

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Análise e Simulação de um
Sistema de Equações
Químicas do Tipo
Difusão-Reação**

por

Ulices Zavaleta Calderón

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Doutor em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Mark Thompson
Orientador

Prof. Dr. Álvaro de Bortoli
Co-orientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2003.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Calderón, Ulices Zavaleta

Análise e Simulação de um Sistema de Equações Químicas do Tipo Difusão-Reação / Ulices Zavaleta Calderón.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2003.

117 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2003.

Orientador: Thompson, Mark; Co-orientador: de Bortoli, Álvaro

Tese: Matemática Aplicada
existência, simulação numérica, difusão-reação, shadowing

Análise e Simulação de um Sistema de Equações Químicas do Tipo Difusão-Reação

por

Ulices Zavaleta Calderón

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Mark Thompson

Co-orientador: Prof. Dr. Álvaro de Bortoli

Banca examinadora:

Prof. Dr. José Luiz Boldrini
UNICAMP

Prof. Dr. Marco Antônio Raupp
LNCC

Prof. Dr. Julio Claeysen
UFRGS

Prof. Dr. Leandro Farina
UFRGS

Tese apresentada e aprovada em
28 fevereiro del 2003.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

AGRADECIMENTO

Conteúdo

LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	viii
RESUMO	ix
ABSTRACT	x
1 INTRODUÇÃO	1
2 PRELIMINARIES	9
2.1 Definições e Notações	9
2.2 Imersão de Sobolev	10
2.3 Desigualdades de Poincaré, Young e Gronwall	11
2.4 Semigrupos de Operadores e Sistemas de evolução	12
2.5 Truncamentos	16
2.6 Outros resultados	17
2.7 Equações de Navier-Stokes e vorticidade	19
3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA E EXISTÊNCIA DA SOLUÇÃO	20
3.1 Formulação do problema	20
3.2 Adimensionalização	22
3.3 Existência e unicidade da solução	25
3.4 Existência local	26
4 SOLUÇÃO NUMÉRICA	52
4.1 Discretização	52
4.2 Resultados	54
5 ESTIMATIVAS LOCAIS SEMI-DISCRETIZADAS	61

5.1	Elementos finitos	61
5.1.0.1	Estimativas do erro	64
5.1.1	Aproximação de problemas parabólicos	65
5.2	Formulação variacional	68
5.3	Estimativas locais	68
6	A POSTERIORI SHADOWING FINITO	80
6.1	Erro global e shadowing	80
6.2	Formulação do problema	82
6.3	Shadowing finito a posteriori	97
	BIBLIOGRAFIA	110

Lista de Figuras

Figura 4.1	<i>A figura da esquerda mostra a variação do reagente c_A no processo de difusão-reação para $Re = 500$, $Ze = 5$ e $Da = 100$ e a figura da direita o comportamento de c_B para os mesmos parâmetros. .</i>	55
Figura 4.2	<i>A figura da esquerda mostra a taxa de reação e à da direita a evolução da formação do produto c_P no processo reativo, para $Re = 500$, $Ze = 5$ e $Da = 300$.</i>	56
Figura 4.3	<i>Variação do reagente c_A para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$.</i>	57
Figura 4.4	<i>Variação da concentração c_A para $Re = 1000$, $Ze = 5$ and $Da = 30, 100, 300$.</i>	58
Figura 4.5	<i>À esquerda mostra-se a evolução da formação do produto P, com concentração c_P, para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. Considerando os mesmos valores de Damköhler e Zel'dovich, o gráfico da direita mostra as variações da concentração c_P para $Re = 1000$.</i>	59
Figura 4.6	<i>A Fig. da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. Considerando $Re = 1000$, o grafo da direita mostra essas variações para os mesmos Damköhler e Zel'dovich.</i>	60
Figura 4.7	<i>O gráfico da esquerda mostra a evolução da taxa de reação r para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. À direita apresenta-se as variações de r para $Re = 1000$ e os mesmos números de Damköhler e Zel'dovich.</i>	60

LISTA DE SÍMBOLOS

$\ \hat{\mathbf{v}}\ $	velocidade
Ω	conjunto limitado
$[0, \tau^*]$	intervalo de tempo
τ	paso de tempo
c_A	concentração da substância A
c_B	concentração da substância B
c_P	concentração do produto
T	Temperatura
Re	número de Reynolds
Ze	número de Zeldovich
Da	numero de Damköler
Sc_i	número de Schmidt
He	constante de liberação de calor
ν_A	$\frac{1}{ReSc_A}$
ν_B	$\frac{1}{ReSc_B}$
ν_T	$\frac{1}{RePr}$
α_A	$v_A Da$
α_B	$v_B Da$
α_T	$v_P He Da$
Δ	Operador de Laplace
$U(t,s)$	sistema de evolução
$\{G(t)\}_{t \geq 0}$	semigrupo de operadores
P_h	projeção ortogonal
ν	viscosidade
∇	gradiente
$\mathcal{C}(\Omega)$	espaço de funções con tínuas sobre Ω
$\mathcal{C}(\bar{\Omega})$	espaço de funções con tínuas sobre $\bar{\Omega}$
H^m	espaço de funções mensuráveis quadrado integráveis
$\text{Im } z$	parte imaginaria de z
$\text{Re } z$	parte real de z
\mathbb{X}	espaço $\mathcal{C}(\Omega) \times \mathcal{C}(\Omega) \times \mathcal{C}(\Omega)$
\mathbb{R}	conjunto de números reais
S_h	espaço de elementos finitos

RESUMO

Neste trabalho estudamos um sistema de equações diferenciais parabólicas que modelam um processo de difusão-reação em duas dimensões da mistura molecular e reação química irreversível de um só passo entre duas espécies químicas A e B para formar um produto P . Apresentamos resultados analíticos e computacionais relacionados à existência e unicidade da solução, assim como estimativas do erro local e global utilizando elementos finitos. Para os resultados analíticos usamos a teoria de semigrupos e o princípio do máximo, e a simulação numérica é feita usando diferenças finitas centrais e o esquema simplificado de Ruge-Kutta. As estimativas do erro local para o problema semi-discretizado são estabelecidas usando normas de Sobolev, e para estimar o erro global usamos *shadowing* finito a posteriori.

Os resultados computacionais obtidos mostram que o comportamento da solução está dentro do esperado e concorda com resultados da referências. Assim mesmo as estimativas do erro local e global são obtidas para pequenos intervalos de tempo e assumindo suficiente regularidade sobre a velocidade do fluído no qual realiza-se o processo. Destacamos que a estimativa do erro global usando *shadowing* finito é obtida sob hipóteses a posteriori sobre o operador do problema e o forte controle da velocidade numa vizinhança suficientemente pequena.

ABSTRACT

In this work we study a system of parabolic equations that model a reaction diffusion process in two dimensions. The molecular mixing and chemical reaction considered is single-step, binary and irreversible, between two species A and B to yield a product P . We present analytic and computational results on the existence and uniqueness the solution, and obtain estimates for the local and global error using finite elements. For the analytic results we use the semigroups theory and the maximal principle; and for the numerical simulations central finite differences and the Runge-Kutta simplified schemes. The local error estimates are established using the Sobolev norms, and for the global error we use a posteriori shadowing finite.

1 INTRODUÇÃO

As equações de difusão-reação cobrem uma ampla variedade de modelos físicos em muitos campos das ciências, tais como população genética, enzimas, reatores nucleares, reatores químicos, combustão, astrofísica, movimentação subsônica de gases, etc. (ver por exemplo, Buckmaster e Ludford [6], Ludford [45], Pao [54]). Diversos modelos têm sido propostos para entender a estrutura do espaço-tempo dos fenômenos não lineares originados nas diversas áreas da matemática aplicada, e tem-se desenvolvido diferentes métodos na área de análise aplicada para demonstrar a existência e unicidade da solução dos sistemas de equações diferenciais não lineares que modelam tais fenômenos.

Em geral, as equações de difusão-reação poderiam ser descritas pelo sistema de equações diferenciais parabólicas semi-lineares da forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{A}(x, t, u)u &= f(x, t, u), \quad \text{sobre } \Omega \times]0, \infty[\times \mathbb{R}^n \\ \mathcal{B}(x, t)u &= \alpha g(x, t, u), \quad \text{sobre } \partial\Omega \times]0, \infty[\times \mathbb{R}^n \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad \text{sobre } \Omega \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(x, t, u)u &= \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + \sum_{j=1}^n a_j(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x_j} \\ \mathcal{B}(x, t, u)u &= \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x, t, u) \bar{\eta}_i \frac{\partial u}{\partial x_j} \quad (\text{condição de fronteira de Neumann para } \alpha = 1) \end{aligned}$$

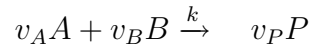
ou

$$\mathcal{B}(x, t, u)u = u \quad (\text{condição de Dirichlet para } \alpha = 0)$$

onde Ω é um domínio no \mathbb{R}^n com fronteira $\partial\Omega$, $\bar{\eta} = (\bar{\eta}_1, \bar{\eta}_2, \dots, \bar{\eta}_n)$ o vetor unitário normal a $\partial\Omega$, $u = (u_1, u_2, \dots, u_m) \in \mathbb{R}^m$ e f uma função cinética de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ em \mathbb{R}^m . A variável u usualmente denota as quantidades tais como densidade de população biológica em ecologia, as concentrações de substâncias em reações químicas ou as concentrações e a temperatura nos processos de difusão-reação, por exemplo. Para

o caso da mistura de fluidos, o sistema (1.1) deve ser acoplado com as equações da conservação da massa e as equações de Navier-Stokes.

Esta tese tem por objetivo apresentar resultados analíticos e computacionais para um sistema de equações de difusão-reação que modela um processo de mistura molecular e reação química irreversível de um só passo entre duas espécies químicas A e B , para obter um produto P . Isto é,



onde v_i , $i \in \{A, B, P\}$ são os coeficientes molares estequiométricos. A reação é considerada de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes, e a taxa da reação específica é, k , é assumida constante e controlada pela cinética de Arrhenius adotando a forma $k = Ze^{-E/RT}$, onde E , R e T são a energia de ativação, a constante universal dos gases e a temperatura absoluta, respectivamente. O sistema modelado tem a forma ([10]),

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial \omega}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0, \quad \Delta \psi = -\omega \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_A}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_A}{\partial x_2} - \frac{1}{Re Sc_A} \Delta c_A = -v_A Da c_A c_B e^{-Ze/T} \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_B}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_B}{\partial x_2} - \frac{1}{Re Sc_B} \Delta c_B = -v_B Da c_A c_B e^{-Ze/T} \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial c_P}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_P}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_P}{\partial x_2} - \frac{1}{Re Sc_P} \Delta c_P = v_P Da c_A c_B e^{-Ze/T} \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial T}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial T}{\partial x_2} - \frac{1}{Re Pr} \Delta T = v_P He Da c_A c_B e^{-Ze/T} \quad (1.6)$$

sobre $\Omega \times [0, \tau^*]$, onde Ω é um domínio em $\mathbb{R}^2 = \{(x_1, x_2) : x_1, x_2 \in \mathbb{R}\}$ com fronteira $\partial\Omega$ e vetor exterior normal unitário $\tilde{\eta} = (\tilde{\eta}_1, \tilde{\eta}_2)$. Do ponto de vista da física e química $c_i(x, t) : \Omega \times [0, \tau^*] \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{A, B, P\}$ representam as concentrações das espécies A , B e P ; $T(x, t) : \Omega \times [0, \tau^*] \rightarrow \mathbb{R}$ a temperatura da mistura e as equações (1.2) correspondem as equações de Navier-Stokes. As constantes Re é o número de Reynolds, Pr o de Prandtl, Ze o de Zel'dovich, Sc_i o de Schmidt, Da o de Damköhler, v_i para $i \in \{A, B, P\}$ os coeficientes estequiométricos e He um parâmetro de liberação de calor. Além disso, o sistema está sujeito as condições

iniciais não negativas

$$c_A(x, 0) = c_{A0}, \quad c_B(x, 0) = c_{B0} \quad T(x, 0) = T_0 \quad \text{sobre } \Omega \quad (1.7)$$

tais que $\sum_{i=A,B,P} c_{i0} = 1$, e as condições de fronteira

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tilde{\eta}} = \frac{\partial T}{\partial \tilde{\eta}} = \frac{\partial c_i}{\partial \tilde{\eta}} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad i \in \{A, B, P\}, \quad j = 1, 2 \quad (1.8)$$

Existe uma ampla literatura apresentando métodos analíticos e numéricos para obter soluções dos diversos modelos propostos, entre estes tem-se as técnicas de comparação, estimativas a priori, condições do tipo Lyapunov, o método de Galerkin, o método de semigrupos, etc. Estes métodos têm sido usados, por exemplo, na teoria de populações biológicas (Mayer-Paape e Lauterbach [46], Cantrel e Cosner [8], Alikakos [2], Mimura e Murray [49], Rothe [63], Levin [42]), neurobiologia (Henry [28]), dinâmica de reatores nucleares (Kastenberg e Chambre [35], Rumble e Kartenburg [64], Leung [41]), reações químicas (Kouachi [38], Fife [21], Smoller [66], Cohen e Alexander [13], Lundford [45], Morgan e Hollis [50]), combustão (Buckmaster e Lundford [6], Willams [76], Ei e Mimura [18], Collet e Xin [14], Manley, Marion e Temam [48], Avrin [4]), movimentação de bactérias por (Yang et. al. [78], Rasleq [60], Hillen e Painter [31]), Malham e Xin [47], Wang e Jiang [74].

Em particular, Amann [3] usando a teoria de semigrupos demonstra que, sob certas condições de regularidade para o operador linear \mathcal{A} e as funções f e g , o problema (1.1) tem uma única solução maximal clássica sobre $[0, \tau_e[$ com τ_e dependendo da condição inicial. Manley [48], utilizando o método de Galerkin, demonstra a existência e unicidade para um sistema de equações que modelam um processo de combustão em presença de química complexa, estabelece a existência de um atrator global e obtém estimativas para sua dimensão. Neste trabalho, utilizando a teoria de semigrupos e o princípio do máximo, demonstraremos que o problema (1.2)-(1.8) também tem uma única solução.

Por outro lado, dada a complexidade dos sistemas matemáticos que modelam o comportamento dos diferentes fenômenos da natureza (o que em geral

torna impossível a obtenção da solução exata), existe a necessidade contínua de desenvolver métodos para obter soluções aproximadas para os diferentes problemas; entre os métodos desenvolvidos tem-se, por exemplo, o método de Rayleigh-Ritz, Kantorovich, dos mínimos quadrados, da colocação, de Galerkin, elementos finitos, etc. O método de elementos finitos, que inicialmente foi desenvolvido para resolver problemas de mecânica ([61], [12]), tem-se convertido numa ferramenta muito utilizada para aproximar a solução de diferentes problemas não lineares, assim como para obter estimativas do erro entre a solução exata e a numérica (obtida mediante métodos computacionais) para problemas parabólicos da forma (1.1) e para o caso em que o operador \mathcal{A} é independente do t , e para funções f com suficiente regularidade ([77], [72], [34], [79], [20]). Tendo em conta que para o problema (1.2)-(1.8) não é possível obter sua solução exata, utilizando a formulação variacional do problema e a teoria elementos finitos, estabelecemos uma estimativa do erro local.

Embora existam métodos numéricos eficientes para a obtenção da solução aproximada de problemas parabólicos não lineares da forma (1.1), dificuldades podem ser encontradas em situações nas quais a evolução do sistema apresenta uma dependência muito grande das condições iniciais (como é o caso das reações químicas), já que pequenas mudanças em qualquer ponto da órbita produzem uma nova órbita, a qual tende a divergir exponencialmente da órbita original. Isto fornece soluções diferentes em pequenos intervalos de tempo, o que origina uma rápida acumulação do erro em tempo global (Hayes [26], Chow e Van Vleck [11], Pilyugin [56]). Independentemente quase todos os métodos numéricos para equações de evolução apresentam problemas de confiabilidade para tempo médio ou grande.

Como uma alternativa para caracterizar os erros globais da solução aproximada de um sistema de evolução tem-se desenvolvido a teoria de *shadowing*, que permite determinar uma trajetória próxima da verdadeira trajetória de um sistema de evolução ([27], [40], [52]). Em particular Ostermann e Palencia [52] utilizam a teoria do *shadowing* finito para obter estimativas do erro para um problema de

valor inicial da forma,

$$y'(t) = A(t)y(t) + f(t) \quad (1.9)$$

$$y(0) = y_0 \quad (1.10)$$

onde $A(t)$ é um operador linear não limitado num espaço de Banach. Seus resultados baseiam-se em certas condições de controle de flutuação em tempo que devem satisfazer o operador $A(t)$. Para o problema (1.2)-(1.8) motivo da tese, usamos o shadowing finito a posteriori para obter uma estimativa do erro global. Larsson e Sanz-Serna [40] utilizando o *shadowing* para obter estimativas do erro das soluções de sistemas de difusão-reação em vizinhanças suficientemente pequenas dos pontos de equilíbrio, utilizando normas nos espaços L^2 e H^1 .

Os primeiros resultados relacionados ao estudo analítico e numérico do sistema de equações (1.2)-(1.6), sujeito às condições iniciais e de fronteira (1.7) e (1.8), respectivamente, é apresentado no capítulo 3 e refere-se à existência e a unicidade da solução. Para isto, em primeiro lugar, considerando o fraco acoplamento do campo de velocidade com as reações e a temperatura, formulamos o sistema como um problema abstrato de valor inicial, da forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{A}(t)\mathbf{y} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}), \quad \text{sobre } \Omega \times]0, \tau^*] \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0, \quad \text{sobre } \Omega \end{aligned} \quad (1.11)$$

onde $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T) : [0, \tau^*] \longrightarrow \mathbb{X}$, $\mathbf{A}(t) = (A_A(t), A_B(t), A_T(t))$ um operador linear sobre $\mathbb{X} = \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ tal que

$$A_i : D_i \longrightarrow \mathbb{X},$$

e $D_i = \{u \in W^{2,p}(\Omega) : \Delta u \in \mathcal{C}(\bar{\Omega}), p > 2, \partial u / \partial \eta = 0\}$ para cada $i = A, B, T$ com $A_i(t) = -\nu_i \Delta + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla$ para $i = A, B, T$; onde $\hat{\mathbf{v}}$ a velocidade do fluido, ν_i são constantes não negativas; e $\mathbf{f}(\mathbf{y}) = (f_A, f_B, f_T)$, com $f_i = \pm \alpha_i c_A c_B T \varphi(T)$ onde $\varphi(T) = e^{-Ze/T}$ e o sinal + corresponde a $i = T$.

Assumindo suficiente regularidade sobre $\hat{\mathbf{v}}$ e utilizando a teoria de semi-grupos ([55], [17], [7]) demonstramos que para cada $t \in [0, \tau^*]$, $\mathbf{A}(t)$ é gerador de um

semigrupo analítico sobre \mathbb{X} . Este fato permite utilizar um resultado de existência e unicidade de sistemas de evolução ([80], [9], [39]) e demonstrar que o problema homogêneo correspondente a (1.11) tem um único sistema de evolução (operador de evolução) $U(t, s)$ para $0 \leq t \leq s \leq \tau^*$.

Tendo em conta a existência e unicidade para o problema homogêneo:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{A}(t)\mathbf{y} &= 0, \quad \text{sobre }]0, \tau^*] \times \Omega \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0, \quad \text{sobre } \Omega, \end{aligned} \tag{1.12}$$

demonstramos que uma solução clássica do problema é uma solução no cone $\mathcal{E} = \{0 \leq c_A \leq 1, 0 \leq c_B \leq 1, T \geq 0\} \subset \mathcal{C}(0, \tau^*, \mathcal{C}(\Omega))$, coincidindo com a única solução *mild* no cone. Esta solução *mild*, é da forma,

$$\begin{aligned} c_A(t) &= U_A(t, 0)c_{A0} - \alpha_A \int_0^t U_A(t, s)c_A(s)c_B(s)\varphi(T(s))ds \\ c_B(t) &= U_B(t, 0)c_{B0} - \alpha_B \int_0^t U_B(t, s)c_A(s)c_B(s)\varphi(T(s))ds \\ T(t) &= U_T(t, 0)T_0 + \alpha_T \int_0^t U_T(t, s)c_A(s)c_B(s)\varphi(T(s))ds \end{aligned} \tag{1.13}$$

Para demonstrar a existência de uma solução deste tipo assumimos maior regularidade da condição inicial, considerando que para este caso $\mathbf{y}(0) \in H^4(\Omega) \times H^4(\Omega) \times H^4(\Omega)$. Mediante isto, usando o método de Galerkin, demonstramos que o sistema de equações equivalente a (1.11) tem uma solução satisfazendo 1.13 em um determinado intervalo de tempo. No caso que $\nu_A = \nu_B = \nu_T$ mostramos que esta solução é global no tempo.

Dado que não é possível obter a solução exata do problema (1.2)-(1.8), para determinar o comportamento das soluções, no capítulo 4, apresentamos algumas simulações computacionais do processo reativo. Os resultados foram obtidos usando o método de diferenças finitas centrais de segunda ordem para a discretização espacial, e o método de Runge-Kutta de três estágios para o passo do tempo. O comportamento da solução é mostrado para alguns valores dos parâmetros do problema, restringindo o processo computacional a um número de iterações que equivale a 2 s no processo de reação. As simulações apresentadas mostram como o consumo

dos reagentes que participam no processo de difusão-reação origina a formação do produto da reação e determina-se que a temperatura apresenta um lento comportamento crescente. Observa-se que nossos resultados sobre o comportamento das concentrações dos reagentes, a formação do produto, a temperatura e a taxa de reação são comparáveis com os obtidos por Chang et.al [10].

Nosso terceiro resultado, apresentado no capítulo 5, refere-se à obtenção de estimativas do erro local para o problema semi-discretizado formulado no espaço de elementos finitos. Se $\{S_h\}_{0 < h < 1}$ é uma família de espaços de dimensão finita de $H^1(\Omega)$, donde cada S_h consiste de funções polinomiais seccionalmente contínuas de grau menor o igual que 1 com respeito à triangulação de $\bar{\Omega}$, a solução aproximada $\tilde{\mathbf{y}}_h(t) = (\tilde{c}_{hA}(t), \tilde{c}_{hB}(t), \tilde{T}_h(t)) \in \mathbf{S}_h = S_h \times S_h \times S_h$ do problema (1.11) é definida como a solução do problema variacional

$$\left\langle \frac{\partial \tilde{\mathbf{y}}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \mathbf{y}, \phi_h \rangle - \nu_i \langle \Delta_h \mathbf{y}, \phi_h \rangle = \langle P_h \mathbf{f}(\mathbf{y}), \phi_h \rangle$$

para todo $\phi_h \in S_h$. Onde \mathbf{y} é a solução exata de (1.11), $P_h : L^2(\Omega) \rightarrow S_h$ é a projeção ortogonal, $\tilde{\mathbf{y}}_h = P_h \mathbf{y}$, $\tilde{c}_{Ah}(0) = \tilde{c}_{Ah_0}$, $\tilde{c}_{Bh}(0) = \tilde{c}_{Bh_0}$ e $\tilde{T}_h(0) = \tilde{T}_{h_0}$, com \tilde{c}_{Ah_0} , \tilde{c}_{Bh_0} e \tilde{T}_{h_0} as projeções de c_{A0} , c_{B0} e T_0 no espaço S_h , respectivamente. Usando estimativas de primeira ordem nas normas de Sobolev e o Lemma de Gronwall, demonstra-se que existe uma constante $\tilde{C} = \tilde{C}(t, \mathbf{y})$ tal que

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\| \leq \tilde{C}h, \quad \text{para todo } t \in [0, \tau^*]. \quad (1.14)$$

Finalmente, o último resultado da análise do problema, é desenvolvido no capítulo 6 e corresponde à análise do erro da discretização plena do problema (1.11). Neste caso, por conveniência e simplicidade, consideramos um problema simplificado de Euler implícito na formulação de elementos finitos. Os resultados obtidos, neste contexto, estão relacionados com a estimativa do erro global usando *shadowing* finito a posteriori. Especificamente, estabelecemos um resultado de *shadowing* via a análise do problema discreto,

$$\zeta_{n+1} = \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n (F(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau)), \quad (1.15)$$

com $n = 0, 1, \dots, N - 1$, $\tau = 1/N$ ($\tau < 1$), h tal que $0 < h < 1$ é parâmetro que corresponde à discretização espacial, e \mathcal{J}_n , F e Θ operadores definidos sobre \mathcal{S}_h .

Especificamente, a equação (1.15) corresponde à equação do erro usando o método de Euler para trás, do problema simplificado (formulado no espaço de elementos finitos \mathcal{S}_h):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{y}_h &= \mathbf{A}_h(t) \mathbf{y}_h + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h) + \mathbf{H}_h(\mathbf{y}) \quad \mathbf{y}_h \in \mathcal{S}_h \\ \mathbf{y}_h(0) &= P_h(\mathbf{y}_0). \end{aligned} \tag{1.16}$$

Estabelecendo algumas hipóteses sobre os operadores \mathbf{A}_h , demonstra-se em primeiro lugar que

$$\|\Theta_{n+1}(h, \tau)\| \leq o(h\tau) + o(\tau^{\alpha+1})$$

Na continuação, definindo os operadores projeção P_n e $Q_n = I - P_n$ sobre o espaço \mathcal{S}_h e assumindo hipóteses apropriadas para os operadores \mathcal{J}_n , P_n e Q_n , formula-se a equação do erro como um problema discreto de valor na fronteira

$$\begin{aligned} \zeta_{n+1} &= \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n (F(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau)) \quad 0 \leq n \leq N - 1 \\ P_0 \zeta_0 &= \xi, \quad \text{e} \quad Q_{N-1} \zeta_{N-1} = \eta. \end{aligned} \tag{1.17}$$

Definindo o conjunto

$$\mathbf{E}_\epsilon = \left\{ \Upsilon = (\zeta_n)_{n=0}^{N-1} \in \mathcal{S}_h^N : \|\Upsilon\|_\infty = \max_n \{\|\zeta_n\|\} \leq \epsilon \right\},$$

usando um Teorema do ponto fixo para conjuntos fechados e segundo as idéias de Ostermann e Palencia [52] e Stuart e Humphries [68] sobre *shadowing*, demonstramos que se $\|\xi\| \leq \epsilon$ e $\|\eta\| \leq \epsilon$ o problema (1.17) tem uma única solução $\Upsilon = (\zeta_n)_{n=0}^{N-1}$ tal que

$$\|\Upsilon\|_\infty \leq \epsilon \left(1 + \frac{\Lambda}{(1 - \mu)} \right),$$

com Λ e μ constantes que dependem de hipóteses a posteriori.

Finalizamos esta introdução lembrando que Smale [65] defende o ponto de vista que a análise numérica é uma área eclética com fundamentos teóricos fracos. Encaramos nosso trabalho nesta tese como uma tentativa de construir estes fundamentos em um exemplo particular.

2 PRELIMINARIES

Neste capítulo estabeleceremos algumas das definições e notações que serão utilizadas nos capítulos seguintes. Além disso, enunciaremos os principais resultados que serão usados, e para sua demonstração indicamos a bibliografia.

2.1 Definições e Notações

Definição 2.1.1. *Sejam $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ e $D_j = \partial/\partial x_j$. Se $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$, com $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ números inteiros não negativos, $D^\alpha u$ (no sentido de distribuições) é definida como*

$$D^\alpha u = D_1^{\alpha_1} \dots D_n^{\alpha_n} u = \frac{\partial^{|\alpha|} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}},$$

onde $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$. Para $\alpha = 0$, $D^0 u = u$.

Definição 2.1.2. *Seja Ω um conjunto aberto e não vazio em \mathbb{R}^n , com $n \geq 1$. Seja $1 \leq p < \infty$ e $m = 1, 2, \dots$*

(i) *O espaço de Lebesgue $L^p(\Omega)$ é o conjunto de classes de equivalência de funções mensuráveis $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\int_\Omega |u(x)|^p dx < \infty$. Com a norma*

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} = \|u\|_p = \left(\int_\Omega |u(x)|^p dx \right)^{1/p},$$

$L^p(\Omega)$ *é um espaço de Banach.*

(ii) *$L^\infty(\Omega)$ é o conjunto de classes de equivalência de funções mensuráveis sobre Ω tais que $u \mapsto |u(x)|$ é essencialmente limitada sobre Ω . Com a norma*

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} = \inf \{M \geq 0 : |u(x)| \leq M \text{ q.s. em } \Omega\}$$

$L^\infty(\Omega)$ *é um espaço de Banach.*

(iii) *O espaço de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$ é o conjunto de todas as funções $u \in L^p(\Omega)$ que tem derivada generalizada até a ordem m tal que*

$$D^\alpha u \in L^p(\Omega) \quad \text{para } |\alpha| \leq m.$$

Para $m = 0$, $W^{0,p}(\Omega) = L^p(\Omega)$; para cada $1 \leq p < \infty$, $W^{m,p}(\Omega)$ é um espaço de Banach com respeito à norma

$$\|u\|_{m,p} = \|u\|_{W^{m,p}(\Omega)} = \left(\sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \int_{\Omega} \|D^{\alpha}u(x)\|_p^p dx \right)^{1/p}.$$

Se $p = \infty$, $W^{m,\infty}(\Omega)$ é um espaço de Banach com respeito à norma

$$\|u\|_{W^{m,\infty}(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq m} \|D^{\alpha}u\|_{L^{\infty}(\Omega)}.$$

Observação 2.1.3. Se $p = 2$, $W^{m,2}(\Omega) = H^m(\Omega)$ é um espaço de Hilbert com o produto escalar

$$(u, v)_{m,p} = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \int_{\Omega} D^{\alpha}u(x)D^{\alpha}v(x)dx.$$

$C^m(\Omega)$ denota o conjunto das funções de valor real (ou complexo) m -vezes continuamente diferenciáveis sobre Ω , e $C^m(\bar{\Omega})$ denota o conjunto das funções de valor real (ou complexo) m -vezes continuamente diferenciáveis sobre $\bar{\Omega}$. $C^0(\Omega) = \mathcal{C}(\Omega)$, em particular, denota o espaço de funções contínuas.

Definição 2.1.4. Seja X um espaço de Banach e $1 \leq p < \infty$. $L^p(a, b; X)$ é o espaço de classes de funções mensuráveis de (a, b) em X com $-\infty \leq a < b \leq +\infty$, tal que $\int_a^b \|u(t)\|_X^p dt < \infty$, o qual é um espaço de Banach com a norma,

$$\|u\|_{L^p(a,b;X)} = \left(\int_a^b \|u(t)\|_X^p dt \right)^{1/p}$$

Se $p = \infty$, $L^{\infty}(a, b; X)$ é o espaço de classes de funções mensuráveis de (a, b) em X tal que $t \mapsto |u(t)|$ é essencialmente limitada.

2.2 Imersão de Sobolev

Se Ω é um domínio limitado no espaço \mathbb{R}^n com fronteira suficientemente regular, $\partial\Omega$, então as imersões $L^2(\Omega) \supseteq W^{1,2} \supseteq W^{2,2} \supset W^{3,2} \dots$ são compactas e para $m - k > n/2$, a imersão

$$W^{m,2}(\Omega) \subseteq \mathcal{C}^k(\bar{\Omega}) \tag{2.1}$$

é contínua (ver Zeidler [82]). Em geral, se Ω é suficientemente regular, tem-se que $W^{m,p}(\Omega)$ é denso em $W^{m-1,p}(\Omega)$, e $H^m(\Omega)$ é denso em $H^{m-1}(\Omega)$. Por outro lado, se Ω é um conjunto aberto no \mathbb{R}^n , então $\mathcal{C}^m(\Omega)$ é denso no espaço $W^{m,p}(\Omega)$ para $1 \leq p < \infty$ (Temam [71]).

A imersão contínua $W^{m,2}(\Omega) \subseteq \mathcal{C}^k(\Omega)$ para $m - k > n/2$ é usada para demonstrar a regularidade de soluções generalizadas u , no sentido que se u pertence ao espaço de Sobolev $W^{m,2}(\Omega)$ para m suficientemente grande, então para $k < m - n/2$ obtém-se $u \in \mathcal{C}^k(\Omega)$, isto é, u tem uma derivada clássica da ordem k . Em particular, no espaço \mathbb{R}^1 , $W^{m,2}(\Omega) \subseteq \mathcal{C}^{m-1}(\Omega)$ para $m = 1, 2, \dots$ e no \mathbb{R}^2 , \mathbb{R}^3 , $W^{m,2}(\Omega) \subseteq \mathcal{C}^{m-2}(\Omega)$ para $m = 2, 3, \dots$. De forma mais geral, tem-se o seguinte Teorema de imersão de Sobolev (ver Agmon [1], Gilbarg e Trudinger [22], Pazy [55], Trebel [73]).

