



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UM ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS DE ALTA
RESOLUÇÃO PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE
PROBLEMAS HIPERBÓLICOS BIDIMENSIONAIS EM
MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

Moacyr Silva do Nascimento Neto

Recife
2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

UM ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS DE ALTA
RESOLUÇÃO PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE
PROBLEMAS HIPERBÓLICOS BIDIMENSIONAIS EM
MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

Moacyr Silva do Nascimento Neto

*Trabalho apresentado ao programa
de pós-graduação em engenharia
mecânica do Departamento de
Eng. Mecânica da Universidade
Federal de Pernambuco como re-
quisito parcial à obtenção do grau
de mestre.*

Orientadores:

Paulo Roberto Maciel Lyra

Darlan Karlo Elisário de Carvalho

Banca Examinadora:

Ézio da Rocha Araújo (Departamento de Eng. Civil - UFPE)

Leonardo José do Nascimento Guimarães (Departamento de Eng. Civil - UFPE)

Maicon Ribeiro Correa (Departamento de Matemática Aplicada - UNICAMP)

**Recife
Julho, 2013**

Catálogo na fonte
Bibliotecária Margareth Malta, CRB-4 / 1198

- N244e Nascimento Neto, Moacyr Silva do.
Um esquema central em volumes finitos de alta resolução para a solução numérica de problemas hiperbólicos bidimensionais em malhas não-estruturais / Moacyr Silva do Nascimento Neto. - Recife: O Autor, 2013.
x, 105 folhas, il., gráfs., tabs.
Orientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2013.
Inclui Referências.
1. Engenharia Mecânica. 2. Leis de conservação. 3. Problemas hiperbólicos escalares. 4. Esquema central em volumes finitos de alta resolução. 5. Limitação de inclinações geométrica. I. Lyra, Paulo Roberto Maciel. (Orientador). II. Título.

621 CDD (22. ed.)

UFPE

BCTG/2014-220

UM ESQUEMA CENTRAL EM VOLUMES FINITOS DE ALTA RESOLUÇÃO
PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS HIPERBÓLICOS
BIDIMENSIONAIS EM MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

MOACYR SILVA DO NASCIMENTO NETO

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: PROCESSOS E SISTEMAS TÉRMICOS
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA/CTG/EEP/UFPE

Prof. Dr. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA
ORIENTADOR/PRESIDENTE

Prof. Dr. DARLAN KARLO ELISIÁRIO DE CARVALHO
CO-ORIENTADOR

Prof. Dr. CEZAR HENRIQUE GONZALEZ
VICE-COORDENADOR DO PROGRAMA

BANCA EXAMINADORA:

PROF. DR. PAULO ROBERTO MACIEL LYRA (UFPE)

Prof. Dr. MAICON RIBEIRO CORREA (UNICAMP)

Prof. Dr. LEONARDO JOSÉ DO NASCIMENTO GUIMARÃES (UFPE)

Prof. Dr. ÉZIO DA ROCHA ARAÚJO (UFPE)

Escanchado aos quartos de minha mãe

Passa por um fato corriqueiro, normalmente levado à sua seriedade real só naquelas situações mais tristes, a inaptidão que nós, seres humanos, demonstramos em viver sozinhos e de depender apenas de nós mesmos. A incapacidade é tanta que não faltam na história da humanidade e muito menos nos dias de hoje punições baseadas no desterro e no isolamento. Não é também obra do acaso, embora num âmbito filosófico mais geral e amplo tudo o possa vir a ser, que tenhamos ao longo dos tempos transferido simpaticamente nossa atenção e carinho a outras espécies, ditas companheiras (a predileção por gatos, contudo, ainda me parece um contrassenso). Esse anseio por companhia está tão arraigado nos corações humanos que, no momento em que nos tornamos mais cientes a respeito da estrutura do cosmos, nos questionamos: estamos sós?

Tente imaginar a que ficaria reduzida a nossa memória sem a relação desenvolvida entre os nossos pares e entes queridos. Não estamos sós.

É bonito considerar a vida de cada pessoa um caminho por onde vão se pregando os rastros de vários pés. A descontinuidade de um desses rastros, pelo motivo que seja, sempre é penosa e acaba por mexer no arranjo desses caminhos.

Por uma canhestrice natural nossos primeiros passos nunca são trilhados sem ao menos um outro par de passos acessório. E mesmo antes de nos livrarmos da insegurança de tirar uma das plantas do chão e caminhar a dois pés de cabeça mais ou menos erguida, há lá alguém que já nos caminha escarranchado em volta de seu cachaço, abraçado ao torso com a cabeça encostada em seu ombro ou escanchado aos seus quartos; há muitos outros meios. Suas pegadas são nossas primeiras.

Se por esse modo ou por outro parecido, nossas vidas se entrelaçam com as de outros, tão cedo e idealmente de maneira tão terna, e o mundo paradoxalmente se revela, como o faz a todos os seres, um palco de maravilhas sem-fim e um algoz terrível, não me espanta a necessidade que sentimos em compartilhar nossas alegrias e surpresas, de louvarmos uns aos outros, e de querermos receber, quase que por merecido, consolo quando um mal nos aflige. A solidão é o pior dos males

porque ela é o mundo, o mundo contra que se depara sozinho.

O traço de minhas próprias pegadas não sou capaz de recobrá-lo. Ninguém o é, imagino. Entretanto, sentido-me aqui impelido em fazê-lo para reconhecer os traços de outros com quem tive a sorte de ir-me misturando ao longo de meu caminho e tendo que começar de algum ponto, escolho os passos da vida por onde cruzei com a minha avó, a quem nunca chamei assim, porque tinha um apelido que era nome e fazia mais jus a pessoa jovem, invicta e extrovertida que era a dona Vanda. Não tenho uma memória sequer de minha primeira infância em que ela não esteja presente. Aí se encontra depositada a importância das coisas que se vão cedo demais. Penso no orgulho que ela sentiria de mim e, indiretamente, de minha mãe por carregar-me como o fez por tanto tempo. Toda realização minha é um feito imediato dessas duas mulheres, as primeiras senhoras do meu passo.

