

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Estabilidade de Métodos Numéricos LCR para a Simulação de Escoamento

Luciene Ap. Bielça Silva
Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Júnior

Presidente Prudente, Fevereiro de 2014

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Estabilidade de Métodos Numéricos LCR para a Simulação de Escoamento

Luciene Ap. Bielça Silva
Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Júnior

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP de Presidente Prudente para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Presidente Prudente, Fevereiro de 2014

FICHA CATALOGRÁFICA

S581e Silva, Luciene Aparecida Bielça.
Estabilidade de métodos numéricos LCR para a simulação de escoamento / Luciene Aparecida Bielça Silva. - Presidente Prudente : [s.n.], 2014
106 f.

Orientador: Messias Meneguette Júnior
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências e Tecnologia
Inclui bibliografia

1. Termo fonte. 2. Número de Weissenberg. I. Meneguette Júnior, Messias. II. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências e Tecnologia. III. Título.

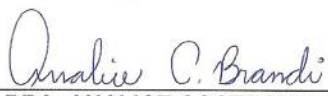
BANCA EXAMINADORA



PROF. DR. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR
ORIENTADOR



PROF. DR. FERNANDO LUIZ PIO DOS SANTOS
UNESP/IB



PROFA. DRA. ANALICE COSTACURTA BRANDI
UNESP/FCT



LUCIENE APARECIDA BIELÇA SILVA

Presidente Prudente (SP), 28 de fevereiro de 2014.

RESULTADO: Aprovada

*Ao meu esposo Silvio,
aos meus pais Antônio e Selma.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por ser o meu refúgio e a minha fortaleza; por estar sempre ao meu lado e ter me ajudado a chegar até aqui.

Ao meu esposo Silvio, aos meus pais Antônio e Selma, e aos demais familiares, pelo amor, compreensão, pelas muitas orações e apoio que me deram, especialmente em minha vida acadêmica.

Ao meu orientador Dr. Messias Meneguette Júnior, que sempre esteve presente e disposto em me atender.

Aos professores Dra. Gilcilene Sanchez, Dr. Cássio Oishi, Dr. Marcos Pimenta, Dr. Marcelo Messias, Dra. Vanessa Avansini, Dr. Ronan dos Reis, Ms. Fernando Pacanelli e também aos demais professores do PósMAC e do Departamento de Matemática,.

Às queridas amigas Gabriela e Mariane, pela amizade, paciência, e pelas muitas orações.

Aos colegas que comigo formaram a terceira turma do PósMAC. Também aos amigos de outras turmas da PósMac, em especial a Camila.

Aos professores da banca de defesa: Fernando Pio e Analice Brandi, pelas correções e sugestões para a finalização deste trabalho.

Aos funcionários da seção de Pós-Graduação, pelo carinho, disposição e boa vontade em atender.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

E por fim agradeço a todas as pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a execução desta dissertação de mestrado e não foram citadas acima.

*“Aquele que habita no esconderijo do Altíssimo,
à sombra do Onipotente descansará.
Dizei do Senhor: Ele é o meu Deus, o meu refúgio,
a minha fortaleza, e nele confiarei.”*
Salmo 91

Resumo

O presente trabalho visa um estudo de estabilidade, através de equações modelo para que, futuramente, possam ser realizadas extensões e aplicados testes diretamente às equações de Navier-Stokes acopladas de um modelo viscoelástico. Aqui, entretanto, vamos nos restringir a uma situação altamente complicada presente neste tipo de problema que está atrelada à viscoelasticidade do fluido, sintetizada, via de regra, pelo número de Weissenberg (We). Dessa forma, a pesquisa visa o estudo da estabilidade, envolvendo a técnica LCR em uma equação de transporte modelo. Isso possibilitará delinear os impactos da formulação EVSS em termos de estabilidade na solução numérica da equação do momento em Navier-Stokes quando LCR é ou não empregado.

Palavras-Chave: Termo Fonte. Número de Weissenberg.

Abstract

This work focuses on a stability study, using model equations, so that future extensions can be made, as well as testes can be applied directly to the coupled Navier-Stokes equation of a viscoelastic model. Here, however, we restrict ourselves to a highly complicated situation present in this type of problem that is tied to viscoelastic fluid, synthesized as a rule, by the number of Weissenberg (We). Thus, the research aims to a stability study, involving LCR in an transport equation model. This will allow to outline the impact of the EVSS formulation in terms of stability in the numerical solution of the momentum equation in the Navier-Stokes when LCR is used or not.

Keywords: Font Term. Number of Weissenberg.

Lista de Figuras

4.1	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.1$	46
4.2	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.05$	47
4.3	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.01$	47
4.4	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.001$	48
4.5	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.1$	49
4.6	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.05$	49
4.7	Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.01$	50
4.8	Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 10$	51
4.9	Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 100$	51
4.10	Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 500$	52
4.11	Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 1000$	52
4.12	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 1$	55
4.13	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$	55
4.14	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$	56
4.15	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$	56
4.16	Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 1$	57
4.17	Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 10$	57
4.18	Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 50$	58
4.19	Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 100$	58
4.20	Propagação da solução de (4.7) na direção das características.	60
4.21	Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.1$	61
4.22	Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.05$	62
4.23	Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.01$	62
4.24	Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 2$	63
4.25	Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 10$	64
4.26	Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 100$	64
4.27	Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 1000$	65
4.28	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.1$	67

4.29	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.05$.	67
4.30	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.01$.	68
4.31	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.001$.	68
4.32	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.1$.	69
4.33	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.05$.	70
4.34	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.01$.	70
4.35	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 2$.	71
4.36	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 3$.	72
4.37	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 5$.	72
4.38	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 10$.	73
4.39	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 100$.	73
4.40	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 2$.	74
4.41	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 5$.	75
4.42	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$.	75
4.43	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$.	76
4.44	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$.	76
4.45	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.1$.	78
4.46	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.05$.	78
4.47	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.01$.	79
4.48	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.001$.	79
4.49	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.1$.	80
4.50	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.05$.	81
4.51	Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.01$.	81
4.52	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 2$.	82
4.53	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 3$.	83
4.54	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 5$.	83
4.55	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 10$.	84
4.56	Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 100$.	84
4.57	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 2$.	85
4.58	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 5$.	86
4.59	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$.	86
4.60	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$.	87
4.61	Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$.	87

Lista de Tabelas

4.1	Erro relativo cometido ao variarmos Δt .	48
4.2	Erro relativo cometido ao variarmos Δx .	50
4.3	Erro relativo cometido ao variarmos We .	53
4.4	Erro relativo cometido ao variarmos We .	59
4.5	Erro relativo cometido ao variarmos Δt .	61
4.6	Erro relativo cometido ao variarmos We .	63
4.7	Erro relativo cometido ao variarmos Δt .	69
4.8	Erro relativo cometido ao variarmos Δx .	71
4.9	Erro relativo cometido ao variarmos Re .	74
4.10	Erro relativo cometido ao variarmos We .	77
4.11	Erro relativo cometido ao variarmos Δt .	80
4.12	Erro relativo cometido ao variarmos Δx .	82
4.13	Erro relativo cometido ao variarmos Re .	85
4.14	Erro relativo cometido ao variarmos We .	88

Lista de Siglas

EDO: Equações Diferenciais Ordinárias.

EDP: Equações Diferenciais Parciais.

HWNP: Problema do alto número de Weissenberg, do inglês High Weissenberg Number Problem.

LCR: Representação por conformação logarítmica, do inglês Log-Conformation Representation.

TVD: Variação Total Decrescente, do inglês Total Variation Diminishing.

FTCS: Progressivo no tempo centrado no espaço, do inglês Forward-Time Central-Space.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Considerações Iniciais	1
1.2	Justificativa e Relevância do Tema	3
2	Leis de Conservação Hiperbólicas	6
2.1	Sistema Hiperbólico	6
2.2	Geração das Leis de Conservação	9
2.3	Equação Hiperbólica com Termo Fonte	11
2.3.1	Origem do Termo Fonte	11
2.3.2	Termo Fonte Stiff	12
2.3.3	Equação de Transporte	12
2.4	Esquemas Numéricos	12
2.4.1	Esquemas de Integração Temporal	14
2.5	Estabilidade	18
2.5.1	Critério de Von Neumann	18
2.5.2	Critério da Matriz	20
2.5.3	Condição CFL	24
2.6	Métodos TVD	25
2.6.1	Métodos com Limitadores de Fluxo	27
2.6.2	Métodos TVD para Leis de Conservação	33
2.6.3	Convergência	34
3	Representação por <i>Log-Conformation</i>	38
3.1	Equação de Advecção Linear com Termo Fonte	38
3.1.1	Estabilidade	39
3.1.2	Erro de Truncamento Local	40
3.2	Versão LCR	42
3.2.1	Estabilidade	43

3.2.2	Erro de Truncamento Local	43
4	Resultados Numéricos	45
4.1	Equação de Advecção Linear 1D	45
4.1.1	Resultados Numéricos	45
4.1.2	Conclusão	53
4.2	Equação de Advecção Linear 2D	53
4.2.1	Resultados Numéricos	54
4.2.2	Conclusão	54
4.3	Equação de Advecção Linear com velocidade constante por partes	59
4.3.1	Resultados Numéricos	60
4.3.2	Conclusão	65
4.4	Equação de Transporte	65
4.4.1	Resultados Numéricos	66
4.4.2	Conclusão	88
5	Conclusão	89
	Referências	91

Capítulo 1

Introdução

1.1 Considerações Iniciais

Atualmente, o estudo de escoamentos incompressíveis tem se dado com sucesso graças ao desenvolvimento tecnológico. Parte muito útil neste desenvolvimento são as simulações numéricas para o escoamento de fluidos. No estudo dos escoamentos de fluidos incompressíveis, a modelagem matemática das leis de conservação é bem estabelecida pelas equações de Navier-Stokes e de conservação de massa, que podem ser escritas em forma adimensional respectivamente por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = \nabla \cdot \sigma + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.2)$$

onde t é o tempo, \mathbf{u} é o vetor campo de velocidade, \mathbf{g} é o campo gravitacional, sendo

$$\sigma = \tau - p\mathbf{I} \quad (1.3)$$

o tensor tensão total, τ o tensor tensão extra, p a pressão e \mathbf{I} o tensor identidade. Para um fluido newtoniano,

$$\tau = \frac{1}{Re} [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^t], \quad (1.4)$$

e a equação (1.1) se torna

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}. \quad (1.5)$$

Os parâmetros adimensionais $Re = LU/v$ e $Fr = U/\sqrt{gL}$ correspondem aos números de Reynolds e de Froude, em que L e U são, respectivamente, as escalas características de comprimento e de velocidade, e v é o coeficiente de viscosidade cinemática molecular do fluido. Para fluidos não newtoniano, utilizando a formulação EVSS (*elastic-viscous split stress*) [14,25], supomos que o tensor tensão extra é dado pela soma de duas parcelas: a primeira representando a contribuição newtoniana (viscosa) e, a segunda, a contribuição não-newtoniana (elástica). Assim,

$$\tau = \frac{2\beta}{Re}D + T, \quad (1.6)$$

com $\beta \in]0, 1[$ um parâmetro adimensional, onde T é definido pela equação constitutiva do fluido. Tal equação, tanto para os modelos mais antigos na literatura [4], como os da família Oldroyd-B, Maxwell, PTT e XPP, entre outros, são dados, invariavelmente por uma equação de transporte, de caráter hiperbólico e com a presença de um termo fonte.

Nas últimas décadas muito esforço tem sido dirigido na obtenção de soluções numéricas de escoamentos de fluidos viscosos incompressíveis. Uma dificuldade adicional aparece se esses escoamentos envolvem superfícies livres, pois a presença desses contornos envolve problemas como: a própria configuração da superfície livre deve ser determinada a cada passo no tempo e o movimento da superfície livre é geralmente influenciado por fenômenos interfaciais. Apesar desses inconvenientes existem vários métodos disponíveis na literatura especializada para se resolver a classe dos problemas com superfícies livres. O GENSMAC [28] baseado no método “Marker-And-Cell” (MAC) [12] tem sido usado, reconhecido [10], [6] e melhorado para altos valores de Reynolds [9].

Outra melhoria foi a utilização de métodos implícitos para diminuir o número de ciclos computacionais exigidos por métodos explícitos [21]. O valor de t se torna muito restrito devido à condição de estabilidade imposta pelos métodos explícitos, que envolvem o número de Reynolds e o espaçamento da malha. Conforme [21], as formulações implícitas possibilitaram aumentar o tamanho do passo temporal em até 500000 vezes em relação ao do método explícito sem o aparecimento de instabilidades.

No contexto desta formulação implícita alguns trabalhos são bastantes relevantes, como [18] e [22], onde se pode encontrar estudos de estabilidade usando o método matricial, analisando a influência das condições de contorno rígido empregadas em (1.5).

Paralelamente a estes estudos de estabilidade, expansões desta formulação implícita a escoamentos viscoelásticos foram realizadas. Entre elas, pode-se citar [19], onde foi usado o modelo Oldroyd-B. Temos também contribuições importantes em [16] e [20].

Estudos de estabilidade são sempre importantes, pois no caso em que o problema analisado é do tipo transiente, o conceito de estabilidade pode ser visto como uma garantia que a solução numérica é limitada. Ou seja, o estudo da estabilidade de esquemas numéricos tem como principal função apresentar qual a influência, ou mesmo qual o limite, do passo temporal na simulação.

Mais recentemente, por via da Representação por Conformação Logarítmica (Log Conformation Representation - LRC) um novo impulso foi dado [1, 7] em direção ao melhor entendimento do HWNP [11, 28].

A possibilidade de se estudar a estabilidade de métodos LCR em equações modelo, de forma a considerar todas as associações acima comentadas, se mostrou interessante na pesquisa durante este ano de trabalho.

1.2 Justificativa e Relevância do Tema

Apesar de sua relevância, um estudo fundamental ainda não foi realizado, que consiste na análise teórica da condição de estabilidade numérica dos métodos para as equações de Navier-Stokes, sem desprezar as eventuais condições de contorno, quando adaptadas para resolver um escoamento viscoelástico. Portanto, o presente trabalho pretende iniciar um estudo de estabilidade, através de equações modelo, para que, futuramente, possam ser realizados extensões e testes aplicados diretamente às equações de Navier-Stokes acopladas de um modelo viscoelástico.

Existem vários critérios para o estudo da estabilidade de um método numérico: método de perturbação discreta, critério de von Neumann, critério da matriz e método de Hirt ou método da equação modificada melhorada descrito por [13], entre outros. Estes critérios foram amplamente aplicados pela comunidade científica (como em [15,26,27,29] e outros), sobre as equações diferenciais parciais quando estas são resolvidas numericamente.

Aqui, entretanto, vamos nos restringir a uma situação altamente complicada presente no tipo de problema delineado na seção anterior, que está atrelado à viscoelasticidade do fluido, sintetizada, via de regra, pelo número de Weissenberg (We).

Simplificadamente, quanto maior We , mais intensas as interações de natureza elástica e mais decisiva no escoamento a contribuição dos termos fontes que aparecem tanto na equação de Navier-Stokes como na própria equação constitutiva do fluido. No entanto, métodos clássicos comumente empregados, que insistem em resolver (1.5) de forma análoga a (1.1) esbarram em restrições de estabilidade na magnitude de We , sobre as quais muito se discute a causa: se são restrições de natureza numérica ou intrínseca ao próprio modelo viscoelástico. Tal situação tem incomodado e despertado o interesse de diversos pesquisadores nas últimas décadas, constituindo o chamado High Weissenberg Number Problem (HWNP), [1,7,11,28].

Recentemente, o mecanismo de formação deste problema parece ter sido desvendado em [7], apontando para uma causa de natureza numérica. Efetivamente, neste trabalho pode-se constatar que, da mesma forma que a solução numérica de uma equação de convecção hiperbólica exige o respeito à condição CFL para o correto balanço da convecção, a solução da mesma equação com a adição de um termo fonte exige um tratamento mais rebuscado que o comum realizado na literatura, sob pena de imprimir as conhecidas restrições em valores moderados e altos de We . Com efeito, a solução numérica desta última precisa levar em consideração o balanço entre os termos de natureza convectiva não-linear (que gera o caráter hiperbólico) e o termo fonte elástico (que introduz uma característica *stiff* na equação diferencial parcial).

Tal situação pode ser resolvida, conforme [7], através de uma mudança de variável na equação diferencial parcial, caracterizando a chamada representação por conformação logarítmica da equação diferencial parcial (do inglês log-conformation representation ou, da sigla, LCR). Ainda segundo este trabalho, a versão LCR da equação diferencial parcial juntamente com técnicas numéricas convenientes conseguem eliminar as restrições de estabilidade impostas pelo HWNP.

Recentemente, em [2,3], foi possível realizar diversos testes numéricos utilizando uma equação de convecção linear com termo fonte. Os resultados foram muito promissores, pois, além de permitir um melhor entendimento da questão, foi marcante a imensa superioridade da solução numérica obtida com a versão LCR para a equação modelo empregada. Portanto, isto motivou fortemente que outros estudos numéricos e, principalmente de estabilidade, fossem realizados, tentando, ao final, gerar extensões que possam ser aplicáveis diretamente às equações de Navier-Stokes.

Dessa forma, o tema deste trabalho está relacionado ao estudo de estabilidade, envolvendo a técnica LCR em uma equação de transporte modelo

da forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial [F(u)]}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nabla T^1, \quad (1.7)$$

onde $F = F(u)$ é uma função de fluxo e $T = T(We, u)$ é o termo fonte, definido pela equação constitutiva do fluido

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = BT, \quad (1.8)$$

onde $B = (b(x) - \frac{1}{We})$, u é a velocidade de convecção e We é o número de Weissenberg. Assim, além da influência do termo fonte na solução numérica de uma *proto-equação constitutiva* (que pode ser obtida fazendo $\varepsilon = 0$ em (1.7)), temos interesse em analisar casos onde $\varepsilon = \frac{1}{Re}$, $Re > 0$. Futuramente, isso possibilitará delinear os impactos da formulação EVSS em termos de estabilidade na solução numérica da equação do momento em Navier-Stokes quando a formulação LCR é ou não empregada.

¹Equação obtida por meio da formulação EVSS na equação de Navier-Stokes (1.1) supondo que o tensor tensão extra é dado pela soma de duas parcelas, como em (1.6).

Capítulo 2

Leis de Conservação Hiperbólicas

2.1 Sistema Hiperbólico

Um sistema hiperbólico de leis de conservação é um sistema de EDPs hiperbólicas que apresentam uma estrutura típica e cuja função incógnita depende do tempo.

No caso de um espaço unidimensional, a estrutura citada acima é a seguinte:

$$u_t + [f(u)]_x = 0, \quad (2.1)$$

onde $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m \in \mathbb{N}^*$, é um vetor que armazena as quantidades conservadas ou variáveis de estado. Além disso, $u = u(x, t)$, onde x é a variável espacial e t é a variável temporal. Quando $m = 1$, ou seja, quando $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, dizemos que trata-se do caso escalar.

A interpretação mais adequada para u é que u_j , com $j = 1, 2, \dots, m$, é a *função densidade* para a j -ésima variável de estado, o que significa que a quantidade total de u_j em $[x_1, x_2]$ é dada por

$$\int_{x_1}^{x_2} u_j(x, t) dx. \quad (2.2)$$

O termo *conservação* é usado no sentido de que as variáveis de estado se conservam com o passar do tempo, ou seja, $\int_{x_1}^{x_2} u_j(x, t) dx$, com $j = 1, 2, \dots, m$, é constante com relação à t .

Desse modo, as funções componentes u_j de u representam a distribuição espacial da j -ésima variável de estado no tempo, mudando de acordo com o passar do tempo. Assim, conhecendo o valor de $u(x, t)$ é possível determinar a taxa de escoamento (ou fluxo) de cada variável de estado em (x, t) .

A função fluxo $f(u)$, presente em (2.1), é dada por

$$\begin{array}{l} f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m. \\ u \rightarrow f(u) \end{array} \quad (2.3)$$

Observemos que a j -ésima componente dessa função é indicada por $f_j(u)$, a qual está presente na j -ésima equação do sistema. Também podemos observar que a função (2.1) não será necessariamente linear e, portanto, o fato dela ser hiperbólica significa que, para cada valor u da matriz jacobiana $f'(u)$, os autovalores de $f'(u)$ são todos reais e o conjunto de autovetores associados é linearmente independente, o que garante a diagonalização da matriz $f'(u)$.

Observação 1. *Para especificar-mos uma solução particular em uma EDP (ou sistema de EDPs), devemos muní-la de condições auxiliares.*

Um caso particular desta situação é o problema de Riemann, que se obtém munindo a lei de conservação de uma condição inicial especial:

$$u(x, 0) = u_0(x) = \begin{cases} u_e, & \text{se } x < 0 \\ u_d, & \text{se } x > 0 \end{cases}, \quad (2.4)$$

onde u_e e u_d são duas constantes pertencentes a \mathbb{R}^m . Este problema é muito usado no desenvolvimento e teste de métodos numéricos.

No caso de um espaço bidimensional, a forma típica de um sistema de leis de conservação será

$$u_t + [f(u)]_x + [g(u)]_y = 0, \quad (2.5)$$

onde $u : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, $u = u((x, y), t) = u(x, y, t)$ e duas funções fluxos:

$$\begin{array}{l} f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m \\ u \rightarrow f(u) \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{l} g : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m. \\ u \rightarrow g(u) \end{array} \quad (2.6)$$

Teremos a hiperbolicidade desse sistema quando qualquer combinação linear $\alpha f'(u) + \beta g'(u)$ apresentar autovalores reais e um conjunto linearmente independente de autovetores associados. É evidente a generalização para outras dimensões.

Pela estrutura de uma lei de conservação, fica claro que funções fluxo possivelmente são funções não-lineares de u . Assim, poderemos ter equações sistemas de EDPs não-lineares.

A seguir, estudaremos as leis de conservação separadamente, buscando desenvolver procedimentos numéricos específicos para essa classe de equações, ou seja, não utilizaremos métodos comuns a problemas não-lineares para esta classe de problemas. Há vários motivos para isso; um deles é o seguinte:

- Em sistemas hiperbólicos de leis de conservação temos a formação e propagação de singularidades na solução, mesmo em situações em que os dados iniciais são suaves. Assim, métodos para trabalhar com soluções suaves poderão trazer efeitos desastrosos ao se depararem com descontinuidades que podem se apresentar.

Olhando para o problema mencionado acima, teremos por consequência que, quando a solução de uma lei de conservação hiperbólica apresentar descontinuidades, tal solução não irá satisfazer a EDP em seu sentido clássico¹. Assim, torna-se necessário construirmos uma lei de conservação hiperbólica a partir de princípios físicos para conseguirmos especificar o significado adequado da solução nesse contexto de leis de conservação.

Na próxima seção iremos construir tal lei de conservação. Primeiramente, conseguiremos equações envolvendo integrais (formas integrais da lei de conservação) e, posteriormente, supondo que esta seja suave, obteremos a equação diferencial (forma diferencial da lei de conservação). Desse modo, como construiremos uma lei de conservação a partir de princípios físicos e consideraremos que as formas integrais desta lei sejam suaves, poderemos ter a ampliação da classe de possíveis soluções.

Deverá ficar claro que, quanto à solução de uma lei de conservação, as formas integrais são válidas até mesmo para soluções descontínuas, porém não trabalharemos diretamente com elas pelo fato das tais nos submeter a maiores dificuldades. Assim, uma possibilidade mais interessante será trabalharmos com a forma fraca da equação diferencial que, além de também envolver integrais e possibilitar soluções descontínuas, é muito mais conveniente que as formas integrais originais. Além disso, a forma fraca da equação diferencial é muito útil no desenvolvimento e análise de métodos numéricos. A forma fraca consiste em eliminar qualquer exigência de suavidade a ser satisfeita pela

¹Isso se deve ao fato de derivadas clássicas não estarem definidas para funções descontínuas.

solução da lei de conservação. Seu arquétipo é transferir a responsabilidade das derivadas para um tipo especial de função.

Uma solução que satisfazer a forma fraca da lei de conservação será chamada de *solução fraca*. Vale observar que poderá existir mais de uma solução fraca para a lei de conservação munida de uma mesma condição inicial, o que não nos é satisfatório, pois, como nossa lei de conservação modela um problema real, somente uma solução será adequada. Assim, surge a necessidade de sabermos escolher a solução fraca fisicamente correta. Para isso, podemos recorrer ao seguinte método:

- **Método do anulamento viscoso:** consiste em inserir um termo representando viscosidade na equação diferencial, com o objetivo de obter uma nova equação com solução suave. Após isto, toma-se a solução fraca adequada como sendo o limite das soluções suaves quando se faz o coeficiente do termo viscoso tender a zero.

