Erro a posteriori e h-adaptação de malhas para o método de Galerkin descontínuo aplicado à equação de Poisson-Boltzmann

Paulo R. Bösing **Luciano Bedin** *
Universidade Federal de Santa Catarina – Departamento de Matemática
88040-900, Campus Trindade, Florianópolis, SC
E-mail: bosing@mtm.ufsc.br, luciano@mtm.ufsc.br

RESUMO

Sejam $K, D \subset \mathbb{R}^2$ regiões poligonais abertas convexas tais que $K \subset D$. Definimos $\Omega = D\backslash\overline{K}$ e consideramos a equação de Poisson-Boltzmann

$$\begin{aligned} &\nabla \cdot (\mathbf{k}(\mathbf{x})\nabla\psi(\mathbf{x})) - b(\mathbf{x}, \psi(\mathbf{x})) = \rho(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, \\ &\psi_2(\mathbf{x}) = \psi_1(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial K, \qquad \psi_2(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial D, \\ &(k_1\partial_\nu\psi_1 - k_2\partial_\nu\psi_2)(\mathbf{x}) = 0, \ \mathbf{x} \in \partial K. \end{aligned} \tag{1}$$

em que ν é o vetor normal unitário e exterior a K, $\psi_1 = \psi_{|K}$, $\psi_2 = \psi_{|\Omega}$, $b(\mathbf{x}, \psi(\mathbf{x})) = r_D(\mathbf{x}) \sinh(\psi(\mathbf{x}))$, $\rho \in L^2(D)$ com $supp(\rho) \subset \overline{K}$ e $\Psi \in L^2(\partial D) \cap \prod_{i=1}^J H^1(\Gamma_i)$, $\partial D = \cup_{i=1}^J \Gamma_i$. As funções $k = k(\mathbf{x})$ e $r_D = r_D(\mathbf{x})$ são dadas por

$$k(\mathbf{x}) = \begin{cases} k_1 & \text{se} \quad \mathbf{x} \in K \\ k_2 & \text{se} \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad \text{e} \quad r_D(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad \mathbf{x} \in K \\ r_d & \text{se} \quad \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases}$$

sendo $k_1 < k_2$ e r_d constantes. A primeira equação do sistema (1) é conhecida como equação de Poisson-Boltzmann e modela o potencial eletrostático ψ de macromoléculas (ocupando a região K) imersas em fluidos ionizados (ocupando a região Ω). Para detalhes do modelo ver [1] ou [2].

A existência e unicidade de soluções em $H^1(D)$ para este problema foi demonstrada em [1], bem como o fato de que $\psi \in H^{3/2}(K) \cap H^{3/2}(\Omega)$. Grande parte da dificuldade de obtenção de maior regularidade para ψ reside na presença de coeficientes descontínuos, e isso acarreta em dificuldades também na obtenção de estimadores para esquemas de aproximação. Para contornar esse problema, vamos aproximar a função $k(\mathbf{x})$ por uma função Lipschitz $k_\epsilon(\mathbf{x})$, para cada $\epsilon > 0$, com a seguinte propriedade $\|k_\epsilon - k\|_{0,p,D} \to 0$ com $\epsilon \to 0$, $\forall p > 1$, $k_1 \leq k_\epsilon \leq k_2$. Portanto, vamos considerar o seguinte problema

$$\begin{aligned} &\nabla \cdot (\mathbf{k}_\epsilon(\mathbf{x})\nabla\psi_\epsilon(\mathbf{x})) - b(\mathbf{x}, \psi_\epsilon(\mathbf{x})) = \rho(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, \\ &\psi_{2,\epsilon}(\mathbf{x}) = \psi_{1,\epsilon}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial K, \qquad \psi_{2,\epsilon}(\mathbf{x}) = \Psi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial D, \\ &(\partial_\nu\psi_{1,\epsilon} - \partial_\nu\psi_{2,\epsilon})(\mathbf{x}) = 0, \ \mathbf{x} \in \partial K; \end{aligned} \tag{2}$$

Esse problema tem uma única solução $\psi_\epsilon \in H^{3/2}(D)$ que satisfaz (2) quase sempre (ver [3]), no sentido de que a primeira equação é satisfeita separadamente em K e em Ω. Vale ressaltar que isso vale para todo subdomínio poligonal aberto $\kappa \subset D$ com $k_\epsilon\partial_\nu\psi_\epsilon|_\kappa \in L^2(\partial\kappa)$.

Desse modo, os objetivos do presente trabalho são: (i) mostrar que (2) é uma boa aproximação para (1), no sentido que $\|\psi_\epsilon - \psi\|_{1,2,D} \to 0$, com $\epsilon \to 0^+$; (ii) apresentar uma nova

*Suporte Financeiro: FAPESC-4518/2008-7

formulação do método de elementos finitos de Galerkin descontínuo para o problema (2); (iii) demonstrar uma estimativas de erro *a posteriori* para essa formulação; (iv) utilizar esse resultado para obter um processo de adaptação da malha computacional.
Palavras-chave: *Poisson-Boltzmann, Galerkin descontínuo, erro a posteriori, h-adaptação*

Referências

[1] L. Bedin, M. Thompson, M. T. Vilhena, On the Poisson-Boltzmann Equation on Non-smooth Domains, *Int. J. Diff. Equ. App.* **8** (2003), 327–360.

[2] L. Chen, M. Holst, J. Xu, The Finite Element Approximation Solutions of the Nonlinear Poisson-Boltzmann Equation, *SIAM J. Numer. Anal.*, **45**(6) (2007), 2298-2320.

[3] G. Savarè, Regularity Results for Elliptic Equations in Lipschitz Domains, *J. Func. Anal.* **152** (1998), 176-201.