

Uma formulação multiescala não linear e descontínua para problemas de convecção-difusão-reação¹

A nonlinear and discontinuous multiscale formulation for convection-diffusion-reaction problems

Una formulación multiescala no lineal y discontinua para problemas de convección-difusión-reacción

Enéas Mendes de Jesus²

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo (IFES), *Campus* Piúma, Piúma, ES, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), Vitória, ES, Brasil

 <https://orcid.org/0000-0002-2384-3831>,  <http://lattes.cnpq.br/4180558774113196>

Isaac Pinheiro dos Santos³

Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), *Campus* de São Mateus, São Mateus, ES, Brasil

 <https://orcid.org/0000-0001-8524-0393>,  <http://lattes.cnpq.br/3793156690673506>

Resumo: Este trabalho apresenta uma formulação de Galerkin descontínua multiescala e não linear com o objetivo de resolver problemas de convecção-difusão-reação. Considerando uma decomposição do espaço de aproximação em duas escalas, macro e micro, o novo método introduz um operador não linear de difusão artificial em ambas as escalas de discretização, enquanto utiliza a abordagem descontínua somente na macro escala. A micro escala é modelada através de funções bolha (funções polinomiais que se anulam na fronteira dos elementos), permitindo a aplicação do processo de condensação estática em cada elemento. A discretização do modelo numérico resulta em um sistema global de equações associado aos pontos nodais apenas da macro escala. Para avaliar as propriedades de estabilidade e convergência do esquema proposto, foram realizados alguns experimentos numéricos e comparados com o método de Galerkin descontínuo clássico. A formulação proposta mostrou-se eficiente em eliminar as oscilações espúrias que aparecem nas regiões de gradientes elevados em problemas com convecção/reação dominantes. Além disso, o método apresentou taxas ótimas de convergência.

¹ Artigo apresentado no Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional 2023 (ERMAT-RJ) & Simpósio 1ª Década do Curso de Mestrado Multidisciplinar em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia (PPG-MCCT), da Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, Rio de Janeiro, realizado de 30 de outubro a 1 de novembro de 2023.

² **Currículo sucinto:** Bacharel e mestre em Matemática pela Universidade Federal do Espírito Santo, doutorando em Ciência da Computação no Programa de Pós-Graduação em Informática da Universidade Federal do Espírito Santo, docente do IFES, *Campus* Piúma. **Contribuição de autoria:** Conceituação, Curadoria de Dados, Escrita – Primeira Redação, Escrita – Revisão e Edição, Investigação, Metodologia, Validação e Visualização. **Contato:** eneas.jesus@ifes.edu.br.

³ **Currículo sucinto:** Licenciado em Matemática e mestre em Ciência da Computação pela Universidade Federal do Espírito Santo, doutor em Modelagem Computacional pelo Laboratório Nacional de Computação Científica e professor da Universidade Federal do Espírito Santo. **Contribuição de autoria:** Conceituação, Curadoria de Dados, Escrita – Revisão e Edição, Metodologia e Supervisão. **Contato:** isaac.santos@ufes.br.



Palavras-chave: Galerkin descontínuo; difusão artificial; convecção-difusão-reação; funções bolha; métodos multiescalas.

Abstract: This work presents a formulation of discontinuous multiscale and nonlinear Galerkin method aiming to solve convection-diffusion-reaction problems. Considering a decomposition of the approximation space into two scales, macro and micro, the new method introduces a nonlinear artificial diffusion operator at both discretization scales, while employing the discontinuous approach only at the macro scale. The micro scale is modeled through bubble functions (polynomial functions that vanish at the boundary of the elements), allowing the application of the static condensation process in each element. The discretization of the numerical model results in a global system of equations associated with nodal points only at the macro scale. To assess the stability and convergence properties of the proposed scheme, several numerical experiments were conducted and compared with the classical discontinuous Galerkin method. The proposed formulation proved to be efficient in eliminating spurious oscillations that appear in regions of high gradients in problems with dominant convection/reaction. Furthermore, the method exhibited optimal convergence rates.

Keywords: discontinuous Galerkin; artificial diffusion; convection-diffusion-reaction; bubble functions; multiscale methods.

Resumen: Este trabajo presenta una formulación de Galerkin discontinua multiescala y no lineal con el objetivo de resolver problemas de convección-difusión-reacción. Considerando una descomposición del espacio de aproximación en dos escalas, macro y micro, el nuevo método introduce un operador no lineal de difusión artificial en ambas escalas de discretización, mientras utiliza el enfoque discontinuo solo en la macro escala. La microescala se modela a través de funciones burbuja (funciones polinomiales que se anulan en la frontera de los elementos), permitiendo la aplicación del proceso de condensación estática en cada elemento. La discretización del modelo numérico resulta en un sistema global de ecuaciones asociado a los puntos nodales solo de la macroescala. Para evaluar las propiedades de estabilidad y convergencia del esquema propuesto, se realizaron algunos experimentos numéricos y se compararon con el método de Galerkin discontinuo clásico. La formulación propuesta se mostró eficiente en la eliminación de las oscilaciones espurias que aparecen en regiones de gradientes elevados en problemas con convección/reacción dominantes. Además, el método presentó tasas óptimas de convergencia.

Palabras clave: Galerkin discontinuo; difusión artificial; convección-difusión-reacción; funciones burbuja; métodos multiescala.

Data de submissão: 31 de janeiro de 2024.

Data de aprovação: 19 de abril de 2024.