Porém, além deste método ser de grande importância teórica, ele se mostra inconveniente, devido ao fato de termos que recorrer à viscosidade na equação de nosso modelo, que é o que desejávamos evitar.

Apesar do método do anulamento viscoso causar grandes dificuldades, a solução fraca obtida através deste método é a fisicamente correta. A fim de evitarmos as dificuldades causadas por este método, podemos recorrer às *condições de entropia* [8], que são impostas à possível solução fraca, possibilitando que a solução fraca fisicamente correta (*solução entrópica*) seja identificada.

Assim, tendo noção de solução fraca e de apropriadas condições de entropia, conseguimos definir matematicamente uma única solução fisicamente correta (a mesma que pode ser obtida pelo método do anulamento viscoso) para uma lei de conservação hiperbólica.

2.2 Geração das Leis de Conservação

Nesta seção, ilustraremos a construção de uma lei de conservação. Mostraremos as formulações integrais e como alcançar a forma diferencial para a lei de conservação. Para isso, apresentaremos uma espécie de *receita geral*.

Como justificativa do que faremos, temos:

1. A formulação dessas equações é baseada em princípios físicos de conservação, os quais geralmente envolvem integrais quando são traduzidos para a linguagem matemática.
2. Formulações com integrais exigirão menos suavidade da solução e, assim, poderemos admitir soluções descontínuas.

Consideremos um espaço unidimensional em que a solução $u = u(x, t)$ é a quantidade conservada. Vamos escolher como volume de controle o conjunto $V = [x_1, x_2] \times [t_1, t_2]$. Temos que a quantidade total de u em $[x_1, x_2]$ no tempo $t \in [t_1, t_2]$ será dada por

$$\int_{x_1}^{x_2} u(x, t) dx. \quad (2.7)$$

Sendo $f(u(x, t))$ o fluxo de u em (x, t) , como a quantidade de u se conserva, podemos dizer que a taxa de variação da quantidade de u em $[x_1, x_2]$ com o tempo só pode ser causada pela diferença entre os fluxos de u nos extremos x_1 e x_2 .

Integrando no tempo, de t_1 a t_2 , obtemos

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \right] dt dx = - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} f(u(x, t)) \right] dx dt. \quad (2.8)$$

Aplicando o Teorema de Fubini em (2.8), obtemos

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \right] + \left[\frac{\partial}{\partial x} f(u(x, t)) \right] \right\} dt dx = 0, \quad (2.9)$$

a qual pode ser reescrita na forma

$$\iint_V \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \right] + \left[\frac{\partial}{\partial x} f(u(x, t)) \right] \right\} dt dx = 0. \quad (2.10)$$

Pelo Teorema de Green para retângulos, segue que (2.10) é equivalente a

$$\oint [u dx - f(u) dt] = 0, \quad (2.11)$$

com a integração no sentido anti-horário ao longo da fronteira do volume de controle. Em (2.9), como o volume foi especificado de forma genérica, podemos concluir que o seu integrando deverá ser nulo e, assim, obtemos

$$u_t + [f(u)]_x = 0, \quad (2.12)$$

ou seja, obtemos a *forma integral* da nossa lei de conservação.

Vale observar que (2.9) pode ser reescrita na forma

$$\int_V (u_t + (f(u)_x)) dx = 0, \quad (2.13)$$

resultando em (2.12) também. Assim, notemos que a forma integral (2.13) não impõe exigências de diferenciabilidade como a forma diferencial (2.12). Portanto, esse é o motivo da formulação integral ser usada para construção de soluções fracas.

Como vemos, conseguimos manipular uma lei de conservação de forma genérica, ou seja, sem especificar quem é a função fluxo.

Para conseguirmos resolver a lei de conservação dada em (2.12), para a função $u = u(x, t)$, precisamos que a função fluxo seja uma função algébrica completamente determinada de $u = u(x, t)$; em alguns casos, até teremos parâmetros do problema incorporados a ela.

2.3 Equação Hiperbólica com Termo Fonte

Uma lei de conservação hiperbólica com termo fonte é dada por

$$u_t + [f(u)]_x = \varphi(x, u), \quad (2.14)$$

onde $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m \in \mathbb{N}^*$, é um vetor que armazena as quantidades conservadas ou variáveis de estado e $\varphi(x, u)$ o termo fonte. Além disso, $u = u(x, t)$, onde x é a variável espacial e t é a variável temporal. Quando $m = 1$, ou seja, quando $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$, dizemos que trata-se do caso escalar.

2.3.1 Origem do Termo Fonte

Em geral, o termo fonte surge na equação hiperbólica quando há uma perda ($\varphi < 0$) ou um ganho ($\varphi > 0$) da quantidade u (no caso em que $\varphi = \varphi(u(x, t))$) ou da variável independente em φ . Assim, segundo [8], o termo fonte pode surgir por meio da reação do fluxo, das forças externas, na redução dimensional ou em derivadas de alta ordem.

2.3.2 Termo Fonte Stiff

Um termo fonte é dito ser *stiff*² quando desenvolve um crescimento ou decaimento da solução de uma forma muito brusca e rápida em um pedaço muito pequeno do domínio.

Ao perturbar levemente a solução de um problema stiff, a qualquer momento, a curva solução resultante através dos dados perturbados tem variação rápida. Em outras palavras, se estamos tentando calcular uma solução particular que é suave e varia lentamente (em relação ao intervalo de tempo de cálculo), mas em um contexto onde as curvas de solução próximas variam rapidamente.

2.3.3 Equação de Transporte

Na teoria das equações diferenciais parciais, a equação de transporte modela fenômenos convectivos, como exemplo, a transferência de calor pelo movimento de um fluido.

A equação de transporte assume a seguinte forma genérica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \Phi = f, \quad (2.15)$$

onde $\mathbf{v} \cdot \nabla \Phi$ é o termo convectivo; \mathbf{v} é um campo de vetores e pode depender do tempo, da posição e da própria incógnita Φ , ou suas derivadas.

Adicionando um termo difusivo,

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi + \mathbf{v} \cdot \nabla \Phi - \eta \Delta \Phi = f, \quad (2.16)$$

obtemos uma equação que modela fenômenos convectivos-difusivos, como a transferência de calor em um fluido pelos processos de convecção e condução.

2.4 Esquemas Numéricos

Nesta seção, apresentaremos esquemas numéricos baseados em diferenças finitas. Para isso, consideremos a equação de advecção linear

$$u_t + au_x = 0. \quad (2.17)$$

²Problemas com termo fonte stiff também são ditos possuírem *stiffness*.

Observação 2. Consideraremos $U_{i,j}$ (ou, $u_{i,j}$) como sendo a solução numérica no ponto (x_i, t_j) ; sendo Δx e Δt o tamanho dos passos espaciais e temporais, respectivamente, para simplificarmos a notação, consideraremos $\Delta x = h$ e $\Delta t = k$.

- **Método explícito - FTCS**

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + a \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h} = 0. \quad (2.18)$$

- **Método de Lax-Friedrichs**

$$\frac{U_{i,j+1} - \frac{U_{i+1,j} + U_{i-1,j}}{2}}{k} + a \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h} = 0. \quad (2.19)$$

- **Método Upwind**

Trata-se de um método que incorpora duas condições:

1. Se $a < 0$, utiliza diferenças progressivas para aproximar a derivada temporal e a derivada espacial.
2. Se $a > 0$, utiliza diferença progressiva para aproximar a derivada temporal e diferença regressiva para aproximar a derivada espacial.

Assim, temos

$$U_{i,j+1} = \begin{cases} U_{i,j} - a \frac{k}{h} (U_{i+1,j} - U_{i,j}), & \text{se } a < 0 \\ U_{i,j} - a \frac{k}{h} (U_{i,j} - U_{i-1,j}), & \text{se } a > 0 \end{cases}. \quad (2.20)$$

- **Método de Lax-Wendroff**

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + a \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h} - a^2 k \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{2h^2} = 0. \quad (2.21)$$

- **Método Leap Frog**

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2k} + a \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h} = 0. \quad (2.22)$$

- **Método de Beam-Warming**

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} - a \frac{k}{2h} (3U_{i,j} - 4U_{i-1,j} + U_{i-2,j}) + a^2 \frac{k^2}{2h^2} (U_{i,j} - 2U_{i-1,j} + U_{i-2,j}). \quad (2.23)$$

- **Método de Crank-Nicolson**

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + a \frac{(U_{i+1,j} + U_{i+1,j+1}) - (U_{i-1,j} + U_{i-1,j+1})}{4h} = 0. \quad (2.24)$$

- **Método implícito de três níveis**

$$\frac{3(U_{i,j+1} - U_{i,j})}{2k} - \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{2k} + a \frac{U_{i+1,j+1} - U_{i-1,j+1}}{2h} = 0. \quad (2.25)$$

- **Método implícito de primeira ordem**

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + a \frac{U_{i,j+1} - U_{i-1,j+1}}{h} = 0. \quad (2.26)$$

- **Método implícito de Wendroff (Método Box)**

$$U_{i+1,j+1} = U_{i,j} + \frac{1 - a \frac{k}{h}}{1 + a \frac{k}{h}} (U_{i+1,j} - U_{i,j+1}). \quad (2.27)$$

2.4.1 Esquemas de Integração Temporal

Nesta seção, considerando a equação

$$u_t + au_x = \varepsilon u_{xx}, \quad (\varepsilon > 0) \quad (2.28)$$

apresentaremos alguns esquemas de integração temporal³.

- **Método de Euler Explícito:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + k \left[-a \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + \varepsilon \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \right], \quad (2.29)$$

o qual pode ser reescrito na forma

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + kf(t_j, u_j). \quad (2.30)$$

³Não vamos usar todos, mas decidimos incluir aqui um rol bastante abrangente.

- **Método de Euler Implícito:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + k \left[-a \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i-1,j+1}}{2h} + \varepsilon \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2} \right], \quad (2.31)$$

o qual pode ser reescrito na forma

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + kf(t_{j+1}, u_{j+1}). \quad (2.32)$$

- **Método Runge-Kutta de 2ª ordem:**

$$u_{i,j+\frac{1}{2}} = u_{i,j} + \frac{k}{2} f(t_j, u_j), \quad (2.33)$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + k \left[f(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{j+\frac{1}{2}}) \right]. \quad (2.34)$$

- **Método Runge-Kutta de 4ª ordem:**

$$u_{i,(j+\frac{1}{2})^*} = u_{i,j} + \frac{k}{2} f(t_j, u_j), \quad (2.35)$$

$$u_{i,(j+\frac{1}{2})^{**}} = u_{i,j} + \frac{k}{2} f(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{(j+\frac{1}{2})^*}), \quad (2.36)$$

$$u_{i,(j+1)^*} = u_{i,j} + kf(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{(j+\frac{1}{2})^{**}}), \quad (2.37)$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{6} \left[f(t_j, u_j) + 2f(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{(j+\frac{1}{2})^*}) + \right. \\ \left. + 2f(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{(j+\frac{1}{2})^{**}}) + f(t_{j+\frac{1}{2}}, u_{(j+\frac{1}{2})^*}) \right]. \quad (2.38)$$

- **Método de Adams-Bashforth de dois passos:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{2} [3f(t_j, u_j) - f(t_{j-1}, u_{j-1})]. \quad (2.39)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = \frac{5}{12} k^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}. \quad (2.40)$$

- **Método de Adams-Bashforth de três passos:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{12} [23f(t_j, u_j) - 16f(t_{j-1}, u_{j-1}) + 5f(t_{j-2}, u_{j-2})]. \quad (2.41)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = \frac{3}{8} k^3 \frac{\partial^4 u}{\partial t^4}. \quad (2.42)$$

- **Método de Adams-Bashforth de quatro passos:**

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} = & u_{i,j} + \frac{k}{24} [55f(t_j, u_j) - 59f(t_{j-1}, u_{j-1}) + \\ & + 37f(t_{j-2}, u_{j-2}) - 9f(t_{j-3}, u_{j-3})]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = \frac{251}{720} k^4 \frac{\partial^5 u}{\partial t^5}. \quad (2.44)$$

- **Método de Adams-Bashforth de cinco passos:**

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} = & u_{i,j} + \frac{k}{720} [1901f(t_j, u_j) - 2774f(t_{j-1}, u_{j-1}) + \\ & + 2616f(t_{j-2}, u_{j-2}) - 1274f(t_{j-3}, u_{j-3}) + \\ & + 251f(t_{j-4}, u_{j-4})]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = \frac{95}{288} k^5 \frac{\partial^6 u}{\partial t^6}. \quad (2.46)$$

- **Método de Adams-Moulton de dois passos:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{12} [5f(t_{j+1}, u_{j+1}) + 8f(t_j, u_j) - f(t_{j-1}, u_{j-1})]. \quad (2.47)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = -\frac{1}{24} k^3 \frac{\partial^4 u}{\partial t^4}. \quad (2.48)$$

- **Método de Adams-Moulton de três passos:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{24} [9f(t_{j+1}, u_{j+1}) + 19f(t_j, u_j) - 5f(t_{j-1}, u_{j-1}) + f(t_{j-2}, u_{j-2})]. \quad (2.49)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = -\frac{19}{720} k^4 \frac{\partial^5 u}{\partial t^5}. \quad (2.50)$$

• **Método de Adams-Moulton de quatro passos:**

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{720} [251f(t_{j+1}, u_{j+1}) + 646f(t_j, u_j) - 264f(t_{j-1}, u_{j-1}) + 106f(t_{j-2}, u_{j-2}) - 19f(t_{j-3}, u_{j-3})]. \quad (2.51)$$

Erro de truncamento local:

$$\tau_j = -\frac{3}{160} k^5 \frac{\partial^6 u}{\partial t^6}. \quad (2.52)$$

• **Método predictor-corrector de 3ª ordem:**

$$u_{i,j+1*} = u_{i,j} + \frac{k}{12} [23f(t_j, u_j) - 16f(t_{j-1}, u_{j-1}) + 5f(t_{j-2}, u_{j-2})]. \quad (2.53)$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{12} [5f(t_{j+1*}, u_{j+1*}) + 8f(t_j, u_j) - f(t_{j-1}, u_{j-1})]. \quad (2.54)$$

• **Método predictor-corrector de 4ª ordem:**

$$u_{i,j+1*} = u_{i,j} + \frac{k}{720} [1901f(t_j, u_j) - 2774f(t_{j-1}, u_{j-1}) + 2616f(t_{j-2}, u_{j-2}) - 1274f(t_{j-3}, u_{j-3}) + 251f(t_{j-4}, u_{j-4})]. \quad (2.55)$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{k}{24} [9f(t_{j+1*}, u_{j+1*}) + 19f(t_j, u_j) - 5f(t_{j-1}, u_{j-1}) + f(t_{j-2}, u_{j-2})]. \quad (2.56)$$

Ainda considerando a equação (2.28), utilizando aproximações centradas para as derivadas espaciais, Euler para a derivada temporal, temos

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = -a \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + \varepsilon \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}, \quad (2.57)$$

o qual pode ser reescrito na forma

$$u_{i,j+1} = \left(1 - \frac{2\varepsilon k}{h^2}\right) u_{i,j} + \frac{\varepsilon k}{h^2} \left(1 - \frac{ah}{2\varepsilon}\right) u_{i+1,j} + \frac{\varepsilon k}{h^2} \left(1 + \frac{ah}{2\varepsilon}\right) u_{i-1,j}. \quad (2.58)$$

2.5 Estabilidade

2.5.1 Critério de Von Neumann

O critério de von Neumann, inspirado pela expansão de uma função em série de Fourier, possibilita a análise e estabelecimento da estabilidade de um esquema numérico. Este critério se baseia no princípio da superposição, ou seja, este critério considera que o erro global pode ser dado pelo somatório de erros mais simples (erros harmônicos). Assim, sendo e_i , com $i = 0, 1, \dots, N$, o erro global em cada ponto da linha inicial em que $t = 0$, segue que

$$e_i = \sum_{n=0}^N a_n e^{I\alpha_n i h}, \quad (2.59)$$

onde h é o passo espacial, $I = \sqrt{-1}$ e $\alpha_n = \frac{n\pi}{Nh}$.

Podemos notar que a expressão (2.59) é um sistema de $N + 1$ equações e incógnitas e, além disso, tem a matriz dos coeficientes não singular. Desta forma, podemos resolvê-la de forma única para determinarmos α_n , sendo $n = 0, 1, \dots, N$.

Observemos que (2.59) corresponde à representação do erro no passo inicial. Para analisarmos a propagação do erro com o transcorrer dos passos, deveremos observar a propagação de um erro (harmônico) genérico dado por

$$e^{\lambda j k} e^{I\beta i h}, \quad (2.60)$$

onde $\beta \in \mathbb{R}$ e $\lambda \in \mathbb{C}$ são arbitrários. Desta forma, segue que a análise da estabilidade a partir deste critério consiste em examinar o resultado de um dado modo de Fourier em linhas subsequentes j . Assim, o método será *instável* quando houver a amplificação deste harmônico e *estável* quando houver o amortecimento do mesmo.

Este critério, apesar de sua brilhante idéia, só poderá ser utilizado para equações lineares e com coeficientes constantes, devido ao fato de se valer do princípio da superposição. Além disso, este critério desconsidera a influência de possíveis condições de fronteira sobre o comportamento da solução produzida pelo esquema numérico.

A aplicação deste critério, na prática, consiste em admitir que haja uma solução da equação a diferenças na seguinte forma:

$$U_{i,j} = e^{\lambda j} e^{I\beta i} = (e^\lambda)^j e^{I\beta i} \quad (2.61)$$

onde e^λ é o fator de amplificação.

Assim, ao encontrarmos uma expressão para e^λ , devemos impor que

$$|e^\lambda| \leq 1, \quad (2.62)$$

para evitarmos que (2.61) não oscile com amplitudes crescentes na situação limite em que $j \rightarrow \infty$, causando a instabilidade do método. Desta forma, podemos notar que uma condição necessária para a estabilidade da equação a diferenças é estipular que o fator de amplificação e^λ obedeça (2.62).

Exemplo 1. *Consideremos a equação de difusão*

$$u_t = \varepsilon u_{xx} \quad (\varepsilon > 0) \quad (2.63)$$

e o método explícito - FTCS associado

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} = \varepsilon \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}. \quad (2.64)$$

Seguindo o critério de von Neumann, temos que

$$U_{i,j} = e^{\lambda j} e^{I\beta i}; \quad (2.65)$$

$$U_{i,j+1} = e^{\lambda(j+1)} e^{I\beta i}; \quad (2.66)$$

$$U_{i+1,j} = e^{\lambda j} e^{I\beta(i+1)}; \quad (2.67)$$

$$U_{i-1,j} = e^{\lambda j} e^{I\beta(i-1)}. \quad (2.68)$$

Assim, substituindo (2.65), (2.66), (2.67) e (2.68) em (2.64), temos

$$\frac{e^{\lambda(j+1)} e^{I\beta i} - e^{\lambda j} e^{I\beta i}}{k} = \varepsilon \frac{e^{\lambda j} e^{I\beta(i+1)} - 2e^{\lambda j} e^{I\beta i} + e^{\lambda j} e^{I\beta(i-1)}}{h^2}.$$

Fazendo as devidas simplificações, obtemos

$$e^\lambda = 1 + \varepsilon \frac{2k}{h^2} (-1 + \cos \beta). \quad (2.69)$$

Se exigirmos que o método seja estável, ou seja, que $|e^\lambda| \leq 1$, teremos

$$0 \leq \varepsilon \frac{k}{h^2} \leq \frac{1}{(1 - \cos \beta)}. \quad (2.70)$$

Desta forma, para todo $\beta \in \mathbb{R}$, temos que

$$\varepsilon \frac{k}{h^2} \leq \frac{1}{2} \quad (2.71)$$

será uma condição necessária para haver estabilidade. Assim, o método explícito - FTCS será condicionalmente estável.

2.5.2 Critério da Matriz

Consideremos o problema de Dirichlet, envolvendo a equação de difusão:

$$\begin{cases} u_t = \varepsilon u_{xx}, \quad \varepsilon > 0, \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \\ u(x, 0) = \phi(x), \quad 0 \leq x \leq L \\ u(0, t) = f(t), \quad t > 0 \\ u(L, t) = g(t), \quad t > 0 \end{cases} \quad (2.72)$$

Com o objetivo de exemplificar a idéia que está por trás do critério da matriz, iremos utilizar o método explícito - FTCS associado ao problema (2.72), que neste caso será dado por

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} = \varepsilon \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}. \quad (2.73)$$

A discretização da equação (2.72) com suas condições auxiliares nos fornece a seguinte equação de diferenças:

$$\begin{cases} U_{i,j+1} = \sigma U_{i-1,j} + (1 - 2\sigma)U_{i,j} + \sigma U_{i+1,j}, \quad i = 1, 2, \dots, (N - 1), \quad j = 0, 1, 2, \dots \\ U_{i,0} = \phi(ih), \quad i = 1, 2, \dots, N \\ U_{0,j} = f(jk), \quad j = 1, 2, \dots \\ U_{N,j} = g(jk), \quad j = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.74)$$

onde

$$\sigma = \varepsilon \frac{k}{h^2}. \quad (2.75)$$

Introduzindo a notação vetorial

$$U_j = \begin{bmatrix} U_{1,j} \\ U_{2,j} \\ \vdots \\ U_{N-1,j} \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

podemos escrever, para cada j , a equação (2.74) na forma matricial

$$U_{j+1} = AU_j + c_j, \quad (2.77)$$

onde a matriz A é dada por

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\sigma & \sigma & 0 & \cdots & 0 \\ \sigma & 1-2\sigma & \sigma & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \sigma & 1-2\sigma & \sigma \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma & 1-2\sigma \end{bmatrix}_{(N-1) \times (N-1)} \quad (2.78)$$

e c_j é o vetor coluna, dado por

$$c_j = \begin{bmatrix} \sigma U_{0,j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sigma U_{N,j} \end{bmatrix}_{(N-1)}. \quad (2.79)$$

Introduzindo de maneira análoga os vetores u_j , τ_j e e_j representando, respectivamente, a solução exata, o erro de truncamento local e o erro global ao longo do nível j da malha, e dados por

$$u_j = \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix}, \quad \tau_j = \begin{bmatrix} \tau_{1,j} \\ \tau_{2,j} \\ \vdots \\ \tau_{N-1,j} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad e_j = \begin{bmatrix} e_{1,j} \\ e_{2,j} \\ \vdots \\ e_{N-1,j} \end{bmatrix} \quad (2.80)$$

temos a seguinte expressão matricial para o erro de truncamento local:

$$u_{j+1} = Au_j + c_j + \tau_j. \quad (2.81)$$

Subtraindo (2.77) de (2.81), resulta a seguinte equação vetorial para o erro global:

$$e_{j+1} = Ae_j + \tau_j. \quad (2.82)$$

Aplicando a equação (2.82) recursivamente para $j, j-1, j-2, \dots, 0$, conseguimos obter

$$e_{j+1} = A^{j+1}e_0 + A^j\tau_0 + A^{j-1}\tau_1 + A^{j-2}\tau_2 + \dots + A\tau_{j-1} + \tau_j. \quad (2.83)$$

Lembrando que $e_0 = 0$ (especificado na condição inicial), segue de (2.83) que

$$e_{j+1} = \sum_{b=0}^j A^{j-b}\tau_b. \quad (2.84)$$

De (2.84), vê-se que o erro global é formado pelo acúmulo dos erros de truncamento local de cada passo, amplificados pelas potências da matriz A . Assim, a matriz A é responsável pela propagação desse erro, e, por esse motivo, recebe o nome de *matriz de amplificação*. Desta forma, se todos os autovalores de A tem módulo menor que 1, teremos o erro decrescendo e, portanto, teremos estabilidade.

Uma equação a diferenças dada na forma vetorial

$$U_{j+1} = AU_j + c_j \quad (2.85)$$

é estável com relação a uma norma $\|\cdot\|$ se, e somente se, existem constantes $h_0 > 0$, $k_0 > 0$, $K \geq 0$ e $\beta \geq 0$ de forma que

$$\|A^n\| \leq ke^{\beta t} \quad (2.86)$$

sempre que $0 \leq t = nk$, $0 < h \leq h_0$ e $0 < k \leq k_0$.

