Método de Galerkin descontínuo aplicado à equação de Poisson-Boltzmann

Paulo Rafael Bösing[1], **Luciano Bedin**[2]

1.- Depto. de Matemática, CFM, UFSC, 88040-900, Florianópolis, SC e-mail: bosing@mtm.ufsc.br,

2.- Depto. de Matemática, CFM, UFSC, 88040-900, Florianópolis, SC e-mail: luciano@mtm.ufsc.br.

1. 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

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

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

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

e

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

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 Bedin (2003) ou Chen (2007).

A existência e unicidade de soluções em $H^1(D)$ para este problema foi demonstrada em Bedin (2003), 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, 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 $\epsilon \to 0$, $\forall p > 1$, $k_1 \leq k_\epsilon \leq k_2$. Assim, vamos considerar o seguinte problema

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

Pode-se provar que (2) é uma boa aproximação para (1), no sentido que $\|\psi_\epsilon - \psi\|_{1,2,D} \to 0$, com $\epsilon \to 0^+$.

Para o problema (2), introduzimos uma formulação do método de elementos finitos de Galerkin descontínuo com termo de penalização. Para essa formulação apresentamos estimativas de erro *a priori* e *a posteriori*. Vale ressaltar que as estimativas *a priori* são facilmente obtidas usando resultados demonstrados em Gudi (2008). Também empregamos as estimativas *a posteriori* para estruturar um refinamento adaptativo da malha computacional.

Outro ponto importante para a resolução numérica de (2) usando Galerkin descontínuo, consiste, em dado uma poligonal K, implementar a função $\mathbf{k}_\epsilon$. Neste sentido, vamos também discutir como isso foi resolvido usando geometria computacional.

Por fim, apresentamos alguns resultados numéricos obtidos usando o método de Newton-Raphson na não linearidade do problema.

Palavras-chave: *Poisson-Boltzmann, Galerkin descontínuo, erro a posteriori, h-adaptação*

2. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio parcial da FAPESC, contrato número 4518/2008-7.

REFERÊNCIAS

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

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

Gudi, T.; Nataraj, N.; Pani, A.K. *hp*-Discontinuous Galerkin methods for strongly nonlinear elliptic boundary value problems, *Numer. Math.* **109** (2008), 233-268.