Teorema 2.2.1. (*Imersão de Sobolev*) *Seja Ω um conjunto aberto em \mathbb{R}^n com fronteira suficientemente regular, $\partial\Omega$, então,*

$$i) \ W^{m,p}(\Omega) \subset L^{np/(n-mp)}(\bar{\Omega}) \quad \text{se} \quad mp < n.$$

$$ii) \ W^{m,p}(\Omega) \subset \mathcal{C}^k(\bar{\Omega}) \quad \text{se} \quad 0 \leq k < m - n/p.$$

2.3 Desigualdades de Poincaré, Young e Gronwall

As desigualdades de Poincaré, Young e Gronwall são essenciais na determinação de estimativas a priori nos problemas de evolução.

i) (Desigualdade de Poincaré): Para todo $u \in H_0^1$, existe uma constante $\alpha(\Omega) = \alpha$ tal que

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \leq \alpha \|u\|_{H_0^1}.$$

ii) (Desigualdade de Young): Para todo $a, b, \epsilon > 0$, $1 < p < \infty$ e $q = p/(p-1)$,

$$ab \leq \frac{\epsilon}{p} a^p + \frac{1}{q\epsilon^{q/p}} b^q.$$

iii) (Lema de Gronwall): Sejam g, h, y funções localmente integráveis sobre $[t_0, \infty)$, tais que

$$\frac{dy}{dt} \leq gy + h, \quad t \geq t_0,$$

então,

$$y(t) \leq y(t_0)e^{\int_{t_0}^t g(s)ds} + \int_{t_0}^t h(s)e^{-\int_t^s g(r)dr} ds, \quad t \geq t_0. \quad (2.2)$$

Lema 2.3.1. (Lema uniforme de Gronwall) Sejam g, h e y três funções positivas localmente integráveis sobre $]t_0, \infty[$ com $\frac{dy}{dt}$ localmente integrável sobre $]t_0, \infty[$ e que satisfazem,

$$\frac{dy}{dt} \leq gy + h \quad \text{para } t \geq t_0,$$

$$\int_t^{t+r} g(s)ds \leq a_1, \quad \int_t^{t+r} h(s)ds \leq a_2, \quad \int_t^{t+r} y(s)ds \leq a_3, \quad \text{para } t \geq t_0$$

onde r e a_i para $i = 1, 2, 3$ são constantes positivas. Então

$$y(t+r) \leq \left(\frac{a_3}{r} + a_2\right) e^{a_1} \quad \text{para } t \geq t_0.$$

2.4 Semigrupos de Operadores e Sistemas de evolução

A noção de semigrupo é uma das mais importantes para descrever processos dependentes do tempo em termos da análise funcional. Por exemplo se um processo físico é descrito pela equação

$$u'(t) = Au(t), \quad u(0) = u_0 \quad (2.3)$$

com A o gerador de um semigrupo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ então a solução do problema (2.3) é $u(t) = G(t)u_0$ para todo $u_0 \in D(A)$.

Definição 2.4.1. Um semigrupo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ sobre um espaço de Banach X é uma família de operadores lineares e limitados $G(t) : X \rightarrow X$ para todo $t \geq 0$ tal que,

$$i) \quad G(t+s) = G(t)G(s), \quad t, s \geq 0$$

ii) $G(0) = I$ com I o operador identidade

O gerador de um semigrupo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ é um operador linear $A : D(A) \subset X \longrightarrow X$ tal que

$$Aw = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{G(t)w - w}{t} \quad (2.4)$$

onde $w \in D(A)$ se e somente se o limite (2.4) existe. Um semigrupo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ é fortemente contínuo ou de classe C^0 se e somente se a aplicação $t \mapsto G(t)w$ é contínua sobre $[0, +\infty)$ para todo $w \in X$, isto é,

$$\lim_{t \rightarrow s} G(t)w = G(s)w \quad \text{para todo } w \in X.$$

Em $s = 0$ considera-se o limite pela direita (ver Butzer [7], Dautray e Lions [17]).

Teorema 2.4.2. *Seja X um espaço de Banach e $A : D(A) \subset X \longrightarrow X$ um operador linear fechado tal que $D(A)$ é denso em X . O operador $-A$ gera um semigrupo fortemente contínuo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ sobre X se e somente se existem constantes $M > 0$ e ω tais que*

$$\|(\lambda I - A)^{-n}\| \leq \frac{M}{(\lambda - \omega)^n} \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que $\lambda > \omega$ com $\lambda \in \rho(A)$, ($\rho(A)$ = conjunto resolvente de A).

Definição 2.4.3. *Seja X um espaço de Banach complexo e*

$$\Sigma = \{z \in \mathbb{C} : \varphi_1 < \arg z < \varphi_2, \varphi_1 < 0 < \varphi_2\}.$$

Uma família $\{G(z)\}_{z \in \Sigma}$ de operadores lineares e limitados $G(z) \in L(X, X)$ é um semigrupo analítico se

i) $G(z_1 + z_2) = G(z_1)G(z_2)$ para todo $z_1, z_2 \in \Sigma$;

ii) $G(0) = I$;

iii) $\lim_{z \rightarrow 0} G(z)w = w$ para todo $w \in X$ e $z \in \Sigma$;

iv) $z \mapsto G(z)$ é uma aplicação analítica de Σ em $L(X, X)$.

A restrição de um semigrupo analítico ao eixo real é um semigrupo fortemente contínuo. Com respeito à extensão de um semigrupo de classe C^0 a um semigrupo analítico tem-se o seguinte teorema (ver [17], [55])

Teorema 2.4.4. *Seja $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ um semigrupo fortemente contínuo uniformemente limitado com gerador A no espaço de Banach X . Então as seguintes afirmações são equivalentes:*

1. Se $p = \lambda + i\mu$ e

$$\limsup_{|\mu| \rightarrow \infty} |\mu| \|R(1 + i\mu)\| < \infty.$$

2. Se $\rho(A) = \{p \in \mathbb{C} : (A - pI)^{-1} \text{ existe}\}$, existem constantes $a, b \geq 0$, $M_1 > 0$ tal que

$$\rho(A) \supset \Sigma = \{p : \operatorname{Re} p > a - b |\operatorname{Im} p|\}$$

e para todo $p \in \Sigma$,

$$\|R(p, A)\| \leq \frac{M_1}{1 + |p|}.$$

3. $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ é diferenciável para todo $t > 0$ e $\limsup_{t \rightarrow 0} t \|AG(t)\| < \infty$.

4. $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ é extensível a um semigrupo analítico em um setor Σ contido no eixo real positivo e $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ é uniformemente limitado em um sub(setor) do mesmo tipo.

Se X um espaço de Banach e $A(t) : D(A(t)) \subset X \rightarrow X$ um operador linear, o problema de valor inicial

$$\begin{aligned} \frac{dv(t)}{dt} &= A(t)v(t) \\ v(s) &= v_s, \end{aligned} \tag{2.6}$$

chama-se *problema de evolução*.

Se para cada s fixo (2.6) tem uma única solução $v(\cdot)$, define-se o propagador ou sistema de evolução $U(t, s)$ por,

$$U(t, s)v_s = v(t), \quad t \geq s \tag{2.7}$$

que descreve a evolução do sistema no tempo. Se $A(t) = A$ é independente de t , y A é gerador de um semigrupo $\{G(t)\}_{t \geq 0}$, então,

$$v(t) = G(t - s)v_s, \quad \text{isto é,}$$

$$U(t, s) = G(t - s).$$

Definição 2.4.5. *Seja X um espaço de Banach. Uma família de operadores lineares limitados de dois parâmetros sobre X , $U(s, t)$ $0 \leq s \leq t \leq \tau$, é um sistema de evolução (ou propagador) se,*

$$i) \quad U(s, s) = I$$

$$ii) \quad U(t, s) = U(t, r)U(r, s), \quad \text{para } 0 \leq s \leq r \leq t \leq \tau^*$$

$$iii) \quad (s, t) \mapsto U(s, t) \text{ é fortemente contínua para } 0 \leq s \leq t \leq \tau.$$

Teorema 2.4.6. *Seja X um espaço de Banach, $A(t) : D(A(t)) \subset X \rightarrow X$ um operador linear fechado para cada $t \in [a, b]$, tal que $D(A(t)) = D$ é independente de t e denso em X e seja*

$$\Sigma_\theta = \{\lambda : -\theta < \arg \lambda < \theta, \quad \pi/2 < \theta < \pi, \quad \text{com } \theta \text{ fixo}\}.$$

Se para cada $t \in [0, \tau]$ o conjunto resolvente de $-A(t)$ contém Σ_θ e

$$\|(\lambda I + A(t))^{-1}\| \leq \frac{M}{1 + |\lambda|}, \quad \lambda \in \Sigma_\theta$$

com M uma constante positiva independente de λ e t ; e o operador $A(t)A(s)^{-1}$ é Hölder contínuo em t na topologia uniforme do operador para cada s fixo. Então, a equação de evolução,

$$\frac{du(t)}{dt} + A(t)u(t) = 0, \quad u(s) = u_s, \quad s < t \leq b$$

tem um único sistema de evolução (ou propagador) $U(t, s)$ tal que

$$u(t) = U(t, s)u_s, \quad s < t \leq b.$$

Para a demonstração deste Teorema ver Yosida [80], Ladas [39] e Pazy [55].

Definição 2.4.7. *Seja X um espaço de Banach, $f : [0, \tau^*] \times X \rightarrow X$ e $A(t) : D(A(t)) \subset X \rightarrow X$ um operador linear com domínio $D(A(t)) = D$ independente de t e denso em X ; e considere o problema de evolução,*

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(t)}{\partial t} + A(t)u &= f(t, u(t)) \\ u(s) &= u_s \in D(A(t)) \end{aligned} \quad (2.8)$$

1. u é solução do problema de evolução (2.8), se $u(t)$ é fortemente continuamente diferenciável sobre $[s, \tau^*]$, $u(t) \in D(A(t))$ para cada $t \in [s, \tau^*]$ e $u(t)$ satisfaz o sistema (2.8).

2. u é uma solução ‘mild’ de (2.8), quando u admite a representação integral da forma,

$$u(t) = U(t, s)u_s + \int_s^t U(t, r)f(r, u(r))dr \quad (2.9)$$

onde $U(t, s)u_s = u(t)$ é solução do problema homogêneo

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A(t)u = 0, \quad u(s) = u_s.$$

2.5 Truncamentos

Definição 2.5.1. *Se $u : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, as funções u^+ e u^- são definidas como,*

$$i) \quad u^+ = \max \{u(x), 0\}$$

$$ii) \quad u^- = \max \{-u(x), 0\}$$

Observação 2.5.2. Desde que $u = u^+ - u^-$,

i) Se $u \in L^p(\Omega)$, $1 \leq p \leq \infty$, então $u^+, u^- \in L^p(\Omega)$, e

$$\|u^+\|_{L^p(\Omega)} \leq \|u\|_{L^p(\Omega)}, \quad \|u^-\|_{L^p(\Omega)} \leq \|u\|_{L^p(\Omega)}$$

ii) Se $u \in W^{1,p}(\Omega)$, $1 \leq p \leq \infty$, então $u^+, u^- \in W^{1,p}(\Omega)$ para q.s. todo $x \in \Omega$, e

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_i} = \begin{cases} \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} & \text{se } u(x) > 0 \\ 0, & \text{se } u(x) \leq 0 \end{cases}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\partial u^+}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)} &\leq \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)} \\ \left\| \frac{\partial u^-}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)} &\leq \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^p(\Omega)} \\ \|u^+\|_{W^{1,p}} &\leq \|u\|_{W^{1,p}} \\ \|u^-\|_{W^{1,p}} &\leq \|u\|_{W^{1,p}} \end{aligned}$$

2.6 Outros resultados

Uma das ferramentas mais importantes para a demonstração da existência de soluções positivas é o princípio do máximo, que enunciamos na continuação (pode-se consultar, por exemplo, Pao [54], Protter-Weinberger [58] ou Kinderlehrer-Stampacchia [37]). Também estabelecemos aqui a noção de função Fréchet diferenciável ([83]) e o um Teorema de ponto fixo para conjuntos fechados ([68]).

Teorema 2.6.1. (*Princípio do máximo*) *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um domínio limitado com fronteira $\partial\Omega$ e L o operador uniformemente elíptico $Lu = \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x,t) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{j=1}^n b_j(x,t) \frac{\partial u}{\partial x_j}$. Se $u \in C^1(0, \tau^*, C^2(\Omega))$ tal que*

$$\frac{\partial u}{\partial t} - Lu + cu \geq 0 \quad \text{sobre } \Omega \times]0, \tau^*] \quad (2.10)$$

onde $c \equiv c(x,t)$ é uma função limitada sobre $\Omega \times]0, \tau^]$. Se $c(x,t) \geq 0$ e u assume um valor mínimo $m_0 \leq 0$ em algum ponto $(x,t) \in \Omega \times]0, \tau^*]$, então $u(x,t) = m_0$ para todo $(x,t) \in \Omega \times]0, \tau^*]$. Se $\partial\Omega$ tem a propriedade da esfera interior e u alcança um valor mínimo em algum ponto $(t_0, x_0) \in \partial\Omega \times]0, \tau^*]$, então se u não é identicamente constante*

$$\frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} u|_{(t_0, x_0)} < 0.$$

Definição 2.6.2. *Sejam E, F espaços de Banach, $\Omega \subset E$ um conjunto aberto, $x \in \Omega$. Uma aplicação $f : \Omega \longrightarrow E$ é F -diferenciável em x , se existe um aplicação linear contínua $\varphi : E \longrightarrow F$ e uma aplicação ψ definida para todo h suficientemente pequeno em E e com valores em F tal que $\lim_{h \rightarrow 0} \psi(h) = 0$, e tal que*

$$f(x+h) - f(x) = \varphi(h) + \|h\| \psi(h)$$

Observação 2.6.3. Sobre as funções F -diferenciáveis (ou Fréchet diferenciáveis) temos as seguintes observações:

1. Se f é F -diferenciável em x para todo $x \in \Omega$, então f é F -diferenciável em Ω e $Df = f' : \Omega \longrightarrow L(E, F)$
2. Se Ω é um conjunto aberto em E e $f : \Omega \longrightarrow F_1 \times F_2 \times \cdots \times F_m$ tal que $f = (f_1, f_2, \dots, f_m)$, então f é F -diferenciável em $x \in \Omega$ se e somente se f_i é F -diferenciável em x para cada $i = 1, 2, \dots, m$. Se este é o caso,

$$f'(x) = (f'_1(x), \dots, f'_m(x))$$

3. $f'' = D^2 f : \Omega \longrightarrow L(E, L(E, F)) \cong L(E, E; F)$

Observação 2.6.4. (Fórmula de Taylor). Sejam E, F espaços de Banach, um conjunto aberto e $f : \Omega \longrightarrow F$ de classe C^p . Sejam $x \in \Omega$ e $y \in \Omega$ tal que o segmento $x + ty$, para $0 \leq t \leq 1$, está contido em Ω . Se $h^k = (h, h, \dots, h)$, então

$$f(x+h) = f(x) + \frac{f'(x)h}{1!} + \cdots + \frac{f^{(p-1)}(x)h^{p-1}}{(p-1)!} + R_p$$

onde

$$R_p = \int_0^1 \frac{(1-r)^{p-1}}{(p-1)!} f^{(p)}(x+rh)h^p dr$$

Teorema 2.6.5. (Teorema da aplicação contração) *Seja X um espaço de Banach, $B \subset X$ um conjunto fechado e $f : B \longrightarrow B$. Se existe uma constante $0 < \alpha < 1$ tal que*

$$\|f(u) - f(v)\| \leq \alpha \|u - v\|, \quad \text{para todo } u, v \in B,$$

então f tem um único ponto fixo $u \in B$ tal que $f(u) = u$.

2.7 Equações de Navier-Stokes e vorticidade

Considerando um conjunto simplesmente conexo $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ com fronteira $\partial\Omega$, o movimento de um fluido newtoneano, viscoso e incompressível é governado pelas equações de Navier-Stokes,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \nu \Delta \mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{f}, \quad \text{em } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \text{em } \Omega \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade do escoamento, p a pressão, ν a viscosidade do fluido e \mathbf{f} as forças externas. As equações (2.11) deve-se adicionar condições iniciais e de fronteira. Em duas dimensões as equações (2.11) podem ser formuladas na forma da função de corrente-vorticidade (ver Quarteroni [59] e Glowinski [24]) introduzindo a chamada função de corrente. Se $\mathbf{v} \in L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$, então existe $\psi \in H^1(\Omega)$ tal que

$$\mathbf{v} = \mathbf{curl} \psi = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right) \quad (2.12)$$

e a vorticidade associada a $\mathbf{v} \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)$ é o campo escalar $\omega \in L^2(\Omega)$ tal que

$$\omega = \mathbf{curl} \mathbf{v} = \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2}. \quad (2.13)$$

Das equações (2.12)-(2.13) obtém-se que a Eq. (2.11) é equivalente a

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right) \cdot \nabla \omega - \nu \Delta \omega = 0, \quad (2.14)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (2.15)$$

As condições de fronteira que acompanham as equações (2.14)-(2.15) são,

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \bar{\eta}} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega$$

que equivale a $\mathbf{v} = 0$ sobre $\partial\Omega$. Introduzindo as notações de função de corrente,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = -v_2, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x_2} = v_1,$$

o sistema (2.14)-(2.15) fica na forma

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \omega - \nu \Delta \omega = 0, \quad \Delta \psi = -\omega$$

onde $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$. Para mais detalhes sobre a existência da solução e aproximação ver por exemplo [43], [23], [75], [57]

3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA E EXISTÊNCIA DA SOLUÇÃO

3.1 Formulação do problema

Muitos problemas na engenharia são modelados por equações do tipo difusão-convecção-reação com um termo fonte. Em particular, a mistura de partículas através de campos de escoamentos turbulentos ou naturais é um dos problemas mais relevantes da mecânica dos fluidos; neste tipo de processos, a faixa na qual as partículas são transportadas e misturadas pelo movimento do fluido é muito diversa. O estudo analítico ou numérico deste tipo de escoamentos incluindo mistura molecular e reação química torna-se geralmente muito complexo, pois o movimento do fluido produz incremento da mistura, o qual pode originar que a reação total aconteça com muita rapidez, com a liberação de calor, sendo que as mudanças da massa específica e pressão originadas pela reação afetam significativamente a mistura (ver Riley et al. [62] e Moser e Rogers [51]).

Para o caso bi-dimensional, o campo de fluxo, a difusão molecular e o processo das reações químicas satisfazem um sistema de equações da forma,

$$\rho\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{v}}\right) - \nu \Delta \hat{\mathbf{v}} + \nabla p = \mathbf{f} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.2)$$

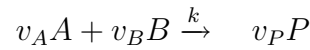
$$\rho c_\nu \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) T\right) - \kappa \Delta T = \Phi \quad (3.3)$$

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_i\right) - D_i \Delta c_i = h_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.4)$$

onde se assume que o fluxo é incompressível; $\hat{\mathbf{v}} = (v_1, v_2)$ é o campo de velocidades, T a temperatura, c_i a fração de massa da i -ésima espécie química, Δ o operador de Laplace, ∇ o gradiente, ρ a massa específica, c_ν a constante de calor específico a volume constante, \mathbf{f} uma força externa, Φ uma função de dissipação, h_i a taxa das reações químicas produzidas por c_i , ν o coeficiente de viscosidade, κ o coeficiente

de difusividade térmica, D_i o coeficiente de difusão dos reagentes e p a pressão cinemática.

Dado que estamos procurando uma aproximação suficientemente realista do fenômeno da mistura molecular, estudaremos o modelo considerado por Chang et al. [10] que corresponde a um processo irreversível de um só passo entre duas espécies químicas A e B, para obter um produto P, ou seja,



onde v_i , $i \in \{A, B, P\}$ são os coeficientes molares estequiométricos. A taxa total de reação é considerada de primeira ordem com respeito a cada um dos reagentes, e a taxa constante da reação específica é controlada pela cinética de Arrhenius, e tem a forma:

$$k = Z e^{-E/RT},$$

onde Z é um fator de frequência, E a energia de ativação total, R a constante universal de gases e T temperatura absoluta. Para o problema que estudaremos, as funções Φ e h_i tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Phi &= q v_P c_A c_B Z e^{-E/RT}, \\ h_i &= \pm v_i Z c_A c_B e^{-E/RT}, \quad i \in \{A, B, P\} \end{aligned}$$

onde q é a liberação do calor por unidade de volume; o sinal mais, “+”, é para $i = P$, e o sinal menos, “-”, é para $i \in \{A, B\}$. Tendo isto em conta, o sistema de equações assume a forma:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{v}} - \nu \Delta \hat{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.6)$$

$$c_\nu \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T \right) - \kappa \Delta T = v_P q c_A c_B Z e^{-E/RT} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_i - \nu_i \Delta c_i = \pm v_i c_A c_B Z e^{-E/RT} \quad (3.8)$$

que corresponde a um modelo de mistura e reação em que os reagentes mesclam-se num reator Ω adiabaticamente isolado e impenetrável ao fluxo de fluidos. Em

consequência, as condições de fronteira associadas ao problema (3.5)-(3.8) são:

$$\hat{v} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \tilde{\eta}} = \frac{\partial c_i}{\partial \tilde{\eta}} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \quad (3.9)$$

onde $\tilde{\eta}$ denota o vetor unitário normal a $\partial\Omega$. Além disso, as equações (3.5)-(3.8) são complementadas com as condições iniciais,

$$\hat{v}(x, 0) = \hat{v}_0(x), \quad T(x, 0) = T_0(x) \quad c_i(x, 0) = c_{i,0}(x), \quad \text{sobre } \Omega. \quad (3.10)$$

onde

$$T(x, 0) \geq 0, \quad c_{i,0} \geq 0, \quad \sum_{i \in \{A, B, P\}} c_{i,0}(x) = 1 \quad (3.11)$$

3.2 Adimensionalização

Sejam L^*, U^*, c_i^*, T^* os valores característicos para o comprimento, velocidade, concentração e temperatura, respectivamente, então as quantidades adimensionais são definidas por:

$$x'_i = \frac{x_i}{L^*}, \quad t' = \frac{tU^*}{L^*}, \quad v'_i = \frac{v_i}{U^*}, \quad T' = \frac{T}{T^*}, \quad c'_j = \frac{c_j}{c^*}, \quad p' = \frac{L^*p}{U^{*2}}$$

onde $i = 1, 2$, $\hat{v} = (v_1, v_2)$, $x = (x_1, x_2)$, $j = A, B, P$. Substituindo essas quantidades no sistema (3.5)-(3.8) obtém-se um sistema adimensional de equações para o processo de mistura-reação. Resulta a:

- Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot \hat{v} = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = 0$$

Fazendo $v_1 = v'_1 U^*$, $v_2 = v'_2 U^*$, $x_1 = x'_1 L^*$ e $x_2 = x'_2 L^*$ tem-se que

$$\frac{\partial(v'_1 U^*)}{\partial(x'_1 L^*)} + \frac{\partial(v'_2 U^*)}{\partial(x'_2 L^*)} = 0$$

$$\frac{U^*}{L^*} \frac{\partial v'_1}{\partial x'_1} + \frac{U^*}{L^*} \frac{\partial v'_2}{\partial x'_2} = 0$$

Portanto,

$$\frac{\partial v'_1}{\partial x'_1} + \frac{\partial v'_2}{\partial x'_2} = 0. \quad (3.12)$$

- Equação da quantidade de movimento (3.5):

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{v}} - \nu \Delta \hat{\mathbf{v}} + \nabla p = 0$$

Fazendo

$$v_1 = v'_1 U^*, v_2 = v'_2 U^*, x_1 = x'_1 L^*, x_2 = x'_2 L^*, t = \frac{t' L^*}{U^*} \text{ e } p = \frac{p' U^{*2}}{L^*},$$

e denotando $\mathbf{v}' = (v'_1, v'_2)$ temos

$$\frac{\partial(\mathbf{v}' U^*)}{\partial(t' L^*/U^*)} + (\mathbf{v}' U^* \cdot \nabla) \mathbf{v}' U^* - \nu \Delta(\mathbf{v}' U^*) + \frac{U^{*2}}{L^*} \nabla p' = 0,$$

e então

$$\frac{U^{*2}}{L^*} \frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial t'} + \frac{U^{*2}}{L^*} (\mathbf{v}' \cdot \nabla) \mathbf{v}' - \frac{\nu U^*}{L^{*2}} \Delta \mathbf{v}' + \frac{U^{*2}}{L^*} \nabla p' = 0.$$

Multiplicando ambos membros por L^*/U^{*2} obtém-se que

$$\frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) \mathbf{v}' - \frac{\nu}{U^* L^*} \Delta \mathbf{v}' + \nabla p' = 0$$

Portanto segue-se que,

$$\frac{\partial \mathbf{v}'}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) \mathbf{v}' - \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{v}' + \nabla p' = 0 \quad (3.13)$$

onde $Re = \frac{U^* L^*}{\nu}$ que corresponde ao número de Reynolds.

- Equação da energia (3.7):

$$c_\nu \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) T \right) - \kappa \Delta T = v_P q c_A c_B Z e^{-E/RT}$$

Fazendo as substituições correspondentes, temos que

$$c_\nu \left(\frac{\partial(T' T^*)}{\partial(t' L^*/U^*)} + (\mathbf{v}' U^* \cdot \nabla) T' T^* \right) - \kappa \Delta(T' T^*) = v_P q c'_A c^* c'_B c^* Z e^{-E/RT' T^*}$$

de onde

$$c_\nu \left(\frac{U^* T^*}{L^*} \frac{\partial T'}{\partial t'} + \frac{U^* T^*}{L^*} (\mathbf{v}' \cdot \nabla) T' \right) - \frac{\kappa T^*}{L^{*2}} \Delta T' = v_P q c'_A c^* c'_B c^* Z e^{-E/RT' T^*},$$

e multiplicando ambos membros por $L^*/U^* T^*$ tem-se que

$$c_\nu \left(\frac{\partial T'}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) T' \right) - \frac{\kappa}{U^* L^*} \Delta T' = \frac{L^*}{U^* T^*} v_P q c'_A c^* c'_B c^* Z e^{-E/RT' T^*}$$

De onde

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) T' - \frac{\kappa}{U^* L^*} \Delta T' = v_P \frac{qc^*}{c_\nu T^*} \frac{Zc^*}{U^*/L^*} c'_A c'_B e^{-E/RT'T^*}$$

Desta forma,

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) T' - \frac{1}{RePr} \Delta T' = v_P He Da c'_A c'_B e^{-Z_e/T'} \quad (3.14)$$

onde

$$Re = \frac{U^* L^*}{\nu}, \quad Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \quad He = \frac{qc^*}{c_\nu T^*}, \quad Da = \frac{Zc^*}{U^*/L^*}$$

- Equações da reação-advectação (3.8):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_i - D_i \Delta c_i = \pm v_i c_A c_B Z e^{-E/RT}$$

Procedendo de forma análoga aos casos anteriores tem-se que:

$$\frac{U^* c^*}{L^*} \frac{\partial c'_i}{\partial t'} + \frac{c^* U^*}{L^*} (\mathbf{v}' \cdot \nabla) c'_i - \frac{D_i c^*}{L^{*2}} \Delta c'_i = \pm v_i c^{*2} c'_A c'_B Z e^{-E/RT'T^*},$$

e multiplicando ambos membros por L^*/U^*c^* :

$$\frac{\partial c'_i}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) c'_i - \frac{D_i}{U^* L^*} \Delta c'_i = \pm v_i \frac{L^*}{U^* c^*} c^{*2} c'_A c'_B Z e^{-E/RT'T^*}$$

Assim,

$$\frac{\partial c'_i}{\partial t'} + (\mathbf{v}' \cdot \nabla) c'_i - \frac{1}{ReSc_i} \Delta c'_i = \pm v_i Da c'_A c'_B e^{-Z_e/T'} \quad (3.15)$$

onde

$$Re = \frac{U^* L^*}{\nu}, \quad Sc_i = \frac{\nu}{D_i}$$

Em conseqüência, o sistema de equações que governa o processo de difusão-reação tem a forma adimensional seguinte:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{v}} - \frac{1}{Re} \Delta \hat{\mathbf{v}} + \nabla p = 0, \quad (3.16)$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T - \frac{1}{RePr} \Delta T = v_P He Da c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_i - \frac{1}{ReSc_i} \Delta c_i = \pm v_i Da c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.19)$$

onde

$$ReSc_i \equiv \frac{U^*L^*}{D_i}; \quad RePr \equiv \frac{U^*L^*}{D_T}; \quad Da \equiv \frac{Zc^*}{U^*/L^*}; \quad Ze = \frac{E}{RT^*}; \quad He \equiv \frac{qc^*}{c_\nu T^*}$$

Da é o número de Damköhler, Ze o de Zel'dovich e He um parâmetro representativo da liberação do calor.

O sistema de equações (3.16)-(3.19) está sujeito às seguintes condições de fronteira:

$$\hat{\mathbf{v}} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \tilde{\boldsymbol{\eta}}} = \frac{\partial c_i}{\partial \tilde{\boldsymbol{\eta}}} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \quad (3.20)$$

onde $\tilde{\boldsymbol{\eta}}$ é o vetor unitário normal à $\partial\Omega$; e às condições iniciais não negativas

$$\hat{\mathbf{v}}(x, 0) = \mathbf{v}_0, \quad c_i(x, 0) = c_{i0}, \quad T(x, 0) = T_0. \quad (3.21)$$

3.3 Existência e unicidade da solução

No sistema (3.16)-(3.21), observa-se que o campo de velocidade é desenvolvido independentemente das concentrações dos reagentes e a temperatura, o que implica que a velocidade $\hat{\mathbf{v}} = (v_1, v_2)$ pode ser obtida independentemente das equações da concentração e da temperatura (ver por exemplo Lions [43]). Para o problema em estudo assumiremos a existência de $\hat{\mathbf{v}}$ com suficiente regularidade sem especificar as condições iniciais sob as quais isto é satisfeito.

Observação 3.3.1. Para a demonstração da existência e unicidade da solução assumiremos que para cada $t \in [0, \tau^*]$ a velocidade $\hat{\mathbf{v}}$, é uma função conhecida, limitada e Hölder contínua em t . Isto é, existem constantes $M > 0$ e $0 < \alpha \leq 1$ tal que

$$\|\hat{\mathbf{v}}(t) - \hat{\mathbf{v}}(s)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M |t - s|^\alpha \quad \text{para todo } s, t \in [0, \tau^*]$$

Considerando Ω um conjunto aberto e limitado em \mathbb{R}^n com fronteira $\partial\Omega$, suficientemente regular e normal exterior unitária $\tilde{\boldsymbol{\eta}}$, o problema em estudo fica

formulado da seguinte maneira:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_A - \frac{1}{ReSc_A} \Delta c_A = -v_A Da c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_B - \frac{1}{ReSc_B} \Delta c_B = -v_B Da c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) T - \frac{1}{RePr} \Delta T = v_P He Da c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.24)$$

onde $c_i = c_i(x, t) : \Omega \times [0, \tau^*] \longrightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{A, B\}$ representam as concentrações dos reagentes na reação de um só passo e $T = T(x, t) : \Omega \times [0, \tau^*] \longrightarrow \mathbb{R}$ a temperatura da mistura. Além disso, o sistema está sujeito as condições iniciais

$$c_A(x, 0) = c_{A0}, \quad c_B(x, 0) = c_{B0} \quad T(x, 0) = T_0 \quad \text{sobre } \Omega \quad (3.25)$$

e às condições de fronteira

$$\frac{\partial T}{\partial \tilde{\eta}} = 0 = \frac{\partial c_i}{\partial \tilde{\eta}} \quad \text{sobre } \partial\Omega \times [0, \tau^*], \quad i = A, B \quad (3.26)$$

3.4 Existência local

Para demonstrar a existência da solução, em primeiro lugar formularemos o sistema (3.22)-(3.26) como um sistema abstrato de primeira ordem sobre o espaço de Banach $\mathbb{X} = \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega}) \times \mathcal{C}(\bar{\Omega})$. As constantes não negativas $v_A Da$, $v_B Da$ e $v_P He Da$ serão denotadas, respectivamente, por α_A , α_B e α_T ; também usaremos a notação $\nu_A = 1/ReSc_A$, $\nu_B = 1/ReSc_B$ e $\nu_T = 1/RePr$.

Para cada $t \in [0, \tau^*]$ defina o operador linear

$$\mathbf{A}(t) : D(\mathbf{A}(t)) = D(A_A(t)) \times D(A_B(t)) \times D(A_T(t)) \subset \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{X}_\eta,$$

tal que

$$\mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) = (A_1(t)\mathbf{y}(t), A_2(t)\mathbf{y}(t), A_3(t)\mathbf{y}(t))$$

com,

$$\begin{aligned}
A_A(t) &= -\nu_A \Delta c_A + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_A \\
A_B(t) &= -\nu_B \Delta c_B + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_B \\
A_T(t) &= -\nu_T \Delta T + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) T \\
D(A_i(t)) &= \left\{ u \in W^{2,p}(\Omega) \text{ para todo } p > 1 : \frac{\partial u}{\partial \bar{\eta}} = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \right\}
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Então, o sistema (3.22)-(3.26) é equivalente a

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) &= f(\mathbf{y}(t)), \quad 0 < t < \tau^* \\
\mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \in \mathbb{X}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Onde $\mathbf{y} : [0, \tau^*] \longrightarrow \mathbb{X}$, $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 = (c_{A0}, c_{B0}, T_0)$ e $f : \mathbb{X} \longrightarrow \mathbb{X}$ são tais que

$$\begin{aligned}
\mathbf{y}(t) &= (c_A(t), c_B(t), T(t)) \\
\frac{d\mathbf{y}}{dt} &= \left(\frac{\partial c_A}{\partial t}, \frac{\partial c_B}{\partial t}, \frac{\partial T}{\partial t} \right) \\
f(\mathbf{y}(t)) &= (-\alpha_A c_A(t) c_B(t) \varphi(T(t)), -\alpha_B c_A(t) c_B(t) \varphi(T(t)), \alpha_T c_A(t) c_B(t) \varphi(T(t)))
\end{aligned}$$

com $\varphi(T) = e^{-Ze/T(t)}$

O sistema (3.28) é um problema de evolução e para determinar a existência da solução utilizaremos os resultados de Yosida-Tanabe. Para isso, em primeiro lugar demonstra-se que o operador $A_i(t)$ para cada $i = 1, 2, 3$ é gerador de um semigrupo analítico (ver Stewart [67], Kato [36], Yosida [80] e Pazy [55]).

Teorema 3.4.1. *Seja $2 \leq p < \infty$, Ω um domínio limitado em \mathbb{R}^n , $n = 2$, com fronteira suave $\partial\Omega$ e considere o operador $Z_p(t) : D(Z_p(t)) \subset L^p(\Omega) \longrightarrow L^p(\Omega)$ tal que*

$$Z_p(t)u = -\nu \Delta u + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla)u,$$

com $D(Z_p(t)) = \{u \in W^{2,p}(\Omega) : \partial u / \partial \bar{\eta} = 0 \text{ sobre } \partial\Omega\}$, então $-Z_p(t)$ é gerador de um semigrupo analítico sobre $L^p(\Omega)$ para cada $t \in [0, \tau^*]$ fixo.