Particularmente, um método será estável se os autovalores λ_i de A forem linearmente independentes e todos eles satisfazerem

$$|\lambda_i| \leq 1 + O(k), i = 1, 2, \dots, (N-1). \quad (2.87)$$

Voltando ao nosso problema proposto em (2.72), temos que o i -ésimo autovetor da matriz de amplificação do método explícito - FTCS será dado

por

$$v_i = \begin{bmatrix} \sin\left(\frac{i\pi}{N}\right) \\ \sin\left(\frac{2i\pi}{N}\right) \\ \vdots \\ \sin\left(\frac{(N-1)i\pi}{N}\right) \end{bmatrix}. \quad (2.88)$$

Como os autovalores associados a A serão dados por

$$\lambda_i = 1 - 4\sigma \operatorname{sen}^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right), \quad i = 1, 2, \dots, (N-1), \quad (2.89)$$

para haver estabilidade, o critério da matriz exigirá que

$$|\lambda_i| = \left| 1 - 4\sigma \operatorname{sen}^2\left(\frac{i\pi}{2N}\right) \right| \leq 1 + O(k), \quad (2.90)$$

o que implica

$$\sigma \leq \frac{1}{2}. \quad (2.91)$$

Podemos notar que a matriz A de um método numérico geralmente terá seus elementos dependentes do parâmetro σ , e, desta maneira, para determinar a estabilidade desse método numérico devemos determinar os autovalores de uma matriz arbitrária de ordem $(N-1)$, cujos elementos dependem de σ . Esta tarefa não é fácil. Assim, com o objetivo de facilitar esta tarefa, contamos com alguns resultados da álgebra linear⁴.

Teorema 1. (Gerschgorin): *Considere $A = (a_{i,j})_{m \times n}$, $d_i = \sum_{j=1}^m |a_{i,j}|$, $r_i = d_i - |a_{ii}|$. Seja λ o maior autovalor de A , em módulo. Então,*

1. $\lambda \leq \max_{1 \leq i \leq m} d_i$;
2. Os autovalores de A estão, no plano complexo, na união dos discos de centro $|a_{ii}|$ e raio r_i , $i = 1, 2, \dots, m$.

Aplicando o resultado acima na matriz de amplificação do método explícito - FTCS, lembrando que sempre $\sigma > 0$, segue que

$$\max_{1 \leq i \leq m} d_i = |\sigma| + |1 - 2\sigma| + |\sigma| = |1 - 2\sigma| + 2\sigma. \quad (2.92)$$

Desta forma, surgem duas possibilidades:

⁴Estes resultados da álgebra linear auxiliam na tarefa de encontrar limitantes para estes autovalores.

- Se $(1 - 2\sigma) \geq 0$, teremos

$$\lambda \leq |1 - 2\sigma| + 2\sigma = 1 - 2\sigma + 2\sigma = 1. \quad (2.93)$$

Neste caso, o método será estável, pois o módulo de qualquer autovalor de A será menor ou igual a unidade.

- Se $(1 - 2\sigma) < 0$, teremos

$$\lambda \leq |1 - 2\sigma| + 2\sigma = -1 + 2\sigma + 2\sigma = 4\sigma - 1. \quad (2.94)$$

Neste caso, para que o valor do maior autovalor de A seja, em módulo, menor ou igual a unidade, é preciso que

$$\sigma \leq \frac{1}{2}, \quad (2.95)$$

o que é um absurdo, pois neste caso estamos tratando da possibilidade em que $(1 - 2\sigma) < 0$. Assim, no caso em que $(1 - 2\sigma) < 0$, não podemos garantir, pelo teorema de Gerschgorin, que um limitante superior para o módulo dos autovalores de A seja menor que a unidade.

Desse modo, devemos impor $(1 - 2\sigma) \geq 0$ para garantir a estabilidade do método explícito - FTCS, o que coincide com o resultado apresentado pelo critério de von Neumann e também com a análise feita a partir da expressão (2.89) para os autovalores da matriz A dada em (2.78).

2.5.3 Condição CFL

A condição de Courant, Friedrichs e Lewy (CFL) é uma condição essencial que devemos impor para a convergência e estabilidade de um esquema voltado às equações hiperbólicas.

Este método consiste em exigir que todos os pontos que contribuírem para a solução exata em um dado ponto P deverão influenciar a solução em P , a fim de evitar que ao refinarmos a malha, mantendo a razão entre os passos constantes⁵, a solução proporcionada pelo método não convirja para P . Assim, esta condição requer que o intervalo de dependência numérica contenha o intervalo de dependência da solução analítica (ponto de onde partiu a curva característica que passou por P).

⁵Devemos manter os passos constantes para que os pontos que não estão na região de dependência da solução numérica em P continuem fora desta região.

Observação 3. Em um método explícito que utilize 3 pontos $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ e $u_{i+1,j}$ (no nível j , como se vê) para calcular $U_{i,j+1}$, a condição CFL exige que a característica que passa por $P = (ih, (j+1)k)$ corte a linha $t = jk$, entre os pontos $((i-1)h, jk)$ e $((i+1)h, jk)$.

2.6 Métodos TVD

A total variação de uma função está relacionada com a medida das oscilações de sua solução.

A total variação para uma função discreta $U_{i,j}$, com relação ao seu índice i , é definida como

$$TV (U_{:,j}) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} |U_{i+1,j} - U_{i,j}|. \quad (2.96)$$

Já no caso de uma função $u = u(x, t)$, a total variação com relação a x no instante t é definida como sendo:

$$TV (u(:, t)) = \sup \sum_{i=1}^N |u(x_{i+1}, t) - u(x_i, t)|, \quad (2.97)$$

ou

$$TV (u(:, t)) = \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} |u(x, t) - u(x - \varepsilon, t)| dx, \quad (2.98)$$

que se reduz a

$$TV (u(:, t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_x(x, t)| dx. \quad (2.99)$$

Observação 4. Em (2.97), o supremo é tomado sobre todas as partições $-\infty = x_1 < x_2 < \dots < x_N = +\infty$ da reta real.

De (2.96) e (2.97) segue que, para a total variação ser finita, é preciso que U e u se aproximem de valores constantes quando, respectivamente, $i \rightarrow \pm\infty$ e $x \rightarrow \pm\infty$.

Considerando a equação de advecção linear, se um esquema para tal equação introduzir oscilações espúrias ao tentar aproximar sua solução exata, teremos, com o suceder dos passos temporais, o aumento indevido da total variação de $U_{i,j}$ com relação a i . Assim, uma condição suficiente para evitar o

aparecimento de oscilações não físicas é exigir que a total variação da solução numérica $U_{i,j}$ com relação ao índice i não aumentará com o transcorrer dos passos temporais.

Definição 1. Dizemos que um método explícito de dois níveis tem total variação decrescente (TVD) se, para quaisquer que sejam os dados iniciais $U_{i,j}$, em $t = t_j$, os valores $U_{i,j+1}$, em $t = t_{j+1}$, satisfazem

$$TV(U_{:,j+1}) \leq TV(U_{:,j}). \quad (2.100)$$

Novamente considerando a equação de advecção linear, temos que um método numérico para tal equação não necessita, literalmente, decrescer com o transcorrer do tempo, sendo suficiente não aumentar. Nesse caso, ao invés de dizermos que tal método apresenta a total variação decrescente (propriedade (2.100)), um termo mais apropriado seria dizermos tratar-se de um esquema com *total variação não crescente*.

Uma condição necessária para evitar o aparecimento de oscilações espúrias é a garantia de que, com o transcorrer dos passos temporais, o esquema numérico preservará a monotonicidade da solução.

Definição 2. Dizemos que um esquema numérico preserva a monotonicidade dos dados fornecidos se, $\forall i$,

$$U_{i,j} \geq U_{i+1,j} \quad (U_{i,j} \leq U_{i+1,j}) \quad (2.101)$$

implica que, $\forall i$,

$$U_{i,j+1} \geq U_{i+1,j+1} \quad (U_{i,j+1} \leq U_{i+1,j+1}). \quad (2.102)$$

Observação 5. É possível mostrar⁶ que um esquema TVD irá preservar a monotonicidade dos dados.

Exigir que um método seja TVD é algo suficiente para evitar o aparecimento das oscilações espúrias. Dessa forma, para obter esquemas não oscilatórios, podemos considerar a seguinte:

Definição 3. Um esquema explícito de dois níveis é dito ser essencialmente não oscilatório (ENO) se a solução por ele produzida satisfaz

$$TV(U_{:,j+1}) \leq TV(U_{:,j}) + O(h^p), \quad (2.103)$$

$\forall j \in \mathbb{N}$ e algum $p \in \mathbb{N}^*$ (pois, se $p = 0$, teríamos um esquema TVD).

⁶Aplicando contraposição lógica nesta proposição, pode-se notar que um esquema que não preserva a monotonicidade terá sua total variação aumentada.

Observação 6. *A definição acima relaxa a condição TVD, porém, a medida que $h \rightarrow 0$, o esquema numérico (ENO) aproxima-se cada vez mais de um esquema TVD e garante o não surgimento de oscilações espúrias.*

Um esquema TVD garante que a aproximação de uma descontinuidade será feita com qualidade, sem oscilações (pois preserva a monotonicidade da solução), porém, o fato de um método ser TVD não garante que a aproximação por ele produzida não se caracterizará por uma suavização excessiva das descontinuidades (por exemplo, o método Upwind, o qual mesmo sendo TVD apresenta tal defeito por ser de primeira ordem). Apesar disso, para que um esquema TVD seja de alta resolução⁷, basta escolhermos limitantes convenientes [8]. Para um estudo mais completo ver [4, 25].

Observação 7. *Na literatura, quando trata-se de "métodos TVD de segunda ordem", refere-se a métodos TVD nos quais a segunda ordem é obtida em porções suaves e fora dos extremos locais.*

Assim, somos remetidos ao estudo de métodos com limitadores de fluxo.

2.6.1 Métodos com Limitadores de Fluxo

Na tentativa de obter-se esquemas TVD de segunda ordem de precisão em porções suaves, uma maneira interessante é escrever um método com limitante de fluxo na forma conservativa.

Isto pode ser feito, de uma forma mais geral, combinando os fluxos $F_{i-1/2,j}^L$ e $F_{i-1/2,j}^H$ de um método de baixa (primeira) e alta (segunda) ordem, respectivamente, escrevendo

$$F_{i-1/2,j} = F_{i-1/2,j}^L + \phi_{i-1/2,j} (F_{i-1/2,j}^H - F_{i-1/2,j}^L). \quad (2.104)$$

Dessa forma, temos um fluxo difusivo $F_{i-1/2,j}^L$ corrigido por um fluxo antidifusivo $(F_{i-1/2,j}^H - F_{i-1/2,j}^L)$ através de uma dosagem $\phi_{i-1/2,j}$. Comumente, toma-se $F_{i-1/2,j}^L$ e $F_{i-1/2,j}^H$ como sendo o fluxo numérico do método Upwind e o fluxo numérico do método de Lax-Wendroff, respectivamente; isso é empregado devido ao fato destes métodos produzirem melhores resultados dentro dos requisitos que esperamos para $F_{i-1/2,j}^L$ e $F_{i-1/2,j}^H$. Vale

⁷Isto é, manter descontinuidades bem definidas e apresentar, pelos menos, segunda ordem de precisão em porções suaves.

observar que, em porções suaves, é interessante que tenhamos $\phi_{i-1/2,j} \approx 1$; já em porções íngremes (como em descontinuidade) é interessante (caso seja possível) tomarmos $\phi_{i-1/2,j} \approx 0$, a fim de evitar que oscilações espúrias sejam produzidas pela atuação do termo antidifusivo.

Para a equação de advecção linear, fazendo tal escolha em (2.104), obtemos

$$F_{i-1/2,j} = a^+ U_{i-1,j} + a^- U_{i,j} + \frac{1}{2} |a| \left(1 - \frac{k}{h} |a| \right) \phi_{i-1/2,j} \Delta U_{i-1/2,j}. \quad (2.105)$$

onde $\Delta U_{i-1/2,j} = U_{i,j} - U_{i-1,j}$. Neste caso, a condição CFL exigirá do método resultante que $v \leq 1$.

Observação 8. *Não é possível provar que esquemas de alta precisão da forma (2.104) fornecem soluções entrópicas. Porém, evidências numéricas apontam firmemente nessa direção, sendo conjecturado por Sweby que tais esquemas herdaram a propriedade de fornecer soluções entrópicas dos esquemas de baixa ordem [8].*

Para determinarmos ϕ , podemos fazer

$$\phi_{i-1/2,j} = \phi_{i-1/2,j}(\theta_{i-1/2,j}), \quad (2.106)$$

onde

$$\theta_{i-1/2,j} = \frac{\Delta U_{I-1/2,j}}{\Delta U_{i-1/2,j}}, \quad (2.107)$$

com

$$I = \begin{cases} i - 1, & \text{se } a > 0 \\ i + 1, & \text{se } a < 0 \end{cases}. \quad (2.108)$$

Observação 9. *O índice I será escolhido de forma conveniente para indicar o volume Upwind com relação à interface $x = x_{i-1/2}$; a razão indicada em (2.107) funciona como uma medida ou parâmetro relativo à suavidade local da solução em um dado instante de tempo.*

Desse modo, queremos que o limitador de fluxo $\phi_{i-1/2,j}$ reaja bem à informação passada pelo medidor de suavidade $\theta_{i-1/2,j}$, com $\phi_{i-1/2,j} \approx 1$ quando $\theta_{i-1/2,j} \approx 1$ e $\phi_{i-1/2,j} \approx 0$ quando $\theta_{i-1/2,j}$ for bem diferente de 1.

Podemos observar que, a partir de (2.105) e (2.107) conseguimos obter os métodos clássicos já vistos anteriormente, apenas fazendo as devidas escolhas para a função $\phi = \phi(\theta)$:

- Método Upwind

$$\phi(\theta) = 0. \quad (2.109)$$

- Método de Lax-Wendroff

$$\phi(\theta) = 1. \quad (2.110)$$

Para que o método resultante da escolha da função limitadora satisfaça a propriedade TVD e seja de segunda ordem em porções suaves, deveremos estabelecer restrições que $\phi = \phi(\theta)$ deverá satisfazer. Nesse sentido, buscando meios para conseguirmos esquemas com tais propriedades, podemos utilizar o teorema de Harten como uma importante ferramenta, pois o mesmo pode ser utilizado para criarmos uma condição suficiente para que o esquema induzido pelo limitador ϕ seja TVD.

Antes de introduzirmos o Teorema de Harten, consideremos as definições a seguir.

Definição 4. *Um esquema explícito de dois níveis, dado por*

$$U_{i,j+1} = \mu(U_{i-p-1,j}, \dots, U_{i+q,j}), \quad (2.111)$$

em que $\mu : \mathbb{R}^{p+q+2} \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função contínua, pode ser escrito na forma incremental (forma-I) se existirem duas funções C e D de $p+q+2$ variáveis, chamadas de coeficientes incrementais, dadas por

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= C(U_{i-p-1,j}, \dots, U_{i+q,j}) \\ D_{i,j} &= D(U_{i-p-1,j}, \dots, U_{i+q,j}) \end{aligned} \quad (2.112)$$

tais que o esquema possa ser escrito equivalentemente com

$$U_{i,j+1} = U_{i,j} - C_{i-1,j}(U_{i,j} - U_{i-1,j}) + D_{i,j}(U_{i+1,j} - U_{i,j}). \quad (2.113)$$

Definição 5. *Um esquema na forma conservativa, com função de fluxo numérico dada por*

$$F_{i-1/2} = \frac{1}{2}[f(U_{i-1,j}) + f(U_{i,j})] - \frac{h}{2k}Q_{i-1/2,j}(U_{i,j} - U_{i-1,j}) \quad (2.114)$$

estará na forma-Q quando estiver escrito na forma

$$\begin{aligned} U_{i,j+1} &= U_{i,j} - \frac{h}{2k}[f(U_{i+1,j}) - f(U_{i-1,j})] + \\ &+ \frac{1}{2}[Q_{i+1/2,j}(U_{i+1,j} - U_{i,j}) - Q_{i-1/2,j}(U_{i,j} - U_{i-1,j})], \end{aligned} \quad (2.115)$$

onde $Q_{i-1/2,j}$ é o coeficiente de viscosidade numérica⁸ do método.

Observação 10. Dado um esquema na forma-Q, tomando

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= \frac{1}{2}(Q_{i+1/2,j} + \frac{k}{h}s_{i+1/2,j}) \\ D_{i,j} &= \frac{1}{2}(Q_{i+1/2,j} - \frac{k}{h}s_{i+1/2,j}) \end{aligned} \quad (2.116)$$

é possível escrevê-lo na forma-I. Inversamente, se o esquema está na forma-I, então, ele pode ser reescrito equivalentemente na forma-Q, apenas considerando

$$Q_{i+1/2,j} = C_{i,j} + D_{i,j}. \quad (2.117)$$

Teorema 2. (Harten): Considere um esquema na forma-I. Logo, se

$$\begin{cases} C_{i-1,j} \geq 0 \\ D_{i,j} \geq 0 \\ C_{i,j} + D_{i,j} \leq 1 \end{cases}, \quad (2.118)$$

então, temos que

$$TV(U_{:,j+1}) \leq TV(U_{:,j}). \quad (2.119)$$

Considerando $a > 0$, podemos escrever o esquema resultante do fluxo numérico (2.105) na forma-I, tomando

$$\begin{aligned} C_{i-1,j} &= v - \frac{1}{2}v(1-v)\phi(\theta_{i-1/2,j}) \\ D_{i,j} &= -\frac{1}{2}v(1-v)\phi(\theta_{i+1/2,j}) \end{aligned} \quad (2.120)$$

Porém, para esta escolha, não podemos utilizar o teorema de Harten, devido ao fato de suas hipóteses não serem satisfeitas ($\phi \geq 0$ e $0 \leq v \leq 1$ acarretam $D_{i,j} \leq 0$).

Outra possibilidade de escrevermos o esquema resultante do fluxo numérico (2.105) na forma-I seria considerar

$$\begin{aligned} C_{i-1,j} &= v + \frac{1}{2}v(1-v) \left[\frac{\phi(\theta_{i+1/2,j})}{\theta_{i+1/2,j}} - \theta_{i-1/2,j} \right]; \\ D_{i,j} &= 0. \end{aligned} \quad (2.121)$$

⁸Poderemos entender a viscosidade numérica $Q_{i-1/2,j}$ como uma constante de proporcionalidade local que participa na especificação da quantidade de viscosidade física artificial $\varepsilon > 0$ que a equação verdadeiramente resolvida pelo método possui.

Desse modo, como já mostramos duas possibilidades de escrevermos o esquema resultante do fluxo numérico na forma-I, vemos que não há somente uma forma incremental em um método.

Podemos notar que, em (2.121), as hipóteses da condição de Harten estarão satisfeitas, desde que

$$0 \leq C_{i-1} \leq 1. \quad (2.122)$$

Assim, para h suficientemente pequeno, teremos (2.122) desde que

$$\left| \frac{\phi(\theta_A)}{\theta_A} - \theta_B \right| \leq 2, \quad \forall \theta_A, \theta_B \in \mathbb{R}. \quad (2.123)$$

Se $\theta < 0$, teremos um extremo local e assim devemos tomar $\phi(\theta) = 0$ para conseguirmos um esquema TVD. Se $\theta \geq 0$, sempre queremos $\phi(\theta) \geq 0$, pois não faz sentido atribuir um sinal negativo ao limitador de fluxo⁹.

Como $\theta_A, \theta_B \in \mathbb{R}$ são quaisquer e independentes, para garantir a condição (2.123), devemos exigir

- Para $\theta \geq 0$:

$$\begin{cases} 0 \leq \frac{\phi(\theta)}{\theta} \leq 2 \\ 0 \leq \phi(\theta) \leq 2 \end{cases}$$

- Para $\theta < 0$:

$$\phi(\theta) = 0. \quad (2.124)$$

Assim, para que o esquema induzido pela função de fluxo numérico (2.105) seja TVD, a função limitadora de fluxo deve satisfazer

$$0 \leq \phi(\theta) \leq \min \text{mod}(2, 2\theta). \quad (2.125)$$

Observação 11. A relação (2.125) define a chamada região TVD, no plano $\theta - \phi$, na qual a curva $\phi = \phi(\theta)$ deverá estar contida para que se trate de um limitador TVD.

⁹Isso se deve ao fato de que com $\phi \geq 0$ o limitador dosa a contribuição do fluxo antidifusivo. Se fizéssemos $\phi < 0$ desvirtuaríamos a funcionalidade da idéia ao tornar o termo corretivo difusivo.

Em um primeiro momento, podemos nos convencer de que precisamos exigir a maximização do efeito antidifusivo em (2.105), adotando o limite superior da região TVD:

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \text{mín}(2, 2\theta), & \text{se } \theta > 0 \\ 0, & \text{se } \theta \leq 0 \end{cases}. \quad (2.126)$$

Porém, lembrando que em porções suaves, onde $\theta \approx 1$, para obtermos a segunda ordem de precisão esperamos ter $\phi(\theta) \approx 1$, fica claro que (2.126) não é um limitador que produzirá um esquema de segunda ordem. Assim, para que um limitador de fluxo seja TVD e também de segunda ordem de precisão em porções suaves, faz-se imprescindível exigir que $\phi(1) = 1$.

Segue abaixo alguns limitadores de fluxo TVD capazes de produzir segunda ordem de precisão em porções suaves:

- **MinMod**

$$\phi(\theta) = \text{mín mod}(1, \theta). \quad (2.127)$$

- **Super Bee**

$$\phi(\theta) = \text{máx}(0, \text{mín}(1, 2\theta), \text{mín}(2, \theta)). \quad (2.128)$$

- **van Albada**

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \frac{\theta + \theta^2}{1 + \theta^2}, & \text{se } \theta \geq 0 \\ 0, & \text{se } \theta < 0 \end{cases}. \quad (2.129)$$

- **van Leer**

$$\phi(\theta) = \frac{\theta + |\theta|}{1 + |\theta|}. \quad (2.130)$$

- **Koren**

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \frac{\theta + 2\theta^2}{2 - \theta + 2\theta^2}, & \text{se } \theta \geq 0 \\ 0, & \text{se } \theta < 0 \end{cases}. \quad (2.131)$$

- **MC**

$$\phi(\theta) = \text{máx}\left(0, \text{mín}\left(\frac{1 + \theta}{2}, 2, 2\theta\right)\right). \quad (2.132)$$

- **Chacravarty-Osher (ψ)**

$$\phi(\theta) = \text{máx}(0, \text{mín}(\theta, \psi)), \quad 1 \leq \psi \leq 2. \quad (2.133)$$

- **Beam-Warming - Lax-Wendroff (BW-LW)**

$$\phi(\theta) = \max(0, \min(\theta, 1)). \quad (2.134)$$

Observação 12. *Tomando $\psi = 1$ no limitador de Chacravathy-Osher, obtemos o limitador de BW-LW (o qual é equivalente ao MinMod).*

Foi Sweby que introduziu a análise gráfica de ϕ em função de θ . Além disso, ele percebeu que é mais interessante tomar ϕ como uma combinação linear convexa de $\phi = 1$ (como no método de Lax-Wendroff) e de $\phi = 0$ (como no método de Beam-Warming). Assim, esta restrição imposta por essa combinação convexa implica na região TVD de Sweby.

A simetria também é uma propriedade importante de exigirmos de uma função limitadora de fluxo. Isso significa que se os dados $U_{:,j}$ são simétricos com relação a x , espera-se que a função por partes também tenha esta propriedades. Para isso, deve-se exigir

$$\phi\left(\frac{1}{\theta}\right) = \frac{\phi(\theta)}{\theta}. \quad (2.135)$$

Observação 13. *O defeito mais notável na classe de métodos TVD de segunda ordem é a perda de amplitude da solução numérica em pontos extremos [7].*

Mais adiante, veremos que a propriedade TVD, embora seja suficiente, não é necessária para a convergência de um método. Assim, é possível afrouxarmos a exigência TVD, permitindo que haja um ligeiro aumento na total variação da solução próximo a pontos extremos, a fim de evitarmos o "re-aparecimento" de oscilações espúrias e, ainda assim, garantirmos a convergência do esquema. Para isso, a abordagem mais interessante presente na literatura é aquela proposta pelos métodos ENO, que, como já falamos anteriormente, relaxam a condição TVD a um nível capaz de evitar o aparecimento de oscilações.