1 Introdução

A solução numérica de problemas de convecção-difusão-reação pode apresentar instabilidades numéricas quando os termos de convecção e/ou reação preponderam em relação à difusão. Isso acontece, em geral, com métodos convencionais, como o método de elementos finitos de Galerkin (MEF) clássico. A estratégia de refinamento de malha não é adequada neste caso porque leva a um aumento considerável no esforço computacional. Uma forma de superar as fragilidades do MEF, para este tipo de problema, é recorrer a métodos de Petrov-Galerkin, também chamados de métodos estabilizados.

Os métodos estabilizados introduzem uma difusão artificial no modelo numérico de modo que a formulação resultante apresenta boas propriedades de estabilidade e convergência, fornecendo soluções numéricas livres de oscilações espúrias. Essas estabilizações podem ser lineares ou não lineares. Como exemplos de formulações estabilizadas lineares para resolver problemas de transporte dominados pela convecção, mencionamos o método *Streamline Upwind Petrov-Galerkin* (SUPG) (Brooks; Hughes, 1982), o método *Galerkin-Least Square* (GLS) (Hughes; Franca; Hulbert, 1989), o método *Continuous Interior Penalty* (CIP) (Burman; Hansbo, 2004), e o método *Local Projection Stabilization* (LPS) (Barrenechea; Burman; Karakatsani, 2017). Todos esses métodos fornecem soluções numéricas globalmente estáveis, mas oscilações localizadas podem permanecer em regiões de altos gradientes. A eliminação dessas oscilações locais pode ser obtida através de esquemas não lineares, conhecidos como captura de descontinuidades (John; Knobloch, 2008).

Uma outra importante classe de métodos para resolver problemas predominantemente convectivos é baseada na metodologia Galerkin descontínuo (GD). O método GD foi introduzido por Redd e Hill, em 1973, para a solução da equação hiperbólica de transporte de nêutrons (Reed; Hill, 1973). Esses métodos possuem várias propriedades importantes, tais como, capacidade de lidar com geometrias complexas, flexibilidade e adaptabilidade para refinamento h - p , facilidade no uso de aproximação de alta ordem e capacidade de paralelização (Cockburn; Karniadakis; Shu, 2000).

Embora os métodos GD exibam boas propriedades de estabilidade para problemas com convecção dominante, eles podem apresentar soluções não físicas (como densidade ou concentração negativa) em regiões de camadas limites, de modo que algum procedimento de estabilização adicional seja necessário para obtenção de soluções sem oscilações numéricas. Existem várias técnicas propostas para evitar essas oscilações indesejáveis em regiões de



gradientes acentuados, como limitadores de inclinação (Cockburn; Hou; Shu, 1990); difusão artificial (Persson; Peraire, 2006; Yucel; Stoll; Benner, 2013); multiescala não linear (Arruda; Almeida; Do Carmo, 2010a; 2010b) e técnicas de pós-processamento (Frerichs; John, 2021; 2022).

A metodologia multiescala não linear apresentada em Arruda, Almeida e Do Carmo (2010a; 2010b), conhecida como Difusão Dinâmica (DD), considera uma decomposição do espaço de aproximação e do campo de velocidade em escalas resolvidas (macro) e não-resolvidas (micro). Um operador não linear de difusão artificial é adicionado à formulação numérica. A quantidade de difusão artificial é determinada pela solução da equação na escala resolvida a nível de elemento, conduzindo a um método auto-adaptativo e livre de parâmetros de estabilização. Além disso, são necessárias duas malhas do domínio do problema: uma malha representando o espaço macro e uma malha mais refinada, onde o problema é resolvido. Isso resulta em uma formulação com um custo computacional elevado, em comparação com o método GD clássico. Mais recentemente, o método DD foi proposto no contexto contínuo usando funções bolha na micro escala (Santos *et al.*, 2021; Valli *et al.*, 2018), resultando em um método com boas propriedades de convergência e estabilidade, além de ter um custo computacional da mesma ordem da formulação clássica de Galerkin contínuo.

Neste trabalho apresentamos um novo método multiescala e não linear utilizando uma abordagem de Galerkin descontínuo para problemas com convecção dominante. O método pode ser considerado uma versão descontínua do método DD apresentado por Valli *et al.* (2018). Além disso, essa formulação é diferente da abordagem apresentada por Arruda, Almeida e Do Carmo (2010a; 2010b), uma vez que utiliza funções bolhas na micro escala, requerendo, dessa forma, apenas uma malha de elementos finitos, associada à macro escala, para resolver o problema. O método tem como ponto de partida uma formulação GD apresentada por Houston, Schwab e Suli (2002), que é a mesma utilizada por Arruda, Almeida e Do Carmo (2010b).

O presente trabalho está organizado da seguinte forma: apresentamos a equação de convecção-difusão-reação, os conceitos e notações utilizados ao longo do texto, assim como a formulação GD. Em seguida, o novo método é proposto. Por fim, alguns experimentos numéricos são apresentados.



2 Método Galerkin Descontínuo

Seja $\Omega \in \mathbb{R}^2$ um domínio aberto limitado com fronteira de Lipschitz, Γ . O problema de convecção-difusão-reação com condição de contorno de Dirichlet é dado por

$$\begin{aligned} -\kappa\Delta u + \beta \cdot \nabla u + \sigma u &= f \text{ em } \Omega, \\ u &= g \text{ em } \Gamma, \end{aligned} \tag{1}$$

onde $\kappa > 0$ é o coeficiente de difusão, $\beta \in [W^{1,\infty}(\Omega)]^2$ com $\nabla \cdot \beta = 0$ é o campo de velocidade, $\sigma \in L^\infty(\Omega)$ é o coeficiente de reação, $f \in L^2(\Omega)$ é o termo de fonte e $g \in H^{1/2}(\Gamma)$. A fronteira de entrada é dada por

$$\Gamma_- = \{x \in \Gamma; \beta(x) \cdot \mathbf{n}(x) < 0\}, \tag{2}$$

onde $\mathbf{n}(x)$ representa o vetor unitário normal na direção exterior a Γ no ponto $x \in \Gamma$.

