

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Leis de Conservação Hiperbólicas 2D com Termo Fonte Stiff

Camila Gonçalves Costa

Orientador: Prof. Dr. Messias Meneguette Júnior

Presidente Prudente, Março de 2013

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Leis de Conservação Hiperbólicas 2D com Termo Fonte Stiff

Camila Gonçalves Costa

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 para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, Março de 2013

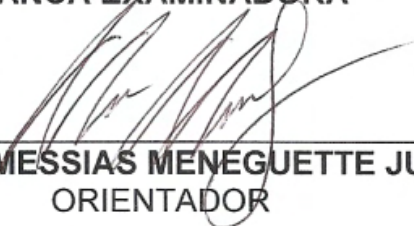
FICHA CATALOGRÁFICA

Costa, Camila Gonçalves.
C871L Leis de Conservação Hiperbólicas 2D com Termo Fonte Stiff / Camila
Gonçalves Costa. - Presidente Prudente : [s.n], 2013
xii, 76 f. : il.

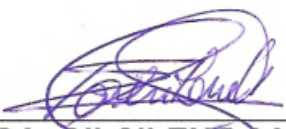
Orientador: Messias Meneguette Júnior
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de
Ciências e Tecnologia
Inclui bibliografia

1. Termos Fonte. 2. Stiff. 3. Weissenberg. 4. Computação – Matemática.
I. Meneguette Júnior, Messias. II. Universidade Estadual Paulista. Faculdade
de Ciências e Tecnologia. III. Título.

BANCA EXAMINADORA



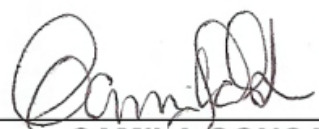
PROF. DR. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR
ORIENTADOR



PROFA. DRA. GILCILENE SANCHEZ DE PAULO
FCT/UNESP



PROF. DR. ERWIN DOESCHER
UNIFESP- SÃO JOSÉ DOS CAMPOS



CAMILA GONÇALVES COSTA

PRESIDENTE PRUDENTE (SP), 15 DE MARÇO DE 2013.

RESULTADO: aprovado

*Aos meus pais
Luiz e Valdenice.*

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, o provedor da vida e de tudo o que foi necessário para eu chegar até aqui. São poucas as palavras para expressar a gratidão ao imenso amor que Ele demonstrou por mim em cada momento, principalmente os de dificuldade e desânimo.

Aos meus pais, Luiz e Valdenice, que sempre me apoiaram em toda minha vida acadêmica.

Ao meu amor e amigo Wesley Eduardo por todo o apoio, atenção e paciência nesses difíceis anos. Obrigada por ser meu maior motivador, pelas palavras de consolo e pelas muitas orações.

Ao meu orientador Dr. Messias Meneguette Júnior, que sempre esteve me ajudando nas pesquisas e discussões, e sempre preocupado em me atender.

Aos professores Dra. Gilcilene Sanchez, Dr. Cássio Oishi, Dra. Vanessa Avansini e Ms. Fernando Pacanelli pelas várias dicas e suportes durante esse dois anos e também aos outros professores que ministraram as aulas na Pós.

Aos amigos que comigo formaram a segunda turma da PósMAC: Larissa, Lívia, Patrícia, Clóvis, Reginaldo, Pedro, Cristiane, Tatiane, Juliano, Fábio e Carlos por todos os ensinamentos e amizade.

Aos amigos de outras turmas da PósMac: Rafael, Luciene, Marilaine, Marluce, Marluci, Vanderléa e Diego, inclusive da Pós COMP: Lílian, Fernanda e Álvaro pelo companheirismo e amizade. Também agradeço à Juliana do ICMC da USP de São Carlos pela paciência em transmitir seus conhecimentos sobre o Clawpack.

Aos professores da banca de defesa Dra. Gilcilene Sanches e Dr. Erwin Doescher pelas correções e importantes sugestões para a finalização deste trabalho.

Aos funcionários da seção de Pós-Graduação, principalmente a Erynat, a Cinthia e o André, pela disposição e boa vontade.

À CAPES pelos primeiros 5 meses de apoio financeiro.

À FAPESP pelos 19 meses de 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.

*“A sabedoria deste mundo é loucura diante de Deus;
porquanto está escrito: Ele apanha os sábios na própria astúcia deles.”*

I Coríntios 3:19

Resumo

As equações diferenciais parciais hiperbólicas tem recebido uma atenção especial nos últimos anos devido sua grande aplicabilidade em diversas áreas da ciência e pelas dificuldades numéricas que elas impõem.

O presente projeto leva em conta a importância do termo fonte e as implicações que isto representa na solução numérica das equações hiperbólicas, em especial nas leis de conservação. Todo o trabalho é focado no caso bidimensional das leis de conservação hiperbólicas, considerando termos fonte *stiff*. Este tipo de termo fonte impõe diferença de escala de propagação das ondas e das escalas advindas do próprio termo fonte.

A equação hiperbólica com termo fonte deve ser tratada de forma especial. Utilizando os métodos mais recomendados na prática, resolvemos tal equação separando-a em duas ou mais partes, e depois acoplamos as partes na solução final. Os métodos utilizados em cada parte separada tem grande influência na solução final, principalmente quando tratamos de termos fonte *stiff*.

Infelizmente, algumas das equações do tipo aqui estudado não possuem uma solução analítica que possamos comparar, principalmente quando tratamos do caso bidimensional. A alternativa que tivemos foi comparar algumas das soluções numéricas com outras soluções em malhas refinadas, com soluções produzidas por métodos diferentes e com o caso unidimensional, quando a solução deste está disponível de alguma forma, como no caso do problema do alto número de Weissenberg aqui estudado para um caso particular.

Palavras-Chave: Termo Fonte. *Stiff*. Weissenberg.

Abstract

Title: 2D Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Font Term

The hyperbolic partial differential equations has had special attention in recent years due to their wide application in various areas of science and the numerical difficulties they impose.

This project takes into account the importance of the font term and the implications this represents in the numerical solution of hyperbolic equations, especially in conservation laws. All work is focused on the case of two-dimensional hyperbolic conservation laws, considering the font terms stiff. This type of font term imposes difference in scale propagation of waves and those scales that comes from the font term.

The hyperbolic equation with font term should be treated in a special way. Using the methods recommended in practice, we solve this equation by separating it into two or more parts, and then put the parties together in the final solution. The methods used in each separate part has a great influence on the final solution, especially when dealing with font terms stiff.

Unfortunately, some of the equations of the type studied here do not have an analytical solution that can be compared, especially when dealing with the two-dimensional case. The alternative we had was to compare numerical solutions with some of the other solutions for refined meshes, with solutions produced by different methods and for the one-dimensional case, when this solution is available in any way, as in the problem of high Weissenberg numbers here studied for a particular case.

Keywords: Font Term. Stiff. Weissenberg.

Lista de Figuras

2.1	Domínio Ω subdividido em dois conjuntos, Ω_R e Ω_L , abertos e separados pelo choque C	7
2.2	Malha computacional em duas dimensões, em que $u_{i,j}$ representa a célula média.	12
2.3	Possíveis configurações de uma onda de choque.	13
2.4	Direção das Ondas.	16
2.5	Região hachurada representando a região de Variação Total Decrescente - TVD.	25
2.6	Comparação dos gráficos das funções limitadoras de fluxo.	26
3.1	Solução da equação de advecção linear com termo fonte $\psi = -\epsilon u$	31
3.2	Solução da equação de advecção utilizando o separador de Strang com o coeficiente do termo fonte variável.	37
3.3	Solução da equação de advecção utilizando o separador de Godunov com o coeficiente do termo fonte variável.	38
3.4	Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com o limitador Chakravarthy-Osher na EDP homogênea.	40
3.5	Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com método de Godunov sem entropia fixa na EDP homogênea.	40
3.6	Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com método Lax-Wendroff na EDP homogênea.	41
3.7	Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$, condição inicial delta Perkin e limitador Van Leer na EDP homogênea. . .	41
4.1	Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte na rampa de acesso. Solução produzida no software Clawpack.	46
4.2	Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte na rampa de acesso. Solução produzida no software MATLAB.	46

4.3	Comparação das soluções produzidas pelos dois softwares diferentes: Clawpack e MATLAB.	47
4.4	Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte função delta de força $D = 0.01$ na rampa de acesso.	47
4.5	Solução numérica bidimensional da equação do tráfego não linear - $D = 0.008$	48
4.6	Solução numérica bidimensional da equação do tráfego não linear - $D = 0.012$	49
4.7	Solução bidimensional exata da equação de Burgers com termo fonte não linear.	52
4.8	Comparação da solução de Burgers com termo fonte não linear - Caso <i>stiff</i>	52
4.9	Comparação da solução de Burgers (com termo fonte não linear) com diferentes separadores e métodos para EDO - Caso <i>stiff</i>	53
5.1	Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 1$	61
5.2	Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 10$	61
5.3	Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 100$	62
5.4	Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 1000$	62
5.5	Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP com a solução exata em 1D para diferentes Wi	63
5.6	Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP, levando em conta os métodos para EDO aplicados no termo fonte.	64
5.7	Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP com a solução exata em 1D - refinando a malha.	66

Lista de Tabelas

3.1	Comparação dos erros cometidos utilizando o método Upwind na EDP homogênea com diferentes separadores e integradores da EDO	38
3.2	Comparação dos erros cometidos utilizando o método Lax-Wendroff na EDP homogênea com diferentes separadores e integradores da EDO	39
4.1	Comparação dos erros cometidos pelos diferentes limitadores de fluxo quando refinamos a malha.	50
5.1	Comparação dos erros relativos cometidos utilizando o método de alta resolução com Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte.	64
5.2	Comparação dos erros absolutos cometidos utilizando o método de alta resolução, Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte.	65
5.3	Comparação dos erros absolutos cometidos utilizando o método de alta resolução, Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte – Refinando a malha.	66

Lista de Siglas

BDF: Fórmulas de Diferenciação Regressiva, do inglês Backward Differentiation Formulas.

CTU: Transporte para borda na direção Upwind, do inglês Corner-Transport Upwind.

DCU: Célula doadora Upwind, do inglês Donor-Cell Upwind.

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.

TR-BDF2: Método implícito de dois passos que utiliza o método dos Trapézios e o método BDF.

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

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Contextualização	1
1.2	Motivação	2
1.3	Objetivos	3
2	Leis de Conservação Hiperbólicas Bidimensionais	4
2.1	Introdução	4
2.2	Breve Introdução às Leis de Conservação Escalares	5
2.2.1	Formação de Descontinuidades	5
2.2.2	Problema de Riemann	6
2.2.3	Relação de Rankine-Hugoniot	7
2.2.4	Condição de Entropia	8
2.2.5	Condição CFL	9
2.2.6	CrITÉrio de Von Neumann	10
2.3	Métodos de Volumes Finitos	11
2.3.1	Forma de Diferenciação de Fluxo	11
2.3.2	Forma de Flutuação	14
2.3.3	Método CTU para a Equação de Advecção	16
2.3.4	Termos de Correção de Alta Resolução	18
2.3.5	Leis de Conservação Não Lineares	18
2.3.6	Separador Dimensional	19
2.4	Esquemas de Alta Resolução	20
2.4.1	Variação Total Decrescente - TVD	21
2.4.2	Esquemas com Limitadores de Fluxo	22
3	Equação Hiperbólica 2D Com Termo Fonte	28
3.1	Introdução	28
3.2	Origem dos Termos Fonte	28
3.3	Métodos Não Separadores	29

3.4	Métodos de Passo Fracional	31
3.5	Separador de Godunov	34
3.6	Separador de Strang	35
3.7	Resultados Numéricos	37
4	Termos Fonte stiff	43
4.1	Introdução	43
4.2	Métodos para a EDO stiff	44
4.3	Fluxo de Tráfego com Rampas de Acesso ou Saída	45
4.3.1	Resultados Numéricos no Caso Bidimensional	48
4.4	Equação de Burgers Stiff	50
4.5	Dificuldades Numéricas	54
5	Problema do Alto Número de Weissenberg	56
5.1	Introdução	56
5.2	O Modelo “Toy”	57
5.3	Representação por Conformação Logarítmica - LCR	58
5.4	Resultados Numéricos	60
6	Considerações Finais	67
	Referências	69
	APÊNDICE	72
A	O Software Clawpack	72
A.1	Introdução	72
A.2	Instalação	72
A.3	Utilizando o Clawpack	74
A.4	Alterando os parâmetros	76

Introdução

1.1 Contextualização

As equações diferenciais parciais (EDP's) hiperbólicas surgem principalmente quando estamos interessados no movimento de ondas ou no transporte advectivo de substâncias, como na área da dinâmica dos gases, da acústica, da biomecânica, entre outros. O avanço dos estudos das equações hiperbólicas mais simples, como a equação de advecção e a equação de Burgers, é muito importante no desenvolvimento de métodos numéricos devido a existência das soluções analíticas para comparação. As equações não lineares, como a equação de Burgers, introduzem dificuldades numéricas devido à possível formação de choques e rarefações, e motivam o desenvolvimento de técnicas cada vez mais robustas.

As leis de conservação hiperbólicas fazem parte de uma classe das EDP's hiperbólicas. A adição de termos fonte nesse tipo de equação significa principalmente a perda ou o ganho de determinada quantidade. Um olhar ingênuo para os dois tipos de equações, com e sem termo fonte, poderia induzir que tais equações são extremamente semelhantes e que, portanto, todo método numérico desenvolvido para a primeira delas seria facilmente aplicado à segunda. Na verdade, isto nem sempre é válido.

Quando tratamos de termos fonte *stiff*¹ estamos introduzindo ou retirando uma certa quantidade de forma brusca da equação. Esse tipo de termo fonte só aumenta as dificuldades numéricas das equações hiperbólicas, podendo acarretar em velocidades incorretas das ondas, de acordo com a referência [16].

O autor LeVeque, em [16], apresenta toda a teoria necessária para o estudo numérico de problemas hiperbólicos com termos fonte *stiff* no caso unidimensional. Nós estendemos

¹Utilizamos o termo em inglês por assim ser usado na literatura.

esta teoria para o caso bidimensional com o auxílio de outros autores, como Thomas [23], Toro [24], Zheng [25] e o próprio LeVeque [17], com apoio em [15].

O problema do alto número de Weissenberg (HWNP) tem relação ao problema hiperbólico com termo fonte *stiff*, visto que a equação simplificada usada como molde do HWNP consiste em uma equação de advecção com um termo fonte que, dependendo do número de Weissenberg, pode ser *stiff*.

Os trabalhos apresentados por Afonso, Pinho e Alves em [1], Bielça em [4], Fattal e Kupferman em [7], Hao e Pan em [11] e ainda por Hulsen, Fattal e Kupferman em [12], desenvolvem os conceitos desse problema também em uma dimensão. Na literatura há pouco desenvolvimento no caso em duas dimensões, e mesmo assim conseguimos bons resultados numéricos ao compararmos as soluções com outras soluções produzidas em malhas refinadas, com soluções produzidas por diferentes métodos, e os perfis diagonais das soluções com os resultados para uma dimensão.

Quando estendemos todos estes conceitos para o caso bidimensional encontramos dificuldades inerentes a este tipo de estudo, pois na literatura a pesquisa sobre esses detalhes está apenas em seu início.

Nosso objetivo não é parabolizar a equação diferencial hiperbólica bidimensional, pois não queremos suavizar as soluções, mas estudar as discontinuidades inerentes a ela, bem como as dificuldades impostas pela adição do termo fonte.

1.2 Motivação

Áreas como a Mecânica dos Fluidos Computacional estão embasadas na concepção de técnicas precisas, eficientes e estáveis de solução das equações hiperbólicas tendo em vista alguma aplicação específica envolvendo a dinâmica de fluidos. Isto, via de regra, exige a solução das equações de Navier-Stokes ou alguma variação ou caso particular das mesmas (ver referências [5] e [20]).

As equações de Navier-Stokes constituem um sistema de equações parciais de natureza mista, altamente não-linear e de elevada complexidade do ponto de vista teórico, numérico e computacional, no qual todo esquema numérico, previamente desenvolvido para uma equação análoga de natureza mais simples, é posto a prova.

Visto que este projeto é de mestrado e que estamos no início do desenvolvimento desta linha de pesquisa, não consideramos estas equações diretamente. No entanto, debruçamos sobre alguns aspectos, contemplando fatores característicos e importantes dessas equações que podem ser tratados em equações mais simples do ponto de vista numérico. São eles:

- o tratamento dispensado aos termos de natureza convectiva e de caráter não-linear.

- o tratamento numérico dispensado quando incluímos termos fontes nas equações de Navier-Stokes, o que comumente ocorre na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Em um contexto mais amplo, a mesma situação das equações hiperbólicas com termo fonte surge quando as equações de Navier-Stokes são acopladas a um modelo viscoelástico, que além de inserir uma equação a mais no sistema, introduz um termo fonte à equação de conservação do momento, conforme em [20].

Estudaremos esses aspectos através de um modelo mais simples, dado por uma equação de advecção com termo fonte, que serve como molde para o HWNP.

1.3 Objetivos

Esta monografia tem como objetivo geral apresentar resultados relacionados às leis de conservação hiperbólicas bidimensionais com termos fonte *stiff*, como métodos e dificuldades numéricas.

O objetivo final é estudar e implementar a solução numérica do caso particular do HWNP, bem como de outras equações caracterizadas pelo comportamento *stiff*, com métodos de alta resolução e comparar com o método LCR.

Para expor a proposta de trabalho, esta monografia encontra-se organizada em cinco capítulos descritos abaixo.

No capítulo 2 apresentamos os conceitos básicos referentes às leis de conservação hiperbólicas bidimensionais e os métodos de volumes finitos e de alta resolução, a fim de que possam ser utilizados no restante deste trabalho.

No capítulo 3 introduzimos a ideia de termo fonte, como ele surge em um modelo matemático, métodos inerentes às equações com termo fonte e apresentamos resultados obtidos no software MATLAB.

No capítulo 4 abordamos métodos numéricos para as equações com termos fonte *stiff* e discutimos exemplos inseridos nesta classe de equações.

No capítulo 5 apresentamos a teoria sobre o HWNP e seu problema modelo, e discutimos algumas soluções.

No capítulo 6 fazemos algumas considerações finais sobre este trabalho.

Leis de Conservação Hiperbólicas Bidimensionais

2.1 Introdução

Com o intuito de adquirir bagagem para estudar as leis de conservação hiperbólicas bidimensionais com termos fonte *stiff*, começamos este trabalho abordando a equação diferencial parcial sem o termo fonte:

$$u_t(x, y, t) + [f(u(x, y, t))]_x + [g(u(x, y, t))]_y = 0. \quad (2.1)$$

A equação acima é hiperbólica. Ela está relacionada a problemas de vibração ou de convecção, e envolve a variação temporal das grandezas físicas, isto é, se trata de um problema transiente, ou de propagação. De acordo com Fortuna em [8], neste tipo de equação os fenômenos dissipativos são mínimos ou podem ser desprezados.

Dizemos que a equação (2.1) está na forma diferencial de conservação, por isso é chamada de lei de conservação hiperbólica.

Felizmente para nós pesquisadores, a teoria dos esquemas de diferenças para leis de conservação bidimensionais hiperbólicas é bem menos explorada do que a teoria para esse tipo de equação em uma dimensão.

Neste capítulo abordaremos conceitos e métodos numéricos referentes somente às equações sem o termo fonte (homogênea), pois posteriormente utilizaremos esses conceitos e métodos para resolver as equações com termos fonte.

2.2 Breve Introdução às Leis de Conservação Escalares

Introduzimos aqui alguns conceitos necessários para um melhor entendimento das leis de conservação hiperbólicas considerando a equação escalar na forma (2.1), em que assumimos que f'' e g'' são positivas. As principais referências utilizadas para o estudo da teoria neste capítulo foram Cuminato e Meneguette [5], Guckenheimer [10], Laney [13], Lindquist [18], Zheng [25] e Zheng e Zhang [26].

2.2.1 Formação de Descontinuidades

Fazendo a mudança de variáveis

$$\xi = \frac{x}{t} \quad \text{e} \quad \eta = \frac{y}{t}, \quad (2.2)$$

a equação

$$u_t + [f(u)]_x + [g(u)]_y = 0 \quad (2.3)$$

tem a forma chamada auto-similar:

$$-\xi u_\xi - \eta u_\eta + [f(u)]_\xi + [g(u)]_\eta = 0. \quad (2.4)$$

Supondo que u é de classe C^1 (diferenciável com primeira derivada contínua), podemos escrever a equação acima da seguinte forma

$$(f'(u) - \xi)u_\xi + (g'(u) - \eta)u_\eta = 0,$$

cuja forma característica é dada por

$$\frac{d\eta(\xi)}{d\xi} = \frac{g'(u) - \eta}{f'(u) - \xi} \quad (2.5)$$

e

$$\frac{du(\xi, \eta(\xi))}{d\xi} = 0. \quad (2.6)$$

Aqui consideramos $f'(u) = [f(u)]_u$ e $g'(u) = [g(u)]_u$.

De (2.5) e (2.6), temos que as **curvas características** são definidas por

$$\frac{\eta - g'(u)}{\xi - f'(u)} = \text{const.}, \quad u = \text{const.} \quad (2.7)$$

Observação 2.1. *As curvas características são linhas retas que tem origem no ponto $(f'(u), g'(u))$, ao longo da qual a solução u é constante.*

Quando duas ou mais características se interceptam, a solução no ponto de interseção poderá ter mais de um valor. Se isto acontecer, dizemos que há a formação de uma descontinuidade, chamada **choque**.

2.2.2 Problema de Riemann

O problema de Riemann consiste de um PVI (problema de valor inicial) especial que aborda a equação (2.3) e uma condição inicial dada por uma função constante por partes:

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) = \begin{cases} u_1 & \text{se } x \geq 0 \text{ e } y \geq 0 \\ u_2 & \text{se } x < 0 \text{ e } y > 0 \\ u_3 & \text{se } x < 0 \text{ e } y < 0 \\ u_4 & \text{se } x > 0 \text{ e } y < 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

em que u_1 , u_2 , u_3 e u_4 são constantes.

Nesta seção consideramos um tipo particular do problema de Riemann, onde tomamos:

$$u_L = u_2 = u_3 = u_4 \quad \text{e} \quad u_R = u_1. \quad (2.9)$$

com u_L e u_R os respectivos valores antes e depois da descontinuidade nas semi-retas $x \geq 0, y = 0$ e $y \geq 0, x = 0$, isto é, nosso problema de Riemann se resume em

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) = \begin{cases} u_R & \text{se } x, y \geq 0, \\ u_L & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.10)$$

Podemos ainda considerar mais valores na condição inicial, e para isto, com relação à teoria apresentada nesta seção, precisamos considerar separadamente os casos.

Consideremos o problema de Riemann consistindo da equação linear de advecção

$$u_t + au_x + bu_y = 0, \quad (2.11)$$

com a e b constantes, juntamente com a condição inicial

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) = \begin{cases} u_R & \text{se } x, y \geq 0 \\ u_L & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.12)$$

A descontinuidade inicial nas semirretas $x = 0, y \geq 0$ e $y = 0, x \geq 0$ propaga-se para o interior do domínio $x, y \geq 0$ a uma velocidade a na direção x e b na direção y e no tempo

t . A solução deste problema é dada então por

$$u(x, y, t) = u_0(x - at, y - bt) = \begin{cases} u_R & \text{se } x - at, y - bt \geq 0 \\ u_L & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.13)$$

Não é o caso do problema acima, mas a solução do problema de Riemann pode ter um número infinito de choques. As regiões entre os choques são chamadas de **ondas de rarefação** (conforme Guckenheimer em [10]), elas são a união das curvas características (para mais detalhes ver referência [18]).

2.2.3 Relação de Rankine-Hugoniot

Seja Ω um conjunto aberto, domínio da função escalar $u = u(x, y, t)$. Supomos que existe uma superfície de choque $C \subset \Omega$ suave bidimensional que separa Ω em dois conjuntos abertos Ω_R e Ω_L , como podemos ver na figura 2.1.

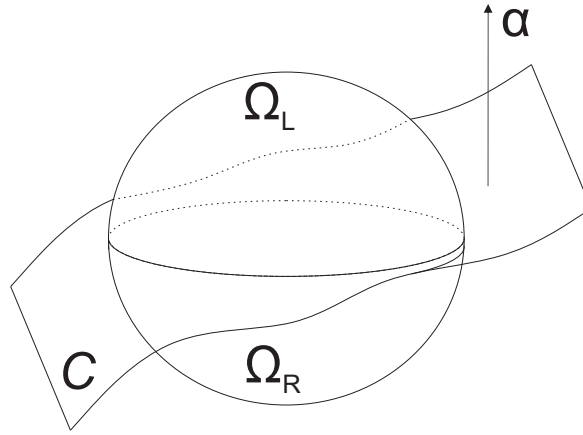


Figura 2.1: Domínio Ω subdividido em dois conjuntos, Ω_R e Ω_L , abertos e separados pelo choque C .

Aqui a superfície C representa o choque ou descontinuidade bidimensional, e os valores u_L e u_R estão definidos na fronteira C comum aos conjuntos Ω_R e Ω_L respectivamente. Seja α o vetor normal da superfície C , o conjunto de descontinuidade que separa os conjuntos Ω_R e Ω_L . Então, para nossa equação escalar homogênea (2.3), a **relação de Rankine-Hugoniot** ou **condição de salto** é dada por

$$\alpha \cdot \left(u_R - u_L, f(u_R) - f(u_L), g(u_R) - g(u_L) \right) = 0, \quad (2.14)$$

onde α é a normal com a superfície de descontinuidade C no espaço físico (x, y, t) .