2.6.2 Métodos TVD para Leis de Conservação

Como já falamos, em (2.104) os fluxos do método Upwind e Lax-Wendroff são geralmente adotados como fluxo de baixa e alta ordem, respectivamente, devido ao fato de apresentarem melhores características dentre os de sua precisão. Nestes termos, para o caso geral de uma lei de conservação hiperbólica,

temos o fluxo numérico do esquema baseado em um limitador de fluxo dado por

$$F_{i-1/2,j} = F_{i-1/2,j}^L + \frac{1}{2} |s_{i-1/2,j}| \left(1 - \frac{k}{h} |s_{i-1/2,j}| \right) (U_{i,j} - U_{i-1,j}) \phi_{i-1/2,j}, \quad (2.136)$$

onde $F_{i-1/2,j}^L$ representa o fluxo do método Upwind, que neste caso será dado por

$$F_{i-1/2,j} = \begin{cases} f(U_{i-1,j}), & \text{se } U_{i-1,j} > u_s \text{ e } s > 0 \\ f(U_{i,j}), & \text{se } U_{i,j} < u_s \text{ e } s < 0 \\ f(u_s), & \text{se } U_{i-1,j} < u_s < U_{i,j} \end{cases}, \quad (2.137)$$

onde u_s é o único valor de u para o qual $f(u) = 0$ (isto é, $f(u_s) = 0$) e

$$s_{i-1/2,j} = \frac{f(U_{i,j}) - f(U_{i-1,j})}{U_{i,j} - U_{i-1,j}}. \quad (2.138)$$

Neste caso, como a propagação da solução pode variar, devemos tomar

$$\theta_{i-1/2,j} = \frac{\Delta U_{I-1/2,j}}{\Delta U_{i-1/2,j}}, \quad (2.139)$$

com o índice I escolhido localmente para representar o lado Upwind da interface $x = x_{i-1/2}$ em $t = t_j$, ou seja,

$$I = \begin{cases} i - 1, & \text{se } s_{i-1/2,j} \geq 0 \\ i + 1, & \text{se } s_{i-1/2,j} < 0 \end{cases}. \quad (2.140)$$

Quanto à $\phi_{i-1/2,j}$, queremos que continue apresentando as propriedades exigidas na seção anterior.

Assim, para obtermos todos os métodos apresentados para uma lei de conservação hiperbólica genérica, basta escolhermos as funções limitadoras de fluxo dadas na seção anterior e aplicá-las em (2.136).

2.6.3 Convergência

De todos os métodos que vimos até aqui, exigimos sua estabilidade e consistência, porém, vale observar que a equivalência de Lax é aplicada somente a problemas lineares. Dos esquemas para leis de conservação hiperbólicas que vimos, nada temos de formal que garanta a convergência. Assim, nesta seção, procuraremos esclarecer formalmente o que já foi percebido na prática: a convergência ou não dos esquemas mencionados.

Lax e Wendroff provaram o seguinte teorema:

Teorema 3. (Lax-Wendroff): *Considere uma sequência de malhas indexadas pelo parâmetro $l = 1, 2, \dots$, com passos $h^{(l)}, k^{(l)} \rightarrow +\infty$ quando $l \rightarrow +\infty$. Seja $U^{(l)}$ uma aproximação numérica efetuada na l -ésima malha com um método consistente e conservativo com relação à lei de conservação hiperbólica. Assim, se $U^{(l)}$ converge para uma função u quando $l \rightarrow +\infty$ de alguma forma específica, então, u será uma solução fraca da lei de conservação hiperbólica.*

Podemos notar que tal resultado não garante a convergência, pois, caso haja mais de uma solução fraca, a convergência poderá se dar para soluções fracas distintas, de acordo como escolhermos as sequências $h = h^{(l)}$ e $k = k^{(l)}$. Porém, se a solução parece razoável e tem possíveis descontinuidades bem determinadas, podemos acreditar, por esse teorema, que essa é uma aproximação para alguma solução fraca¹⁰.

Com o objetivo de provar a convergência da solução aproximada de uma classe de métodos para a solução entrópica, é útil considerar a seguinte definição:

Teorema 4. (Osher): *Definimos um esquema numérico para uma lei de conservação hiperbólica de fluxo $f = f(u)$ como sendo um esquema-E (ou esquema de entropia) se, e só se, sua função de fluxo numérico F satisfaz*

$$\frac{(U_{i,j} - U_{i-1,j})}{|U_{i,j} - U_{i-1,j}|} [F_{i-1/2,j} - f(u)] \leq 0, \quad (2.141)$$

$$\forall u \in [\text{mín}(U_{i-1,j}, U_{i,j}), \text{máx}(U_{i-1,j}, U_{i,j})].$$

Particularmente, o método Upwind com seu fluxo numérico F^U dado em (2.137) é um esquema-E. Na realidade, este é o caso limite, pois, desde que a condição CFL seja satisfeita, temos que os esquemas de entropia são aqueles cuja função de fluxo numérico F satisfaz

$$\begin{aligned} F_{i-1/2,j} &\leq F_{i-1/2,j}^U, \text{ se } U_{i-1/2} \leq U_{i,j} \\ F_{i-1/2,j}^U &\leq F_{i-1/2,j}, \text{ se } U_{i,j} \leq U_{i-1,j} \end{aligned} \quad (2.142)$$

¹⁰Aqui o conhecimento acerca da estrutura da lei de conservação (parabolizada e hiperbólica) faz-se útil para sabermos se a solução que foi produzida não contraria a solução apontada pelo método do anulamento viscoso. Assim, a solução numérica da equação parabolizada pode nos fornecer importantes informações a serem empregadas nesse processo.

Teorema 5. *Um esquema-E conservativo, tal que*

$$\frac{h}{k} \left| [F_{i+1/2,j} - f(U_{i,j})] + [F_{i+1/2,j} - f(U_{i+1,j})] \right| \leq |U_{i+1,j} - U_{i,j}|,$$

é TVD.

A importância deste resultado é que ele deixa claro que todo esquema-E será TVD para um h suficientemente pequeno.

Observação 14. *O método de Lax-Wendroff e o método Upwind são esquemas-E.*

Teorema 6. (Osher): *Todo esquema-E converge para a solução entrópica de uma lei de conservação.*

Desse modo, temos que os esquemas-E convergem para a solução fraca correta; porém, infelizmente, estes esquemas apresentam no máximo primeira ordem de precisão. Assim, como já conhecemos as falhas introduzidas por um esquema de primeira ordem, torna-se indispensável recorrermos a outros tipos de esquemas também.

Em alguns casos, para provar a convergência, o resultado mais geral que é útil se dá a partir da seguinte definição:

Definição 6. *Um esquema numérico tem total variação limitada¹¹ (TVB) se, para qualquer dado inicial $U_{i,0}$ em $t = t_0$, com $-\infty < TV(U_{:,0}) < +\infty$, em um instante qualquer $T > 0$, existe $R > 0$ e um valor $k_0 > 0$ tal que o resultado da aplicação do esquema satisfaz*

$$TV(U_{:,j}) \leq R, \tag{2.143}$$

$\forall j$ escolhido de modo que $jk \leq T$ sempre que $k \leq k_0$.

Observação 15. *Tomando $R = TV(U_{:,0})$ em (2.143) e considerando $T > 0$, segue que se um método é TVD então ele é TVB.*

Assim, nosso interesse na definição anterior é afirmar que qualquer esquema TVB é convergente, ou seja, sua solução converge para a solução

¹¹Em outras palavras, um esquema é dito ser TVB se sua total variação até um determinado instante é limitada e finita para malhas suficientemente refinadas (dessa forma, isso se aplica quando $h, k \rightarrow 0$).

fraca da lei de conservação. Dessa forma, levando em conta a observação citada acima, podemos dizer que todo esquema TVD convergirá (desde que a condição CFL seja satisfeita) para uma solução fraca da lei de conservação quando $h, k \rightarrow 0$.

O que acabamos de dizer significa que até mesmo uma condição mais frouxa que a TVD é suficiente para que tenhamos a garantia de convergência.

Um método que satisfaz

$$TV(U_{:,j+1}) \leq (1 + \alpha k)TV(U_{:,j}), \quad (2.144)$$

para alguma constante $\alpha \in \mathbb{R}$ independente de k (pelo menos para quando $k \rightarrow 0$), não será TVD , mas será TVB , o que basta para haver a convergência.

Dessa forma, mesmo com o possível surgimento de oscilações espúrias na solução (desde que essas oscilações estejam sob controle - o que sempre ocorre) teremos que os métodos clássicos de segunda ordem são convergentes, pois se tratam de esquemas TVB .

Quanto a convergência dos esquemas TVD para a solução entrópica, não é possível provar formalmente; porém, as evidências numéricas apontam nessa direção, sendo conjecturado por Sweby que tais esquemas herdam a propriedade de fornecer a solução entrópica do esquema de baixa ordem que entra na formulação do método baseado em limitante de fluxo.

Capítulo 3

Representação por *Log-Conformation*

3.1 Equação de Advecção Linear com Termo Fonte

Dada uma equação hiperbólica na forma conservativa, a adição de um termo fonte resulta em uma equação ainda hiperbólica. Porém, nem toda extensão de método numérico concebido para a primeira delas é aplicável à segunda.

A equação de advecção linear é uma equação hiperbólica cuja solução numérica precisa respeitar à condição CFL para o correto balanço da convecção [13, 16]. Assim, consideremos a equação de advecção linear com termo fonte

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = BT, \quad (3.1)$$

onde $B = (b(x) - \frac{1}{We})$, u é a velocidade de convecção e We é o número de Weissenberg.

Esta equação, também hiperbólica, quando aproximada por métodos de diferenças finitas, além do balanço convectivo imposto pela condição CFL, necessita de uma análise quanto ao balanço elástico, resultante da adição de um termo fonte [6].

Neste trabalho, veremos que a restrição de estabilidade inerente ao balanço elástico citado, apontado por [6] como causa do HWNP quando da solução de (3.1), pode ser removida através de uma mudança de variável, denominada

representação por *log-conformation* na equação em questão.

Sem perda de generalidade, em (3.1), consideraremos $u(x, t) = a > 0$. Aproximando (3.1) por meio dos métodos Upwind (para o termo convectivo) e Euler explícito (para o termo transiente), obtemos o esquema

$$T_{i,j+1} = T_{i,j} \left(1 - \frac{ak}{h} + k \left(b_i - \frac{1}{We} \right) \right) + T_{i-1,j} \left(\frac{ak}{h} \right), \quad (3.2)$$

onde consideramos $T_{i,j} = T(x_i, t_j)$ como sendo a solução fornecida pelo esquema numérico no ponto (x_i, t_j) , sendo h o passo espacial e k o passo temporal, com $b_i = b(x_i)$.

3.1.1 Estabilidade

No esquema (3.2), levando em conta a linearidade de (3.1) e supondo $T_{i,j}$ e $T_{i-1,j}$ positivos, a fim de que a solução numérica fornecida por tal esquema seja estável, devemos impor que o coeficiente de $T_{i-1,j}$ e o coeficiente de $T_{i,j}$ sejam menores ou iguais a 1, ou seja,

$$\frac{ak}{h} \leq 1, \quad (3.3)$$

e

$$1 - \frac{ak}{h} + k \left(b_i - \frac{1}{We} \right) \leq 1. \quad (3.4)$$

Observe que, para (3.4), é suficiente que

$$We < \frac{1}{b_i} \quad (3.5)$$

ou

$$h \leq \frac{a}{b_i - We^{-1}}. \quad (3.6)$$

Assim, além da restrição CFL (3.3), temos que (3.6) é uma restrição sobre o passo espacial da malha, imposta pelo balanço elástico [6]. Note que (3.5) e (3.6) são afetados pelo número de Weissenberg: em (3.6), temos que, quanto maior for We , menor terá que ser h ; por outro lado, em (3.5), dado um $b = b(x)$ temos uma limitação no maior We que pode ser utilizado. Esta situação está ligada ao chamado HWNP.

Mais adiante, veremos que é possível remover a restrição (3.6) através da representação por *log-conformation*.

3.1.2 Erro de Truncamento Local

A seguir, iremos calcular o erro de truncamento local da equação (3.1). Para isso, consideraremos $u_{i,j} = u(x_i, t_j)$ como sendo a *solução exata* em (x_i, t_j) e $U_{i,j} = U(x_i, t_j)$ como sendo a solução fornecida pelo esquema numérico neste mesmo ponto; denotaremos o erro de truncamento local por $\tau_{i,j}$.

Para o cálculo do erro de truncamento local, utilizaremos a seguinte estratégia: substituiremos $U_{i,j}$ por $u_{i,j}$ na equação a diferenças; após fazermos tal substituição, iremos supor que $u_{i,j}$ é suficientemente suave e realizaremos sua expansão em série de Taylor em torno de (x_i, t_j) . Em seguida, manipularemos a expressão resultante, obtendo assim uma igualdade para $\tau_{i,j}$, o que nos possibilitará obter sua ordem.

Aproximando a equação (3.1) por meio dos métodos Euler Explícito (termo transiente) e Upwind (termo convectivo), obtemos

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + a_i \left(\frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{h} \right) = \left(b(x) - \frac{1}{We} \right) U_{i,j}. \quad (3.7)$$

Em (3.7), substituindo a solução aproximada ($U_{i,j}$) pela solução exata ($u_{i,j}$), temos:

$$\frac{u(x_i, t_j+k) - u(x_i, t_j)}{k} + a_i \left(\frac{u(x_i, t_j) - u(x_i-h, t_j)}{h} \right) = \left(b(x) - \frac{1}{We} \right) u(x_i, t_j). \quad (3.8)$$

Dessa forma, o erro de truncamento local $\tau_{i,j}$ deverá satisfazer

$$\begin{aligned} \tau_{i,j} = & \frac{u(x_i, t_j+k) - u(x_i, t_j)}{k} + a_i \left(\frac{u(x_i, t_j) - u(x_i-h, t_j)}{h} \right) \\ & - \left(b(x) - \frac{1}{We} \right) u(x_i, t_j). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Lembremos que, se $u(x, t)$ tem derivada até a ordem $n+1$ em (x, t) podemos escrever

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}u^{(n)}(x) + \quad (3.10)$$

$$+ \frac{h^{(n+1)}}{(n+1)!}u^{(n+1)}(\xi), \quad x < \xi < x+h \quad (3.11)$$

e

$$u(t+k) = u(t) + ku'(t) + \frac{k^2}{2!}u''(t) + \cdots + \frac{k^n}{n!}u^{(n)}(t) + \quad (3.12)$$

$$+ \frac{k^{(n+1)}}{(n+1)!}u^{(n+1)}(\varsigma), \quad t < \varsigma < t+k, \quad (3.13)$$

onde (3.11) representa o erro de $u(x+h)$ pelo polinômio, na variável h , grau n

$$P_n(h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!}u^{(n)}(x), \quad (3.14)$$

e (3.13) representa o erro de $u(t+k)$ pelo polinômio, na variável k ,

$$P_n(k) = u(t) + ku'(t) + \frac{k^2}{2!}u''(t) + \cdots + \frac{k^n}{n!}u^{(n)}(t). \quad (3.15)$$

Assim, tomando $n = 1$ em (3.12), obtemos o fórmula de diferença progressiva (usada no método de Euler explícito):

$$u_t = \frac{u(x_i, t_j + k) - u(x_i, t_j)}{k} - \frac{k}{2}u_{tt}(\varsigma), \quad (3.16)$$

onde $-\frac{k}{2}u_{tt}(\varsigma)$ representa o erro dessa aproximação. De modo análogo, tomando $n = 1$ e $-h$ em (3.10), obtemos

$$u_x = \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i - h, t_j)}{h} + \frac{h}{2}u_{xx}(\xi), \quad (3.17)$$

onde $\frac{h}{2}u_{xx}(\xi)$ representa o erro dessa aproximação. Ainda em (3.10), tomando $n = 2$, reescrevendo (3.10) para h e para $-h$ e, por último, subtraindo a expressão obtida para $-h$ da expressão obtida para h obtemos a fórmula centrada, na variável h ,

$$u_x = \frac{u(x_i + h, t_j) - u(x_i - h, t_j)}{2h} - \frac{h^2}{3!}u_{xxx}(\xi), \quad (3.18)$$

onde $-\frac{h^2}{3!}u_{xxx}(\xi)$ representa o erro dessa aproximação.

Assim, como o erro de truncamento local de (3.7) deverá satisfazer

$$\begin{aligned} \tau_{i,j} = & \frac{u(x_i, t_j + k) - u(x_i, t_j)}{k} + a \left(\frac{u(x_i, t_j) - u(x_i - h, t_j)}{h} \right) \\ & - \left(b(x) - \frac{1}{We} \right) u(x_i, t_j), \end{aligned} \quad (3.19)$$

segue, de (3.16) e (3.17), que tal erro será dado por

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2}u_{tt}(\varsigma) - a\frac{h}{2}u_{xx}(\xi) = O(k+h). \quad (3.20)$$

Observação 16. Para aliviar a notação, consideraremos $u(x_i+h, t_j) = u_{i+1,j}$, $u(x_i, t_j+k) = u_{i,j+1}$ e $u(x_i, t_j) = u_{i,j}$.

3.2 Versão LCR

Definição 7. A representação de uma equação diferencial parcial por log-conformation consiste em substituir uma escala de incógnitas presentes na equação parcial por incógnitas logarítmicas. Assim, para representar uma equação diferencial parcial cuja incógnita é u , deve-se fazer a mudança de variável

$$\psi = \log(u), \quad (3.21)$$

de onde

$$u = \exp(\psi). \quad (3.22)$$

Utilizando (3.22) na equação em questão, obtem-se sua versão LCR.

Logo, em (3.1), fazendo a mudança de variável (3.21) obtemos

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + a\frac{\partial\psi}{\partial x} = \left(b_i - \frac{1}{We}\right), \quad (3.23)$$

que, por sua vez, corresponde a versão LCR da equação (3.1).

A seguir, discretizamos (3.23) por diferenças finitas, considerando $\Psi_{i,j} = \Psi(x_i, t_j)$ como sendo a solução fornecida pelo esquema numérico no ponto (x_i, t_j) . Dessa forma, aproximando a equação (3.23) por meio dos métodos Upwind (para o termo convectivo) e Euler explícito (para o termo transiente), obtemos o esquema

$$\Psi_{i,j+1} = \Psi_{i,j} \left(1 - \frac{ak}{h}\right) + \Psi_{i-1,j} \left(\frac{ak}{h}\right) + k \left(b_i - \frac{1}{We}\right). \quad (3.24)$$

3.2.1 Estabilidade

No esquema acima, supondo $\Psi_{i,j}$ e $\Psi_{i-1,j}$ positivos, a fim de que a solução numérica fornecida por tal esquema seja estável, devemos impor que os coeficientes de $\Psi_{i-1,j}$ e $\Psi_{i,j}$ sejam menores ou iguais a 1, ou seja,

$$\frac{ak}{h} \leq 1, \quad (3.25)$$

e

$$\left(1 - \frac{ak}{h}\right) \leq 1, \quad (3.26)$$

Note que (3.26) implica

$$\frac{ak}{h} \geq 0, \quad (3.27)$$

que, de fato se verifica, pois todos os termos de (3.26) são positivos.

Dessa forma, temos que a equação de advecção linear com termo fonte representada por *log-conformation* não impõe restrição de estabilidade no passo espacial h .

Em (3.24), desfazendo a mudança de variável (3.21) obtemos o esquema

$$U_{i,j+1} = (U_{i,j})^{\left(1 - \frac{ak}{h}\right)} (U_{i-1,j})^{\left(\frac{ak}{h}\right)} \exp \left[k \left(b_i - \frac{1}{We} \right) \right], \quad (3.28)$$

que impõe [7] uma condição menos restritiva do que (3.6), dada por

$$h \leq \frac{a}{\log \left(b_i - \frac{1}{We} \right)}. \quad (3.29)$$

3.2.2 Erro de Truncameto Local

Aproximando (3.23) por meio do método de Euler Explícito (para o termo transiente) e do método Upwind (para o termo convectivo), temos

$$\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{k} + a \left(\frac{\Psi_{i,j} - \Psi_{i-1,j}}{h} \right) = \left(b_i - \frac{1}{We} \right). \quad (3.30)$$

Agora, substituindo a solução aproximada pela solução exata, temos

$$\frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{k} + a \left(\frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{h} \right) = \left(b_i - \frac{1}{We} \right). \quad (3.31)$$

Fazendo um processo análogo ao que foi feito no caso sem LCR, temos que o erro de truncamento local de (3.30) é dado por

$$\tau_{i,j} = \frac{k}{2}u_{tt}(\varsigma) - a\frac{h}{2}u_{xx}(\xi) = O(k + h). \quad (3.32)$$

Capítulo 4

Resultados Numéricos

4.1 Equação de Advecção Linear 1D

4.1.1 Resultados Numéricos

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos no software MATLAB a solução exata e a solução numérica da equação de advecção linear com termo fonte

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = BT, \quad (4.1)$$

onde $B = (b(x) - \frac{1}{w_e})$, $u > 0$ constante.

A solução numérica da equação (4.1) foi obtida por (3.2) e sua versão LCR por (3.24). Também apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao usarmos esquemas TVD (Koren Limiter e Super Bee) no termo convectivo da equação em questão.

A solução analítica da equação (4.1), para $x \in [0, L]$, $u > 0$, $B > 0$, $T|_{x,t=0} = 1$ e $T|_{x=0,t} = 1$ é dada por

$$T(x, t) = \begin{cases} \exp(\frac{Bx}{u}), & x \leq ut \\ \exp(Bt), & ut < x \leq L \end{cases} . \quad (4.2)$$

Observação 17. *Desconsideraremos o fato da solução numérica fornecida pelo método com LCR sofrer uma dissipação no ponto da descontinuidade de contato da solução, pois estamos usando o método Upwind no termo convectivo da equação em questão, o qual mesmo sendo TVD apresenta tal defeito por ser de primeira ordem. Esta situação pode ser facilmente resolvida;*

porém, não buscamos resolvê-la por estarmos interessados apenas em analisar se o crescimento da solução numérica acompanha o crescimento da solução exata.

I) Influência de Δt

Tomando $u = 1$, $b = 1$, $We = 100$, $t = 2$, $x = [0, 10]$ e $\Delta x = 0.1$, as Figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 representam a solução numérica da equação (4.1) sem LCR e com LCR ao variarmos Δt .

Comparando tais soluções podemos ver que, independentemente do passo temporal, a solução fornecida pelo caso com LCR sempre acompanha o crescimento da solução exata; já nos casos sem LCR a solução numérica acompanha o crescimento da solução exata na medida em que diminuimos Δt .

A Tabela 4.1 mostra o erro relativo (norma 2) cometido em cada método ao variarmos Δt . Note que o erro calculado pela norma 2, por ser global, reflete essa dissipação, mas na região em que a solução é constante, o LCR é muito mais preciso.

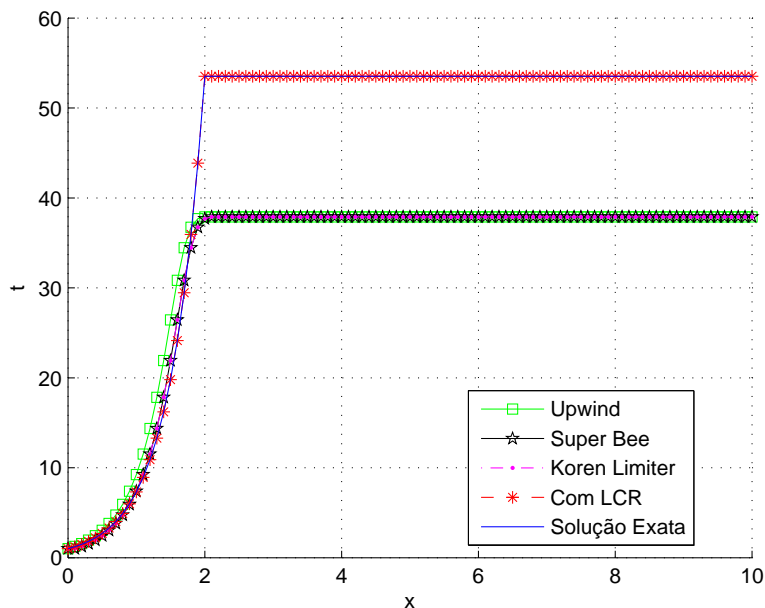


Figura 4.1: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.1$.

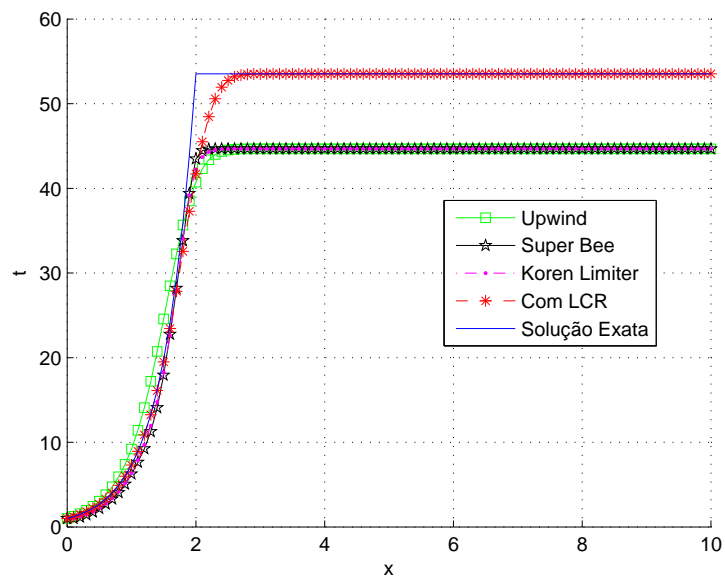


Figura 4.2: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.05$.