Considerando uma partição triangular regular do domínio Ω , denotada por $\mathcal{T}_h = \{K\}$, onde h é o parâmetro de malha, define-se o espaço quebrado de elementos finitos descontínuos da seguinte forma:

$$V_h = \{v \in L^2(\Omega) : v|_K \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \tag{3}$$

onde $\mathbb{P}_1(K)$ denota o espaço de polinômios lineares sobre K .

A fim de obter a formulação Galerkin descontínua é necessário introduzir alguns conceitos preliminares. Denotamos por \mathcal{E}_h o conjunto de todas as arestas em \mathcal{T}_h . Os conjuntos \mathcal{E}_h^0 e \mathcal{E}_h^Γ contêm as arestas do interior e da fronteira, respectivamente. Dada uma função escalar φ , suave por partes em \mathcal{T}_h , definimos o salto e a média, respectivamente, sobre uma aresta $e \in \mathcal{E}_h^0$ da seguinte forma:

$$[[\varphi]] = \varphi|_{K_1} \mathbf{n}^1 + \varphi|_{K_2} \mathbf{n}^2, \quad \{\varphi\} = \frac{\varphi|_{K_1} + \varphi|_{K_2}}{2}, \tag{4}$$

onde $\varphi|_{K_i}$ é a restrição da função φ ao elemento K_i . Mais ainda, K_1 e K_2 são os elementos que compartilham a aresta e e \mathbf{n}^1 e \mathbf{n}^2 são os vetores unitários normais a aresta e apontando para o exterior do elemento K_1 e K_2 , respectivamente. Para uma função vetorial τ , temos

$$[[\tau]] = \tau|_{K_1} \cdot \mathbf{n}^1 + \tau|_{K_2} \cdot \mathbf{n}^2, \quad \{\tau\} = \frac{\tau|_{K_1} + \tau|_{K_2}}{2}. \tag{5}$$

Além disso, se $e \in \mathcal{E}_h^\Gamma$, as definições de salto e média coincidem com os traços sobre e das respectivas funções.



O método GD para o problema descrito na equação (1), definido em Houston, Schwab e Suli (2002), consiste em achar $u_h \in V_h$ tal que

$$B_{GD}(u_h, v_h) = F_{GD}(v_h), \quad \forall v_h \in V_h, \tag{6}$$

onde

$$\begin{aligned} B_{GD}(u_h, v_h) = & \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K (\kappa \nabla u_h \cdot \nabla v_h + \beta \cdot \nabla u_h + \sigma u_h v_h) dx \\ & - \kappa \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \int_e \{\nabla u_h\} \llbracket v_h \rrbracket ds + \epsilon_0 \kappa \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \int_e \llbracket u_h \rrbracket \{\nabla v_h\} ds + \kappa \eta_0 h^{-1} \sum_{e \in \mathcal{E}_h^0} \int_e \llbracket u_h \rrbracket \llbracket v_h \rrbracket ds \\ & - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{0-}} \int_e (\beta \cdot \llbracket u_h \rrbracket) v_h ds - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma-}} \int_e (\beta \cdot \mathbf{n}) u_h v_h ds \\ & - \kappa \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma}} \int_e (\nabla u_h \cdot \mathbf{n}) v_h ds + \epsilon_0 \kappa \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma}} \int_e u_h (\nabla v_h \cdot \mathbf{n}) ds + \kappa \eta_{\Gamma} h^{-1} \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma}} \int_e u_h v_h ds, \end{aligned} \tag{7}$$

$$F_{GD}(v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K f v_h dx + \epsilon_0 \kappa \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma}} \int_e g (\nabla v_h \cdot \mathbf{n}) ds + \kappa \eta_{\Gamma} h^{-1} \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma}} \int_e g v_h ds - \sum_{e \in \mathcal{E}_h^{\Gamma-}} \int_e (\beta \cdot \mathbf{n}) g v_h ds, \tag{8}$$

em que $\epsilon_0 = \{-1, 0, 1\}$, η_0 e η_{Γ} são os parâmetros de penalização das arestas do interior e da fronteira, respectivamente. Na formulação original, apenas um parâmetro de penalização foi utilizado, isto é, $\eta_0 = \eta_{\Gamma}$. Porém, conforme discutido por Arnold *et al.* (2002), o parâmetro de penalização pode ser ajustado a fim de minimizar os saltos nas fronteiras dos elementos na solução, produzindo assim uma continuidade entre os elementos. Mais ainda, tal parâmetro pode fazer com que a condição de contorno de Dirichlet seja satisfeita fraca ou fortemente, a depender do valor assumido. Neste trabalho consideramos separadamente parâmetros de penalização no interior e na fronteira do domínio, de forma a obter simultaneamente a continuidade inter-elementar e a satisfação forte ou fraca das condições de contorno de Dirichlet.

3 Método Difusão Dinâmica Descontínua com Funções Bolha

Esta formulação multiescala considera a metodologia descontínua aplicada apenas na escala macro da discretização. A escala micro ou fina é discretizada usando funções bolha. Além disso, um operador de difusão artificial não linear é adicionado a ambas as escalas. O método tem origem nos trabalhos apresentados por Arruda, Almeida e Do Carmo (2010a) e Valli *et al.* (2018).