No curso dessa estrada de memórias agora tenho dois tios a lembrar. Um por ter sido e continuar a ser um modelo distante, quem pouco conheci mas a quem sou constantemente assemelhado, cujo nome sempre me soa drummondianamente enigmático justo por ser de nossos nomes o mais simples, o José. Sua figura para mim é indissociável da lembrança de minha vó. Do outro lembro-me bem porque foi também meu irmão mais velho, um reflexo do que eu considerava fantástico, e mesmo com toda a distância que algumas vezes se interpõe entre dois caminhos ainda o distingo como o grande e fiel amigo que sempre me foi. Ao meu tio Eduardo também se deve, diga-se de passagem, a descoberta prematura em minha personalidade de um viés acadêmico, prematura porque eu mesmo por muito tempo relutei em desfavor dessa suposta tendência. Não fosse pela persuasão de outros amigos, em especial, a de meu caríssimo Paulo Duarte, eu talvez continuasse a crer que um diploma de físico e um emprego como perito na polícia federal constituíssem realizações profissionais mais do que suficientes na vida de qualquer homem.

Há de se notar então o talhe de três pares de pés pequenos bem próximos àquelas pegadas deitadas por mim. Em mais de um momento de minha vida, elas protagonizaram o passeio. São as marcas da minha tia Arlete, deixadas com a simplicidade e a alegria sincera que lhe são características, as da minha tia Ana, pisadas com a energia feliz e a força de sua presença, e, ao seu lado, os passos da minha tia Liliane, um exemplo inigualável de doçura genuína.

De minhas tias não posso lembrar sem acrescentar-lhes os meus primos. A baralhada em minha trilha é de sua culpa, contudo tenho certeza absoluta de que eles se defenderam dizendo que se algum rastro foi por diversão bagunçado tal rastro é o deles e essa confusão foi incitada por mim. A Neg'a, Marzinho, Bochecha, Cadu, Cove, Kiko, a loira louca, todos têm um papel fundamental em minha vida, além do usual e de extrema importância deixar-me contente e fazer-me rir. E um tanto mais a frente da linha de meus primos chegam as minhas duas irmãs. Primeiro a minha loira com a sua pose de estrela a indicar não só

o entrelaçamento genético que há nas pessoas mas também o de seus caminhos, porque ela é uma verdadeira vitamina de liquidificador à base de minha mãe e minhas tias, com uma porção maior de tia Ana na mistura, eu diria. Pouco após entra em cena a minha preta que abre um sorriso e esboça uma postura capazes de restaurar ao convívio humano o mais dedicado dos anacoretas.

É entre os passos de minhas irmãs onde acho os de meu pai. O seu Rocha é aquilo que o seu nome anuncia. Meu pai é sólido, constante, paciente. A sua vida considero uma lição. Junto a pedra de meu pai, eu a vejo de novo, minha mãe, que é a água, as pedras e a própria erosão. Minha mãe não é uma parada, ela é a linha, a máquina e o trem. Um trem que me diz por vezes que sou uma ponte sem a qual teria caído num precipício. Não sei de que modo poderia servir de suporte para um veículo em que sou passageiro, mas adquiri a sensatez ao longo dos anos de não discutir e aceitar o que me diz a minha mãe.

Como se vê, a lista de passos é extensa. Cada pisada tem o seu próprio peso e frequência. E tudo o que foi dito corresponde a somente um quinhão da família. E ao se considerar uma família, uma pessoa deve considerar também a outra. A outra sim, porque um homem afortunado não apenas tem a família em que nasceu, mas compõe conjuntamente uma outra em que ele próprio trabalha para a constituir.

Um fato que me comove é o de como uma pessoa com tão poucos dotes de sociabilidade, eu, possa gozar de um círculo de amigos tão admiráveis. Não sou capaz de me conhecer sem que eu olhe fundo e tente descobrir eu mesmo em meus amigos. Eles me ensinam e me motivam a aprender. Apontam os meus defeitos, reconhecem as minhas qualidades e de um todo dividem comigo as graças e a carga do mundo.

Tenho muitas menções honrosas: Paulo Duarte, Bruno Veríssimo, Henrique Vicente, Tiago Saraiva, Marcel Moura, Humberto Barbosa, Marília, Daniel Miranda, Gabriel Guimarães, Paulo D'Ávila, André Gomes e mais recentemente Leo Soares, Ramon Domingues e Bruno Camerano. Desejo não me falta de deixar-lhes registrado alguma palavrinha para embelezar ainda mais os seus nomes, no entanto, o que se pode fazer para aprimorar o perfeito? ;)

Enfim, o falar de amigos me carrega a um lugar mais do que especial, onde encontro junto aos meus passos um outro par, de pisadas firmes que se alternam entre as minhas e me guarnecem da inquietação de estar-me dirigindo por um mal caminho. Minha guia, minha senhora, minha esposa e minha namorada, o temor da humanidade é o meu, só que em meu caso ele está consubstanciado na sua ausência.

E, reduzindo a vida a isto: um passeio entre família e amigos e mais de um cachorro, este humilde trabalho é apenas mais um passo ou, menos ainda, a ponta de um outro passo que não posso considerar só meu. Tomá-lo para mim seria uma apropriação indevida e uma desfeita a quem por tamanho tempo e apesar

de tanto esteve junto de mim, imprimindo pegadas num solo mais depressa que a maré certa consiga de todo as lavar. Se jamais estive só, não vejo razão para me destacar agora. Eu sinceramente agradeço a todos que tentam ou tentaram me proibir do mundo aquele fuso que há de pior.