Fazendo a mudança de variáveis $\xi = \frac{x}{t}$ e $\eta = \frac{y}{t}$ como em (2.2), a forma auto-similar da solução admite a superfície de descontinuidade especificada pela curva

$$S(\xi, \eta) = 0 \quad \text{no plano} \quad (\xi, \eta).$$

Tomando o gradiente de $S(x/t, y/t)$ em (x, y, t) , o vetor normal é dado por

$$\alpha = (S_x, S_y, S_t) = t^{-1}(S_\xi, S_\eta, -\xi S_\xi - \eta S_\eta). \quad (2.15)$$

Usando esta normal, podemos escrever a relação de Rankine-Hugoniot da seguinte forma:

$$S_\xi([f] - \xi[u]) + S_\eta([g] - \eta[u]) = 0, \quad (2.16)$$

em que $[u] = u_L - u_R$, etc. Derivando $S(\xi, \eta) = 0$ no plano (ξ, η) , temos que a relação de Rankine-Hugoniot pode ainda ser escrita na forma

$$\frac{d\eta}{d\xi} = \frac{[g] - \eta[u]}{[f] - \xi[u]}. \quad (2.17)$$

2.2.4 Condição de Entropia

Quando, devido à propagação de descontinuidades, não há regularidade na solução u , precisamos entendê-la não somente no seu sentido global que envolve as derivadas, mas no sentido local e mais fraco. A uma solução no sentido global chamamos de **solução clássica**, e essa solução satisfaz a equação diferencial em todo o domínio regularmente. A uma solução no sentido local e mais fraco chamamos de **solução fraca**, que também é regular, porém, por partes. Por exemplo, a solução (2.13) é uma solução fraca para o problema (2.11)-(2.12).

Soluções fracas para problemas de valor inicial podem não ser únicas, elas podem conter descontinuidades que são propagadas da descontinuidade da condição inicial ou derivadas da interseção das características.

Como nosso objetivo é calcular numericamente as soluções das leis de conservação, precisamos escolher qual é a solução “correta”, no caso em que as soluções não são únicas. Essa escolha é feita utilizando a condição de entropia, ou seja, escolhemos a solução entrópica do problema como solução correta.

Tomando o vetor normal

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = t^{-1}(S_\xi, S_\eta, -\xi S_\xi - \eta S_\eta),$$

e um ponto v da curva $S(\xi, \eta) = 0$, definimos a função $H : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$H(v) = \alpha_1 f(v) + \alpha_2 g(v). \quad (2.18)$$

A **condição de entropia** então é satisfeita se

$$\frac{H(u) - H(u_L)}{u - u_L} \geq \alpha_1 \xi + \alpha_2 \eta, \quad \forall u \in (u_L, u_R). \quad (2.19)$$

Substituindo o lado direito da desigualdade acima pela relação de Rankine-Hugoniot, escrevemos a condição de entropia na forma:

$$\frac{H(u) - H(u_L)}{u - u_L} \geq \frac{H(u_R) - H(u_L)}{u_R - u_L}. \quad (2.20)$$

2.2.5 Condição CFL

A condição de Courant - Friedrichs - Lewy (CFL) é uma condição indispensável para a convergência e estabilidade do método numérico, e estabelece um critério mínimo e simples que o método deve satisfazer. Esta condição é uma medida grosseira de estabilidade e convergência, porém, é sempre fácil de calcular e serve como um excelente limite superior para a condição de estabilidade. Levando em conta a equação (2.11), vamos considerar três esquemas de diferenças:

$$u_{i,j}^{n+1} = a_1 u_{i-1,j}^n + a_2 u_{i,j-1}^n + a_3 u_{i,j}^n + a_4 u_{i+1,j}^n + a_5 u_{i,j+1}^n, \quad (2.21)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = a_3 u_{i,j}^n + a_4 u_{i+1,j}^n + a_5 u_{i,j+1}^n, \quad (2.22)$$

e

$$u_{i,j}^{n+1} = a_1 u_{i-1,j}^n + a_2 u_{i,j-1}^n + a_3 u_{i,j}^n, \quad (2.23)$$

em que a_1, a_2, a_3, a_4 e a_5 são constantes.

Também consideramos $r_x = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$ e $r_y = \frac{b\Delta t}{\Delta y}$ fixos. O domínio de dependência da solução numérica de um esquema de diferenças finitas no ponto $(i\Delta x, j\Delta y, (n+1)\Delta t)$ é definido como o menor retângulo em \mathbb{R}^2 que contém todos os pontos no qual a solução desse esquema depende de Δt , Δx e Δy próximos de zero. Considerando os esquemas (2.21), (2.22) e (2.23), os domínios de dependência da solução numérica são respectivamente

$$[(i-n-1)\Delta x, (i+n+1)\Delta x] \times [(j-n-1)\Delta y, (j+n+1)\Delta y], \quad (2.24)$$

$$[i\Delta x, (i+n+1)\Delta x] \times [j\Delta y, (j+n+1)\Delta y], \quad (2.25)$$

e

$$[(i - n - 1)\Delta x, i\Delta x] \times [(j - n - 1)\Delta y, j\Delta y]. \quad (2.26)$$

Para uma dada EDP associada com um esquema de diferenças finitas, a condição CFL é satisfeita se o domínio de dependência da solução exata estiver contida no domínio de dependência da solução numérica. O domínio de dependência da solução exata do ponto (x, y, t) para a equação (2.11) é $(x_0, y_0) = (x - at, y - bt)$. Se considerarmos o ponto $(x, y, t) = (i\Delta x, j\Delta y, (n + 1)\Delta t)$, temos:

$$\begin{aligned} x_0 &= x - at = i\Delta x - a(n + 1)\Delta t = (i - r_x(n + 1))\Delta x, \\ y_0 &= y - bt = j\Delta y - b(n + 1)\Delta t = (j - r_y(n + 1))\Delta y. \end{aligned}$$

Vamos considerar o esquema (2.21), e os demais serão análogos. Observe que para

$$x_0 \in [(i - n - 1)\Delta x, (i + n + 1)\Delta x],$$

e

$$y_0 \in [(j - n - 1)\Delta y, (j + n + 1)\Delta y],$$

devemos ter

$$(i - n - 1)\Delta x \leq (i - r_x(n + 1))\Delta x \leq (i + n + 1)\Delta x,$$

e

$$(j - n - 1)\Delta y \leq (j - r_y(n + 1))\Delta y \leq (j + n + 1)\Delta y.$$

Efetuada algumas operações básicas chegamos que o esquema (2.21) satisfaz a condição CFL se:

$$|r_x| \leq 1 \quad \text{e} \quad |r_y| \leq 1.$$

Procedendo de forma análoga, os esquemas (2.22) e (2.23) satisfazem a condição CFL se

$$-1 \leq r_x \leq 0 \quad \text{e} \quad -1 \leq r_y \leq 0$$

e

$$0 \leq r_x \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq r_y \leq 1,$$

respectivamente.

2.2.6 Critério de Von Neumann

O critério de Von Neumann nos fornece uma condição necessária para a estabilidade de equações lineares. Esse critério estuda a propagação do erro global na solução no

transcorrer dos passos temporais através de um harmônico genérico que tem a forma

$$e^{\lambda n \Delta t} e^{I \beta i \Delta x} e^{I \alpha j \Delta y}, \quad (2.27)$$

em que $I = \sqrt{-1}$.

Para analisarmos a aplicação desse critério precisamos admitir que a equação a diferenças tem a solução na forma

$$u_{i,j}^n = e^{\lambda n} e^{I \beta i} e^{I \alpha j}.$$

Assim, encontrando uma expressão para o fator de amplificação e^λ , devemos impor que $|e^\lambda| \leq 1$, garantindo que $u_{i,j}^n$ não oscile com amplitudes crescentes quando avançamos no tempo.

2.3 Métodos de Volumes Finitos

Os métodos de volumes finitos são baseados na forma integral das leis de conservação. Para a construção desses métodos precisamos subdividir cada domínio espacial (x e y) em intervalos – onde estaremos construindo a malha computacional – e fazer as aproximações das integrais nesses intervalos, chamados células. Em cada passo de tempo atualizamos esses valores usando aproximações dos fluxos através dos pontos extremos das células, que caracterizam as faces.

Assim, deixamos de trabalhar com a equação original e passamos a trabalhar com aproximações, e o domínio bidimensional passa a ser um conjunto discreto de pontos. A equação agora é avaliada no ponto $(x_i, y_j, t_n) = (i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t) = (i, j, n)$ da malha, em que Δx e Δy são os espaçamentos em cada direção espacial e Δt o tamanho do passo temporal. Por simplicidade consideramos a malha cartesiana uniforme, ilustrada pela figura 2.2 (com fonte na referência [16]) abaixo, porém isto não é uma exigência.

O valor da solução numérica $u_{i,j}^n$ representa a célula média sobre a célula (i, j) no tempo t_n , isto é

$$u_{i,j}^n \approx \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, y, t_n) dx dy. \quad (2.28)$$

Utilizamos a forma integral para calcular como esta célula média varia com o tempo. A célula $u_{i,j}^n$ representa uma aproximação do valor de $u(x_i, y_j, t_n)$ no ponto (x_i, y_j) .

2.3.1 Forma de Diferenciação de Fluxo

Consideramos aqui a lei de conservação (2.1) e o domínio espacial Ω retangular. O fluxo é dado por $f(u)$ ao longo das bordas esquerda e direita e por $g(u)$ ao longo do topo

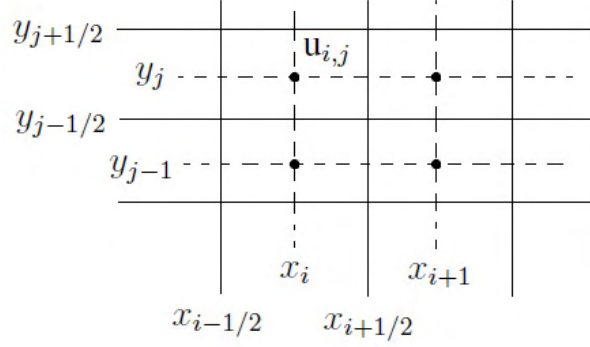


Figura 2.2: Malha computacional em duas dimensões, em que $u_{i,j}$ representa a célula média.

e da base das células. Integrando a equação (2.1) nas bordas, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, y, t) dx dy &= \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} f(u(x_{i+1/2}, y, t)) dy - \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} f(u(x_{i-1/2}, y, t)) dy \\ &+ \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} g(u(x, y_{j+1/2}, t)) dx - \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} g(u(x, y_{j-1/2}, t)) dx. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Integrando esta última expressão de t_n a t_{n+1} e dividindo pela área $\Delta x \Delta y$ da célula, obtemos um método com fluxo totalmente discreto na forma

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [f_{i+1/2,j}^n - f_{i-1/2,j}^n] - \frac{\Delta t}{\Delta y} [g_{i,j+1/2}^n - g_{i,j-1/2}^n], \quad (2.30)$$

em que

$$\begin{aligned} f_{i-1/2,j}^n &\approx \frac{1}{\Delta t \Delta y} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} f(u(x_{i-1/2}, y, t)) dy dt \\ g_{i,j-1/2}^n &\approx \frac{1}{\Delta t \Delta x} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} g(u(x, y_{j-1/2}, t)) dx dt. \end{aligned}$$

Para a equação de advecção linear, em que $f(u) = au$ e $g(u) = bu$, fazemos esta aproximação utilizando séries de Taylor em torno de $u(x, y, t + \Delta t)$ e obtemos os fluxos

$$\begin{aligned} f_{i-1/2,j}^n &\approx au - \frac{\Delta t}{2} a^2 u_x - \frac{\Delta t}{2} ab u_y, \quad u = u(x_{i-1/2}, y_j, t_n) \\ g_{i,j-1/2}^n &\approx bu - \frac{\Delta t}{2} b^2 u_y - \frac{\Delta t}{2} ab u_x, \quad u = u(x_i, y_{j-1/2}, t_n). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Método de Godunov

O método de Godunov é a forma de diferenciação de fluxo mais simples possível. A ideia central do método é interpretar a solução discretizada no nível de tempo $t = t_n$ definindo uma função constante por partes u^\downarrow em cada célula. O valor de u^\downarrow é calculado nas faces e depende da direção do choque ou da rarefação, por exemplo na direção x :

- | | |
|--|--|
| (1) Choque para a esquerda: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{i,j}^n$ | (4) Rarefação para a esquerda: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{i,j}^n$ |
| (2) Choque estacionário: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{i-1,j}^n$ ou $u_{i,j}^n$ | (5) Rarefação transônica: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{s,j}^n$ |
| (3) Choque para a direita: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{i-1,j}^n$ | (6) Rarefação para a direita: $u_{i-1/2,j}^\downarrow = u_{i-1,j}^n$ |

Aqui $u_{s,j}^n$ é o único valor de u tal que $f'(u_{s,j}^n) = 0$, e de forma análoga construímos as configurações das ondas de choque na direção espacial y . Ver figura 2.3 abaixo, com fonte na referência [21].

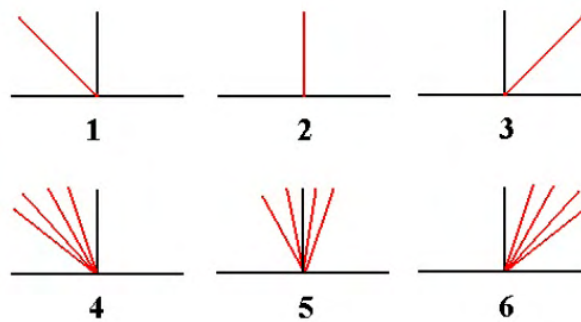


Figura 2.3: Possíveis configurações de uma onda de choque.

Assim, para o método de Godunov temos

$$\begin{aligned} f_{i-1/2,j} &= f(u_{i-1/2,j}^\downarrow) \\ g_{i,j-1/2} &= g(u_{i,j-1/2}^\downarrow). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Definição 2.1. Definimos α^\pm da seguinte forma

$$\alpha^+ = \max(\alpha, 0), \quad \alpha^- = \min(\alpha, 0), \quad (2.33)$$

com $\alpha \in \mathbb{R}$.

Para a equação de advecção linear, por exemplo, os fluxos para o método de Godunov tem a forma

$$\begin{aligned} f_{i-1/2,j} &= a^+ u_{i-1,j} + a^- u_{i,j}, \\ g_{i,j-1/2} &= b^+ u_{i,j-1} + b^- u_{i,j}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Método Upwind

O método Upwind é o método mais simples para a equação de advecção, e os seus fluxos para a equação de advecção linear tem a forma

$$\begin{aligned} f_{i+1/2,j} &= a^+ u_{i,j} + a^- u_{i+1,j} & e & & f_{i-1/2,j} &= a^+ u_{i-1,j} + a^- u_{i,j}, \\ g_{i+1/2,j} &= a^+ u_{i,j} + a^- u_{i+1,j} & e & & g_{i-1/2,j} &= a^+ u_{i-1,j} + a^- u_{i,j}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Observe que este método é idêntico ao método de Godunov para a equação de advecção linear.

Método de Lax-Wendroff

Para o problema de advecção linear, os fluxos para o método de Lax-Wendroff são dados por

$$\begin{aligned} f_{i-1/2,j}^n &= \frac{1}{2}a(u_{i-1,j} + u_{i,j}) - \frac{r_x}{2}a^2(u_{i,j} - u_{i-1,j}) - \frac{r_x}{8}ab[(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + (u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j}) + \\ & \quad + (u_{i,j} - u_{i,j-1}) + (u_{i-1,j} - u_{i-1,j-1})] \\ g_{i,j-1/2}^n &= \frac{1}{2}b(u_{i,j-1} + u_{i,j}) - \frac{r_y}{2}b^2(u_{i,j} - u_{i,j-1}) - \frac{r_y}{8}ab[(u_{i+1,j} - u_{i,j}) + (u_{i+1,j-1} - u_{i,j-1}) + \\ & \quad + (u_{i,j} - u_{i-1,j}) + (u_{i,j-1} - u_{i-1,j-1})], \end{aligned} \quad (2.36)$$

em que

$$r_x = \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad e \quad r_y = \frac{\Delta t}{\Delta y}. \quad (2.37)$$

2.3.2 Forma de Flutuação

A forma de flutuação nos permite desenvolver métodos de volumes finitos em uma forma mais geral que a forma de diferenciação de fluxo (2.30), podendo fazer uso das equações hiperbólicas na forma não conservativa. Para fazer esta extensão, escrevemos o método da seguinte forma

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j} - r_x(a^+ \Delta u_{i-1/2,j} + a^- \Delta u_{i+1/2,j}) - r_y(b^+ \Delta u_{i,j-1/2} + b^- \Delta u_{i,j+1/2}) \\ & \quad - r_x(\tilde{f}_{i+1/2,j} - \tilde{f}_{i-1/2,j}) - r_y(\tilde{g}_{i,j+1/2} - \tilde{g}_{i,j-1/2}). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Os fluxos \tilde{f} e \tilde{g} serão usados na construção dos termos de correção estudados na próxima seção.

Método de Godunov

No caso linear, as flutuações do método de Godunov são dadas por

$$\begin{aligned} a^\pm \Delta u_{i-1/2,j} &= a^\pm (u_{i,j} - u_{i-1,j}), \\ b^\pm \Delta u_{i,j-1/2} &= b^\pm (u_{i,j} - u_{i,j-1}). \end{aligned} \quad (2.39)$$

No caso não linear de leis de conservação onde os fluxos de Godunov são dados por (2.32), as flutuações deste método são dadas por

$$\begin{aligned} a^+ \Delta u_{i-1/2,j} &= f(u_{i,j}) - f(u_{i-1/2,j}^\downarrow), \\ a^- \Delta u_{i-1/2,j} &= f(u_{i-1/2,j}^\downarrow) - f(u_{i-1,j}), \\ b^+ \Delta u_{i,j-1/2} &= g(u_{i,j}) - g(u_{i,j-1/2}^\downarrow), \\ b^- \Delta u_{i,j-1/2} &= g(u_{i,j-1/2}^\downarrow) - g(u_{i,j-1}). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Em ambos os casos utilizamos $\tilde{f} = \tilde{g} = 0$ na equação (2.38). O valor de u^\downarrow em cada interface depende do sinal da velocidade.

Método Upwind

Na forma de flutuação (2.38), o método Upwind toma $\tilde{f} = \tilde{g} = 0$ e as mesmas flutuações do método de Godunov (2.39). Esse método para a equação de advecção é chamado de método DCU (Célula Doadora Upwind, do inglês Donor-Cell Upwind).

A solução é formada por uma onda que transporta o salto em u entre as duas células vizinhas. Dependendo da orientação dessas duas células, essa onda se propaga horizontalmente com velocidade a ou verticalmente com velocidade b .

Cada fluxo dado por (2.35) se aproxima de u , que flui na direção normal das bordas fazendo com que somente esse fluxo contribua na construção da próxima célula no lado Upwind (célula doadora), como indica a figura 2.4(a) para $a, b > 0$. O valor de $u_{i,j}^{n+1}$ depende somente de três valores, $u_{i,j}^n$, $u_{i-1,j}^n$ e $u_{i,j-1}^n$, e não de $u_{i-1,j-1}^n$. Isto só estaria correto se o fluxo fizesse um ângulo com a malha, como mostra a figura 2.4(b) (a figura 2.4 tem fonte na referência [16]). Podemos ter então problemas de estabilidade com a condição CFL. Pela análise de estabilidade de Von Neumann este método é estável para

$$\left| \frac{a\Delta t}{\Delta x} \right| + \left| \frac{b\Delta t}{\Delta y} \right| \leq 1. \quad (2.41)$$

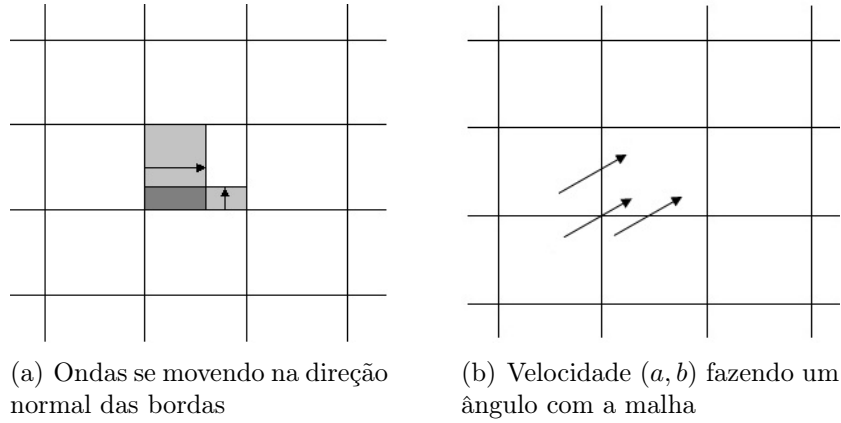


Figura 2.4: Direção das Ondas.

2.3.3 Método CTU para a Equação de Advecção

Podemos construir um método Upwind de primeira ordem com mais precisão para a equação de advecção fazendo uma reconstrução da célula $u_{i,j}^n$. Este é o chamado método CTU (transporte para a borda na direção Upwind, do inglês Corner-Transport Upwind).

Para fazer a reconstrução da célula $u_{i,j}^n$, precisamos definir uma função constante $\tilde{u}^n(x, y, t_n)$ com $u_{i,j}^n$ constante na célula $\mathcal{C}_{i,j}$, construir a equação com esta função no tempo Δt e por fim calcular a média da solução $\tilde{u}^n(x, y, t_{n+1})$. Consideramos $\mathcal{C}_{i,j} = [(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})] \times [(y_{j-1/2}, y_{j+1/2})]$.

Para a equação com coeficientes constantes, temos

$$\tilde{u}^n(x, y, t_{n+1}) = \tilde{u}^n(x - a\Delta t, y - b\Delta t, t_n),$$

que é a mesma função constante \tilde{u} deslocada por $(a\Delta t, b\Delta t)$. A nova célula média $u_{i,j}^{n+1}$ é construída deslocando a região da célula média $\tilde{u}^n(x, y, t_n)$. Se esta última célula for constante, a nova célula média tem a forma

$$u_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left[(\Delta x - a\Delta t)(\Delta y - b\Delta t)u_{i,j}^n + (\Delta x - a\Delta t)(b\Delta t)u_{i,j-1}^n + (\Delta y - b\Delta t)(a\Delta t)u_{i-1,j}^n + (a\Delta t)(b\Delta t)u_{i-1,j-1}^n \right]. \quad (2.42)$$

Este esquema ainda é de primeira ordem, pois as aproximações para u_{xx} e u_{yy} não se encontram (tendo como base a aproximação em séries de Taylor), e as aproximações para au_x e bu_y são de primeira ordem. O esquema (2.42) pode ser escrito na forma de

flutuação (2.38) tomando as flutuações de (2.39) e os fluxos de correção dados por

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_{i-1/2,j} &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} ab(u_{i-1,j} - u_{i-1,j-1}), \\
\tilde{f}_{i+1/2,j} &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} ab(u_{i,j} - u_{i,j-1}), \\
\tilde{g}_{i,j-1/2} &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} ab(u_{i,j-1} - u_{i-1,j-1}), \\
\tilde{g}_{i,j+1/2} &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} ab(u_{i,j} - u_{i-1,j}),
\end{aligned} \tag{2.43}$$

supondo aqui $a, b > 0$.

É esperado que este método seja estável para uma função \tilde{u} que não se desloca para mais de uma célula no tempo (conforme vemos na referência [16]), e a condição de estabilidade é dada por

$$\max \left(\left| \frac{a\Delta t}{\Delta x} \right|, \left| \frac{b\Delta t}{\Delta y} \right| \right) \leq 1. \tag{2.44}$$

Para a equação de advecção com coeficientes não constantes, isto é, $a = a(x, y)$ e $b = b(x, y)$, assumimos que as velocidades estão definidas nas bordas das células. O problema em cada interface resulta em um única onda \mathcal{W} com velocidade s dada pela velocidade na borda. Na direção x temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{i-1/2,j} &= u_{i,j} - u_{i-1,j}, \\
s_{i-1/2,j} &= a_{i-1/2,j},
\end{aligned} \tag{2.45}$$

e na direção y :

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{i,j-1/2} &= u_{i,j} - u_{i,j-1}, \\
s_{i,j-1/2} &= b_{i,j-1/2},
\end{aligned} \tag{2.46}$$

e de forma análoga podemos construir os fluxos na direção y . Generalizando as flutuações do esquema CDU (2.39), temos

$$\begin{aligned}
a^\pm \Delta u_{i-1/2,j} &= s_{i-1/2,j}^\pm \mathcal{W}_{i-1/2,j} = a_{i-1/2,j}^\pm (u_{i,j} - u_{i-1,j}), \\
b^\pm \Delta u_{i,j-1/2} &= s_{i,j-1/2}^\pm \mathcal{W}_{i,j-1/2} = b_{i,j-1/2}^\pm (u_{i,j} - u_{i,j-1}).
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Para calcular os fluxos de correção para o algoritmo CTU, consideramos que cada onda se propaga transversalmente para cada célula vizinha. Ao invés de dar uma única expressão para cada fluxo de correção, construímos esses fluxos adicionando algum termo transversal que surge do problema de Riemann. No início de cada passo de tempo consideramos $\tilde{f}_{i-1/2,j} = 0$ e $\tilde{g}_{i,j-1/2} = 0$ para todo i e j .