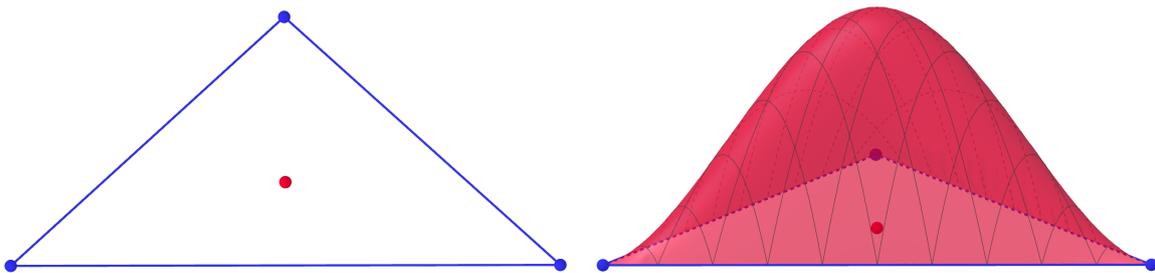
O espaço definido na equação (3) é enriquecido com o espaço de funções bolha, definido por

$$V_b = \{w \in H^1(\Omega) : w|_K \in H_0^1(K), \forall K \in \mathcal{T}_h\}. \tag{9}$$

Uma função bolha $\varphi_b \in V_b$ associada ao elemento K é positiva em $K \setminus \partial K$ e assume valor 1 no baricentro de K , conforme Figura 1. Além disso, tal função se anula no restante do domínio. Neste trabalho utilizamos a função bolha descrita por $\varphi_b = 27N_1^K N_2^K N_3^K$, onde $N_j^K = N_j^K(x, y)$ são as funções bases do espaço V_h . O espaço enriquecido é representado pela soma direta

$$V_E = V_h \oplus V_b. \tag{10}$$

Figura 1 – À esquerda tem-se a configuração dos nós no elemento triangular, onde os pontos azuis são os pontos nodais em V_h e o ponto vermelho é o ponto nodal em V_b ; à direita tem-se a representação da função bolha utilizada



Fonte: Elaboração dos autores (2023).

Portanto, a formulação Difusão Dinâmica Descontínua com funções Bolha (DDB) consiste em achar $u_E = u_h + u_b \in V_E$, com $u_h \in V_h$ e $u_b \in V_b$, tal que

$$B_{GD}(u_E, v_E) + D(u_h; u_E, v_E) = F_{GD}(v_E), \quad \forall v_E \in V_E, \tag{11}$$

onde $v_E = v_h + v_b$, com $v_h \in V_h$ e $v_b \in V_b$. O operador não linear de difusão artificial $D(\cdot; \cdot, \cdot)$ é definido como

$$D(u_h; u_E, v_E) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \xi(u_h) \nabla u_E \cdot \nabla v_E \, dx, \tag{12}$$

onde

$$\xi(u_h) = \begin{cases} \frac{\hbar}{2} \frac{|R(u_h)|}{\|\nabla u_h\|}, & \text{se } \|\nabla u_h\| > \text{tol}_\xi, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{13}$$

Na equação (13), $\hbar = c_0 \sqrt{|K|}$, onde c_0 é uma constante, $|K|$ é a área do elemento K , $R(u_h) = -\kappa \Delta u_h + \beta \cdot \nabla u_h + \sigma u_h - f$ é o resíduo da solução da macro escala, u_h , no elemento K e



tol_ξ é um número positivo pequeno suficiente para evitar divisão por zero. Neste trabalho utilizamos $tol_\xi = 10^{-5}$.

Dada a não-linearidade do operador (12), utilizamos um processo iterativo para solução do método DDB, definido por: dada a solução u_h^n no passo n , achar u_h^{n+1} satisfazendo

$$B_{GD}(u_E^{n+1}, v_E) + D(u_h^n; u_E^{n+1}, v_E) = F_{GD}(v_E), \quad \forall v_E \in V_E. \tag{14}$$

Substituindo $u_E^{n+1} = u_h^{n+1} + u_b^{n+1}$ na equação (14) e considerando separadamente $v_E^{n+1} = v_h^{n+1}$ e $v_E^{n+1} = v_b^{n+1}$, obtemos dois subproblemas; um macro dado por

$$B_{GD}(u_h^{n+1}, v_h) + B_{GD}(u_b^{n+1}, v_h) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \xi(u_h^n) \nabla u_h^{n+1} \cdot \nabla v_h \, d\mathbf{x} = F_{GD}(v_h), \quad \forall v_h \in V_h; \tag{15}$$

e um problema micro, descrito pela equação

$$B_{GD}(u_h^{n+1}, v_b) + B_{GD}(u_b^{n+1}, v_b) + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \xi(u_h^n) \nabla u_b^{n+1} \cdot \nabla v_b \, d\mathbf{x} = F_{GD}(v_b), \quad \forall v_b \in V_b, \tag{16}$$

uma vez que

$$\int_K \xi(u_h^n) \nabla u_h^{n+1} \cdot \nabla v_b \, d\mathbf{x} = \int_K \xi(u_h^n) \nabla u_b^{n+1} \cdot \nabla v_h \, d\mathbf{x} = 0. \tag{17}$$

