^m}{dt} \varphi_2 \right) \varphi_1(x) - k \left(\alpha_1^m \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + \alpha_2^m \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right) \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - f (\alpha_1^m \varphi_1 + \alpha_2^m \varphi_2) \varphi_1(x) \right] dx \right\}
 \end{aligned}$$

e a outra, que é a integral ao infinito seguinte

$$\begin{aligned}
 & - \left[\int_{-\infty}^{x_1} \left(\frac{d\alpha_1^m}{dt} \varphi_1(x, t) + \alpha_1^m \frac{\partial \varphi_1(x, t)}{\partial t} \right) \varphi_1(x, t) dx - \int_{-\infty}^{x_1} k \alpha_1^m \left(\frac{\partial \varphi_1(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx \right. \\
 & \left. - \int_{-\infty}^{x_1} f (\alpha_1^m \varphi_1(x, t)) \varphi_1(x, t) dx \right] .
 \end{aligned}$$

No caso da componente GF_{N+1} a integral no infinito que precisamos é

$$\begin{aligned}
 & - \left(\int_{x_{N+1}}^{\infty} \left(-\frac{d(\alpha_{N+1}^m)}{dt} \varphi_{N+1}(x, t) + \alpha_{N+1}^m \frac{\partial \varphi_{N+1}(x, t)}{\partial t} \right) \varphi_{N+1} dx - \right. \\
 & \left. - \int_{x_{N+1}}^{\infty} k \alpha_{N+1}^m \left(\frac{\partial \varphi_{N+1}(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx - \int_{x_{N+1}}^{\infty} f(\alpha_{N+1}^m \varphi_{N+1}(x, t)) \varphi_{N+1}(x, t) dx. \right.
 \end{aligned}$$

As integrais ao infinito são, também, aproximadas usando a estimativa expressa em (4.10).

4.2. DESCRIÇÃO DOS PROGRAMAS

Apresentaremos nesta seção uma descrição da estrutura global dos programas desenvolvidos para achar a solução aproximada do problema parabólico (3.1) com condições inicial e sem fronteiras, onde por simplicidade $k(x, t)$ vamos tomar como uma constante. No fim apresentamos o diagrama de blocos dos programas.

Do ponto de vista do usuário, os programas que chamamos de EVO EXTP e EVO NEW 2, segundo o método utilizado, consiste em três unidades funcionais: Pré-processo, Processo e Saída (ver Figura 6).

Pelo fato do modelo de elementos finitos empregados (explicitamente uma região limitada simétrica, $\Omega = [-L, L]$, elementos finitos

do mesmo comprimento e partição em tempos iguais), precisamos de uma quantidade de dados que podem ser gerados internamente e também de outros dados de controle que vão ser lidos no arquivo FOR022.DAT e FOR024.DAT, segundo o método, respectivamente. A geração e leitura dos dados constitui a unidade Pré-Processo.

Os cálculos das matrizes elementares, a montagem das matrizes globais, o cálculo do vetor forçante e a solução do sistema de equações globais formam parte da Unidade Processo que é de importância central.

A unidade Saída dos programas varia com o método usado para resolver o problema, assim, ou simplesmente imprime os valores nos nós em um tempo fixado da solução ou calcula também, o erro máximo obtido de iteração em iteração no método Newton-Galerkin.

Os programas EVOEXTP e EVONEW2 foram escritos em linguagem FORTRAN, rodado em um computador da Digital Equipment Corporation VAX/VMS versão V4.3, em precisão simples e os gráficos obtidos na impressora PLOTTER do VAX.