Após obtermos a solução do problema de Riemann na direção x na interface $(i-1/2, j)$, tomamos as flutuações como em (2.47) e atualizamos os próximos fluxos de correção por

$$\begin{aligned}
\tilde{g}_{i-1,j-1/2} &= \tilde{g}_{i-1,j-1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} b_{i-1,j-1/2}^- a_{i-1/2,j}^- (u_{i,j} - u_{i-1,j}), \\
\tilde{g}_{i-1,j+1/2} &= \tilde{g}_{i-1,j+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} b_{i-1,j+1/2}^+ a_{i-1/2,j}^- (u_{i,j} - u_{i-1,j}), \\
\tilde{g}_{i,j-1/2} &= \tilde{g}_{i,j-1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} b_{i,j-1/2}^- a_{i-1/2,j}^+ (u_{i,j} - u_{i-1,j}), \\
\tilde{g}_{i,j+1/2} &= \tilde{g}_{i,j+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} b_{i,j+1/2}^+ a_{i-1/2,j}^+ (u_{i,j} - u_{i-1,j}).
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Este esquema leva em conta todas as possíveis regiões triangulares. Na direção y os fluxos de correção são construídos de forma análoga.

2.3.4 Termos de Correção de Alta Resolução

Como o método CTU é de primeira ordem devido a falta dos termos u_{xx} e u_{yy} , iremos adicionar fluxos de correções, a fim de substituir a aproximação de primeira ordem Upwind pela aproximação de segunda ordem de Lax-Wendroff em cada direção. Assim, podemos melhorar a ordem do método CTU atualizando os fluxos de correção para

$$\begin{aligned}
\tilde{f}_{i-1/2,j} &= \tilde{f}_{i-1/2,j} + \frac{1}{2} |a_{i-1/2,j}| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |a_{i-1/2,j}| \right) \tilde{W}_{i-1/2,j}, \\
\tilde{g}_{i,j-1/2} &= \tilde{g}_{i,j-1/2} + \frac{1}{2} |b_{i,j-1/2}| \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta y} |b_{i,j-1/2}| \right) \tilde{W}_{i,j-1/2}.
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Neste caso, existe apenas uma onda $W_{i-1/2,j} = u_{i,j} - u_{i-1,j}$, e assim $\tilde{W}_{i-1/2,j}$ representa uma versão limitada desta onda obtida fazendo uma comparação desta com a onda na direção Upwind.

2.3.5 Leis de Conservação Não Lineares

Nesta seção extendemos os métodos desenvolvidos na seção anterior referentes às equações quase lineares para as equações não lineares (2.1). O procedimento agora é feito resolvendo o problema de Riemann normal em cada borda das células em uma dimensão, obtendo ondas, velocidades e flutuações inerentes às equações não lineares.

Na direção x :

$$\begin{aligned}
W_{i-1/2,j} &= u_{i,j} - u_{i-1,j}, \\
s_{i-1/2,j} &= \begin{cases} [f(u_{i,j}) - f(u_{i-1,j})]/(u_{i,j} - u_{i-1,j}) & \text{se } u_{i-1,j} \neq u_{i,j}, \\ f'(u_{i,j}) & \text{se } u_{i-1,j} = u_{i,j}, \end{cases} \tag{2.50}
\end{aligned}$$

Na direção y :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{i,j-1/2} &= u_{i,j} - u_{i,j-1}, \\ s_{i,j-1/2} &= \begin{cases} [g(u_{i,j}) - g(u_{i,j-1})]/(u_{i,j} - u_{i,j-1}) & \text{se } u_{i,j-1} \neq u_{i,j}, \\ g'(u_{i,j}) & \text{se } u_{i,j-1} = u_{i,j}. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.51)$$

As flutuações são definidas por

$$\begin{aligned} a^\pm \Delta u_{i-1/2,j} &= s_{i-1/2,j}^\pm \mathcal{W}_{i-1/2,j}, \\ b^\pm \Delta u_{i,j-1/2} &= s_{i,j-1/2}^\pm \mathcal{W}_{i,j-1/2}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

exceto no caso em que temos uma rarefação transsônica (quando a condição de entropia não é satisfeita). Se houver esse tipo de rarefação ($f'(u_{i-1,j}) < 0 < f'(u_{i,j})$ e $g'(u_{i,j-1}) < 0 < g'(u_{i,j})$) aplicamos uma entropia fixa para modificar as flutuações em

$$\begin{aligned} a^+ \Delta u_{i-1/2,j} &= f(u_{i,j}) - f(u_{s,j}), & a^- \Delta u_{i-1/2,j} &= f(u_{s,j}) - f(u_{i-1,j}), \\ b^+ \Delta u_{i,j-1/2} &= f(u_{i,j}) - f(u_{i,s}), & b^- \Delta u_{i,j-1/2} &= f(u_{i,s}) - f(u_{i,j-1}), \end{aligned} \quad (2.53)$$

em que $u_{s,j}$ é o único valor de u tal que $f'(u_{s,j}) = 0$, e de forma análoga $u_{i,s}$ é o único valor de u tal que $g'(u_{i,s}) = 0$.

2.3.6 Separador Dimensional

O separador dimensional é uma aplicação do método de passo fracional que veremos no próximo capítulo, e é a forma mais simples de estender os métodos numéricos unidimensionais para mais que uma dimensão. Esse separador pode ser utilizado para problemas multidimensionais, mas aqui discutiremos somente para o caso bidimensional, sendo a extensão óbvia.

O separador dimensional, como o próprio nome diz, separa o problema 2D em dois problemas 1D. Por exemplo, a equação linear

$$u_t + a u_x + b u_y = 0 \quad (2.54)$$

pode ser separada nos dois problemas unidimensionais

$$\begin{aligned} \text{Problema A: } & u_t + a u_x = 0, \\ \text{Problema B: } & u_t + b u_y = 0. \end{aligned}$$

Calculamos a solução do problema A no tempo t_n em cada linha da célula com j fixo:

$$u_{i,j}^* = u_{i,j}^n - r_x(f_{i+1/2,j}^n - f_{i-1/2,j}^n), \quad (2.55)$$

com $f_{i-1/2,j}^n$ o fluxo numérico para o problema em uma dimensão. No problema A, calculamos a solução em cada coluna da célula com i fixo:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^* - r_y(g_{i,j+1/2}^n - g_{i,j-1/2}^n). \quad (2.56)$$

Veremos no próximo capítulo que o método separador irá inserir um erro chamado erro de separação, a menos que os operadores $\mathcal{A} = a\partial_x$ e $\mathcal{B} = b\partial_y$ comutem.

Em problemas bidimensionais não teremos erro de separação somente se os subproblemas forem equações de advecção, mas mesmo assim as condições de fronteira podem interferir neste caso. Ainda assim, o erro de separação é menor que os outros tipos de erros introduzidos na solução numérica de cada subproblema, e é uma forma simples de utilizar métodos de alta ordem unidimensionais em problemas 2D.

O separador utilizado nos problemas A e B é chamado separador de Godunov, mas também podemos utilizar o separador de Strang:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^* &= u_{i,j}^n - \frac{r_x}{2}(f_{i+1/2,j} - f_{i-1/2,j}), \\ u_{i,j}^{**} &= u_{i,j}^* - r_y(g_{i,j+1/2}^* - g_{i,j-1/2}^*), \\ u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n - \frac{r_x}{2}(f_{i+1/2,j}^{**} - f_{i-1/2,j}^{**}). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Abordaremos melhor esses separadores no próximo capítulo.

2.4 Esquemas de Alta Resolução

Historicamente, no estudo numérico das equações hiperbólicas, as oscilações nas descontinuidades eram propagadas sem nenhum tratamento. Os esquemas numéricos até ali conhecidos de baixa ordem suavizavam demais essas descontinuidades e os de ordem mais alta produziam muitas oscilações.

Os métodos de segunda ordem, como o método de Lax-Wendroff por exemplo, possuem melhor precisão que o método Upwind (de primeira ordem) em regiões suaves. Porém, próximo às descontinuidades geram oscilações espúrias. Embora os métodos de alta ordem possam convergir mais rapidamente quando refinamos a malha, eles podem trazer uma propriedade, chamada não-monotocidade, que pode afetar a solução de forma adversa.

A monotocidade, num processo de advecção por exemplo, simplesmente transporta o perfil sem modificar sua forma, isto é, não cria novos mínimos e/ou máximos. Um esquema que possui essa propriedade é chamado de esquema monotônico.

Infelizmente foi provado por Godunov que não existe esquema linear monotônico que tenha ordem de precisão maior que um. A maior barreira aqui é que esquemas lineares de alta ordem não geram soluções fisicamente corretas (conforme a referência [5]).

Procurou-se então desenvolver esquemas que limitassem as oscilações nas discontinuidades sem suavizar excessivamente, que combinassem alta ordem de precisão e soluções fisicamente aceitáveis.

Os esquemas de alta resolução fazem exatamente um misto entre um esquema de baixa ordem e outro de alta ordem. Vamos nos aprofundar aqui nos métodos TVD e nos conceitos de limitadores de fluxo.

Dizemos que um método é de alta resolução (ou alta precisão) quando ele satisfaz as três seguintes propriedades:

- Ter ao menos segunda ordem de precisão em soluções suaves ou em partes suaves da solução, caso ela apresente descontinuidade em alguma região;
- Ter resolução “acurada” das descontinuidades, sem que haja suavização excessiva;
- Não ter oscilações espúrias na solução.

Nesta seção estamos interessados em estudar esquemas conservativos que tenham bom comportamento nas descontinuidades, sem oscilar excessivamente. Aqui, tomamos por referência principalmente [2], [3], [13], [19], [22] e [23].

2.4.1 Variação Total Decrescente - TVD

Para encontrarmos esquemas de alta resolução precisamos conhecer algumas propriedades e definições básicas fundamentais no estudo de esquemas de maior ordem de precisão.

Os métodos TVD (Variação Total Decrescente, do inglês Total Variation Diminishing) foram desenvolvidos devido à necessidade de métodos que não permitissem o surgimento de novos mínimos e/ou máximos na solução. A variação total (TV) tem a função de “medir” as oscilações da solução. A variação total é definida como

$$\begin{aligned} \text{TV}(u) = & \limsup_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |u(x + \epsilon, y) - u(x, y)| dx dy \\ & + \limsup_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |u(x, y + \epsilon) - u(x, y)| dx dy. \end{aligned}$$

No caso discreto, a TV é definida como

$$TV(u^n) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \left[\Delta y |u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n| + \Delta x |u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n| \right]. \quad (2.58)$$

Definição 2.2. *Um esquema de diferenças é dito ter variação total decrescente (TVD), se a solução produzida por este esquema satisfaz*

$$TV(u_{i,j}^{n+1}) \leq TV(u_{i,j}^n),$$

para todo $n \geq 0$.

Se um esquema é TVD, então nas descontinuidades a aproximação será feita de forma a não produzir oscilações, preservando a monotocidade da solução. Porém, a propriedade TVD não garante que a aproximação produzida não irá suavizar excessivamente as descontinuidades. Um exemplo de quando isto acontece é o método Upwind, que mesmo sendo TVD suaviza excessivamente próximo das descontinuidades.

Em uma tentativa de mostrar que esquemas TVD podem introduzir segunda ordem de precisão, Goodman e LeVeque [9] conseguiram o seguinte resultado negativo:

Teorema 2.1 (Goodman & LeVeque[9]). *Exceto em certos casos triviais, todo o método que é TVD em duas dimensões espaciais tem no máximo primeira ordem de precisão.*

Este teorema significa simplesmente que a condição TVD não é suficiente para prover convergência em esquemas de alta resolução em duas dimensões.

O resultado acima não nos diz que é impossível encontrar métodos de alta resolução em duas dimensões espaciais. Inclusive poderemos impor que um esquema TVD seja de alta resolução através da escolha de limitantes convenientes, chamados limitadores de fluxo. A função dos limitadores é, essencialmente, transformar esquemas de alta resolução em esquemas que evitam oscilações na solução.

2.4.2 Esquemas com Limitadores de Fluxo

Os esquemas em duas dimensões de alta resolução podem ser construídos utilizando o esquema de diferenças (2.30), onde os fluxos f e g no caso linear são definidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} f_{i+1/2,j}^n &= au_{i,j}^n + \phi_{x_{i,j}}^n \frac{1}{2} a (1 - ar_x) (u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n), \\ g_{i+1/2,j}^n &= bu_{i,j}^n + \phi_{y_{i,j}}^n \frac{1}{2} b (1 - br_y) (u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n), \end{aligned} \quad (2.59)$$

assumindo $a > 0$ e $b > 0$, em que r_x e r_y são definidos em (2.37) e $\phi_{x_{i,j}}^n = \phi_x(\theta_{x_{i,j}}^n)$ e $\phi_{y_{i,j}}^n = \phi_y(\theta_{y_{i,j}}^n)$. As funções ϕ_x e ϕ_y são funções limitantes, e $\theta_{x_{i,j}}^n$ e $\theta_{y_{i,j}}^n$ são parâmetros de suavidade nas direções x e y respectivamente e são definidos como

$$\begin{aligned}\theta_{x_{i,j}}^n &= \frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}, \\ \theta_{y_{i,j}}^n &= \frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n}.\end{aligned}\tag{2.60}$$

Na prática, os parâmetros de suavidade são usados para detectar se há descontinuidade, ou seja, se não há suavidade.

Uma maneira de escrever o esquema numérico no caso linear sem se preocupar com o sinal de a e b , é utilizar o esquema Upwind de baixa ordem

$$\begin{aligned}f_{L_{i+1/2,j}}^n &= \frac{1}{2}a(u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n) - \frac{1}{2}|a|(u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n), \\ g_{L_{i,j+1/2}}^n &= \frac{1}{2}b(u_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n) - \frac{1}{2}|b|(u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n),\end{aligned}\tag{2.61}$$

e depois usar o esquema de Lax-Wendroff como o esquema de alta ordem com função fluxo numérico

$$\begin{aligned}f_{i+1/2,j}^n &= f_{L_{i+1/2,j}}^n + \frac{1}{2}\phi_{x_{i,j}}^n a(\text{sign}(a) - ar_x)(u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n), \\ g_{i,j+1/2}^n &= g_{L_{i,j+1/2}}^n + \frac{1}{2}\phi_{y_{i,j}}^n b(\text{sign}(b) - br_y)(u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n),\end{aligned}\tag{2.62}$$

em que $\text{sign}(a)$ denota o sinal de a , e agora temos

$$\theta_{x_{i,j}}^n = \begin{cases} \frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } a > 0 \\ \frac{u_{i+2,j}^n - u_{i+1,j}^n}{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } a < 0 \end{cases}\tag{2.63}$$

e

$$\theta_{y_{i,j}}^n = \begin{cases} \frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } b > 0 \\ \frac{u_{i,j+2}^n - u_{i,j+1}^n}{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } b < 0 \end{cases}\tag{2.64}$$

Para o caso não linear fazemos o mesmo procedimento, utilizando o esquema Upwind como um esquema de baixa ordem e depois o esquema de Lax-Wendroff como um esquema de alta ordem. Assim, construímos as funções de fluxo numérico da forma

$$\begin{aligned}f_{i+1/2,j}^n &= f_{L_{i+1/2,j}}^n + \frac{1}{2}\phi_{x_{i,j}}^n |a_{i+1/2,j}^n| [1 - r_x |a_{i+1/2,j}^n|] (u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n), \\ g_{i,j+1/2}^n &= g_{L_{i,j+1/2}}^n + \frac{1}{2}\phi_{y_{i,j}}^n |b_{i,j+1/2}^n| [1 - r_y |b_{i,j+1/2}^n|] (u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n),\end{aligned}\tag{2.65}$$

em que

$$\begin{aligned} f_{L_{i+1/2,j}}^n &= \frac{1}{2}[f_{i,j}^n + f_{i+1,j}^n] - \frac{1}{2}|a_{i+1/2,j}^n|(u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n), \\ g_{L_{i,j+1/2}}^n &= \frac{1}{2}[g_{i,j}^n + g_{i,j+1}^n] - \frac{1}{2}|b_{i,j+1/2}^n|(u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Aqui, $a_{i+1/2,j}$ e $b_{i+1/2,j}$ estão fazendo o papel das ondas $s_{i+1/2,j}$ e $s_{i,j+1/2}$, respectivamente, estudadas na seção 2.3.5:

$$a_{i+1/2,j} = \begin{cases} [f(u_{i+1,j}) - f(u_{i,j})]/(u_{i+1,j} - u_{i,j}) & \text{se } u_{i,j} \neq u_{i+1,j}, \\ f'(u_{i+1,j}) & \text{se } u_{i,j} = u_{i+1,j}, \end{cases} \quad (2.67)$$

$$b_{i,j+1/2} = \begin{cases} [g(u_{i,j+1}) - g(u_{i,j})]/(u_{i,j+1} - u_{i,j}) & \text{se } u_{i,j} \neq u_{i,j+1}, \\ g'(u_{i,j+1}) & \text{se } u_{i,j} = u_{i,j+1}. \end{cases} \quad (2.68)$$

Como estamos utilizando um esquema Upwind para o esquema de baixa ordem, usaremos uma definição dos parâmetros de suavidade similar às utilizadas em (2.63) e (2.64):

$$\theta_{x_{i,j}}^n = \begin{cases} \frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } a_{i+1/2,j}^n > 0 \\ \frac{u_{i+2,j}^n - u_{i+1,j}^n}{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } a_{i+1/2,j}^n < 0 \end{cases} \quad (2.69)$$

e

$$\theta_{y_{i,j}}^n = \begin{cases} \frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } b_{i,j+1/2}^n > 0 \\ \frac{u_{i,j+2}^n - u_{i,j+1}^n}{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n} & \text{se } b_{i,j+1/2}^n < 0. \end{cases} \quad (2.70)$$

Diferentes escolhas para ϕ nos fornecem diferentes esquemas numéricos. Por exemplo:

- Para $\phi(\theta) = 0$ temos o esquema FTBS (diferença progressiva no tempo e regressiva no espaço, do inglês Forward Time Backward Space, que é exatamente o método Upwind para $a, b > 0$), que é um esquema estável para $-1 \leq r_x \leq 1$ e $-1 \leq r_y \leq 1$ e consistente de primeira ordem.
- Para $\phi(\theta) = 1$ temos o esquema Lax-Wendroff, que é estável para $|r_x| \leq 1$ e $|r_y| \leq 1$ e consistente de segunda ordem.
- Para $\phi(\theta) = \theta$ temos o esquema Beam-Warming que é consistente de segunda ordem.

Nosso objetivo é escolher ϕ de tal forma que nosso esquema seja TVD e de segunda ordem, isto é, queremos que nas discontinuidades não haja oscilação nem suavização excessiva.

A estratégia para assegurar que o esquema seja TVD, é exigir que ele seja incrementalmente TVD. Isto equivale exigir que ϕ satisfaça:

$$\left| \frac{\phi(\theta_m)}{\theta_m} - \phi(\theta_{m-1}) \right| \leq 2 \quad \forall m, \quad (2.71)$$

em que $m = i$ na direção x e $m = j$ na direção y (para mais detalhes ver referência [3]).

Para que ϕ seja não-negativa, assumimos $\phi(\theta) = 0$ para $\theta \leq 0$. Assim, a desigualdade acima é satisfeita se a função limitadora ϕ satisfizer

$$0 \leq \frac{\phi(\theta)}{\theta} \leq 2 \quad \text{e} \quad 0 \leq \phi(\theta) \leq 2 \quad \forall \theta. \quad (2.72)$$

Desta forma escolhemos ϕ de maneira que seu gráfico esteja no interior da região hachurada da figura 2.5 definida por (2.71).

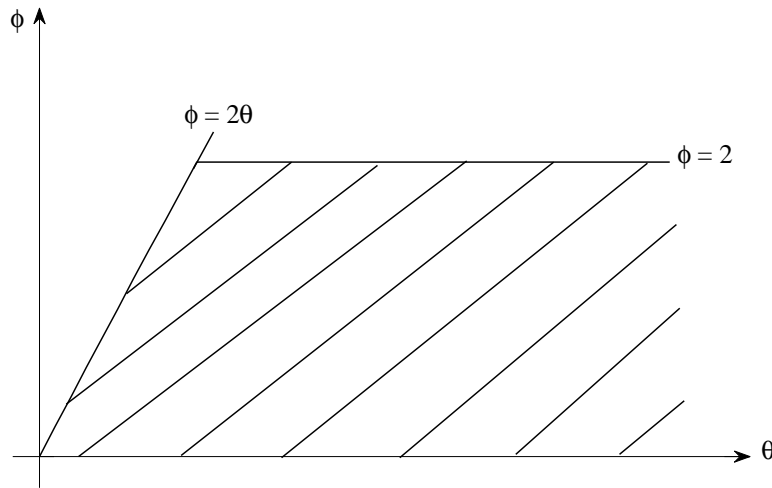


Figura 2.5: Região hachurada representando a região de Variação Total Decrescente - TVD.

Existem muitas funções que estão no interior da região hachurada da figura 2.5 e que podem ser escolhidas. Precisamos escolher essas funções de forma que para $\theta = 1$ tenhamos $\phi = 1$ (ver referências [3] e [19]).

Dentre vários limitadores, vamos abordar alguns dos principais discutidos na literatura:

Superbee

$$\phi(\theta) = \max \{0, \min \{1, 2\theta\}, \min \{\theta, 2\}\} \quad (2.73)$$

Van Leer

$$\phi(\theta) = \frac{|\theta| + \theta}{1 + |\theta|} \quad (2.74)$$

Chakravarthy-Osher (C-O)

$$\phi(\theta) = \max \{0, \min \{\theta, \beta\}\}, \quad 1 \leq \beta \leq 2 \quad (2.75)$$

Beam Warming - Lax-Wendroff (BW-LW)

$$\phi(\theta) = \max \{0, \min \{\theta, 1\}\}. \quad (2.76)$$

Van Albada

$$\phi(\theta) = \begin{cases} \frac{\theta + \theta^2}{1 + \theta^2}, & \theta \geq 0 \\ \theta, & \theta < 0. \end{cases} \quad (2.77)$$

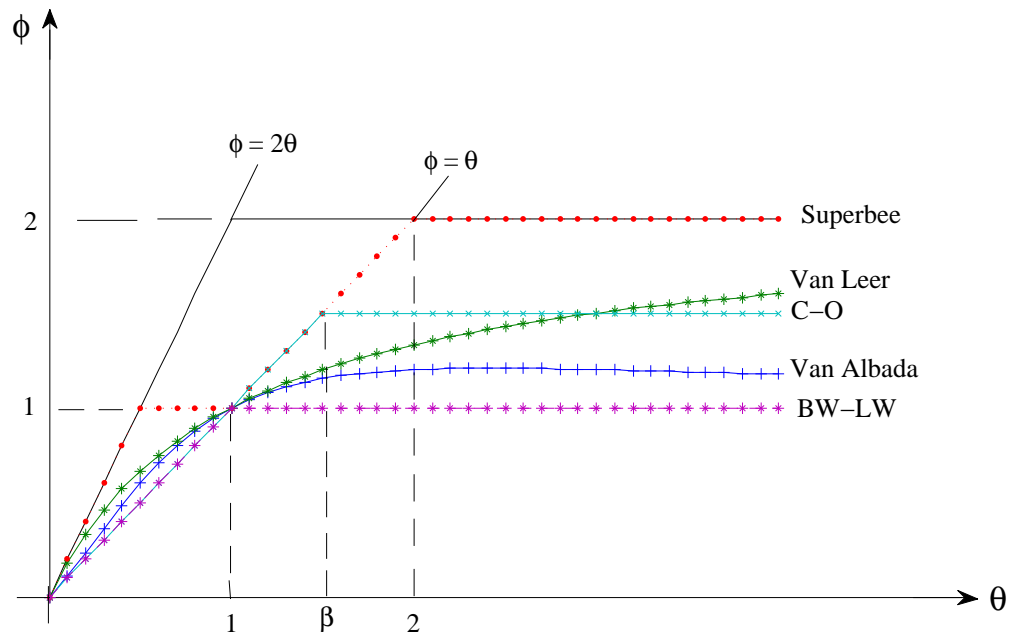


Figura 2.6: Comparação dos gráficos das funções limitadoras de fluxo.

Observe que o limitador BW-LW (uma combinação dos esquemas Beam-Warming e Lax - Wendroff) é um caso especial do limitador C-O (para $\beta = 1$). Observe também na figura 2.6 que os limitadores (2.73)-(2.77) satisfazem a condição (2.71), isto é, seus gráficos estão no interior da região TVD.

Uma propriedade interessante que algumas funções limitadoras possuem é a simetria. Uma função limitadora é **simétrica** se satisfaz

$$\frac{\phi(\theta)}{\theta} = \phi\left(\frac{1}{\theta}\right). \quad (2.78)$$

Esta propriedade assegura que o esquema utilizado será preciso no tratamento dos gradientes, independente da direção de propagação das ondas características. Os limitadores Superbee, Van Leer, BW-LW e Van Albada são simétricos, enquanto o limitador C-O não é simétrico para $\beta > 1$.

Equação Hiperbólica 2D Com Termo Fonte

3.1 Introdução

Uma lei de conservação hiperbólica com termo fonte em duas dimensões é dada na forma

$$\underbrace{u_t}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{[f(u)]_x + [g(u)]_y}_{\text{termos convectivos}} = \underbrace{\psi(x, y, u)}_{\text{termo fonte}} \quad (3.1)$$

Como veremos a seguir, alguns modelos exigem que ψ seja também função das derivadas de u , mas neste trabalho consideraremos ψ como função somente de x , y e u .

Geralmente, os termos fonte surgem na equação hiperbólica quando há uma perda ($\psi < 0$) ou um ganho ($\psi > 0$) da quantidade u (no caso em $\psi = \psi(u(x, y, t))$) ou da variável independente em ψ .

3.2 Origem dos Termos Fonte

Segundo LeVeque, em [16], os termos fonte podem surgir na equação das seguintes formas:

Na Reação do Fluxo

Muitas vezes, os problemas de dinâmica dos fluidos envolvem a reação química dos fluidos ou gases. Nos problemas mais simples, os compostos reagentes tem pouco volume e não afetam a dinâmica dos fluidos.