Reconhecimentos

Agradeço aos meus orientadores Prof. Paulo e Prof. Darlan pela introdução ao problema, objeto desta dissertação, pela confiança em relação a execução da tarefa, feita de tempo livre e à distância, e principalmente pela paciência que me demonstraram.

Aos membros da banca, fico grato pelas sugestões.

Tenho uma dívida de compreensão e gratidão com os colegas e amigos de trabalho, principalmente com aqueles que divido sala e atribuições: Leo Soares, Gustavo Meurer, Rafael da Silva.

Aos amigos e colegas do programa de pós-graduação, eu gostaria de dizer que a minha experiência não teria tido metade da graça e nem um décimo do proveito, não fosse pelas nossas conversas e intercâmbio de informação. Em especial, eu gostaria de agradecer ao Márcio Souza por ter desenvolvido e compartilhado o seu pré-processador, sem o qual o meu trabalho não teria se desenvolvido na velocidade que se fez. Agradeço ainda ao Luiz Eduardo Queiroz pelas tantas vezes em que se dispôs a perder um pouco do seu tempo a me esclarecer qualquer dúvida ou a me auxiliar na criação de alguma coisa.

Resumo

Um esquema central em volumes finitos para a solução numérica de problemas hiperbólicos escalares bidimensionais, definido sobre domínios computacionais discretizados por malhas triangulares não-estruturadas, é proposto. O método é bipartido (*staggered*), de modo que é definida uma malha dual e auxiliar à malha de triângulos original para que se alternem a posição dos graus de liberdade numéricos entre duas iterações sucessivas. Neste sentido, o esquema proposto é híbrido, podendo ser encarado como um método centrado na células triangulares da malha, a forma escolhida neste trabalho, ou centrado em seus nós. O esquema é também conservativo, o que significa que deriva diretamente da lei de conservação da qual o problema diferencial provém, e assim está apto a aproximar satisfatoriamente soluções generalizadas. O método é inicialmente desenvolvido para lidar com leis de conservação convectivas não-lineares e uniformes. Uma extensão, entretanto, é realizada para que ele seja também aplicável a problemas que envolvam a equação de transporte. São apresentadas tanto uma formulação de baixa ordem quanto uma variação de alta resolução. Essa última criada a partir de reconstruções polinomiais lineares por partes, célula a célula, limitadas geometricamente e não pelo uso de funções limitadoras. Por fim, esquemas derivados segundo o processo proposto são aplicados para solução de problemas hiperbólicos simples que possuam solução exata conhecida. A conformidade dos resultados obtidos sugere que a convergência desses esquemas não pode ser peremptoriamente refutada. Além disso, a ordem com que essa convergência é estabelecida é estimada através de testes.

Palavras-chave: leis de conservação, problemas hiperbólicos escalares, esquema central em volumes finitos de alta resolução, limitação de inclinações geométrica.

Abstract

A finite volume central scheme for the numerical solution of bidimensional scalar hyperbolic problems made discrete over non-structured triangular meshes is proposed. The method is staggered, in such a way a dual auxiliary mesh is defined from the original one composed of triangles to make possible the displacement required by the numerical degrees of freedom between successive iterations. The proposed scheme is hybrid in a sense that it may be regarded as a cell-centered method, the choice in this work, or a node-centered one. The scheme is also conservative, which means it is generated by the use of that specific conservation law from which the differential problem stems, therefore making it capable of satisfactorily approximating generalized solutions. The method is initially developed to deal with non-linear uniform convective conservation laws. An extension of it, however, is made to tackle appropriately those problems which make use of the transport equation. Both low order and high resolution formulations are presented. The latter is created from piecewise linear polynomial reconstructions whose inclination vectors are geometrically limited. At last, schemes derived from the proposed process are applied to simple hyperbolic problems for which an exact solution is available in order to assess the conformity of the numerical solutions generated by the schemes. Moreover, the order of convergence of the method is estimated through tests.

Keywords: conservation laws, scalar hyperbolic problems, finite volume central schemes.

Lista de siglas e acrônimos

- EDP Equação diferencial Parcial
DDC Domínio de dependência computacional
DDR Domínio de dependência real
IMPES *Implicit pressure and explicit saturation*
MUSCL *Monotone upstream centered schemes for conservation laws*
REP Reconstrução, evolução e projeção

Sumário

Escanchado aos quartos de minha mãe	i
Reconhecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de siglas e acrônimos	vii
Introdução	1
1 Leis de Conservação e EDP hiperbólicas	5
1.1 O conteúdo físico de uma lei de conservação	5
O axioma de conservação	6
A aditividade de grandezas	6
Campos materiais	6
Lei de conservação definida sobre regiões fixas do espaço	7
1.2 Relações Constitutivas	9
1.2.1 Termos de fonte	9
1.2.2 Fluxos locais	10
Relações constitutivas convectivas	10
Relações constitutivas difusivas	11
1.3 Equações diferenciais parciais	11
1.3.1 Equações hiperbólicas e equações parabólicas	13
Equação de convecção linear uniforme	13
Equação de convecção linear não-uniforme	14