Demonstração. Sejam $u \in D(A_p(t))$, $\hat{\mathbf{v}} = (v_1, v_2)$, $q \in \mathbb{R}$ tal que $1/p + 1/q = 1$ e $\langle u, u^* \rangle$ denota a relação de dualidade entre os elementos $u \in L^p(\Omega)$ e $u^* \in L^q(\Omega)$. Então, para $u \in D(Z_p(t))$, $u^* = |u|^{p-2} \bar{u} \in L^q(\Omega)$ e $\langle u, u^* \rangle = \|u\|_p^p$.

Tendo em conta que,

$$\begin{aligned}\langle Z_p(t)u, u^* \rangle &= \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla))u, u^* \rangle \\ &= \langle -\nu\Delta u, u^* \rangle + \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla)u, u^* \rangle,\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} |u|^{p-2} = \frac{1}{2}(p-2) |u|^{p-4} \left(\bar{u} \frac{\partial u}{\partial x_k} + u \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_k} \right)$$

e denotando

$$|u|^{(p-4)/2} \bar{u} \left(\frac{\partial u}{\partial x_k} \right) = \alpha_k + i\beta_k, \quad |\alpha|^2 = \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \alpha_k^2 \quad \text{e} \quad |\beta|^2 = \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \beta_k^2,$$

utilizando integração por partes tem-se que,

$$\begin{aligned}\langle -\nu\Delta u, u^* \rangle &= \nu \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{u} |u|^{p-2}) dx \\ &= \nu \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \left(|u|^{p-2} \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_k} + \bar{u} \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial |u|^{p-2}}{\partial x_k} \right) \\ &= \nu \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 ((p-1)\alpha_k^2 + \beta_k^2 + i(p-2)\alpha_k\beta_k) dx \\ &= \nu \left((p-1)\alpha^2 + \beta^2 + i(p-2) \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \alpha_k\beta_k dx \right)\end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\operatorname{Re} \langle -\nu\Delta u, u^* \rangle = \nu ((p-1)\alpha^2 + \beta^2) \quad (3.29)$$

$$\operatorname{Im} \langle -\nu\Delta u, u^* \rangle = \nu \left((p-2) \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 \alpha_k\beta_k dx \right) \quad (3.30)$$

Também,

$$\begin{aligned}\langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla)u, u^* \rangle &= \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k \frac{\partial u}{\partial x_k} |u|^{p-2} \bar{u} dx \\ &= \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k |u|^{p/2} |u|^{(p-4)/2} \bar{u} \frac{\partial u}{\partial x_k} dx \\ &= \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k |u|^{p/2} (\alpha_k + i\beta_k) dx.\end{aligned}$$

Então,

$$\operatorname{Re} \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) u, u^* \rangle = \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k |u|^{p/2} \alpha_k dx \quad (3.31)$$

$$\operatorname{Im} \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) u, u^* \rangle = \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k |u|^{p/2} \beta_k dx \quad (3.32)$$

Agora, observamos que

$$\begin{aligned} |\langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) u, u^* \rangle| &= \left| \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 v_k |u|^{p/2} (\alpha_k + i\beta_k) dx \right| \\ &\leq \int_{\Omega} \sum_{k=1}^2 |v_k| |u|^{p/2} |\alpha_k + i\beta_k| dx \\ &\leq \sum_{k=1}^2 \|v_k\|_{\infty} \int_{\Omega} |\alpha_k + i\beta_k| |u|^{p/2} dx \\ &\leq \sum_{k=1}^2 \|v_k\|_{\infty} \int_{\Omega} |\alpha_k + i\beta_k|^2 |u|^{p/2} dx \\ &\leq \epsilon \sum_{k=1}^2 \int_{\Omega} \left(\frac{\nu}{2\epsilon} (|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2) + \frac{\epsilon}{2\nu} |u|^p \right) dx, \quad \epsilon = \max_{k=1,2} \{\|v_k\|_{\infty}\} \\ &= \frac{\nu}{2} \left(\sum_{k=1}^2 \int_{\Omega} |\alpha_k|^2 dx + \sum_{k=1}^2 \int_{\Omega} |\beta_k|^2 dx \right) + \frac{\epsilon^2}{\nu} \sum_{k=1}^2 \int_{\Omega} |u|^p dx \\ &= \frac{\nu}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) + \mu' \langle u, u^* \rangle, \quad \text{onde } \mu' = 2\epsilon^2/\nu, \quad \langle u, u^* \rangle = \|u\|_{0,p}^p \end{aligned}$$

Segue-se, de (3.29) e (3.31) que,

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \langle Z_p(t)u, u^* \rangle &= \operatorname{Re} \langle (-\nu\Delta + (v \cdot \nabla)) u, u^* \rangle \\ &= \operatorname{Re} \langle -\nu\Delta u, u^* \rangle + \operatorname{Re} \langle (v \cdot \nabla) u, u^* \rangle \\ &\geq \nu ((p-1)|\alpha|^2 + |\beta|^2) - \frac{\nu}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) - \mu' \langle u, u^* \rangle \\ &= \nu(p-3/2)|\alpha|^2 + \frac{1}{2}|\beta|^2 - \mu' \langle u, u^* \rangle \end{aligned}$$

e de (3.30) e (3.32) que

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \langle Z_p(t)u, u^* \rangle &= \operatorname{Im} \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla)) u, u^* \rangle \\ &= \operatorname{Im} \langle -\nu\Delta u, u^* \rangle + \operatorname{Im} \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) u, u^* \rangle \\ &\leq \frac{\nu}{2} [|p-2| (|\alpha|^2 + |\beta|^2) + |\alpha|^2 + |\beta|^2] + \mu' \langle u, u^* \rangle, \end{aligned}$$

o que é equivalente a,

$$\operatorname{Re} \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu') u, u^* \rangle \geq \nu(p - 3/2) |\alpha|^2 + \frac{1}{2} |\beta|^2 \geq 0 \quad (3.33)$$

e

$$\operatorname{Im} \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - i\mu') u, u^* \rangle \leq \frac{(p-1)}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2). \quad (3.34)$$

Então, de (3.33), para todo $\lambda > 0$ e $u \in D(Z_p(t))$:

$$\lambda \|u\|_{0,p} \leq \|(\lambda I - \nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu' I)\|_{0,p} \quad \text{para todo } p \geq 2 \quad (3.35)$$

Como $\lambda I - \nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu' I$ é bijetiva, utilizando (3.35) tem-se que para todo $\lambda > 0$,

$$\left\| (\lambda I - \nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu' I)^{-1} \right\|_{0,p} \leq \frac{1}{\lambda} \quad (3.36)$$

Portanto, pelo Teorema de Hille-Yosida, o operador $\nu\Delta - (v \cdot \nabla) - \mu' I$ é gerador de um semigrupo de contração sob $L^p(\Omega)$ para $2 \leq p < \infty$.

Agora demonstraremos que $\nu\Delta - (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - (\mu' I)$ é extensível a um semigrupo analítico. Levando em conta (3.33) e (3.34) e, visto que,

$$\begin{aligned} \frac{|\operatorname{Im} \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu' I(1-i))u, u^* \rangle|}{|\operatorname{Re} \langle (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu'(1-i)I)u, u^* \rangle|} &\leq \frac{(p-1)/2 (|\alpha|^2 + |\beta|^2)}{(p-3/2) |\alpha|^2 + 1/2 |\beta|^2} \\ &\leq (p-1) \end{aligned}$$

então a imagem numérica $S(-Z_p(t) - \mu'(1-i)I)$ de $\nu\Delta - (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - \mu'(1-i)I$ é tal que

$$S(-Z_p(t) - \mu'(1-i)I) \subset \{\lambda : |\arg \lambda| > \pi - \theta_1\}$$

onde $\theta_1 = \arctan(2p-1)$, $0 < \theta_1 < \pi/2$. Fazendo,

$$\sum_{\theta} = \{\lambda : |\arg \lambda| < \pi - \theta\}, \text{ com } \theta_1 < \theta < \pi/2 \quad (3.37)$$

tem-se que existe uma constante $M_{\theta} > 0$ tal que

$$\left\| (\lambda I - \Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu'(1-i)I)^{-1} \right\|_p \leq \frac{M}{|\lambda|}, \quad \text{para todo } \lambda \in \sum_{\theta} \quad (3.38)$$

Desta forma, $(\nu\Delta - (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - \mu'(1-i)I)$ é gerador de um semigrupo analítico sobre $L^p(\Omega)$ para $2 \leq p < \infty$. Pazy [55]).

Teorema 3.4.2. *Seja o operador linear $Z(t) : D(Z(t)) \longrightarrow \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ tal que*

$$Z(t)u = (-\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla))u, \quad \text{para todo } u \in D(A(t)) \quad (3.39)$$

onde

$$D(Z(t)) = \left\{ u \in W^{2,p} : Z(t)u \in \mathcal{C}(\bar{\Omega}), \quad \text{para todo } p \geq 2 \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \right\}.$$

Então, $-Z(t)$ é gerador de um semigrupo analítico sobre o espaço $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$ para cada t fixo.

Demonstração. Pelo Teorema 3.4.1, tem-se que $-Z_p(t) = \nu\Delta - (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - \mu'(1-i)I$ é gerador de um semigrupo analítico sobre $L^p(\Omega)$, $p \geq 2$, então existe uma constante $M > 0$ tal que,

$$\left\| (\lambda I - \Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu'(1-i))^{-1} u \right\|_p \leq \frac{M}{|\lambda|} \|u\|_p, \quad (3.40)$$

para todo $\lambda \in \sum_\theta$ e todo $u \in D(Z(t))$. Usando o Teorema de imersão de Sobolev 2.2.1, temos

$$D(Z(t)) \subset D(Z_p) \subset \mathcal{C}(\bar{\Omega}), \quad \text{para todo } p \geq 2$$

Por outro lado, para todo $u \in L^\infty(\Omega)$ temos que

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \|u\|_p = \|u\|_\infty$$

para $u \in L^\infty(\Omega)$. Então, de (3.40) resulta que

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \left\| (\lambda I - \Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu'(1-i)I)^{-1} u \right\|_p \leq \lim_{p \rightarrow \infty} \frac{M}{|\lambda|} \|u\|_p = \frac{M}{|\lambda|} \|u\|_\infty$$

Desta forma, para todo $u \in \mathcal{C}(\bar{\Omega})$,

$$\left\| (\lambda I - \Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) + \mu'(1-i)I)^{-1} u \right\|_{\mathcal{C}(\bar{\Omega})} \leq \frac{M}{|\lambda|} \|u\|_{\mathcal{C}(\bar{\Omega})}, \quad \text{para todo } \lambda \in \sum_\theta$$

Em conseqüência, $Z(t) = -\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - \mu'(1-i)I$ é gerador de um semigrupo analítico sobre X_η para cada t fixo.

Observação 3.4.3. Como conseqüência que $Z(t) = -\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) - \mu'(1-i)I$ é um semigrupo analítico tem-se que $-Z(t)$ também é gerador de um semigrupo analítico sobre $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$.

Observação 3.4.4. Para resultados mais gerais relacionados com a geração de semigrupos analíticos ver Stewart [67] e Amann [3].

Lema 3.4.5. *Seja $Z(t) = -\nu\Delta + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla$ o operador linear do Teorema 3.4.2 e $B = \mu I$, com $0 < \mu < 1$ uma perturbação do operador $Z(t)$. Se $Z_\mu(t) = Z(t) + B$ então $Z_\mu(t)Z_\mu(0)^{-1}$ é Hölder contínua.*

Demonstração. Como por hipótese, $\hat{\mathbf{v}}(t)$ é Hölder contínua em t , então existem constantes $M_1 > 0$ e $0 < \alpha \leq 1$ tais que

$$\|\hat{\mathbf{v}}(t) - \hat{\mathbf{v}}(s)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq M_1 |t - s|^\alpha.$$

Por outro lado, dado que $-Z_\mu(t)$ é gerador de um semigrupo analítico, então $Z_\mu(t)Z_\mu(0)^{-1}$ é um operador limitado para todo $u \in D(Z_\mu(t)) = D(Z(t))$ ([80]). Assim, usando o fato que $\|\nabla Z_\mu(0)^{-1}u\| \leq M_2 \|u\|$ para alguma constante $M_2 > 0$ ([22]) tem-se que

$$\begin{aligned} \|Z_\mu(t)Z_\mu(0)^{-1}u - Z_\mu(s)Z_\mu(0)^{-1}u\| &= \|((Z_\mu(t) - Z_\mu(s)) Z_\mu(0)^{-1}u)\| \\ &= \|(-\nu\Delta + \hat{\mathbf{v}}(t) \cdot \nabla + B + \nu\Delta - \hat{\mathbf{v}}(s) \cdot \nabla - B) Z_\mu(0)^{-1}u\| \\ &= \|(\hat{\mathbf{v}}(s) - \hat{\mathbf{v}}(t) \cdot \nabla) Z_\mu(0)^{-1}u\| \\ &\leq \|\hat{\mathbf{v}}(t) - \hat{\mathbf{v}}(s)\|_{L^\infty(\Omega)} \|\nabla Z_\mu(0)^{-1}u\|_{C^1(\Omega)} \\ &\leq M_1 |t - s|^\alpha \|\nabla Z_\mu(0)^{-1}u\|_{C^1(\Omega)} \\ &\leq M |t - s|^\alpha \|u\|_{C(\Omega)}, \quad M = M_1 M_2 \end{aligned}$$

Em conseqüência, existem constantes $M > 0$ e $0 < \alpha \leq 1$ tais que,

$$\|(Z_\mu(t) - Z_\mu(s)) Z_\mu(0)^{-1}\| \leq M |t - s|^\alpha, \quad \text{para todo } s, t \in [0, \tau^*].$$

Teorema 3.4.6. *Seja $A_i(t) = -\nu\Delta + (\hat{\mathbf{v}}(t) \cdot \nabla)$ para cada $t \in [0, \tau^*]$ e*

$$\mathbf{A}(t) : D(A_A(t)) \times D(A_B(t)) \times D(A_T(t)) \longrightarrow \mathbb{X}$$

, tal que

$$\mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) = (A_A(t)\mathbf{y}(t), A_B(t)\mathbf{y}(t), A_T(t)\mathbf{y}(t)),$$

onde $D(A_i(t))$ como em 3.27. Então o problema homogêneo

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) &= 0 \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \in \mathbb{X} \end{aligned} \tag{3.41}$$

tem uma única solução $\mathbf{y}(t) = U(t, 0)\mathbf{y}_0$ onde $U(t, s) = (U_A(s, t), U_B(s, t), U_T(s, t))$ é um sistema de evolução sobre \mathbb{X} para $0 \leq s \leq t \leq \tau^*$.

Demonstração. Seja $A_i(t) = \nu_i \Delta - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla$, $i = A, B, T$ e $\mathbf{y}(t) = (c_A(t), c_B(t), T(t))$. Pelo Teorema 3.4.2 para cada $t \in [0, \tau]$, $A_i(t)$, $i = A, B, T$, gera um semigrupo analítico sobre \mathbb{X} , tal que

$$\|(\lambda I + A_i(t))^{-1}\|_{X_n} \leq \frac{M}{|\lambda|}, \quad \text{para todo } \lambda \in \sum_\theta,$$

onde M é uma constante positiva independente de t e $\lambda \in \sum_\theta$ dado em (3.37). Então, pelo Teorema 2.4.6¹, existe um único sistema de evolução $U(t, s) = (U_A(t, s), U_B(t, s), U_T(t, s))$ tal que $\mathbf{y}(t) = (c_A(t), c_B(t), T(t))$ com

$$\begin{aligned} c_A(t) &= U_A(t, 0)c_1(0) \\ c_B(t) &= U_B(t, 0)c_2(0) \\ T(t) &= U_T(t, 0)T(0) \end{aligned} \quad 0 < t \leq \tau^*$$

é solução do problema (3.41). Portanto, o problema homogêneo (3.41) tem uma única solução $\mathbf{y}(t) \in \mathbb{X}$ tal que,

$$\mathbf{y}(t) = U(t, 0)\mathbf{y}(0).$$

Dado que ésta é uma solução clássica, aplicando o princípio do máximo concluimos que $\|U(t, s)\| \leq 1$.

Lema 3.4.7. *Seja $\mathbf{y}(t) = (c_A, c_B, T) \in \mathbb{X}$ e $\mathbf{f} : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$ tal que*

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) = (f_1(\mathbf{y}), f_2(\mathbf{y}), f_3(\mathbf{y})),$$

¹Para a geração de semigrupos de evolução além das referências mencionadas anteriormente ver [69] onde se demonstra um resultado sobre a geração de operadores de evolução com uma condição mais fraca que a estabelecida em [36]

onde $f_i : \mathbb{X} \longrightarrow \mathcal{C}(\Omega)$ com $f_i(\mathbf{y}) = \pm \alpha_i c_A c_B e^{-Ze/T}$ para $i = A, B, T$ com o sinal "+" para $i = T$. Então \mathbf{f} é uniformemente Lipschitz contínua sobre o conjunto $\mathcal{E} = \{0 \leq c_A(x, t) \leq 1, 0 \leq c_B(x, t) \leq 1, T(x, t) \geq 0\}$

Demonstração. Se $\mathbf{y}, \mathbf{y}^* \in \mathbb{X}$, demonstraremos que existe uma constante $M > 0$ tal que

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{y}^*)\|_{\mathbb{X}} \leq M \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\|_{\infty}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{y}^*)\|_{\mathbb{X}} &= \|(f_A(\mathbf{y}), f_B(\mathbf{y}), f_T(\mathbf{y})) - (f_A(\mathbf{y}^*), f_B(\mathbf{y}^*), f_T(\mathbf{y}^*))\|_{\mathbb{X}} \\ &= \|f_A(\mathbf{y}) - f_A(\mathbf{y}^*), f_B(\mathbf{y}) - f_B(\mathbf{y}^*), f_T(\mathbf{y}) - f_T(\mathbf{y}^*)\|_{\mathbb{X}} \\ &= \sum_{i=A,B,T} \|(f_i(\mathbf{y}) - f_i(\mathbf{y}^*))\|_{\mathcal{C}(\Omega)} \end{aligned}$$

Agora, fazendo $\varphi(T) = e^{-Ze/T}$ e definindo

$$\varphi(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T \leq 0 \\ e^{-Ze/T} & \text{se } T > 0, \end{cases}$$

então, $\varphi(T)$ é uma limitada e $|\varphi(T)| \leq 1$.

Dado que para $i = A, B$ $0 \leq c_i(t) \leq 1$, então temos que

$$\begin{aligned} \|f_i(\mathbf{y}) - f_i(\mathbf{y}^*)\|_{\mathcal{C}(\Omega)} &= \max_{x \in \Omega} |f_i(\mathbf{y}) - f_i(\mathbf{y}^*)| \\ &= \max_{x \in \Omega} |\alpha_i (c_A c_B e^{-Ze/T} - c_A^* c_B^* e^{-Ze/T^*})| \\ &= |\alpha_i| \max_{x \in \Omega} |(c_A - c_A^*) c_B \varphi(T) + (c_B - c_B^*) c_A^* \varphi(T^*) \\ &\quad + c_A^* c_B (\varphi(T) - \varphi(T^*))| \\ &= M_i \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\|_{\infty} \quad M_i = \max \{N, |\alpha_i| \quad i = A, B, T\}. \end{aligned}$$

onde $\|\cdot\|_{\infty}$ denota a norm de $\mathbf{y} : [0, \tau^*] \longrightarrow \mathbb{X}$; segue-se que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{f}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(\mathbf{y}^*)\|_{\mathbb{X}} &= \sum_{i=A,B,T} \|f_i(\mathbf{y}) - f_i(\mathbf{y}^*)\|_{\mathcal{C}(\Omega)} \\ &\leq \sum_{i=A,B,T} M_i \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\|_{\infty} \\ &= M \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\|_{\infty}, \quad M = \sum_{i=A,B,T} M_i. \end{aligned}$$

Em conseqüência, \mathbf{f} é uma função uniformemente Lipschitz contínua sobre \mathcal{E} .

Teorema 3.4.8. *Seja $\mathbf{y}(0) = (c_{A0}, c_{B0}, T_0) \in \mathbb{X}$ e consideremos o conjunto*

$$\mathcal{E} = \{0 \leq c_A(t) \leq 1, 0 \leq c_B(t) \leq 1, T(t) \geq 0\}.$$

Então a solução clássica do problema

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) &= \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) \quad 0 < t \leq \tau^* \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \in \mathbb{X} \end{aligned} \tag{3.42}$$

tem uma formulação como uma solução (única) "mild" $\mathbf{y} \in \mathcal{E}$.

Demonstração. Pelo Teorema 3.4.6, se $\mathbf{f} \equiv 0$, existe um único sistema de evolução $U(t, s) = (U_A(t, s), U_B(t, s), U_T(t, s))$ (3.42), tal que existe uma constante $M_i > 0$ tal que $\|U_i(t, s)\| \leq 1$, para $i = A, B, T$ e

$$\mathbf{y}(t) = U(t, 0)\mathbf{y}_0, \quad \text{para todo } 0 \leq t \leq \tau^*,$$

é a única solução do problema homogêneo correspondente a (3.42). Agora, pela definição 2.4.7, uma solução "mild" do problema (3.28), si existe, é da forma

$$\mathbf{y}(t) = (c_A(t), c_B(t), T(t)) \in \mathbb{X},$$

onde,

$$\begin{aligned} c_A &= U_A(t, 0)c_{A0} - \alpha_A \int_0^t U_A(t, s)f(\mathbf{y}(s))ds \\ c_B &= U_B(t, 0)c_{B0} - \alpha_B \int_0^t U_B(t, s)f(\mathbf{y}(s))ds \\ T &= U_T(t, 0)T_0 + \alpha_T \int_0^t U_T(t, s)f(\mathbf{y}(s))ds \end{aligned} \tag{3.43}$$

Para demonstrar que o problema (3.42) tem uma única solução "mild" em \mathcal{E} , definamos a aplicação,

$$\mathcal{K} : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$

com

$$\mathcal{K}(\mathbf{y})(t) = U(t, 0)\mathbf{y}_0 + \int_0^t U(t, s)f(\mathbf{y}(s))ds,$$

e em primeiro lugar determinaremos a existência da solução via um processo iterativo da forma,

$$c_A^{n+1} = U_A(t, 0)c_A(0) - \alpha_A \int_0^t U_A(t, s)c_A^{n+1}c_B^n\varphi(T^n(s))ds \quad (3.44)$$

$$c_B^{n+1} = U_B(t, 0)c_B(0) - \alpha_B \int_0^t U_B(t, s)c_A^n c_B^{n+1}\varphi(T^n(s))ds \quad (3.45)$$

$$T^{n+1} = U_T(t, 0)T(0) + \alpha_T \int_0^t U_T(t, s)c_A^n c_B^n\varphi(T^n(s))ds \quad (3.46)$$

Sejam \mathcal{K}_{nA} e \mathcal{K}_{nB} os operadores

$$\mathcal{K}_{nA} = -\alpha_A \int_0^t c_B^n(s)\varphi(T^n(s))ds$$

$$\mathcal{K}_{nB} = -\alpha_B \int_0^t c_A^n(s)\varphi(T^n(s))ds$$

então

$$c_A^{n+1} = U_A(t, 0)c_A(0) - \mathcal{K}_n c_A^{n+1}$$

e assim,

$$c_A^{n+1} = (I - \mathcal{K}_n)^{-1}U_A(t, 0)c_A(0) \quad (3.47)$$

Analogamente, obtém-se para c_B^{n+1} que

$$c_B^{n+1} = (I - \mathcal{K}_{nB})^{-1}U_B(t, 0)c_B(0) \quad (3.48)$$

Portanto, o sistema iterativo (3.44)-(3.46) fica formulado na forma,

$$\begin{aligned} c_A^{n+1} &= c_{AL} - \alpha_A \int_0^t U_A(t, s)(I - \mathcal{K}_{nA})^{-1}c_{AL}^n c_B^n\varphi(T^n(s))ds \\ c_B^{n+1} &= c_{BL} - \alpha_B \int_0^t U_B(t, s)(I - \mathcal{K}_{nB})^{-1}c_{BL}^n c_A^n\varphi(T^n(s))ds \\ T^{n+1} &= T_L + \alpha_T \int_0^t U_T(t, s)c_A^n c_B^n\varphi(T^n(s))ds \end{aligned}$$

onde $c_{AL} = U_A(t, 0)c_A(0)$, $c_{BL} = U_B(t, 0)c_B(0)$ e $T_L = U_T(t, 0)T(0)$. Portanto, a solução $\mathbf{y}^{n+1} = (c_A^{n+1}, c_B^{n+1}, T^{n+1})$ pode ser expressa na forma

$$\mathbf{y}^{n+1}(t) = \mathbf{y}_L^n + \mathcal{I}^n(\mathbf{y}^n)$$

com $\mathcal{I}^n = (\mathcal{I}_A^n, \mathcal{I}_B^n, \mathcal{I}_T^n)$, onde

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_A^n(c_A^n) &= -\alpha_A \int_0^t U_A(t, s)(I - \mathcal{K}_{nA})^{-1} c_{AL}^n c_B^n \varphi(T^n(s)) ds \\ \mathcal{I}_B^n(c_B^n) &= -\alpha_B \int_0^t U_B(t, s)(I - \mathcal{K}_{nB})^{-1} c_{BL}^n c_A^n \varphi(T^n(s)) ds \\ \mathcal{I}_T^n(T^n) &= \alpha_T \int_0^t U_T(t, s) c_A^n c_B^n \varphi(T^n(s)) ds\end{aligned}$$

Definindo,

$$\begin{aligned}c_A^{n+1} &= c_{AL} + \sum_{j=1}^n \mathcal{I}_A^n \mathcal{I}_A^{n-1} \cdots \mathcal{I}_A^{n-j} c_{AL} \\ c_B^{n+1} &= c_{BL} + \sum_{j=1}^n \mathcal{I}_B^n \mathcal{I}_B^{n-1} \cdots \mathcal{I}_B^{n-j} c_{BL} \\ c_A^{n+1} &= T_L + \sum_{j=1}^n \mathcal{I}_T^n \mathcal{I}_T^{n-1} \cdots \mathcal{I}_T^{n-j} T_{TL}\end{aligned}$$

demonstraremos que a solução $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T)$ existe com

$$c_A(t) = c_{AL} + \sum_{j=1}^{\infty} \mathcal{I}_A^n \mathcal{I}_A^{n-1} \cdots \mathcal{I}_A^{n-j} c_{AL} = \sum_{j=0}^n S^j c_A(0) \quad (3.49)$$

$$c_B(t) = c_{BL} + \sum_{j=1}^{\infty} \mathcal{I}_B^n \mathcal{I}_B^{n-1} \cdots \mathcal{I}_B^{n-j} c_{BL} = \sum_{j=0}^n S^j c_B(0) \quad (3.50)$$

$$T(t) = T_L + \sum_{j=1}^{\infty} \mathcal{I}_T^n \mathcal{I}_T^{n-1} \cdots \mathcal{I}_T^{n-j} T_{TL} = \sum_{j=0}^n S^j T(0) \quad (3.51)$$

onde $S^j = \mathcal{I}^n \circ \mathcal{I}^{n-1} \circ \cdots \circ \mathcal{I}^{n-j}$

Observe que, se $\mathbf{y}^0 \equiv \mathbf{y}_L(0) = U(t, 0)\mathbf{y}(0)$, então $\mathbf{y}_0 \in \mathcal{E}$. Por outro lado, usando o princípio do máximo tem-se que para cada n , $0 \leq c_A^n \leq 1$, $0 \leq c_B^n \leq 1$ e $T \geq 0$ (ver Lema 3.4.10). Também tem-se que \mathcal{K}_{nA} e \mathcal{K}_{nB} são operadores tipo Volterra e portanto os operadores $(I - \mathcal{K}_{nA})^{-1}$ e $(I - \mathcal{K}_{nB})^{-1}$ existem e são limitados. Demonstraremos que la serie (3.49) es convergente, para las series (3.50) e (3.51) o procedimento é análogo. Em conseqüência, denotando por M o máximo

das constantes

$$\begin{aligned} \|\mathcal{I}_A^n(c_{AL})\| &= \|\mathcal{I}_A^n(U_A(t, 0)c_A(0))\| \\ &\leq \alpha_A \int_0^t \|U(t, s)(I - K_0)^{-1}U_A(t, 0)c_A(0)c_B(s)\varphi(T(s))\| ds \\ &\leq \alpha_A k_{\mathcal{K}} t = M_A t \end{aligned}$$

onde $k_{\mathcal{K}} = \sup_n \|I - \mathcal{K}_{nA}\|^{-1}$ e $M_A = \alpha_A k_{\mathcal{K}}$. Também,

$$\|\mathcal{I}_A^n \circ \mathcal{I}^n(c_{AL})\| = \|\mathcal{I}_A^n(\mathcal{I}_A^n(c_{AL}))\| \leq \int_0^t M_A^2 s ds \leq \frac{(M_A t)^2}{2}.$$

Procedendo por indução, se

$$\|\overbrace{\mathcal{I}^n \circ \mathcal{I}^n \circ \dots \circ \mathcal{I}^n}^n(\mathbf{y}^0)\| \leq \frac{(M_A t)^n}{n!}$$

então

$$\begin{aligned} \|\overbrace{\mathcal{I}^n \circ \mathcal{I}^n \circ \dots \circ \mathcal{I}^n}^{n+1}(\mathbf{y}^0(t))\| &= \|\mathcal{I}^n(\overbrace{\mathcal{I}^n \circ \mathcal{I}^n \circ \dots \circ \mathcal{I}^n}^n(\mathbf{y}^0(t)))\| \\ &\leq \int_0^t \frac{(M_A t)^n}{n!} s ds \\ &= \frac{(M_A t)^{n+1}}{(n+1)!}. \end{aligned}$$

Portanto, pelo princípio de indução matemática, para todo $n \in \mathbb{N}$,

$$\|\overbrace{\mathcal{I}^n \circ \mathcal{I}^n \circ \dots \circ \mathcal{I}^n}^n(\mathbf{y}^0)\| \leq \frac{(M_A t)^n}{n!}.$$

Assim,

$$\|S_{n+m} - S_n\| \leq \sum_{j=m}^{n+m} \frac{(M_A t)^j}{j!} \rightarrow 0 \text{ se } j \rightarrow \infty.$$

Portanto $(S_m)_{m \in \mathbb{N}}$ com $S_m = \sum_{j=0}^m S^j(\mathbf{y}^0)$ é a seqüência de Cauchy em $\mathcal{E} \subset \mathcal{C}(0, \tau^*, \mathcal{C}(\Omega))$, e portanto convergente. Analogamente se demonstra que las series (3.50) e (3.51) son convergentes em \mathcal{E} . Em conseqüência a solução *mild* existe e é da forma (3.43).

Para demonstrar a unicidade, consideramos que exista uma solução da forma (3.43) e utilizando o fato que f é uma função uniformemente Lipschitz contínua

sobre \mathcal{E} (Lema 3.4.7), obtem-se que para todo $m \in \mathbb{N}$

$$\|(\mathcal{K}^m \mathbf{y})(t) - (\mathcal{K}^m \mathbf{y}^*)(t)\| \leq \frac{(Kt)^m}{m!} \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\|_\infty.$$

Por tanto, por um Teorema do ponto fixo, $\mathbf{y} \in \mathcal{E}$ é única.

Observação 3.4.9. É conhecido que uma solução “mild” não é necessariamente uma solução (clássica) ou uma solução forte, porém se (3.26) tem uma solução clássica ou uma solução forte, então esta solução é da forma (3.43). Para obter soluções clássicas ou fortes é necessário considerar condições iniciais apropriadas. Nos seguintes Lemas assumiremos que $\mathbf{y}(x, t) = (c_A(x, t), c_B(x, t), T(x, t))$ é uma solução clássica do problema (3.28) tal que $c_A, c_B, T \in \mathcal{C}^1(0, \tau^*; \mathcal{C}^2(\Omega))$

Lema 3.4.10. Se $c_i \in \mathcal{C}^1(0, \tau^*, \mathcal{C}(\Omega))$ e $c_i(x, 0) \geq 0$ sobre $\bar{\Omega} \times [0, \tau^*]$, $i \in \{A, B\}$, $\varphi(T) = e^{-Ze/T}$ e

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + (-\nu_1 \Delta + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_A + \alpha_{ACB} \varphi(T) c_A = 0 \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + (-\nu_2 \Delta + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_B + \alpha_{BCA} \varphi(T) c_B = 0 \quad (3.53)$$

com

$$\frac{\partial c_i}{\partial \bar{\eta}} = 0 \quad \text{sobre } \partial \Omega \quad (3.54)$$

então,

$$c_i(x, t) \geq 0 \quad \text{sobre } \bar{\Omega} \times [0, \tau^*] \quad i \in \{A, B\}.$$

Demonstração. Seja,

$$h(x, t) = \alpha_{ACB}(x, t) \varphi(T), \quad \text{sobre } \Omega \times]0, \tau^*].$$

- i) Em primeiro lugar, suponha que $h(x, t) \geq 0$ para todo $(x, t) \in \Omega \times]0, \tau^*]$. Se $c_A(x, t) \not\geq 0$, para todo $(x, t) \in \Omega \times [0, \tau^*]$, então existe $(x_0, t_0) \in \bar{\Omega} \times [0, \tau^*]$ tal que,

$$c_A(x_0, t_0) = m_0,$$

com m_0 o valor mínimo negativo de $c_A(x, t)$ em $\bar{\Omega} \times [0, \tau]$.

Agora, como $c_A(x, 0) \geq 0$, então $(x_0, t_0) \in \Omega \times]0, \tau^*]$ ou $(x_0, t_0) \in \partial\Omega \times]0, \tau^*]$.

Dado que $c_A(x, t)$ não pode assumir um valor constante negativo, então pelo princípio do máximo (Teorema 2.6.1),

$$(x_0, t_0) \in \partial\Omega \times]0, \tau^*],$$

caso contrário $c_A(x, t) \equiv m_0$ sobre $\Omega \times]0, \tau]$.