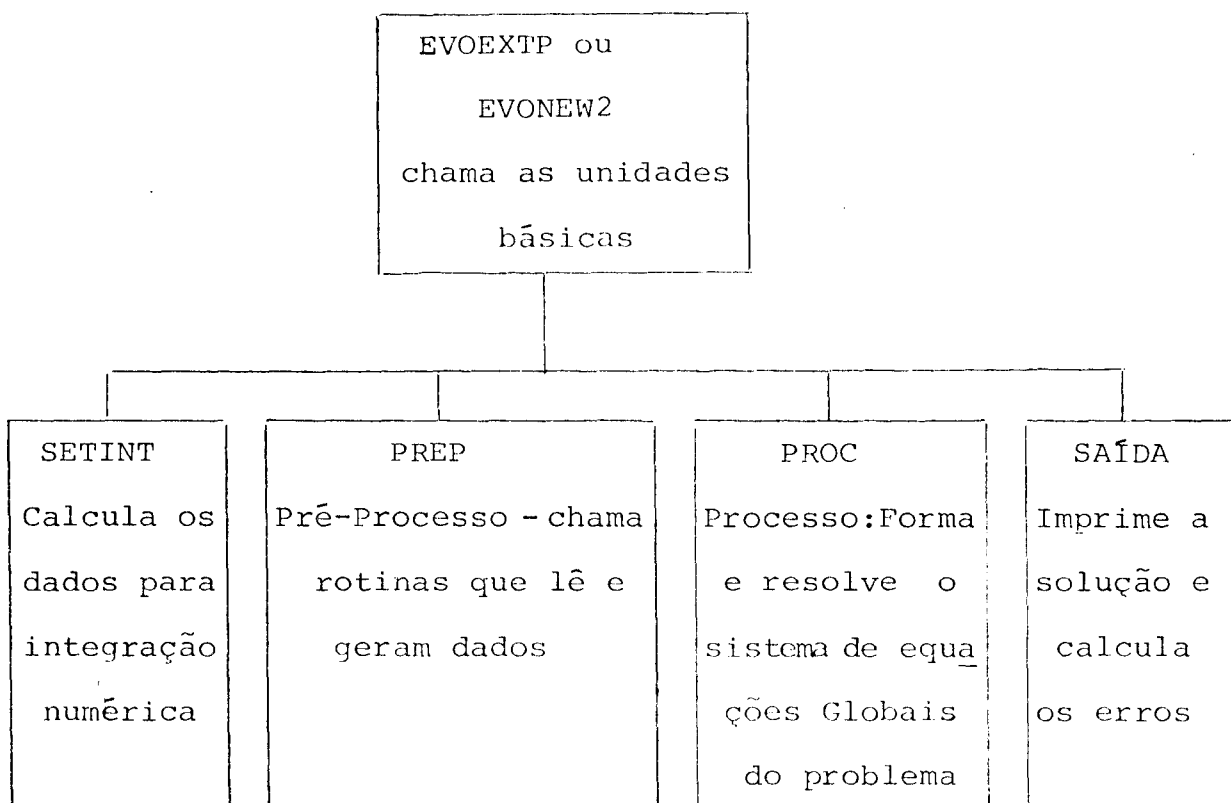


Figura 6 - Diagrama Geral dos Programas

A seguir escreveremos uma relação com o nome das variáveis usadas nos dois programas e também o dicionário das rotinas principais envolvidas.

VARIÁVEIS:-

N, NN - Número de nós por elemento, neste caso é dois. Número de pontos gaussianos para a integração numérica.

$X(\cdot)$ - Vetor das coordenadas dos nós.

$XI(NN,NN), XIV(NN)$ - Matriz dos valores dos pontos de Gauss usados para integração dos elementos finitos. Vetor contendo os valores dos pontos de Gauss para integração dos elementos infinitos.

$W(NN,NN), WIV(NN)$ - Matriz e vetor respectivamente dos pesos para a quadratura gaussiana.

$EAK(N,N), EBK(N,N)$ - Matrizes elementares já definidas na seção 4.1.

$NNODE, NELEM, NTEMPO$ - Número de nós, número de elementos total (finitos mais os infinitos), número de intervalos no tempo.

$GAK(NNODE, NNODE), GBK(\cdot, \cdot)$ e $GF(\cdot)$ - Matrizes globais do sistema de equações diferenciais definido no capítulo III.

$ALFA(NNODE, NTEMPO+1), TETA$ - Matriz das soluções no método Galerkin com aproximações Crank-Nicolson extrapolados no programa EVOEXT. Parâmetro do método (θ).

$ERR(NTEMPO), LAM, IT$ - Vetor do erro cometido em cada nível do tempo. Parâmetro do programa EVONEW2, usado para resolver o problema

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \lambda f(u) , \text{ com } 0 < \lambda \leq 1 \quad (4.15)$$

atê chegar ao nosso problema, com $\lambda = 1$. Contador do número de iterações.

ALFA(21,NNODE,NTEMPO) - Matriz das soluções, considerando como máximo até 20 iterações no programa EVONEW2, mais a iteração zero.