	Equação de convecção não-linear uniforme	14
	Equação de transporte	14
1.4	Escoamento bifásico em meios porosos: um exemplo de modelagem	15
1.4.1	A lei de Darcy	15
	Saturação e permeabilidade relativa	16
1.4.2	Equações de conservação de massa	17
2	Rudimentos da teoria de problemas hiperbólicos	21
2.1	A equação de convecção linear	22
2.1.1	Curvas características	22
2.1.2	Condições iniciais descontínuas e soluções generalizadas . . .	24
2.1.3	A equação de convecção linear não-uniforme	26
2.2	Equações hiperbólicas quasilineares	26
2.3	Equação de convecção não-linear uniforme	28
2.3.1	Soluções generalizadas	32
	Linhas de deslizamento	33
	Ondas de choque	34
	Ondas de rarefação e ondas de choque instáveis	37
	Problemas de Riemann e o princípio da similaridade	39
	Fluxos não-convexos e o problema de Buckley-Leverett	39
	O problema de injeção	42
2.4	Condições de entropia e unicidade de problemas hiperbólicos	43
3	Métodos numéricos em volumes finitos	46
3.1	Discretização, métodos numéricos e leis de conservação	46
3.2	Convergência, consistência e estabilidade	49
3.2.1	Reconstrução, evolução e projeção	49
3.2.2	Convergência	50
	A definição de convergência	51
3.2.3	Consistência	54
3.2.4	Estabilidade	55
	Operadores coercivos	55
3.2.5	Convergência de soluções generalizadas	56
3.3	O algoritmo REP	57
4	Um Esquema Central para Leis de Conservação Hiperbólicas em Malhas Não-Estruturadas Triangulares	58
4.1	Esquemas Centrais	58
4.2	Introdução ao método proposto	59
4.2.1	Domínios computacionais e a proposta do problema	59
	Condições de contorno	60

	Descrição dos parâmetros	60
4.2.2	Motivação e delineamento do método	62
	Primeira reconstrução	62
	Evolução e projeção auxiliar	62
	Aproximação fundamental do método	64
	Segunda reconstrução	65
	Segunda evolução e projeção principal	65
4.2.3	Estrutura geral do esquema	66
4.3	A variação de baixa resolução	66
4.3.1	Tratamento de células internas	67
4.3.2	Condições de contorno	67
	Arestas com valor prescrito	68
	Arestas de fluxo prescrito	69
	Arestas livres de prescrição	69
4.4	O esquema de alta resolução	70
4.4.1	A definição das inclinações	71
	Princípio dos extremos locais	72
4.4.2	Evolução	75
	Funções de fluxos quadráticas	76
	Interpolação	79
4.5	Generalização do esquema proposto para sua aplicação à equação de transporte	80
4.6	O algoritmo IMPES	81
5	Aplicações e testes com resultados	84
5.1	Equação da convecção linear	85
5.1.1	Teste de convergência	87
5.2	O problema de Buckley-Leverett	89
5.2.1	Malha estruturada sobre domínio estendido	89
	Teste de convergência	91
5.2.2	Malha não-estruturada sobre domínio restringido	93
	Teste de convergência	96
5.3	Rotação de corpo rígido	97
	Observações e considerações finais	101
	Referências Bibliográficas	103

Introdução

Esquemas computacionais de alta resolução são necessários para um tratamento numérico adequado daqueles problemas hiperbólicos de que se espera soluções descontínuas ou não continuamente diferenciáveis. O surgimento de oscilações espúrias na vizinhança de descontinuidades de uma solução é um evento facilmente observado quando métodos de alta ordem são utilizados na tentativa de produção de um substituto numérico que aproxime a solução exata com erros menores e mais alta ordem de convergência. Um teorema por Godunov, [28], estabelece que nenhum esquema numérico linear de ordem mais alta que 1 é capaz de produzir tais substitutos, isso porque a geração dessas oscilações, ou a violação de monotonicidade, nome pelo qual o fenômeno é conhecido, é uma propriedade intrínseca desses esquemas. A teoria subsequentemente desenvolvida [30], [31], [32], [33], [6], ainda restrita a problemas unidimensionais, visa a proposição de esquemas não-lineares para contornar essa falha, acompanhando as linhas gerais de confecção de esquemas conservativos, introduzidas pelo método de Godunov, [14], e generalizadas por Van Leer, culminando no desenvolvimento de esquemas de tipo MUSCL, [34]. Conceitos como métodos TVD (*Total Variation Diminishing*), [19], limitadores de inclinação e limitadores de fluxo, [29], são oriundos dessa teoria.

Uma vez delineados a estrutura das principais ideias e o papel dos conceitos, o processo de formulação de métodos numéricos em volumes finitos segue o denominado algoritmo REP, [25], [23]. O algoritmo subentende conhecimento exato ou aproximado da estrutura característica da reconstrução utilizada, [10], entre instantes sucessivos da iteração. Isso justifica a profusão de trabalhos publicados propondo aproximações, correspondentemente, definindo esquemas em si, disposta na literatura. Em geral, as estratégias adotadas categorizam os métodos em duas classes: uma em que o problema original é substituído por outro de uma estrutura característica mais simples, contudo, de maneira determinadamente equivalente,

que permita a evolução exata do problema de Riemann generalizado, [17], [28], e outra em que a dificuldade introduzida pela possível complexidade da estrutura característica de um problema hiperbólico é contornada por meio de um uso judicioso da lei de conservação do qual o problema é derivado. Os chamados métodos baseados em soluções de problemas de Riemann (*Riemann Solvers*), concernem à primeira classe. A segunda classe de métodos recebe a denominação de central, [23], [27], [21].

Tanto solucionadores de Riemann quanto métodos centrais revelam-se bem-sucedidos. Os primeiros exibem geralmente uma melhor ordem de convergência, mas tendem a apresentar um custo computacional mais elevado do que os esquemas centrais. Estes, por outro lado, gozam de não necessitar da solução local de um problema de Riemann, o que os torna conceitualmente mais simples e mais facilmente implementáveis.