Em cada elemento $K \in \mathcal{T}_h$ os problemas (15) e (16) resultam no seguinte sistema local

$$\begin{bmatrix} A_{hh} & A_{hb} \\ A_{bh} & A_{bb} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_h \\ U_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{h,K} \\ F_{b,K} \end{bmatrix}, \tag{18}$$

onde A_{hh} é a matriz local associada ao termo $B_{GD}(u_h^{n+1}, v_h)|_K + \int_K \xi(u_h^n) \nabla u_h^{n+1} \cdot \nabla v_h \, d\mathbf{x}$; A_{hb} é a matriz local associada ao termo $B_{GD}(u_b^{n+1}, v_h)|_K$; A_{bh} é a matriz local associada ao termo $B_{GD}(u_h^{n+1}, v_b)|_K$; A_{bb} é a matriz local associada ao termo $B_{GD}(u_b^{n+1}, v_b)|_K + \int_K \xi(u_h^n) \nabla u_b^{n+1} \cdot \nabla v_b \, d\mathbf{x}$; $F_{h,K}$ é o vetor local associada ao termo $F_{GD}(v_h)|_K$; e $F_{b,K}$ é o vetor local associada ao termo $F_{GD}(v_b)|_K$. Os vetores U_h e U_b representam os valores das soluções u_h e u_b nos pontos nodais da macro e da micro escala, respectivamente, em cada elemento K .

Como o suporte da função bolha está contido no elemento K , a solução U_b não depende de outros elementos, sendo assim, utilizamos o processo de condensação estática para eliminar a variável U_b na equação (18), resultando no sistema local reduzido

$$A_K U_h = F_K, \tag{19}$$

onde $A_K = A_{hh} - A_{hb}(A_{bb})^{-1}A_{bh}$ e $F_K = F_{h,K} - A_{hb}(A_{bb})^{-1}F_{b,K}$. As matrizes e os vetores locais do sistema reduzido (19) são utilizados para obter o sistema global que fornecerá uma solução aproximada para o problema (1).



Para melhorar a convergência do processo iterativo não linear, utilizamos o esquema de relaxação apresentado por Santos e Almeida (2007):

$$\xi^* \leftarrow \omega \xi(u_h^n) + (1 - \omega) \xi(u_h^{n-1}), \tag{20}$$

$$\xi(u_h^n) \leftarrow \xi^*, \tag{21}$$

onde o parâmetro ω , neste trabalho, é definido por

$$\omega = \begin{cases} 0, & \text{se } ||R(u_h^{n+1})| - |R(u_h^n)|| < C_R, \\ 1/2, & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{22}$$

com $C_R = 0, 2$.

4 Resultados e Discussões

Nesta seção apresentamos os experimentos numéricos considerando dois problema de convecção-difusão com convecção dominante, um problema de difusão-reação com reação dominante e um problema com solução suave para avaliarmos as taxas de convergência do método proposto nas normas $L^2(\Omega)$ e $H^1(\Omega)$. Os resultados numéricos são comparados com o método GD descrito na equação (6). Vamos adotar $c_0 = \sqrt{2}$, de modo que $h = \sqrt{2|K|}$. Em todos os exemplos o domínio espacial é dado por $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ e utilizamos uma malha triangular regular com 20 partições nas direções x e y .

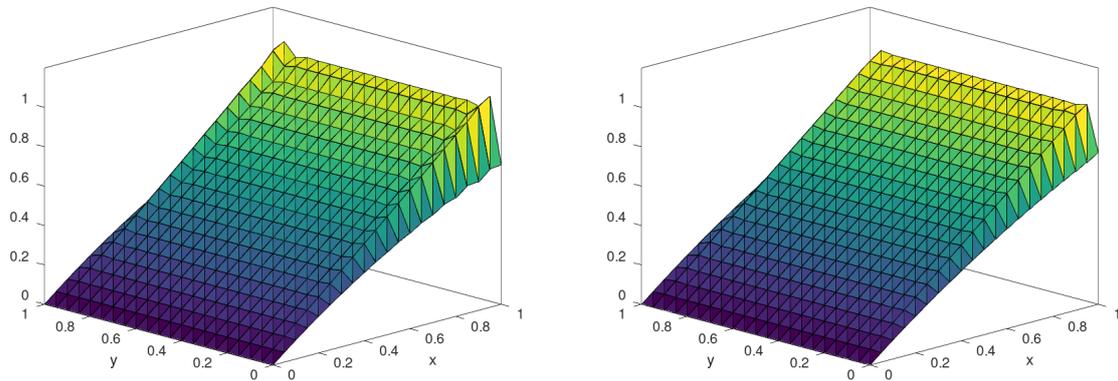
4.1 Exemplo 1: Problema com camada limite exponencial e parabólica

Consideramos um problema bidimensional de convecção-difusão onde $\kappa = 10^{-4}$, $\beta = (1, 0)$, $f = 1$ e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas, conforme descrito em Arruda, Almeida e Do Carmo (2010b). A solução analítica possui camada limite exponencial em $x = 1$ e camadas limite parabólicas em $y = 0$ e $y = 1$. Fora dessas camadas, a solução é aproximadamente igual a $u(x, y) = x$. A Figura 2 exibe as soluções aproximadas obtidas pelos métodos GD e DDB.

Utilizamos de forma empírica, $\eta_0 = 60$ e $\eta_\Gamma = 0, 15$. Observamos que este valor do parâmetro η_Γ não impôs fortemente a condição de contorno de Dirichlet, mas foi suficiente para representar as camadas limites em $y = 0$ e $y = 1$. Como consequência, o método GD apresenta oscilações



Figura 2 – Soluções obtidas com o método GD (à esquerda) e com o método DDB (à direita)



Fonte: Elaboração dos autores (2023).

espúrias nessas camadas, enquanto o método DDB foi capaz de reduzir quase totalmente essas oscilações numéricas.