Os problemas mais interessantes surgem quando essas reações afetam o movimento do fluido, como em problemas de combustão onde o calor das reações tem grande efeito na dinâmica do fluido. Geralmente as reações químicas ocorrem em um número maior de vezes que a velocidade da onda, resultando em problemas com termos fonte *stiff*.

Nas Forças Externas

As forças externas provocam termos fonte na equação do momento, e assim não há conservação do momento inicial, pois essa força causará uma aceleração do fluido e uma mudança no seu momento.

Na Redução Dimensional

Geralmente podemos reduzir um problema físico de uma dimensão maior para uma dimensão menor. Por exemplo, quando queremos calcular a acústica de uma onda esférica que surge da perturbação da pressão no espaço, podemos resolver o problema em uma dimensão, em r (distância da fonte) e t (tempo).

Entretanto, a lei de conservação homogênea pode ganhar termos fonte quando reduzimos sua dimensão. No exemplo da acústica de uma onda esférica, o termo fonte surge do fato de o intervalo $[r_1, r_2]$ não corresponder à forma esférica, cujo volume varia com o raio r .

Nas Derivadas de Alta Ordem

Muitos problemas práticos envolvem derivadas de alta ordem, como a equação de advecção-

difusão $u_t + au_x + bu_y = \mu(u_{xx} + u_{yy})$. Outros problemas podem também envolver termos de dispersão contendo $u_{xxx} + u_{yyy}$ ou outra ordem ímpar de derivadas, por exemplo $u_t + uu_x + uu_y = u_{xxx} + u_{yyy}$ que é a equação de Korteweg-de-Vries (KdV). Assim, essas equações podem ser escritas na forma (3.1) substituindo $\psi(u)$ por $\psi(u, u_{xx}, u_{xxx}, \dots)$, o novo termo fonte.

3.3 Métodos Não Separadores

Nesta seção estudamos os problemas onde o termo fonte depende somente de u (e/ou também de x e y), e não de suas derivadas parciais.

Antes de introduzirmos os métodos separadores (do inglês *split*), veremos dois dos métodos mais conhecidos, Upwind e Lax-Wendroff, para a equação de advecção linear com termo fonte $\psi = -\epsilon u$:

$$u_t + au_x + bu_y = -\epsilon u, \quad (3.2)$$

chamada de equação de advecção-reação linear. Esta equação pode modelar, por exemplo, o transporte de um material radioativo em um fluido com velocidades constantes a na direção x e b na direção y , escorrendo por um tubo e que decai a uma taxa ϵ (Conforme LeVeque em [16]). Fazendo a expansão em séries de Taylor para esta equação, temos

$$u(x, y, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \partial_t^n u(x, y, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} (-a\partial_x - b\partial_y - \epsilon)u(x, y, t),$$

que podemos escrever na forma exponencial:

$$u(x, y, t + \Delta t) = e^{-\Delta t(a\partial_x + b\partial_y + \epsilon)}u(x, y, t). \quad (3.3)$$

Sendo $u(x, y, 0) = u_0(x, y)$ a condição inicial desta equação, visto que ao longo das características $dx/dt = a$ e $dy/dt = b$ temos $du/dt = -\epsilon u$, a solução exata é dada por

$$u(x, y, t) = e^{-\epsilon t}u_0(x - at, y - bt). \quad (3.4)$$

Assumindo $a, b > 0$, uma extensão do método Upwind seria

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - b \frac{\Delta t}{\Delta y} (u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n) - \Delta t \epsilon u_{i,j}^n, \quad (3.5)$$

que é de primeira ordem e estável para $0 < r_x \leq 1$, $0 < r_y \leq 1$ e $\epsilon > 0$, em que $r_x = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$ e $r_y = b \frac{\Delta t}{\Delta y}$.

Já o método *Lax-Wendroff*, que é de segunda ordem, pode ser desenvolvido usando séries de Taylor

$$u(x, y, t + \Delta t) \approx u(x, y, t) + \Delta t u_t(x, y, t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 u_{tt}(x, y, t), \quad (3.6)$$

em que substituímos as derivadas parciais da equação (3.2) e aproximamos as derivadas em x e y por diferenças finitas centrais para obter

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} = & \left(1 - \epsilon \Delta t + \frac{1}{2} \epsilon^2 \Delta t^2 - \gamma \right) u_{i,j}^n + \frac{r_x}{2} (\epsilon \Delta t + r_x - 1) u_{i+1,j}^n + \\ & + \frac{r_y}{2} (\epsilon \Delta t + r_y - 1) u_{i,j+1}^n + \frac{r_x}{2} (1 - \epsilon \Delta t + r_x) u_{i-1,j}^n + \\ & + \frac{r_y}{2} (1 - \epsilon \Delta t + r_y) u_{i,j-1}^n + \frac{r_{xy}}{2} (u_{i+1,j+1}^n - u_{i+1,j-1}^n - u_{i-1,j+1}^n + u_{i-1,j-1}^n), \end{aligned} \quad (3.7)$$

em que $\gamma = r_x + r_y$ e $r_{xy} = \frac{\Delta t^2 ab}{2\Delta x \Delta y}$.

Para problemas mais complicados, pode ser mais difícil calcular o termo de segunda ordem u_{tt} para substituir na expansão em séries de Taylor, impondo dificuldades no desen-

volvimento de métodos numéricos de segunda ordem. Também não é fácil introduzirmos limitadores no método não separador (3.7), que poderia ser bastante útil em problemas com soluções descontínuas. Por isto iremos introduzir os conceitos de métodos de passo fracional ou métodos separadores.

Visto que a equação de advecção-reação estudada é mais simples, implementamos os dois métodos não separadores acima no software MATLAB, com $\Delta x = \Delta y = 8e - 03$, $\Delta t = 0.1\Delta x$, $\epsilon = 1e - 04$, $t = 0.2$ e condição inicial

$$u_0(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{se } |x| \leq 1 \text{ e } |y| \leq 1 \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.8)$$

que podem ser observados na figura 3.1. Observe que o método Upwind ilustrado na figura 3.1.(a) não apresentou oscilações e suavizou a solução, por ser um método de primeira ordem. Já na figura 3.1.(b) que ilustra o método Lax-Wendroff, percebemos que as cores da escala foram modificadas. Isto aconteceu devido as oscilações que são características do método de segunda ordem.

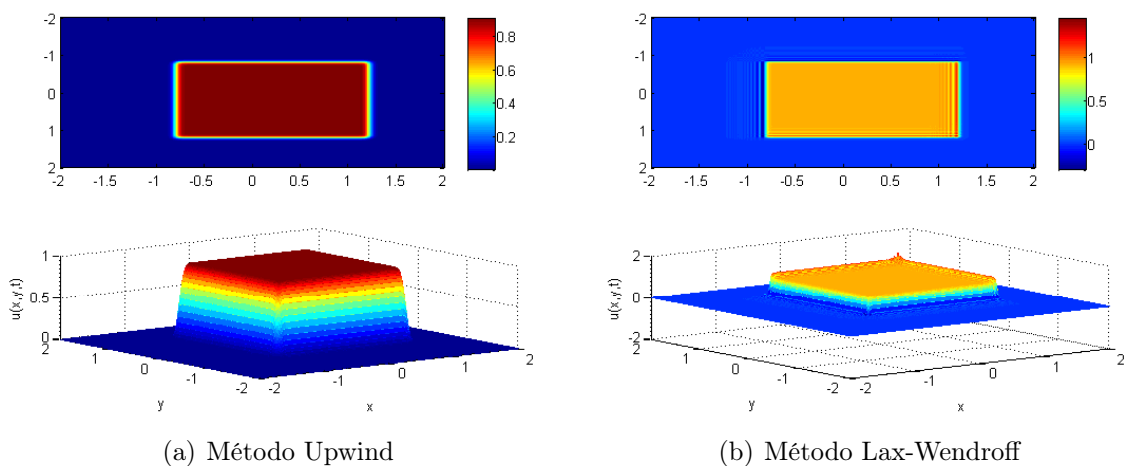


Figura 3.1: Solução da equação de advecção linear com termo fonte $\psi = -\epsilon u$.

3.4 Métodos de Passo Fracional

Os métodos de passo fracional separam a equação com termo fonte em duas ou três partes, onde uma é a equação $u_t = \psi(u)$, que no caso da equação (3.2) é uma EDO, e a(s) outra(s) é(são) uma equação(ões) homogênea(s)

$$u_t(x, y, t) + [f(u(x, y, t))]_x + [g(u(x, y, t))]_y = 0. \quad (3.9)$$

Eles produzem as soluções dessas duas equações independentemente a fim de aproximar a solução do problema completo.

Também é possível separar a equação homogênea (3.9) em relação à dimensão com o método separador dimensional, como vimos na seção (2.3.6).

Em alguns casos, a equação hiperbólica traz termos fontes que dependem das derivadas de u , como por exemplo a equação de advecção-difusão

$$u_t + au_x + bu_y = \epsilon(u_{xx} + u_{yy}). \quad (3.10)$$

Esta equação poderia ser escrita na forma de conservação

$$u_t + [au - \epsilon u_x]_x + [bu - \epsilon u_y]_y = 0, \quad (3.11)$$

porém é mais simples e temos melhores resultados se aplicarmos um método explícito de alta ordem na parte de advecção e métodos implícitos na equação de difusão $u_t = \epsilon(u_{xx} + u_{yy})$, como Crank-Nicolson por exemplo.

A fim de ilustrar as considerações até agora expostas, vamos considerar o problema de advecção-reação (3.2) e separá-lo da seguinte forma:

$$\text{Problema A: } u_t + au_x + bu_y = 0, \quad (3.12)$$

$$\text{Problema B: } u_t = -\epsilon u. \quad (3.13)$$

Uma maneira bastante simples de construir um método de passo fracional, é utilizar o método Upwind no problema A e Euler no problema B. Assim, o método de passo fracional consiste em dois passos:

$$\text{Passo A: } u_{i,j}^* = u_{i,j}^n - r_x(u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - r_y(u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n)$$

$$\text{Passo B: } u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^* - \epsilon \Delta t u_{i,j}^*,$$

em que $u_{i,j}^*$ é um passo intermediário. Se combinarmos esses dois estágios teremos uma aproximação para resolver a equação original (3.2). A fim de analisar a consistência e a estabilidade desse método, eliminamos $u_{i,j}^*$ e combinamos os dois passos para obter

$$u_{i,j}^{n+1} = (1 - \epsilon \Delta t)(1 - \gamma)u_{i,j}^n + (r_x - \epsilon \Delta t r_x)u_{i-1,j}^n + (r_y - \epsilon \Delta t r_y)u_{i,j-1}^n. \quad (3.14)$$

Este método é consistente de ordem 1 e estável para $0 < r_x \leq 1$ e $0 < r_y \leq 1$.

A escolha do método Upwind no passo A e Euler no passo B foi opcional. Para este caso, podemos melhorar a precisão do método de passo fracional escolhendo um método

de maior ordem de precisão, como por exemplo, o método de Lax-Wendroff no passo A e Runge-Kutta no passo B. Se utilizarmos aqui um método de p -ésima ordem de precisão, teremos um método de p -ésima ordem de precisão para a equação original.

Os métodos separadores permitem utilizar métodos de alta ordem para (3.9) e métodos padrões para a EDO que contém o termo fonte, porém podem introduzir erros chamados **erros de separação**. Independentemente de como aproximamos os subproblemas, esses erros surgem quando separamos a equação original em pedaços, e dependem do passo temporal Δt .

Para a equação (3.2) não existem erros de separação pelo fato que podemos obter a solução em Δt resolvendo primeiramente a equação (3.12) e utilizando a solução para resolver (3.13). Para verificar essa ausência de erro de separação, consideramos $u^*(x, y, \Delta t)$ a solução analítica do problema A com condição inicial $u^*(x, y, 0) = u_0(x, y)$. Assim,

$$u^*(x, y, \Delta t) = u_0(x - at, y - bt),$$

que é a solução da equação de advecção linear. Utilizamos a notação u para a solução do problema original (3.2) e u^{**} a solução do problema B (3.13). Tomando o resultado acima como condição inicial do problema B, temos $u^{**}(x, y, 0) = u^*(x, y, \Delta t) = u_0(x - a\Delta t, y - b\Delta t)$. Assim, temos

$$u^{**}(x, y, \Delta t) = e^{-\epsilon\Delta t}u_0(x - a\Delta t, y - b\Delta t).$$

Comparando com a equação (3.4), recuperamos a solução do problema original.

Observe que os operadores solução na equação anterior comutam. Geralmente os operadores que comutam não possuem erros de separação. Existe uma outra forma de analisar o erro de separação, geralmente utilizada quando não conhecemos a solução analítica, e que pode ser aplicada à equações não lineares também. Para isto, expandimos os problemas A e B separadamente em séries de Taylor, obtendo na forma exponencial

$$\begin{aligned} u^*(x, y, \Delta t) &= e^{-\Delta t(a\partial_x + b\partial_y)}u_0(x, y) \\ u^{**}(x, y, \Delta t) &= e^{-\epsilon\Delta t}u^{**}(x, y, 0). \end{aligned} \tag{3.15}$$

Utilizando $u^*(x, y, \Delta t)$ como condição inicial para $u^{**}(x, y, \Delta t)$, como fizemos anteriormente no método de passo fracional, temos que

$$\begin{aligned} u^{**}(x, y, \Delta t) &= e^{-\epsilon\Delta t}e^{-\Delta t(a\partial_x + b\partial_y)}u_0(x, y) \\ &= e^{-\Delta t(\epsilon + a\partial_x + b\partial_y)}u_0(x, y), \end{aligned} \tag{3.16}$$

que é exatamente o operador solução da equação original, como em (3.3).

Não existe erro de separação para este problema porque o operador solução do problema original é exatamente o produto dos operadores solução dos problemas (3.12) e (3.13).

3.5 Separador de Godunov

Consideramos a forma geral de uma equação hiperbólica linear

$$u_t = (\mathcal{A} + \mathcal{B})u, \quad (3.17)$$

em que \mathcal{A} e \mathcal{B} são operadores diferenciais, por exemplo, $\mathcal{A} = -a\partial_x - b\partial_y$ e $\mathcal{B} = -\epsilon$ na equação (3.2).

Por simplicidade, supomos que \mathcal{A} e \mathcal{B} não dependem do termo temporal. Assim,

$$u_{tt} = (\mathcal{A} + \mathcal{B})u_t = (\mathcal{A} + \mathcal{B})^2u.$$

Em geral, podemos escrever

$$\frac{\partial^n u}{\partial t^n} = (\mathcal{A} + \mathcal{B})^n u. \quad (3.18)$$

Fazendo a expansão da solução em séries de Taylor no ponto $(x, y, \Delta t)$, temos

$$\begin{aligned} u(x, y, \Delta t) &= u_0(x, y) + \Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B})u_0(x, y) + \frac{1}{2}\Delta t^2(\mathcal{A} + \mathcal{B})^2u_0(x, y) + \dots \\ &= \left(I + \Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B}) + \frac{1}{2}\Delta t^2(\mathcal{A} + \mathcal{B})^2 + \dots \right) u_0(x, y), \end{aligned} \quad (3.19)$$

e na forma exponencial escremos

$$u(x, y, \Delta t) = e^{\Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B})}u(x, y, 0).$$

O separador de Godunov consiste em resolver o primeiro subproblema em Δt e usar o resultado obtido para resolver o segundo subproblema, também em Δt , como em (3.12)-(3.13). Assim, utilizando o separador de Godunov, escrevemos a solução na forma exponencial

$$u(x, y, \Delta t) = e^{\Delta t \mathcal{B}} e^{\Delta t \mathcal{A}} u_0(x, y).$$

Para problemas não lineares também é possível escrever a solução em séries de Taylor, porém a expressão não será tão simples quanto a acima.

O erro de separação é dado pela diferença entre a solução exata (3.19) e a solução calculada. Assim, tomando u^* a solução obtida pelo separador de Godunov, o erro de

separação é

$$u(x, y, \Delta t) - u^*(x, y, \Delta t) = \left(e^{\Delta t(\mathcal{A}+\mathcal{B})} - e^{\Delta t\mathcal{B}}e^{\Delta t\mathcal{A}} \right) u_0(x, y).$$

Abrindo a solução numérica u^* temos

$$\begin{aligned} u^* &= \left(I + \Delta t \mathcal{B} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathcal{B}^2 + \dots \right) \left(I + \Delta t \mathcal{A} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathcal{A}^2 + \dots \right) u_0(x, y) \\ &= \left[I + \Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B}) + \frac{1}{2} \Delta t^2 (\mathcal{A}^2 + 2\mathcal{B}\mathcal{A} + \mathcal{B}^2) + \dots \right] u_0(x, y). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Logo, por (3.19) e (3.20), o erro de separação do separador de Godunov é

$$u(x, y, \Delta t) - u^*(x, y, \Delta t) = \frac{1}{2} \Delta t^2 (\mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}) u_0(x, y) + O(\Delta t^3).$$

Portanto, o erro de separação depende da comutatividade dos operadores. No caso da equação (3.2), não existe erro de separação porque os operadores comutam.

Supomos que $\epsilon = \epsilon(x, y)$ no exemplo da equação (3.2). Então teremos

$$\mathcal{A}\mathcal{B}u = a\partial_x(\epsilon(x, y)u) + b\partial_y(\epsilon(x, y)u) = a\epsilon(x, y)u_x + a\epsilon_x(x, y)u + b\epsilon(x, y)u_y + b\epsilon_y(x, y)u$$

porém

$$\mathcal{B}\mathcal{A}u = \epsilon(x, y)au_x + \epsilon(x, y)bu_y.$$

Então, a menos que $\epsilon_x = \epsilon_y = 0$, teremos que o erro de separação neste caso é

$$u - u^* = \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(a\epsilon_x + b\epsilon_y \right) u_0 + O(\Delta t^3).$$

Se os operadores não comutarem, então o erro de separação irá introduzir um erro de ordem $O(\Delta t^2)$ em cada passo de tempo, e no final teremos acumulado um erro de ordem $O(\Delta t)$, se fizermos $T/\Delta t$ passos de tempo, com T o tempo final (assumindo que o método é estável). E assim, quaisquer que sejam os métodos escolhidos para resolver os subproblemas, o método resultante terá somente primeira ordem de precisão.

3.6 Separador de Strang

Este separador foi primeiramente publicado por Strang em 1968 na solução de problemas multidimensionais, e propõe uma pequena mudança na ideia do separador de Godunov fazendo com que o método seja de segunda ordem.

Esse separador consiste em resolver primeiramente o subproblema $u_t = \mathcal{A}u$ sobre a metade do passo de tempo, $\Delta t/2$, utilizar o resultado obtido para resolver o segundo subproblema $u_t = \mathcal{B}u$ com o passo de tempo Δt e então usar a outra metade do passo temporal em $u_t = \mathcal{A}u$.

Podemos, sem perda de generalizadade, inverter a ordem dos operadores \mathcal{A} e \mathcal{B} descrita acima.

Comparando com o separador de Godunov, estamos aproximando o operador solução $e^{\Delta t(\mathcal{A}+\mathcal{B})}$ por $e^{\frac{1}{2}\Delta t\mathcal{A}}e^{\Delta t\mathcal{B}}e^{\frac{1}{2}\Delta t\mathcal{A}}$. Expandindo esse último produto em séries de Taylor, temos que

$$e^{\frac{1}{2}\Delta t\mathcal{A}}e^{\Delta t\mathcal{B}}e^{\frac{1}{2}\Delta t\mathcal{A}} = I + \Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B}) + \frac{1}{2}\Delta t^2(\mathcal{A}^2 + \mathcal{A}\mathcal{B} + \mathcal{B}\mathcal{A} + \mathcal{B}^2) + O(\Delta t^3). \quad (3.21)$$

Denotando por u^{**} a solução obtida pelo separador de Strang, o erro de separação cometido quando utilizamos esse separador é dado por

$$u(x, y, \Delta t) - u^{**}(x, y, \Delta t) = \frac{1}{4}\Delta t^3 \left(\mathcal{A}^2\mathcal{B} + \mathcal{A}\mathcal{B}^2 - \mathcal{B}\mathcal{A}^2 - \mathcal{B}^2\mathcal{A} \right) u_0(x, y) + O(\Delta t^4).$$

Além do termo $I + \Delta t(\mathcal{A} + \mathcal{B})$, o termo de ordem $O(\Delta t^2)$ também é idêntico ao da equação (3.19), o que nos dará segunda ordem de precisão. Já o termo $O(\Delta t^3)$ será diferente, a menos que os operadores $\mathcal{A}^2\mathcal{B}$ e $\mathcal{B}\mathcal{A}^2$, $\mathcal{A}\mathcal{B}^2$ e $\mathcal{B}^2\mathcal{A}$ comutem.

Vamos considerar a equação (3.2) com $\epsilon = \epsilon(x, y) = 1 - x - y$. Visto que os operadores $\mathcal{A}^2\mathcal{B}$ e $\mathcal{B}\mathcal{A}^2$, $\mathcal{A}\mathcal{B}^2$ e $\mathcal{B}^2\mathcal{A}$, dados por

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^2\mathcal{B}u &= a^2(\epsilon u_{xx} - 2u_x) + 2ab(\epsilon u_{xy} - u_x - u_y) + b^2(\epsilon u_{yy} - 2u_y), \\ \mathcal{B}\mathcal{A}^2u &= \epsilon(a^2u_{xx} + 2abu_{xy} + b^2u_{yy}), \\ \mathcal{A}\mathcal{B}^2u &= a(\epsilon^2u_x - 2\epsilon u) + b(\epsilon^2u_y - 2\epsilon u), \\ \mathcal{B}^2\mathcal{A}u &= \epsilon^2(au_x + bu_y), \end{aligned}$$

não comutam, esta equação contém erro de separação dado por

$$\text{erro} = \frac{1}{2}\Delta t^3 \left(a^2\partial_x + ab(\partial_x + \partial_y) + b^2\partial_y + \epsilon(a + b) \right) u_0 + O(\Delta t^4), \quad (3.22)$$

com $\epsilon = \epsilon(x, y)$.

Esse exemplo modela um composto que está sendo adveccionado numa distância $a\Delta t$ na direção x e $b\Delta t$ na direção y com taxas dadas pelos valores de ϵ .

Implementamos este problema no software MATLAB com $a = b = 1$ utilizando o método Upwind para resolver a equação de advecção em $1/2\Delta t$, o método de Euler para

resolver a EDO e novamente o método Upwind para resolver a equação de advecção com a outra metade do passo temporal. Assim, resolvemos os três seguintes subproblemas:

$$\begin{aligned}
 \text{Problema A: } u_{i,j}^* &= u_{i,j}^n - \frac{r_x}{2}(u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{r_y}{2}(u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n) \\
 \text{Problema B: } u_{i,j}^{**} &= u_{i,j}^* - \epsilon \Delta t u_{i,j}^* \\
 \text{Problema C: } u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^{**} - \frac{r_x}{2}(u_{i,j}^{**} - u_{i-1,j}^{**}) - \frac{r_y}{2}(u_{i,j}^{**} - u_{i,j-1}^{**})
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

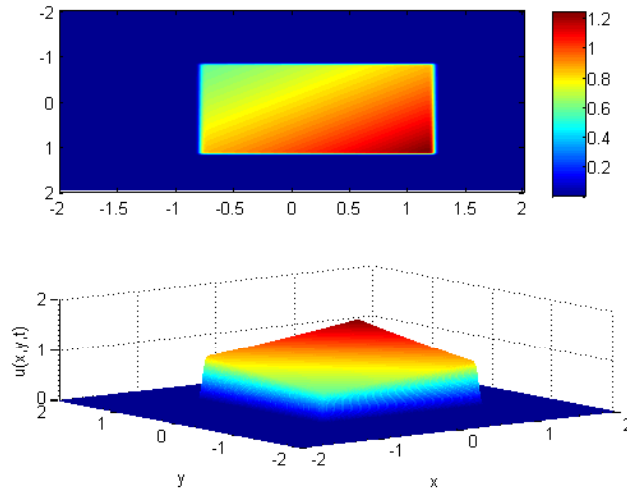


Figura 3.2: Solução da equação de advecção utilizando o separador de Strang com o coeficiente do termo fonte variável.

A figura 3.2 acima representa o mesmo problema ilustrado na figura 3.1, porém com ϵ não constante ($\epsilon = 1 - x - y$), condição inicial (3.8) e $\Delta x = \Delta y = 2e - 03$, $\Delta t = 0.1\Delta x$. Podemos observar que os valores de ϵ influenciam na amplitude da solução do problema de advecção-reação. Comparando com a figura 3.3, que ilustra o mesmo problema utilizando o separador de Godunov, pode parecer que as figuras são idênticas, mas a solução utilizando o separador de Strang fornece um erro um pouco maior que a solução obtida utilizando o separador de Godunov. Esse erro tem ordem de 10^{-4} , mas numericamente este número é significativo.

3.7 Resultados Numéricos

Começamos esta seção considerando o problema de Riemann

$$u_t + a u_x + b u_y = -\epsilon u, \quad (x, y) \in [-2, 2] \times [-2, 2], t > 0 \tag{3.24}$$

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } (x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1] \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{3.25}$$

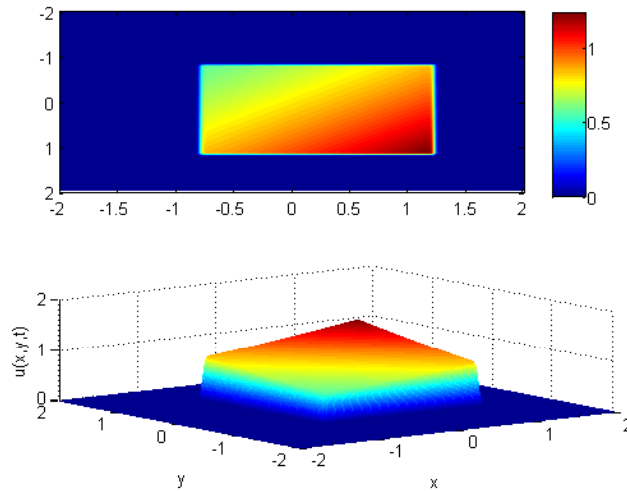


Figura 3.3: Solução da equação de advecção utilizando o separador de Godunov com o coeficiente do termo fonte variável.