No que concerne ao desenvolvimento de métodos para problemas hiperbólicos bidimensionais, a proposta de esquemas baseados na evolução da estrutura característica de reconstruções utilizadas encerra um problema de grande dificuldade, explicando parcialmente a falta de rigor encontrada em tantos trabalhos existentes na literatura que adotam essa linha de construção. A ideia geral é a de pressupor ou, efetivamente, a de abarcar numa única expressão todos os possíveis resultados de um problema de Riemann local, tendo como base conceitual a teoria unidimensional desses problemas. As maneiras como isto é feito são diversas e dependem fortemente do tipo de discretização do domínio utilizada. Para malhas estruturadas quadrangulares LeVeque, [25], sumariza boa parte dos métodos e das ideias presentes na literatura. Edwards, [13], faz uso deles em um artigo razoavelmente recente no contexto da simulação de escoamentos bifásicos em meios porosos, o que demonstra como essas ideias continuam atuais. Para malhas não-estruturadas, principalmente para aquelas compostas de elementos triangulares, o número de trabalhos é similar ou superior, produzindo resultados mais ou menos conformes e sendo principalmente justificados pela maleabilidade dessas malhas na discretização dos domínios, [5], [26], [12].

Quanto à formulação de esquemas centrais para semelhantes problemas multidimensionais, a proposta de tais métodos é enormemente facilitada pelo uso da lei de conservação e mesmo susceptível a uma análise numérica *a priori*. Possivelmente, o primeiro esquema central para a solução numérica de problemas hiperbólicos bidimensionais, com efeito não somente para estes mas também para qualquer problema derivado de uma lei de conservação, a ser proposto é a extensão dos esquemas de Lax-Friedrichs e de Nessyahu-Tadmor apresentada por Arminjon *et al.*, [2], [1]. Desde então, outros esquemas e otimizações desses esquemas foram e vem sendo propostas. Extensões que comportem malhas com características diferentes das malhas usadas na formulação original, reconstruções de grau mais

alto, limitações de inclinações mais adequadas, *etc.* são melhorias introduzidas, [3].

Este trabalho visa contribuir para o crescimento da lista desses últimos métodos. O esquema central aqui proposto lida satisfatoriamente com problemas hiperbólicos não-lineares uniformes e não-uniformes, no sentido de que as soluções numéricas por ele produzidas apresentam um bom acordo com as soluções exatas, fortes e fracas, dos problemas considerados.

Por fim, na organização do texto, admite-se uma disposição que naturalmente influa na formulação do esquema proposto:

Capítulo 1 Leis de conservação e EDP hiperbólicas

São introduzidos os principais conceitos e a metodologia da modelagem matemática de corpos materiais, seguindo a linha das referências: [15], [18]. O estudo é considerado importante, uma vez que traça a estrutura matemática subjacente a qualquer problema que envolva EDP. Ênfase é dada, sobretudo, àqueles modelos de que se conclui o comportamento hiperbólico, ou de onda, nas equações diferenciais parciais resultantes.

Capítulo 2 Rudimentos da teoria de problemas hiperbólicos

Esboça-se um tratamento de alguns problemas de valor inicial baseados nessas equações, visando introduzir os principais atributos de suas soluções. Apresenta-se em contraponto o conceito de soluções generalizadas para tais problemas a fim de conciliar seus requisitos com as algumas propriedades dessas novas soluções. Com o intuito de uma exposição mais didática possível, soluções de um bom número de problemas são deduzidas como exemplo. Espera-se ainda que as dificuldades apontadas neste trecho do trabalho justifiquem suficientemente a necessidade de um tratamento numérico de semelhantes problemas.

Capítulo 3 Métodos numéricos em volumes finitos

Os principais conceitos e ideias referentes à formulação de métodos em volumes finitos são formalmente expostos.

Capítulo 4 Um esquema central para leis de conservação hiperbólicas em malhas não-estruturadas triangulares

Todas as variantes do método central proposto são desenvolvidas e explicadas em detalhe nesta secção do texto. O esquema de baixa ordem é o primeiro a ser apresentado após dispostas algumas definições cabíveis, sendo seguido pela formulação de alta resolução e logo adiante pela extensão do método apropriada a lidar com problemas que envolvem a equação de transporte.

Capítulo 5 Aplicações e teste de resultados

Esses esquemas são aplicados na solução numérica de problemas para os quais

se dispõe de uma solução exata e os resultados são devidamente confrontados. Uma estimativa da ordem de convergência dos esquemas é realizada.

Leis de Conservação e EDP hiperbólicas

1.1 O conteúdo físico de uma lei de conservação

A modelagem de corpos materiais, no que concerne aos fenômenos macroscópicos, está fundamentalmente embasada na hipótese do contínuo. Ela permite que se identifique com o corpo, em cada instante de tempo t , um domínio B_t do espaço euclidiano \mathbb{E}^3 , denominado a configuração do corpo nesse instante.

Subjacente a essa ideia está a noção de que um corpo material é com efeito composto de um incontável número de partículas, que, no decurso de algum evento, ocupam posições distintas em um determinado instante t das que ocupavam previamente. Esse deslocamento pode acarretar em uma mudança de configuração do corpo, no entanto, não necessariamente. Essa última observação sugere que a definição de configuração de um corpo, embora útil, é insuficiente para uma descrição única e inequívoca de seu movimento.

Faz-se necessário, portanto, introduzir o conceito de deslocamento de um corpo entre duas configurações. Com tal intuito, sejam B_0 e B duas configurações de um corpo material, podendo inclusive serem idênticas, por um deslocamento do corpo entre essas configurações entende-se um mapa bijetivo $\varphi : B_0 \rightarrow B$ que preserva a orientação de qualquer sistema de eixos conjugado ao corpo. Uma sequência contínua de deslocamentos, φ_t , define uma evolução, ou, também chamado, um movimento do corpo.

O axioma de conservação

A construção do sistema físico que servirá de modelo a um evento qualquer se desenvolve a partir desse ponto com a identificação daquele grupo específico de grandezas atribuídas ao corpo que predominam à descrição do evento e se segue na determinação das relações que esses parâmetros apresentam um com os outros. Quanto a essas relações uma classe de princípios predomina na Física, todos partindo do axioma fundamental que *o valor assumido por uma certa propriedade de um corpo isolado não se altera no curso da dinâmica desse corpo*.