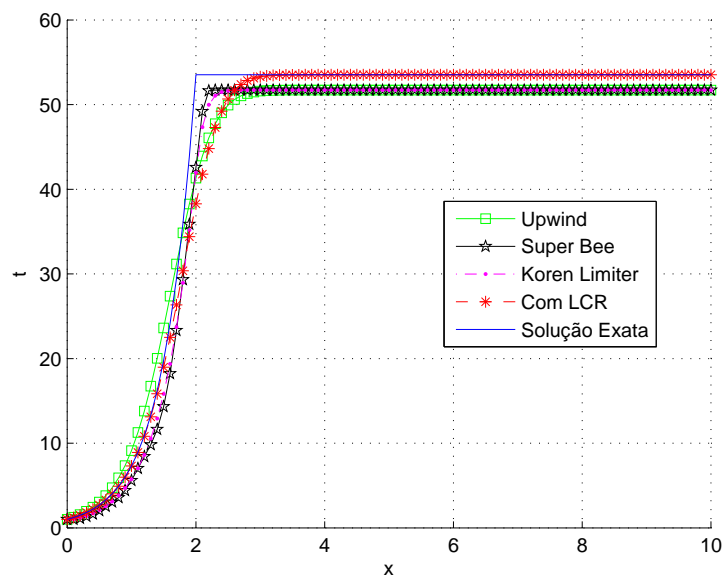
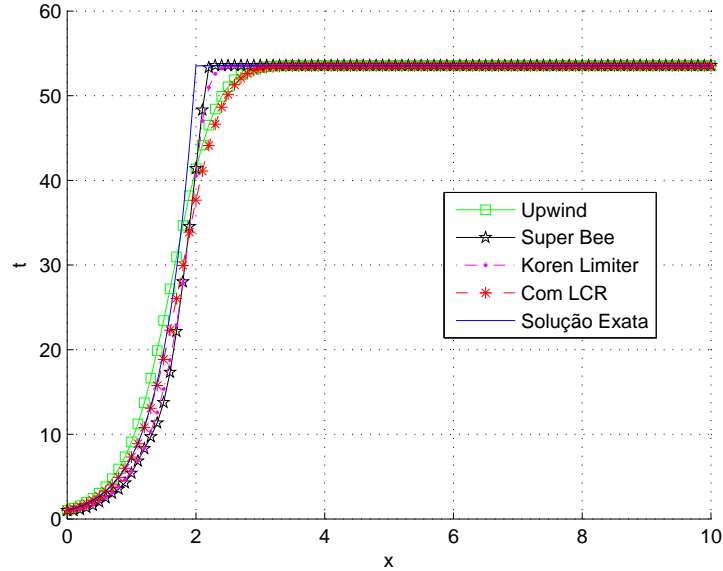


Figura 4.3: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.01$.


 Figura 4.4: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta t = 0.001$.

Δt	CFL	ERRO			
		LCR	Upwind	Koren Limiter	Super Bee
0.1	1	2.4506e-017	0.2901	0.2890	0.2890
0.05	0.5	0.0355	0.1674	0.1649	0.1644
0.01	0.1	0.0523	0.0552	0.0531	0.0526
0.001	0.01	0.0557	0.0429	0.0467	0.0468

 Tabela 4.1: Erro relativo cometido ao variarmos Δt .

II) Influência de Δx

Tomando $u = 1$, $b = 1$, $We = 100$, $t = 2$, $x = [0, 10]$ e $\Delta t = 0.001$, as Figuras 4.5, 4.6 e 4.7 representam a solução numérica da equação (4.1) sem LCR e com LCR ao variarmos Δx .

Podemos ver que todas as soluções numéricas acompanharam o crescimento da solução exata. Isso se deve ao fato de estarmos trabalhando com uma malha suficientemente refinada. Caso contrário, apenas o caso com LCR estaria acompanhando o crescimento da solução exata.

A Tabela 4.2 mostra o erro relativo cometido em cada método ao variar-

mos Δx .

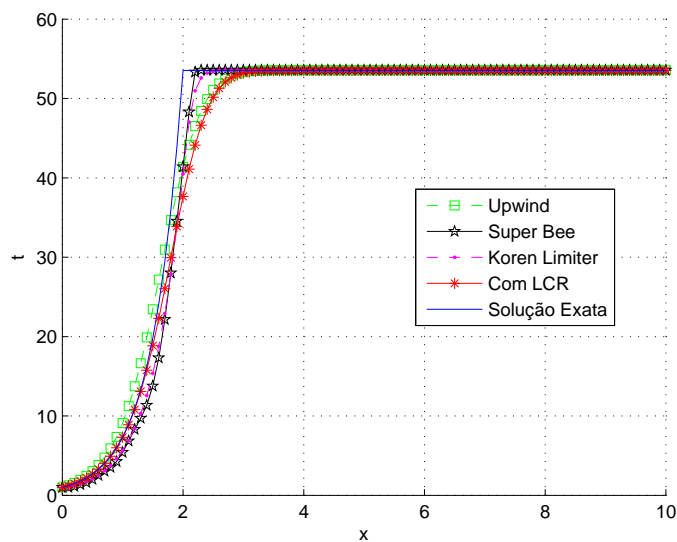


Figura 4.5: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.1$.

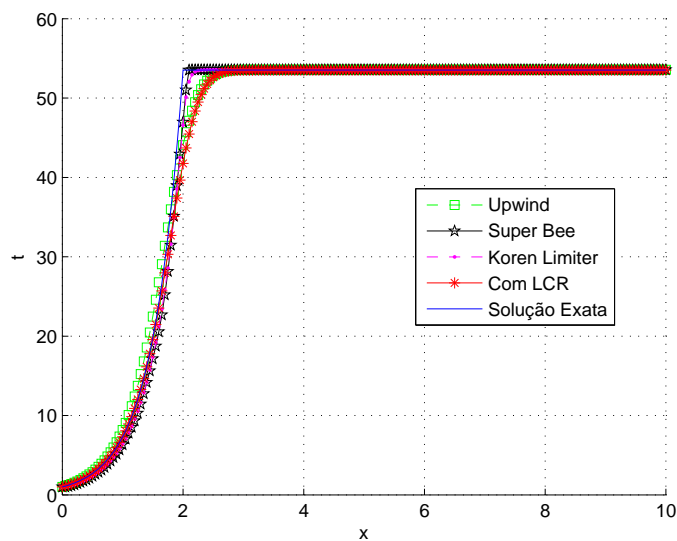


Figura 4.6: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.05$.

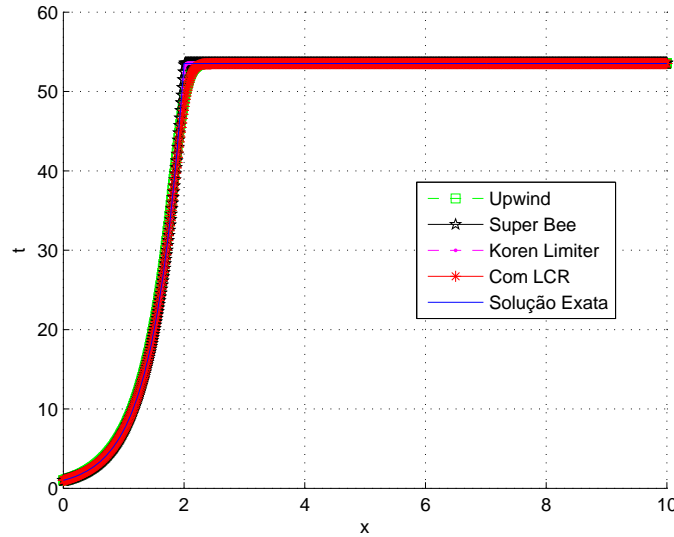


Figura 4.7: Soluções numéricas da equação (4.1) para $\Delta x = 0.01$.

Δx	CFL	ERRO			
		LCR	Upwind	Koren Limiter	Super Bee
0.1	1	0.0557	0.0429	0.0467	0.0468
0.05	0.5	0.0345	0.0281	0.0233	0.0234
0.01	0.1	0.0105	0.0095	0.0037	0.0037

Tabela 4.2: Erro relativo cometido ao variarmos Δx .

III) Influência de We

Tomando $u = 1$, $b = 1$, $t = 2$, $x \in [0, 10]$, $\Delta t = 0.1$ e $\Delta x = 0.1$, a Tabela 4.3 apresenta o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados ao variarmos We . Podemos ver que, independentemente do We considerado, o erro relativo do método com LCR é sempre bem menor do que o erro relativo dos métodos sem LCR.

As Figuras 4.8, 4.9, 4.10 e 4.11 representam, respectivamente, a solução numérica da equação (4.1) ao tomarmos $We = 10$, 100, 500 e 1000; vale ressaltar que, para os demais valores de We considerados, as figuras obtidas são semelhantes, sendo que em todas elas a solução numérica fornecida pela versão com LCR se mostrou mais eficiente, sempre acompanhando o

crescimento da solução exata.

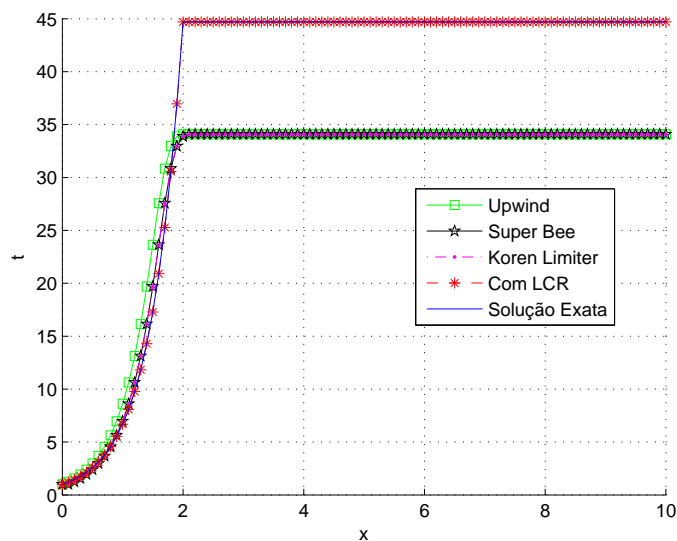


Figura 4.8: Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 10$.

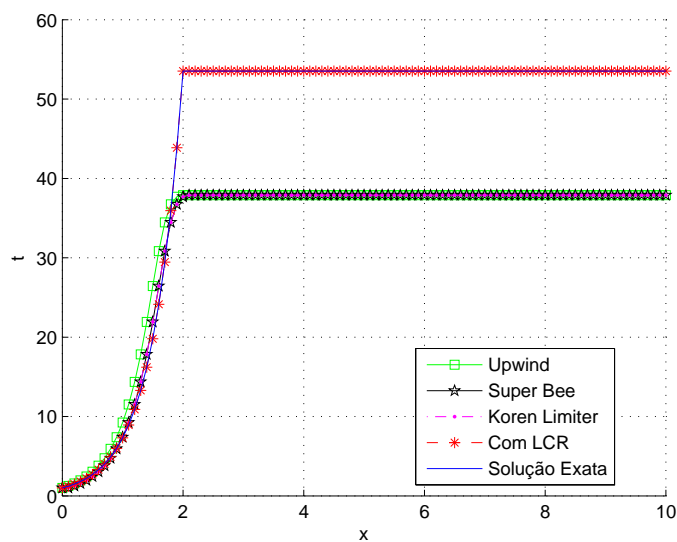
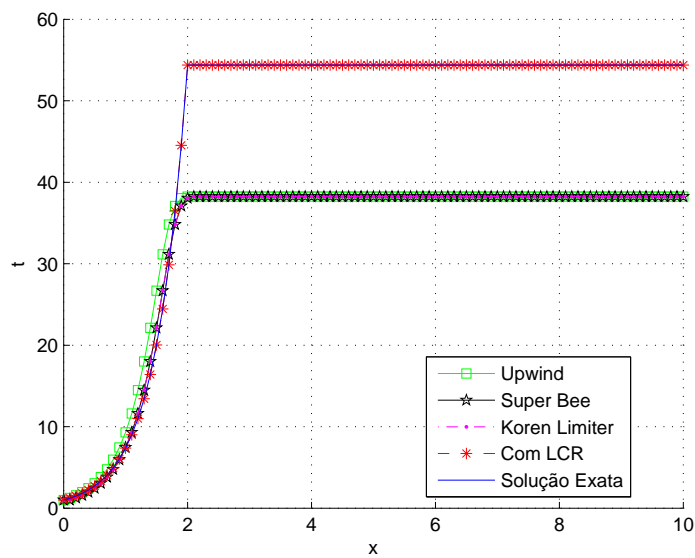
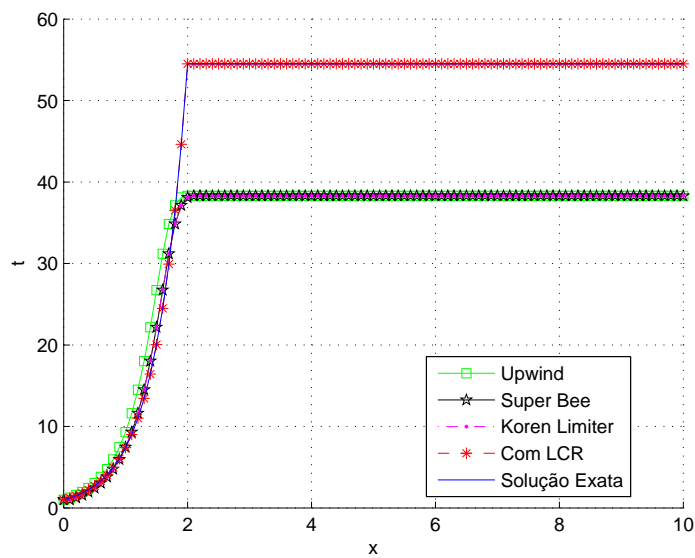


Figura 4.9: Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 100$.

Figura 4.10: Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 500$.Figura 4.11: Soluções numéricas da equação (4.1) para $We = 1000$.

We	ERRO			
	LCR	Upwind	Koren Limiter	Super Bee
1	4.1252e-017	0.6960	0.6857	0.6857
2	3.7132e-017	0.1040	0.0848	0.0848
5	6.2840e-017	0.1741	0.1701	0.1701
10	2.3574e-017	0.2370	0.2350	0.2350
50	2.3941e-017	0.2844	0.2832	0.2832
100	2.4506e-017	0.2901	0.2890	0.2890
500	6.4126e-017	0.2947	0.2936	0.2936
1000	6.8731e-017	0.2952	0.2941	0.2941

Tabela 4.3: Erro relativo cometido ao variarmos We .

4.1.2 Conclusão

Considerando discretização por Upwind de primeira ordem no termo convectivo e Euler explícito no termo transiente vimos que a solução numérica fornecida pelo caso com LCR sempre acompanha o crescimento da solução exata. Além disso, quanto menos refinada for a malha, melhor é a solução numérica fornecida pelo caso com LCR

4.2 Equação de Advecção Linear 2D

Consideremos a equação de advecção linear com termo fonte 2D

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = BT, \quad (4.3)$$

onde $B = (b(x, y) - \frac{1}{We})$, $u > 0$, $v > 0$ constante.

Aproximando (4.3) por meio dos métodos Upwind (para o termo convectivo) e Euler explícito (para o termo transiente), obtemos o esquema

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n \left(1 - \frac{uk}{h} - \frac{vk}{q} + k \left(b_{i,j} - \frac{1}{We} \right) \right) + T_{i-1,j}^n \left(\frac{uk}{h} \right) + T_{i,j-1}^n \left(\frac{vk}{q} \right), \quad (4.4)$$

onde consideramos $T_{i,j}^n = T(x_i, y_j, t_n)$, h o passo x-espacial, q o passo y-espacial e k o passo temporal, com $b_i = b(x_i, y_j)$.

Em (4.3), fazendo a mudança de variável (3.21), obtemos sua versão LCR, dada por

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = T. \quad (4.5)$$

Aproximando (4.5) por meio dos métodos Upwind e Euler explícito, obtemos o esquema

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n \left(1 - \frac{uk}{h} - \frac{vk}{q} + T_{i-1,j}^n \left(\frac{uk}{h} \right) \right) + T_{i,j-1}^n \left(\frac{vk}{q} \right) + k \left(b_{i,j} - \frac{1}{We} \right). \quad (4.6)$$

4.2.1 Resultados Numéricos

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos no software MATLAB a solução numérica da equação (4.3) via os esquemas (4.4) e (4.6). Vale ressaltar que não apresentaremos os resultados obtidos ao variarmos o passo temporal e o passo espacial da malha devido ao fato de serem análogos aos do caso 1D.

I) Influência de We

Tomando $u = v = 1$, $b = 1$, $t = 2$, $x \in [0, 10]$, $\Delta x = \Delta y = 0.1$ e $\Delta t = 0.05$, a Tabela 4.4 apresenta o erro absoluto cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados com relação a solução exata em 1D. Esses erros foram calculados somente na parte que nos interessa, que é a região do crescimento multiplicativo da solução.

As Figuras 4.12, 4.13, 4.14 e 4.15 representam, respectivamente, a solução numérica da equação (4.3) ao tomarmos $We = 1, 10, 50$ e 100 . Nas Figuras 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19 estão ilustradas as comparações dos perfis diagonais das soluções produzidas pelos esquemas (4.4) e (4.6) com a solução exata em uma dimensão.

Na Tabela 4.4 podemos ver que, independentemente do We considerado, o erro absoluto do método com LCR é sempre bem menor do que o erro absoluto do método sem LCR.

4.2.2 Conclusão

Considerando discretização por Upwind de primeira ordem no termo convectivo e Euler explícito no termo transiente vimos que, assim como no

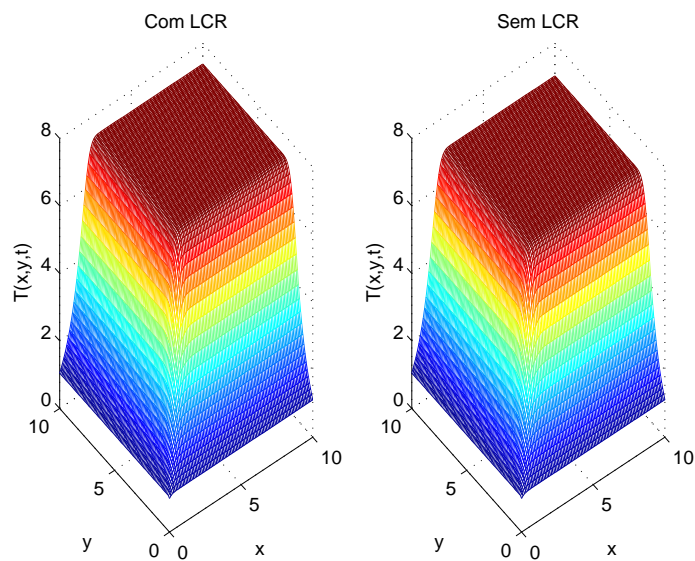


Figura 4.12: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 1$.

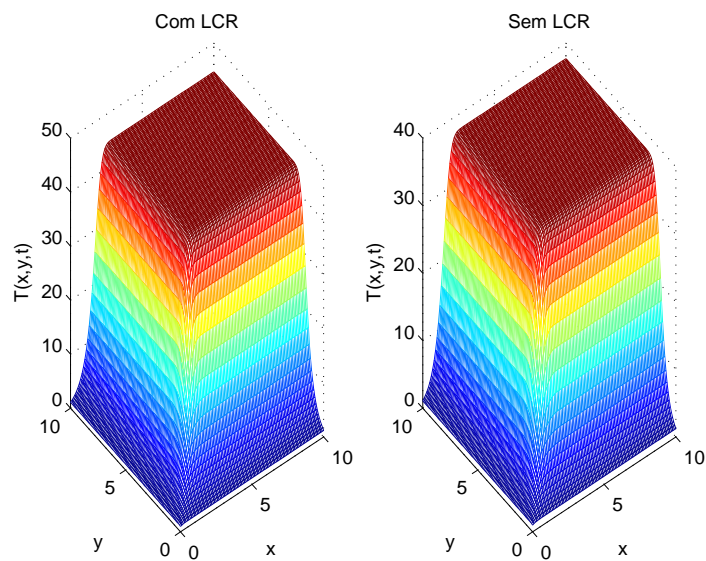


Figura 4.13: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$.

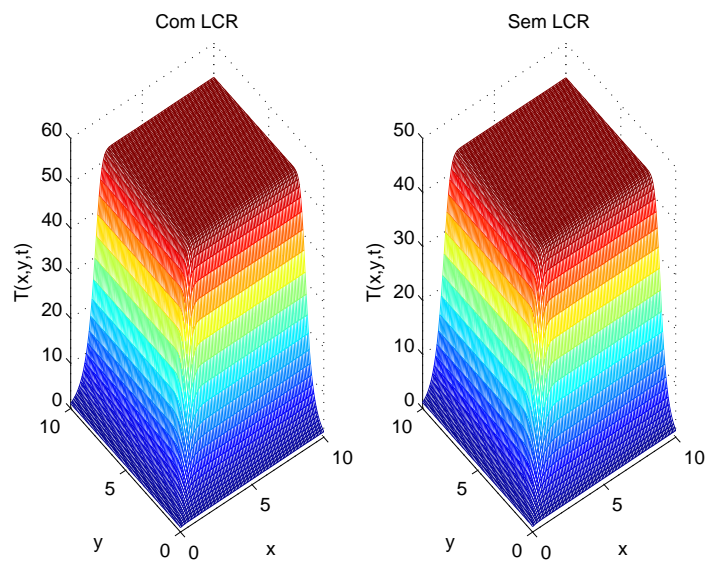


Figura 4.14: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$.