NODES(2,NNODE),KIND(NELEM),NINT(NELEM) - Matriz da enumeração de nós. Vetor que contém o tipo de funções de forma que vai ter cada elemento. Vetor que contém o número de pontos de Gauss a usar na integração numérica sobre cada elemento.

BB(3,NNODE),BF(NNODE) - Matriz do sistema do método Crank-Nicolson, armazenando só a banda tridiagonal e o vetor do lado direito do sistema $BB\bar{\gamma} = BF_{-}$ (onde $\bar{\gamma} = \bar{\alpha}(t_{k+1}) - \bar{\alpha}(t_k)$ em forma genérica).

ROTINAS:

SETINT - Esta rotina armazena numa memória comum os valores dos pesos e coordenadas dos pontos de Gauss, para a integração numérica dos elementos finitos.

GRULE - Gera os pontos de Gauss e os pesos respectivos para a integração nos elementos infinitos.

QGAUSS e QGAUSLI - Faz a integração numérica nos elementos infinitos.

RTEM - Lê os limites inferior e superior da variável tempo e o número de divisões.

RCON - Lê os parâmetros de controle do programa, isto é, número de nós e número de elementos.

RNODE - Lê e gera as coordenadas de nós.

RINI - Nesta rotina atribui-se os valores da condição inicial.

RELEM - Lê o número de elementos, o tipo de funções de forma e o número de pontos de Gauss a usar, para cada elemento, finalmente faz a enumeração global de nós e elementos.

PREP - Constituído pelos chamamos às subrotinas RCON, RNODE e RELEM.

RINTEG - Calcula as entradas das matrizes EAK, EBK que estão associadas ao primeiro e último elemento (os elementos infinitos).

ELEM,LINEAK - Calcula as matrizes elementares EAK e EBK. Calcula a matriz elementar $\overline{EAK}$.

SHAPE - Calcula os valores das funções de forma e de suas derivadas.

ASSMB - Faz a montagem das matrizes GAK e GBK.

CRANKSOLVE - Gera o sistema linear $BB\overline{\alpha} = BF$, onde $BB = GBK + \Delta t(0.5 + \theta)GAK$, e $BF = -\Delta t(\theta GAK(\overline{\alpha}_{k-1} - \overline{\alpha}_k) + GF + GAK\overline{\alpha}_k)$, basta $\theta = 0$ para o método de Newton.

BANDATRI - Resolve o sistema tridiagonal sem pivotamento.