A tabela 3.1 apresenta os valores do erros relativos das soluções do problema (3.24)-(3.25), com $\epsilon = 0.5$, utilizando o método Upwind na EDP com diferentes separadores e integradores da EDO $u_t = -\epsilon u$. As malhas utilizadas são todas espacialmente quadradas, com espaçamento temporal $\Delta t = 0.1\Delta x = 0.1\Delta y$ e quantidade de pontos dada por:

$$\begin{aligned} \text{M1: } 16 \times 10^2 \text{ pontos, } \quad \text{M2: } 64 \times 10^2 \text{ pontos, } \quad \text{M3: } 16 \times 10^4 \text{ pontos,} \\ \text{M4: } 25 \times 10^4 \text{ pontos, } \quad \text{M5: } 4 \times 10^6 \text{ pontos.} \end{aligned}$$

Na primeira coluna da tabela utilizamos o método não separador Upwind. Na segunda e terceira coluna utilizamos o separador de Godunov com os métodos Euler e Trapézios (Tr.) (4.1), respectivamente na EDO, e na quarta e quinta coluna utilizamos o separador de Strang com o método de Euler e Trapézios respectivamente na EDO. Podemos observar que o separador de Godunov nos traz melhores resultados quanto ao tamanho do erro.

Malha	Upwind	Upwind+Euler	Up.+Tr.	Up.+Euler+Up.	Up.+Tr.+Up.
M1	0.2098817717	0.2104765566	0.2104882197	0.2127131786	0.2127240737
M2	0.1637138013	0.1639802201	0.1639795725	0.1659066937	0.1659057481
M3	0.1016883960	0.1017264791	0.1017254162	0.1030646087	0.1030635135
M4	0.0957764605	0.0958053830	0.0958045189	0.0970739549	0.0970730669
M5	0.0668755768	0.0668807495	0.0668805536	0.0677845521	0.0677843524

Tabela 3.1: Comparação dos erros cometidos utilizando o método Upwind na EDP homogênea com diferentes separadores e integradores da EDO

Resultado semelhante acontece quando utilizamos o método Lax-Wendroff, apesar de apresentar valores menores dos erros se comparados com o Upwind, quando refinamos a malha, por se tratar de um método de maior ordem (ver tabela 3.2).

Segue abaixo a expressão utilizada para o cálculo do erro relativo

$$erro = \frac{\sum |S_{exata} - S_{numérica}|^2}{\sum |S_{exata}|^2}.$$

Malha	Lax-Wendroff	L-W+Euler	L-W+Tr.	L-W+Euler+L-W	L-W+Tr.+L-W
M1	0.2524750910	0.2525249633	0.2525797966	0.2600600185	0.2601170530
M2	0.1879718266	0.1880100157	0.1880282922	0.1951431894	0.1951625492
M3	0.0998830563	0.0998929948	0.0998945240	0.1032921188	0.1032937612
M4	0.0920486097	0.0920568173	0.0920579127	0.0950663277	0.0950675040
M5	0.0564499021	0.0564523858	0.0564525305	0.0580068399	0.0580069956

Tabela 3.2: Comparação dos erros cometidos utilizando o método Lax-Wendroff na EDP homogênea com diferentes separadores e integradores da EDO

Como o separador de Godunov e os métodos Upwind e Euler são de primeira ordem, os esquemas ilustrados na primeira, segunda e quarta coluna da tabela 3.1 são de primeira ordem. Já na terceira e na quinta coluna os esquemas ilustrados são de segunda ordem, pois o método dos Trapézios tem segunda ordem de precisão.

Analogamente, como o método de Lax-Wendroff é de segunda ordem, todos os esquemas da tabela 3.2 são de segunda ordem, que é a maior ordem do método utilizado nos subproblemas.

Apesar dos métodos não separadores aqui apresentarem o erro relativo um pouco menor que os métodos separadores, nem sempre podemos utilizá-los. Nas equações não lineares por exemplo, dependendo do termo fonte utilizado fica impossível encontrar uma expressão para os métodos não separadores.

Também consideramos o problema de Riemann

$$u_t + \left[\frac{1}{2}u^2\right]_x + \left[\frac{1}{2}u^2\right]_y = -\epsilon u, \quad (x, y) \in [-2.5, 2] \times [-2.5, 2], t > 0 \quad (3.26)$$

$$u(x, y, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } (x, y) \in (-2, 0) \times (-2, 0) \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.27)$$

que é a equação de Burgers bidimensional com ϵ constante.

Nas figuras 3.4, 3.5 e 3.6 temos uma aproximação para a solução do problema de Riemann (3.26)-(3.27) no tempo $t = 1$, obtidas por três tipos de métodos diferentes, onde utilizamos o separador de Godunov, Euler explícito na EDO, $\epsilon = 0.5$, $\Delta x = \Delta y = 0.01$ e $\Delta t = 0.1\Delta x$. A primeira figura, obtida pelo método de alta resolução Chakravarthy -

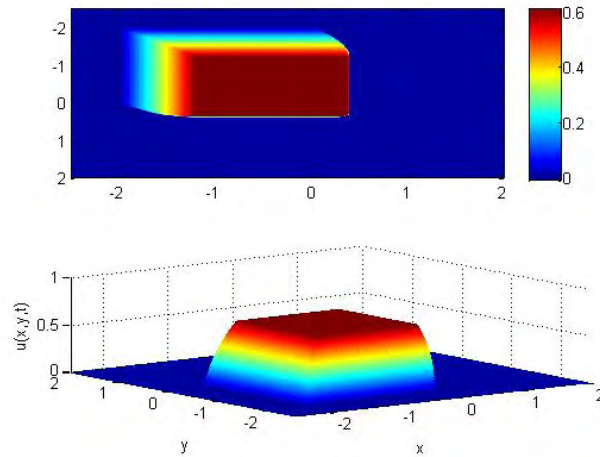


Figura 3.4: Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com o limitador Chakravarthy-Osher na EDP homogênea.

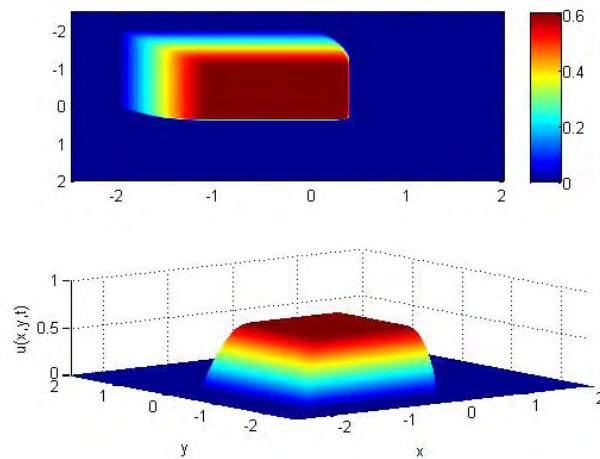


Figura 3.5: Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com método de Godunov sem entropia fixa na EDP homogênea.

Osher, produziu uma aproximação melhor que as outras duas obtidas pelos métodos de primeira e segunda ordem Godunov e Lax-Wendroff, respectivamente, se compararmos com a solução analítica unidimensional.

Observe na figura 3.6 que a solução apresentou oscilação espúria, e isto é devido ao método de segunda ordem Lax - Wendroff.

Aqui há uma certa dificuldade, pois na literatura não encontramos uma expressão correta para a solução analítica de Burgers bidimensional, devido à dificuldade de generalizar os conceitos de choque e rarefação no caso 2D.

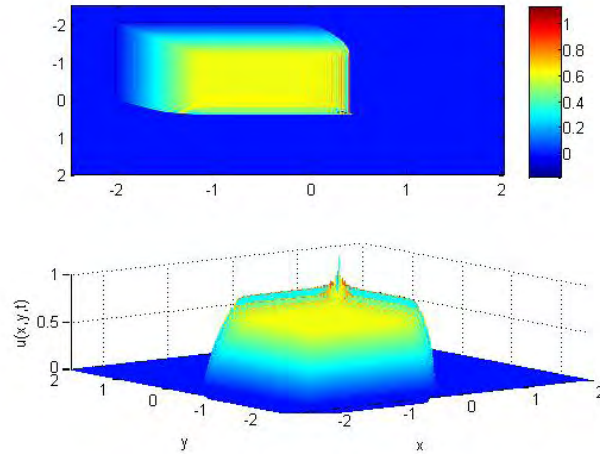


Figura 3.6: Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$ com método Lax-Wendroff na EDP homogênea.

Também consideramos a condição inicial função delta Perkin, com $\beta = 1$:

$$\delta_\beta(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{4\beta} \left(1 + \cos(\pi x/2\beta)\right) \left(1 + \cos(\pi y/2\beta)\right), & \text{se } |x| < 2\beta \text{ e } |y| < 2\beta \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.28)$$

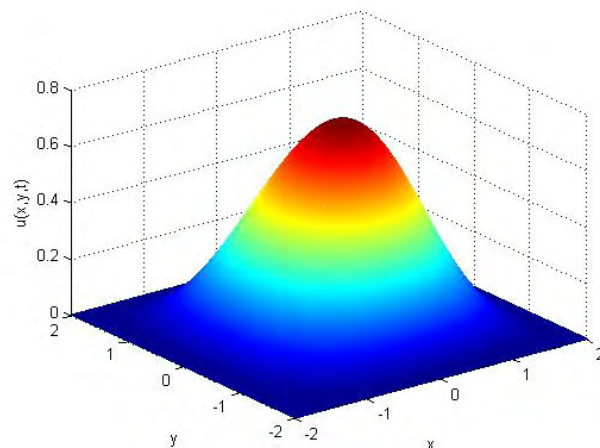


Figura 3.7: Solução aproximada da equação de Burgers com termo fonte $\psi = -\epsilon u$, condição inicial delta Perkin e limitador Van Leer na EDP homogênea.

Nas figuras 3.4, 3.5, 3.6 e 3.7 podemos notar que a ação do termo fonte $\psi = -\epsilon u$ foi diminuir a amplitude do perfil da solução, conforme o esperado. Em todas as figuras a

amplitude máxima sem o termo fonte seria igual a um, sem contar as oscilações espúrias dos métodos. Com o termo fonte essa amplitude diminuiu a uma taxa $\epsilon = 0.5$.

Escolhemos utilizar o separador de Godunov devido sua facilidade em trabalhar com o tipo de termo fonte até aqui utilizado e devido a sua boa aproximação.

Termos Fonte stiff

4.1 Introdução

Em muitos problemas os termos fonte são concentrados em um único ponto, em uma função delta de Dirac (4.4), ou em uma região muito pequena se comparada com o tamanho do domínio. Em alguns casos esse termo pode ser uma fonte externa que depende somente das variáveis espaciais.

Em outros casos a fonte ψ depende somente da solução e a solução desenvolve naturalmente estruturas para que os termos fonte sejam diferentes de zero (e muito grandes) somente em regiões muito pequenas no espaço, por exemplo, quando os termos fonte modelam reações químicas entre espécies diferentes de reação dos fluxos nos casos onde as reações acontecem em escalas de tempo muito mais rápidas que as escalas de tempo da dinâmica do fluido.

Dessa forma as soluções podem desenvolver finas *zonas de reação* em que a atividade químico - cinética é concentrada. Tais problemas são modelados de forma a serem *stiff*, também ditos possuem *stiffness*, muito comum em problemas na cinética (condizente com a referência [16]).

Assim, um problema é *stiff* se é caracterizado por uma forma muito brusca e rápida de decaimento ou crescimento da solução em um pedaço muito pequeno do domínio.

Neste capítulo apresentamos o termo fonte *stiff*. Também apresentamos as dificuldades numéricas encontradas e discutimos alguns exemplos.

4.2 Métodos para a EDO stiff

Supondo que o termo fonte ψ seja uma função da solução u , quando utilizamos métodos separadores precisamos resolver uma equação diferencial ordinária (EDO), e no caso do termo fonte *stiff* essa EDO será também *stiff*.

Se a EDO $u_t = \psi(u)$ for *stiff*, precisamos utilizar um método implícito para usarmos um passo de tempo adequado. Segundo LeVeque [16], mesmo fazendo uso de métodos implícitos estáveis na EDO podemos ter resultados ruins, como veremos nas seções seguintes.

O método implícito mais simples a ser considerado é o método dos Trapézios, que tem segunda ordem de precisão. Supondo que já obtemos a solução do problema que contém a equação hiperbólica sem o termo fonte $u_{i,j}^*$, o método é dado por

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{2} [\psi(u_{i,j}^*) + \psi(u_{i,j}^{n+1})]. \quad (4.1)$$

Observe que, apesar deste método ser implícito, é possível desacoplar o esquema, dependendo do termo fonte, transformando-o em explícito.

Definição 4.1 (A-estável). *Em um método A-estável, a região de estabilidade contém todo o semi plano esquerdo (métodos implícitos). Em problemas não lineares, embora métodos estáveis possam ser usados, trazem junto de si um grande obstáculo. Eles podem não fornecer amortecimento adequado para manter estabilidade. Esse tipo de método é adequado para soluções periódicas.*

Apesar do método dos Trapézios ser de segunda ordem e A-estável, ele não é *stiff* estável. Então, LeVeque [16] recomenda o método TR-BDF2 como um método implícito de segunda ordem.

O método TR-BDF2 foi desenvolvido por Klaus-Jürgen Bathe (conforme observamos na referência [6]) e é um método Runge-Kutta de dois passos que combina o método dos Trapézios em $\Delta t/2$ com o método BDF (do inglês backward differentiation formulas) de segunda ordem, onde utilizamos o resultado do primeiro passo como outro nível de tempo. Para a EDO $u_t = \psi(u)$, o método TR-BDF2 é dado por

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{**} &= u_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{4} [\psi(u_{i,j}^*) + \psi(u_{i,j}^{**})], \\ u_{i,j}^{n+1} &= \frac{1}{3} [4u_{i,j}^{**} - u_{i,j}^* + \Delta t \psi(u_{i,j}^{n+1})]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

No caso em que o termo fonte ψ é função das derivadas espaciais de u , em ambos os métodos aproximamos essas derivadas por diferenças finitas centradas.

4.3 Fluxo de Tráfego com Rampas de Acesso ou Saída

Este modelo é considerado como um termo fonte singular, um tipo de termo fonte *stiff* que leva a uma modificação nas condições de salto de Rankine-Hugoniot (2.16) para determinar a estrutura e velocidade da propagação das descontinuidades.

Consideramos um fluxo de tráfego em uma estrada de mão única com rampas de acesso ou saídas por onde os carros podem entrar e sair da estrada. O número total de carros na estrada não é conservado, e existem fontes positivas e negativas no modelo. Os termos fonte correspondentes são funções delta com força D positiva nos locais em que há rampas de acesso e negativa nas rampas de saídas.

Consideramos aqui que nosso modelo tem apenas uma rampa de acesso com fluxo $D > 0$ em $(x, y) = (x_0, y_0)$, de forma que o termo fonte seja

$$\psi(x) = D\delta(x - x_0, y - y_0), \quad (4.3)$$

em que δ é o delta de Dirac, definido por

$$\delta(x - x_0, y - y_0) = \begin{cases} \infty, & (x, y) = (x_0, y_0), \\ 0, & (x, y) \neq (x_0, y_0). \end{cases} \quad (4.4)$$

Supondo que o tráfego é suficientemente leve e se move com uma velocidade constante a na direção x e b na direção y que independe da densidade u , o modelo é dado por uma equação de advecção linear com a adição do termo fonte (4.3):

$$u_t + a u_x + b u_y = D\delta(x - x_0, y - y_0), \quad (4.5)$$

cuja solução tem um salto de descontinuidade.

Um problema mais interessante acontece para maiores densidades de tráfego, modelado por uma equação não linear na forma (3.1) com fluxos $f = g = u_{\max}u(1 - u)$, em que u_{\max} é a velocidade limite máxima dos carros. Tomando $u_{\max} = 1$, a equação do fluxo de tráfego não linear é dada por

$$u_t + [u(1 - u)]_x + [u(1 - u)]_y = D\delta(x - x_0, y - y_0). \quad (4.6)$$

A figura 4.1 é um exemplo desse fluxo de tráfego em uma dimensão com densidade inicial $u = 0.4$ e um termo fonte de forças $D = 0.008$ e $D = 0.012$ introduzido em $x_0 = 0$ no instante $t = 20$, utilizando $\Delta x = 0.012$, CFL = 0.9 e Δt variável. Essa figura foi produzida pelo software MATLAB mas o problema implementado no software Clawpack (APÊNDICE A) utilizando o Separador de Godunov com o método de alta resolução

utilizando o limitador Van Leer na EDP e Euler progressivo na EDO. O Clawpack é um pacote em linguagem Fortran criado por Handall J. LeVeque para resolver equações diferenciais parciais hiperbólicas (ver referência [17]).

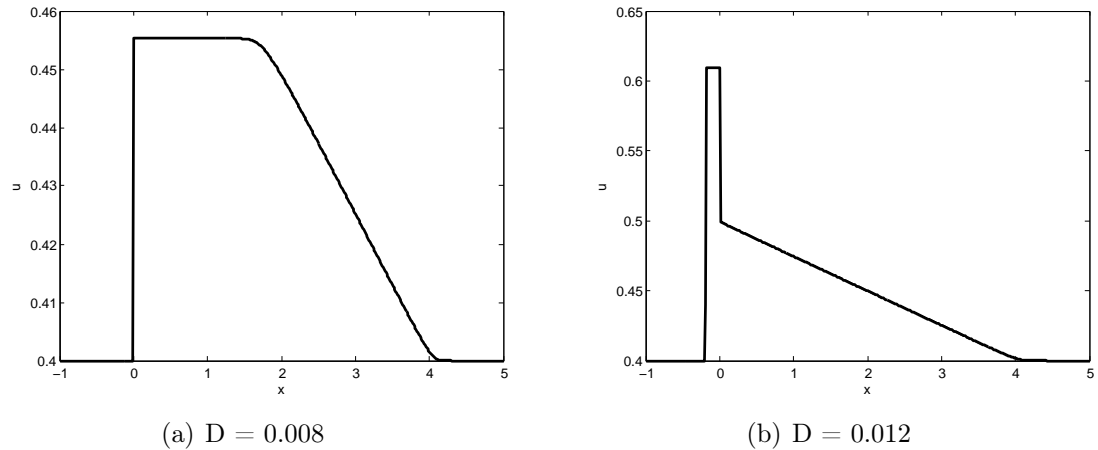


Figura 4.1: Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte na rampa de acesso. Solução produzida no software Clawpack.

O método utilizado para resolver a equação do fluxo de tráfego não linear no software Clawpack é o separador de Godunov, onde foi aplicado o método de Godunov com o limitador Van Leer, e passo de tempo variável.

Já a figura 4.2, produzida e implementada pelo software MATLAB, ilustra o mesmo problema, porém, utilizando o limitador Van Albada ao invés do limitador Van Leer e passo de tempo fixo $\Delta t = 0.1\Delta x$. Como a solução exata deste problema não está disponível, podemos comparar as aproximações feitas pelos dois softwares na figura 4.3.

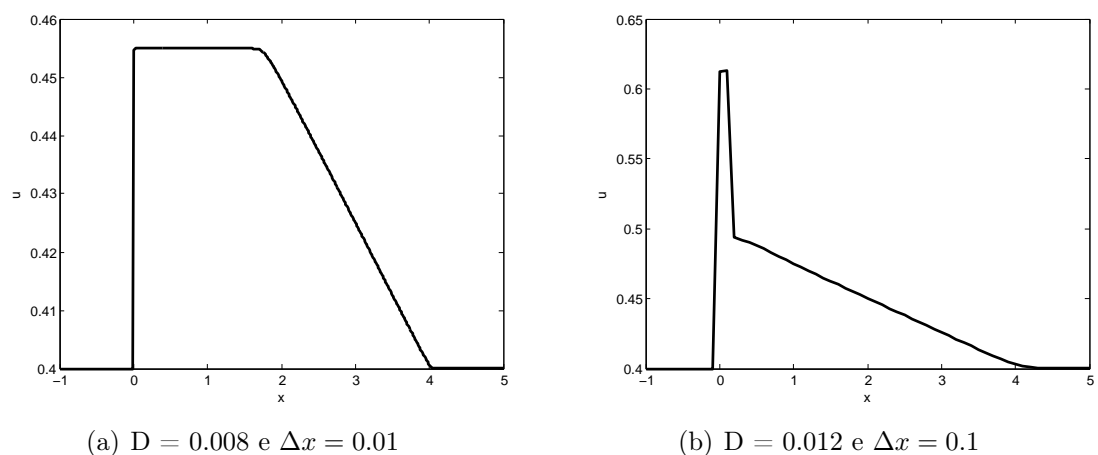


Figura 4.2: Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte na rampa de acesso. Solução produzida no software MATLAB.

Para a força da fonte $D = 0.008$, o perfil é basicamente o mesmo de um problema linear, visto que o congestionamento é observado apenas depois da rampa de acesso e os carros aceleram através de uma onda de rarefação. Já para $D = 0.012$ o fluxo de carros é um pouco maior e causa maior congestionamento, formando uma onda de choque. Isto acontece porque no modelo não linear a velocidade varia com a densidade de carros.

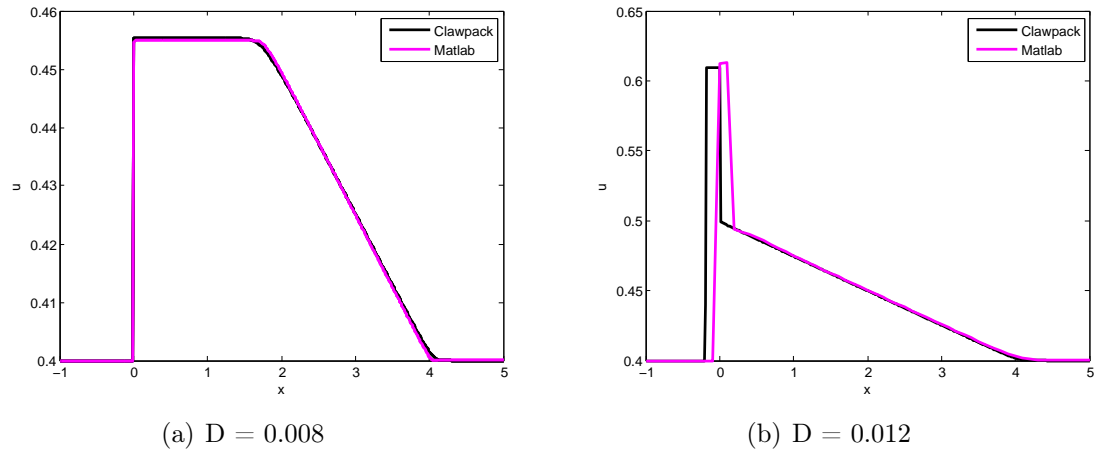


Figura 4.3: Comparação das soluções produzidas pelos dois softwares diferentes: Clawpack e MATLAB.

Mesmo que o fluxo na rampa de acesso for reduzido ou eliminado este congestionamento vai continuar a ser propagado e interromper o tráfego, e por isso algumas rampas de acesso são equipadas com semáforos para que o fluxo de carros nunca atinja um valor crítico.

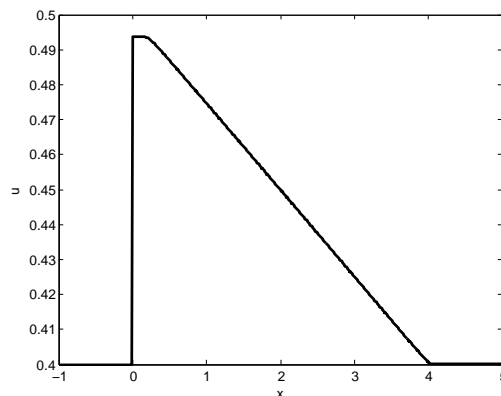


Figura 4.4: Tráfego não linear unidimensional com um termo fonte função delta de força $D = 0.01$ na rampa de acesso.

Podemos determinar a estrutura da solução de Riemann para este modelo de forma explícita. Se $u_l > 0.5$ o choque do congestionamento do tráfego vai ser formado para algum $D > 0$. Se $u_l < 0.5$, como no nosso modelo acima, sempre haverá a formação de choque para $D > (1 - 2u_l)^2/4$, por exemplo em $D = 0.01$, como na figura 4.4, implementada em em $t = 20$, com $\Delta t = 0.1\Delta x$ e $\Delta x = 0.01$, utilizando o Separador de Godunov e método de alta resolução com limitador Van Albada na EDP e Euler progressivo na EDO - Solução produzida no software MATLAB.

4.3.1 Resultados Numéricos no Caso Bidimensional

Como nossa intenção é estudar o caso numérico bidimensional, vamos a ele. Como já dito, a solução para este problema em uma dimensão não está disponível. Então podemos pensar que no caso bidimensional também não está. É difícil dizer aqui que os resultados que vamos apresentar são as soluções do problema, visto que não a conhecemos nem numericamente, como no caso unidimensional.