Agora, como $\partial c_A(x, t)/\partial \bar{\eta} = 0$ para todo $(x, t) \in \partial\Omega \times]0, \tau^*]$, em particular

$$\frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} c_A(x_0, t_0) = 0, \quad (3.55)$$

Pelo princípio do máximo (3.55) é uma contradição, em conseqüência,

$$c_A(x, t) \geq 0, \quad \text{sobre } \bar{\Omega} \times [0, \tau^*].$$

- ii) Em geral, como $h(x, t)$ é limitada, existe uma constante C tal que $C \geq -h(x, t)$ para todo $(x, t) \in \Omega \times [0, \tau^*]$. Defina a função

$$g(x, t) = e^{-Ct} c_A(x, t),$$

então

$$\frac{\partial g}{\partial t} - \nu_A \Delta g + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla g + (g + h)g = 0 \quad \text{para todo } (x, t) \in \Omega \times]0, \tau^*].$$

En efeito,

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} - \nu_A \Delta g + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla g + (g + h)g &= e^{-Ct} \frac{\partial c_A}{\partial t} - C e^{-Ct} c_A - \nu_1 e^{-Ct} \Delta c_A \\ &\quad + e^{-Ct} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_A) + (C + h(x, t)) e^{-Ct} c_A \\ &= e^{-Ct} \left(\frac{\partial c_A}{\partial t} - \nu_A \Delta c_A + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_A + h(x, t) c_A \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Além disso,

$$\frac{\partial g}{\partial \bar{\eta}} = e^{-Ct} \frac{\partial c_A}{\partial \bar{\eta}} = 0 \quad \text{e} \quad g(x, 0) = c_A(x, 0)$$

Então, $g(x, t)$ é solução do problema

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} - \nu_A \Delta g + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla g + (C + h)g &= 0 \quad \text{sobre } \Omega \times]0, \tau^*] \\ g(x, 0) &\geq 0 \quad \text{sobre } \Omega \\ \frac{\partial g}{\partial \bar{\eta}} &= 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times [0, \tau^*]. \end{aligned}$$

Dado que $C + h(x, t) \geq 0$, pela parte i), $g(x, t) = e^{-Ct} c_A(x, t) \geq 0$ para todo $(x, t) \in \Omega \times]0, \tau^*]$. Assim,

$$c_A(x, t) \geq 0 \quad \text{sobre } \Omega \times [0, \tau^*].$$

Analogamente, se demonstra a positividade de $c_B(x, t)$ sobre $\Omega \times [0, \tau^*]$.

Observação 3.4.11. O seguinte Lema pode ser estabelecido sob condições mais fracas que $T \in L^2(, 0, \tau^*; H^1(\Omega))$.

Lema 3.4.12. *Seja $T(x, 0) = T_0 \geq 0$ q.s. sobre Ω . Se*

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nu_3 \Delta T + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T = \alpha_3 c_A c_B \varphi(T) \quad (3.56)$$

então $T(x, t) \geq 0$ sobre $\Omega \times [0, \tau^*]$.

Demonstração. Se $u \in H^1(\Omega)$, então $\max\{u, 0\}, \min\{u, 0\} \in H^1(\Omega)$ (ver seção 2.5 do capítulo 2). Se

$$T^-(t) = \max_t \{-T(t), 0\},$$

Como $T(t) \in L^2(\Omega)$, tomando em (3.56) o produto interno com T^- temos que

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial t}, T^- \right\rangle - \langle \nu_T \Delta T, T^- \rangle + \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) T, T^- \rangle = \langle \alpha_T c_A c_B \varphi(T), T^- \rangle$$

então,

$$\int_{\Omega} T^- \frac{\partial T}{\partial t} dx - \nu_3 \int_{\Omega} T^- \Delta T dx + \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T) T^- dx = \alpha_T \int_{\Omega} c_A c_B \varphi(T) T^- dx$$

Agora, usando a fórmula de Green, obtemos que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} T^- \frac{\partial T}{\partial t} dx &= -\frac{1}{2} \frac{dT}{dt} \|T^-\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ -\nu_T \int_{\Omega} T^- \Delta T dx &= -\nu_T \int_{\Omega} (\nabla T^-)^2 dx = -\nu_T \|\nabla T^-\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T) T^- dx &= 0. \end{aligned}$$

Dado que $\alpha_T \geq 0$, $\varphi(T) \geq 0$ e pelo Lema 3.4.10 $c_i(x, t) \geq 0$ para $i = A, B$, então

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|T^-\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_T \|\nabla T^-\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0$$

o que é equivalente a

$$\frac{d}{dt} \|T^-\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq -2\nu_T \|\nabla T^-\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Então, a função $t \mapsto \|T^-\|_{L^2(\Omega)}^2$ é decrescente. Assim,

$$0 \leq \|T^-(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|T^-(0)\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.57)$$

Como, por hipótese, $T(x, 0) \geq 0$, e $T^-(x, 0) = 0$ q.s. sobre Ω , então de (3.57) concluíse que

$$T^-(x, t) = 0 \quad \text{q.s. sobre } \Omega \text{ e } t \in [0, \tau^*].$$

Em conseqüência, como $T = T^+ - T^-$,

$$T(x, t) \geq 0 \quad \text{q.s sobre } \Omega \text{ e para todo } t \in [0, \tau^*].$$

Observação 3.4.13. Considerando que no processo de difusão-reação as concentrações iniciais satisfazem a relação $\sum_{i=A=B=T} c_i(x, 0) = 1$, no seguinte Lema demonstraremos que $0 \leq c_i(x, t) \leq 1$ sobre Ω e para todo $t \in [0, \tau^*]$.

Lema 3.4.14. *Se $c_i(x, t) \geq 0$ e $c_i \in L^2(0, \tau, H^1(\Omega))$ para $i = A, B, T$; então $c_i(x, t) \in [0, 1]$ sobre Ω e para todo $t \in [0, \tau^*]$.*

Demonstração. Se,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + (u \cdot \nabla) c_i - \nu_i \Delta c_i = -\alpha_i c_A c_B \varphi(T), \quad i \in \{A, B\} \quad (3.58)$$

então tomando o produto interno da equação (3.58) com $(c_i - 1)^+ = \max\{(c_i - 1), 0\}$,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial c_i}{\partial t}, (c_i - 1)^+(t) \right\rangle + \langle (\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla) c_i, (c_i - 1)^+(t) \rangle - \langle \nu_i \Delta c_i(t), (c_i - 1)^+(t) \rangle \\ = \langle -\alpha_i c_A c_B \varphi(T), (c_i - 1)^+ \rangle \end{aligned} \quad (3.59)$$

Agora, observe que

i)

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \frac{\partial c_i}{\partial t} [c_i - 1]^+ dx &= \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} (c_i - 1) \right] (c_i - 1)^+ dx \\
&= \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} [(c_i - 1)^+ - (c_i - 1)^-] (c_i - 1)^+ dx \\
&= \int_{\Omega} (c_i - 1)^+ \frac{\partial}{\partial t} (c_i - 1)^+ dx - \int_{\Omega} (c_i - 1)^+ \frac{\partial}{\partial t} (c_i - 1)^- dx \\
&= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|(c_i - 1)^+\|_{L^2(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

ii)

$$\int_{\Omega} ((\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_i) (c_i - 1)^+ dx = 0$$

iii)

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \nu_i \Delta c_i (c_i - 1)^+ dx &= \nu_i \int_{\Omega} \Delta (c_i - 1) (c_i - 1)^+ dx \\
&= \nu_i \int_{\Omega} \Delta (c_i - 1)^+ (c_i - 1)^+ dx - \int_{\Omega} \Delta (c_i - 1)^- (c_i - 1)^+ dx \\
&= -\nu_i \int_{\Omega} \nabla (c_i - 1)^+ \nabla (c_i - 1)^+ dx \\
&= -\nu_i \|\nabla (c_i - 1)^+\|_{L^2(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

iv) Tendo em vista que $c_i(t, x) \geq 0$ e $e^{-Z_e/T} \geq 0$ para todo $t \geq 0$ e para todo $x \in \Omega$,

$$\alpha_i \int_{\Omega} c_A c_A (c_i - 1)^+ e^{-Z_e/T} dx \geq 0.$$

Utilizando (i)-(iv), da equação (3.59), tem-se

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|(c_i - 1)^+\|^2 + \nu_i \|\nabla (c_i - 1)^+\|^2 \leq 0$$

de onde,

$$\|(c_i - 1)^+(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\nu_i \int_0^t \|\nabla (c_i - 1)^+\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \|(c_i - 1)^+(0)\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Posto que $(c_i - 1)^+(0) = \max_t \{(c_i - 1), 0\} = 0$, então,

$$\|(c_i - 1)^+(x, t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|(c_i - 1)^+(x, 0)\|_{L^2(\Omega)} = 0.$$

Finalmente, como $(c_i - 1)^+(x, t) = 0$ e $(c_i - 1)^-(x, t) \geq 0$ q.s. sobre Ω e para todo $t \in [0, \tau^*]$, e dado que

$$(c_i - 1)(x, t) = (c_i - 1)^+(x, t) - (c_i - 1)^-(x, t),$$

então,

$$(c_i - 1)(x, t) \leq 0, \text{ q.s.} \quad (3.60)$$

Em conseqüência, de (3.60) tem-se que para $i = A, B$,

$$c_i(x, t) \in [0, 1], \quad \text{q.s. sobre } \Omega \text{ e para todo } t \in [0, \tau^*].$$

Teorema 3.4.15. *Sejam c_A, c_B e T satisfazendo as equações (3.22)- (3.24) com as respectivas condições iniciais e de fronteira (3.25) e (3.26) tais que $c_A, c_B, T \in L^2(0, \tau^*, H^1(\Omega))$. Então existem constantes positivas a e b tais que,*

$$\|T(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq at + b \quad \text{para todo } t \geq 0 \quad (3.61)$$

Demonstração. Em primeiro lugar definimos: $T(t, x) = \hat{T}(t, x) + \tilde{T}(t)$, onde

$$\tilde{T}(t) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} T(t, x) dx$$

De (3.24) tem-se que T satisfaz,

$$\frac{dT}{dt} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T + \nu_T \Delta T = \alpha_T c_A c_B e^{-Z_e/T},$$

então,

$$\frac{d}{dt} (\hat{T} + \tilde{T}) + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{T} + \nu_T \Delta \hat{T} = \alpha_T c_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (3.62)$$

e

$$\frac{d\tilde{T}}{dt} = (\alpha_T c_A c_B e^{-Z_e/T}) \quad (3.63)$$

Dado que $\hat{b}(\hat{\mathbf{v}}, u, u) = \int_{\Omega} [\hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla u] \phi dx = 0$ para todo $u \in H^1(\Omega)$, então tomando o produto interno de (3.62) com \hat{T} tem-se que,

$$\left\langle \frac{d\hat{T}}{dt}, \hat{T} \right\rangle + \left\langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{T}, \hat{T} \right\rangle + \nu_T \left\langle \nabla \hat{T}, \nabla \hat{T} \right\rangle = \alpha_T \left\langle c_A c_B e^{-Z_e/T}, \hat{T} \right\rangle$$

De onde,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_T \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)} = \alpha_T \int_{\Omega} c_A c_B e^{-Z e/T} \hat{T} dx$$

Dado que $\|c_A\| \leq 1$, $\|c_B\| \leq 1$ e $\|e^{-Z e/T}\| \leq 1$, então

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_T \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \alpha_T \int_{\Omega} \hat{T} dx \\ &\leq \alpha_T \left(\int_{\Omega} dx \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} |\hat{T}|^2 \right)^{1/2} \\ &= M_T \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}, \quad M_T = \alpha_T |\Omega|^{1/2} \end{aligned}$$

Como, $\|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)} \leq (\lambda_1)^{-1/2} \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}$, com λ_1 o primeiro autovalor do operador Δ ([71]), então

$$M_T \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)} \leq M_T (\lambda_1)^{-1/2} \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}.$$

Agora, usando a desigualdade de Young obtemos

$$M_T \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{\nu_T}{2} M_T \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_T^2}{2\nu_T \lambda_1}.$$

e conseqüentemente

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_T \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \frac{\nu_T}{2} M_T \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{M_T^2}{2\nu_T \lambda_1}$$

ou

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\nu_T}{2} \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \frac{M_T^2}{2\nu_T \lambda_1}.$$

Agora como,

$$\lambda_1 \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|\hat{T}\|_{H^1(\Omega)}^2,$$

então

$$\frac{d}{dt} \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \lambda_1 \nu_T \|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{M_T^2}{2\nu_T \lambda_1}. \quad (3.64)$$

Usando a desigualdade de Gronwall, de (3.64) obtém-se

$$\|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|\hat{T}(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 e^{-\nu_T \lambda_1 t} + \frac{1}{\nu_T^2 \lambda_1^2} M_T^2 (1 - e^{-\nu_T \lambda_1 t})$$

Então, se $t \rightarrow \infty$,

$$\|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{M_T^2}{\nu_T^2 \lambda_1^2}.$$

Portanto, existe $\hat{K}_T = \frac{M_T}{\nu_T \lambda_1} + \|\hat{T}(0)\|$, tal que

$$\|\hat{T}\|_{L^2(\Omega)} \leq \hat{K}_T, \quad \text{para todo } t \geq 0. \quad (3.65)$$

Por outro lado, de (3.63) temos que

$$\tilde{T}(t) \leq \alpha_T |\Omega| t + \tilde{T}(0). \quad (3.66)$$

Em conseqüência, de (3.65)-(3.66) temos finalmente que,

$$\begin{aligned} \|T\| &\leq \|\hat{T} + \tilde{T}\| \leq \|\hat{T}\| + \|\tilde{T}\| \\ &\leq at + b, \quad \text{com } a = \alpha_T |\Omega| \text{ e } b = \hat{K}_T + \tilde{T}(0). \end{aligned}$$

Observação 3.4.16. Observe que $T(t)$ cresce no máximo linearmente em $L^2(0, \tau^*; H^1(\Omega))$. Nossos estudos computacionais indicam certo crescimento com $0,665 \times 10^{-4} \leq a \leq 0,725 \times 10^{-4}$, para $Re = 10^3$ (Fig. 4.6).

Observação 3.4.17. Precisamos de estimativas de ordem maior para estabelecer a existência de uma única solução forte para o problema (3.28) que é equivalente ao sistema (3.22)-(3.26). Para obter estas estimativas, por simplicidade e conveniência assumiremos adequada regularidade nos dados iniciais e utilizamos o Lema de Gronwall. Estes argumentos poderiam ser alterados usando o Lema uniforme de Gronwall (Teorema 2.3.1) e estabelecendo a devida regularidade em um instante τ' , $0 < \tau' < \tau^*$.

Estas estimativas junto com técnicas bem conhecidas de aproximações de Galerkin e argumentos de compacidade podem ser utilizadas para estabelecer a existência de soluções fracas ([43], [71], [70]).

Utilizaremos as notações $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T)$, $\nu_{min} = \min\{\nu_A, \nu_B, \nu_T\}$, $\alpha_{max} = \max\{\alpha_A, \alpha_B, \alpha_T\}$, e para as estimativas do gradiente, consideraremos os

valores médios de c_A , c_B e T , respectivamente. Isto é,

$$\begin{aligned}\bar{c}_A(t) &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} c_A(x, t) dx \\ \bar{c}_B(t) &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} c_B(x, t) dx \\ \bar{T}(t) &= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} T(x, t) dx.\end{aligned}$$

assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned}c_A(x, t) &= \hat{c}_A(x, t) + \bar{c}_A(t) \\ c_B(x, t) &= \hat{c}_B(x, t) + \bar{c}_B(t) \\ T(x, t) &= \hat{T}(x, t) + \bar{T}(t)\end{aligned}$$

a) **Estimativa para $\|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}$.**

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_A \|\nabla \mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \alpha_{max} |\langle f(\mathbf{y}), \hat{\mathbf{y}} \rangle|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{\alpha_{max}}{2} \int_{\omega} |\mathbf{y}|^3 dx$$

segue-se que

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \|\hat{\mathbf{y}}\|^2 + 2\nu_{min} \|\nabla \mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq k_1 \alpha_{max} \|\hat{\mathbf{y}}\|_{H^{1/3}(\Omega)}, \text{ (pela desigualdade de Sobolev)} \\ &\leq k_1 \alpha_{max} \|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{y}\|_{H^1(\Omega)} \\ &\quad \text{(por interpolação entre } L^2(\Omega) \text{ e } H^1(\Omega)) \\ &\leq \nu_{min} \|\mathbf{y}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{4\nu_{min}} \|\mathbf{y}\|^4 \\ &\quad \text{(pela desigualdade de Young)} \\ &\leq k_A \|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^4 + \nu_{min} \|\mathbf{y}\|^2, \quad k_A = \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{4\nu_{min}} \\ &\leq k_A \left(\|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\nu_{min}}{2k_A} \right)^2\end{aligned}$$

Integrando

$$\left[-\frac{1}{\|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\nu_{min}}{2k_A}} \right]_{\|\mathbf{y}(0)\|_{L^2(\Omega)}}^{\|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}} \leq k_A t,$$

dado que $0 < t < \tau^* < \frac{1}{k_A \left(\|\hat{\mathbf{y}}(0)\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2k_A} \right)}$. Então

$$k_A t + \frac{1}{\|\hat{\mathbf{y}}\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2}} \geq \frac{1}{\|\hat{\mathbf{y}}(0)\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2}}.$$

Assim, para $0 \leq t \leq \tau^*$,

$$\|\hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \leq \sqrt{\frac{\|\hat{\mathbf{y}}(0)\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2} \left(1 - k_A t (\|\hat{\mathbf{y}}(0)\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2k_A})\right)}{1 - k_A t \left(\|\hat{\mathbf{y}}(0)\|^2 + \frac{\nu_{min}}{2k_A}\right)}} = c_0(t).$$

Estimativa para $\|\nabla \mathbf{y}\|$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_{min} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \alpha_{max} \|\langle \nabla f(\mathbf{y}), \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\| + \|\langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{y}}, \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|\hat{\mathbf{v}}\| \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} + \alpha_{max} \|\hat{\mathbf{y}}\|_{L^4(\Omega)}^2 \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} + \frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|^2}{\nu_{min}} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \alpha_{max} k_2 \|\hat{\mathbf{y}}\|_{H^{1/2}(\Omega)}^2 \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|^2}{\nu_{min}} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + k_1 \alpha_{min} \|\hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \|\hat{\mathbf{y}}\|_{H^1(\Omega)} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|^2}{\nu_{min}} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{\nu_{min}} c_0(t)^4 + \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{\nu_{min}} c_0(t)^2 \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

então,

$$\frac{d}{dt} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq g_1(t) \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + h_1(t)$$

onde $g_1(t) = \frac{\|\hat{\mathbf{v}}\|^2}{\nu_{min}} + \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{\nu_{min}} c_0(t)^2$ e $h_1(t) = \frac{k_1 \alpha_{max}^2}{\nu_{min}} c_0(t)^4$. Assim,

$$\|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|\nabla \hat{\mathbf{y}}(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 e^{\int_0^t g_1} + \int_0^t h_1(s) e^{-\int_t^s g} ds$$

Portanto,

$$\|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \leq c_1(t), \quad \text{para } 0 \leq t \leq \tau^*$$

com $\hat{\mathbf{y}}(t) = \|\nabla \hat{\mathbf{y}}(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 e^{\int_0^t g_1} + \int_0^t h_1(s) e^{-\int_t^s g}$.

Estimativa para $\Delta \mathbf{y}$: Utilizaremos as estimativas obtidas para \mathbf{y} e $\|\nabla \hat{\mathbf{c}}_A\|_{L^2(\Omega)} \leq c_1(t)$ para $0 \leq t < \tau^*$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_{min} |\langle \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}, \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle| &\leq \alpha_{max} \|\langle \nabla f(\mathbf{y}), \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|\langle \nabla \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{y}}, \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Dado que

$$\begin{aligned} \|\langle \nabla \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{y}}, \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\|_{L^2(\Omega)} &\leq k_3 \|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{1,\infty}} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k_2 \|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{1,\infty}}^2}{\nu_{min}} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \alpha_{max} \|\langle \nabla(\mathbf{y}), \nabla \Delta \hat{\mathbf{y}} \rangle\| &\leq k_4 \alpha_A c_1(t) (\|\mathbf{y}\|_\infty + \|\mathbf{y}\|_\infty^2) \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq k_4 \alpha_A c_1(t) (\|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}) + \|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)} (\|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)}) \\ &\leq k_4 \alpha_A c_1(t) (c_0(t) + c_0(t)^2 + (1 + c_0(t)) \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}) \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k_1 \alpha_{max} c_1(t)^2 c_0(t)^2}{\nu_{min}} (1 + c_0(t))^2 \\ &\quad + \frac{\alpha_{max}^2}{\nu_{min}} c_1(t)^2 (1 + c_0(t))^2 \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

Segue-se que

$$\frac{d}{dt} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq g_2(t) \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + h_2(t)$$

e pelo Lema de Gronwall tem-se que existe uma função $c_2(t)$ tal que

$$\|\Delta \hat{\mathbf{y}}\| \leq c_2(t)$$

Estimativa para $\Delta^2 \mathbf{y}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \nu_{min} \|\nabla \Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq |\langle \nabla \Delta \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{y}}, \nabla \Delta^2 \hat{\mathbf{y}} \rangle| \\ &\quad + \alpha_{max} |\langle \nabla \Delta f(\mathbf{y}), \nabla \Delta^2 \hat{\mathbf{y}} \rangle| \end{aligned}$$

Do fato que

$$\begin{aligned} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} &\leq k_5 \|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{3,\infty}} \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \frac{\nu_{min}}{4} \|\nabla \Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k_5 \|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{3,\infty}}^2}{\nu_{min}} \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\alpha_{max} \|\nabla \Delta f(\mathbf{y})\|_{L^2(\Omega)} &\leq \alpha_{max} k_6 \left[\|\mathbf{y}\|_\infty^2 \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_\infty \|\hat{\mathbf{y}}\|_\infty + \|\nabla \hat{\mathbf{y}}\|_\infty^3 \right] \\
&\leq \alpha_{max} k_6 \left[\|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_\infty^2 \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \|\hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^{1/2} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^{1/2} \right. \\
&\quad \left. + \|\hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^{3/2} \|\Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^{3/2} \right] \\
&\quad \text{(Por Sobolev, Poincaré e interpolação)} \\
\alpha_{max} k_6 &\left[\|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\| c_2(t)^2 + c_2(t)^{5/2} c_0(t)^{1/2} + c_2(t)^{3/2} c_0(t)^{3/2} \right]
\end{aligned}$$

Segue-se que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\nu_{min}}{2} \|\nabla \Delta \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \frac{k_6}{\nu_{min}} \left(\|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{3,\infty}}^2 + \alpha_{max}^2 c_2(t)^2 \right) \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_h^2 \text{ il} \\
&\quad + k_6 \alpha_{max} \left(c_2(t)^{5/2} c_0(t)^{1/2} + c_2(t)^{3/2} c_0(t)^{3/2} \right)
\end{aligned}$$

Assim,

$$\frac{1}{dt} \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq g_4(t) \|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|^2 + h_4(t)$$

onde

$$\begin{aligned}
g_4(t) &= \frac{k_6}{\nu_{min}} \left(\|\hat{\mathbf{v}}\|_{W^{3,\infty}}^2 + \alpha_{max}^2 c_2(t)^2 \right) \\
h_4(t) &= k_6 \alpha_{max} \left(c_2(t)^{5/2} c_0(t)^{1/2} + c_2(t)^{3/2} c_0(t)^{3/2} \right).
\end{aligned}$$

Portanto, usando a desigualdade de Gronwall, existe $c_4(t)$ tal que

$$\|\Delta^2 \hat{\mathbf{y}}\|_{L^2(\Omega)} \leq c_4(t), \quad 0 \leq t < \tau_*.$$

Em conseqüência, pelas desigualdades de Sobolev $\hat{\mathbf{y}} \in \mathcal{C}^2(\Omega)$ e temos uma solução clássica.

Observação 3.4.18. Das desigualdades mostradas na observação anterior, temos que existe uma solução clássica local $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T)$ para o problema (3.22)-(3.26). A dificuldade é para obter uma solução global no tempo. Se assume-se o caso $\nu_A = \nu_B = \nu_T$ (utilizado nas simulações) e consideramos

$$\chi = \frac{\nu_P H e}{\nu_A + \nu_B} (c_A + c_B) + T,$$

então das equações (3.22)-(3.24) temos que

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \chi - \nu \Delta \chi = 0$$

é satisfeita no sentido clássico em $0 \leq t \leq \tau^*$. Então pelo princípio do máximo

$$0 \leq T(x, t) \leq \frac{v_p He}{v_A + v_B} + T(x, 0).$$

Fazendo,

$$\lambda_0 = 2 \left(\frac{v_p He}{v_A + v_B} \right)^2,$$

tem-se

$$\|T(t)\|^2 \leq \lambda_0 + 2 \|T(0)\|^2.$$

Também tem-se que $\|c_i\|^2 \leq \|c_i(0)\|^2$ para $i = A, B$. Dado que,

$$\frac{1}{k_A \|\mathbf{y}\|^2 + \nu_{min}} > \frac{1}{a (\lambda_0 + \|T(0)\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2) + \nu_{min}}$$

e fazendo

$$\tau_* = \frac{1}{k_A (\lambda_0 + \|T(0)\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2) + \nu_{min}}$$

temos que $t_* < \tau^*$. Evidentemente, tem-se que

$$\frac{1}{k_A \|\mathbf{y}(\tau_*)\|^2 + \nu_{min}} > \tau_* \quad \text{e} \quad \tau_* < \tau^*.$$

Por conseqüência, podemos os argumentos anteriores estender a solução clássica ao intervalo $[\tau_*, 2\tau_*]$ e assim por iteração construir uma solução clássica global.

4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

Existem, na literatura, publicações que apresentam diversos métodos para simular a solução da formulação de vorticidade-função de corrente para fluidos incompressíveis não estacionários: ver por exemplo Weinan [75], Young et al. [81], Weinan e Liu [44], etc. O problema em estudo tem sido simulado utilizando o método de diferenças finitas de segunda ordem para a discretização espacial e o método de Runge-Kutta para o passo do tempo (Jameson [33]), tendo em conta que esses métodos são particularmente simples e eficientes, especialmente para o caso quando as fronteiras do domínio são paralelas aos eixos coordenados. Utilizando este procedimento no artigo [] De Bortoli, Thompson e Zavaleta simulam a rotação de um fluídos fracamente viscoelásticos e determinam o comportamento das normas de Sobolev, e recentemente Zavaleta, De Bortoli e Thompson [] mostram que o comportamento das soluções do problema (??) são comparables com os resultados mostrados por Chang et.al. [10].

4.1 Discretização

Para a simulação numérica, consideramos o sistema de equações (3.16)-(3.21) expresso na forma de função de corrente-vorticidade com suas respectivas condições iniciais e de fronteira (ver seção 2.7 do capítulo 2). O sistema de equações tem a forma,

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial \omega}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial \omega}{\partial x_2} - \frac{1}{Re} \Delta \omega = 0, \quad \Delta \psi = -\omega \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_A}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_A}{\partial x_2} - \frac{1}{ReSc_A} \Delta c_A = -v_A Dac_{ACBE}^{-Ze/T} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_B}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_B}{\partial x_2} - \frac{1}{ReSc_B} \Delta c_B = -v_B Dac_{ACBE}^{-Ze/T} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial c_P}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial c_P}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial c_P}{\partial x_2} - \frac{1}{ReSc_P} \Delta c_P = v_P Dac_{ACBE}^{-Ze/T} \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \frac{\partial T}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1} \frac{\partial T}{\partial x_2} - \frac{1}{RePr} \Delta T = v_P He Dac_{ACBE}^{-Ze/T} \quad (4.5)$$

onde

$$\hat{\mathbf{v}} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \right) \quad (4.6)$$

Assumimos, também, que o reator onde produz-se o processo reativo é o quadrado $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$. Para aproximar as soluções consideramos o método de diferenças finitas com 5 pontos para a discretização espacial e o esquema de Runge-Kutta de três-estágios para a evolução temporal (Jameson [33]). Então, a discretização do sistema (1.2)-(1.6) é dado pelo conjunto de equações,

$$\frac{\omega^{n+1} - \omega^n}{\Delta t} + \hat{D}_y \psi^n \hat{D}_x \omega^n - \hat{D}_x \psi^n \hat{D}_y \omega^n - \frac{1}{Re} \Delta_h^n \omega^n = 0 \quad (4.7)$$

$$\Delta_h \psi^{n+1} = -\omega^{n+1} \quad (4.8)$$

$$\frac{c_A^{n+1} - c_A^n}{\Delta t} + \hat{D}_y \psi^n \hat{D}_x c_A^n - \hat{D}_x \psi^n \hat{D}_y c_A^n = \frac{1}{ReSc_A} \Delta_h c_A^n - v_A Da c_A^n c_B^n e^{-Ze/T^n} \quad (4.9)$$

$$\frac{c_B^{n+1} - c_B^n}{\Delta t} + \hat{D}_y \psi^n \hat{D}_x c_B^n - \hat{D}_x \psi^n \hat{D}_y c_B^n = \frac{1}{ReSc_B} \Delta_h c_B^n - v_B Da c_A^n c_B^n e^{-Ze/T^n} \quad (4.10)$$

$$\frac{c_P^{n+1} - c_P^n}{\Delta t} + \hat{D}_y \psi^n \hat{D}_x c_P^n - \hat{D}_x \psi^n \hat{D}_y c_P^n = \frac{1}{ReSc_P} \Delta_h c_P^n + v_P Da c_A^n c_B^n e^{-Ze/T^n} \quad (4.11)$$

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \hat{D}_y \psi^n \hat{D}_x T^n - \hat{D}_x \psi^n \hat{D}_y T^n = \frac{1}{RePr} \Delta_h T^n + v_P Da He c_A^n c_B^n e^{-Ze/T^n} \quad (4.12)$$

onde \hat{D}_x , \hat{D}_y e \hat{D}_h são tais que

$$\begin{aligned} (\hat{D}_x g(x, y)) &= \frac{g(x+h, y) - g(x-h, y)}{2\Delta x} \\ (\hat{D}_y g(x, y)) &= \frac{g(x, y+h) - g(x, y-h)}{2\Delta y} \\ \Delta_h g(x, y) &= \frac{g(x-h, y) - 2g(x, y) + g(x+h, y)}{(\Delta x)^2} \\ &\quad + \frac{g(x, y-h) - 2g(x, y) + g(x, y+h)}{(\Delta y)^2} \end{aligned}$$

Sem perda de generalidade, assumimos que $\Delta x = \Delta y$ e usamos a notação i, j para referir a malha na direção x e y , respectivamente, com $i = 1, 2, \dots, N$, $j = 1, 2, \dots, N$.

As condições de fronteira são discretizadas na forma

$$g_{1,j} = 2g_{2,j} - g_{3,j}$$

$$g_{M,j} = 2g_{N-1,j} - g_{N-2,j}$$

$$g_{i,1} = 2g_{i,2} - g_{i,3}$$

$$g_{i,N} = 2g_{i,N-1} - g_{i,N-2}$$

O método de Runge-Kutta simplificado usado para o processo iterativo tem o seguinte esquema:

$$\begin{aligned} W_{i,j}^{(0)} &= W_{i,j}^n \\ W_{i,j}^{(k)} &= W_{i,j}^{(0)} - \alpha_k \Delta t R_{i,j}^{(k-1)} \\ W_{i,j}^{(n+1)} &= W_{i,j}^{(k)}, \end{aligned}$$

onde os α_k são (chamados) os coeficientes do passo de tempo de Runge-Kutta e $R_{i,j}$ é o vetor residual. Para o esquema de três estágios são usados os seguintes coeficientes ([33]):

$$\alpha_1 = 1/2, \quad \alpha_2 = 1/2, \quad \alpha_3 = 1,$$

e o passo de tempo foi determinado com as variações do número de Reynolds e o tamanho da malha (Young et al [81]),

$$\frac{1}{Re} \Delta t \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \right) \leq \frac{1}{2}.$$

4.2 Resultados

Para obter a solução numérica da evolução na concentração dos reagentes c_A , c_B , a temperatura T , assim como a concentração do produto c_P , consideramos a divisão do domínio computacional $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ em uma malha de 31×31 , com $\Delta x = \Delta y = 1/30$ e o passo de tempo $\Delta t = 0.0001$. Os resultados obtidos foram calculados para os seguintes números: Reynolds: $Re = 100, 500, 1000, 2000$ e 3000 , Damkhöler: $Da = 30, 100, 300$ e Zel'dovich: $Ze = 1, 5, 8$. A temperatura é considerada na forma absoluta.

Assumimos que a difusividade D das quantidades que estão participando na mistura são comparáveis à difusividade da vorticidade do fluido, isto é equivalente a assumir que o número de Schimidt $Sc \equiv \nu/D \approx 1$ (Dahm et al [16]); tendo isto em conta, consideramos que $Sc_i = 1$ para $i \in \{A, B, P\}$. Também assumiremos $Pr = 1$, $He = 10$ e os coeficientes molares estequiométricos como $v_A = v_B = v_P = 1$. O processo de reação é iniciado em $t = 0$ tomando como condição inicial para a vorticidade $\omega_0(i, j) = 0,01$ no interior da malha e $\omega_0(i, j) = 0$ nas fronteiras, e as concentrações iniciais $c_A(0) = 1/2$, $c_B(0) = 1/2$, $c_P(0) = 0$ e $T(0) = 1$.

Nas Figs. 4.1, 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 mostra-se as variações das concentrações, produto, temperatura e taxa de reação, respectivamente, para algumas das variações dos parâmetros considerados nas simulações computacionais. Dado que o comportamento dos reagentes A e B durante o processo reativo é similar, só mostraremos os gráficos do processo evolutivo do reagente A .