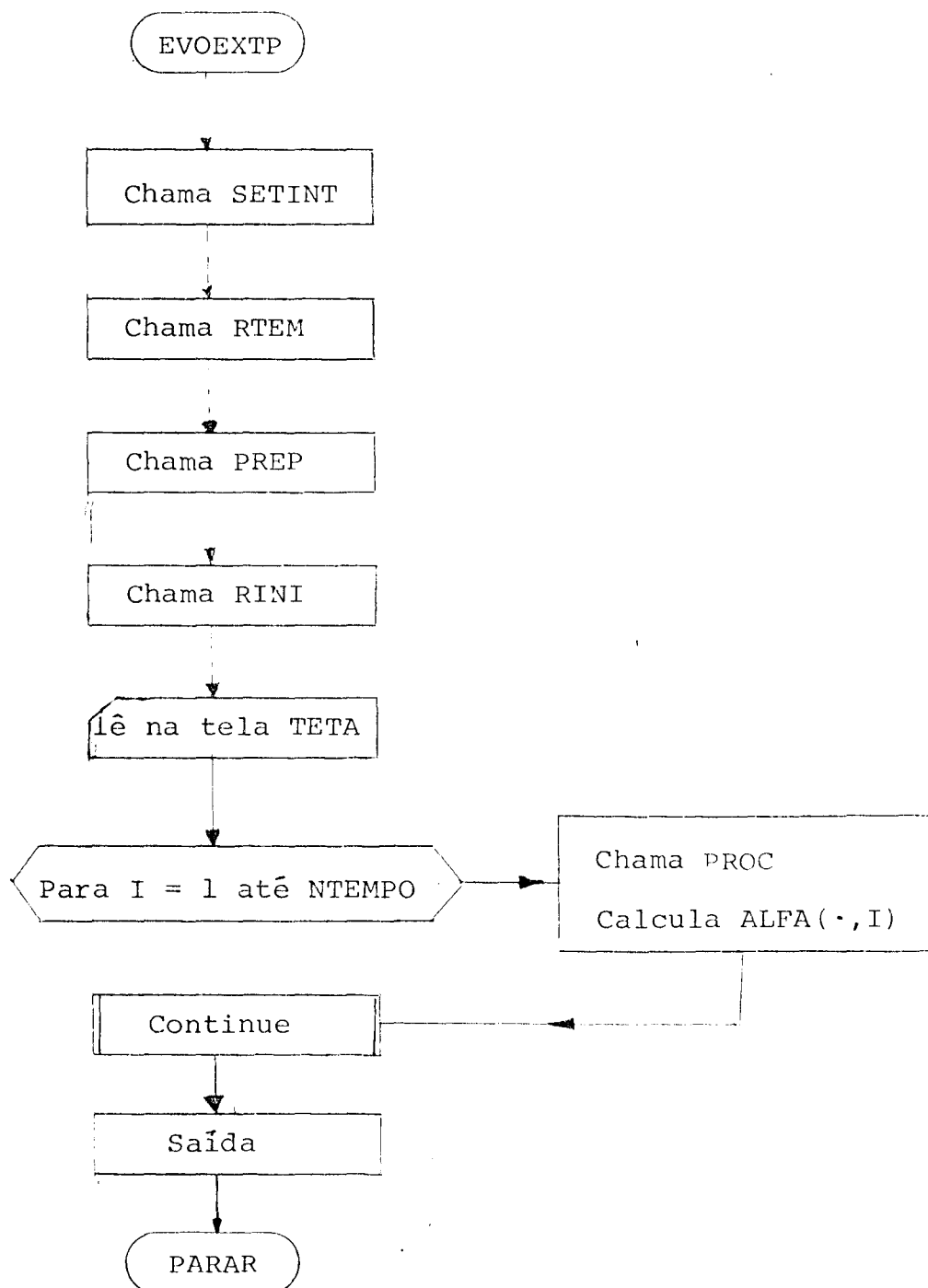
FORÇANTE - Calcula o vetor forçante no método de Crank-Nicolson extrapolado.