4.2 Exemplo 2: Problema de convecção-difusão com solução analítica

Considere o problema bidimensional de convecção-difusão com $\kappa = 10^{-8}$ e $\beta = (1, 1)$. O termo de fonte é definido de modo que a solução exata seja

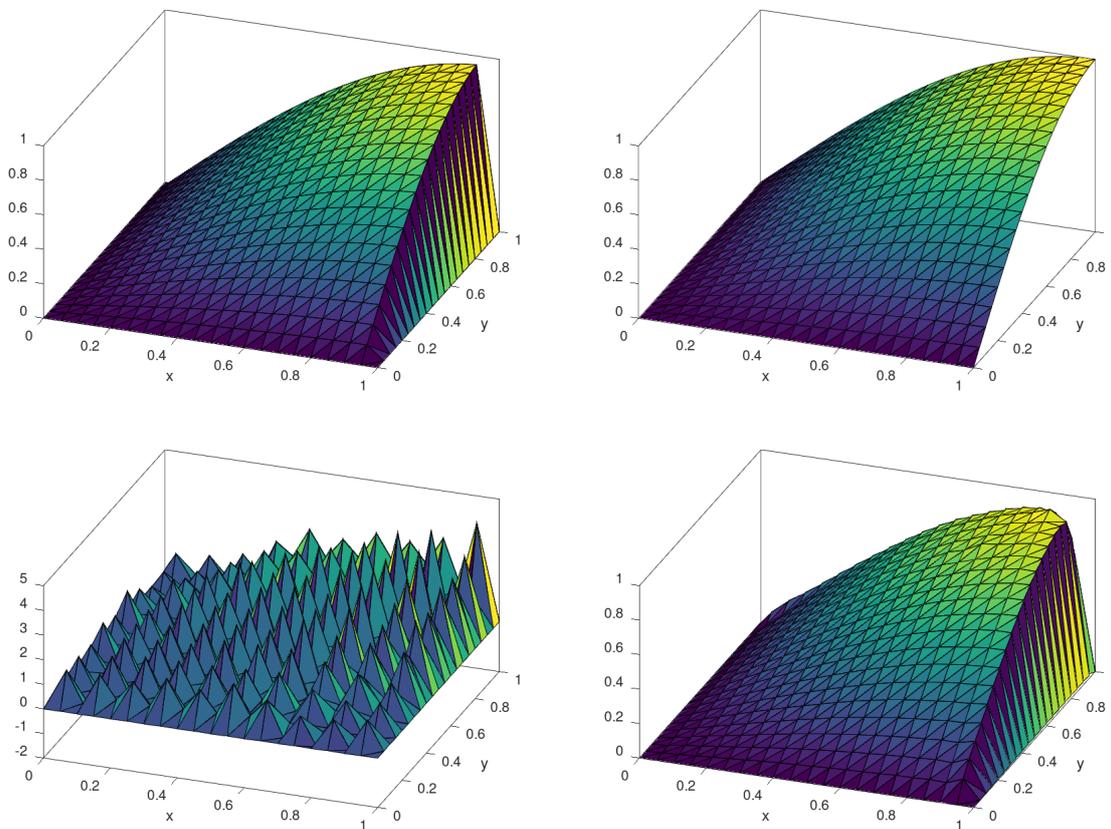
$$u(x, y) = \sin(\pi x/2) \sin(\pi y/2)(1 - e^{(x-1)/\kappa})(1 - e^{(y-1)/\kappa}). \tag{23}$$

Neste caso, a condição de contorno de Dirichlet é homogênea. A solução analítica e suas aproximações obtidas pelos métodos GD e DDB são exibidas na Figura 3. Este exemplo foi extraído de Oikawa (2014).

Neste experimento apresentamos dois cenários: condição de contorno de Dirichlet imposta fracamente e fortemente. Para o cenário onde a condição de contorno é imposta fracamente, definimos $\eta_0 = \eta_\Gamma = 4$. Neste caso, o método GD apresenta uma boa aproximação para a solução. O método DDB apresenta uma solução semelhante. No segundo cenário definimos empiricamente $\eta_0 = 3 \times 10^6$ e $\eta_\Gamma = 6 \times 10^6$, de modo a satisfazer a condição de contorno fortemente e a continuidade inter-elementar. Neste caso, o método GD apresenta oscilações espúrias por todo o domínio, enquanto a solução obtida pelo método DDB é quase livre de oscilações numéricas.



Figura 3 – Solução analítica (superior esquerdo), aproximação obtida pelo método GD com condição de Dirichlet imposta fracamente (superior direito) e fortemente (inferior esquerdo) e aproximação obtida pelo método DDB (inferior direito)



Fonte: Elaboração dos autores (2023).

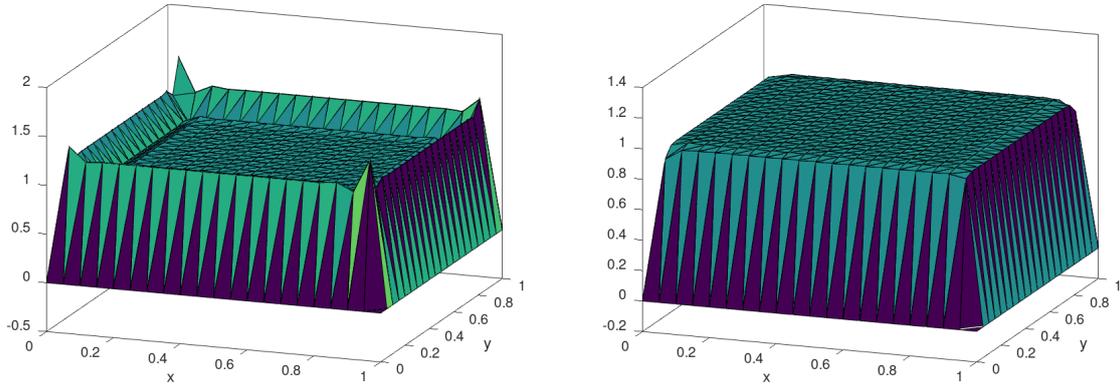
4.3 Exemplo 3: Problema de difusão-reação com reação dominante