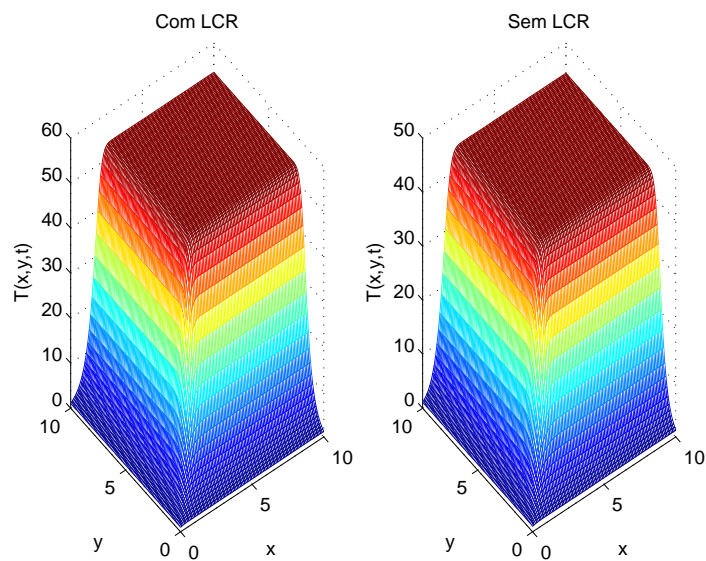
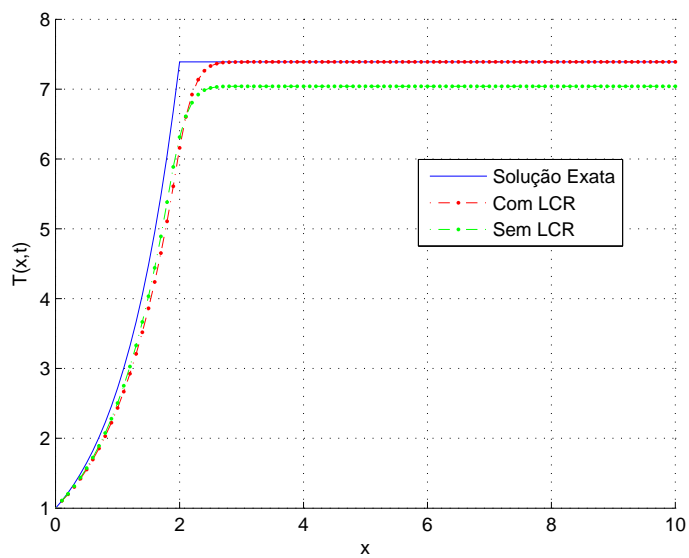
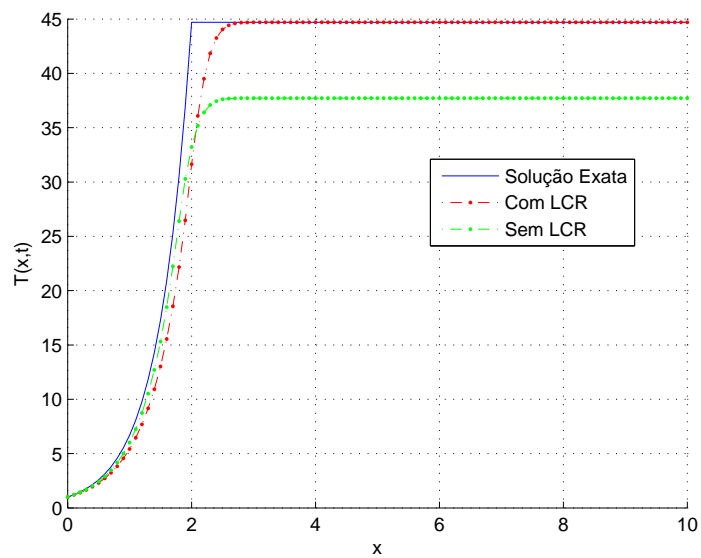
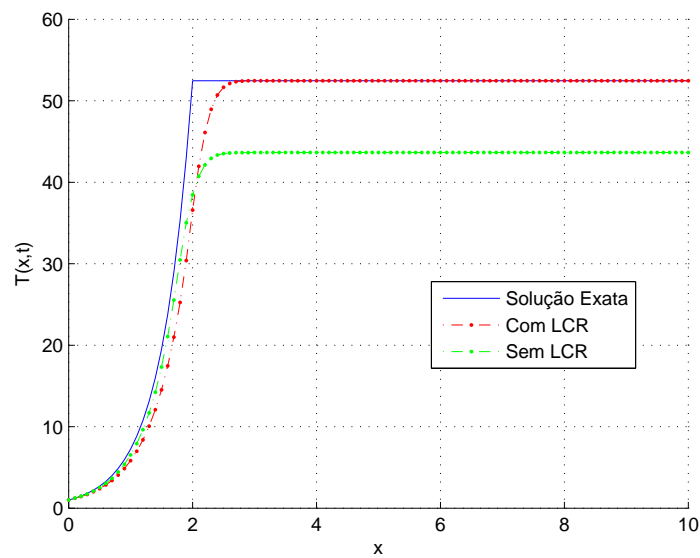
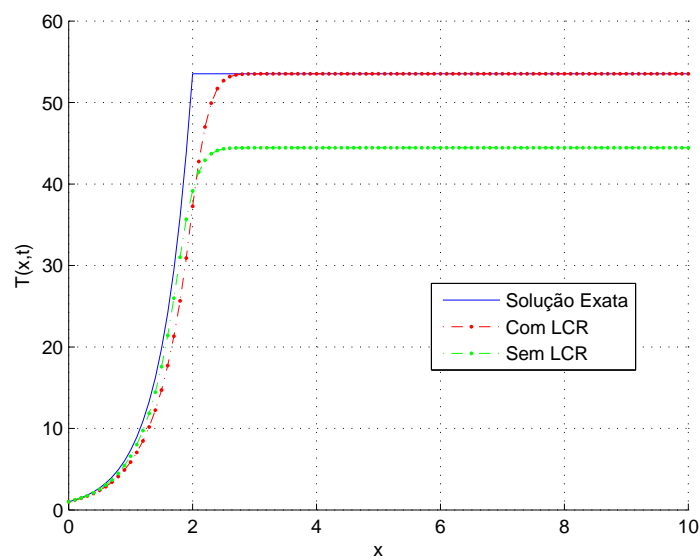


Figura 4.15: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$.

Figura 4.16: Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 1$.Figura 4.17: Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 10$.

Figura 4.18: Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 50$.Figura 4.19: Perfis diagonais da equação (4.3) para $We = 100$.

We	ERRO	
	LCR	Upwind
1	6.2172e-015	0.3491
10	1.5632e-013	6.9818
50	1.8474e-013	8.8150
100	9.2371e-014	9.0734

Tabela 4.4: Erro relativo cometido ao variarmos We .

caso 1D (seção anterior), a aproximação produzida pelo caso com LCR se mostrou mais eficiente, sempre acompanhando o crescimento da solução exata, independentemente do We considerado.

4.3 Equação de Advecção Linear com velocidade constante por partes

Consideremos a equação de advecção linear com termo fonte (4.1) com velocidade constante por partes

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = BT, \quad (4.7)$$

onde

$$u = \begin{cases} a_1, & \text{para } 0 \leq x \leq \alpha \\ a_2, & \text{para } \alpha < x \leq L \end{cases},$$

com $B = (b(x) - \frac{1}{We})$, $x \in [0, L]$ e $0 < \alpha < L$.

Tomando, por exemplo, $a_1 < a_2$ temos que, para $x \in [0, \alpha]$, a solução analítica da equação acima é dada por

$$T(x, t) = \begin{cases} T_0(x - a_1 t) e^{Bt}, & 0 \leq t \leq \frac{x}{a_1} \\ v_0(t - x/a_1) e^{\frac{Bx}{a_1}}, & \frac{x}{a_1} < t \leq \frac{\alpha}{a_1} \\ v_0(t - \alpha/a_1) e^{\frac{B\alpha}{a_1}}, & \frac{\alpha}{a_1} < t \end{cases}, \quad (4.8)$$

e, para $x \in]\alpha, L]$,

$$T(x, t) = \begin{cases} T_0(x - a_2 t)e^{Bt}, & \alpha \leq t \leq \frac{x-\alpha}{a_2} \\ T_0(x - a_1(t - \frac{x-\alpha}{a_2}))e^{Bt}, & \frac{x-\alpha}{a_2} < t \leq \frac{\alpha}{a_1} + \frac{x-\alpha}{a_2} \\ v_0(t - \frac{x-\alpha}{a_2} - \frac{\alpha}{a_1})e^{B(\frac{x-\alpha}{a_2} + \frac{\alpha}{a_1})}, & \frac{x-\alpha}{a_2} + \frac{\alpha}{a_1} < t \leq \frac{L-\alpha}{a_2} + \frac{\alpha}{a_1} \\ v_0(t - \frac{L-\alpha}{a_2} - \frac{\alpha}{a_1})e^{B(\frac{L-\alpha}{a_2} + \frac{\alpha}{a_1})}, & \frac{L-\alpha}{a_2} + \frac{\alpha}{a_1} < t \end{cases} \quad (4.9)$$

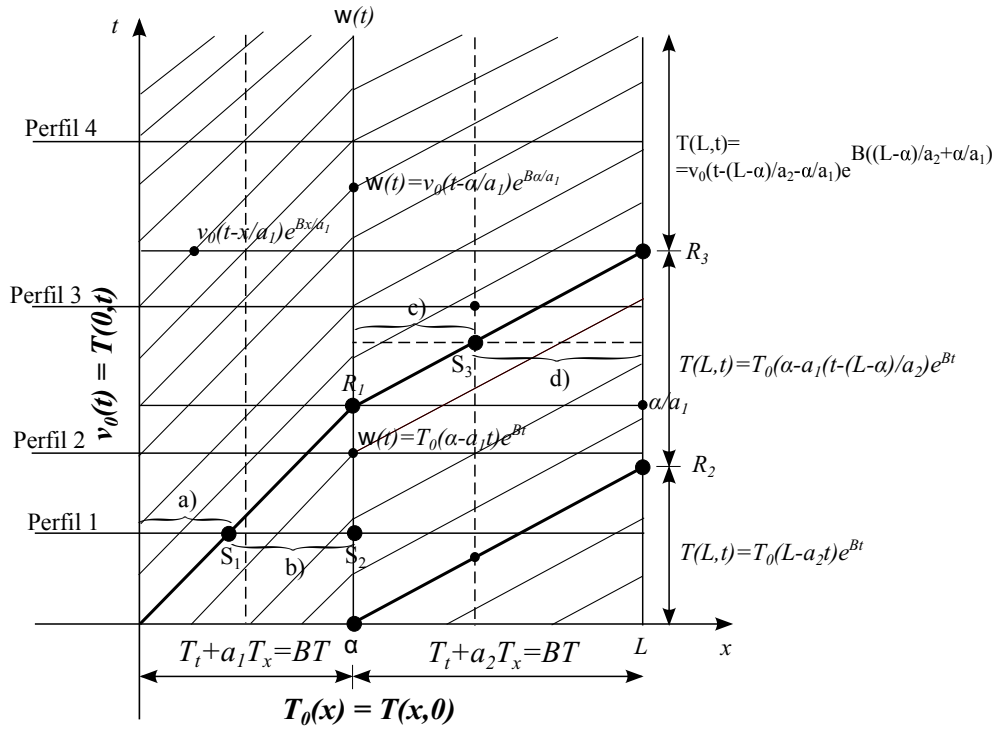


Figura 4.20: Propagação da solução de (4.7) na direção das características.

4.3.1 Resultados Numéricos

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos no software MATLAB a solução numérica da equação (4.7) via os esquemas (3.2) e (3.24).

I) Influência de Δt

Tomando $a_1 = 1$, $a_2 = 0.5$, $b = 1$, $We = 100$, $t = 2$, $x = [0, 2.5]$ e $\Delta x = 0.1$, as Figuras 4.21, 4.22 e 4.23 representam a solução numérica da equação (4.7) sem LCR e com LCR ao variarmos Δt . Comparando tais soluções podemos ver que, assim como no caso estudado na seção 4.1, independentemente do passo temporal a solução numérica fornecida pelo caso com LCR acompanha o crescimento da solução exata.

A Tabela 4.5 apresenta o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados ao variarmos Δt . Podemos ver que o erro cometido pelo método com LCR sempre é menor do que o erro relativo cometido pelo método sem LCR.

Δt	CFL	ERRO	
		LCR	Upwind
0.1	1	0.0351	0.0965
0.05	0.5	0.0468	0.0722
0.01	0.1	0.0578	0.0610

Tabela 4.5: Erro relativo cometido ao variarmos Δt .

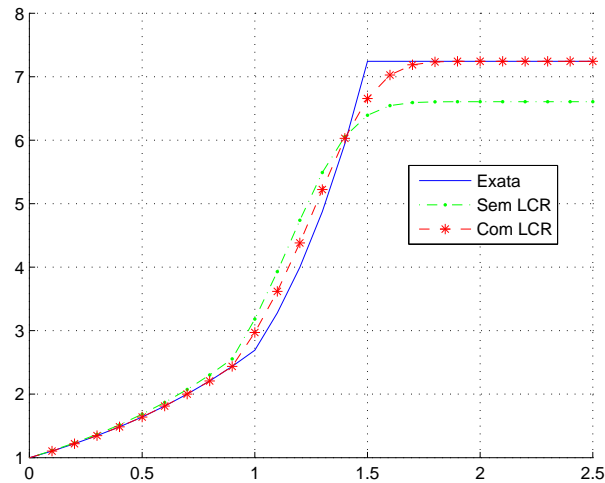
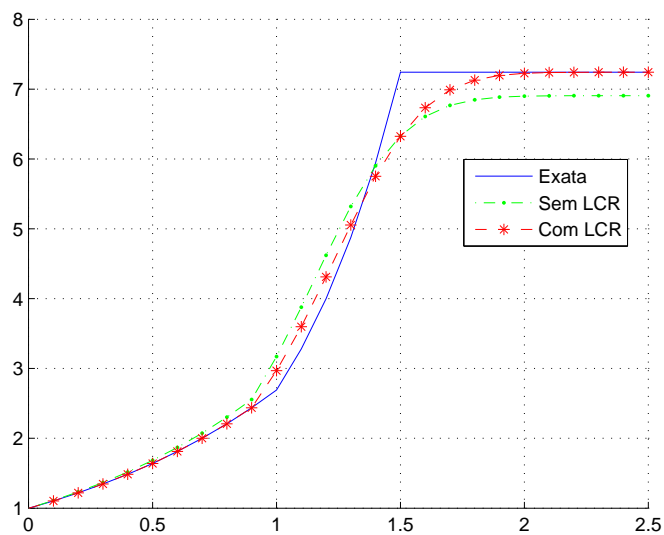
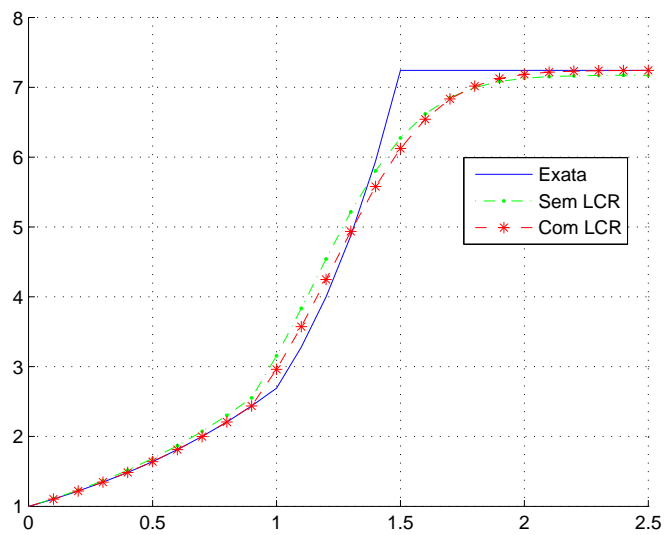


Figura 4.21: Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.1$.

Figura 4.22: Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.05$.Figura 4.23: Soluções numéricas da equação (4.7) para $\Delta t = 0.01$.

II) Influência de We

Tomando $a_1 = 1$, $a_2 = 0.5$, $b = 1$, $t = 2$, $x \in [0, 2.5]$, $\Delta t = 0.1$ e $\Delta x = 0.1$, as Figuras 4.24, 4.25, 4.26 e 4.27 representam, respectivamente, a solução numérica ao tomarmos $We = 2$, 10, 100 e 1000. Comparando tais figuras podemos ver que, independentemente do We considerado, a aproximação produzida pelo caso com LCR se mostrou mais eficiente, sempre acompanhando o crescimento da solução exata.

A Tabela 4.6 apresenta o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados ao variarmos We .

We	ERRO	
	LCR	Upwind
2	0.0331	0.0197
10	0.0326	0.0826
100	0.0351	0.0965
1000	0.0353	0.0980

Tabela 4.6: Erro relativo cometido ao variarmos We .

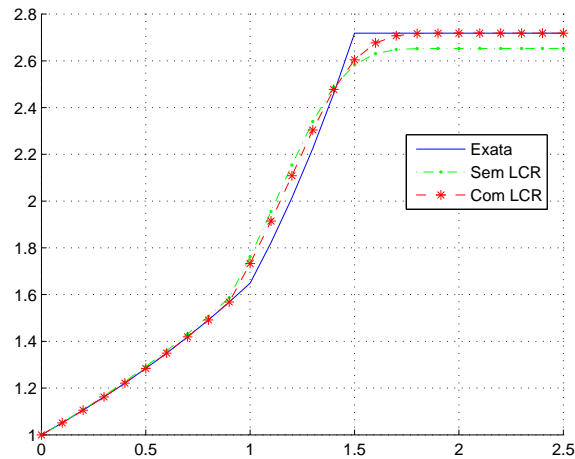


Figura 4.24: Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 2$.

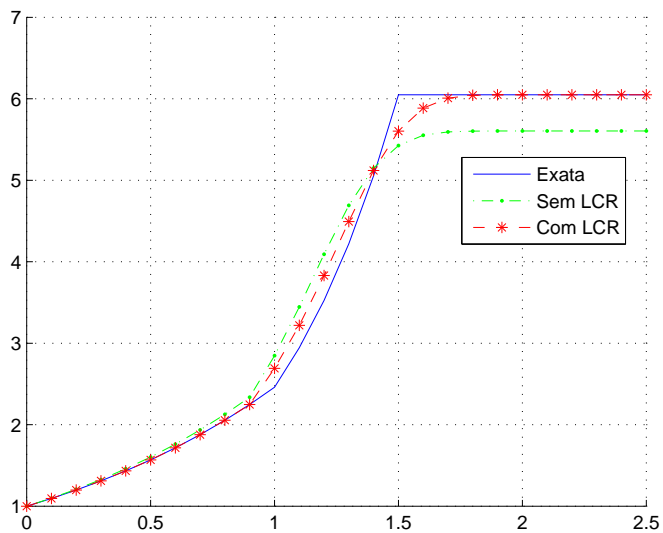


Figura 4.25: Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 10$.

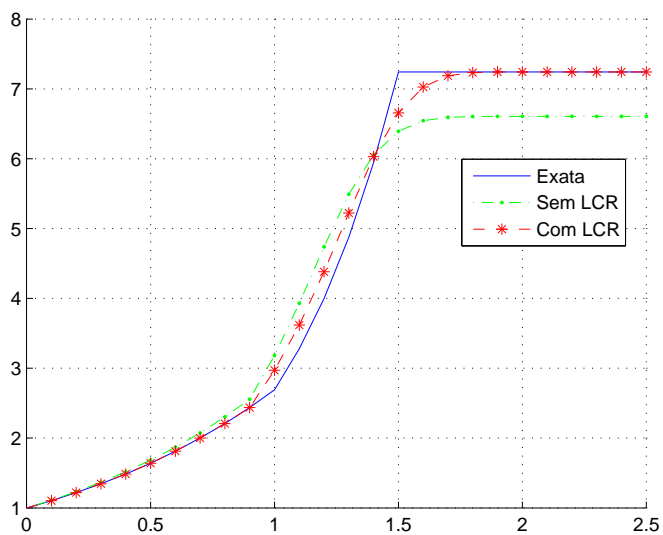


Figura 4.26: Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 100$.

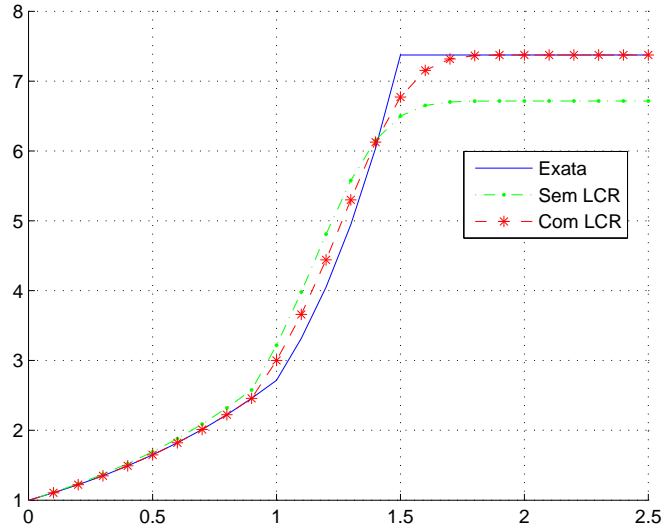


Figura 4.27: Soluções numéricas da equação (4.7) para $We = 1000$.

4.3.2 Conclusão

Assim como nas seções anteriores, vimos que a situação ligada ao HWNP pode ser melhorada através da representação por conformação logarítmica da equação diferencial parcial em questão. Resultados numéricos foram obtidos corroborando com essa perspectiva.

4.4 Equação de Transporte

A seguir, consideraremos a equação de transporte modelo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nabla T, \quad (4.10)$$

onde $T = T(We, u)$ é o termo fonte, definido pela equação constitutiva do fluido¹. Assim, trabalharemos com um sistema composto pelas equações (4.10) e

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = BT, \quad (4.11)$$

¹Equação de advecção linear com termo fonte, estudada nas seções anteriores

onde $\varepsilon = \frac{2\beta}{Re}$, $Re > 0$ e $B = (b(x) - \frac{1}{We})$.

Aproximando (4.10) por meio dos métodos Euler explícito e Diferenças centradas, obtemos o esquema

$$U_i^{n+1} = U_i^n \left(1 - \frac{2\varepsilon k}{h^2} \right) + \frac{\varepsilon k}{h^2} (U_{i+1}^n - U_{i-1}^n) + \frac{k}{2h} (T_{i+1}^n - T_{i-1}^n), \quad (4.12)$$

onde consideramos $U_i^n = U(x_i, t_n)$, h o passo espacial e k o passo temporal.

4.4.1 Resultados Numéricos

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos no software MATLAB a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) via os esquemas (3.2), (3.24) e (4.12). Consideraremos como solução exata da equação (4.10) a solução fornecida ao utilizarmos a solução analítica de (4.11) ao invés da solução numérica fornecida pela versão sem LCR (esquema (3.2)) ou pela versão LCR (esquema (3.24)).

Parte I

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos os esquemas numéricos acima mencionados com $x \in [0, 1]$.

i) Influência de Δt

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $We = 10$, $\beta = 0.1$ e $\Delta x = 0.1$, temos que as Figuras 4.28, 4.29, 4.30 e 4.31 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Δt .

Comparando tais soluções podemos ver que a solução numérica fornecida pelo método sem LCR se aproxima da solução exata na medida em que diminuimos Δt . Já o caso com LCR mantém-se próximo à solução exata independentemente do Δt considerado.

A Tabela 4.7 mostra o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados.

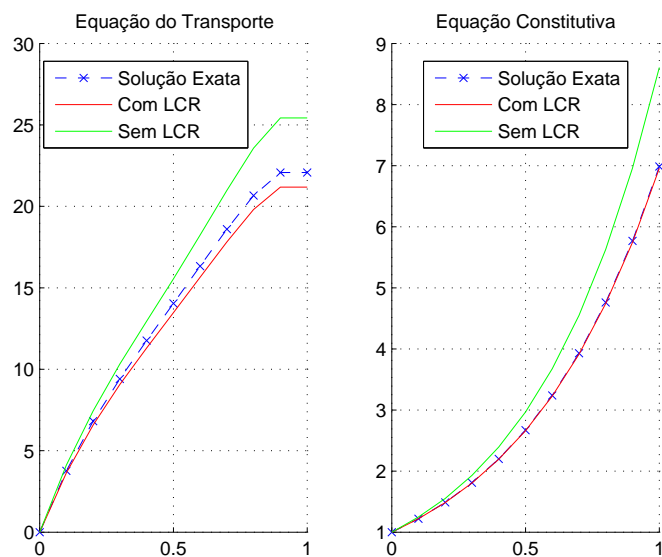


Figura 4.28: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.1$.

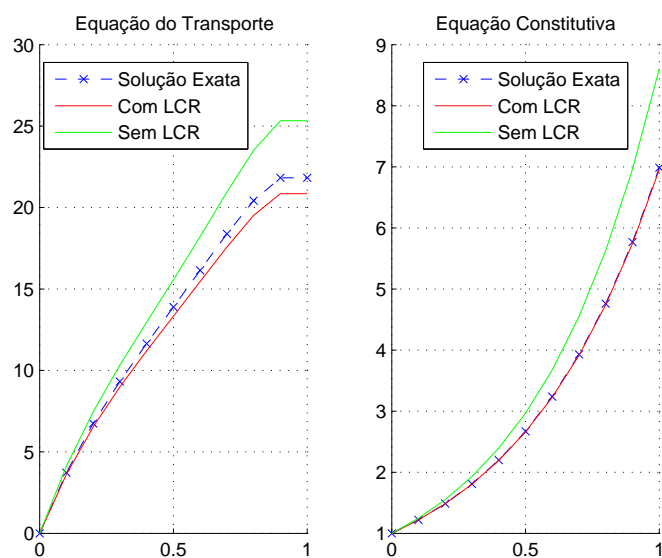


Figura 4.29: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.05$.

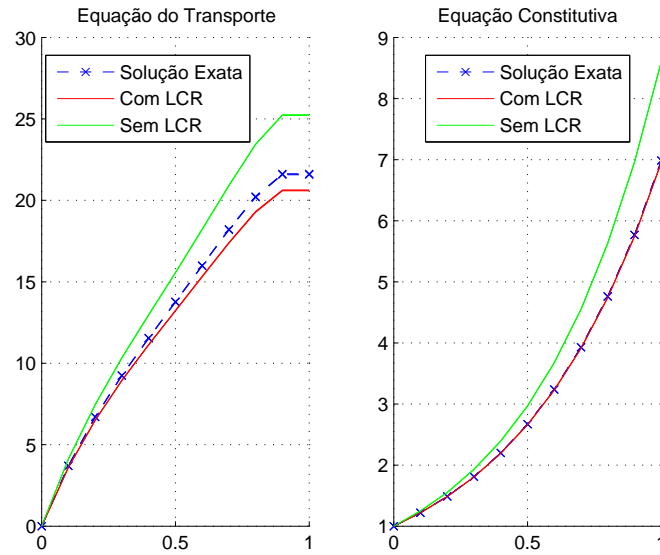


Figura 4.30: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.01$.