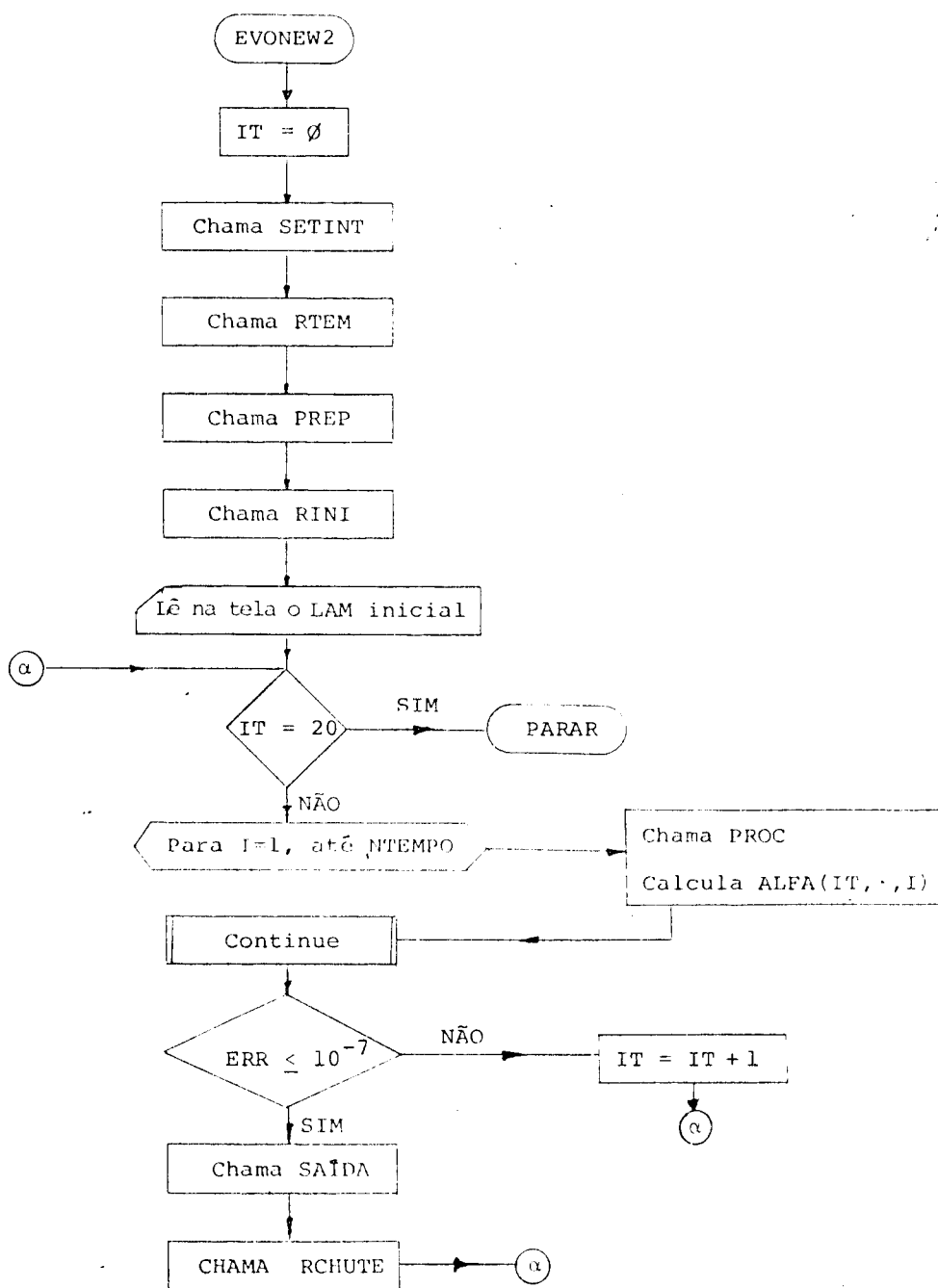
FORÇANEW - Calcula o vetor forçante no método de Newton (EVONEW2).