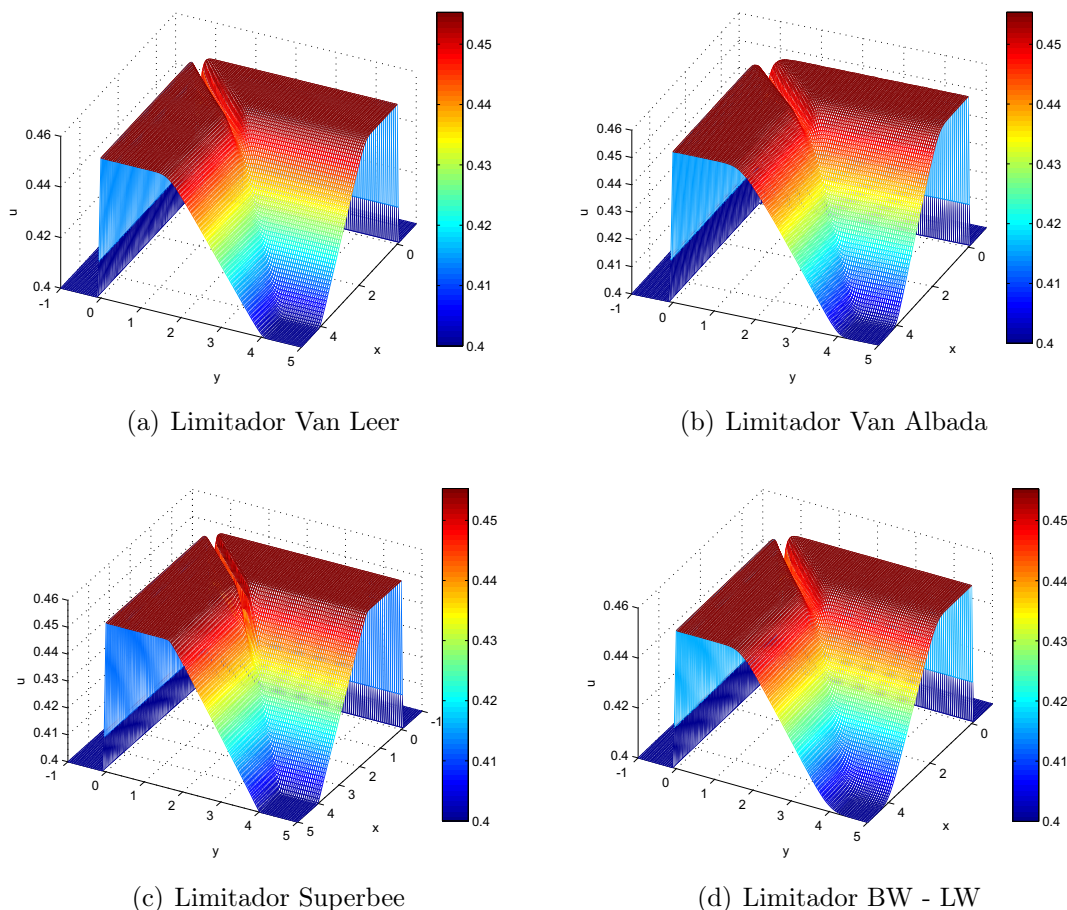


Figura 4.5: Solução numérica bidimensional da equação do tráfego não linear - $D = 0.008$.

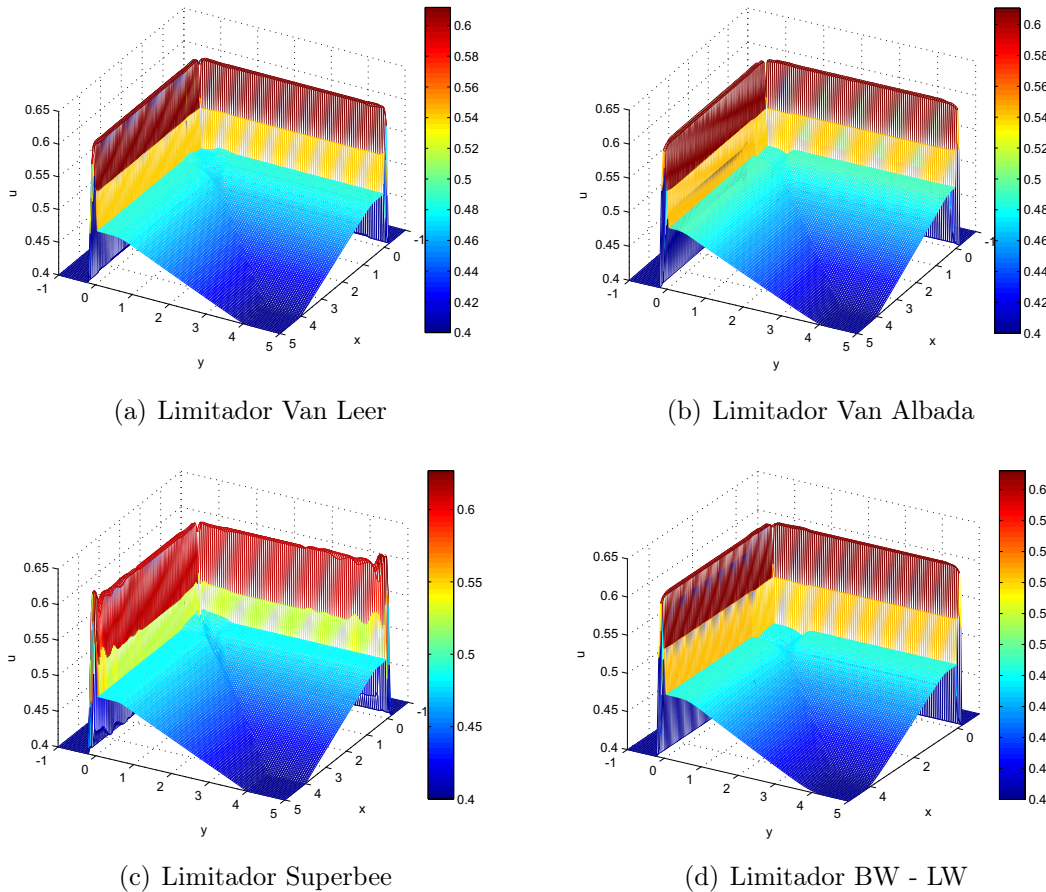


Figura 4.6: Solução numérica bidimensional da equação do tráfego não linear - $D = 0.012$.

Nossos testes numéricos mostram que a solução realmente está convergindo, mas pode ser que converja para uma outra solução. A solução é estável para quase todos os tipos de limitadores utilizados, como podemos ver nas figuras 4.5 e 4.6, em que utilizamos $\Delta x = \Delta y = 0.05$, $\Delta t = 0.005$ e o método de alta resolução com diferentes limitadores.

Observe que na figura 4.5, em que a fonte é $D = 0.008$, que não houve instabilidade para diferentes tipos de limitadores, mas que a solução produzida utilizando o limitador Superbee, representada pela figura 4.5(c), parece aproximar mais o perfil diagonal dos outros dois perfis laterais, enquanto a solução produzida utilizando o limitador Van Albada, representada pela figura 4.5(b), parece ter suavizado mais a profundidade desse perfil diagonal, quando comparamos com as outras figuras.

Já na figura 4.6, onde a fonte é $D = 0.012$, podemos observar que houve certa instabilidade na solução produzida utilizando o limitador Superbee, representada na figura 4.6(c). O perfil diagonal das diferentes soluções também mostraram certa diferença próximo ao ponto onde há uma rampa de acesso, isto é, no ponto $(x_0, y_0) = (0, 0)$. Nas figuras 4.6(a) e 4.6(c), em que foram utilizados os limitadores Van Leer e Superbee respectivamente, esse

perfil diagonal próximo ao ponto $(x_0, y_0) = (0, 0)$ parece ser mais suave que nas figuras 4.6(b) e 4.6(d).

Observe na tabela 4.1 a comparação dos erros cometidos entre os limitadores no método de alta resolução quando refinamos a malha de $\Delta x = \Delta y = 0.1$ para $\Delta x = \Delta y = 0.05$, com $\Delta t = 0.1\Delta x$ em ambos os casos. Vemos claramente que o erro foi inferior no caso da fonte $D = 0.008$ para todos os limitadores utilizados.

D	Van Leer	Van Albada	Superbee	BW - LW
0.008	0.0032622498	0.0035324496	0.0029159573	0.0037214162
0.012	0.0238069823	0.0212468725	0.0291924266	0.0246771404

Tabela 4.1: Comparação dos erros cometidos pelos diferentes limitadores de fluxo quando refinamos a malha.

No caso em que não temos a solução analítica para comparar, esta é uma forma de verificar se a solução numérica está no caminho correto, isto é, comparar as soluções com malhas diferentes. Baseando-nos neste fato, nossos resultados foram bons.

4.4 Equação de Burgers Stiff

Abordaremos agora problemas cujo termo fonte não é uma função delta, mas se aproxima de zero sobre a maioria do domínio e é muito grande sobre finas zonas de reação que evoluem dinamicamente. Para exemplificar, consideramos a equação de Burgers com o termo fonte

$$\psi(u) = \frac{1}{\tau}u(1-u)(u-\beta), \quad (4.7)$$

com $\tau > 0$ e $0 < \beta < 1$. Considerando a EDO

$$u'(t) = \psi(u(t)) \quad (4.8)$$

isolada, observamos que $u = 0$, $u = \beta$ e $u = 1$ são pontos de equilíbrio. O parâmetro τ determina a escala de tempo no qual u se aproxima de um equilíbrio. A equação completa pode ser escrita como

$$u_t + \left[\frac{1}{2}u^2 \right]_x + \left[\frac{1}{2}u^2 \right]_y = \frac{1}{\tau}u(1-u)(u-\beta). \quad (4.9)$$

Para valores de τ muito pequenos, qualquer condição inicial irá se aproximar de uma função degrau com valores 0 e 1 numa escala de tempo muito menor que a propagação da onda hiperbólica.

Para ver como a solução evolui, vamos considerar dois casos:

- Se tomarmos uma condição inicial que satisfaça $u_0 > \beta$ para $x, y < 0$ e $u_0 < \beta$ para $x, y > 0$, a equação de Burgers com o termo fonte (4.7) resulta em uma onda de choque que se move com velocidade $1/2$ para algum valor de β .
- Se a condição inicial for $u_L = 0$ e $u_R = 1$, a solução da equação de Burgers sem o termo fonte será uma onda de rarefação que espalha a descontinuidade inicial por todos os valores intermediários, tornando este caso mais interessante. O termo fonte atua retornando todos os valores para 0 ou 1, fazendo com que a solução seja uma solução suave que se aproxima de uma onda que não se modifica, mas simplesmente se propaga com velocidade s_1 na direção x e s_2 na direção y :

$$u(x, y, t) = w\left(\frac{x - s_1 t}{\tau}\right)w\left(\frac{y - s_2 t}{\tau}\right) = w(\xi)w(\eta). \quad (4.10)$$

Determinamos a forma do perfil w inserindo a forma (4.10) na equação de Burgers com termo fonte (4.9). Tomando $s_1 = s_2 = \beta$ o perfil da solução é dado por

$$w(\xi, \eta) = \frac{1}{4}[1 + \tanh(\xi/2)][1 + \tanh(\eta/2)], \quad (4.11)$$

em que

$$\xi = \frac{x - \beta t}{\tau} \quad \text{e} \quad \eta = \frac{y - \beta t}{\tau}. \quad (4.12)$$

A solução exata para este problema está disponível e é expressa na forma:

$$u(x, y, t) = \begin{cases} \frac{e^{\xi+\eta}}{1+e^{\xi}+e^{\eta}+e^{\xi+\eta}}, & \xi, \eta < 0 \\ \frac{1}{1+e^{-\xi}+e^{-\eta}+e^{-(\xi+\eta)}}, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.13)$$

e pode ser visualizada na figura 4.7 abaixo, com $s_1 = s_2 = \beta = 0.6$ no tempo $t = 3$, $\Delta x = \Delta y = 0.05$.

Exceto no caso em que $u_L = 1$ e $u_R = 0$, a velocidade da propagação da onda depende da estrutura do termo fonte, que nos leva à dificuldades numéricas, como veremos na próxima seção. Calcular uma solução desse tipo, onde a estrutura da malha não é adequada ($\Delta x, \Delta y > \tau$, por exemplo), pode ser mais difícil que aproximar corretamente uma onda de choque. Se os passos espaciais são maiores que τ , não estaremos capturando cada pedaço da descontinuidade ocasionada pelo termo fonte *stiff*.

Na figura 4.8, plotada em $t = 3$, utilizando $\Delta x = \Delta y = 0.05$ e $\tau = 0.001$, observamos a comparação das soluções numéricas da equação de Burgers com termo fonte (4.9) com diferentes métodos numéricos, e podemos observar que a onda se propagou com velocidade errada quando comparamos com a solução do perfil (4.11) na figura 4.8(a). Essa

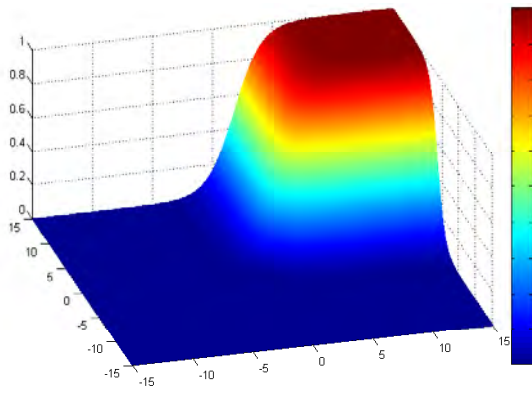
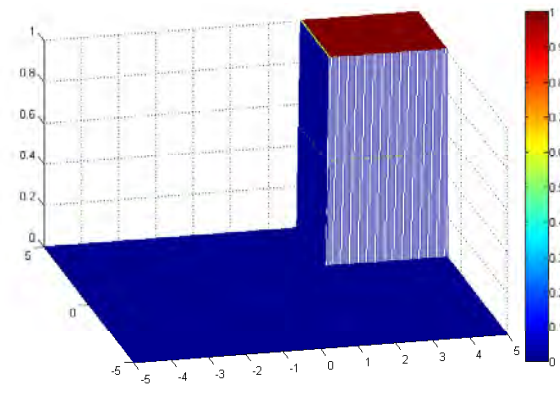
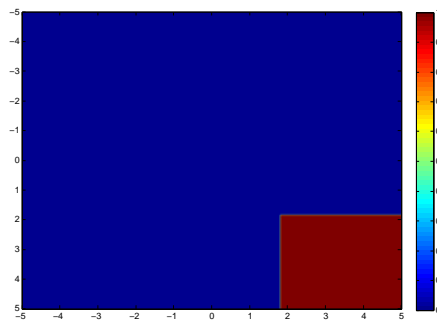
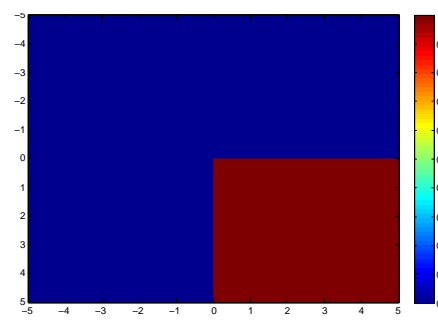
(a) Caso não *stiff* $\tau = 1.12$ (b) Caso *stiff* $\tau = 1e-03$

Figura 4.7: Solução bidimensional exata da equação de Burgers com termo fonte não linear.

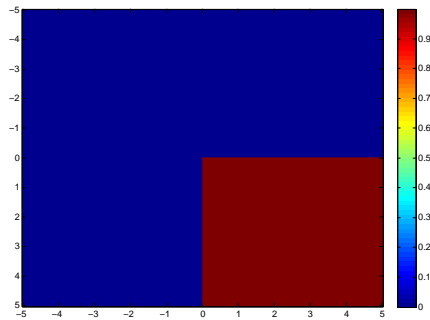
figura foi plotada com o intuito de visualizar melhor o comportamento das ondas. Esse comportamento (velocidade errada) também foi descrito por LeVeque em [16].



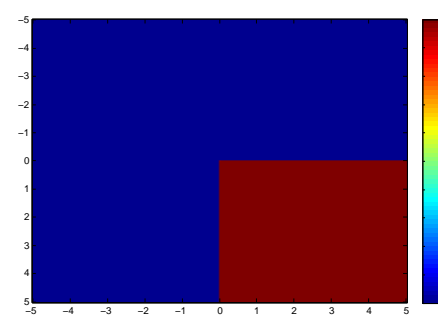
(a) Solução exata



(b) Separador Dimensional/Godunov, Limitador Van Albada na EDP e TR-BDF2 na EDO



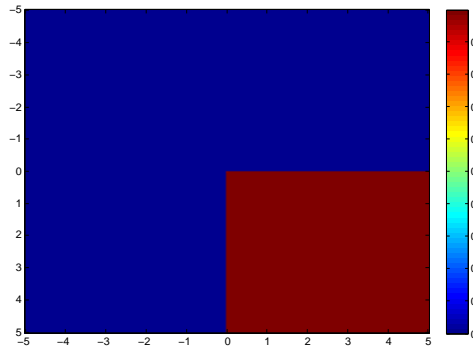
(c) Separador Dimensional/Godunov, Limitador Van Albada na EDP e Trapézios na EDO



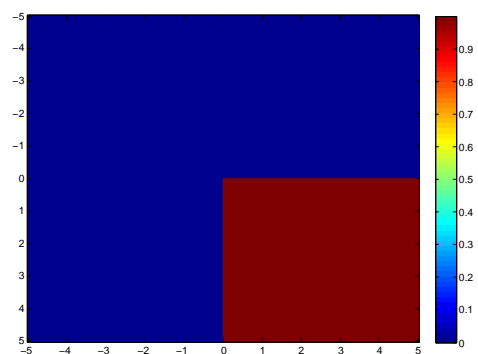
(d) Separador de Godunov, Limitador Van Albada na EDP e Trapézios na EDO

Figura 4.8: Comparação da solução de Burgers com termo fonte não linear - Caso *stiff*.

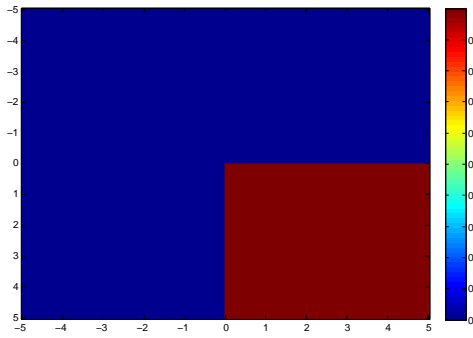
Fazendo uma comparação dos limitadores de fluxo e dos métodos para EDO, podemos observar na figura 4.9 que as soluções numéricas para limitadores e métodos para EDO diferentes foram bastante semelhantes.



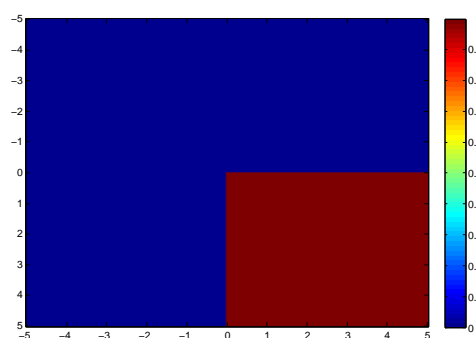
(a) Separador de Godunov, Limitador Van Leer na EDP e Trapézios na EDO



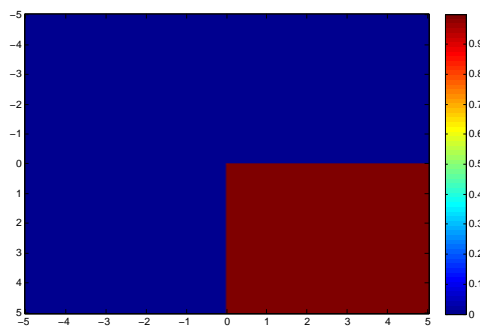
(b) Separador de Godunov, Limitador Van Leer na EDP e TR-BDF2 na EDO



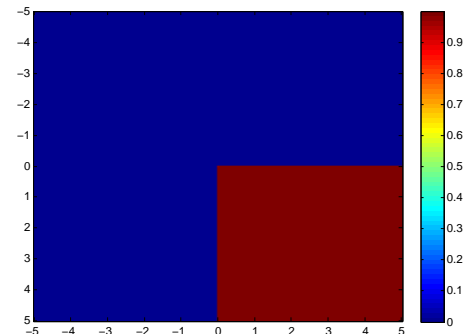
(c) Separador de Godunov, Limitador Superbee na EDP e Trapézios na EDO



(d) Separador de Godunov, Limitador Superbee na EDP e TR-BDF2 na EDO



(e) Separador de Godunov, Limitador BW - LW na EDP e Trapézios na EDO



(f) Separador de Godunov, Limitador BW - LW na EDP e TR-BDF2 na EDO

Figura 4.9: Comparação da solução de Burgers (com termo fonte não linear) com diferentes separadores e métodos para EDO - Caso *stiff*

4.5 Dificuldades Numéricas

Uma equação hiperbólica com termo fonte é chamada *stiff* se a propagação da onda de interesse ocorre numa escala de tempo muito menor que a escala de tempo da EDO $u_t = \psi(u)$ que surge do termo fonte. Consideramos por exemplo a equação de Burgers com termo fonte (4.7), com τ muito pequeno (na escala de 10^{-10}) e uma condição inicial tal que $u_L = 0$ e $u_R = 1$. A solução da onda será uma descontinuidade de u_L a u_R que se propaga, por exemplo, com velocidade β .

Essa transição de u_L a u_R se torna uma área de largura na ordem de τ , e se tomarmos os passos espaciais maiores que τ (o que geralmente acontece), não estaremos resolvendo a estrutura da onda. Também não é possível tomar o passo temporal na ordem de τ devido às restrições do número CFL.

É muito mais difícil resolver uma EDP hiperbólica *stiff* do que resolver uma EDO *stiff*, visto que as reações mais rápidas não estão em equilíbrio em todo domínio. Muitas vezes será necessário utilizar uma malha adaptativa refinada para obter bons resultados. Apesar de existirem bons métodos não separadores, continuaremos abordando os métodos separadores.

Definição 4.2 (L-estável). *Um método L-estável é “mais forte” que um método A-estável. O método L-estável fornece amortecimento adequado para manter a estabilidade, e é adequado para soluções não periódicas.*

Ao nos depararmos com o subproblema onde deve ser resolvida uma EDO *stiff*, poderíamos utilizar efetivamente o método dos Trapézios (4.1) na EDO, porém, quando acoplarmos novamente a solução desse subproblema na solução da equação hiperbólica, esse tipo de método pode nos trazer grandes decepções dependendo do problema de Riemann utilizado. Segundo LeVeque em [16], isto acontece porque o método dos Trapézios é A-estável e não é L-estável (estável em todo o domínio).

Já os métodos BDF possuem essa propriedade, que é necessária para resolver equações *stiff*. Mas esses métodos ainda introduzem uma solução incorreta no caso *stiff*, podendo transportar a onda com uma velocidade errada, por exemplo, se a malha não for muito refinada. Mesmo a equação de advecção mais simples com um termo fonte *stiff* teria resultados similares.

O método numérico para a equação hiperbólica homogênea também pode atrapalhar fortemente a solução acoplada final se introduzir difusão numérica. Da mesma forma, métodos não separadores, como apresentados na seção 3.3, podem acarretar dificuldades similares.

Observação 4.1. *Nem todos os problemas com termo fonte acarretam dificuldades numéricas em malhas não refinadas. LeVeque [16] propõe que se adicionarmos um termo*

viscoso (difusivo) no termo fonte stiff em certos tipos de equação, a solução não mudará significativamente e podemos trabalhar com a malha não refinada obtendo bons resultados.

Porém nosso objetivo não é parabolizar a equação hiperbólica, mas estudar as discontinuidades inerentes à ela.

Problema do Alto Número de Weissenberg

5.1 Introdução

Desde a década de 1970 o Problema do Alto Número de Weissenberg (HWNP, do inglês High Weissenberg Number Problem) tem sido um grande obstáculo computacional na dinâmica dos fluidos.

O termo “HWNP” tem referência na observação empírica de que os métodos numéricos não são eficientes quando o número de Weissenberg ultrapassa certo valor crítico. Esse valor crítico varia dependendo do problema, do método e da malha utilizada. Embora o HWNP tenha surgido há mais de quatro décadas sua origem não é certa. Conforme a literatura, é difícil saber se o problema é um fenômeno puramente numérico ou se é o resultado do modelo das leis constitutivas não ser totalmente adequado. Esse problema ocorre em modelos viscoelásticos onde o campo de tensão tem um papel importante.

O HWNP geralmente dificulta a convergência do método, pois é falho em aproximar perfis exponenciais (ver referência [12]). Para ultrapassar os obstáculos impostos pelo problema é possível tentar duas alternativas. A primeira seria utilizar funções exponenciais nas regiões onde o problema é acentuado. A outra alternativa é fazer uma mudança de variáveis em escalas logarítmicas. Em ambos os casos é necessário que o campo de tensão $\tau(x, y, t)$ seja estritamente positivo, porém não podemos garantir que esta propriedade seja satisfeita.

Nos modelos viscoelásticos Fattal e Kupferman [7] afirmam que o tensor conformação $\sigma(x, y, t)$ é uma quantidade física, relacionada à tensão, que preserva a positividade e é simétrica definida positiva. Esse tensor tem uma representação logarítmica bem definida

dada por $\psi(x, y, t) = \log(\sigma(x, y, t))$. Assim, podemos garantir que o HWNP seja resolvido ao passo que podemos aproximar $\psi(x, y, t)$.

A transformação logarítmica remove a instabilidade que causa os obstáculos computacionais. Ela foi proposta por Fattal [7] e é chamada de Representação por Conformação Logarítmica (LCR, do inglês Log-Conformation Representation).