Neste experimento vamos avaliar o desempenho do método DDB para um problema bidimensional de reação-difusão, com $\kappa = 10^{-5}$, $\sigma = 1$ e $f = 1$. Além disso, a condição de contorno é de Dirichlet homogênea. A Figura 4 apresenta as soluções aproximadas obtidas pelos método GD e DDB.

Neste caso, como o problema tem reação dominante, as oscilações restringem-se às regiões próximas às camadas limites. O método GD não é capaz de eliminar essas instabilidades numéricas, enquanto que o método DDB apresenta uma solução sem oscilações espúrias. Os parâmetros de penalização utilizados foram $\eta_0 = 10^4$ e $\eta_\Gamma = 10^5$.



Figura 4 – Soluções obtidas com o método GD (à esquerda) e com o método DDB (à direita)



Fonte: Elaboração dos autores (2023).

4.4 Taxas de convergência

Neste exemplo vamos avaliar as taxas de convergência do método DDB nas normas $L^2(\Omega)$ e $H^1(\Omega)$. Para isso, consideramos um problema bidimensional de convecção-difusão-reação onde $\kappa = 10^{-6}$, $\beta = (1, 0)^T$ e $\sigma = 1$. O termo de fonte f e as condições de contorno de Dirichlet são definidas de modo que a solução exata (suave) do problema descrito na equação (1) seja

$$u(x, y) = \sin(\pi x) \cos(\pi y). \tag{24}$$

A solução aproximada u_h é calculada em quatro malhas uniformes com 128, 512, 2048 e 8192 elementos. Os erros nas normas $L^2(\Omega)$ e $H^1(\Omega)$, definidos por

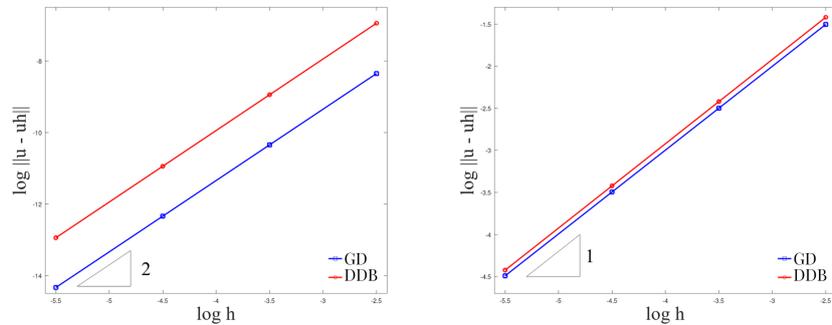
$$\|e(\mathbf{x})\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} e(\mathbf{x})^2 d\mathbf{x}, \quad \|e(\mathbf{x})\|_{H^1(\Omega)}^2 = \|e(\mathbf{x})\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla e(\mathbf{x})\|_{L^2(\Omega)}^2, \tag{25}$$

onde $e(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) - u_h(\mathbf{x})$, são apresentados na Figura 5, considerando $\log h$ no eixo das abscissas e $\log \|e(\mathbf{x})\|_X$ no eixo das ordenadas. As integrais presentes na definição das normas são resolvidas através de integração numérica, a saber, quadratura gaussiana com quatro pontos nodais.

Taxas ótimas de convergência são obtidas para ambos os métodos, GD e DDB, isto é, taxa quadrática na norma de $L^2(\Omega)$ e linear na norma de $H^1(\Omega)$, conforme Figura 5. O método DDB apresenta erros na norma de $L^2(\Omega)$ levemente maiores do que os erros obtidos pelo método GD.



Figura 5 – Taxas de convergência dos métodos GD e DDB nas norma de $L^2(\Omega)$ à esquerda e de $H^1(\Omega)$ à direita



Fonte: Elaboração dos autores (2023).

5 Conclusões

Apresentamos um método multiescala descontínuo e não linear para solução numérica de problemas de reação-difusão-convecção. Um operador de difusão artificial não linear é adicionado a uma formulação GD descrita em um cenário de discretização de duas escalas, onde as escalas finas são discretizadas através de funções bolha. O método proposto é eficiente em eliminar as oscilações espúrias que aparecem próximas às camadas limites de problemas com convecção/reação dominantes, conforme apresentado nos experimentos numéricos. Além disso, o esquema numérico apresentou taxas de convergência ótimas nas normas $L^2(\Omega)$ e $H^1(\Omega)$.

O método desenvolvido oferece uma abordagem promissora para resolver problemas de transporte com convecção ou reação dominante. Como trabalhos futuros, destacamos o ajuste correto dos parâmetros \bar{h} e C_R , relacionados à difusão artificial e ao processo iterativo, respectivamente; a inserção de algum tipo de estabilização nas arestas dos elementos; o desenvolvimento de estratégias para redução do custo computacional inerente às formulações descontínuas; a descrição de estratégias para acelerar a convergência do processo iterativo não linear; a análise numérica do método; e a extensão para problemas transientes.