A aditividade de grandezas

O enunciado resume o compreendido por conservação de uma grandeza. Ele também subentende a hipótese de que cada grandeza consiste de algo que de fato pode ser medido e o valor que lhe corresponde é próprio do corpo, ou seja, independente de sua configuração. Assim, denotando por U uma grandeza conservada qualquer, o axioma de conservação é equivalentemente escrito como

$$\frac{d}{dt}U[B_t] = 0, \quad (1.1)$$

qualquer que seja o movimento φ_t a que o corpo se encontra submetido. Mais ainda, a capacidade de se atribuir propriedades a corpos materiais obviamente se estende a todos os corpos materiais, e, uma vez que U se encontra definida sobre um corpo qualquer, a cada parte desse mesmo corpo, na medida que cada parte define um corpo material em si, cabe um valor dessa propriedade. Supõe-se que esse valor é único e isso resulta na aditividade de uma grandeza entre as partes de um todo. Implicando então que para qualquer partição \mathcal{P} de uma configuração B de um corpo, tem-se

$$U[B] = \sum_i U[\Omega_i], \quad (1.2)$$

onde a soma é tomada sobre todos os elementos Ω_i de \mathcal{P} . A aditividade permite do mesmo modo que se considere uma família de partição e refinamentos e que se carregue a soma (1.2) sobre o refinamento-limite da partição, quando o maior dos volumes das regiões definidas pelo particionamento tende a zero. O procedimento nesse caso resulta na variante integral da equação (1.2):

$$U[B] = \int_B dU. \quad (1.3)$$

Campos materiais

Escrever o valor de uma grandeza associada a um corpo material como uma integral definida sobre os pontos de uma configuração do mesmo possibilita ainda

a introdução de novas grandezas, associadas, por exemplo, não mais ao corpo em si, mas às partículas que o compõem, identificadas nesta escala com pontos geométricos. Posto que volume é uma propriedade sempre atribuída a corpos materiais, convém expressar as demais propriedades por meio de uma distribuição volumétrica. Isso leva a definição de campos materiais sobre os pontos de uma configuração.

Rigorosamente a definição de tais campos se dá da seguinte maneira, [15]: seja U uma grandeza qualquer associada a um corpo cuja configuração instantânea é B_t e considere uma família de volumes $\Omega_\delta(\mathbf{x})$, todos incluídos em B_t , com a propriedade $\Omega_\delta(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ a medida que $\delta \rightarrow 0$ e $\mathbf{x} \in \Omega_\delta(\mathbf{x})$ para todo $\delta > 0$, então assume-se que o limite abaixo existe e ainda que é indiferente à família de volumes $\Omega_\delta(\mathbf{x})$ utilizada, definindo portanto o campo u associada a U e ao volume

$$u(\mathbf{x}, t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{U[\Omega_\delta(\mathbf{x}), t]}{\text{vol}[\Omega_\delta(\mathbf{x})]}.$$

A introdução do campo $u : B_t \rightarrow \mathbb{R}$ permite assim que se escreva para qualquer $\Omega \subseteq B_t$.

$$U[\Omega, t] = \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t) dV. \quad (1.4)$$

Lei de conservação definida sobre regiões fixas do espaço

A definição de campos materiais sugere uma nova maneira de lidar com grandezas e porquanto um modo diferente de seguir com a modelagem física e matemática de sistemas.

Seja Ω uma região fixa do espaço tal que para algum movimento φ_t está contida em toda configuração por que passa o corpo. Ao se considerar a equação (1.1), entretanto, evidenciando a contribuição associada à parte do corpo identificada por Ω num instante t e a contribuição devida ao resto do corpo, obtém-se uma equação de balanço entre as taxas com que a propriedade U varia em cada região, ou seja,

$$\frac{d}{dt} U[\Omega, t] = - \frac{d}{dt} U[B_t - \Omega, t]. \quad (1.5)$$

A interpretação da equação acima é evidente: a taxa com que o valor de U atribuído a região Ω diminui, ou aumenta, é igual a taxa com que o valor dessa mesma grandeza associado ao restante do corpo aumenta, ou respectivamente diminui. Contudo, considerações a respeito do lado direito da equação (1.5) requerem um conhecimento pleno do movimento a que o corpo material está sujeito, inclusa a participação que a propriedade U tem na dinâmica desse movimento. Dado que se deseja quantificar a taxa que aparece no lado esquerdo da equação, faz-se preciso determinar seu valor por outras vias.

Dois mecanismos são assumidamente aceitos em substituição à taxa no lado direito da equação (1.5). O primeiro considera que o valor de uma grandeza numa região é susceptível à mudança se a grandeza está de alguma forma sendo produzida ou consumida no interior da região. O segundo supõe que o valor de uma grandeza também é alterado quando há transporte da propriedade através dos limites da região. Em ambos processos não é difícil se identificar a mesma origem, a saber, o movimento das partículas materiais, ou, mais propriamente, o contínuo deslocamento de diminutos corpos sobre os quais o valor da propriedade é virtualmente homogêneo. Movimento esse pressuposto em análise, todavia, impossível de se determinar tendo por base somente o axioma de conservação.

Cada um desses mecanismos por sua vez insere novas grandezas no objeto da análise e as hipóteses que necessariamente têm de ser feitas sobre suas naturezas definem uma dinâmica para U . Consequentemente, essa dinâmica pode não ser, e normalmente não é, exata, no sentido de que ao se agrupar todas as grandezas que se infere ter participação na evolução de um corpo e, em sua posse, reproduz-se o movimento executado por ele, os dois movimentos não serão estritamente os mesmos. A sua semelhança, ou a sua diferença, serve à avaliação dos modelos escolhidos.