Denotando o campo velocidade por $\mathbf{u}(x, y, t)$ e o campo de pressão por $\mathbf{p}(x, y, t)$, as equações do momento e da continuidade são dadas respectivamente por

$$-\nabla p + v_s \nabla^2 \mathbf{u} + v_p \nabla \cdot \tau = 0, \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5.2)$$

onde v_s e v_p são as respectivas viscosidades do solvente e do polímero, e o tensor $\tau(x, y, t)$ é dado por

$$\tau = \frac{g(\sigma)}{Wi}(\sigma - \mathbf{I}), \quad (5.3)$$

onde Wi é o número de Weissenberg e $g(\sigma)$ uma função escalar.

Assim, a equação constitutiva escrita como uma equação de evolução para o tensor conformação é dada por

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \sigma - (\nabla \mathbf{u}) \sigma - \sigma (\nabla \mathbf{u})^T = \frac{g(\sigma)}{Wi} P(\sigma), \quad (5.4)$$

onde $P(\sigma)$ é um polinômio. Em [1], [7] e [12] a teoria foi desenvolvida para o caso em uma dimensão (1D). Neste trabalho estendemos esta teoria para o caso 2D.

5.2 O Modelo “Toy”

Fazendo uma sequência de simplificações do modelo original (5.4), Fattal [7] relata dois pontos importantes sobre a origem da instabilidade do HWNP:

- Mesmo que desacoplemos a equação constitutiva da equação do momento a instabilidade permanece, e assim, é possível estudar o surgimento da instabilidade de uma forma mais simples, onde o campo de velocidade é mantido fixo.
- Se substituirmos a equação constitutiva por uma equação escalar a instabilidade continua presente.

Essa sequência de simplificações nos leva ao chamado “modelo toy”, do inglês modelo brinquedo, ou fantasia. Esse modelo é uma equação linear bidimensional para

$\phi = \phi(x, y, t)$, com $(x, y) \in [(0, L) \times (0, L)]$:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x} + b(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y} - c(x, y) \phi = -\frac{1}{Wi} \phi, \quad (5.5)$$

com $a(x, y), b(x, y), c(x, y) > 0$, condição inicial $\phi(x, y, 0) = 1$ e condição de fronteira $\phi(0, 0, t) = 1$.

Assim, podemos estudar as instabilidades do problema (5.5), que é mais fácil de abordar, e supor que a equação constitutiva (5.4) possua o mesmo comportamento.

Esta equação modela um campo ϕ que é convecionado para a direita com velocidades $a(x, y)$ e $b(x, y)$ na direção x e y respectivamente, e cresce exponencialmente a uma taxa de $c(x, y) - Wi^{-1}$. Os coeficientes $a(x, y)$ e $b(x, y)$ representam o vetor velocidade $\mathbf{u} = (u, v)$ na equação (5.4), e $c(x, y)$ o crescimento positivo da taxa $c(x, y) - Wi^{-1}$.

Observe que a taxa $c(x, y) - Wi^{-1}$ nada mais é que o coeficiente de ϕ no termo fonte quando escrevemos a equação (5.5) da seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial x} + b(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial y} = \left(c(x, y) - \frac{1}{Wi} \right) \phi. \quad (5.6)$$

Já que podemos utilizar a equação mais simples (5.6) para estudar a equação mais elaborada (5.4) e esta conserva a mesma instabilidade da segunda, precisamos encontrar formas numéricas para resolver o problema com precisão. Assim, veremos a seguir uma forma de eliminar a barreira da instabilidade.

5.3 Representação por Conformação Logarítmica - LCR

A instabilidade do HWNP surge devido à falha em equilibrar o crescimento exponencial criado pela convecção. A Representação por Conformação Logarítmica (LCR), como já mencionado na introdução, foi proposta por Fattal [7] e tem a função de remover a instabilidade presente na equação (5.5) exatamente trabalhando com uma mudança de variáveis a fim de eliminar o crescimento exponencial desequilibrado.

Para visualizar o problema da instabilidade no HWNP, supomos primeiramente que queremos resolver o problema (5.6) utilizando, por exemplo, o esquema Upwind de primeira ordem. Temos então o esquema

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \phi_{i,j}^n - \frac{a_{i,j} \Delta t}{\Delta x} (\phi_{i,j}^n - \phi_{i-1,j}^n) - \frac{b_{i,j} \Delta t}{\Delta y} (\phi_{i,j}^n - \phi_{i,j-1}^n) + \Delta t \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right) \phi_{i,j}^n, \quad (5.7)$$

em que $a_{i,j} = a(x_i, y_j)$, $b_{i,j} = b(x_i, y_j)$ e $c_{i,j} = c(x_i, y_j)$. Reescrevendo o esquema, temos que

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \left[1 - \frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} - \frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y} + \Delta t \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right) \right] \phi_{i,j}^n + \left[\frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} \right] \phi_{i-1,j}^n + \left[\frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y} \right] \phi_{i,j-1}^n. \quad (5.8)$$

Para que $\phi_{i,j}^{n+1}$ não cresça descontroladamente, precisamos impor a seguinte condição sobre o coeficiente de $\phi_{i,j}^n$:

$$\left[1 - \frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} - \frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y} + \Delta t \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right) \right] \leq 1, \quad (5.9)$$

que é satisfeita se

$$Wi < \frac{1}{c_{i,j}} \quad \text{ou} \quad \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right) \leq \frac{a_{i,j}}{\Delta x} + \frac{b_{i,j}}{\Delta y}. \quad (5.10)$$

Se supormos que a malha computacional é quadrada, isto é, $\Delta x = \Delta y$, teremos

$$\Delta x = \Delta y \leq \frac{a_{i,j} + b_{i,j}}{c_{i,j} - Wi^{-1}}.$$

A condição de estabilidade (5.10) é uma restrição no tamanho da malha espacial, não devemos confundi-la com a condição CFL. Analisando essa condição, observamos que o perfil espacial de ϕ é exponencial, e assim, todo esquema convectivo aplicado será falho em aproximar o problema para a solução correta, tendo em vista a dificuldade em equilibrar a taxa de crescimento multiplicativo.

Ainda que utilizemos um método de alta resolução ou até um método implícito no lugar do método Upwind de primeira ordem, a falha em equilibrar a taxa de crescimento multiplicativo (da solução) no termo fonte ainda persiste. Observamos mais enfaticamente essa falha quando aumentamos o valor de Wi , tratando o termo fonte com um método explícito. A diferença quando utilizamos um método implícito no termo fonte pode ser visualizada na figura 5.6, que compara os diferentes métodos utilizados no termo fonte.

Felizmente existe uma solução para remover a restrição descrita acima, que não é propriamente relativa a estabilidade, mas é uma forma de caracterização de *stiffness*. Essa solução consiste na mudança de variáveis $\psi = \log(\phi)$, a chamada Representação por Conformação Logarítmica (LCR). Assim, substituindo $\phi = \exp(\psi)$ na equação (5.6), e levando em consideração que a função exponencial é contínua e não negativa para todo (x, y, t) , temos

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + a(x, y) \frac{\partial \psi}{\partial x} + b(x, y) \frac{\partial \psi}{\partial y} = \left(c(x, y) - \frac{1}{Wi} \right), \quad (5.11)$$

com condição de fronteira $\psi(0, 0, t) = 0$ e condição inicial $\psi(x, y, 0) = 0$. Desta forma, mesmo que aplicarmos o esquema Upwind não teremos problemas com a restrição dos passos espaciais:

$$\psi_{i,j}^{n+1} = \left[1 - \frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} - \frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y} \right] \psi_{i,j}^n + \left[\frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} \right] \psi_{i-1,j}^n + \left[\frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y} \right] \psi_{i,j-1}^n + \Delta t \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right). \quad (5.12)$$

A fim de recuperar a equação para ϕ , passamos a função exponencial na equação (5.12), obtendo

$$\phi_{i,j}^{n+1} = (\phi_{i,j}^n)^{(1-R_{i,j}-S_{i,j})} (\phi_{i-1,j}^n)^{R_{i,j}} (\phi_{i,j-1}^n)^{S_{i,j}} e^{\Delta t(c_{i,j}-Wi^{-1})}, \quad (5.13)$$

e fazendo a expansão do termo $\exp(C\Delta t)$, $C = c_{i,j} - Wi^{-1}$, temos

$$\phi_{i,j}^{n+1} = (\phi_{i,j}^n)^{(1-R_{i,j}-S_{i,j})} (\phi_{i-1,j}^n)^{R_{i,j}} (\phi_{i,j-1}^n)^{S_{i,j}} + \Delta t \left(c_{i,j} - \frac{1}{Wi} \right) \phi_{i,j}^n, \quad (5.14)$$

em que

$$R_{i,j} = \frac{a_{i,j}\Delta t}{\Delta x} \quad \text{e} \quad S_{i,j} = \frac{b_{i,j}\Delta t}{\Delta y}. \quad (5.15)$$

Agora a condição de estabilidade é bem menos restritiva

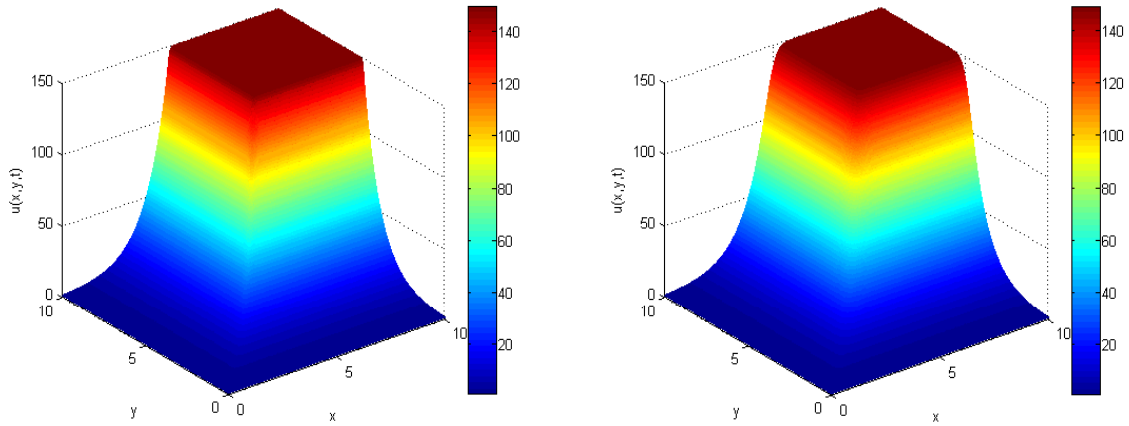
$$\Delta x = \Delta y \leq \frac{a_{i,j} + b_{i,j}}{\log(c_{i,j} - Wi^{-1})},$$

supondo nossa malha espacial quadrada.

5.4 Resultados Numéricos

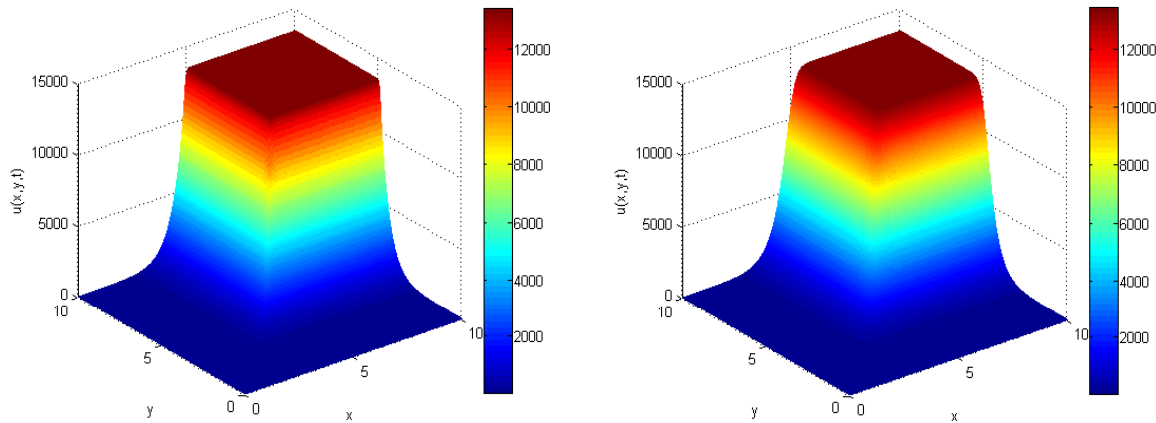
Nesta seção fizemos as comparações das soluções obtidas por métodos de alta resolução e o método LCR. Tomamos o domínio espacial quadrado $0 \leq x, y \leq 10$, com $a_{i,j}$, $b_{i,j}$ e $c_{i,j}$ constantes, $a_{i,j} = a = 1$, $b_{i,j} = b = 1$, $c_{i,j} = c$, condição inicial $\phi(x, y, 0) = 1$ e condição de fronteira $\phi(0, 0, t) = 1$ na equação (5.14). Nas figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 podemos observar os resultados obtidos ao implementarmos no software MATLAB para diferentes valores de Wi e $\Delta x = \Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.002$ e $c = 2$.

O problema particular aqui estudado do HWNP não possui a solução analítica no caso bidimensional. Felizmente temos disponível a solução no caso unidimensional, para que



(a) Alta resolução com separador Van Albada

(b) Método LCR

Figura 5.1: Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 1$.

(a) Alta resolução com separador Van Albada

(b) Método LCR

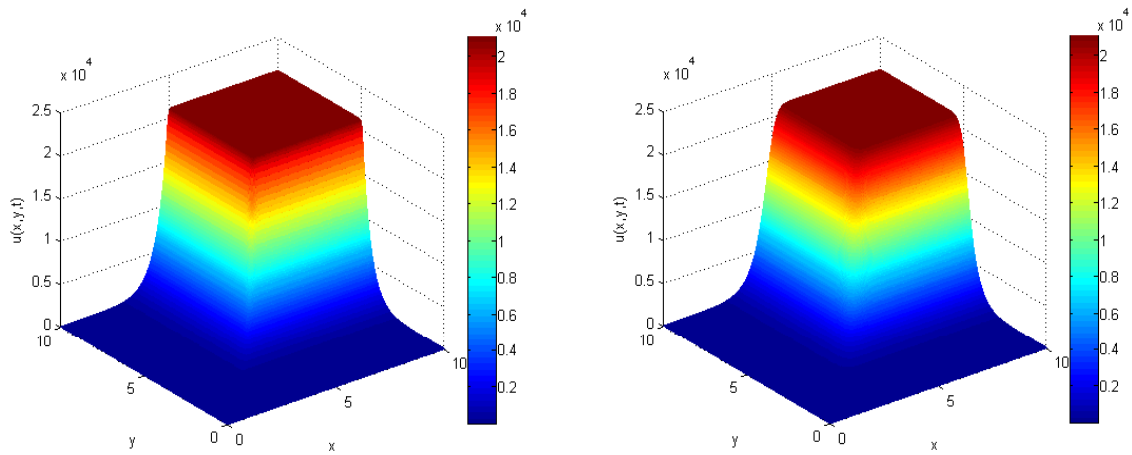
Figura 5.2: Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 10$.

possamos comparar o perfil diagonal das soluções em duas dimensões:

$$u(x, t) = \begin{cases} \exp\left(\frac{Bx}{a}\right) & \text{para } x \leq at, \\ \exp(Bt) & \text{para } at < x, \end{cases} \quad (5.16)$$

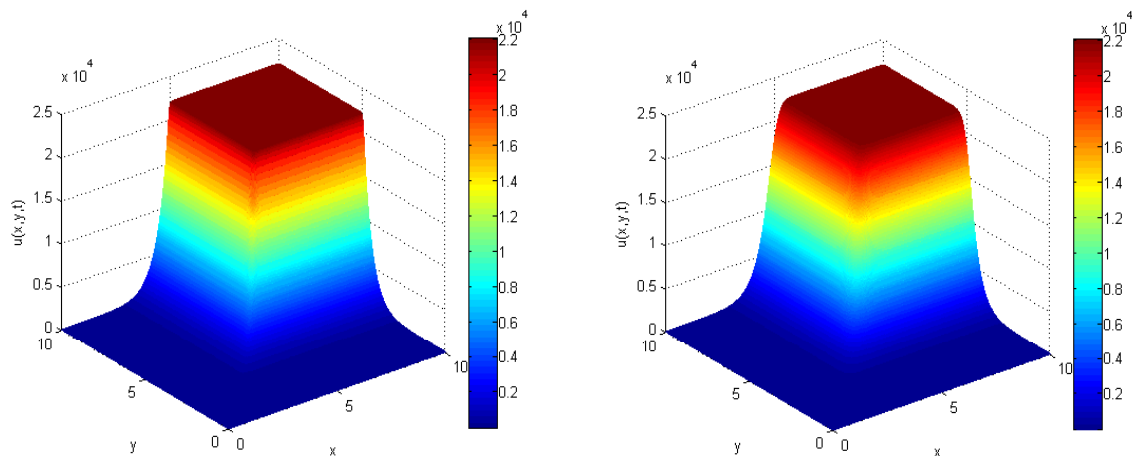
em que $B = c(x) - Wi^{-1}$, na equação em uma dimensão

$$u_t + au_x = \left(c(x) - \frac{1}{Wi}\right)u.$$



(a) Alta resolução com separador Van Albada

(b) Método LCR

Figura 5.3: Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 100$.

(a) Alta resolução com separador Van Albada

(b) Método LCR

Figura 5.4: Soluções numéricas bidimensionais do problema modelo do HWNP, com $Wi = 1000$.

Na figura 5.5 estão ilustradas as comparações dos perfis diagonais das soluções produzidas pelo método de alta resolução com diferentes limitadores de fluxo, com a solução exata em uma dimensão e com o método LCR (utilizando Upwind). Aqui utilizamos o método implícito TR-BDF2 no termo fonte de todas as soluções, $\Delta x = \Delta y = 0.1$, $\Delta t = 0.01$ e $c = 2$. Todos os limitadores nos deram boa convergência.

Observe que o método LCR com Upwind na EDP homogênea e TR-BDF2 na EDO controla muito bem o crescimento multiplicativo, mas suaviza demais a solução próximo à descontinuidade, enquanto o método de alta resolução não suaviza tanto. Isso pode ser superado se ao invés de utilizarmos o método Upwind na EDP homogênea, substituirmos

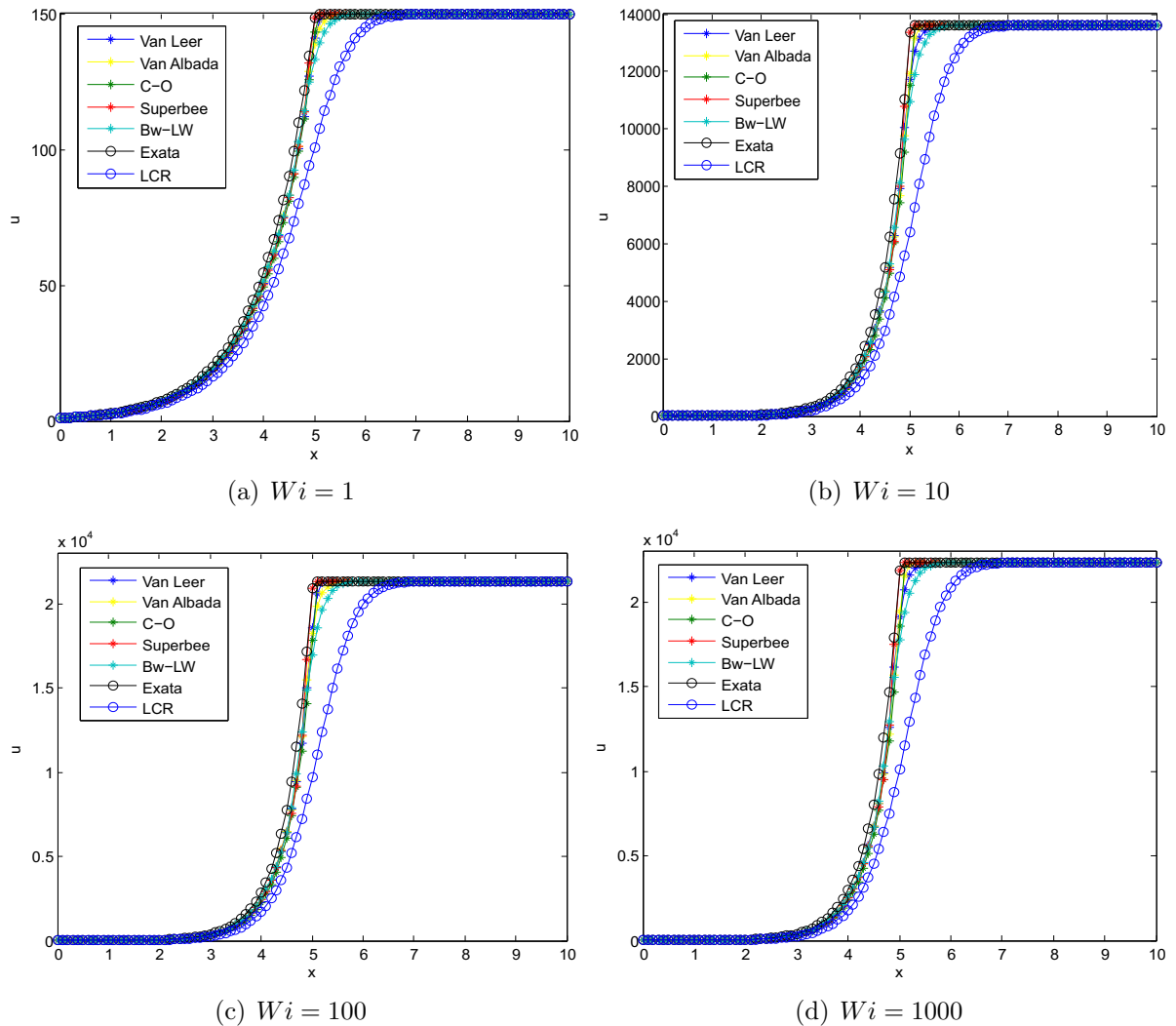


Figura 5.5: Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP com a solução exata em 1D para diferentes Wi .

por um método de alta ordem. Como nosso objetivo nesta seção é analisar o crescimento multiplicativo, não faremos as simulações acima comentadas.

O crescimento multiplicativo a que nos referimos, se dá no final do domínio, aproximadamente em $7 < x \leq 10$ na figura 5.5.

Já na figura 5.6 observamos as comparações dos diferentes métodos quando tratamos o termo fonte de forma diferenciada, utilizando o método implícito TR-BDF2 e o método explícito de Euler progressivo.

Quando tratamos o termo fonte com o método implícito TR-BDF2, o método de alta resolução e até o método Upwind controlam bem o crescimento multiplicativo. Porém isto não acontece quando tratamos o termo fonte com o método explícito de Euler progressivo, como vemos na figura 5.6. Tanto o método de alta resolução quanto o método Upwind

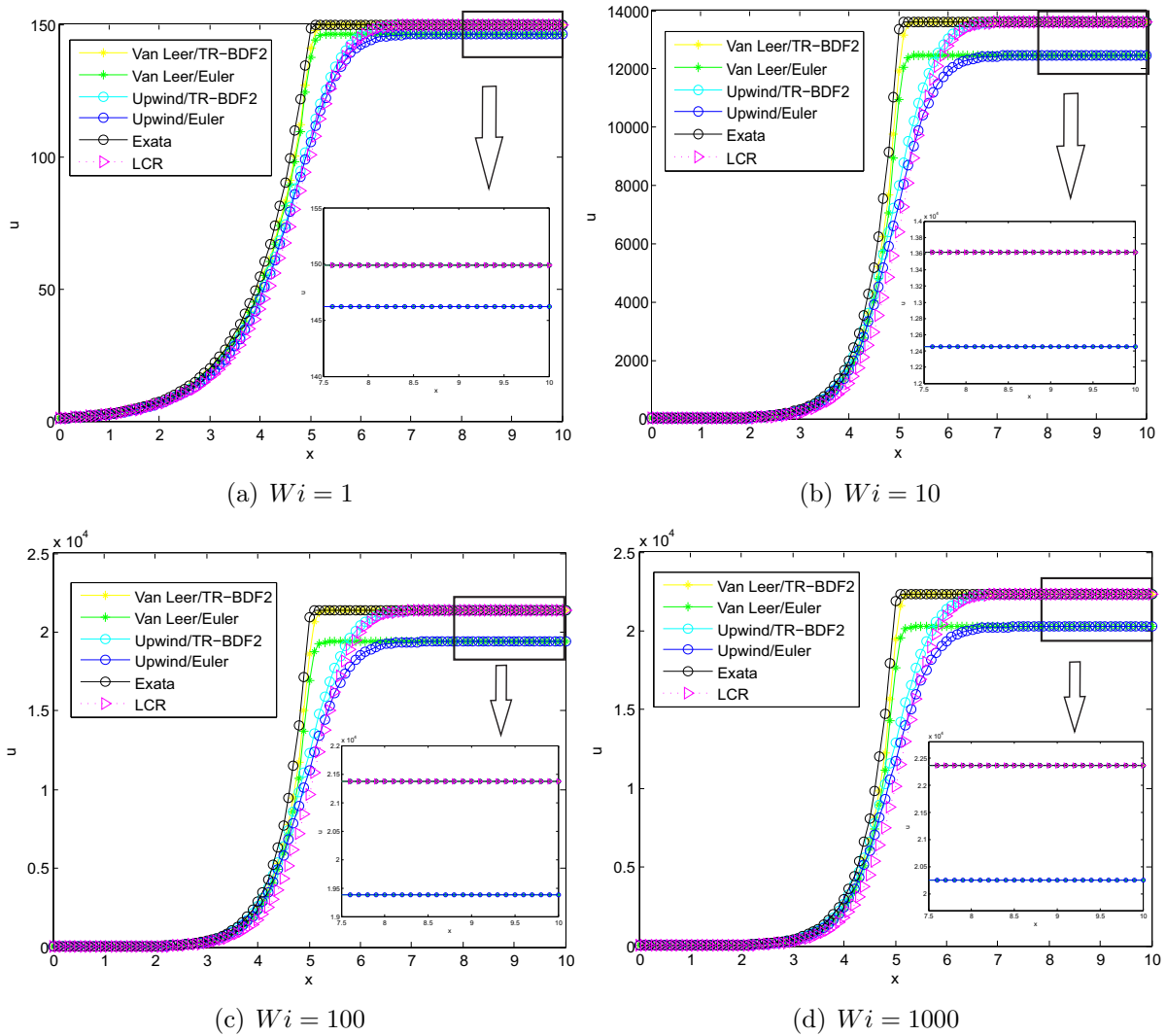


Figura 5.6: Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP, levando em conta os métodos para EDO aplicados no termo fonte.

não controlam corretamente o crescimento multiplicativo da solução quando utilizamos um método explícito no termo fonte.