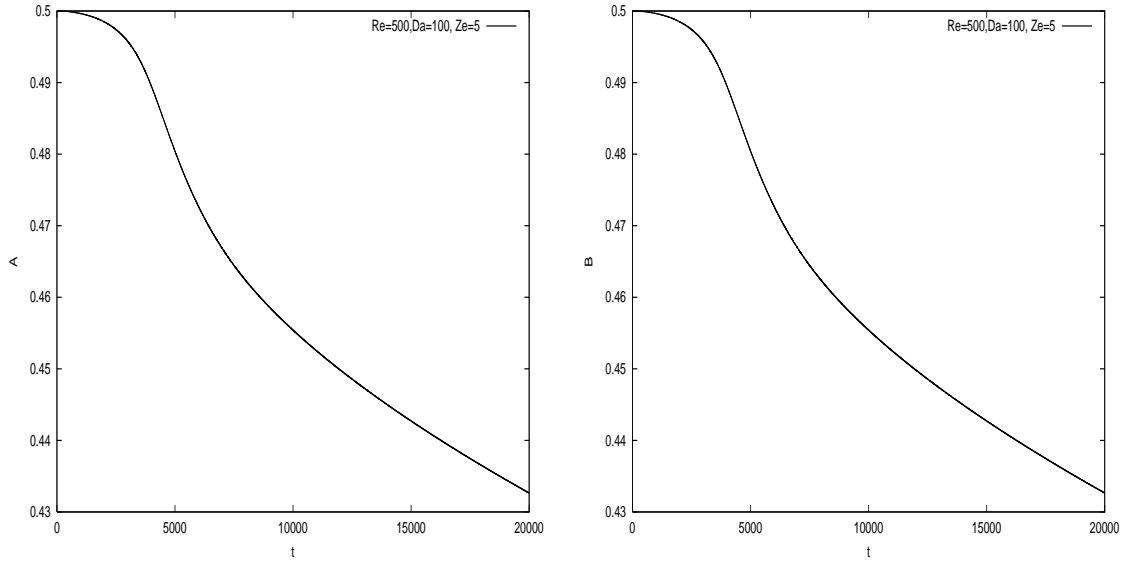


Figura 4.1: A figura da esquerda mostra a variação do reagente c_A no processo de difusão-reação para $Re = 500$, $Ze = 5$ e $Da = 100$ e a figura da direita o comportamento de c_B para os mesmos parâmetros.

A Fig. 4.1 mostra, na esquerda, o decaimento da concentração do reagente A , e na direita o comportamento da concentração do reagente B a partir de $t = 0s$ até $t=2s$ para os valores dos números de Reynolds ($Re = 500$), Damköler

($Da = 100$) e Zel'dovich ($Ze = 5$), respectivamente. Observe que tanto o consumo do reagente A como B vai decrescendo durante o processo de difusão-reação, e os dois elementos apresentam um comportamento semelhante.

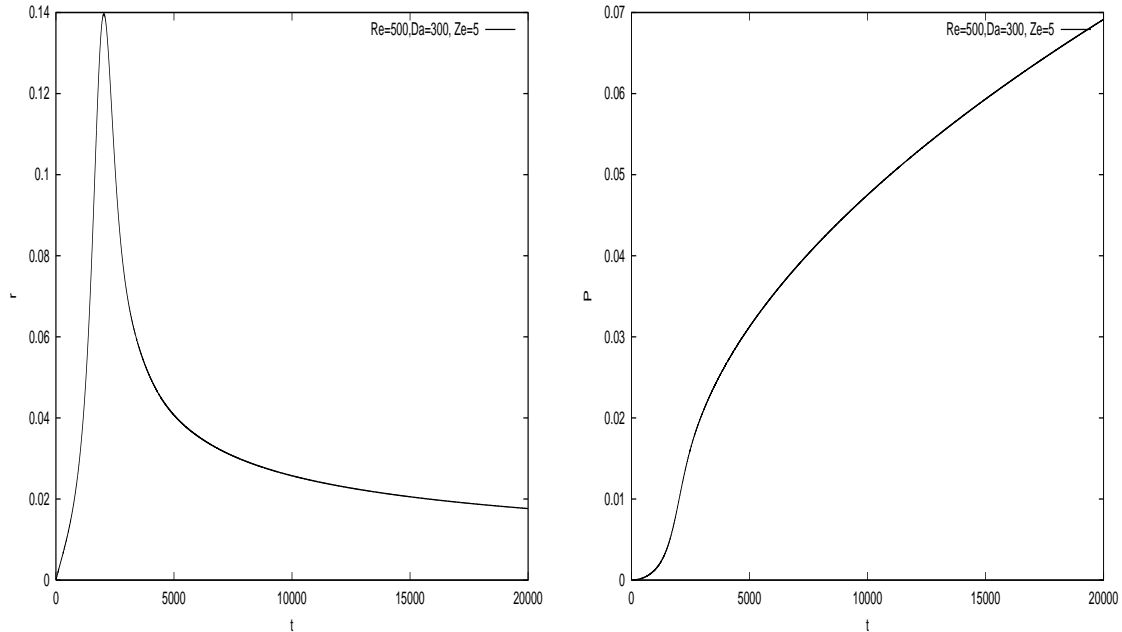


Figura 4.2: A figura da esquerda mostra a taxa de reação e à da direita a evolução da formação do produto c_P no processo reativo, para $Re = 500$, $Ze = 5$ e $Da = 300$.

O consumo dos reagentes A e B vai originando a formação de um novo produto, P , com concentração c_P cuja formação depende da taxa de reação, que é dada pela expressão algébrica $r = Da c_A c_B e^{-Ze/T}$. A taxa de reação, cujo comportamento é mostrado na esquerda da Fig. 4.2 é o que determina a velocidade da formação do produto P . Observe que a taxa de reação apresenta no início um crescimento abrupto devido as condições iniciais e de fronteira, para após decair também abruptamente até alcançar um comportamento tendendo a estabilidade. Ao contrário, a evolução da formação de P , partindo de zero, apresenta um comportamento crescente, como foi demonstrado no capítulo 3. Estes resultados foram obtidos para $Re = 500$, $Da = 300$ e $Ze = 5$.

Na Fig. 4.3 mostra-se resultados comparativos da evolução da concentração c_A para $Re = 100$, $Ze = 5$ e diferentes valores do número de Damköhler.

Considerando $Da = 30, 100, 300$, observe como as variações de Da influem no decaimento de c_A . Do processo evolutivo de c_A , determina-se que quando aumenta Da , o consumo de c_A se acelera. Do contrário, mantendo fixos Da e Ze , o aumento do número de Reynolds produz diminuição no consumo de reagente. O reagente c_B apresenta comportamento semelhante.

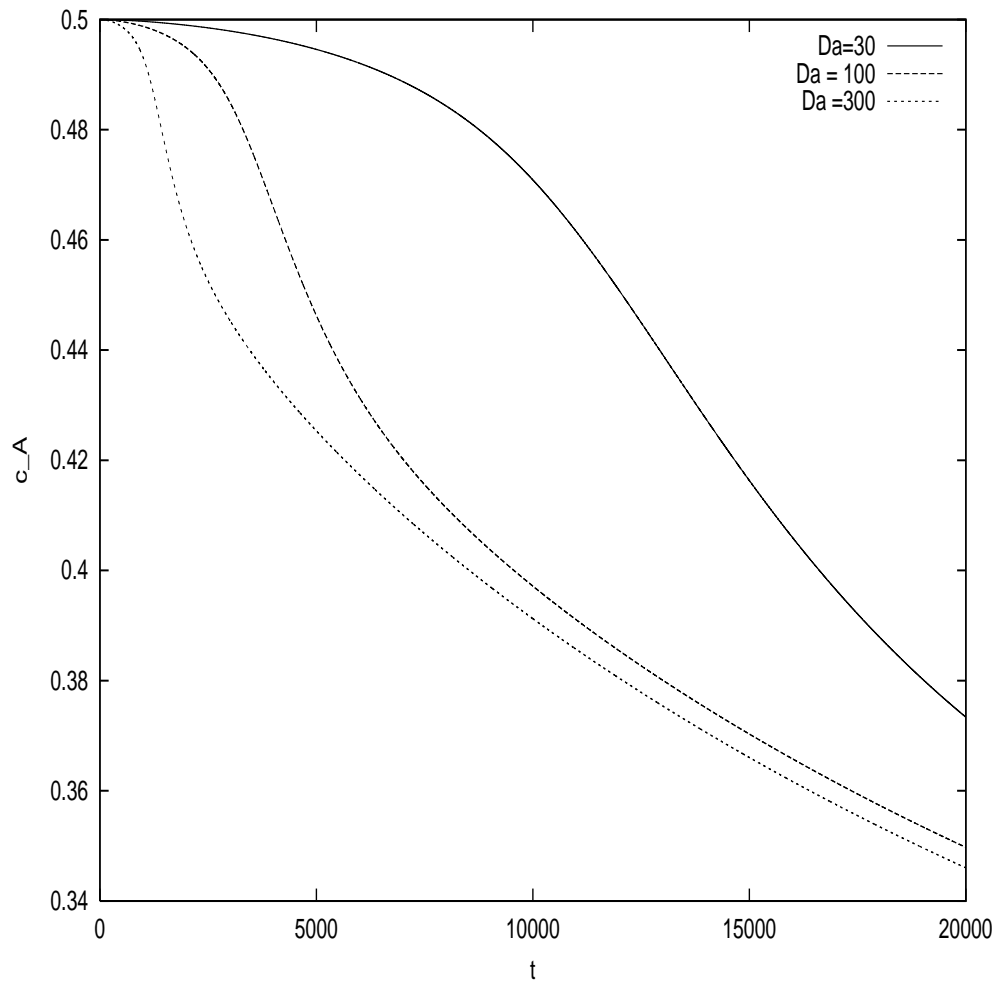


Figura 4.3: *Variação do reagente c_A para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$.*

Na Fig. 4.4 apresentamos os resultados da evolução da concentração c_A para $Re = 1000$, $Ze = 5$ and $Da = 30, 100, 300$. Observa-se que comparado com o comportamento de c_A , mostrado na Fig. 4.3 para $Re = 100$, a evolução do consumo de c_A , no mesmo intervalo de tempo diminui, o que significa que o aumento

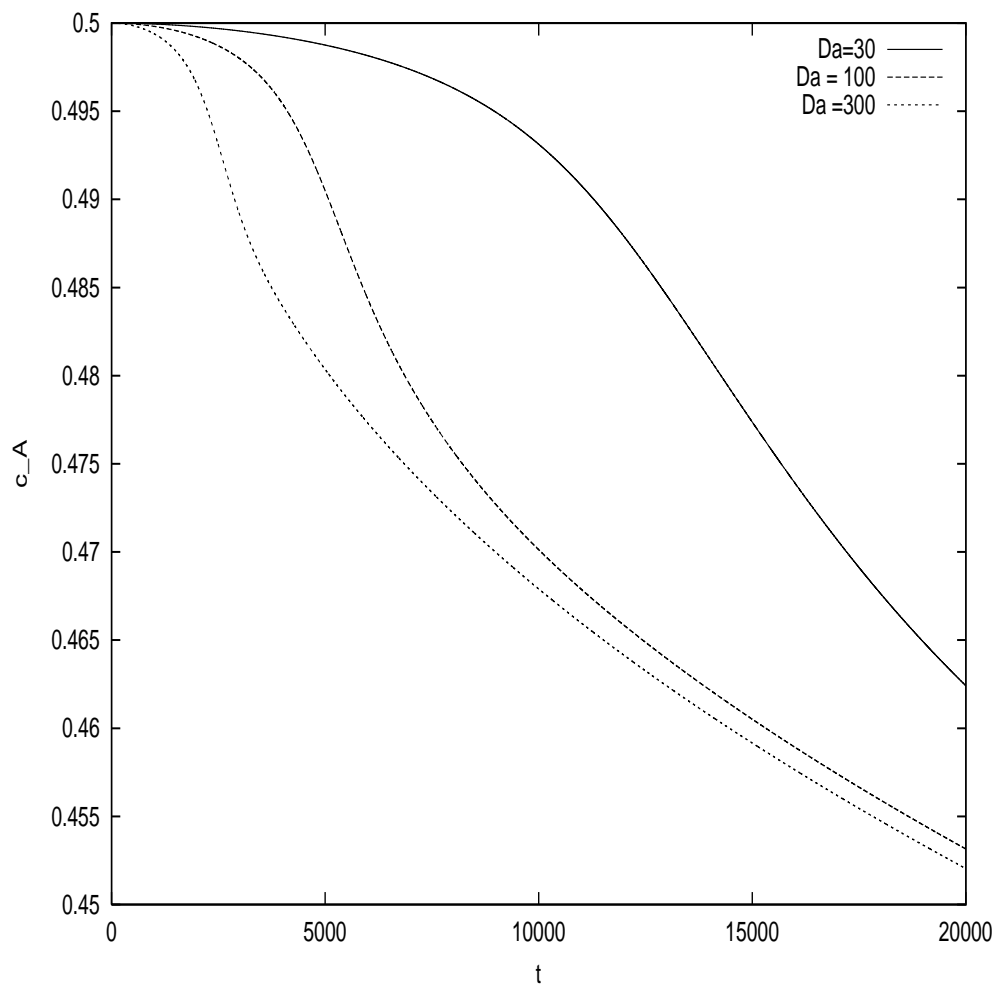


Figura 4.4: Variação da concentração c_A para $Re = 1000$, $Ze = 5$ and $Da = 30, 100, 300$.

significativo do número de Reynolds produz desaceleração na formação do produto da reação.

Na Fig. 4.5 apresenta-se a evolução da formação do produto durante o processo de mistura-difusão-reação para diferentes valores de Da e Re . No gráfico da esquerda consideramos $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$, e na direita $Re = 1000$, $Ze = 5$, e $Da = 30, 100, 300$. A formação do produto também é influenciada pela variação dos parâmetros Re e Da ; observe que para $Re = 100$ a concentração do produto P é menor que para $Re = 1000$. Isto é uma consequência

do fato que o aumento de Re origina que a transferência de massa entre os reagentes diminua.

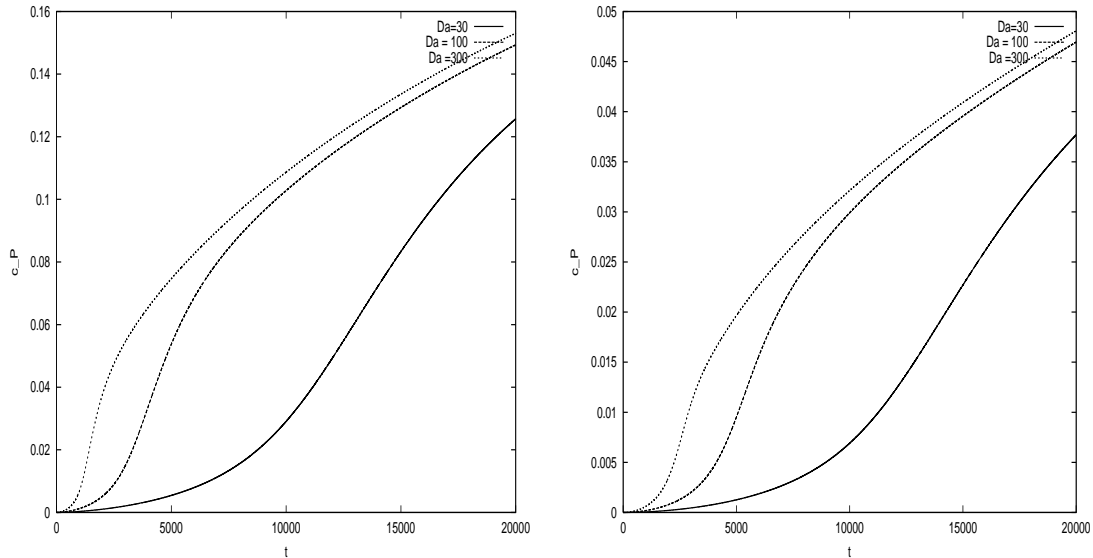


Figura 4.5: À esquerda mostra-se a evolução da formação do produto P , com concentração c_P , para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. Considerando os mesmos valores de Damköhler e Zel'dovich, o gráfico da direita mostra as variações da concentração c_P para $Re = 1000$.

Na Fig. 4.6 mostra-se a evolução da temperatura; no gráfico da esquerda tem-se sua evolução para $Re = 100$ e à direita para $Re = 1000$, considerando nos dois casos $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. Observe como a variação da temperatura é influenciada pela variação dos diferentes parâmetros do problema; note que para Damköhler relativamente "pequenos" origina-se um baixo incremento da temperatura, mas o incremento de Da produz aumento na difusão. Por outro lado, números de Reynolds relativamente baixos originam decaimento na difusão e transferência de temperatura.

Para finalizar, a Fig. 4.7 mostra o comportamento da taxa de reação resultante $r = Da(c_A c_B)e^{-Ze/T}$. Ao contrário dos reagentes, o produto e a temperatura, observe que a taxa de reação apresenta um comportamento inicial com um transiente mais pronunciado. Este transiente mostra um pico inicial mais pronunciado quando é aumentado o valor de Da . O transiente apresentado é possivelmente

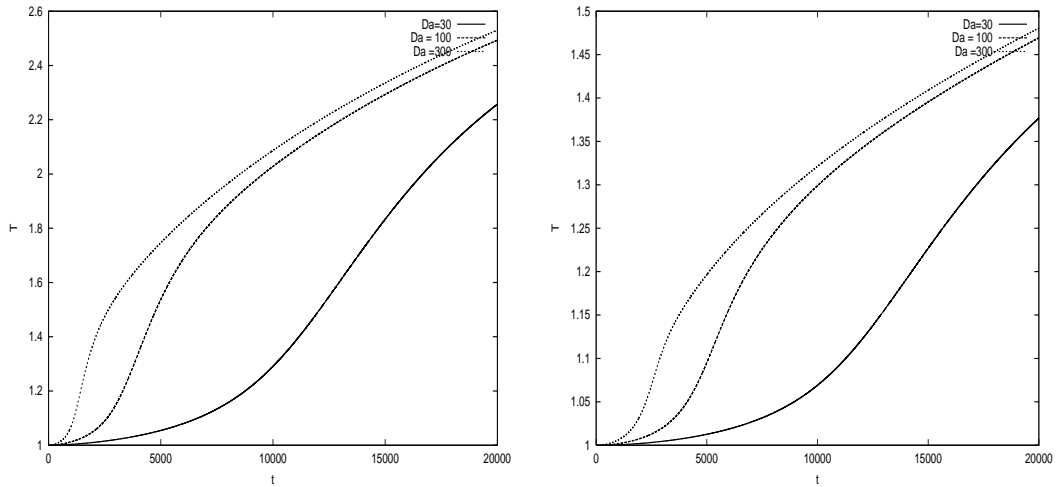


Figura 4.6: A Fig. da esquerda mostra a evolução da temperatura para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. Considerando $Re = 1000$, o grafo da direita mostra essas variações para os mesmos Damköhler e Zel'dovich.

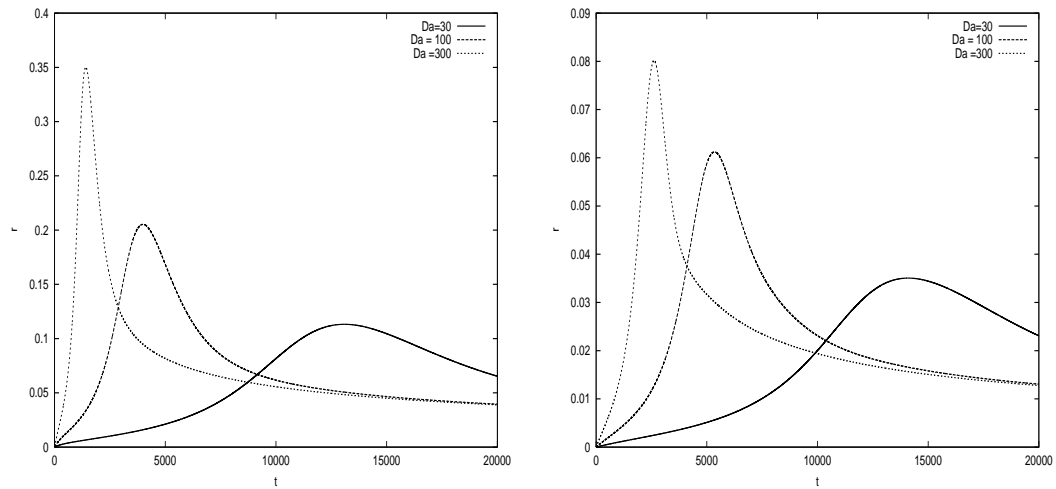


Figura 4.7: O gráfico da esquerda mostra a evolução da taxa de reação r para $Re = 100$, $Ze = 5$ e $Da = 30, 100, 300$. À direita apresenta-se as variações de r para $Re = 1000$ e os mesmos números de Damköhler e Zel'dovich.

consequência da condição inicial dada. Por outro lado, adiciona-se também que o aumento do Da produz aumento na taxa de reação e, ao mesmo tempo, acréscimo do consumo do reagente, aumento da temperatura e de formação do produto.

5 ESTIMATIVAS LOCAIS SEMI-DISCRETIZADAS

Existem diferentes métodos numéricos que permitem aproximar a solução de (3.28), tais como diferenças finitas, elementos finitos, (Galerkin), Colocação, mínimos quadrados, etc.; neste capítulo realizaremos um análise da aproximação entre a solução exata, \mathbf{y} , e a solução aproximada, $\tilde{\mathbf{y}}_h$, utilizando o método de elementos finitos. Para isto seguimos seguinte estratégia:

- a) Estabeleceremos a formulação variacional do problema (3.28) num espaço de Hilbert apropriado, \mathbf{V} .
- b) Substituiremos o problema (3.28) por um problema aproximado (problema semidiscreto), para o qual introduziremos um espaço de dimensão finita, \mathbf{S}_h (que depende do parâmetro h), chamado *espaço de elementos finitos*.
- c) Finalmente, estimaremos o erro local entre a solução exata e a aproximada (erro da solução exata com a de um problema semi-discreto).

Descrevemos, na continuação, as noções básicas do método de elementos finitos, estabelecendo apenas as definições e propriedades básicas que serão requeridas; os resultados utilizados são somente enunciados e para sua demonstração e diferentes aplicações pode-se consultar, por exemplo, Ciarlet [12], Strang and Fix, Hughes [32], Oxelsson-Baker [53], entre outros.

5.1 Elementos finitos

O método de elementos finitos permite aproximar a solução exata de um problema de valor inicial com valores na fronteira, e caracteriza-se por basear-se numa formulação variacional do problema. É um processo que consiste em construir espaços de dimensão finita, chamados *espaços de elementos finitos*, cujos elementos

são funções polinomiais. A construção destes espaços tem três aspectos básicos: uma triangulação do espaço domínio, uma base e um conjunto de polinômios definidos sobre cada elemento da triangulação.

Definição 5.1.1. *Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um domínio limitado, com fronteira $\partial\Omega$ suficientemente regular. Para cada $h > 0$, uma triangulação, \mathcal{T}_h , de $\bar{\Omega}$ é uma partição de $\bar{\Omega}$ em “triângulos” κ tais que,*

1. Para todo h , \mathcal{T}_h é um conjunto finito de “triângulos” fechados em $\bar{\Omega}$
2. $\cup_{\kappa \in \mathcal{T}_h} \kappa = \bar{\Omega}$
3. $h = \max \{h_\kappa : \kappa \in \mathcal{T}_h\}$ onde $h_\kappa = \text{diam}(\kappa)$ ¹
4. Se $\kappa_1, \kappa_2 \in \mathcal{T}_h$, $\kappa_1 \neq \kappa_2$, então $\kappa_1^\circ \cap \kappa_2^\circ = \emptyset$ e $\kappa_1 \cap \kappa_2 = \emptyset$ ou κ_1, κ_2 tem em comum só um lado ou só um vértice.

Definição 5.1.2. *Uma família de triangulações, $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$, é regular quando $h \rightarrow 0$, se existe uma constante $\sigma > 0$, independente de h e κ tal que*

$$\sigma_\kappa \leq \sigma \quad \text{para todo } \kappa \in \mathcal{T}_h,$$

onde $\sigma_\kappa = h_\kappa/\rho_\kappa$, com $\rho_\kappa = \sup \{\text{diam}(B) : B \text{ é uma bola contida em } \kappa\}$ e $h_\kappa = \text{diam}(\kappa)$.

Definição 5.1.3. *Uma família de triangulações é uniformemente regular conforme $h \rightarrow 0$, se existe uma constante $\sigma' > 0$ tal que*

$$\sigma' h \leq h_\kappa \leq \sigma \rho_\kappa \quad \text{para todo } \kappa \in \mathcal{T}_h$$

Definição 5.1.4. *Para cada inteiro fixo $m \geq 1$, o espaço de elementos finitos S_h , é um espaço de dimensão finita, definido por,*

$$S_h^m = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_\kappa \in \mathbb{P}_m \text{ para todo } \kappa \in \mathcal{T}_h \}$$

onde \mathbb{P}_m denota o conjunto de polinômios de grau menor ou igual a m .

¹ $\text{diam}(\kappa) = \text{diâmetro de } \kappa$

² $\kappa^\circ = \{x \in \kappa : x \text{ é ponto interior de } \kappa\}$

Observação 5.1.5. É importante fazer as seguintes observações sobre a teoria de elementos finitos; para maiores detalhes consultar Ciarlet [12], Girault e Raviart [23], Quarteroni [59], Thomée [72], Dautray-Lions [17].

- i) Uma vez construído o espaço de elementos finitos S_h , é necessário determinar uma base para ele, de tal maneira que permita representar os elementos de S_h de forma "relativamente" simples. Para isto, deve-se eleger um conjunto de pontos em cada $\kappa \in \mathcal{T}_h$ (denominados *graus de liberdade*), que permitam identificar de maneira única as funções no espaço \mathbb{P}_m . Isto estará em função do grau de polinômio que se considere para representar os elementos de S_h sobre cada $\kappa \in \mathcal{T}_h$.
- ii) Para o nosso problema consideraremos as funções $v_{h|\kappa} \in \mathbb{P}_1$ para todo $\kappa \in \mathcal{T}_h$, com $\mathbb{P}_1 = \{q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} : q(x_1, x_2) = \alpha x_1 + \beta x_2 + \gamma, \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}\}$. Observe que qualquer elemento de \mathbb{P}_1 fica bem definido e sua representação é única considerando os valores que assume nos três vértices de cada triângulo. Portanto, é suficiente considerar os valores sobre os vértices de cada triângulo κ , o que significa que temos três graus de liberdade sobre cada elemento $\kappa \in \mathcal{T}_h$.
- iii) Uma vez determinados os graus de liberdade e as funções que permitam expressar de maneira simples qualquer função em S_h , está-se em condições de definir os operadores de interpolação mediante os quais é possível obter estimativas para o erro entre a solução exata e a aproximada. Quando as funções a serem interpoladas satisfazem a condição (mínima) de serem contínuas, obtém-se estimativas ótimas para o erro nas normas de Sobolev. Porém, dado que nas diferentes aplicações nem sempre tem-se esta condição, introduz-se outros tipos de operadores de aproximação, tais como as projeções ortogonais sobre $L^2(\Omega)$ e $H^1(\Omega)$.

Se $\Sigma_h = \{N_j\}_{j=1}^{N_h}$ é o conjunto de vértices (ou nós) da triangulação \mathcal{T}_h , uma função $v_h \in S_h$ é determinada de maneira única par os valores que assume nos

pontos N_j e, desta forma, depende dos N_h parâmetros. Isto permite definir uma base:

Definição 5.1.6. Para cada $N_j \in \Sigma_h$ defina a função ϕ_i , tal que

$$\phi_i(N_j) = \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, \dots, N_h \quad (5.1)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Se $\mathcal{B}_h = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_h}\}$, com ϕ_i satisfazendo (5.1), então o espaço de elementos finitos S_h é tal que, $S_h = \text{span } \mathcal{B}_h$. Isto quer dizer, o conjunto \mathcal{B}_h é uma base para o espaço de elementos finitos S_h . Portanto, cada elemento $v_h \in V_h$ pode ser expresso na forma,

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^{N_h} v_h(N_i) \phi_i(x) \quad x \in \Omega.$$

5.1.0.1 Estimativas do erro

Enunciamos, na continuação, as estimativas ótimas de erro nas normas de Sobolev, estabelecidas para os operadores projeção e que serão usadas na estimativa do erro local na aproximação da solução do problema (3.28). Se $P_h^m : L^2(\Omega) \longrightarrow S_h^m$ e $R_h^m : H^1(\Omega) \longrightarrow S_h^m$ são projeções ortogonais, então (ver [59]):

1. Para todo $u \in H^{l+1}(\Omega)$ e $0 \leq l \leq m$, existe uma constante $C > 0$ tal que

$$\begin{aligned} & \|u - P_h^m u\|_{L^2(\Omega)} + \|u - R_h^m u\|_{L^2(\Omega)} \\ & \quad + h \left(\|u - P_h^m u\|_{H^1(\Omega)} + \|u - R_h^m u\|_{H^1(\Omega)} \right) \\ & \leq Ch^{l+1} \|u\|_{H^{l+1}(\Omega)} \end{aligned} \quad (5.2)$$

2. Como casos particulares de (5.2) tem-se que se $P_h^1 = P_h$ e $R_h^1 = R_h$,

- (a) $\|u - P_h u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^1(\Omega)}$

$$(b) \|u - P_h u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^2 \|u\|_{H^2(\Omega)}$$

$$(c) \|u - R_h u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch \|u\|_{H^1(\Omega)}$$

$$(d) \|u - R_h u\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^2 \|u\|_{H^2(\Omega)}$$

5.1.1 Aproximação de problemas parabólicos

Dado que o problema (3.22)-(3.26) é um problema parabólico não linear, descrevemos, na continuação, em forma geral, o tratamento deste tipo de problema usando elementos finitos.

Seja Ω um domínio limitado em \mathbb{R}^n com fronteira suave $\partial\Omega$, o problema semilinear parabólico com condições de fronteira de Neumann e condições iniciais consiste em encontrar u tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A(t, x, u)u = f(t, x, u) \quad \text{sobre }]0, \infty[\times \Omega \quad (5.3)$$

$$B(t, x, u) = g(t, x, u) \quad \text{sobre }]0, \infty[\times \partial\Omega \quad (5.4)$$

$$u(0, x) = u_0 \quad \text{sobre } \Omega \quad (5.5)$$

onde $u = (u_1, u_2, \dots, u_m)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$,

$$A(t, x, u) = - \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(t, x, u) \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + \sum_{i=1}^n b_j(t, x, u) \frac{\partial u}{\partial x_i}$$

$$B(t, x, u) = \sum_{i,j} a_{ij}(t, x, u) \eta_i \cdot \frac{\partial u}{\partial x_i}$$

com $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)$ o vetor unitário normal a $\partial\Omega$.

Segundo as condições que satisfazem a_{ij} , f , g e u_0 tem-se resultados de existência e unicidade da solução, assim como estimativas sobre a aproximação da solução usando os diferentes métodos analíticos e numéricos. Por exemplo, se $\partial\Omega \in C^\infty$ e as funções $a_{ij}, b_i, f, g \in C^\infty$ (definidas apropriadamente), com $g(t, x, 0) = 0$; e A é um operador elíptico sobre o espaço de Banach $W^{1,p}(\Omega)$, demonstra-se que o problema (5.3)-(5.5) tem uma única solução clássica maximal para cada $u_0 \in W^{1,p}(\Omega)$ ([3]). Além disso, assumindo a hipótese a priori que $\sup_{0 \leq t \leq \tau^*} \|u(t, u_0)\| <$

∞ , tem-se que (5.3)- (5.5) tem uma única solução global sobre cada intervalo de tempo $[0, \tau^*[$ com $\tau^* \leq \infty$. Resultados de estimativas para o erro de problemas parabólicos não lineares semi-discretizados utilizando o método de elementos finitos têm sido obtidos por Thomée [72], Johnson et.al [34], Yang [79], Gonzales et.al. [25], etc.

A formulação variacional do problema (5.3)-(5.5) consiste em encontrar $u \in V$, com V um espaço de Hilbert apropriado, tal que

$$\frac{d}{dt} \langle u(t), \phi \rangle + \langle A(t, x, u), \phi \rangle = \langle F(t, x, u), \phi \rangle \quad \text{para todo } \phi \in V \quad (5.6)$$

$$u(0, x, u) = u_0(x) \quad (5.7)$$

Para aproximar a solução de um problema da forma (5.3)-(5.5), é preciso discretizá-lo com respeito as variáveis espacial e temporal. Consideremos em particular (como é o caso do problema (3.22)-(3.26), que $n = 2$, $A(t, x, u) \equiv A(t)$, $f(t, x, u) \equiv f(u)$). A discretização espacial, usando o método de elementos finitos, que consiste em encontrar $u_h \in S_h \subset V$, com S_h o espaço de elementos finitos, tal que

$$\frac{d}{dt} \langle u_h(t), \phi_h \rangle + a(u_h(t), \phi_h) = \langle f(u), \phi_h \rangle \quad \text{para todo } \phi_h \in S_h \quad (5.8)$$

$$u_h(0) = u_{h0} \quad (5.9)$$

onde $a(u_h(t), \phi) = \langle u_h, \phi \rangle$ e u_{h0} é um elemento aproximado em V_h de u_0 . O problema (5.8)-(5.9) é chamado *aproximação semi discreta* (ou contínua no tempo) do problema (5.3)-(5.5).

Se $\mathcal{B} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_h}\}$ é uma base de V_h , então

$$u_h(t, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \phi_j(\mathbf{x}) \quad \text{para } t > 0$$

$$u_{h0}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_h} u_{0j}(t) \phi_j(\mathbf{x})$$

Substituindo estas igualdades em (5.8), temos que para todo $\phi_h \in S_h$,

$$\frac{d}{dt} \left\langle \sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \phi_j(\mathbf{x}), \phi_h \right\rangle + a \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \phi_j(\mathbf{x}), \phi_h \right) = \left\langle f \left(\sum_{j=1}^{N_h} u_j(t) \phi_j(\mathbf{x}) \right), \phi_h \right\rangle.$$

Fazendo, $\phi_h = \phi_j$ para cada $j = 1, 2, \dots, N_h$, a igualdade anterior é equivalente ao sistema de equações

$$\sum_{j=1}^{N_h} \langle \phi_j(\mathbf{x}), \phi_i(\mathbf{x}) \rangle \frac{d}{dt} u_j(t) + \sum_{j=1}^{N_h} a(\phi_j(\mathbf{x}), \phi_i(\mathbf{x})) u_j(t) = \sum_{j=1}^{N_h} \langle f, \phi_i(\mathbf{x}) \rangle$$

que na sua forma matricial torna-se,

$$M \frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} + A\mathbf{u}(t) = F(\mathbf{u}(t)) \quad (5.10)$$

onde $\mathbf{u} = [u_1(t) \ u_2(t) \ \dots \ u_{N_h}(t)]^t$, $M = (\langle \phi_j, \phi_i \rangle)_{ij}$ é chamada de matriz massa, $A = (A_{ij})$, com $A_{ij} = a(\phi_i, \phi_j)$ a matriz de rigidez e $F = \langle f(\mathbf{u}), \phi_j \rangle$, para $i, j = 1, n$. A solução de (5.10) é chamada solução semi-discreta do problema (5.6)-(5.7).