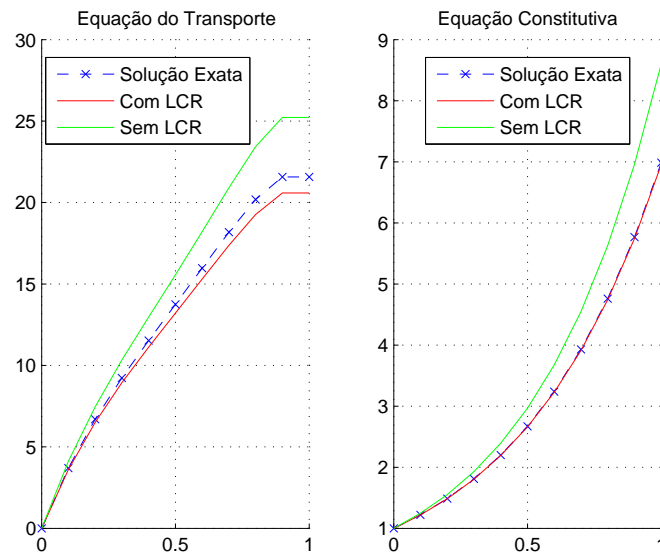


Figura 4.31: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.001$.

Δt	ERRO	
	LCR	Upwind
0.1	0.0406	0.1347
0.05	0.0430	0.1447
0.01	0.0434	0.1527
0.001	0.0434	0.1545

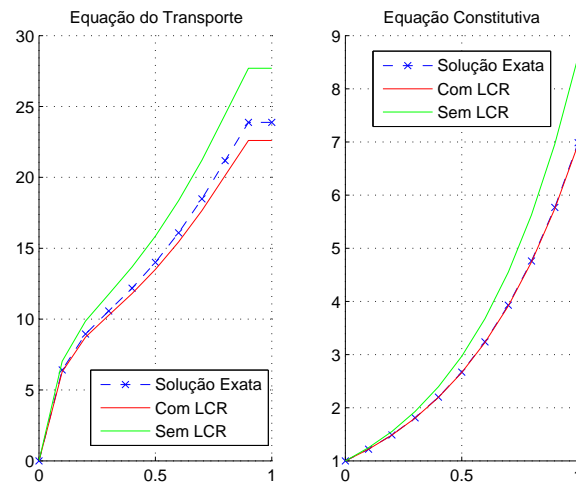
Tabela 4.7: Erro relativo cometido ao variarmos Δt .

ii) Influência de Δx

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $We = 10$, $\beta = 0.1$ e $\Delta t = 0.001$, temos que as Figuras 4.32, 4.33 e 4.34 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Δx .

Comparando tais soluções podemos ver que, na medida em que diminuimos Δx , a solução numérica fornecida pelo método sem LCR aproximou-se da solução exata. Já o caso com LCR aproximou-se da solução exata independentemente do Δx considerado.

A Tabela 4.8 mostra o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados.

Figura 4.32: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.1$.

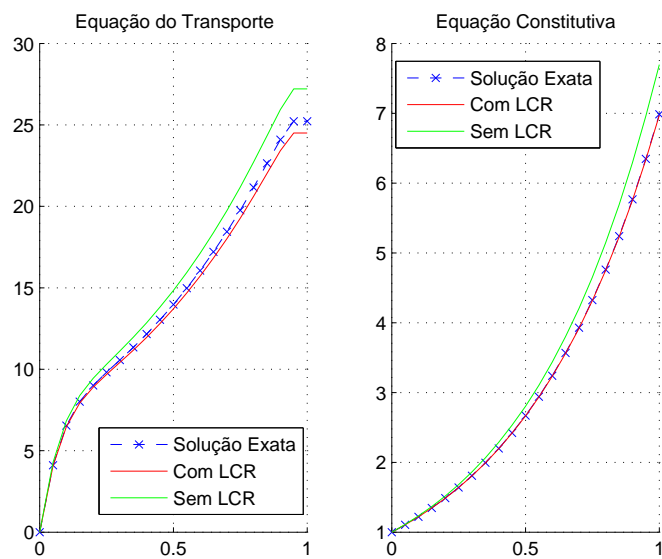


Figura 4.33: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.05$.

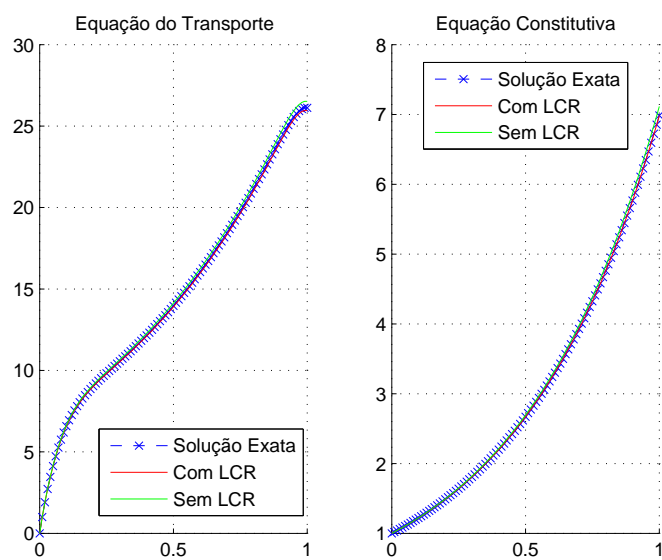


Figura 4.34: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.01$.

Δx	ERRO	
	LCR	Upwind
0.1	0.0434	0.1545
0.05	0.0228	0.0734
0.01	0.0049	0.0138

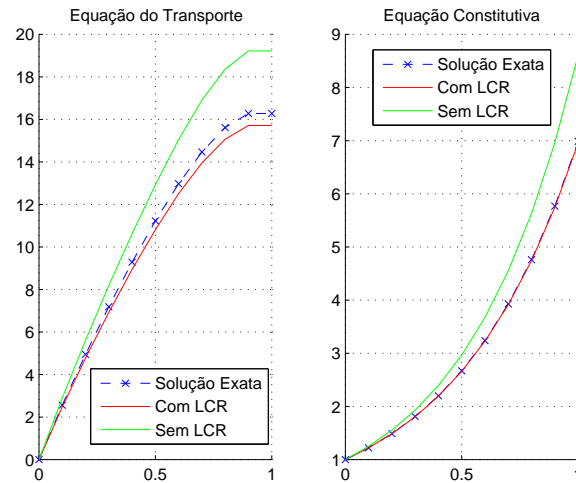
Tabela 4.8: Erro relativo cometido ao variarmos Δx .

iii) Influência de Re

Tomando $t = 3$, $We = 10$, $\beta = 0.1$, $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.5$ temos que as Figuras 4.35, 4.36, 4.37, 4.38 e 4.39 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Re .

Comparando tais soluções podemos ver que, independentemente do Re considerado, a solução numérica fornecida pelo método com LCR manteve-se próxima da solução exata, o que não ocorreu com o método sem LCR.

A Tabela 4.9 mostra o erro relativo cometido pelos métodos acima mencionados.

Figura 4.35: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 2$.

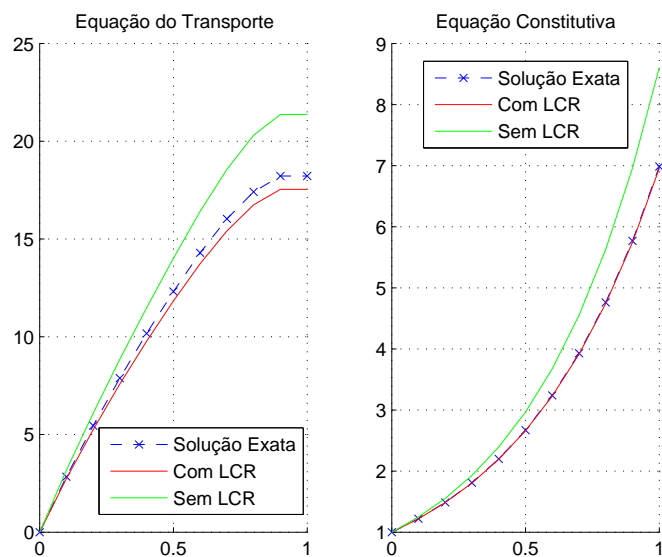


Figura 4.36: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 3$.

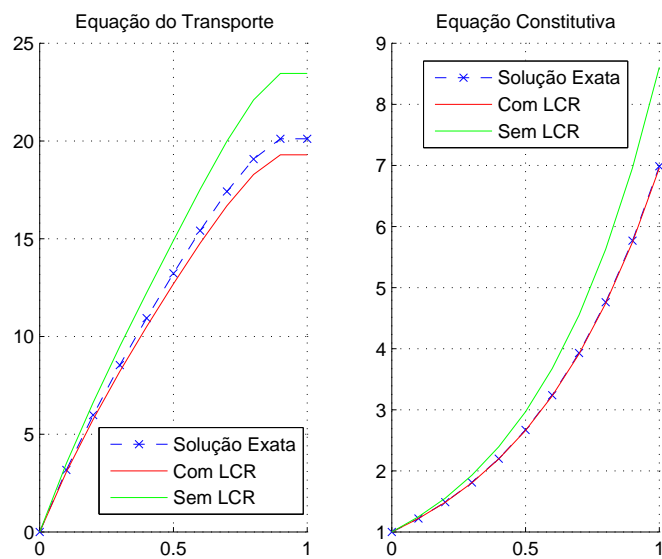


Figura 4.37: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 5$.

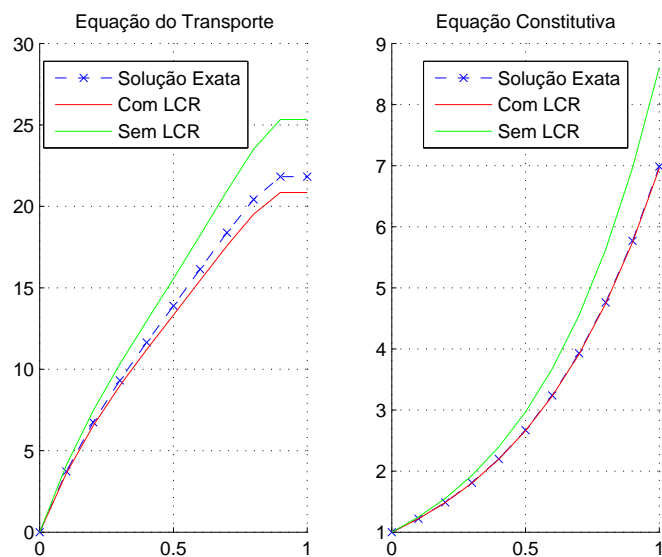


Figura 4.38: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 10$.

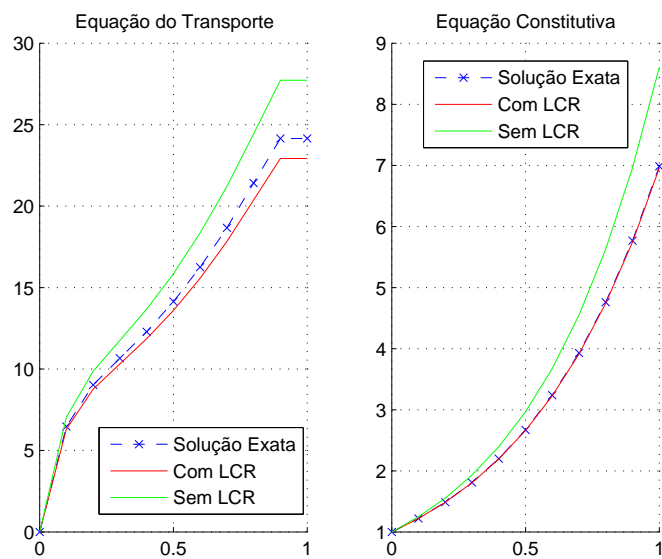


Figura 4.39: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 100$.

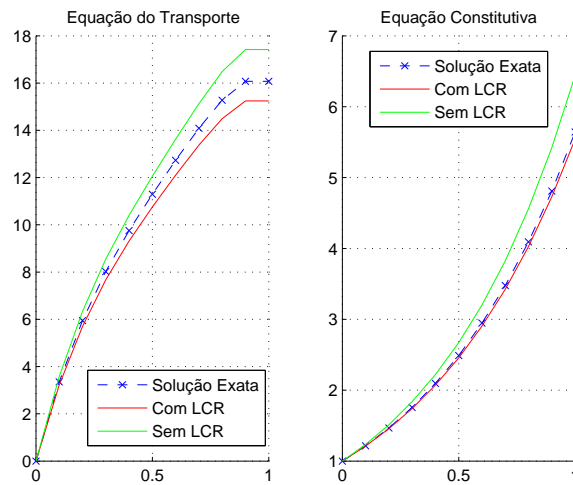
Re	ERRO	
	LCR	Upwind
2	0.0356	0.1689
3	0.0384	0.1591
5	0.0408	0.1512
10	0.0430	0.1447
100	0.0459	0.1364

Tabela 4.9: Erro relativo cometido ao variarmos Re .

iv) Influência de We

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $\beta = 0.1$, $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.5$ temos que as Figuras 4.40, 4.41, 4.42, 4.43 e 4.44 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos We .

A Tabela 4.10 mostra o erro relativo cometido pelos métodos aqui utilizados. Podemos ver que, independentemente do We considerado, o erro relativo do método com LCR é sempre menor do que o erro relativo do método sem LCR e, além disso, na medida em que tomamos We maior, o erro relativo do método com LCR diminui e o erro relativo do método sem LCR cresce.

Figura 4.40: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 2$.

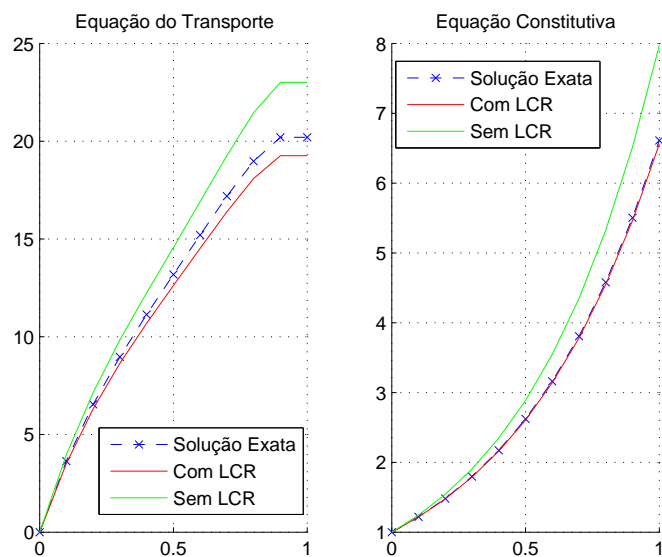


Figura 4.41: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 5$.

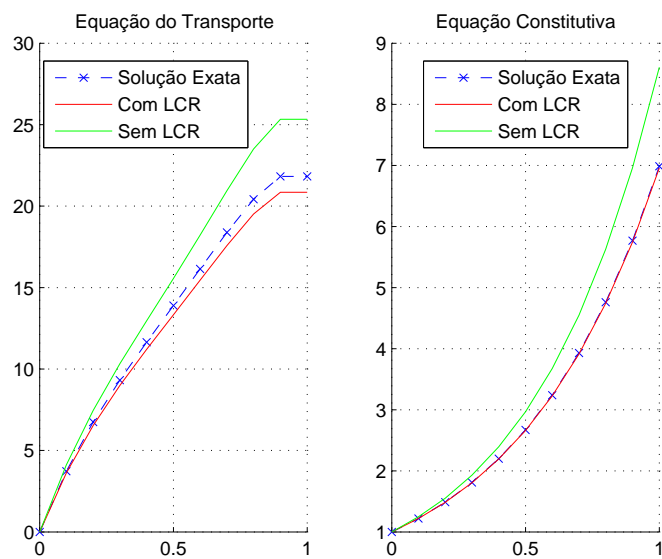


Figura 4.42: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$.

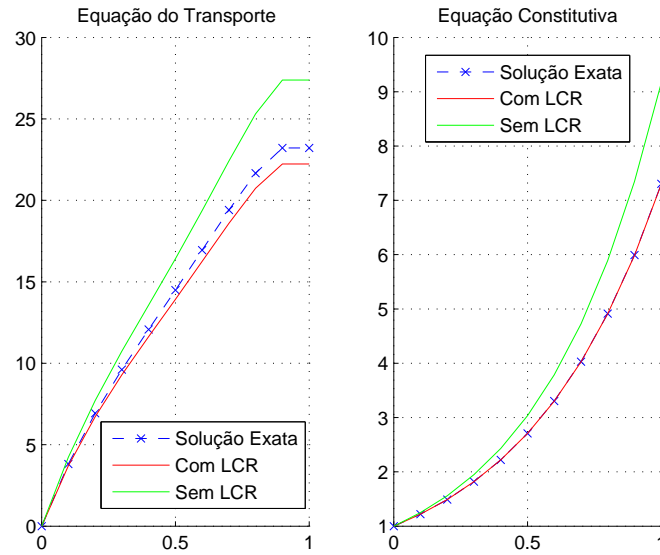


Figura 4.43: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$.

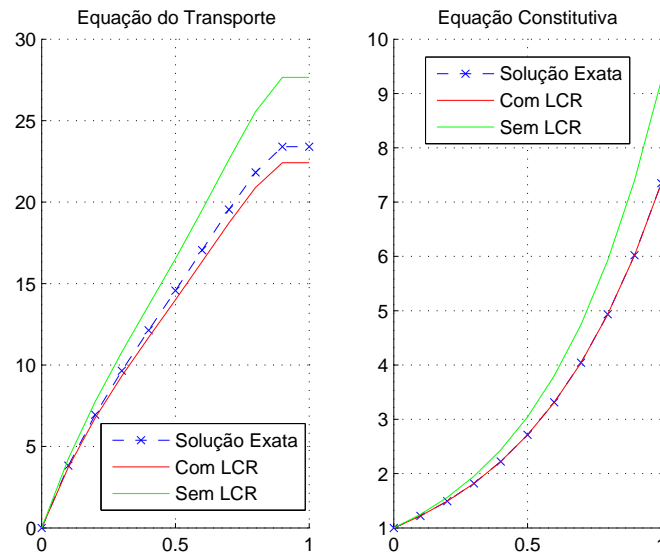


Figura 4.44: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$.

We	ERRO	
	LCR	Upwind
2	0.0497	0.0764
5	0.0450	0.1253
10	0.0430	0.1447
50	0.0412	0.1616
100	0.0409	0.1637

Tabela 4.10: Erro relativo cometido ao variarmos We .

Parte II

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos obtidos ao implementarmos os esquemas numéricos acima mencionados com $x \in [0, 6]$.

Note que aumentamos o domínio espacial a fim de envolver o ponto de descontinuidade de contato da solução da equação constitutiva na equação de transporte.

i) Influência de Δt

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $We = 10$, $\beta = 0.1$ e $\Delta x = 0.1$, temos que as Figuras 4.45, 4.46, 4.47 e 4.48 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Δt .

Comparando tais soluções podemos ver que a solução numérica fornecida pelo método com LCR aproxima-se melhor da solução exata. No entanto, quanto maior for Δt , melhor será a solução fornecida pelo método com LCR. Já o caso sem LCR aproxima-se da solução exata na medida em que diminuimos Δt , o que não nos é satisfatório pois, quanto mais refinada for a malha, maior será o esforço computacional para calcular a solução numérica.

A Tabela 4.11 mostra o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados.

Podemos ver que o erro relativo cometido pelo método com LCR é sempre menor do que o erro relativo cometido pelo método sem LCR.

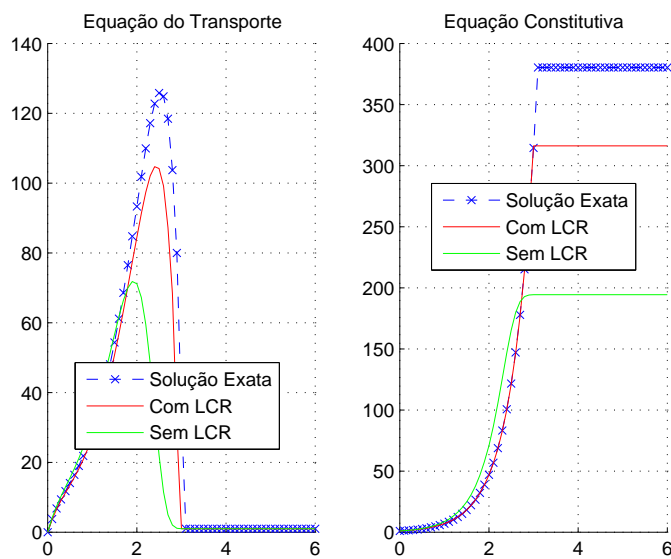


Figura 4.45: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.1$.

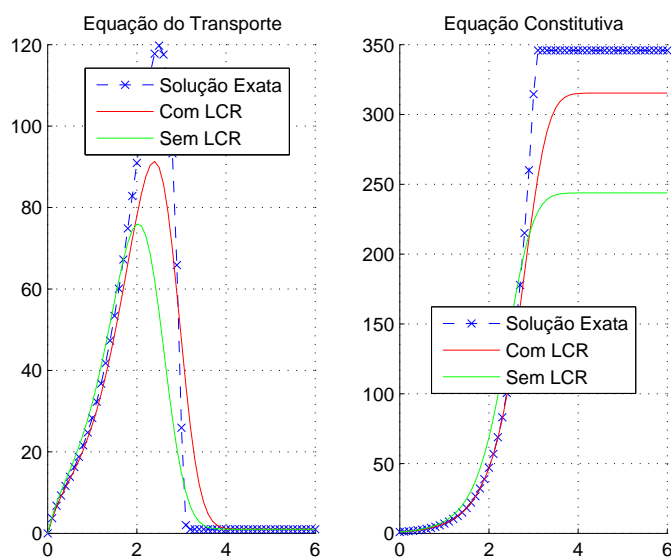


Figura 4.46: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.05$.

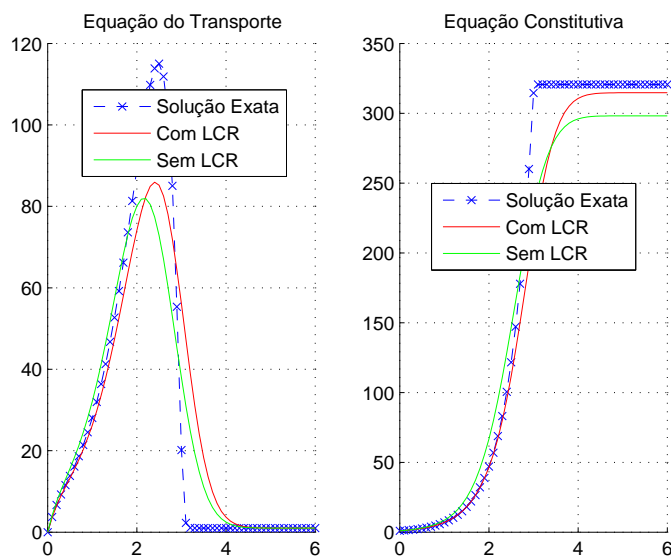


Figura 4.47: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.01$.

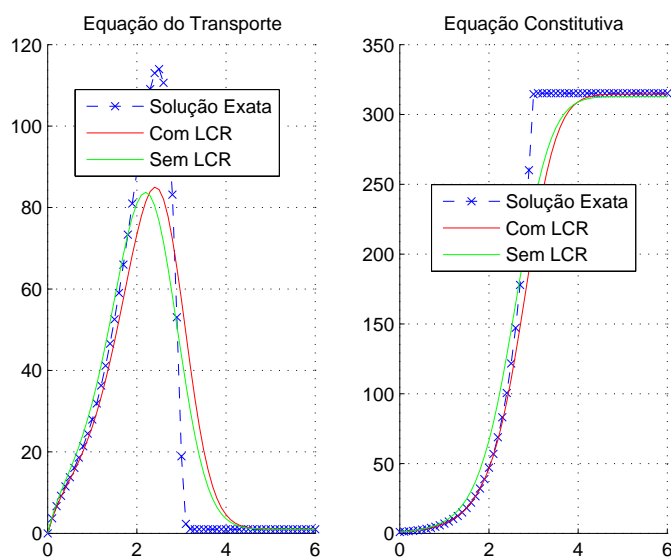


Figura 4.48: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta t = 0.001$.