Referências

ARNOLD, D. N.; BREZZI, F.; COCKBURN, B.; MARINI, L. D. Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, [S. l.], v. 39, n. 5,



p. 1749-1779, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1137/S0036142901384162>.

ARRUDA, N. C. B.; ALMEIDA, R. C.; DO CARMO, E. G. D. Discontinuous subgrid formulations for transport problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 199, n. 49, p. 3227-3236, 2010a. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.06.028>.

ARRUDA, N. C. B.; ALMEIDA, R. C.; DO CARMO, E. G. D. Dynamic diffusion formulation for advection dominated transport problems. **Mecánica Computacional**, [S. l.], v. 29, n. 20, p. 2011-2025, 2010b. Disponível em: <http://venus.ceride.gov.ar/ojs/index.php/mc/article/view/3135/3063>. Acesso em: 2 jul. 2024.

BARRENECHEA, G. R.; BURMAN, E.; KARAKATSANI, F. Blending low-order stabilised finite element methods: A positivity-preserving local projection method for the convection–diffusion equation. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 317, p. 1169-1193, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.01.016>.

BROOKS, A. N.; HUGHES, T. J. R. Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 32, n. 1, p. 199-259, 1982. DOI: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(82\)90071-8](https://doi.org/10.1016/0045-7825(82)90071-8).

BURMAN, E.; HANSBO, P. Edge stabilization for Galerkin approximations of convection-diffusion-reaction problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 193, n. 15, p. 1437-1453, 2004. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.032>.

COCKBURN, B.; HOU, S.; SHU, C.-W. TVD Runge–Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws IV: The multidimensional case. **Mathematics of Computation**, [S. l.], v. 54, n. 190, p. 545-581, 1990. Disponível em: <http://www.jstor.org/stable/2008501>. Acesso em: 2 jul. 2024.

COCKBURN, B.; KARNIADAKIS, G. E.; SHU, C.-W. The development of discontinuous Galerkin methods. In: COCKBURN, B.; KARNIADAKIS, G. E.; SHU, C.-W. (ed.). **Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications**. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. [S. l.]: Springer Verlag, 2000. v. 11, p. 3-50. Disponível em: <https://conservancy.umn.edu/server/api/core/bitstreams/45558d35-9d55-4e64-8086-98f1fceb49f/content>. Acesso em: 2 jul. 2024.

FRERICHS, D.; JOHN, V. On a technique for reducing spurious oscillations in DG solutions of convection-diffusion equations. **Applied Mathematics Letters**, [S. l.], v. 129, p. 107969, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aml.2022.107969>.

FRERICHS, D.; JOHN, V. On reducing spurious oscillations in discontinuous Galerkin (DG) methods for steady-state convection-diffusion equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, [S. l.], v. 393, p. 113487, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2021.113487>.

HOUSTON, P.; C. SCHWAB, C.; SULI, E. Discontinuous hp-finite element methods for advection-diffusion-reaction problems. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, [S. l.], v. 39, n. 6, p. 2133-2163, 2002. DOI: <https://doi.org/10.1137/S0036142900374111>.



HUGHES, T. J. R.; FRANCA, L. P.; HULBERT, G. M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The galerkin/least-squares method for advective-diffusive equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 73, n. 2, p. 173-189, 1989. DOI: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(89\)90111-4](https://doi.org/10.1016/0045-7825(89)90111-4).

JOHN, V.; KNOBLOCH, P. On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: Part II - Analysis for P1 and Q1 finite elements. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 197, n. 21, p. 1997-2014, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.12.019>.

OIKAWA, I. Hybridized discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems. **Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics**, [S. l.], v. 31, n. 2, p. 335-354, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13160-014-0137-5>.

PERSSON, P.; PERAIRE, J. Sub-cell shock capturing for discontinuous Galerkin methods. *In*: AIAA AEROSPACE SCIENCES MEETING AND ENHIBIT, 44., 2006, Nevada. **Anais [...]**. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 2012. v. 112, p. 9-12. DOI: <https://doi.org/10.2514/6.2006-112>.

REED, W. H.; HILL, T. R. **Triangular mesh methods for the neutron transport equation**. Tech. Report LA-UR-73-479. Los Alamos: Los Alamos Scientific Laboratory, 1973. Disponível em: <https://www.osti.gov/biblio/4491151>. Acesso em: 2 jul. 2024.

SANTOS, I. P.; ALMEIDA, R. C. A nonlinear subgrid method for advection-diffusion problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [S. l.], v. 196, n. 45, p. 4771-4778, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2007.06.009>.

SANTOS, I. P.; MALTA, Sandra M. C.; VALLI, Andrea M. P.; CATABRIGA, Lucia; ALMEIDA, Regina C. Convergence analysis of a new dynamic diffusion method. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 98, p. 1-9, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2021.06.012>.

VALLI, Andrea. M. P.; ALMEIDA, Regina C.; SANTOS, Isaac P.; CATABRIGA, Lucia; MALTA, Sandra M. C.; COUTINHO, Alvaro L. G. A. A parameter-free dynamic diffusion method for advection-diffusion-reaction problems. **Computers & Mathematics with Applications**, [S. l.], v. 75, n. 1, p. 307-321, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2017.09.020>.

YÜCEL, H.; STOLL, M.; BENNER, P. Discontinuous Galerkin finite element methods with shock-capturing for nonlinear convection dominated models. **Computers & Chemical Engineering**, [S. l.], v. 58, p. 278-287, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.07.011>.

Agradecimentos

Agradecemos ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo, *Campus* Piúma, e à Universidade Federal do Espírito Santo, por meio do Programa de Pós-Graduação em Informática. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de



Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES), código de financiamento 001.