Para ter a discretização plena também deve-se discretizar no tempo; para isso, a derivada do problema pode ser discretizada utilizando os esquemas de diferenças de Euler (para trás ou para frente), de Crank-Nicolson, Adams-Brashfort ou o θ -esquema para $0 \leq \theta \leq 1$ (que para $\theta = 0$ e $\theta = 1$ corresponde aos métodos de Euler explícito e implícito, respectivamente) [59], [82].

Para o caso particular que estamos tratando, considere a partição do intervalo de tempo $[0, \tau^*]$ em N subintervalos $[t_n, t_{n+1}]$ para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ tais que $\Delta t = \tau = t_{n+1} - t_n = \tau^*/N$, com $t_0 = 0$ e $t_N = \tau^*$. Denotando por u_h^n a aproximação de $u(t)$ no instante de tempo t_n (observe que u_h^n é uma função no espaço de dimensão finita S_h). Então a discretização plena do problema (5.6), utilizando o θ -esquema, consiste em encontrar $u_h^n \in S_h$ tal que para todo $\phi_h \in S_h$,

$$\frac{1}{\tau} \langle u_h^{n+1} - u_h^n, \phi_h \rangle + a(\theta u_h^{n+1} + (1 - \theta) u_h^n, \phi_h) \quad (5.11)$$

$$= \langle \theta f(u_h^{n+1}), \phi_h + (1 - \theta) f(u_h^n, \phi_h) \rangle \quad (5.12)$$

de onde tem-se que, se $\theta = 1$, em cada passo de tempo deve-se resolver um sistema de equações lineares da forma:

$$(M + \theta\tau A) \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{b}^n$$

onde \mathbf{b}^n é considerado conhecido pelos passos prévios.

5.2 Formulação variacional

Agora, passamos a estabelecer a formulação variacional do problema (3.28), o que permitirá formular o problema discreto e, posteriormente, usando a teoria de elementos finitos, obter estimativas do erro entre as soluções exata e aproximada. Para isto, em primeiro lugar define-se o espaço de Hilbert \mathbf{S} , por

$$\mathbf{S} = \{y = (c_A, c_B, T) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)\}.$$

\mathbf{S} é um espaço de Hilbert. A formulação variacional do problema (3.28), que é equivalente ao sistema (3.22)- (3.26), consiste dado $(c_{0A}, c_{0B}, T_0) \in \mathbb{X}$ em obter $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \equiv (H^1(\Omega))^3$ tal que para todo $\phi \in H^1(\Omega)$:

$$\left\langle \frac{\partial c_A}{\partial t}, \phi \right\rangle + \langle \hat{v} \cdot \nabla c_A, \phi \rangle - \nu_A \langle \Delta c_A, \phi \rangle = \langle -\alpha_A c_A c_B e^{-Z e/T}, \phi \rangle \quad (5.13)$$

$$\left\langle \frac{\partial c_B}{\partial t}, \phi \right\rangle + \langle \hat{v} \cdot \nabla c_B, \phi \rangle - \nu_B \langle \Delta c_B, \phi \rangle = \langle -\alpha_B c_A c_B e^{-Z e/T}, \phi \rangle \quad (5.14)$$

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial t}, \phi \right\rangle + \langle \hat{v} \cdot \nabla T, \phi \rangle - \nu_T \langle \Delta T, \phi \rangle = \langle \alpha_T c_A c_B e^{-Z e/T}, \phi \rangle \quad (5.15)$$

e $\langle c_A(0), \phi \rangle = \langle c_{0A}, \phi \rangle$, $\langle c_B(0), \phi \rangle = \langle c_{0B}, \phi \rangle$ e $\langle T(0), \phi \rangle = \langle T_0, \phi \rangle$.

5.3 Estimativas locais

Se \mathbf{y} é a solução exata do problema (3.28) e $\tilde{\mathbf{y}}_h$ é a solução aproximada obtida da formulação do problema semi-discreto correspondente a (??), então se $\epsilon_h = \mathbf{y}_h - \mathbf{y}$ denota o erro entre a solução exata e a aproximada, definindo o operador projeção ortogonal sobre $L^2(\Omega)$, $P_h : L^2(\Omega) \rightarrow S_h$, tem-se que

$$\epsilon_h = \tilde{\mathbf{y}}_h - \mathbf{y} = \tilde{\mathbf{y}}_h - P_h \mathbf{y} + P_h \mathbf{y} - \mathbf{y}.$$

Nesta seção estabeleceremos uma estimativa do erro local do problema semi-discreto, tendo em conta as normas de Sobolev em $L^2(\Omega)$ (ver Heywood e Rannacher [30]). Para isto, em primeiro lugar formularemos o problema semi-discreto considerando o espaço de elementos finitos S_h descrito na seção 5.1 tal que $S_h \subset H^1(\Omega)$.

Definição 5.3.1. Seja $S_h = \{v_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) : v_h|_{\kappa} \in \mathbb{P}_1\}$, o operador de Laplace discreto é definido como $-\Delta_h : S_h \longrightarrow S_h$

$$\langle -\Delta_h \psi, \phi \rangle = \langle \nabla \psi, \nabla \phi \rangle \quad \text{para todo } \phi \in S_h.$$

Se P_H é o operador projeção ortogonal sobre $L^2(\Omega)$, $P_h : L^2(\Omega) \longrightarrow S_h$ consideraremos que a solução aproximada por elementos finitos $\tilde{\mathbf{y}}_h = (\tilde{c}_{hA}, \tilde{c}_{hB}, \tilde{T}_h)$ para a solução exata $\mathbf{y} = (c_A, c_B, T)$ satisfaz

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \tilde{c}_{Ah}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \tilde{c}_{Ah}, \phi_h \rangle - \nu_A \langle \Delta_h \tilde{c}_{Ah}, \phi_h \rangle &= \left\langle -\alpha_A P_h \tilde{f}_A, \phi_h \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial \tilde{c}_{Bh}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \tilde{c}_{Bh}, \phi_h \rangle - \nu_B \langle \Delta_h \tilde{c}_{Bh}, \phi_h \rangle &= \left\langle -\alpha_B P_h \tilde{f}_B, \phi_h \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial \tilde{T}_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \tilde{T}_h, \phi_h \rangle - \nu_T \langle \Delta_h \tilde{T}_h, \phi_h \rangle &= \left\langle \alpha_T P_h \tilde{f}_T, \phi_h \right\rangle \end{aligned} \quad (5.16)$$

para todo $\phi_h \in S_h$, $\tilde{f}_A = \tilde{f}_B = \tilde{f}_T = \tilde{c}_{Ah} \tilde{c}_{Bh} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}$, $\tilde{c}_{Ah}(0) = \tilde{c}_{Ah_0}$, $\tilde{c}_{Bh}(0) = \tilde{c}_{Bh_0}$ e $\tilde{T}_h(0) = \tilde{T}_{h_0}$, com \tilde{c}_{Ah_0} , \tilde{c}_{Bh_0} e \tilde{T}_{h_0} as projeções de c_{A0} , c_{B0} e T_0 no espaço S_h , respectivamente. No sistema (5.16) (chamado *problema semi-discreto* de (3.28)), $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual no espaço $L^2(\Omega)$.

Observação 5.3.2. Seja $P_h : L^2(\Omega) \longrightarrow S_h$ o operador projeção. A projeção da solução do problema (5.13)-(5.15) satisfaz

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial c_{Ah}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_{Ah}, \phi_h \rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_{Ah}^\perp, \phi_h \rangle - \nu_A \langle \Delta_h c_{Ah}, \phi_h \rangle &= \langle P_h f_A, \phi_h \rangle \\ \left\langle \frac{\partial c_{Bh}}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_{Bh}, \phi_h \rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_{Bh}^\perp, \phi_h \rangle - \nu_B \langle \Delta_h c_{Bh}, \phi_h \rangle &= \langle P_h f_B, \phi_h \rangle \\ \left\langle \frac{\partial T_h}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T_h, \phi_h \rangle + \langle P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla T_h^\perp, \phi_h \rangle - \nu_T \langle \Delta T_h, \phi_h \rangle &= \langle P_h f_T, \phi_h \rangle \end{aligned} \quad (5.17)$$

com $(c_{hA}(0), c_{hB}(0), T_h(0)) = (P_h c_{A0}, P_h c_{B0}, P_h T_0)$ e onde

$$\begin{aligned} f_A &= -\alpha_A (c_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (c_{Bh} + c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} \\ f_B &= -\alpha_B (c_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (c_{Bh} + c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} \\ f_T &= \alpha_T (c_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (c_{Bh} + c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + T_h^\perp|} \end{aligned}$$

Observamos que se $c_A, c_B, T \in L^2(\Omega)$, então existem funções $c_{Ah}, c_{Bh}, T_h \in P_h(L^2(\Omega))$ e funções $c_{Ah}^\perp, c_{Bh}^\perp, T_h^\perp \in (I - P_h)(L^2(\Omega))$ tais que

$$\begin{aligned} c_A &= P_h c_A + (I - P_h) c_A \equiv c_{Ah} + c_{Ah}^\perp \\ c_B &= P_h c_B + (I - P_h) c_B \equiv c_{Bh} + c_{Bh}^\perp \\ T &= P_h T + (I - P_h) T \equiv T_h + T_h^\perp. \end{aligned}$$

Observação 5.3.3. Seja \tilde{f}_i , e f_i como no problema (5.16) e na observação 5.3.2 para $i \in \{A, B, T\}$, respectivamente. Se $w_A = c_{Ah} - \tilde{c}_{Ah}$, $w_B = c_{Bh} - \tilde{c}_{Bh}$ e $w_T = T_h - \tilde{T}_h$, então

$$\begin{aligned} f_i - \tilde{f}_i &= \pm \alpha_i (w_A w_B + w_A \tilde{c}_{Bh} + w_A c_{Bh}^\perp + w_B \tilde{c}_{Ah} + \tilde{c}_{Ah} \tilde{c}_{Bh} + \tilde{c}_{Ah} c_{Bh}^\perp \\ &\quad + w_B c_{Ah}^\perp + c_{Ah}^\perp \tilde{c}_{Bh} + c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \\ &\quad - \alpha_i c_A c_B \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right), \end{aligned}$$

onde o sinal + corresponde a $i = T$.

Observamos somente o caso para $i = A$; o desenvolvimento para $i = B, T$ é análogo. Sejam

$$w_A = c_{Ah} - \tilde{c}_{Ah}, \quad w_B = c_{Bh} - \tilde{c}_{Bh}, \quad \text{e} \quad w_T = T_h - \tilde{T}_h$$

então

$$\begin{aligned} f_A - \tilde{f}_A &= -\alpha_A (c_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (c_{Bh} + c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h + \tilde{T}_h^\perp|} + \alpha_A \tilde{c}_{Ah} \tilde{c}_{Bh} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \\ &= -\alpha_A \left\{ [(w_A + \tilde{c}_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (w_B + \tilde{c}_{Bh} + c_{Bh}^\perp) - \tilde{c}_{Ah} \tilde{c}_{Bh}] e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right. \\ &\quad \left. + (w_A + \tilde{c}_{Ah} + c_{Ah}^\perp) (w_B + \tilde{c}_{Bh} + c_{Bh}^\perp) \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \right\} \\ &= -\alpha_A \left[(w_A w_B + w_A \tilde{c}_{Bh} + w_A c_{Bh}^\perp + w_B \tilde{c}_{Ah} + \tilde{c}_{Ah} \tilde{c}_{Bh} + \tilde{c}_{Ah} c_{Bh}^\perp + w_B c_{Ah}^\perp \right. \\ &\quad \left. + c_{Ah}^\perp \tilde{c}_{Bh} + c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} + c_A c_B \left(e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right) \right] \end{aligned}$$

Lema 5.3.4. Se

$$\varphi(T) = \begin{cases} e^{-Ze/|T|}, & \text{if } T \neq 0 \\ 0, & \text{if } T = 0 \end{cases},$$

então existe uma constante $CT > 0$ tal que

$$|\varphi(T_2) - \varphi(T_1)| \leq \frac{C}{Ze} |T_2 - T_1|$$

Demonstração. Se $T_2 > T_1 \geq 0$, então

$$\begin{aligned} \varphi(T_2) - \varphi(T_1) &= e^{-Ze/T_2} - e^{-Ze/T_1} \\ &= \int_{T_1}^{T_2} \frac{d}{dT} e^{-Ze/T} dT = \int_{T_1}^{T_2} \frac{Ze}{T^2} e^{-Ze/T} dT \\ &= \frac{1}{Ze} \int_{T_1}^{T_2} \frac{(Ze)^2}{T^2} e^{-Ze/T} dT. \end{aligned}$$

Desta forma, existe uma constante $C > 0$ tal que,

$$|\varphi(T_2) - \varphi(T_1)| \leq \frac{C}{Ze} |T_2 - T_1|$$

Observação 5.3.5. De 5.3.3 e 5.3.4 obtém-se, respectivamente, que:

1.

$$\begin{aligned} &\langle P_h f_A - P_h \tilde{f}_{Ah}, \phi_h \rangle \\ &= \alpha_A \left[\langle P_h w_{ACB} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle + \langle P_h c_A w_{BE} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \right. \\ &\quad - \langle P_h w_A w_{BE} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle + \langle P_h c_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\ &\quad - \langle P_h c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle - \langle P_h w_{ACB} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\ &\quad + \langle P_h c_{Ah}^\perp c_{BE} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle - \langle P_h c_{Ah}^\perp w_{BE} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \rangle \\ &\quad \left. - \langle P_h c_{ACB} (e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), \phi_h \rangle \right] \end{aligned}$$

2. Existe uma constante $C > 0$ tal que

$$\begin{aligned} \left| e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|} \right| &\leq \frac{C}{Ze} \left| |w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp| - |\tilde{T}_h| \right| \\ &\leq \frac{C}{Ze} |w_T + T_h^\perp| \end{aligned}$$

O seguinte Teorema é o resultado principal deste capítulo. Utilizando normas de Sobolev no espaço $L^2(\Omega)$ e a desigualdade de Gronwall, estabelecemos uma estimativa do erro local, assumindo que a solução $\mathbf{y} \in H^2(\Omega)$.

Teorema 5.3.6. *Seja \mathbf{y} a solução do problema (5.13)-(5.15), $\tilde{\mathbf{y}}_h$ a solução do problema (5.16) e assumamos que $\mathbf{y} \in H^2(\Omega)$. Então existe uma constante $\tilde{C} \equiv \tilde{C}(t, \mathbf{y})$ tal que*

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\| \leq \tilde{C}h \quad (5.18)$$

Demonstração. Se

$$P_h : L^2(\Omega) \longrightarrow S_h$$

é o operador projeção, então

$$\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h = \mathbf{y} - P_h\mathbf{y} + P_h\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h,$$

de onde tem-se que

$$\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\mathbf{y} - P_h\mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)} + \|P_h\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\|_{L^2(\Omega)}.$$

Da subsecção 5.1.0.1 temos que existe uma constante $C_1 > 0$ tal que

$$\|P_h\mathbf{y} - \mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1h \|\mathbf{y}\|_{H^1(\Omega)} \quad \text{e} \quad \|P_h\mathbf{y} - \mathbf{y}\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1h^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)},$$

portanto, para demonstrar o teorema é suficiente demonstrar que existe $\tilde{C}_1 \equiv \tilde{C}_1(t, \mathbf{y})$ tal que

$$\|P_h\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}_h\|_{L^2(\Omega)} \leq \tilde{C}_1h.$$

Assim, se $\mathbf{w} = (w_A, w_B, w_T)$, onde

$$w_A = c_{Ah} - \tilde{c}_{Ah}, \quad w_B = c_{Bh} - \tilde{c}_{Bh}, \quad \text{e} \quad w_T = T_h - \tilde{T}_h$$

subtraindo as correspondentes equações de (5.17) e (5.16), obtém-se

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w_A}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla w_A, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla c_{Ah}^\perp, \phi_h \rangle \\ - \nu_A \langle \Delta_h w_A, \phi_h \rangle = \left\langle P_h(f_A - \tilde{f}_A), \phi_h \right\rangle \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w_B}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla w_B, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla c_{Bh}^\perp, \phi_h \rangle \\ - \nu_B \langle \Delta_h w_B, \phi_h \rangle = \left\langle P_h(f_B - \tilde{f}_B), \phi_h \right\rangle \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w_T}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla w_T, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla T_h^\perp, \phi_h \rangle \\ - \nu_T \langle \Delta_h w_T, \phi_h \rangle = \left\langle P_h(f_T - \tilde{f}_T), \phi_h \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Após substituir a igualdade dada pela equação (1) da observação 5.3.5 na equação (5.19), obtemos

$$\begin{aligned}
& \left\langle \frac{\partial w_A}{\partial t}, \phi_h \right\rangle + \langle P_h v \cdot \nabla w_A, \phi_h \rangle + \langle P_h v \cdot \nabla c_{Ah}^\perp, \phi_h \rangle - \langle \nu_A \Delta_h w_A, \phi \rangle \\
&= -\alpha_A \left[\left\langle P_h w_{ACB} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h c_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \right. \\
&\quad - \left\langle P_h w_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle + \left\langle P_h c_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&\quad - \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h w_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&\quad + \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle - \left\langle P_h c_{Ah}^\perp w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, \phi_h \right\rangle \\
&\quad \left. - \left\langle P_h c_A c_B (e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), \phi_h \right\rangle \right]. \tag{5.22}
\end{aligned}$$

Agora, fazendo $w_A = \phi_h$ na equação (5.22) resulta a identidade de energia:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w_A\|^2 + \langle P_h v \cdot \nabla c_{Ah}^\perp, w_A \rangle + \nu_A \|\nabla w_A\|^2 \\
&= -\alpha_A \left[\left\langle P_h w_{ACB} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle + \left\langle P_h c_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle \right. \\
&\quad - \left\langle P_h w_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle + \left\langle P_h c_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle \\
&\quad + \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle - \left\langle P_h w_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle \\
&\quad + \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle - \left\langle c_{Ah}^\perp w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_A \right\rangle \\
&\quad \left. + \left\langle P_h c_A c_B (e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_A \right\rangle \right] \tag{5.23}
\end{aligned}$$

Analogamente, para as equações (5.20), (5.21), fazendo $w_B = \phi_h$ e $w_T = \phi_h$, respectivamente, temos que

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w_B\|^2 + \langle P_h v \cdot \nabla c_{Bh}^\perp, w_B \rangle + \nu_B \|\nabla w_B\|^2 \\
&= -\alpha_B \left[\left\langle P_h w_{ACB} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle + \left\langle P_h c_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle \right. \\
&\quad - \left\langle P_h w_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle + \left\langle P_h c_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle \\
&\quad + \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle - \left\langle P_h w_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle \\
&\quad + \left\langle P_h c_{Ah}^\perp c_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle - \left\langle c_{Ah}^\perp w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}, w_B \right\rangle \\
&\quad \left. + \left\langle P_h c_A c_B (e^{-Ze/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_B \right\rangle \right] \tag{5.24}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w_T\|^2 + \langle P_h v \cdot \nabla T_h^\perp, w_T \rangle + \nu_T \|\nabla w_T\|^2 \\
&= -\alpha_T \left[\langle P_h w_A c_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle + \langle P_h c_A w_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \right. \\
&\quad - \langle P_h w_A w_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle + \langle P_h c_A c_B^\perp e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
&\quad + \langle P_h c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle - \langle P_h w_A c_{Bh}^\perp e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
&\quad + \langle P_h c_{Ah}^\perp c_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle - \langle c_{Ah}^\perp w_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}, w_T \rangle \\
&\quad \left. + \langle P_h c_A c_B (e^{-Z_e/|w_T + \tilde{T}_h + T_h^\perp|} - e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}), w_T \rangle \right] \tag{5.25}
\end{aligned}$$

Agora, utilizando o fato que $0 \leq \|c_i\| \leq 1$ para $i = A, B$, $|e^{-Z_e/|T|}| \leq 1$, a observação 5.3.5, a desigualdade de Young e as estimativas de erro estabelecidas na subseção (5.1.0.1), para os termos do segundo membro de (5.23)-(5.25), tem-se que existem constantes $\sigma, C, C', C_1, C_2, C_3, C_4, C_5$ tais que:

i)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \langle P_h(w_A c_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}), w_j \rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(w_A c_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} |w_A| |c_B| |w_j| dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|w_A\| \|w_j\| \\
&= \sigma \|\mathbf{w}\|^2, \quad \sigma = \max_j |\alpha_j|
\end{aligned}$$

ii)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \langle P_h(c_A w_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}), w_j \rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(c_A w_B e^{-Z_e/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,b,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} |w_B| |w_j| dx \\
&\leq \sum_{j=A,b,T} |\alpha_j| \|w_B\| \|w_j\| \leq \sigma \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

iii)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(w_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(w_A w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|w_A\|_{L^4(\Omega)} \|w_B\|_{L^4(\Omega)} \|w_j\| dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)}^2 \|w_j\| \\
&\leq \sigma C' (\|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \|\mathbf{w}\| \\
&= \sigma C' (\|\nabla \mathbf{w}\|^2 \|\mathbf{w}\| + \|\mathbf{w}\|^3)
\end{aligned}$$

iv)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(c_A c_{Bh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(c_A c_{Bh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} |c_{Bh}^{\perp}| |w_j| dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|c_{Bh}^{\perp}\| \|w_j\| \\
&\leq \sigma C h^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} h^4 + \frac{C^2 \sigma^2}{2\epsilon} \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

v)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(c_{Ah}^{\perp} c_{Bh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(c_{Ah}^{\perp} c_{Bh}^{\perp} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|c_{Ah}^{\perp}\|_{L^4(\Omega)} \|c_{Bh}^{\perp}\|_{L^4(\Omega)} \|w_j\| dx \\
&\leq \sigma C C_1 h^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \sigma C_1 h^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} h^4 + \frac{1}{2\epsilon} C_1^2 \sigma^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^4 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

vi)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(w_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(w_A c_{Bh}^\perp e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} |w_A| |c_{Bh}^\perp| |w_j| dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|w_A\|_{L^4(\Omega)} \|c_{Bh}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|w_j\| \\
&\leq \sigma C' \|c_{Bh}^\perp\|_{H^1(\Omega)} \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \sigma C_2 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} (\|\nabla \mathbf{w}\| + \|\mathbf{w}\|) \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \sigma C_2 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{w}\| \|\mathbf{w}\| + \sigma C_2 h \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} h^2 \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2\epsilon} C_2^2 \sigma^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + \sigma C_2 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

vii)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(c_{Ah}^\perp c_{Bh} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(c_{Ah}^\perp c_{Bh} e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \|c_{Ah}^\perp\| \|w_j\| dx \\
&\leq \sigma C h^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} h^4 + \frac{1}{2\epsilon} \sigma^2 C^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

viii)

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(c_{Ah}^\perp w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}), w_j \right\rangle &= \sum_{j=A,B,T} \alpha_j \int_{\Omega} P_h(c_{Ah}^\perp w_B e^{-Ze/|\tilde{T}_h|}) w_j dx \\
&\leq \sigma \|c_{Ah}^\perp\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\|_{L^4(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \sigma C_3 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\nabla \mathbf{w}\| \|\mathbf{w}\| + \sigma C_3 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} h^2 \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2\epsilon} C_3^2 \sigma^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + \sigma C_3 h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

ix)

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=A,B,T} \left\langle P_h(c_A c_B (e^{\frac{-Ze}{|w_T + \hat{T}_h + T_h^\perp|}} - e^{\frac{-Ze}{|\hat{T}_h|}})), w_j \right\rangle \\
& \leq \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} |c_A| |c_B| \left| (e^{\frac{-Ze}{|w_T + \hat{T}_h + T_h^\perp|}} - e^{\frac{-Ze}{|\hat{T}_h|}}) \right| |w_j| dx \\
& \leq \frac{C_T}{Ze} \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \int_{\Omega} (|w_T| |w_j| + |T_h^\perp| |w_j|) dx \\
& \leq \frac{C_T}{Ze} \sum_{j=A,B,T} |\alpha_j| \left(\int_{\Omega} |w_T| |w_j| dx + \int_{\Omega} |T_h^\perp| |w_j| dx \right) \\
& \leq \frac{C_T \sigma}{Ze} \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{\epsilon C_T}{2Ze} h^4 + \frac{1}{2\epsilon(Ze)^2} \sigma^2 C_4 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned}
\sum_{j=A,B,T} \langle P_h v \cdot \nabla c_{jh}^\perp, w_j \rangle &= \sum_{j=A,B,T} \int_{\Omega} P_h \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla c_{jh}^\perp w_j dx \\
&\leq \|\hat{\mathbf{v}}\|_\infty \sum_{j=A,B,T} \|\nabla c_{jh}^\perp\| \|w_j\| dx \\
&\leq C_5 \|\hat{\mathbf{v}}\|_\infty h \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)} \|\mathbf{w}\| \\
&\leq \frac{\epsilon}{2} \|\hat{\mathbf{v}}\|_\infty^2 h^2 + \frac{1}{2\epsilon} C_5^2 \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)}^2 \|\mathbf{w}\|^2
\end{aligned}$$

Desta forma, se $\nu_* = \min \{\nu_A, \nu_B, \nu_T\}$ e $\mathbf{w} = (w_A, w_B, w_T)$, utilizando as desigualdades obtidas nos sistema (5.19)-(5.21) temos que,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + \nu_* \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq \gamma_1 \|\mathbf{w}\|^2 + \gamma_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \gamma_2 \|\mathbf{w}\|^3 + \epsilon h^2 \|\nabla \mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + \epsilon_* h^4 + \frac{\epsilon}{2} \|v\|_\infty^2 h^2.
\end{aligned}$$

onde $\gamma_1 \equiv \gamma_1(\sigma, \epsilon, C, C', C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, Ze, C_T, \|\mathbf{y}\|, \|\mathbf{y}\|_{H^2(\Omega)})$, $\gamma_2 = \sigma C'$, $\epsilon_* = \epsilon(1 + C_T/2Ze)$.

Agora, para ϵ e h suficientemente pequenos e $\nu_* > \epsilon h^2$, se $\nu_{**} = \nu_* - \epsilon h^2$, então

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + \nu_{**} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq \gamma_1 \|\mathbf{w}\|^2 \\
&\quad + \gamma_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + \gamma_2 \|\mathbf{w}\|^3 + \epsilon_* h^4 + \frac{\epsilon}{2} \|v\|_\infty^2 h^2. \tag{5.26}
\end{aligned}$$

Por outro lado, o termo $2\epsilon h^4$ pode ser desprezado, desde que seja pequeno se comparado com $\frac{\epsilon}{2} \|v\|_\infty^2 h^2$. Então, fazendo $\gamma_3 = \frac{1}{2}\epsilon \|v\|_\infty^2 h^2 + \epsilon_* h^2$ a equação (5.26) toma a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + 2\nu_{**} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 &\leq 2\gamma_1 \|\mathbf{w}\|^2 \\ &+ 2\gamma_2 \|\mathbf{w}\| \|\nabla \mathbf{w}\|^2 + 2\gamma_2 \|\mathbf{w}\|^3 + 2\gamma_3 h^2 \end{aligned} \quad (5.27)$$

Utilizando a teoria de inequações diferenciais [29] tem-se que para cada (h, τ) existe um intervalo inicial $[0, s]$ tal que para todo $t \in [0, s]$,

$$\|\mathbf{w}\| \leq \frac{\nu_{**}}{2\gamma_2}. \quad (5.28)$$

Então, de (5.27), sobre $[0, s]$ tem-se que

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 + \nu_{**} \|\nabla \mathbf{w}\|^2 \leq 2\gamma_4 \|\mathbf{w}\|^2 + 2\gamma_3 h^2, \quad (5.29)$$

onde $\gamma_4 = (\gamma_1 + \nu_{**}/2)$.

Finalmente, a desigualdade (5.29) é equivalente a,

$$\frac{d}{dt} \|\mathbf{w}\|^2 \leq 2\gamma_4 \|\mathbf{w}\|^2 + 2\gamma_3 h^2. \quad (5.30)$$

Usando o Lema de Gronwall, de (5.30), resulta que

$$\|\mathbf{w}\|^2 \leq 2\gamma_3 h^2 \int_0^t e^{-\int_t^s 2\gamma_4 dr} ds = \frac{\gamma_3}{\gamma_4} (e^{2\gamma_4 t} - 1) h^2, \quad (5.31)$$

Assim se, $\gamma(t) = \frac{\gamma_3}{\gamma_4} (e^{2\gamma_4 t} - 1)$, então

$$\|\mathbf{w}(t)\|^2 \leq \gamma(t) h^2. \quad (5.32)$$

Considerando h_* suficientemente pequeno, de tal maneira que

$$\sqrt{\gamma(\tau)} h \leq \frac{\nu_{**}}{2\gamma_2} \quad (5.33)$$

para (h, τ) com $h < h_*$ tem-se que $\|\mathbf{w}\| \leq \frac{\nu_{**}}{2\gamma_2}$; pois no caso contrário a desigualdade (5.27) seria falsa, o qual é uma contradição.

Segue-se que se $\tilde{C}_1 = \sqrt{\gamma(\tau)}$

$$\|\mathbf{w}(t)\| \leq \tilde{C}_1 h \quad \text{para cada } t \in [0, \tau^*]. \quad (5.34)$$

Por tanto existe \tilde{C} tal que $\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\| \leq \tilde{C}h$.

Observação 5.3.7. É importante mencionar que a estimativa de erro local obtido é de ordem h para t pequeno. Se t não é suficientemente pequeno, em geral a estimativa do erro aumenta exponencialmente. Na seguinte seção estabeleceremos estimativas do erro global usando *shadowing* finito.

6 A POSTERIORI SHADOWING FINITO

Por conveniência e simplicidade, tratamos aqui a discretização plena, considerando um problema simplificado de Euler para trás na formulação de elementos finitos; isto para ficar dentro do contexto das aproximações internas. Observamos a equivalência da formulação do Laplaciano discreto de cinco pontos e a formulação em elementos finitos de primeira ordem (Glowinski [24]). Esta equivalência, no caso não linear, não é muito clara, mas observamos que essencialmente leva à introdução de novos erros locais, como será evidente na natureza das demonstrações a seguir. Em trabalho futuro, propomos estender as estimativas aqui obtidas, utilizando o método de Runge-Kutta de três estágios e desenvolver as simulações no contexto de elementos finitos.

6.1 Erro global e shadowing

Um dos métodos para obter a estimativa do erro global da solução aproximada de equações diferenciais não lineares com interesse dinâmico é o *shadowing*, cuja teoria baseia-se no fato que em geral os sistemas dinâmicos apresentam uma dependência muito sensível das condições iniciais; pois, pequenas mudanças em qualquer ponto da órbita produz uma nova órbita que tende a divergir exponencialmente da órbita original, produzindo-se uma quantidade grande de soluções diferentes em pequenos intervalos de tempo. Dado que todo método numérico introduz pequenas perturbações originadas dos erros de truncamento e arredondamento, a pergunta natural é como esses erros afetam a validade dos resultados numéricos ([11], [52], [19], [27], [26], [15], [40]). A idéia de *shadowing* é simples, pois substitui a solução exata por uma verdadeira trajetória, de um sistema dinâmico, muito perto da trajetória numérica.

O shadowing é um ramo da teoria de sistemas dinâmicos que leva a demonstrar que frente à acumulação exponencial de pequenos erros, as soluções

numéricas tem alguma validade. Isto se faz mostrando que para qualquer solução particular calculada (a solução "ruidosa"), existe uma "solução verdadeira" com condições iniciais ligeiramente diferentes que permanece uniformemente muito perto da solução calculada. Se esta solução existe, é chamada *shadow verdadeiro* da solução calculada. Uma aproximação ao verdadeiro *shadowing* é o *shadowing numérico*.

Pilyugin [56] apresenta uma descrição detalhada do uso de shadowing para o estudo de sistemas dinâmicos. Hayes [27] desenvolve um método para provar a existência de "shadows" em tempo finito na integração numérica de equações diferenciais ordinárias. No tratamento de sistemas de equações de difusão-reação, Larson e Sanz-Serna [40] usam a teoria de "shadowing" para obter estimativas do erro global nas normas de L^2 e H^1 na aproximação da solução de problemas parabólicos não lineares, Bruno et.al [5] utilizam o shadowing no processamento paralelo como um artifício para os defeitos na tolerância dos sistemas. Por outro lado, no artigo [52] Ostermann-Palencia apresentam resultados de shadowing para sistemas parabólicos não autônomos estabelecendo estimativas de erro para tempos longos, considerando a equação de evolução abstrata da forma

$$y'(t) = A(t)y(t) + f(t) \quad (6.1)$$

$$y(0) = y_0 \quad (6.2)$$

onde $y : [0, \tau^*] \rightarrow X$, com X espaço de Banach complexo. Para obter seus resultados Ostermann e Palencia adotam certas hipóteses para o operador $A(t)$ definido no espaço X , demonstrando que se y_n é a aproximação numérica da solução do problema (6.1)- 6.2 no tempo $t_n = \tau n$, então existe uma nova solução w de (6.1), e uma constante C que não depende de τ^* tal que

$$\max_{0 \leq n \leq N} \|w(t_n) - y_n\| \leq C\tau$$

Estabelecendo hipóteses a posteriori sobre e segundo as idéias de Ostermann e Palencia [52] usamos shadowing finito a posteriori para estimar o erro global do problema (3.22)-(3.26).