Δt	ERRO	
	LCR	Upwind
0.1	0.2259	0.6712
0.05	0.2445	0.4467
0.01	0.3048	0.3058
0.001	0.3190	0.2955

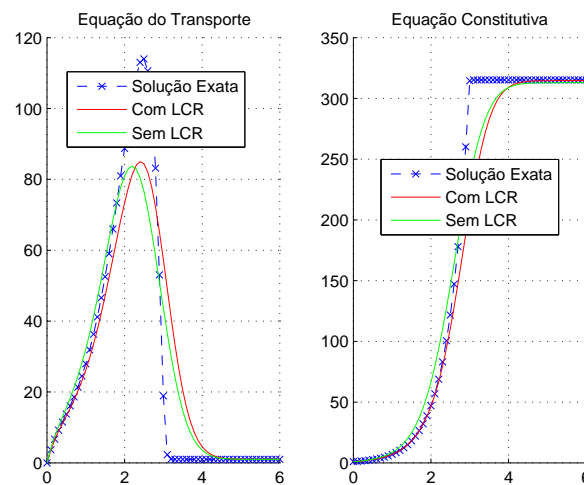
Tabela 4.11: Erro relativo cometido ao variarmos Δt .

ii) Influência de Δx

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $We = 10$, $\beta = 0.1$ e $\Delta t = 0.001$, temos que as Figuras 4.49, 4.50 e 4.51 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Δx .

Comparando tais soluções podemos ver que, independentemente do Δx considerado, os métodos numéricos fornecem solução semelhante. Além disso, a solução numérica fornecida pelos métodos numéricos aproxima-se da solução exata na medida em que diminuimos Δx .

A Tabela 4.12 mostra o erro relativo cometido pelos esquemas numéricos aqui utilizados.

Figura 4.49: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.1$.

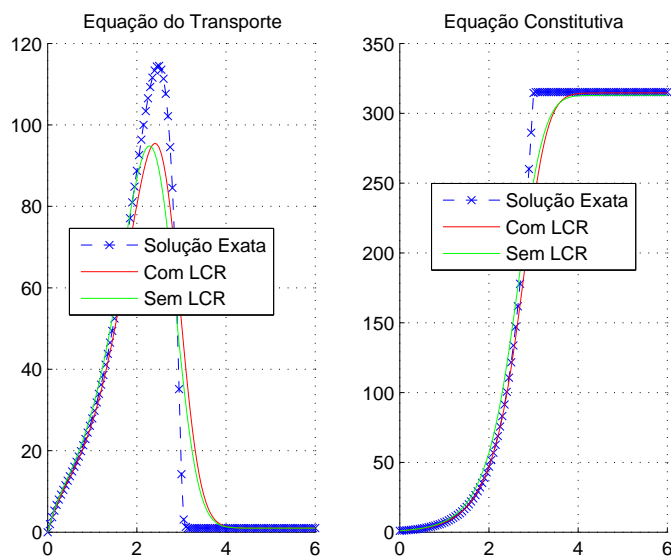


Figura 4.50: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.05$.

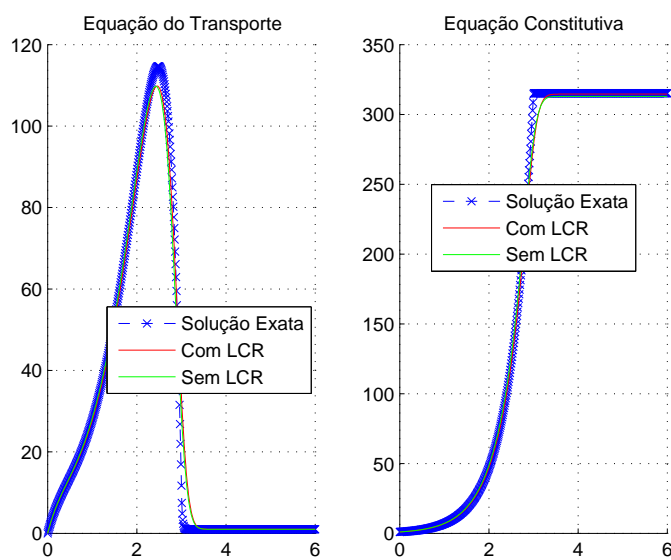


Figura 4.51: Soluções numéricas da equação (4.3) para $\Delta x = 0.01$.

Δx	ERRO	
	LCR	Upwind
0.1	0.3190	0.2955
0.05	0.2269	0.2165
0.01	0.0842	0.0846

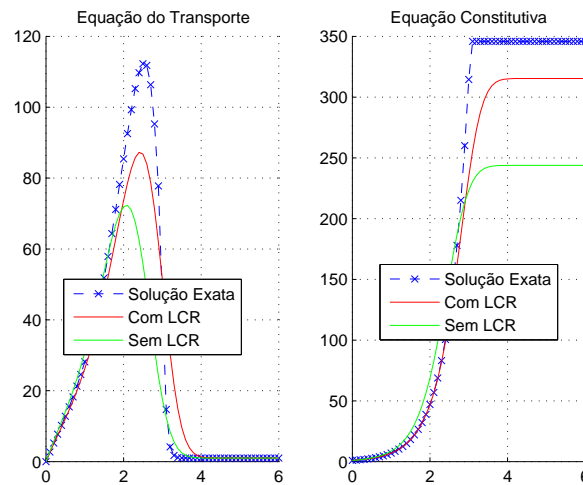
Tabela 4.12: Erro relativo cometido ao variarmos Δx .

iii) Influência de Re

Tomando $t = 3$, $We = 10$, $\beta = 0.1$, $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.05$ temos que as Figuras 4.52, 4.53, 4.54, 4.55 e 4.56 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos Re .

Comparando tais soluções podemos ver que, independentemente do Re considerado, a solução numérica fornecida pelo método com LCR aproximou-se mais da solução exata.

A Tabela 4.13 mostra o erro relativo cometido pelos métodos acima mencionados. Podemos ver que o erro relativo do método com LCR é menor do que o erro relativo cometido pelo método sem LCR, independentemente do Re considerado.

Figura 4.52: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 2$.

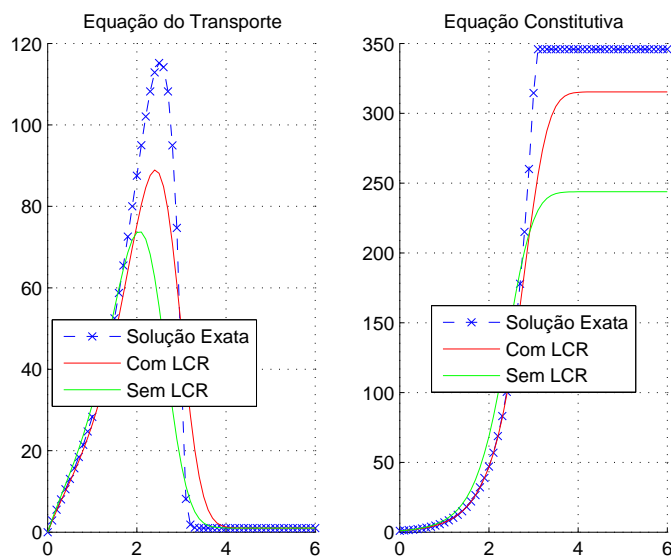


Figura 4.53: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 3$.

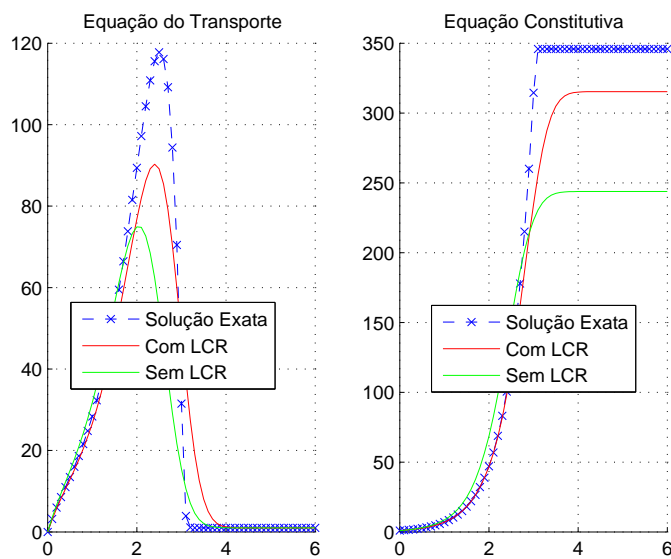


Figura 4.54: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 5$.

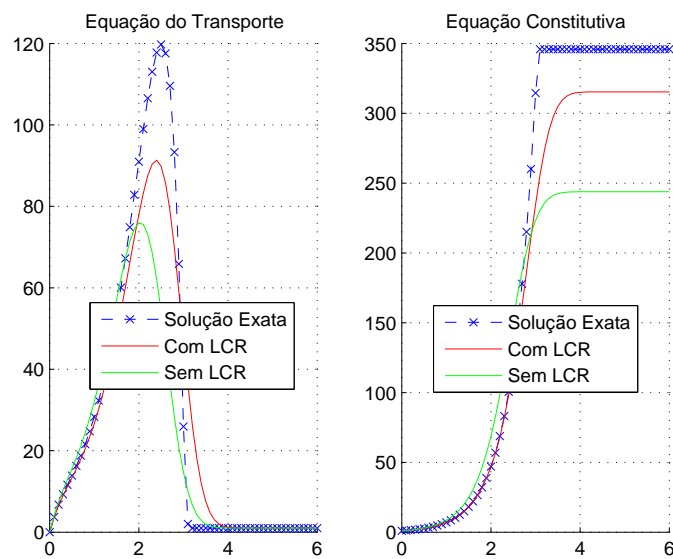


Figura 4.55: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 10$.

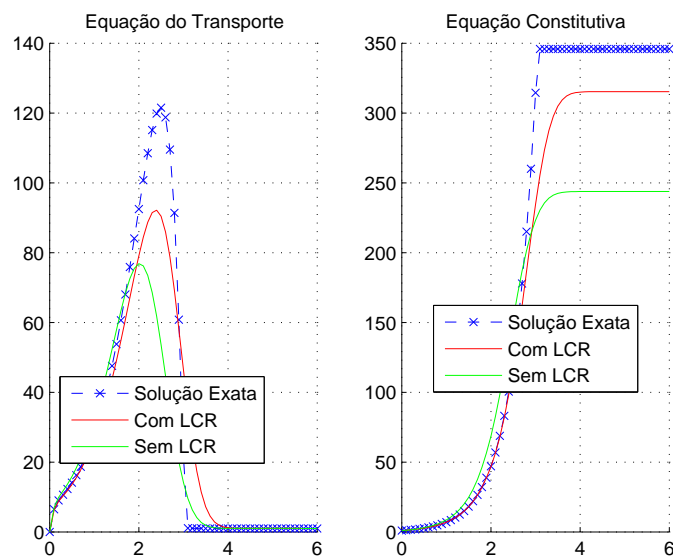


Figura 4.56: Soluções numéricas da equação (4.3) para $Re = 100$.

Re	ERRO	
	LCR	Upwind
2	0.2283	0.4297
3	0.2358	0.4371
5	0.2412	0.4428
10	0.2445	0.4467
100	0.2466	0.4497

Tabela 4.13: Erro relativo cometido ao variarmos Re .

iv) Influência de We

Tomando $t = 3$, $Re = 10$, $\beta = 0.1$, $\Delta x = 0.1$ e $\Delta t = 0.5$ temos que as Figuras 4.57, 4.58, 4.59, 4.60 e 4.61 representam a solução numérica do sistema formado pelas equações (4.10) e (4.11) ao variarmos We .

A Tabela 4.14 mostra o erro relativo cometido pelos métodos aqui utilizados. Podemos ver que, independentemente do We considerado, o erro relativo do método com LCR é sempre menor do que o erro relativo do método sem LCR.

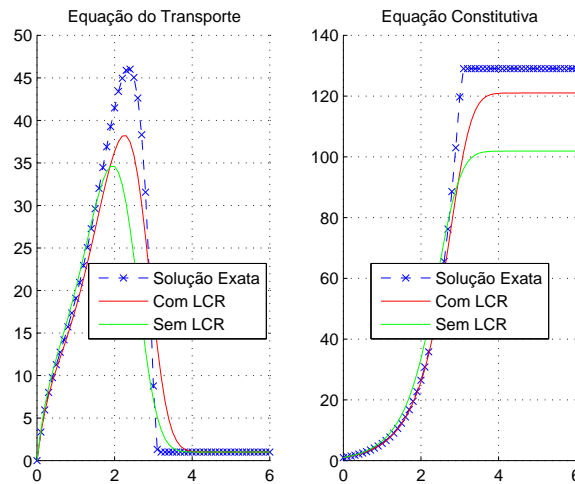


Figura 4.57: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 2$.

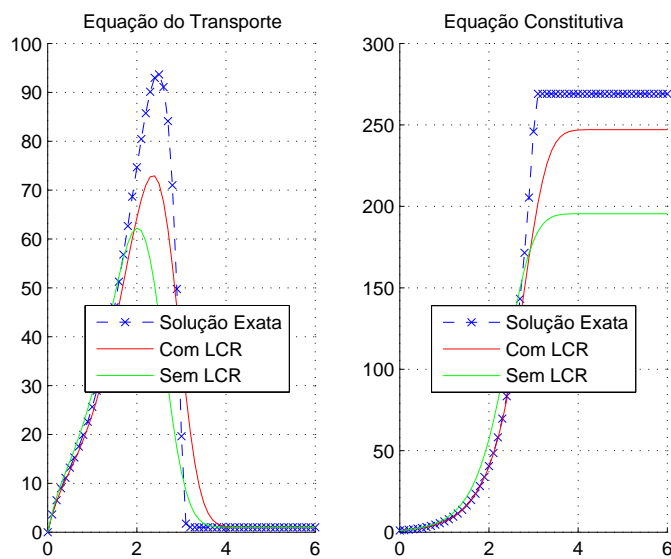


Figura 4.58: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 5$.

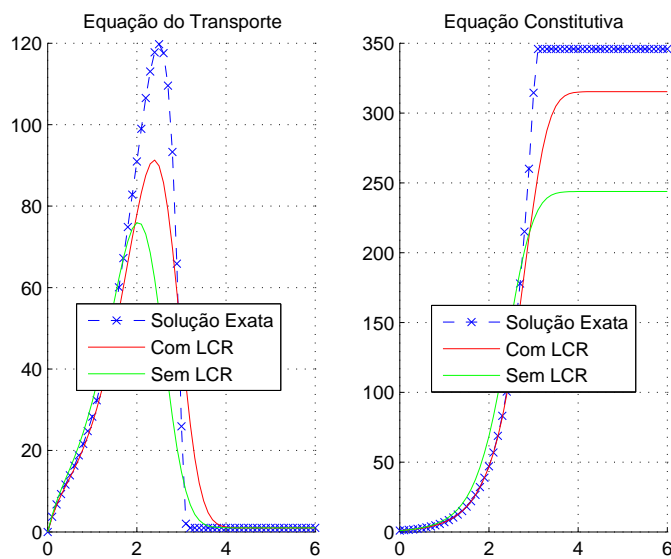


Figura 4.59: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 10$.

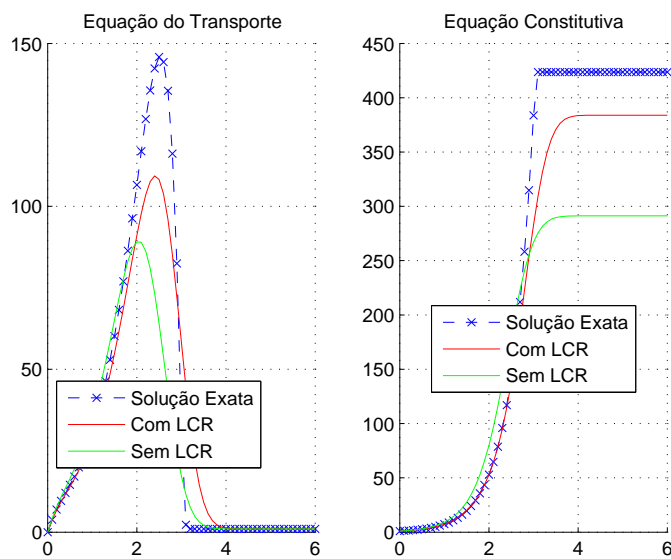


Figura 4.60: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 50$.

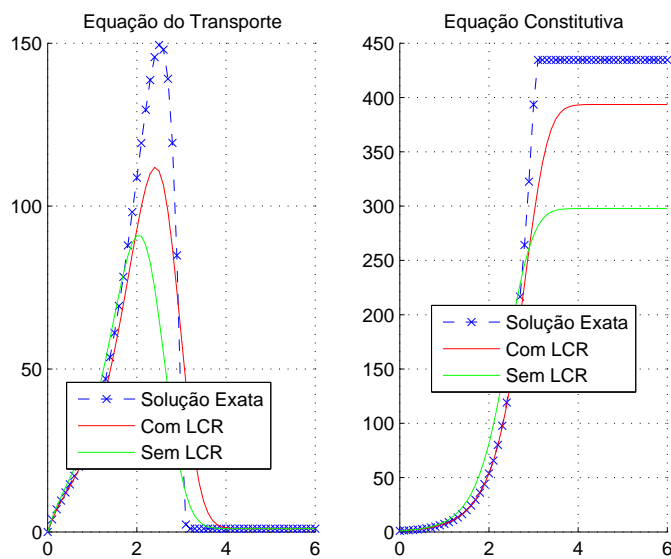


Figura 4.61: Soluções numéricas da equação (4.3) para $We = 100$.

We	ERRO	
	LCR	Upwind
2	0.1875	0.3286
5	0.2305	0.4176
10	0.2445	0.4467
50	0.2555	0.4696
100	0.2569	0.4724

Tabela 4.14: Erro relativo cometido ao variarmos We .

4.4.2 Conclusão

Ao estudarmos a estabilidade do método LCR na equação de transporte pudemos ver que, independentemente dos parâmetros adimensionais considerados, a aproximação produzida ao utilizarmos a versão LCR da equação constitutiva se mostrou mais eficiente, mantendo-se sempre mais próxima da solução em que foi utilizado a solução exata da equação constitutiva.

Capítulo 5

Conclusão

Considerando discretização por Upwind de primeira ordem no termo convectivo e Euler explícito no termo transiente, vimos que ao incluirmos um termo fonte na equação de advecção linear é também inserida uma restrição de estabilidade ao passo espacial da malha e , que tal restrição é influenciada pelo número de Weissenberg. Assim, quanto maior for We , menor necessita ser o passo espacial da malha, a fim de que a solução numérica fornecida pelo esquema numérico seja estável. Esta situação está ligada ao HWNP.

Assim como em [6], vimos que tal situação pode ser melhorada através de uma mudança de variável na equação diferencial parcial em questão, caracterizando a chamada representação por conformação logarítmica da equação diferencial parcial.

Ao realizarmos testes numéricos com a equação constitutiva pudemos ver que, independentemente do passo da malha e dos parâmetros adimensionais considerados, a solução numérica fornecida pela versão LCR aproxima-se da solução exata com crescimento exponencial análogo ao crescimento exponencial da mesma. Os resultados numéricos obtidos foram análogos, independentemente da maneira em que definimos a velocidade e independentemente da dimensão do problema.

Ao estudarmos a estabilidade do método LCR na equação de transporte modelo foi notório que a solução numérica fornecida ao utilizar a versão LCR da equação constitutiva se mostrou mais eficiente, mantendo-se sempre mais próxima da solução em que foi utilizada a solução exata da mesma, independentemente do passo da malha e dos parâmetros adimensionais considerados.

Em todos os testes numéricos realizados pudemos ver que a solução numérica fornecida pelos métodos com LCR fornece solução mais satisfatória ao

utilizarmos uma malha menos refinada, o que nos é vantajoso, pois isso faz com que seja diminuído o esforço computacional exigido para calcular a solução de um esquema método numérico.

Os resultados numéricos obtidos corroboram com a perspectiva de que a instabilidade numérica pode ser melhorada através da representação por conformação logarítmica.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Afonso, P. J. Oliveira, F. T. Pinho, and M. A. Alves, The log-conformation tensor approach in the finite-volume method framework, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 157 (2009), 55–65.
- [2] L. A. Bielça, F. P. Martins, and M. Meneguette, Representação por log-conformation, *Proceedings of DINCON2011* (2011).
- [3] L. A. Bielça, Orientador, M. Meneguette, Co-orientador, and F. P. Martins, Leis de conservação hiperbólicas com termo fonte: solução pelo método de diferenças finitas usando representação por log-conformation, *Relatorio IC-FAPESP, Processo 2010/0993-1* (2011).
- [4] R. C. Bird, R.C. Armstrong, and O. Hassager, *Numerical simulation in fluid dynamics: A practical introduction*, John Willey & Sons, 1987.
- [5] L. Corrêa, G. A. B. Lima e V. G. Ferreira, Metodologia para o desenvolvimento de esquemas upwind de alta ordem, *Notas em Matematica Aplicada*, vol.57, SBMAC, 2011.
- [6] P. Dartzi, Y.S. Yang, and C.H Chang, Computation of internal flow with free surface using artificial compressibility, *Numer. Heat Transfer B* 33 (1998), 119–134.
- [7] R. Fattal and R. Kupferman, Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 126 (2005), 23–37.
- [8] R. J. Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, New York, 2002.

- [9] V.G. Ferreira, M.F. Tomé, A.F. Castelo, J.A. Cuminato, N. Mangiavacchi, and S. McKee, High order upwinding and the hydraulic jump, *International Journal of Numerical Methods in Fluid* 39 (2002), 549–583.
- [10] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoeffler, *Numerical simulation in fluid dynamics: A practical introduction*, Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, 1998.
- [11] J. Hao and T. W. Pan, Simulation for high Weissenberg number: viscoelastic flow by a finite element method, *Applied Mathematics Letters* 20 (2007), 988–933.
- [12] F.H. Harlow and J.E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Physics of Fluids* 8 (1965), 2182–2189.
- [13] C. W. Hirt, Heuristic stability theory for finite-difference equations, *Journal of Computational Physics* 2 (1968), 339–355.
- [14] D. Loghin, Fast solvers for evss formulations of viscoelastic flows, *Proceedings on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problems, Romania* (2006), 135–146.
- [15] M. L. Mansour and A Hamed, Implicit solution of the incompressible navier-stokes equations on a non-staggered grid, *Journal of Computational Physics* 86 (1990), 147–167.
- [16] F.P. Martins, Desenvolvimento de um método numérico implícito para a simulação numérica de escoamentos viscoelásticos com superfícies livre, *Masters thesis, Universidade de São Paulo, Brasil*, 2009.
- [17] C. L. Menezes and M Meneguetto, Estudo da estabilidade de métodos numéricos semi-implícito para as equações de Navier-Stokes, *Proceedings of CNMAC2010* (2010).
- [18] C. Oishi, , J.A. Cuminato, J.Y. Yuan, and S. McKee, Stability of numerical schemes on staggered grids, *Numerical Linear Algebra with Applications* 15(10) (2008), 945–967.
- [19] C. M. Oishi, , M.F. Tomé, J.A. Cuminato, and S. McKee, An implicit technique for solving 3d low Reynolds number moving free surface flows, *J. Comp. Physics* 227 (2008), 7446–7468.

- [20] C. M. Oishi, F.P. Martins, M.F. Tomé, J.A. Cuminato, and S. McKee, Numerical solution of the extended pom-pom model for viscoelastic free surface flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 166 (2011), 165–179.
- [21] C. M. Oishi, Análise e implementação de métodos implícitos no sistema freeflow2d, Masters thesis, Universidade de São Paulo, Brasil, 2004.
- [22] C. M. Oishi, Análise e implementação de métodos implícitos e de projeção para escoamentos com superfície livre, Ph.D. Thesis, Universidade de São Paulo, Brasil, 2008.
- [23] N. A. Petersson, Stability of pressure boundary conditions for Stokes and Navier-Stokes equations, *Journal of Computational Physics* 172 (2001), 40–70.
- [24] R. A. B. Queiroz; V. Garcia, Development and testing of high resolution upwind schemes: upwind schemes for incompressible free surface flows VDMVerlag Dr. Muller, 2010.
- [25] D. Rajagopalan, R.C. Armstrong, and R.A. Brown, Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a newtonian viscosity, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 36 (1990), 159–192.
- [26] P. J. Roache, *Fundamental of computational fluid dynamics*, Albuquerque, Hermosa Publishers, 1998.
- [27] TWH Sheu, S. KWang, and R. K. Lin, An implicit schemes for solving the convection-diffusion-reaction equation in two dimension, *Journal of Computational Physics* 164 (2000), 123–142.
- [28] M. F. Tomé and S. McKee, Gensmac: A computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains, *Journal of Computational Physics* 110 (1994), 171–186.
- [29] P. Wesseling, *Principles of computational fluid dynamics*, vol. 1, Springer Serie in Computational Mathematics, 2000.