PROC. - Rotina que faz o cálculo total chamando rotinas de integração, montagem e solução.

RCHUTE - Atribui o valor, da última iteração, de ALFA(IT, NNODE, NTEMPO) à iteração zero, novo chute, quando o lambda muda (ver 4.15) no programa EVONEW2.

A seguir apresentamos o diagrama de blocos dos programas EVONEW2, EVOEXTP.



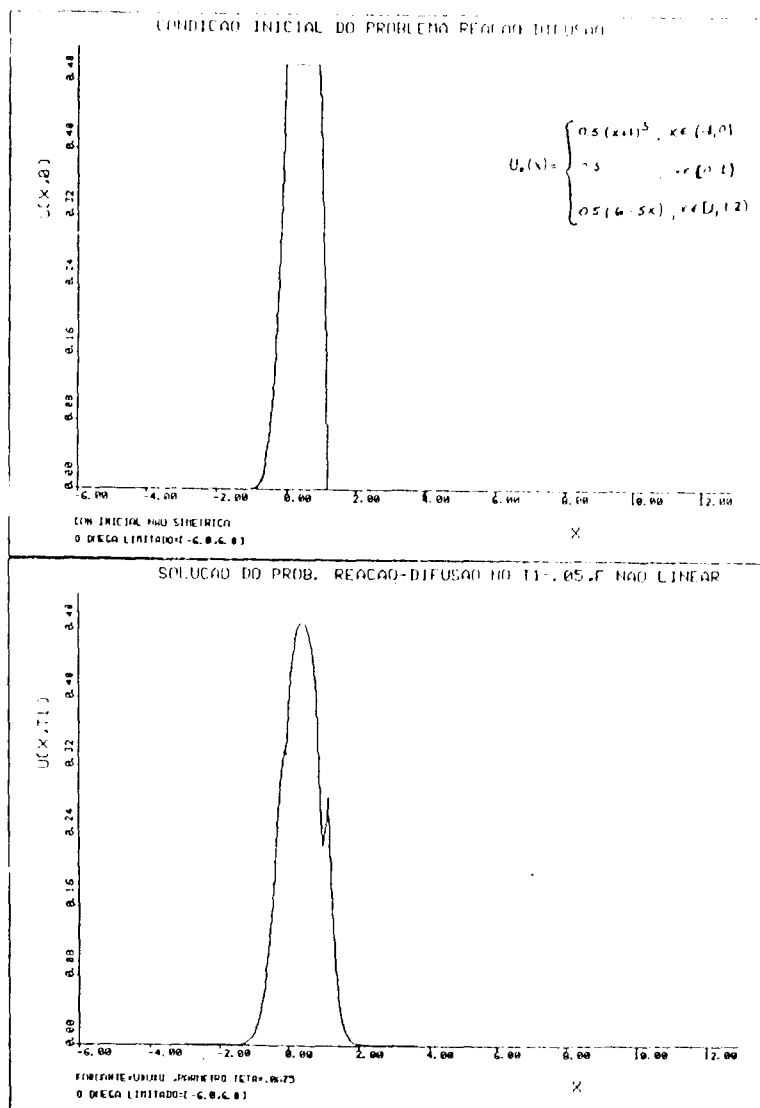


4.3. ENSAIOS NUMÉRICOS

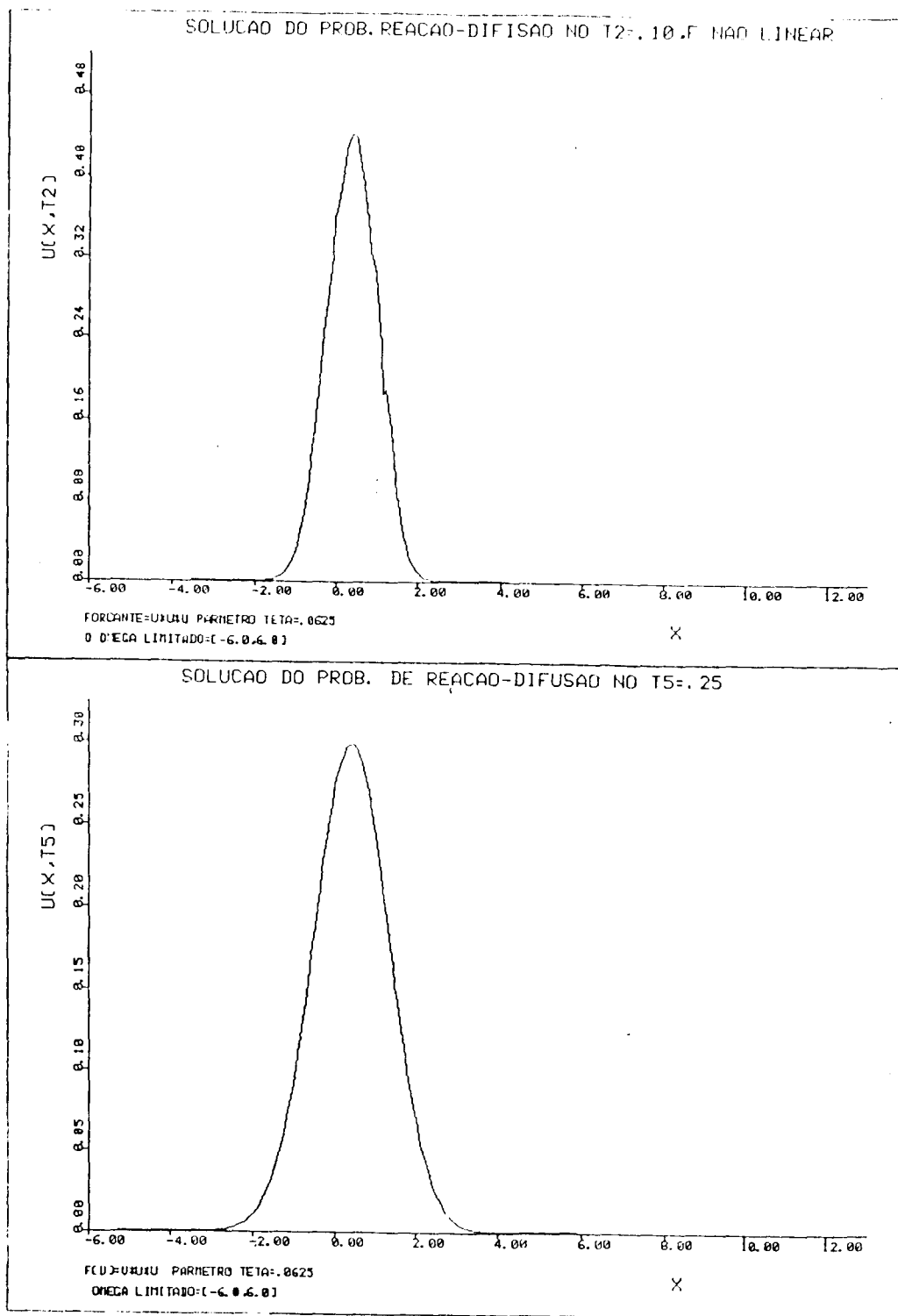
Os programas EVOEXTP e EVONEW2 foram usados com diferentes funções forçantes e diferentes condições iniciais. Apresentamos os gráficos das soluções aproximadas obtidas com EVOEXTP, em dois exemplos usando 200 elementos em Ω e 20 divisões no intervalo de tempo $[0,1]$.