6.2 Formulação do problema

Levando em conta o problema (3.28) e considerando o operador projeção $P_h : L^2(\Omega) \longrightarrow S_h$, onde S_h é o espaço de elementos finitos, observamos que $\mathbf{y}_h = P_h \mathbf{y}$ satisfaz

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{y}_h &= \mathbf{A}_h(t) \mathbf{y}_h + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h) + \mathbf{H}_h(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y}_h(0) &= P_h(\mathbf{y}_0) \end{aligned} \quad (6.3)$$

onde (expressado em forma matricial),

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_h(t) \mathbf{y}_h &= P_h \begin{bmatrix} \nu_A \Delta_h - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla & 0 & 0 \\ 0 & \nu_B \Delta_h - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla & 0 \\ 0 & 0 & \nu_T \Delta_h - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{Ah} \\ c_{Bh} \\ T_h \end{bmatrix} \\ \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h) &= P_h \begin{bmatrix} -\alpha_A c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \\ -\alpha_B c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \\ \alpha_T c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \end{bmatrix} \\ \mathbf{H}_h(\mathbf{y}) &= P_h \begin{bmatrix} -\alpha_A (c_{Ah} c_{Bh} + c_{Ah} c_{Bh}^\perp + c_{Ah}^\perp c_{Bh} + c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h+T_h^\perp|} + \alpha_A c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \\ -\alpha_B (c_{Ah} c_{Bh} + c_{Ah} c_{Bh}^\perp + c_{Ah}^\perp c_{Bh} + c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h+T_h^\perp|} + \alpha_B c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \\ \alpha_T (c_{Ah} c_{Bh} + c_{Ah} c_{Bh}^\perp + c_{Ah}^\perp c_{Bh} + c_{Ah}^\perp c_{Bh}^\perp) e^{-Ze/|T_h+T_h^\perp|} - \alpha_T c_{Ah} c_{Bh} e^{-Ze/|T_h|} \end{bmatrix} \\ &\quad + P_h \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla & 0 & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{Ah}^\perp \\ c_{Bh}^\perp \\ T_h^\perp \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\mathbf{y} = P_h \mathbf{y} + (I - P_h)(\mathbf{y}) \equiv P_h \mathbf{y} + Q_h(\mathbf{y})$$

$$P_h \mathbf{y} = [c_{Ah} \ c_{Bh} \ T_h]^t$$

$$Q_h \mathbf{y} = [c_{Ah}^\perp \ c_{Bh}^\perp \ T_h^\perp]^t$$

Observação 6.2.1. Para estimar o erro global, consideraremos o problema (6.3) e utilizamos o método de Euler para trás, com $t_n = n\tau$, $0 \leq n \leq N - 1$, $0 \leq \tau \leq 1$. Se denotamos por \mathbf{y}_h^n e \mathbf{A}_h^n as aproximações de $\mathbf{y}_h(t)$ e $\mathbf{A}_h(t)$ no passo de tempo

t_n , respectivamente; isto é, $\mathbf{y}_h^n \approx \mathbf{y}_h(t_n)$ e $\mathbf{A}_h^n \approx \mathbf{A}_h(t_n)$, então as aproximações do problema (6.3) para cada $n = 0, 1, \dots, N - 1$ tomam a forma:

$$\frac{\mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_h^n}{\tau} = \mathbf{A}_h^{n+1} \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1})$$

com $\mathbf{y}_h^0 = \mathbf{y}_h(0) = P_h(\mathbf{y}_0)$; dado que $\mathbf{H}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) = 0$.

Aqui há certa diferença com o trabalho de Ostermann e Palencia [52] onde hipóteses são assumidas sobre o operador não limitado $\mathbf{A}(t)$. Em princípio esperamos as propriedades de \mathbf{A}_h para h pequeno a ser herdadas de $\mathbf{A}(t)$ via hipóteses sobre $\hat{\mathbf{v}}(t)$. Para nós é suficiente que a aproximação tenha estas propriedades. Estes resultados correspondem a estimativas a priori relativamente fracas em um intervalo fixo de tempo. Nossos resultados combinam tais estimativas junto com hipóteses a posteriori sobre o que pode ser encarado como sendo a solução calculada \mathbf{y}_h^n . Estes resultados operam com hipóteses mais fortes do que Teorema 5.3.6 mais são estabelecidas independentemente destes resultados locais pela circunstância do forte controle sobre a não linearidade que permite a comparação do algoritmo diretamente com o problema original. Em problemas mais gerais e difíceis será imprescindível utilizar este resultado.

Observamos que hipóteses garantindo a separação do espectro de $\mathbf{A}(t)$ para estes resultados podem ser estabelecidos via perturbação dos resultados em dimensão infinita.

Hipóteses 6.2.2. Se I é o operador identidade e $(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)$, com $0 < \sigma < 1$, denota uma perturbação do operador \mathbf{A}_h em $t = 0$ no problema (6.3), então

assumiremos que existem constantes C_1, C_2, C_3 e C_4 tais que

- a) $\sup_{0 \leq t \leq \tau^*} \|\mathbf{A}_h(t) (\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1} \mathbf{y}_h(t)\| \leq C_2$
- b) $\sup_t \|(\mathbf{A}_h(t)) \mathbf{y}_h(t)\| \leq C_3 |\lambda_h|$, com $|\lambda_h| = \sup_t |\lambda_h(t)|$,
 $\lambda_h(t)$ o maior autovalor de $\mathbf{A}_h(t)$
- c) $\|(\mathbf{A}_h(t) - \mathbf{A}_h(s)) (\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}\| \leq C_4 |t - s|^\alpha \quad 0 < \alpha \leq 1$
- d) $\sup_t \|(\mathbf{A}_h(t) - \mathbf{A}_h^{n+1}) (\mathbf{y}_h(t))\| \leq C_6 |\lambda_h| \tau^\alpha$
- e) $\sup_{0 \leq t \leq \tau^*} \|\mathbf{A}_h(0) + \sigma I\| \mathbf{y}_h(t) \leq C_1$

De fato d) e e) são conseqüências de b) e c).

Definição 6.2.3. Para cada $t \in [0, \tau^*]$ definimos a função

$$\mathbf{y}_{h,\tau}(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \mathbf{y}_h(s) ds, \quad (6.4)$$

com $\mathbf{y}_h(t) = 0$ para $t \leq 0$.

Lema 6.2.4. Se \mathbf{A}_h satisfaz as hipótese 6.2.2, então para $n = 0, 1, \dots, N-1$ existe uma constante M_1 tal que

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) (\mathbf{y}_h(t_n + s')) ds' ds \right\| \leq M_1 |\lambda_h| \tau^{1+\alpha}$$

Demonstração. Seja

$$J_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) (\mathbf{y}_h(t_n + s')) ds' ds$$

então, usando a hipótese (6.2.2) tem-se que existem constantes C_1, C_4 e $0 < \alpha \leq 1$ tais que

$$\begin{aligned} \|J_1\| &\leq \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \|((\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) (\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}) u_h\| ds' ds \\ &\qquad\qquad\qquad u_h = (\mathbf{A}_h(0) + \sigma I) (\mathbf{y}_h(t_n + s')) \\ &\leq \frac{C_4}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \|t_n + s' - t_{n-1} - s'\|^\alpha \|u_h\| ds' ds \\ &\leq |\lambda_h| C_1 C_4 \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \tau^\alpha ds' ds = \frac{C_1 C_4}{2} |\lambda_h| \tau^{\alpha+1} \end{aligned}$$

Portanto, existe uma constante M_1 tal que

$$\|J_1\| \leq M_1 \tau^{\alpha+1} |\lambda_h|.$$

Lema 6.2.5. *Sob as hipóteses do lema 6.2.4, para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, existe uma constante M_4 positiva tal que*

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') (\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) ds' ds \right\| \leq M_4 \tau^2$$

Demonstração. Em primeiro lugar observe que,

$$\mathbf{y}_h(t_n + s) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s') = \int_{t_{n-1}+s'}^{t_n+s'} \left(\mathbf{A}_h(\theta) \mathbf{y}_h(\theta) + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(\theta)) + \mathbf{H}_h(\mathbf{y}_h(\theta)) \right) d\theta$$

implica que existe uma constante C' tal que

$$\|\mathbf{y}_h(t_n + s) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')\| \leq C' \tau |\lambda_h| \sup_{[0, \tau^*]} \|\mathbf{y}_h(\theta)\|.$$

Também tem-se que,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}(\theta)\| &\leq \|(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}\| \|(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I) \mathbf{y}_h(\theta)\| \\ &\leq C_1 \|(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}\| \\ &\leq CC_1 \|(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}\| |\lambda_h| \end{aligned}$$

Agora, se

$$J_2 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') (\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) ds' ds$$

então

$$\begin{aligned} \|J_2\| &\leq \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \|\mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') (\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s'))\| ds' ds \\ &\leq CC_1 \|(\mathbf{A}_h(0) + \sigma I)^{-1}\| |\lambda_h|^2 \tau^2 \end{aligned}$$

Assim, existe uma constante M_2 tal que

$$\|J_2\| \leq M_2 |\lambda_h|^2 \tau^2. \quad (6.5)$$

Lema 6.2.6. *Sob as hipóteses do lema 6.2.4, para $n = 0, 1, \dots, N - 1$, existe uma constante M_3 tal que*

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s'))) ds' ds \right\| \leq M_3 |\lambda_h| \tau^2$$

Demonstração. Seja

$$J_3 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s'))) ds' ds,$$

então como \mathbf{F}_h é Lipschitz contínua, existe uma constante M' tal que

$$\begin{aligned} \|J_3\| &\leq M' \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \|\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')\| ds' ds \\ &\leq M' \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \sup_{s'} \|\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')\| ds' ds \end{aligned}$$

assim usando o Lema 6.2.5 existe uma constante $M_3 > 0$, tal que

$$\|J_3\| \leq M_3 |\lambda_h| \tau^2. \quad (6.6)$$

Lema 6.2.7. *Seja \mathbf{y}_h a solução do problema (6.3). Se \mathbf{A}_h satisfaz as hipóteses 6.2.2, então para $n = 0, 1, \dots, N-1$ existe uma constante M_4 tal que*

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(s)) ds \right\| \\ \leq M_5 (\tau^2 |\lambda_h|^2 + \tau^{1+\alpha} |\lambda_h| + |\lambda_h| \tau^2 + h\tau) \end{aligned}$$

Demonstração. Dado que,

$$\frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(s)) ds = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n + s)) ds$$

e

$$\frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(s)) ds = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s)) ds$$

então

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n + s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(s)) ds &= \\ &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n + s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s)) ds \\ &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_{n-1} + 2\tau) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + \tau + s)) ds \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (\mathbf{y}_h(t_{n-1} + \tau) - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s)) ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_{t_{n-1}+\tau}^{t_{n-1}+2\tau} [\mathbf{A}_h(s') \mathbf{y}_h(s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s')) + H_h(\mathbf{y}(s'))] ds' ds \\
&\quad - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_{t_{n-1}+s}^{t_{n-1}+\tau} [\mathbf{A}_h(s') \mathbf{y}_h(s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s')) + H_h(\mathbf{y}(s'))] ds' ds \\
&= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [\mathbf{A}_h(t_{n-1} + \tau + s') \mathbf{y}_h(t_{n-1} + \tau + s') \\
&\quad + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + \tau + s')) + H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + \tau + s'))] ds' ds \\
&\quad - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [\mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) \\
&\quad + H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + s'))] ds' ds \\
&= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [\mathbf{A}_h(t_n + s') \mathbf{y}_h(t_n + s') \\
&\quad + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) + H_h(\mathbf{y}(t_n + s'))] ds' ds \\
&\quad - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [\mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) \\
&\quad + H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + s'))] ds' ds \\
&= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [(\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') + \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) \mathbf{y}_h(t_n + s') \\
&\quad + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) + H_h(\mathbf{y}(t_n + s'))] ds' ds \\
&\quad - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau [\mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) \\
&\quad + H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + s'))] ds' ds \\
&= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) \mathbf{y}_h(t_n + s') ds' ds \\
&\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') (\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) ds' ds \\
&\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s'))) ds' ds \\
&\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (H_h(\mathbf{y}(t_n + s')) - H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + s'))) ds' ds \\
&= J_1 + J_2 + J_3 + J_4
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
J_1 &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (\mathbf{A}_h(t_n + s') - \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s')) \mathbf{y}_h(t_n + s') ds' ds \\
J_2 &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \mathbf{A}_h(t_{n-1} + s') (\mathbf{y}_h(t_n + s') - \mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) ds' ds
\end{aligned}$$

$$J_3 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \left(\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_n + s')) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(t_{n-1} + s')) \right) ds' ds$$

$$J_4 = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau \left(H_h(\mathbf{y}(t_n + s')) - H_h(\mathbf{y}(t_{n-1} + s')) \right) ds' ds$$

Pelos Lemas 6.2.4, 6.2.5 e 6.2.6 temos que existem constantes M_1 , M_2 e M_3 tais que

$$\|J_1\| \leq M_1 \tau^{1+\alpha} |\lambda_h|$$

$$\|J_2\| \leq M_2 \tau^2 |\lambda_h|^2$$

$$\|J_3\| \leq M_3 \tau^2 |\lambda_h|$$

e utilizando a subsection 5.1.0.1 tem-se que existe uma constante M_4 tal que

$$\|J_4\| \leq M_4 h \tau$$

Portanto, existe uma constante $M_5 = \max \{M_1, M_2, M_3, M_4\}$ tal que

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(s)) \right\|$$

$$\leq M_5 (\tau^2 |\lambda_h|^2 + \tau^{1+\alpha} |\lambda_h| + |\lambda_h| \tau^2 + h \tau)$$

Lema 6.2.8. *Seja $\zeta_{n+1} = \mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})$, com $\mathbf{y}_{h,\tau}(t)$ como na definição 6.2.3.*

Para cada $n = 0, 1, \dots, N-1$ tem-se que existem $\theta, \theta' \in [0, 1]$ tais que

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s)) \right) ds = \tau \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) \zeta_{n+1}$$

$$+ \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s)) \right) ds$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \delta_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\delta_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds$$

$$- \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds$$

onde $\delta_{h,\tau}^{n+1}(s) = \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})$, para $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$.

Demonstração. Seja

$$I_1 = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s)) \right) ds.$$

Se $\zeta_{n+1} = \mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})$,

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{h,\tau}(s) &= \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) \\ &= \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \zeta_{n+1} \end{aligned}$$

então

$$I_1 = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \zeta_{n+1}) \right] ds.$$

Pondo, para $n = 0, 1, \dots, N-1$,

$$\delta_{h,\tau}^{n+1}(s) = \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}),$$

tem-se que

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s)) \right) ds \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1} - \zeta_{n+1}) \right] ds \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) ds - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1} - \zeta_{n+1}) ds \end{aligned}$$

Agora, dado que existe a derivada de Fréchet de segunda ordem para \mathbf{F}_h , utilizando a fórmula de Taylor, tem-se que existem constantes $\theta, \theta' \in [0, 1]$ tais que

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) ds - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s)) - \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s)) \zeta_{n+1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta \right] ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) ds - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) ds + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) \boldsymbol{\zeta}_{n+1} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \int_0^1 (1-\theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \boldsymbol{\zeta}_{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1}^2 d\theta \right] ds \\
&= \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) \boldsymbol{\zeta}_{n+1} ds \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \boldsymbol{\zeta}_{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1}^2 d\theta ds \\
&= \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1} ds \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta') \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \boldsymbol{\zeta}_{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1}^2 d\theta ds \\
&= \tau \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta') \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \boldsymbol{\zeta}_{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1}^2 d\theta ds.
\end{aligned}$$

Teorema 6.2.9. *Suponha que as hipóteses 6.2.2 são válidas e que a inversa $\mathcal{J}_n = (I - \tau(\mathbf{A}_h^{n+1} + \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1})))^{-1}$ existe para cada $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$. Então pelo método de Euler para trás, o erro $\boldsymbol{\zeta}_{n+1} = \mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})$ satisfaz a relação*

$$\boldsymbol{\zeta}_{n+1} = \mathcal{J}_n \boldsymbol{\zeta}_n + \mathcal{J}_n (F(\boldsymbol{\zeta}_{n+1}) + \boldsymbol{\Theta}_{n+1}(h, \tau))$$

onde

$$F(\boldsymbol{\zeta}_{n+1}) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau,n+1} - \theta \boldsymbol{\zeta}_{n+1}) \boldsymbol{\zeta}_{n+1}^2 d\theta ds$$

e

$$\|\boldsymbol{\Theta}_{n+1}(h, \tau)\| \leq O(h\tau) + O(\tau^{\alpha+1})$$

Demonstração. Dado que \mathbf{y}_h satisfaz

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \mathbf{y}_h &= \mathbf{A}_h \mathbf{y}_h + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h) + \mathbf{H}_h(\mathbf{y}) \\
\mathbf{y}_h(0) &= P_h(\mathbf{y}_0)
\end{aligned} \tag{6.7}$$

então, pelo método de Euler, tem-se para $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ que

$$\frac{\mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_h^n}{\tau} = \mathbf{A}_h^{n+1} \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}). \quad (6.8)$$

Integrando a primeira equação do problema (6.7) no intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$, tem-se para $n = 0, 1, \dots, N - 1$ que

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} &= \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{A}_h(s) \mathbf{y}_h(s) ds + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds \end{aligned}$$

que é equivalente a

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} &= \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1} + \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds \end{aligned}$$

de onde resulta

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} &= \mathbf{A}_h^{n+1} \left(\frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{y}_h(s) ds \right) \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Como da definição 6.2.3 tem-se que

$$\mathbf{y}_{h,\tau}(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \mathbf{y}_h(s) ds,$$

então, (6.9) é equivalente a

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} &= \mathbf{A}_h^{n+1} \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds \\ &\quad + \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Se para $n = 0, 1, \dots, N - 1$,

$$\zeta_{n+1} = \mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}),$$

então

$$\begin{aligned} \frac{\zeta_{n+1} - \zeta_n}{\tau} &= \frac{\mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_h^n - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} \\ &= \frac{\mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_h^n}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau}, \end{aligned}$$

e usando a identidade (6.10)

$$\begin{aligned} \frac{\zeta_{n+1} - \zeta_n}{\tau} &= \mathbf{A}_h^{n+1} \mathbf{y}_h^{n+1} + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{A}_h^{n+1} \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds \\ &\quad + \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} \\ &= \mathbf{A}_h^{n+1} (\mathbf{y}_h^{n+1} - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})) - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds \\ &\quad + \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} \\ &= \mathbf{A}_h^{n+1} \zeta_{n+1} - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds \\ &\quad - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s)) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s)) + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s))) ds \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds \\ &\quad + \frac{\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)}{\tau} - \frac{\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n)}{\tau} \end{aligned}$$

segue-se que

$$\begin{aligned}
\zeta_{n+1} - \zeta_n &= \tau \mathbf{A}_h^{n+1} \zeta_{n+1} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))) ds \\
&\quad - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))) ds \\
&\quad - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds \\
&\quad + (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(t_n)) - (\mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1}) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_n))
\end{aligned}$$

ou equivalentemente,

$$\begin{aligned}
(I - \tau \mathbf{A}_h^{n+1}) \zeta_{n+1} &= \zeta_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))) ds \\
&\quad + F_1 + F_2 + F_3 + F_4
\end{aligned} \tag{6.11}$$

onde

$$F_1^{n+1}(h, \tau) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))) ds \tag{6.12}$$

$$F_2^{n+1}(h, \tau) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds. \tag{6.13}$$

$$F_3^{n+1}(h, \tau) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s)) ds. \tag{6.14}$$

$$F_4^{n+1}(h, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{y}_h(t_{n+1}) - \mathbf{y}_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\mathbf{y}_h(t_n) - \mathbf{y}_h(s)) ds. \tag{6.15}$$

Utilizando a representação para a integral obtida no Lema 6.2.8, a equação (6.11) toma a forma

$$\begin{aligned}
(I - \tau (\mathbf{A}_h^{n+1})) \zeta_{n+1} &= \zeta_n + \tau \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) \zeta_{n+1} \\
&\quad + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds \\
&\quad + F_1 + F_2 + F_3 + F_4
\end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned}
(I - \tau (\mathbf{A}_h^{n+1} + \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}))) \zeta_{n+1} &= \zeta_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds \\
&+ \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)^2 d\theta' ds \\
&- \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds \\
&+ F_1 + F_2 + F_3 + F_4
\end{aligned}$$

onde $\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) = \mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})$ para $t_n \leq s \leq t_{n+1}$. Assim,

$$\begin{aligned}
\left(I - \tau \left(\tilde{\mathbf{A}}_h^{n+1} + \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) \right) \right) \zeta_{n+1} &= \zeta_n + F(\zeta_{n+1}) \\
&+ F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6,
\end{aligned} \tag{6.16}$$

com F_i para $i = 1, 2, 3, 4$ dados por (6.12)-(6.15) e

$$F(\zeta_{n+1}) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds. \tag{6.17}$$

$$F_5^{n+1}(h, \tau) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds. \tag{6.18}$$

$$F_6^{n+1}(h, \tau) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds. \tag{6.19}$$

Finalmente, dado que por hipótese $\mathcal{J}_n = (I - \tau (\mathbf{A}_h^{n+1} + \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1})))^{-1}$ existe para todo $n = 0, 1, \dots, N - 1$, então

$$\begin{aligned}
\zeta_{n+1} &= \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n (F(\zeta_{n+1}) + F_1^{n+1}(h, \tau) \\
&+ F_2^{n+1}(h, \tau) + F_3^{n+1}(h, \tau) + F_4^{n+1}(h, \tau) + F_5^{n+1}(h, \tau) + F_6^{n+1}(h, \tau))
\end{aligned}$$

Isto é,

$$\zeta_{n+1} = \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n \left(F(\zeta_{n+1}) + \boldsymbol{\Theta}_{n+1}(h, \tau) \right) \tag{6.20}$$

onde,

$$\boldsymbol{\Theta}^{n+1}(h, \tau) = \sum_{k=1}^6 F_k^{n+1}(h, \tau)$$

com $F_k^{n+1}(h, \tau)$ dado por (6.12)-(6.15) e (6.18)-(6.19).

Observação 6.2.10. Procedendo como na demonstração do Lema 6.2.5, existe uma constante M_7

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_h(r + s - \tau)\| &\leq \int_{r+s-\tau}^s \|\mathbf{A}_h(s')\mathbf{y}(s') + \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s')) + \mathbf{H}_h(\mathbf{y}(s'))\| ds' \\ &\leq M_7 |\lambda_h|^2 (\tau - r) \leq M_7 |\lambda_h|^2 \tau \end{aligned}$$

Observação 6.2.11. Da observação anterior obtemos que

$$\|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(s)\| \leq M_7 |\lambda_h|^2 \tau. \quad (6.21)$$

Em efeito,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(s)\| &= \left\| \mathbf{y}_h(s) - \frac{1}{\tau} \int_{s-\tau}^s \mathbf{y}_h(r) dr \right\| \\ &= \left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \mathbf{y}_h(s) dr - \frac{1}{\tau} \int_{s-\tau}^s \mathbf{y}_h(r) dr \right\| \\ &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_h(r + s - \tau)\| dr \\ &= M_7 |\lambda_h|^2 \tau \end{aligned}$$

Agora, obtemos as estimativas para as F_k^{n+1} :

- i) Do fato que \mathbf{F}_h é uma função Lipschitz contínua, tem-se que existe uma constante M' tal que $\|\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))\| \leq M' \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(s)\|$. Então pela observação 6.2.11

$$\begin{aligned} \|F_1^{n+1}(h, \tau)\| &\leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h(s)) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_{h,\tau}(s))\| ds \\ &\leq M' \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(s)\| ds \\ &\leq M' M_7 |\lambda_h|^2 \tau \end{aligned}$$

Portanto, existe uma constante M_8 tal que

$$\|F_1^{n+1}(h, \tau)\| \leq M_8 |\lambda_h|^2 \tau^2$$

ii) Por (6.13) temos que $F_2^{n+1}(h, \tau) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s) ds$, então usando a 6.2.2 tem-se

$$\begin{aligned} \|F_2^{n+1}(h, \tau)\| &\leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|(\mathbf{A}_h(s) - \mathbf{A}_h^{n+1}) \mathbf{y}_h(s)\| ds \\ &\leq C_6 |\lambda_h| \tau^{1+\alpha} \end{aligned}$$

iii)

$$\|F_3^{n+1}(h, \tau)\| = \left\| \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{H}_h(\mathbf{y}_h(s)) ds \right\| \leq Ch\tau$$

iv) Pelo Lema 6.2.7

$$\|F_4^{n+1}(h, \tau)\| \leq M_5(\tau^2 |\lambda_h|^2 + \tau^{1+\alpha} + |\lambda_h| \tau^2 + h\tau)$$

v) Novamente do fato que \mathbf{F}_h é Lipschitz contínua, e usando a observação 6.2.11 temos que

$$\begin{aligned} \|F_5^{n+1}(h, \tau)\| &\leq \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1}) - \mathbf{F}_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))\| ds \\ &\leq M \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\mathbf{y}_{h,\tau}(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})\| ds \\ &\leq M \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(s)\| + \|\mathbf{y}_h(s) - \mathbf{y}_{h,\tau}(t_{n+1})\|) ds \\ &\leq M_9 |\lambda_h|^2 \tau^2 \end{aligned}$$

vi) Dado \mathbf{F} é duas vezes Fréchet diferenciável, então existe uma constante $M > 0$ tal que para cada $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$,

$$\|\mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))\| \leq M,$$

então existe uma constante M_{10} tal que

$$\begin{aligned} \|F_6^{n+1}(h, \tau)\| &\leq \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \left\| \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \theta' \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)) (\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 \right\| d\theta' ds \\ &\leq \frac{M}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta') \|\boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1}(s)\|^2 d\theta' ds, \quad M \equiv \text{const.} \\ &\leq M_{10} |\lambda_h|^4 \tau^3 \end{aligned}$$

Em conseqüência se M_{λ_h} denota o máximo das constantes obtidas para F_k^{n+1} para $k = 2, 3, \dots, 5$ temos que

$$\zeta_{n+1} = \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n \left(F(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau) \right) \quad (6.22)$$

com $\Theta_{n+1}(h, \tau)$ tal que

$$\|\Theta_{n+1}(h, \tau)\| \leq O(ht) + O(\tau^{\alpha+1}) \quad (6.23)$$

6.3 Shadowing finito a posteriori

Tendo expressado a equação do erro (entre a solução “exata” do problema (6.3) e a solução aproximada em termos de elementos finitos e usando o método implícito de Euler), como uma equação algébrica da forma

$$\zeta_{n+1} = \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n \left(F(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau) \right),$$

nesta seção estimaremos o erro global utilizando hipótese a posteriori, o qual determina-se baseado fortemente em hipóteses baseadas no algoritmo calculado, o que de fato dá a informação disponível. Especificamente, demonstramos um resultado de *shadowing* finito a posteriori para o problema (6.3), e a prova é inspirada no artigo de Ostermann e Palencia [52], no qual estabelecem resultados de shadowing para problemas de evolução parabólicos (caso linear). Eles provam, que sob certas condições, o erro global, é limitado pelas condições iniciais impostas. Utilizaremos alguns destes resultados para obter uma estimativa do erro global; para isto será necessário construir espaços apropriados \mathbb{X}_i e \mathbb{Y}_i em termos das projeções ortogonais P_n e Q_n dos elementos ζ_n , que representam o erro em cada passo de tempo para $n = 0, 1, 2, N - 1$. Além disso, será conveniente assumir certas hipóteses para os operadores \mathcal{J}_n , P_n , Q_n e as composições entre eles.

Em primeiro lugar, estabeleceremos algumas notações e observações que serão necessárias para a demonstração de Teorema central desta seção. Como na seção anterior, $\mathbf{S}_h = S_h^A \times S_h^B \times S_h^T$ denota o espaço de elementos finitos.

Observação 6.3.1. Na equação algébrica,

$$\zeta_{n+1} = \mathcal{J}_n \zeta_n + \mathcal{J}_n (F(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau))$$

ζ_n denota o vetor

$$\zeta_n = (\zeta_{nA}, \zeta_{nB}, \zeta_{nT}),$$

$$F(\zeta_{n+1}) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) \mathbf{F}_h''(\mathbf{y}_h^{n+1} + \boldsymbol{\delta}_{h,\tau}^{n+1} - \theta \zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds.$$

e $\Theta_{n+1}(h, \tau)$ tal que

$$\|\Theta_{n+1}(h, \tau)\| \leq O(ht) + O(\tau^{\alpha+1})$$

Definição 6.3.2. Para $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$, defina os operadores projeção

$$P_n : S_h \longrightarrow S_h \quad e \quad Q_n : S_h \longrightarrow S_h$$

tais que satisfazem as seguintes condições

i) $Q_n = (I - P_n)$

ii) $P_n^2 = P_n$ e $Q_n^2 = Q_n$

iii) $\|P_n\| \leq 1$ e $\|Q_n\| \leq 1$

iv) $\text{Im } P_n = \mathbb{X}_n$ e $\text{Im } Q_n = \mathbb{Y}_n$

Observação 6.3.3. Precisamos que consideramos a projeção sobre S_h^i para cada $i = A, B, T$, esta é denota por P_n^i . Assim S_h^i pode-se decompor na forma

$$S_h^i = \mathbb{X}_{ni} \oplus \mathbb{Y}_{ni} \cong \mathbb{X}_{ni} \times \mathbb{Y}_{ni}$$

Observação 6.3.4. Tendo em conta estas projeções, para $i = A, B, T$, construímos os espaços:

$$\mathbb{X}_i = \mathbb{X}_{0i} \times \mathbb{X}_{1i} \times \cdots \times \mathbb{X}_{N-1i}$$

$$\mathbb{Y}_i = \mathbb{Y}_{0i} \times \mathbb{Y}_{1i} \times \cdots \times \mathbb{Y}_{N-1i}$$

de onde temos que,

$$\begin{aligned}\mathbf{x} \in \mathbb{X}_i &\Rightarrow \mathbf{x} = (x_{0i}, x_{1i}, \dots, x_{N-1i}) \in \mathbb{X}_{0i} \times \mathbb{X}_{1i} \times \dots \times \mathbb{X}_{(N-1)i} \\ \mathbf{y} \in \mathbb{Y}_i &\Rightarrow \mathbf{y} = (y_{0i}, x_{1i}, \dots, y_{N-1i}) \in \mathbb{Y}_{0i} \times \mathbb{Y}_{1i} \times \dots \times \mathbb{Y}_{(N-1)i}\end{aligned}$$

Então $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{X}_i \times \mathbb{Y}_i$ é equivalente a ter uma seqüência finita

$$(\zeta_{0i}, \zeta_{1i}, \dots, \zeta_{N-1i}) \in S_h^i \times S_h^i \times \dots \times S_h^i \cong (S_h^i)^N$$

tal que

$$P_n^i(\zeta_{ni}) = x_{ni} \quad \text{e} \quad Q_n^i(\zeta_{ni}) = y_{ni}$$

Definição 6.3.5. Para $i = A, B, T$; seja $\Upsilon^i = (\zeta_{0i}, \zeta_{1i}, \dots, \zeta_{(N-1)i}) \in (S_h^i)^N$, a norma $\|\cdot\|_\infty : (S_h^i)^N \rightarrow \mathbb{R}$ é definida por

$$\|\Upsilon^i\|_\infty = \max_{0 \leq n \leq N-1} \|\zeta_{ni}\| \quad (6.24)$$

onde $\|u\| = \max_n \{\|P_n^i u\|, \|Q_n^i u\|\}$

Finalmente, é necessário assumir as seguintes hipóteses a posteriori sobre os operadores \mathcal{J}_n , P_n e Q_n . Estas hipótese essencialmente controlam o espectro estável e não estável e a oscilação ou “overlap” de projeções em passos de tempo diferentes e são mais fracas que as condições normais de uniforme hiperbolicidade. Não obstante não controle o fenômeno físico de problemas de dinâmica de fluidos o que é de condicional estável ou de singularidades em qual ha mudança de estável para não estável. Isto é dizer, autovalores atravessando o eixo imaginário no em dependência em tempo contínuo ou próximo deste na discretização. Aqui entramos nesta situação com a latitude a nostra disposição dada pelo fato que o campo de velocidades entra como un controle externo.