Formalmente, introduz-se uma função $q : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, $T > 0$, usualmente denominada termo de fonte, que responde pelas variações da propriedade no interior da região, e um campo vetorial $\mathbf{f} : \bar{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3$, conhecido pelo nome densidade de fluxo, fluxo local, ou simplesmente, quando este uso não gera ambiguidade, fluxo. O modo com que essas grandezas substituem o termo no lado direito da equação (1.5) equivale ao postulado da lei de conservação:

$$\frac{d}{dt}U[\Omega, t] = - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})dA + \int_{\Omega} q(\mathbf{x}, t)dV,$$

o que em conjunto com a equação (1.4) resulta na equação base da modelagem matemática da dinâmica de qualquer grandeza,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t)dV = - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})dA + \int_{\Omega} q(\mathbf{x}, t)dV. \quad (1.6)$$

A lei (1.16) ainda não resolve o problema de como uma grandeza U está distribuída na região ou qual o seu valor. Conforme mencionado, é necessário tomar ainda algumas suposições acerca de \mathbf{f} e q . Essas hipóteses têm um papel fundamental na teoria e recebem por isso a denominação especial de leis ou relações constitutivas do modelo. Uma exposição mais detalhada de algumas delas é feita na secção que se segue.

A lei de conservação (1.6) possui a vantagem de não mais exigir referência ao corpo material sobre o qual a grandeza U está de fato definida. A introdução do

campo material, fluxo local e termo de fonte permite que se interprete tais grandezas como funções definidas diretamente sobre os pontos do espaço. Em um grande número de aplicações, principalmente naquelas em que o corpo material é assumido permear todo o espaço, tal procedimento não gera infortúnios e, porque de fato é mais simples considerar valores cambiantes de uma grandeza numa posição fixa do espaço a valores possivelmente cambiantes sobre pontos de alguma família de trajetórias de um grupo inumerável de partículas, esse formalismo é na prática o mais utilizado.

1.2 Relações Constitutivas

Considerando que o campo material u é de fato a variável de interesse, uma vez que, se determinado, o valor de U em cada instante para qualquer subconjunto de Ω pode ser obtido através de uma integração volumétrica, a lei de conservação (1.6) é determinante apenas quando \mathbf{f} e q são funções conhecidas. Quando não, outras equações, que relacionem o fluxo local e os termos de fonte com o campo em questão, ou mesmo com campos materiais associados a outras grandezas, precisam ser suplementadas a fim de que se obtenha finalmente um sistema determinado. Quando essa interdependência introduz novas grandezas, suas leis de conservação aparecem acopladas e o problema é dito possuir um carácter vetorial; o caso mais simples, onde nenhuma outra grandeza precisa ser aduzida e logo tanto fluxo local quanto termo de fonte apresentam uma relação funcional apenas com o campo material u ou também com algumas de suas derivadas, é denominado um problema escalar.

1.2.1 Termos de fonte

Na maioria das aplicações esses termos são introduzidos como funções conhecidas definidas sobre o domínio de u . Sendo assim, sua lei de definição exerce o papel de equação suplementar. Entretanto, existem casos onde a taxa com que uma grandeza varia dentro de uma determinada região depende do valor instantâneo da grandeza; a energia de substâncias que exibem decaimento radioativo é um exemplo comum.

A relação constitutiva entre o termo de fonte de uma propriedade e o seu campo material, para o caso escalar, é então geralmente escrita como

$$q(\mathbf{x}, t) = Q(\mathbf{x}, t, u(\mathbf{x}, t)), \quad (1.7)$$

onde Q representa uma função conhecida dos parâmetros envolvidos.

1.2.2 Fluxos locais

A relação que o fluxo local de uma propriedade tem com o seu campo material é o atributo mais distintivo do modelo em construção. Do ponto de vista físico-macroscópico, o laço funcional entre essas grandezas é desenvolvido fenomenologicamente, visando certos processos observados, ou esperados, na dinâmica de U . Apesar de variados boa parte desses processos se encaixa formidavelmente em uma das duas seguintes classes de mecanismos, ou num misto de ambas, a saber: convecção e difusão. Cada uma dessas classes subentende uma relação constitutiva prototípica de onde um ajuste particular a cada caso de interesse determina o carácter do modelo.

Relações constitutivas convectivas

A relação-protótipo do processo de convecção assume que o fluxo local de uma grandeza U é uma função vetorial do campo material dessa grandeza, contudo, para que a dinâmica resultante se dê por processos puramente convectivos algumas condições devem ser adicionadas ao enunciado.

O caso mais simples de algum interesse que se pode propor é o denominado fluxo convectivo linear:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{a}(\mathbf{x}, t)u(\mathbf{x}, t), \quad (1.8)$$

onde \mathbf{a} é um campo vetorial solenoidal definido sobre o domínio de u . Os corpos ou sistemas modelados por essa relação recebem diversos nomes a depender dos critérios a que satisfaz \mathbf{a} . Esse campo em si é denominado velocidade de convecção de u em virtude de, como está demonstrado no Capítulo 2, o valor dessa propriedade no ponto (\mathbf{x}, t) ser propagado com tal velocidade.

Uma outra relação de maior interesse e complexidade é a do caso quasilinear homogêneo onde o fluxo local é exclusivamente uma função vetorial do campo material, isto é,

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}(u(\mathbf{x}, t)). \quad (1.9)$$

Quando \mathbf{F} e u são campos diferenciáveis, o campo-derivada $\mathbf{F}'(u)$ está definido e executa o mesmo papel do campo \mathbf{a} no caso linear. Propor um método numérico que produza soluções aproximadas satisfatórias àquelas equações derivadas do uso dessa relação e de sua extensão heterogênea define o propósito deste trabalho.