EXEMPLO 1: $u_t = u_{xx} + u^3$

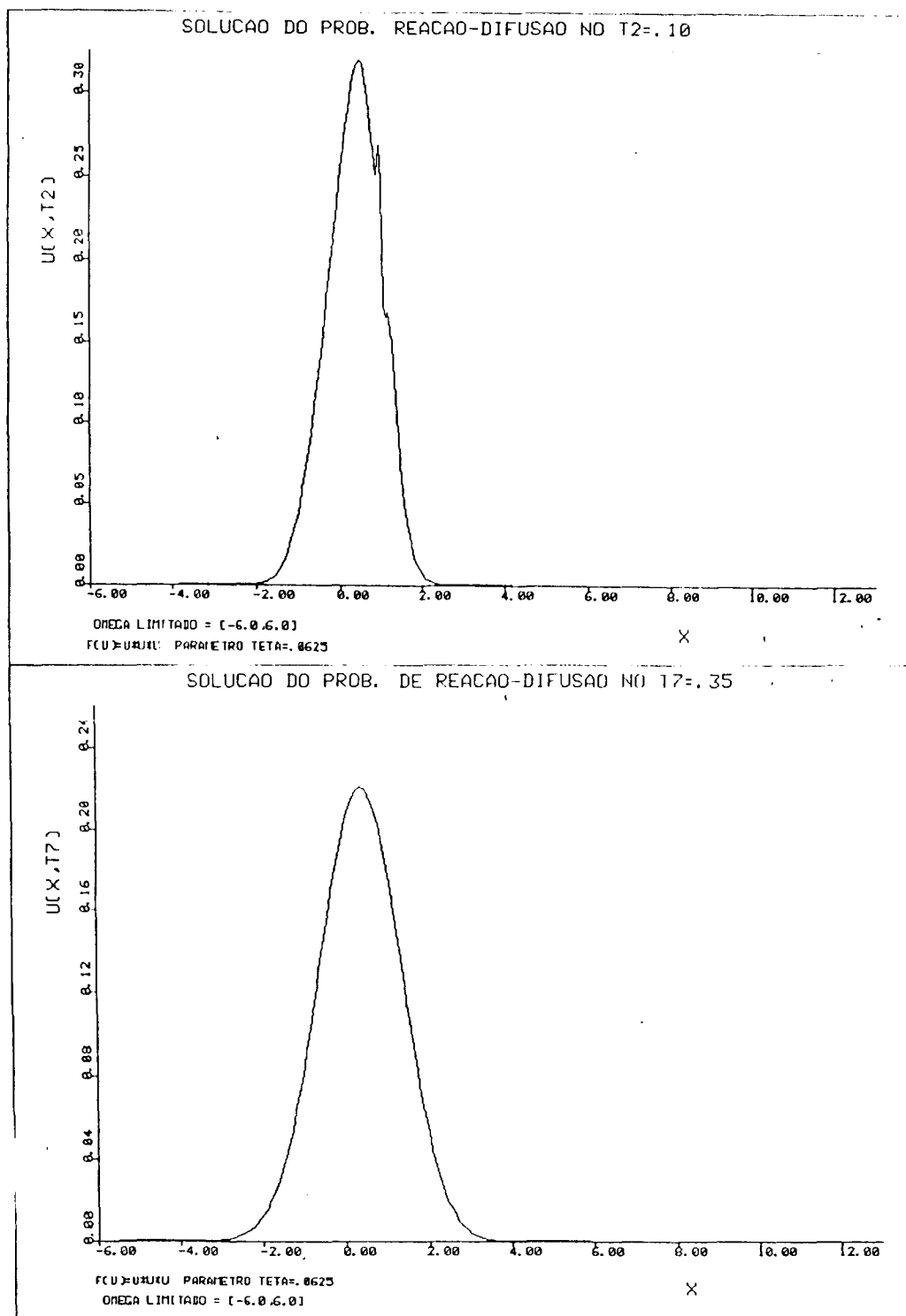
$$u(x,0) = u_0(x).$$



Continuação do Exemplo 1.