Hipóteses 6.3.6. (a posteriori) Para cada $n = 0, 1, \dots, N-1$ sejam P_n, Q_n as projeções definidas em 6.3.2; consideremos que $\{\mathcal{J}_n\}_{n \in I}$ é uma seqüência de operadores lineares sobre \mathbf{S}_h

$$\mathcal{J}_n(\zeta_{n+1}) = (I - \tau (\mathbf{A}_h^{n+1} + \mathbf{F}'_h(\mathbf{y}_h^{n+1})))^{-1} (\zeta_{n+1}),$$

e assumamos que existe uma seqüência de números positivos $(\rho_n)_{n=0,1,\dots,N-1}$ tal que:

i)

$$\|P_{n+1}\mathcal{J}_nQ_n\| \leq \rho_{n+1}$$

$$\|Q_{n+1}\mathcal{J}_nP_n\| \leq \rho_{n+1}$$

ii) $Q_{n+1}\mathcal{J}_nQ_n : \mathbb{Y}_i \longrightarrow \mathbb{Y}_i$ são isomorfismos para para $n = 0, 1, \dots, N - 2$ e existe uma constante C tal que

$$\left\| \prod_{l=1}^{j-1} (Q_{l+1}\mathcal{J}_lQ_l)^{-1} \right\| \leq C$$

iii) Existe uma constante $\Lambda > 0$ tal que para $i \in I$

$$\sum_{j=0}^i \left\| \prod_{l=j}^{i-1} P_{l+1}\mathcal{J}_lP_l \right\| \leq \Lambda \quad (6.25)$$

$$\sum_{j=0}^{N-1} \left\| \prod_{l=i}^{j-1} (Q_{l+1}\mathcal{J}_lQ_l)^{-1} \right\| \leq \Lambda \quad (6.26)$$

iv) Existe $0 < \mu < 1$ tal que

$$\sum_{j=0}^{i-1} \rho_{j+1} \left\| \prod_{l=j+1}^{i-1} P_{l+1}\mathcal{J}_lP_l \right\| \leq \mu, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (6.27)$$

$$\sum_{j=i}^{N-2} \rho_{j+1} \left\| \prod_{l=i}^j (Q_{l+1}\mathcal{J}_lQ_l)^{-1} \right\| \leq \mu, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N - 2 \quad (6.28)$$

Teorema 6.3.7. *Sejam $\zeta = (\zeta_A, \zeta_B, \zeta_T)$, $P_n\zeta_n = (P_n^A\zeta_A, P_n^B\zeta_B, P_n^T\zeta_T)$, e $J = \{0, 1, 2, \dots, N - 1\}$. Para cada $n \in J$ e $i = A, B, T$ sejam P_n^i, Q_n^i as projeções definidas na observação 6.3.3. Considere a seqüência $\{\delta_n\}_{n \in I} \in \mathbf{S}_h$ e as seqüências de operadores $\mathcal{J}_n, F_n : \mathbf{S}_h \longrightarrow \mathbf{S}_h$; onde*

$$\mathcal{J}_n = (I - \tau (A_h^{n+1} + F'_h(\mathbf{y}_h^{n+1})))^{-1}$$

$$F_n(\zeta_{n+1}) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1 - \theta) F''_h(\mathbf{y}_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta\zeta_{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds$$

e

$$\delta_{n+1}(\zeta_{n+1}, h, \tau) = \mathcal{J}_n (F_n(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau))$$

Se $\xi = (\xi_A, \xi_B, \xi_T) \in \text{Im } P_0$ e $\eta = (\eta_A, \eta_B, \eta_T) \in \text{Im } Q_{N-1}$ satisfazem

$$\|\xi\| \leq \epsilon \quad e \quad \|\eta\| < \epsilon.$$

Então o problema discreto de valor no contorno

$$\left. \begin{aligned} \zeta_{n+1} &= \mathcal{J}_n \zeta_n + \delta_{n+1}(\zeta_{n+1}, h, \tau) \quad 0 \leq n \leq N-2 \\ P_0 \zeta_0 &= \xi, \quad e \quad Q_{N-1} \zeta_{N-1} = \eta, \end{aligned} \right\} \quad (6.29)$$

tem uma única solução $(\zeta_n)_{n \in J}$ tal que

$$\max_{n \in J} \|\zeta_n\| \leq \epsilon \left(\frac{\Lambda}{1 - \mu} + 1 \right),$$

onde μ e Λ são constantes.

Demonstração. Seja $\zeta = (\zeta_A, \zeta_B, \zeta_T) \in \mathcal{S}_h$ e para cada $n \in J$ considere

$$\begin{aligned} P_n \zeta_n &= (P_n^A \zeta_n, P_n^B \zeta_n, P_n^T \zeta_n) \\ Q_n \zeta_n &= (Q_n^A \zeta_n, Q_n^B \zeta_n, Q_n^T \zeta_n) \end{aligned}$$

onde para $i = A, B, T$ os operadores P_n^i e Q_n^i são as projeções definidas na observação 6.3.3.

Para cada $n \in J$, $\zeta_n \in \mathcal{S}_h$ pode ser expresso ζ na forma

$$\zeta_n = P_n \zeta_n + Q_n \zeta_n \equiv \mathbf{p}_n + \mathbf{q}_n,$$

onde $\mathbf{p}_n = P_n \zeta_n$ e $\mathbf{q}_n = Q_n \zeta_n$. Tomando as projeções P_n e Q_n na equação (6.29) temos que

$$P_{n+1} \zeta_{n+1} = P_{n+1} \mathcal{J}_n \zeta_n + P_{n+1} \delta_{n+1}(\zeta_{n+1}, \tau, h) \quad (6.30)$$

$$Q_{n+1} \zeta_{n+1} = Q_{n+1} \mathcal{J}_n \zeta_n + Q_{n+1} \delta_{n+1}(\zeta_{n+1}, \tau, h) \quad (6.31)$$

Fazendo

$$\gamma_{n+1} = P_n \delta_n(\zeta_n, h, \tau)$$

$$\beta_n = Q_n \delta_n(\zeta_n, h, \tau)$$

de (6.30)-(6.31) temos

$$\mathbf{p}_{n+1} = P_{n+1}\mathcal{J}_n P_n \mathbf{p}_n + P_{n+1}\mathcal{J}_n Q_n \mathbf{q}_n + \boldsymbol{\gamma}_{n+1} \quad (6.32)$$

$$\mathbf{q}_{n+1} = Q_{n+1}\mathcal{J}_n P_n \mathbf{p}_n + Q_{n+1}\mathcal{J}_n Q_n \mathbf{q}_n + \boldsymbol{\beta}_{n+1}. \quad (6.33)$$

Portanto usando a notação

$$\mathcal{P}_1(n) = P_{n+1}\mathcal{J}_n P_n \quad \mathcal{Q}_1(n) = Q_{n+1}\mathcal{J}_n P_n$$

$$\mathcal{P}_2(n) = P_{n+1}\mathcal{J}_n Q_n \quad \mathcal{Q}_2(n) = Q_{n+1}\mathcal{J}_n Q_n,$$

tem-se finalmente que o problema (6.29) é equivalente a resolver

$$\mathbf{p}_{n+1} = \mathcal{P}_1(n)\mathbf{p}_n + \mathcal{P}_2(n)\mathbf{q}_n + \boldsymbol{\gamma}_{n+1} \quad (6.34)$$

$$\mathbf{q}_{n+1} = \mathcal{Q}_1(n)\mathbf{p}_n + \mathcal{Q}_2(n)\mathbf{q}_n + \boldsymbol{\beta}_{n+1}. \quad (6.35)$$

com as condições de fronteira

$$P_0 \boldsymbol{\zeta}_0 = \boldsymbol{\xi},$$

$$Q_{N-1} \boldsymbol{\zeta}_{N-1} = \boldsymbol{\eta}.$$

para $n = 0, 1, \dots, N - 1$

Da equação (6.35) e usando 6.3.6-(ii) resolvemos (6.46) para \mathbf{q} , obtendo

$$\mathbf{q}_n = (\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \mathbf{q}_{n+1} - (\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \mathcal{Q}_1(n)\mathbf{p}_n - (\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \boldsymbol{\beta}_{n+1}. \quad (6.36)$$

Assim, das equações (6.34) e (6.36) obtemos que o sistema de equações que tem-se que resolver é;

$$\left. \begin{aligned} -\mathcal{P}_1(n)\mathbf{p}_n \quad +\mathbf{p}_{n+1} \quad -\mathcal{P}_2(n)\mathbf{q}_n \quad &= \boldsymbol{\gamma}_{n+1} \\ (\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \mathcal{Q}_1(n)\mathbf{p}_n \quad +\mathbf{q}_n - (\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \mathbf{q}_{n+1} \quad &= -(\mathcal{Q}_2(n))^{-1} \boldsymbol{\beta}_{n+1} \end{aligned} \right\} \quad (6.37)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, $\mathbf{p}_0 = \boldsymbol{\xi}$ e $\mathbf{q}_{N-1} = \boldsymbol{\eta}$, que corresponde a 3 sistemas de $2N$ equações com $2N$ incógnitas.

Considerando os espaços \mathbb{X}_i e \mathbb{Y}_i para $i = A, B, T$, descritos na observação e 6.3.4, definimos os operadores lineares

$$\mathbf{N}, \mathbf{G} : \mathbb{X}_i \times \mathbb{Y}_i \longrightarrow \mathbb{X}_i \times \mathbb{Y}_i$$

onde

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \mathbf{L} & 0 \\ 0 & \mathbf{M} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{E} \\ \mathbf{F} & 0 \end{bmatrix} \quad (6.38)$$

com $\mathbf{L}, \mathbf{M}, \mathbf{E}$ e \mathbf{F} matrizes $N \times N$ tais que para $0 \leq i, j \leq N - 1$ $L_{i,j}$, $M_{i,j}$, $E_{i,j}$ e $F_{i,j}$:

$$L_{ij} = \begin{cases} -\mathcal{P}_1(j), & i = j + 1 \\ 0 & i \neq j + 1 \end{cases}$$

$$M_{ij} = \begin{cases} -(\mathcal{Q}_2(i))^{-1}, & i = j - 1 \\ 0 & i \neq j - 1 \end{cases}$$

$$E_{ij} = \begin{cases} -\mathcal{P}_2(j), & i = j + 1 \\ 0 & i \neq j + 1 \end{cases}$$

$$F_{ij} = \begin{cases} (\mathcal{Q}_2(i))^{-1} \mathcal{Q}_2(i), & i = j, \quad i \neq N - 1 \\ 0 & i \neq j, \quad i \neq N - 1. \end{cases}$$

Fazemos,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{I} + \mathbf{N} + \mathbf{G},$$

$$\tilde{\mathbf{U}}_i = \begin{bmatrix} \tilde{U}_{pi} \\ \tilde{U}_{pi} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{\Phi}}_i = \begin{bmatrix} \tilde{\Phi}_{\gamma i} \\ \tilde{\Phi}_{\beta i} \end{bmatrix}$$

onde

$$\tilde{U}_{pi} = \begin{bmatrix} p_{0i} \\ p_{1i} \\ \vdots \\ p_{(N-1)i} \end{bmatrix}, \quad \tilde{U}_{qi} = \begin{bmatrix} q_{0i} \\ q_{1i} \\ \vdots \\ q_{(N-1)i} \end{bmatrix}$$

$$\tilde{\Phi}_{\gamma_i} = \begin{bmatrix} \xi_i \\ \gamma_{1i} \\ \vdots \\ \gamma_{N-1i} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\Phi}_{\beta_i} = \begin{bmatrix} -(\mathcal{Q}_2(0))^{-1}\beta_{1i} \\ -(\mathcal{Q}_2(1))^{-1}\beta_{2i} \\ \vdots \\ -(\mathcal{Q}_2(N-2))^{-1}\beta_{(N-1)i} \\ \eta_i \end{bmatrix},$$

então o sistema de equações (6.37), com as respectivas condições de fronteira, é equivalente a resolver o sistema de equações lineares,

$$\tilde{\mathbf{A}}_i \tilde{\mathbf{U}}_i = \tilde{\Phi}_i \quad (6.39)$$

para $i = A, B, T$.

A seguir denotando por $\tilde{\mathbf{A}}$, qualquer das matrizes $\tilde{\mathbf{A}}_i$, e $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ denota sua inversa, então $\|\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\|$ é limitada. A prova deste resultado é devida a Ostermann e Palencia [52] mas para ser completos, descrevemos aqui a demonstração.

Lema 6.3.8. *Assumindo as hipótese do Teorema 6.3.7, a matriz $\tilde{\mathbf{A}}$ do sistema (6.39) é inversível e existem constantes $\Lambda > 0$ e $0 < \mu < 1$ tal que*

$$\|\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\| \leq \frac{C}{1-\mu}. \quad (6.40)$$

Demonstração. Seja $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{I} + \mathbf{N} + \mathbf{G}$, com \mathbf{N} e \mathbf{G} dadas em ???. Dado que \mathbf{N} é uma matriz nilpotente, então $\mathbf{I} + \mathbf{N}$ é uma inversível, e, portanto, a matriz matriz $\tilde{\mathbf{A}}$ pode ser expressa na forma,

$$\tilde{\mathbf{A}} = (\mathbf{I} + \mathbf{N})(\mathbf{I} + (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G})$$

de onde

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = (\mathbf{I} + (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G})^{-1} (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1} \quad (6.41)$$

Utilizando a série de Neumann, tem-se que

$$(\mathbf{I} + (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k ((\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G})^k, \quad (6.42)$$

a qual é absoluta e uniformemente convergente se $\|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G}\| < 1$. Além disso

$$\left\| (\mathbf{I} + (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G})^{-1} \right\| \leq \frac{1}{1 - \|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G}\|}. \quad (6.43)$$

Assim, para provar que \mathbf{A} é inversível é suficiente demonstrar que existe uma constante $\Lambda > 0$ tal que,

$$\|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\| \leq \Lambda \quad \text{e} \quad \|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G}\| < 1. \quad (6.44)$$

Em primeiro lugar, demonstraremos que $\|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\|$ é limitada.

Em efeito, da que em geral, as entradas de cada bloco não nulo da matriz $(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}$ são dadas por:

$$(\mathbf{I} + \mathbf{L})_{ij}^{-1} = \begin{cases} \prod_{k=j}^{i-1} \mathcal{P}_1(k), & \text{para } i \geq j \\ 0, & \text{para } i < j \end{cases}$$

e

$$(\mathbf{I} + \mathbf{M})_{ij}^{-1} = \begin{cases} \prod_{k=j}^{i-1} \mathcal{Q}_2(k)^{-1}, & \text{para } j \geq i \\ 0, & \text{para } j < i \end{cases}$$

Então,

$$(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1} = \begin{bmatrix} (\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1} & 0 \\ 0 & (\mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1} \end{bmatrix}.$$

Somando as normas dos elementos das filas da matriz $(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}$, pela hipótese 6.3.6-iii, existe uma constante $\Lambda > 0$, tal que

$$\sum_{j=0}^i \left\| \prod_{k=j}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right\| \leq \Lambda \quad \text{para } 0 \leq i \leq N-1 \quad \text{e}$$

$$\sum_{j=i}^{N-1} \left\| \prod_{k=i}^{j-1} \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right\| \leq \Lambda \quad \text{para } 0 \leq i \leq N-1.$$

Então

$$\|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\| = \max_i \left\{ \sum_{j=0}^i \left\| \prod_{k=j}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right\|, \sum_{j=i}^{N-1} \left\| \prod_{k=j}^{i-1} \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right\| \right\}.$$

Portanto, da hipótese 6.3.6-iii), existe uma constante C tal que

$$\|(\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\| \leq \Lambda. \quad (6.45)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} + \mathbf{N})^{-1}\mathbf{G} &= \begin{bmatrix} (\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1} & 0 \\ 0 & (\mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{E} \\ \mathbf{F} & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & (\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{E} \\ (\mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1}\mathbf{F} & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

cujas entradas de cada bloco não nulo são da forma,

$$((\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{E})_{ij} = \begin{cases} -\left(\prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k)\right) \mathcal{P}_2(j) & \text{para } i > j \\ 0 & \text{se } i \leq j \end{cases}$$

e

$$((\mathbf{I} + \mathbf{M})^{-1}\mathbf{F})_{ij} = \begin{cases} -\left(\prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1}\right) \mathcal{Q}_1(j) & \text{para } i \leq j < N-1 \\ 0 & \text{se } N-1 \leq j < i \end{cases}$$

Dado que para todo $0 \leq j \leq N-1$, pela hipótese 6.3.6-i,

$$\begin{aligned} \left\| \left(\prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right) \mathcal{P}_2(j) \right\| &\leq \left\| \left(\prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right) \right\| \|\mathcal{P}_2(j)\| \\ &\leq \rho_{j+1} \left\| \prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right\| \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \left\| \left(\prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right) \mathcal{Q}_1(j) \right\| &\leq \left\| \prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right\| \|\mathcal{Q}_1(j)\| \\ &\leq \rho_{j+1} \left\| \prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right\|, \end{aligned}$$

então pela hipótese 6.3.6-iv), existe uma constante $0 < \mu, < 1$ tal que,

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{i-1} \left\| \left(\prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right) \mathcal{P}_2(j) \right\| &\leq \mu \quad \text{para } 1 \leq i \leq N-1 \text{ e} \\ \sum_{j=i}^{N-1} \left\| \left(\prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right) \mathcal{Q}_1(j) \right\| &\leq \mu \quad \text{para } 0 \leq i \leq N-2. \end{aligned}$$

De onde obtém-se,

$$\begin{aligned} \|(I + N)^{-1}G\| &= \max_i \left\{ \sum_{j=0}^{i-1} \left\| \left(\prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right) \mathcal{P}_2(j) \right\|, \sum_{j+i}^N \left\| \left(\prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right) \mathcal{Q}_1(j) \right\| \right\} \\ &\leq \max_i \left\{ \sum_{j=0}^{i-1} \rho_{j+1} \left\| \prod_{k=j+1}^{i-1} \mathcal{P}_1(k) \right\|, \sum_{j=i}^{N-1} \rho_{j+1} \left\| \prod_{k=i}^j \mathcal{Q}_2(k)^{-1} \right\| \right\} \end{aligned}$$

Desta forma,

$$\|(I + N)^{-1}G\| \leq \mu < 1. \quad (6.46)$$

Finalmente, dado que de (6.41) $\tilde{A}^{-1} = (I + (I + N)^{-1}G)^{-1} (I + N)^{-1}$, usando (6.42), (6.43), (6.45) e (6.46) obtemos que

$$\begin{aligned} \|\tilde{A}^{-1}\| &= \|(I + (I + N)^{-1}G)^{-1} (I + N)^{-1}\| \\ &\leq \|(I + (I + N)^{-1}G)^{-1}\| \|(I + N^{-1})\| \\ &\leq \Lambda \left\| \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k ((I + N)^{-1}G)^k \right\| \\ &\leq \Lambda \sum_{k=1}^{\infty} \mu^k. \end{aligned}$$

Conseqüentemente, como $0 < \mu < 1$, então \tilde{A} é inversível e

$$\|\tilde{A}^{-1}\| \leq \frac{\Lambda}{1 - \mu}. \quad (6.47)$$

Voltamos á demonstração do Teorema, e segundo um modelo de demonstração dado em Stuart e Humphries [68] (corrigindo um erro presente la e adaptado a nossa situação), por simplicidade denote por $U = (\zeta_n)_{n=0}^{N-1}$ a solução do sistema de equações para qualquer $i = A, B, T$, e considermos

$$U = \tilde{A}^{-1} \begin{bmatrix} \xi \\ \Psi \\ \eta \end{bmatrix}$$

Fazendo $U^0 = \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{bmatrix} \xi \\ \mathbf{O} \\ \eta \end{bmatrix}$ e $V = U - U^0$, então

$$U = \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi \\ o \end{bmatrix} + \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{bmatrix} \xi \\ \mathbf{O} \\ \eta \end{bmatrix}$$

e

$$V = \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(V + U^0) \\ o \end{bmatrix}$$

com $U^0 = (u_n)_{n=0}^{N+1}$ e $V = (v_n)_{n=0}^{N+1}$.

Dado que $\|\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\| \leq \Lambda/1 - \mu$ e $\|\xi\| \leq \epsilon, \|\eta\| \leq \epsilon$ temos que

$$\|U^0\| \leq \frac{\Lambda}{1 - \mu} \epsilon$$

Por outro lado temos que

$$\|V\| \leq \|\tilde{\mathbf{A}}^{-1}\| \left\| \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(V + U^0) \\ o \end{bmatrix} \right\| \leq \frac{\Lambda}{1 - \mu} \left\| \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(V + U^0) \\ o \end{bmatrix} \right\|$$

e existe uma constante k_1 tal que

$$\begin{aligned} \left\| \left\| F(v_{n+1} + u_{n+1}^0) \right\| \right\| &\leq k_1 \tau \|v_{n+1} + u_{n+1}^0\|^2 \\ &\leq 2k_1 \tau (\|v_{n+1}\|^2 + \|u_{n+1}^0\|^2) \\ &\leq 2k_1 \tau \epsilon^2 \left(1 + \frac{\Lambda^2}{(1 - \mu)^2}\right) \end{aligned}$$

Então usando (6.23) e o fato que a norma

$$\left\| \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(V + U^0) \\ o \end{bmatrix} \right\|$$

é da ordem $O(\|F(v_{n+1} + u_{n+1}^0)\|, \|\Theta_{n+1}\|)$ tem-se que para τ e h suficientemente pequenos $\|V\| \leq \epsilon$.

Finalmente temos que se $U = (\zeta_n)_{n=0}^{N-1}$ e $U' = (\zeta'_n)_{n=0}^{N-1}$, então

$$\begin{aligned} \|F(\zeta_{n+1}) - F_n(\zeta' - n + 1)\| &\leq \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda}{1-\mu}\right)^2 \epsilon^2 \tau \sup_{\|\zeta_{n+1}\| < \epsilon} \|F'''(w_h^n - r\zeta_{n+1})\| \|\zeta_{n+1} - \zeta'_{n+1}\| \\ &\quad + \left(\frac{\Lambda}{1-\mu} + 1\right) \epsilon \tau \sup_{\|\zeta_{n+1}\| < \epsilon} F''(w_h^n - r\zeta_{n+1}) \|\zeta_{n+1} - \zeta'_{n+1}\| \\ &\leq k_2 \tau \|\zeta_{n+1} - \zeta'_{n+1}\| \quad k_2 = \text{constante} \end{aligned}$$

Pelo tanto para τ suficientemente pequeno, $\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi(V + U^0) \\ 0 \end{bmatrix}$ é uma contração e conseqüentemente usando o Teorema 2.6.5 existe uma única solução $V = (v_n)_{n=0}^{N+1}$ tal que

$$\zeta_n = u_n + u_n^0 \quad \text{e} \quad \|\zeta_n\| \leq \epsilon \left(1 + \frac{c}{1-\mu}\right).$$

o que também implica que a solução do problema (6.29) é única.

Bibliografia

- [1] AGMON, S. *Lectures on Elliptic Boundary Value Problems*. Van Nostrand, New Yprk, 1965.
- [2] ALIKAKOS, N. D. l_p -bounds of solutions of reactions-difusion equation. *Com. Part. Diff. Eq.* **4**, 8 (1979), 827–868.
- [3] AMANN, H. Dynamic theory of quasilinear parabolic systems. *Math. Z.* **202** (1989), 219–250.
- [4] AVRIN, J. D. Qualitative theory for a model of laminar flames with arbitrary nonnegative initial data. *J. Diff. Eq.* **84** (1990), 290–308.
- [5] BRUNO, M. AND OTHERS. Processor shadowing: Maximizing expected throughput in fault tolerant-systems. *J. Theor. Biol.* **75** (1979), 249–262.
- [6] BUCKMASTER, J. AND LUDFORD, G. *Lectures on Mathematical Combustion*. SIAM, New York, 1983.
- [7] BUTZER, P.L. AND BERENS, H. *Semi-groups and approximation*. Springer-Verlag, New York, 1967.
- [8] CANTRELL, R.S. AND COSNER, C. On the steady-state problem for the Volterra-Lotka competition model with diffusion. *Houston J Math.* **13** (1987), 337–352.
- [9] CARROLL, R. W. *Abstract Methods in Partial Differential Equations*. Harper & Row, Publishers, New York, 1969.
- [10] CHANG, C.H., DAHM, W.J.A. AND TRYGGVASON, G. Lagrangian model simulations of molecular mixing, including finite rate chemical reactions, in a temporally developing shear layer. *Phys. Fluids A* **3**, 5 (1991), 1300–1311.
- [11] CHOW, S-N. AND VAN VLECK, E.S. Shadowing of lattice maps. *Contemporary Mathematics* **272** (1994), 97–113.

- [12] CIARLET, P. G. *The finite element method for elliptic problems*. North-Holland, Amsterdam, 1978.
- [13] COHEN, D.S. AND ALEXANDER, R. Chemical reactor theory and problems in diffusion. *Physica* **20 D** (1986), 122–141.
- [14] COLLET, P. AND XIN, J. Global existence and large time asymptotic bounds of L^∞ solutions of thermal diffusive combustion systems on \mathbb{R}^n . *Indiana J.* **40** (1995), 65–89.
- [15] COOMES, D. Shadowing orbits of ordinary differential equations on invariant submanifolds. *Trans. Amer. Math. Soc.* **34**, 1 (1997), 203–216.
- [16] DAHM, W.J., SOUTHERLAND, K.B. AND BUCH, H.A. Direct high resolution, four-dimensional measurements of the fine scale structure of $sc \gg 1$ molecular mixing in turbulent flows. *Phys. Fluids A: Fluid Dynamics*. **3**, 5 (1991), 1115.
- [17] DAUTRAY, R. AND LIONS, J.L. *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Sciences and Technology*, vol. 4,5. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [18] EI, S-I. AND MIMURA, M. Relaxation oscillations in combustion models of thermal self-ignition. *JJ. Dyna. Diff. Eqs.* **4** (1992), 191–229.
- [19] EIROLA, T., NEVALINA, O. AND PILYUGIN, S.Y. Limit shadowing property. *Numer. Funct. Anal. and Optimiz.* **18**, 1 & 2 (1997), 75–92.
- [20] ELLIOTT, CH. AND LARSSON, S. A finite element model for the time-dependent Joule heating problem. *Math. Comp.* **64**, 212 (1995), 1433–1453.
- [21] FIFE, P. C. *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*, vol. 840. Springer-Verlag, New York, 1981.
- [22] GILBERT, D. AND TRUDINGER, G.D. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer-Verlag, Berlin, 1977.

- [23] GIRAULT, V. AND RAVIART, P.A. *Finite element methods for Navier-Stokes equations*. Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [24] GLOWINSKI, R. *Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems*. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [25] GONZÁLEZ, C. OSTERMANN, A. PALENCIA, C., AND THALHAMMER, M. Backward Euler discretization of fully nonlinear parabolic problems. *Math. Comp.* **71** (2002), 125–141.
- [26] HAYES, W. *Efficient shadowing of high dimensional chaotic system with the large astrophysical N-body problem as an example*. Master's thesis, University of Toronto, Graduate Department of Computer Sciences, 1995.
- [27] HAYES, W. *Rigorous shadowing of numerical solutions of ordinary differential equations by containment*. Doctoral thesis., University of Toronto, Graduate Department of Computer Sciences, 2001.
- [28] HENRY, D. *Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations*, vol. 840. Springer-Verlag, 1981.
- [29] HEYWOOD, J. AND RANNACHER, R. Finite element approximation of the nonstationary Navier-Stokes problem I. regularity of solutions and second order-error estimates for spatial discretization. *SIAM J. Numer. Anal.* **19**, 2 (1982), 275–311.
- [30] HEYWOOD, J. AND RANNACHER, R. On the question of turbulence modeling by approximate inertial manifolds and the nonlinear Galerkin method. *SIAM J. Numer. Anal.* **30**, 6 (1993), 1603–1621.
- [31] HILLEN, T. AND PAINTER, K. Global existence for a parabolic chemotactic model with prevention of overcrowding. *Adv. Math. Sci. Appl.* **26**, 3 (2001), 280–301.
- [32] HUGHES, T. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Prentice-Hall, New Jersey, 1987.

- [33] JAMESON, A., SCHMIDT, E. AND TURKEL, E. Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. *AIAA* (1981), 81–1259.
- [34] JOHNSON, C., LARSSON, S., TOMÉE, V. AND WAHLBIN, L. Error estimates for spatially discrete approximation of semilinear parabolic equations with nonsmooth initial data. *Math. Comp.* **49**, 180 (1987), 331–357.
- [35] KASTEMBERG, W.E. AND CHAMBRÉ, P.L. On the stability of nonlinear space-dependent reactor kinetics. *Nucl. Sci. Eng.* **31** (1968), 67–79.
- [36] KATO, T. *Abstract evolution equations, linear and quasilinear*, vol. 1540. Springer-Verlag, New York, 1993, pp. 103–125.
- [37] KINDERLEHRER, D. AND STAMPACCHIA, G. *An Introduction to Variational Inequalities and their Applications*. Academic Press, New York, 1980.
- [38] KOUACHI, S. Existence of global solutions to reaction-diffusion systems with nonhomogeneous boundary conditions via a Lyapunov functional. *Electron. J. Diff. Eqns.* *68* (2002), 1–13.
- [39] LADAS, G.E. AND LAKSHMIKANTHAM, V. *Differential Equations in Abstract spaces*. Academic Press, New York, 1972.
- [40] LARSSON, S. AND SANZ-SERNA, J. M. A shadowing result with applications to finite element approximation of reaction-diffusion equations. *Mathematics of Computation* *68*, 225 (1999), 55–72.
- [41] LEUNG, A. *Systems of nonlinear partial differential equations*. Kluwer Academic Publishers, Oxford, 1989.
- [42] LEVIN, S. Dispersion and population interactions. *Amer. Natu.* **108** (1974), 207–228.

- [43] LIONS, J. L. *Quelques Méthodes de Résolution des Problèmes Aux Limites Non Lineaires*. Dunod, Paris, 1969.
- [44] LIU, J-G. AND WINAN, E. Simple finite element method in vorticity formulation for incompressible flows. *Math. Comp.* **70**, 234 (2000), 570–593.
- [45] LUDFORD, G. *Reacting Flows: Combustion and chemical Reactors*, vol. 1, 2. Ludford Editor, 1986.
- [46] MAIER-PAAPE, S. AND LAUTERBACH, R. Heteroclinic cycles for reaction diffusion systems by forced symmetry-breaking. *Trans. Amer. Math. Soc.* **352**, 7 (2000), 2937–2991.
- [47] MALHAM, S. AND XIN, J. X. Global solutions to reactive Boussinesq system with front data on an infinite domain. *Commun. Math. Phys.* **193** (1998), 287–316.
- [48] MANLEY, O. MARION, M. AND TEMAM, R. Equations of combustion in the presence of complex chemistry. *Ind. Univ. Math. J.* **42**, 3 (1993), 941–967.
- [49] MIMURA, M. AND MURRAY, J.D. Prey-predator model which exhibits patchiness. *J. Theor. Biol.* **75** (1979), 249–262.
- [50] MORGAN, J.J. AND HOLLIS, S.L. The existence of periodic solutions to diffusion-reactions system with periodic data. *SIAM J. Anal.* **26**, 5 (1995), 1225–1232.
- [51] MOSER, R. AND ROGERS, M. Mixing transition and the cascade to small scales in a plane mixing layer. *Phys. Fluids.* **3**, 5 (1991), 1128–1134.
- [52] OSTERMANN, A. AND PALENCIA, C. Shadowing for nonautonomous parabolic problems with applications to long-time error bounds. *SIAM J. Numer. Anal.* **37**, 5 (2000), 1399–1419.

- [53] OXELSSON, O. AND BARKER, V.A. *Finite element solution of boundary value problems: theory and computations*. Academic Press, INC, Florida, 1984.
- [54] PAO, V. *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*. Plenum Press, New York, 1992.
- [55] PAZY, A. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [56] PILYUGIN, S. *Shadowing in Dynamical Systems*, vol. 1706. Springer-Verlag, 1999.
- [57] PIRONEAU, O. On the transport-diffusion algorithm and its applications to Navier-Stokes equations. *Numer. Math.* **38** (1982), 309–332.
- [58] PROTTER, M. AND WEINBERGER, H. *Maximum principles in differential equations*. Prentice-Hall, INC, London, 1967.
- [59] QUARTERONI, A. AND VALLI, A. *Numerical approximation of partial differential equations*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [60] RASCLE, M. Sur une equation integro-differentiable nonlineare issue de biologie. *J. Diff. Eq.* **32** (1979), 420–453.
- [61] REEDY, J. *An introduction to the finite element method*. McGraw-Hill Book Company, New-York, 1984.
- [62] RILEY, J.J., METCALFE, R.W AND ORSZAG, S.A. Direct numerical simulation of chemically reacting turbulent mixing layers. *Phys. Fluids* **29**, 2 (1986), 406–422.
- [63] ROTHE, F. *Global Solutions of Reactions-Diffusion Systems*, vol. 1072. Springer-Verlag, 1984.

- [64] RUMBLE, E.T. AND KASTEMBERG, W.E. On the application of eigenfunction expansion to problems in nonlinear space-time reactor dynamics. *Commun. Math. Phys.* **49** (1972), 172–187.
- [65] SMALE, S. Some remarks on the foundations of numerical analysis. *SIAM Review* **20** (1990), 211–220.
- [66] SMOLLER, J. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [67] STEWART, H. Generation of analytic semigroups by strongly elliptic operators. *Trans. Amer. Math. Soc.* **199** (1974), 141–162.
- [68] STUART, A.M AND HUMPHRIES, A.R. *Dynamical Systems and Numerical Analysis*. Cambridge, New York, 1996.
- [69] TANAKA, N. Generation of linear evolution operators. *Proc. Amer. Math. Soc.* **128**, 7 (2000), 2007–2015.
- [70] TEMAM, R. *Navier-Stokes Equations, Theory and Numerical Analysis*. North-Holland, Amsterdam, 1979.
- [71] TEMAM, R. *Infinite-Dimensional Dynamical Systems in Mechanics and Physics*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [72] THOMÉE, V. *Galerkin finite element methods for Parabolic problems*, vol. 1054. Springer-Verlag, 1984.
- [73] TREBEL, I. *Interpolation Theory, functions spaces, Differential Operators*. North-Holland, Amsterdam, 1978.
- [74] WANG, Y. AND JIANG, J. The convergence of the class of quasi monotone reaction-diffusion system. *J. London. Math. Soc.* **64**, 2 (2001), 395–408.
- [75] WEINAN, E. AND LIU, J-G. Vorticity boundary condition and related issues for finite difference schemes. *J. Comp. Phys.* **124** (1996), 368–390.

- [76] WILLIAMS, F. *Combustion Theory*, 2nd ed. The Benjamin Cummings Publishing Co., California, 1985.
- [77] XU, J. AND ZHOU, A. Local and parallel finite element algorithms based on two-grid discretizations. *Math. Comp.* **69**, 231 (2000), 881–909.
- [78] YANG, Y., CHEN, H., AND LIU, W. On existence of global solutions and blow-up to a system of reaction-diffusion equations modelling chemotaxis. *SIAM J. Math. Anal.* **33**, 4 (2001), 763–785.
- [79] YANG, D-P. Analysis of least-squares mixed finite element methods for nonlinear nonstationary convection-diffusion problems. *Math. Comp.* **69**, 231 (2000), 929–963.
- [80] YOSIDA, K. *Functional Analysis*, 2nd ed. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [81] YOUNG, D.L., YANG, S.K. AND ELDHO, T.I. Solution of Navier-Stokes equations in velocity-vorticity form using a Eulerian-Lagrangian boundary element method. *Int. J. Num. Met. Fluids* **34** (2000), 627–650.
- [82] ZEIDLER, E. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications*, vol. 2. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [83] ZEIDLER, E. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications*, vol. 1. Springer-Verlag, Berlin, 1990.