Método	$Wi = 1$	$Wi = 10$	$Wi = 100$	$Wi = 1000$
Van Leer/TR-BDF2	2.085799e-05	1.429695e-04	1.642536e-04	1.664913e-04
Van Leer/Euler	0.0245771820	0.0854298682	0.0932638538	0.0940630014
Superbee/TR-BDF2	2.085799e-05	1.429695e-04	1.642536e-04	1.664913e-04
Superbee/Euler	0.0245771820	0.0854298682	0.0932638538	0.0940630014
Upwind/TR-BDF2	2.085799e-05	1.429694e-04	1.642536e-04	1.664913e-04
Upwind/Euler	0.0245771820	0.0854298682	0.0932638538	0.0940630014
LCR	3.07225e-012	5.71801e-012	6.04487e-012	6.01656e-012

Tabela 5.1: Comparação dos erros relativos cometidos utilizando o método de alta resolução com Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte.

A tabela 5.1 nos mostra os erros relativos das soluções numéricas com relação a solução exata em 1D, em que utilizamos $\Delta x = \Delta y = 0.1$, $\Delta t = 0.01$ e $c = 2$. Esses erros foram calculados somente na parte que nos interessa, que é a região do crescimento multiplicativo. Observe que quando aumentamos Wi o erro aumenta levemente para todos os métodos, e os valores dos erros praticamente se coincidem nos casos onde utilizamos o método explícito de Euler. Da mesma forma, onde utilizamos o método implícito TR-BDF2, os valores dos erros são praticamente iguais. O método LCR controla muito melhor o crescimento multiplicativo da solução.

Na tabela 5.2 podemos observar melhor a diferença entre as soluções com relação ao crescimento multiplicativo, que é a região do final do domínio.

Método	$Wi = 1$	$Wi = 10$	$Wi = 100$	$Wi = 1000$
Van Leer/TR-BDF2	0.0031267127	1.9466711246	3.5106511502	3.7226012819
Van Leer/Euler	3.6842359921	1.16321e+003	1.99336e+003	2.10316e+003
Superbee/TR-BDF2	0.0031267127	1.9466711246	3.5106511502	3.7226012819
Superbee/Euler	3.6842359921	1.16321e+003	1.99336e+003	2.10316e+003
Upwind/TR-BDF2	0.0031267125	1.9466710946	3.5106511012	3.7226012304
Upwind/Euler	3.6842359923	1.16321e+003	1.99336e+003	2.10316e+003
LCR	1.94233e-010	3.21197e-008	5.36856e-008	5.51699e-008

Tabela 5.2: Comparação dos erros absolutos cometidos utilizando o método de alta resolução, Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte.

Apesar de apresentar erros de 3 unidades quando aumentamos Wi , observamos na tabela acima que as soluções onde utilizamos TR-BDF2 na EDO apresentaram bons resultados, se compararmos as escalas que são de 10^4 . Enquanto, onde utilizamos o método de Euler explícito os erros estão na escala de 10^3 .

Se refinarmos a malha, como nas soluções das figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 (com $\Delta x = \Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.002$ e $c = 2$) e compararmos seus perfis diagonais com a solução analítica, observamos que a suavização diminui (principalmente a solução que usa LCR com Upwind na EDP homogênea), e principalmente: o crescimento multiplicativo das soluções onde utilizamos o método explícito se aproxima mais da solução exata – conforme podemos visualizar na figura 5.7.

Podemos observar melhor essa diferença do crescimento multiplicativo quando refinamos a malha na tabela 5.3, que mostra os erros absolutos dos perfis diagonais das soluções numéricas em comparação com a solução analítica em uma dimensão. Aqui também calculamos o erro absoluto de forma a analisar o crescimento multiplicativo da solução, ou seja, no final do domínio espacial.

Porém, o tempo de implementação das soluções com malha refinada é muito grande, o que causa custo computacional. No caso que implementamos aqui, o custo computacional

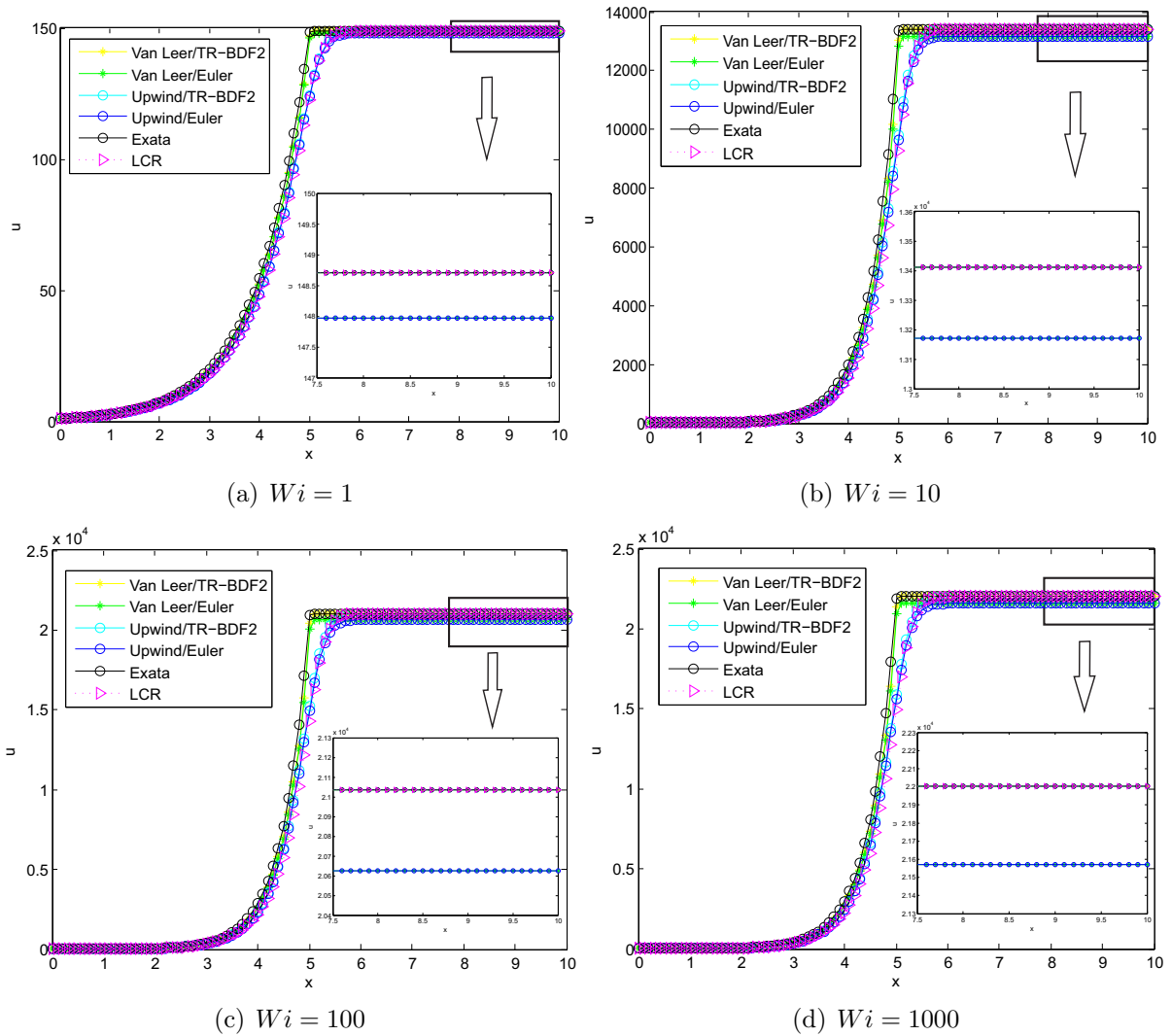


Figura 5.7: Comparação dos perfis diagonais das soluções numéricas do problema modelo do HWNP com a solução exata em 1D - refinando a malha.

foi cerca de 60% maior. Apesar de melhorar o crescimento exponencial, ainda continua tendo uma falha considerável quando utilizamos um método explícito no termo fonte.

Método	$Wi = 1$	$Wi = 10$	$Wi = 100$	$Wi = 1000$
Van Leer/TR-BDF2	1.23954e-004	0.0766593882	0.1381555078	0.1464865660
Van Leer/Euler	0.7410061896	2.39383e+002	4.11504e+002	4.34311e+002
Superbee/TR-BDF2	1.23954e-004	0.0766593882	0.1381555078	0.1464865660
Superbee/Euler	0.7410061896	2.39383e+002	4.11504e+002	4.34311e+002
Upwind/TR-BDF2	1.23954e-004	0.0766593882	0.1381555078	0.1464865660
Upwind/Euler	0.7410061896	2.39383e+002	4.11504e+002	4.34311e+002
LCR	6.10214e-011	3.35967e-009	1.85318e-008	7.26868e-009

Tabela 5.3: Comparação dos erros absolutos cometidos utilizando o método de alta resolução, Upwind e LCR, comparando também os métodos aplicados no termo fonte – Refinando a malha.

Considerações Finais

No presente trabalho apresentamos o estudo das equações diferenciais parciais (EDP's) hiperbólicas em duas dimensões com termos fonte, em especial o termo fonte *stiff*. Abordamos primeiramente algumas definições e esquemas numéricos para a equação sem o termo fonte, isto é, para a EDP homogênea, e então tratamos dos métodos numéricos para a equação com termo fonte inserindo métodos para a equação diferencial ordinária (EDO) *stiff* e não *stiff*.

Fizemos os testes numéricos nas equações mais simples e com os termos fontes não *stiff* para então estudar dois tipos de equações não lineares (equação do tráfego com rampas e de Burgers) e uma linear (equação de advecção) com termos fonte *stiff*. Estas foram as três principais equações estudadas neste trabalho.

A primeira equação não linear mencionada no estudo de *stiffness* se trata da equação do tráfego não linear com rampas de acesso, que apesar de não possuir uma solução analítica, comparamos o caso em uma dimensão com a solução numérica apresentada pelo autor LeVeque [16] no software Clawpack. O caso bidimensional desta equação não pôde ser comparado nem numericamente, entretanto, implementado no software MATLAB com um método de alta resolução e comparando com vários limitadores, refinando a malha computacional e utilizando métodos implícitos no termo fonte, não constatamos instabilidades que poderiam nos levar a acreditar que nossa solução numérica está errada.

A segunda equação não linear anteriormente citada é a equação de Burgers com um termo fonte especial que se caracteriza *stiff* pelo fato de se aproximar muito de zero sobre a maioria do domínio e ser muito grande em outras partes. Como a solução analítica neste caso está disponível, ficou claro a partir dos resultados aqui apresentados que a solução numérica não apresentou instabilidade, mas suas curvas características se propagaram

com velocidades erradas. Esse comportamento era esperado no caso bidimensional, visto que o mesmo aconteceu no trabalho de LeVeque [16] em uma dimensão.

A última equação que assinalamos relacionada ao *stiffness* se trata de um problema particular do HWNP. Os estudos deste problema em uma dimensão mostram que mesmo métodos de alta resolução no termo convectivo ou métodos implícitos para a EDP homogênea não eram capazes de equilibrar corretamente a taxa de crescimento multiplicativo da solução como o método LCR podia fazer. Nós descobrimos que quando tratamos o termo fonte com um método implícito esta situação muda de figura. Mesmo utilizando o método Upwind no termo convectivo com o método implícito TR-BDF2 no termo fonte, os resultados obtidos mostraram que a solução controlou bem o crescimento multiplicativo, porém ainda não tão bem quanto o método LCR. Como neste caso a solução analítica em duas dimensões não está disponível, comparamos a solução exata disponível em uma dimensão com os perfis diagonais das soluções bidimensionais.

Como trabalho futuro, propomos utilizar o método implícito TR-BDF2 no termo fonte do HWNP juntamente com o método LCR, utilizando o separador Godunov. Também propomos o uso deste método de EDO em outros tipos de equações não lineares e/ou com termo fonte não linear ou com comportamento *stiff*.

Referências Bibliográficas

- [1] AFONSO, A. M., PINHO, F. T., ALVES, M. A., “*The Kernel-Conformation Constitutive Laws*”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 167-168: 30-37, 2012.
- [2] BERTOCO, J., “*Simulação Numérica de Equações de Conservação Usando Esquemas “Upwind”*”. Dissertação de Mestrado, ICMC - USP, 2012.
- [3] BEZERRA, D. J., “*Métodos Numéricos Para Leis de Conservação*”. Dissertação de Mestrado, ICMC-USP, São Carlos, 2003.
- [4] BIELÇA, L. A., “*Leis de Conservação Hiperbólicas com Termo Fonte: Solução pelo Método de Diferenças Finitas Usando Representação por Log-Conformation*”. Relatório IC-FAPESP, 2012.
- [5] CUMINATO, J. A., MENEGUETTE, M., “*Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas*”. ICMC/USP - São Carlos, 2000.
- [6] DHARMARAJA, S., “*An Analysis of the TR-BDF2 Integration Scheme*”. Dissertação de Mestrado, School of Engineering in Partial Fulfillment - Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [7] FATTAL, R., KUPFERMAN, R., “*Time-Dependent Simulation of Viscoelastic Flows at High Weissenberg Number Using the Log-Conformation Representation*”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 126:23-37, 2005.
- [8] FORTUNA, A. O., “*Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*”. EDUSP, 2000.
- [9] GOODMAN, J. B., LEVEQUE, R. J., “*On the Accuracy of Stable Schemes for 2D Scalar Conservation Laws*”. *Math. Comp.*, 45, pg.15-21, 1985.
- [10] GUCKENHEIMER, J., “*Shocks and Rarefactions in Two Space Dimensions*”. University of California - Santa Cruz, 1974.

-
- [11] HAO, J., PAN, T. W., “*Simulation of High Wessenberg Number: Viscoelastic Flow by a Finite Element Method*”. Applied Mathematics Letters, 20: 908-933, 2007.
- [12] HULSEN, M. A., FATTAL, R., KUPFERMAN, R., “*Flow of Viscoelastic Fluids Past a Cylinder at High Weissenberg Number: Stabilized Simulations Using Matrix Logarithms*”. J. Non-Newtonian Fluid Mechanics, 127:27-39, 2005.
- [13] LANEY, C. B., “*Computational Gasdynamics*”. Cambridge University Press, New York, 1998.
- [14] LEVEQUE, R. J., “*CLAWPACK Version 4.3 User’s Guide*”. University of Washington, 2006.
- [15] LEVEQUE, R. J., “*Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*”. University of Washington, Seattle, Washington, 2007.
- [16] LEVEQUE, R. J., “*Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*”. Cambridge University Press, New York, 2002.
- [17] LEVEQUE, R. J., “*Numerical Methods for Conservation Laws*”. Birkhauser, Basel, 1992.
- [18] LINDQUIST, W. B., “*Construction of Solutions for Two Dimensional Riemann Problems*”. Courant Mathematics and Computing Laboratory, New York University, 1984.
- [19] MARTINEZ, D.M., “*Esquemas Numéricos para Equações Hiperbólicas e Aplicações*”. Dissertação de Mestrado, ICMC - USP, 2001.
- [20] MARTINS, F.P., “*Desenvolvimento de um Método Numérico Implícito para a Simulação de Escoamentos Viscoelásticos com Superfícies Livres*”. Dissertação de Mestrado, ICMC - USP, 2009.
- [21] MARTINS, F.P., “*Introdução ao método de volumes finitos para a equação 2D de Burgers*”. Relatório IC-FAPESP, 2006.
- [22] THOMAS, J. W., “*Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*”. Springer, 1995.
- [23] THOMAS, J. W., “*Numerical Partial Differential Equations: Conservation Laws and Elliptic Equations*”. Springer, 1999.

- [24] TORO, E.F., *“Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction”*. Springer, 1999.
- [25] ZHENG, Y., *Systems of Conservation Laws: Two-Dimensional Riemann Problems*”. Birkhauser Boston, 2001.
- [26] ZHENG, Y.; ZHANG, T., *“Two - Dimensional Riemann Problem for a Single Conservation Law”*. Transactions of the American Mathematical Society, Vol 312, N. 2, 1989.

O Software Clawpack

A.1 Introdução

Neste capítulo faremos uma espécie de tutorial do software Clawpack.

O Clawpack é um pacote em linguagem Fortran criado por Handall J. Leveque para resolver equações diferenciais parciais hiperbólicas em 1, 2 e 3 dimensões espaciais. Ele roda em sistemas operacionais baseados em Linux. Se o usuário não tiver o Linux instalado e não quiser formatar seu computador (ou instalar um segundo sistema operacional), é recomendado que ele instale uma máquina virtual.

No Clawpack, os problemas já estão implementados (em linguagem Fortran) e as soluções são visualizadas pelo software Python, já instalado. Ele está pronto para rodar, assim que for instalado.

A máquina virtual é um software que simula um computador virtual dentro do computador real. Ela possibilita a instalação de vários sistemas operacionais, e é rápida e fácil de usar.

Faremos então, este breve tutorial baseando-nos na máquina virtual.

A.2 Instalação

Para instalar a máquina virtual, acesse a página da internet

<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>

e escolha a plataforma compatível com o sistema operacional instalado na sua máquina real, ou seja, no seu computador físico. Para o sistema operacional Windows, por exemplo, escolha a opção

VirtualBox N for Windows hosts

onde N é o número mais recente da versão, e clique em **x86/amd64**. Após o download, siga as instruções de instalação.

Após ter baixado e instalado a máquina virtual, é necessário baixar a imagem de disco do Clawpack, que vai funcionar como um sistema operacional na máquina virtual. Para isto, acesse a página

<http://depts.washington.edu/clawpack/VM/>

O arquivo estará na forma VirtualClaw-N.vdi.zip - onde N é o número da versão. Baixe a versão mais recente.

Após ter baixado e descompactado a imagem de disco da máquina virtual, instale o Clawpack dentro dela. Para isto é necessário seguir as instruções:

- Inicie o VirtualBox;
- Clique no botão “Novo”, próximo ao canto superior esquerdo;
- Clique em “Próximo” na página inicial;
- Digite um nome para a máquina virtual (colocar o que quiser), por tipo de sistema operacional;
- Selecione “Linux”, e para a versão, selecione “Ubuntu”. Clique em “Próximo”;
- Digite a quantidade de memória para dar a máquina virtual (MV), em megabytes. Dar tanto quanto você pode poupar, sendo 512MB o mínimo recomendado. Clique em “Próximo”;
- Clique em “Usar disco rígido existente”, em seguida, clique no ícone da pasta ao lado da lista de discos;
- No Gerenciador de mídia virtual que aparece, selecione a imagem de disco da máquina virtual que você baixou no site da classe;
- Ignore o aviso de erro e clique em “Próximo” e em seguida, clique em “Concluir”; A sua nova máquina virtual deve aparecer no lado esquerdo da janela do VirtualBox.

Após ter configurado a MV no VirtualBox, inicie clicando duas vezes na lista de MVs em seu sistema. A máquina virtual vai demorar um pouco para iniciar, e irá exibir algumas mensagens explicando sobre o ponteiro do mouse e a captura do teclado.

Após a MV concluir a inicialização, ela vai apresentar uma tela de login. Clique no botão rotulado “Clawpack User” para entrar como **clawuser**. A senha também é **clawuser**.

Clique no homem verde que corre no canto inferior direito e em seguida clique em “Shut Down” para sair da MV. Você também pode suspender a máquina clicando em “Suspend”, que preserva a memória e é útil se um trabalho longo está em execução na máquina virtual e você deseja reiniciar depois de onde parou.

Você pode encontrar mais detalhes sobre a instalação da máquina virtual Clawpack em

<http://depts.washington.edu/clawpack/users/vm.html#vm>

A.3 Utilizando o Clawpack

Após ter feito o login, a área de trabalho aparecerá. Dê um clique duplo na pasta “Home” e depois em “clawpack-N”. A partir daqui, precisamos selecionar o diretório que contém o problema a ser implementado. Nesta versão do Clawpack, o problema é implementado e também pode ser visualizado.

Se quisermos, por exemplo, implementar a equação de advecção em 2D com velocidades constantes e condições de fronteira periódicas, devemos seguir os passos:

```
apps/advection/2d/
```

o problema está implementado na pasta “example1”, e agora é necessário que você clique nesta pasta com o botão direito do mouse e escolha a opção “Open Terminal Here”, que permitirá que você abra o terminal neste diretório.

Isso poderia ser feito de outra forma, mais trabalhosa: No canto inferior esquerdo da janela do sistema operacional, clique em “Command Prompt”, que abrirá uma janela do prompt de comando. Então, digite o caminho do diretório desejado precedido por “cd”. Por exemplo, para implementar o problema anteriormente citado, digite no prompt de comando (no caso em que sua versão do Clawpack é 4.6.1):

```
cd clawpack-4.6.1/apps/advection/2d/example1
```

e então tudo o que você digitar no prompt será direcionado para este diretório.

Após selecionar o diretório, você precisa digitar comandos que deem ordens para implementar o problema, por exemplo, alguns tipos de comandos:

<code>‘make .exe’</code>	para criar o executável
<code>‘make .output’</code>	para rodar o código
<code>‘make .plots’</code>	para produzir as imagens (.plots)
<code>‘make .htmls’</code>	para produzir as versões dos arquivos em html
<code>‘make .new’</code>	para remover todos os objetos e fazer o <code>make .exe</code>
<code>‘make clean’</code>	para limpar a compilação e os arquivos html
<code>‘make clobber’</code>	para limpar as saídas e as imagens plotadas
<code>‘make all’</code>	para fazer os .htmls e as imagens (.plots)
<code>‘make help’</code>	para imprimir esta mensagem

De uma forma bastante simples, para rodar o problema e criar os .plots, digite `‘make all’` no prompt de comando.

Você pode visualizar os resultados na pasta que será gerada, chamada “plots”, que salvará as imagens na extensão escolhida previamente (geralmente é pré escolhida a extensão .png e também são salvas em .html).

Também vão ser gerados vários arquivos e pastas, dependendo do problema. Na pasta “_output”, por exemplo, os resultados estão em arquivos de texto que você poderá utilizar para fazer comparações ou plotar em um software diferente.

Para utilizar esses resultados salvos em arquivos de textos dentro do software MATLAB, por exemplo (que fizemos na nossa dissertação de mestrado), você precisa inserir um pendrive na máquina virtual para transferir por meio dele, os arquivos para a máquina real. Para isto, conecte o pendrive no seu computador real. Na máquina virtual (na tela do sistema operacional) clique com o botão direito do mouse no terceiro ícone da segunda fileira no canto inferior direito, e escolha o dispositivo USB desejado. Agora salve os arquivos desejados (utilizando copiar e colar) no pendrive. Após isto, com a opção “renomear” (“rename”), mude a extensão destes arquivos para .dat. É interessante esperar alguns minutos até que os arquivos sejam completamente salvos, caso contrário, a máquina real pode não reconhecer.

Depois, é interessante limpar o diretório (pois você pode querer fazer mudanças posteriormente), e para isto você precisa digitar dois comandos; primeiro `‘make clobber’` e depois `‘make clean’`.

Os problemas discutidos no livro “Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems” do autor do Clawpack LeVeque [16] estão todos implementados no Clawpack, e podem ser encontrados por capítulo no diretório

`clawpack-N/book`.

Por exemplo, para rodar o problema do fluxo de tráfego não linear com rampa de acesso, que se encontra no capítulo 17 do livro [16], precisamos seguir

`clawpack-N/book/chap17`

e selecionar a pasta “onramp”. A partir daí seguir as mesmas instruções para o problema da equação de advecção citada acima.

A.4 Alterando os parâmetros

Você pode alterar alguns parâmetros nos diretórios manualmente conforme sua necessidade.

Em cada diretório, haverá um arquivo de texto chamado “README.txt” que fornecerá todas as informações do problema implementado naquele diretório, como o tipo de equação, o tipo de condições de fronteira e inicial, e etc. Neste arquivo, também estão explicados o papel de cada arquivo dentro deste diretório.

Por exemplo:

No arquivo “qinit.f” estão os comandos que fazem a condição inicial do problema (você poderá alterar este arquivo);

O arquivo “claw.data” mostra os valores dos parâmetros utilizados. Você não conseguirá modificar este arquivo;

No arquivo “rpn2.f” é resolvido o problema de Riemann;

No arquivo “setplot.py” vão ser especificados os parâmetros para criação dos plots, como os limites espaciais;

O arquivo “setrun.py” especifica os parâmetros de plotagens temporais utilizados, como o número de células, o número CFL, a condição de fronteira e os métodos utilizados.

Alguns arquivos você não vai conseguir modificar, ou não poderá modificar. Basicamente, você poderá modificar com cuidado os arquivos “qinit.f” e “setrun.py”.

Se você quiser resolver um problema em 2D, por exemplo, deverá procurar nos diretórios (geralmente em `clawpack-N/apps`) qual o problema implementado que melhor se aproxima do que você quer resolver e depois modificar os parâmetros.

Você também poderá encontrar mais detalhes na referência [14], inclusive se você já tem o Linux e um software de linguagem Fortran instalados e não quer instalar a máquina virtual.