Continuação do Exemplo 2.



CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS

Entre os dois métodos de aproximação utilizados, o Galerkin com o procedimento Crank-Nicolson Extrapolado e Newton-Galerkin, nos sos ensaios numéricos favorecem o primeiro com relação ao número de sistemas lineares a serem resolvidos e memória. Também a implementação computacional do procedimento Crank-Nicolson Extrapolado resultou muito mais simples que o Newton-Galerkin.

Com relação à base do espaço de aproximação, as mesmas idéias utilizadas aqui poderiam ser extendidas a sistemas de equações de reação-difusão em uma variável espacial.

Finalmente, parece-nos que a combinação das técnicas da análise assintótica junto com o método de Galerkin é útil para tratar problemas em domínios ilimitados ou com singularidades.

BIBLIOGRAFIA

1. BARROS NETO J. - "An introduction to the theory distributions", Marcel Dekker, Inc., New York, 1973.
2. BECKER E. - CAREY G. - ODEN J. - "Finite Elements: An Introduction", Prentice Hall, New Jersey, 1981.
3. BRAMBLE, J.H. - THOMÉE, V. - Discrete Time Galerkin Methods for a Parabolic Boundary Valued Problem, Annali di Matematica Pura e Applicata, Vol. 101, 1974.
4. CIARLET, P.G. - "The Finite Element Method for Elliptic Problems", North-Holland, Publishing Company, New York, 1978.
5. DAVIS, P.J. - RABINOWITZ, P. - "Methods of Numerical Integration", Academic Press, New York, 1974.
6. DUPONT, T. - FAIRWEATHER, G. - JOHNSON, P. - Three-level Galerkin Methods for Parabolic Equations. SIAM J. Numerical Analysis, Vol. II, N° 2, April, 1974.
7. FAIRWEATHER, G. - "Finite Element Galerkin Methods for

Differential Equations", Marcel Dekker, Inc. New York, 1978.

8. FOLLAND, B. - "Introduction to Partial Differential Equations", Princeton University Press, Mathematical Notes, Vol. 17, 1976.
9. FRIEDMAN, A. - "Partial Differential Equations of Parabolic Type", Krieger, Malabar, Fla., 1983.
10. LADYŽENSKAJA, O.A. - SOLONNIKOV, V.A. - URAL'CEVA, N.N. - "Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type", American Mathematical Soc., Vol. 23, Providence Rhode Island, 1968.
11. LIONS, J.L. - MAGENES, E. - "Problemes aux Limites Nonhomogenes et Applications", Dunod, Paris, 1968.
12. MEDEIROS, L.A. - "Iniciação aos Espaços de Sobolev e Aplicações", Texto de Métodos Matemáticos de U.F. Rio de Janeiro, Vol. 16, 1983.
13. MITCHELL, A.R. - WAIT, R. - "The Finite Element Methods in Partial Differential Equations", John Wiley & Sons, New York, 1977.

14. ODEN, J.T. - REDDY, J.N. - "An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements, John Wiley & Sons, New York, 1976.
15. PRENTER, P.M. - "Splines and Variational Methods", John Wiley & Sons, New York, 1975.
16. RALL, L.B. - "Computational Solution of Nonlinear Operator Equations", John Wiley & Sons, New York, 1969.
17. SCOTT, R. - Interpolated boundary conditions in the Finite Element Method, SIAM J., Numerical Analysis, Vol. 12, 1975.
18. STRANG, G. - FIX, G.J. - "An Analysis of the Finite Element Method", Prentice Hall, Englewood, Cliffs, 1973.
19. TONG, P. - ROSETOS, J. - "Finite Element Methods, Basic Technique and Implementation", M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, 1977.
20. WHEELER, M.F. - A priori L^2 error estimates for Galerkin Approximations to Parabolic Partial Differential Equations, SIAM J. Numerical Analysis, Vol. 10, 1973.

21. KERVORKIAN J. - COLE J.D. - "Perturbation Methods in Applied Mathematics", Springer-Verlag, New York, 1981.