Enfim, a relação constitutiva convectiva mais geral é a do caso quasilinear heterogêneo:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{F}(\mathbf{x}, t, u(\mathbf{x}, t)), \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F} &= 0. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Relações constitutivas difusivas

Embora as relações constitutivas convectivas sejam úteis por apresentar bons resultados quando se espera um transporte orientado da propriedade modelada, o modelo oriundo dessas relações não é o mais fidedigno possível, pois na dinâmica de grandezas atribuídas a corpos materiais é recorrente o mecanismo de dissipação, no entanto, relação convectiva alguma é capaz de simular tal processo. Fenomenologicamente processos dissipativos, ou difusivos, são introduzidos por uma lei constitutiva conhecida como *lei de Fick*, [8], que atesta que o fluxo local de uma determinada propriedade é proporcional a, e se dá na direção oposta ao gradiente do campo material, ou seja,

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = -\kappa \nabla u(\mathbf{x}, t), \quad (1.11)$$

o parâmetro κ possui muitos nomes, indicando a amplitude do espectro de aplicações dessa relação. Neste texto, adota-se o termo difusividade de u .

Generalizações e extensões da relação constitutiva acima existem e têm aplicação direta na modelagem de escoamentos multifásicos envolvendo uma fase gasosa e na disciplina da Reologia, entretanto, para o que se presta este trabalho, a simples introdução da lei de Fick com κ uniforme e constante é suficiente.

1.3 Equações diferenciais parciais

A lei de conservação (1.6) representa a estrutura básica de derivação de equações diferenciais condizentes com a dinâmica da propriedade de interesse do corpo físico modelado. Munida das relações constitutivas apresentadas na secção 1.2 a lei de conservação em si já manifesta uma equação integral, aliás, de importância fundamental na análise de problemas onde o critério usual de diferenciabilidade de suas soluções não é atendido.

Se tal critério, no entanto, é assumido para todo o domínio do campo material u (perceba que o critério de diferenciabilidade depende do carácter da relação constitutiva; relações difusivas necessariamente assumem que os campos já são continuamente diferenciáveis, enquanto relações convectivas supõem *a priori* somente a integrabilidade do campo sobre o seu domínio) a lei de conservação pode ser reduzida a uma equação diferencial parcial.

Na demonstração dessa redução, contudo, faz-se uso de um resultado conhecido por **Teorema da Localização**, [15].

Proposição 1.1. *Considere B um conjunto aberto em \mathbb{E}^3 e $\phi : B \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua. Se para todo aberto $\Omega \subseteq B$*

$$\int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) dV = 0,$$

então

$$\phi(\mathbf{x}) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in B.$$

Demonstração. A prova é facilmente estabelecida por contradição. Assuma que exista algum $\mathbf{y} \in B$ tal que $\phi(\mathbf{y}) \neq 0$, por exemplo, assumamos que $\phi(\mathbf{y}) = 2\delta$ e $\delta > 0$. O caso $\delta < 0$ é tratado de maneira análoga. Então, porque ϕ é contínua, deve existir uma vizinhança $\Omega \subset B$ em torno de \mathbf{y} tal que $\phi(\mathbf{x}) > \delta$ para todo $\mathbf{x} \in \Omega$. Sobre esse conjunto tem-se

$$\int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) dV > \delta \text{vol}[\Omega] > 0,$$

o que contradiz a hipótese do teorema. Portanto $\phi(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in B$. □

Em posse do resultado acima enuncia-se a redução:

Proposição 1.2. *Se u e \mathbf{f} são funções continuamente diferenciáveis sobre o aberto regular $B \subseteq \mathbb{E}^3$ em cada instante $t \in [0, T]$, $T > 0$, e q é uma função contínua sobre esse mesmo domínio, então a lei de conservação (1.6) é equivalente à equação diferencial parcial*

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = q(\mathbf{x}, t), \quad (1.12)$$

no sentido de que ambas possuem o mesmo conjunto de soluções.

Demonstração. Seja Ω em (1.6) um aberto regular arbitrário contido em B cujo contorno $\partial\Omega$ é suave por partes. Uma vez que \mathbf{f} é continuamente diferenciável sobre Ω , o teorema da divergência estabelece a identidade entre as integrais:

$$\oint_{\partial\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dA = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) dV.$$

Uma vez que a região Ω é fixa no espaço e u é continuamente diferenciável em t o intercâmbio entre as operações de derivação e integração no primeiro termo da equação é permitido. Assim,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{x}, t) dV.$$

Finalmente, trazendo todos os termos, já substituídos, para o lado esquerdo da equação, obtém-se

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} u(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - q(\mathbf{x}, t) \right) dV = 0.$$

Fazendo uso da arbitrariedade de Ω , aplica-se portanto o teorema da localização sobre o termo entre parênteses para se determinar a redução. Assim, se u satisfaz a lei de conservação (1.6) e, conjuntamente com \mathbf{f} e q , atende os requisitos da proposição, então u é solução da EDP (1.12). □

1.3.1 Equações hiperbólicas e equações parabólicas

A inserção de uma relação constitutiva na equação (1.12) encerra o problema da modelagem. Não obstante todas as equações assim derivadas provirem de uma estrutura comum, a distinção entre as classes de relações constitutivas, apresentada na secção 1.2, transfere uma distinção equivalente às soluções das equações de que lhe fazem uso. Pode-se inclusive argumentar que a aceitação de uma relação constitutiva está na qualidade das soluções de sua respectiva equação diferencial e portanto fica estabelecida somente *a posteriori*. De fato, o argumento é plausível e suficiente. Porém, semelhantes relações constitutivas são normalmente oriundas de outros modelos; por exemplo, para lei de Fick há uma dedução mecânico-estatística de onde, aliás, se conclui que uma preferência estocástica por alguma direção no deslocamento de partículas introduz o elemento convectivo. Tais modelos ratificam o uso dessas relações e, mais importante, o sucesso de suas respectivas equações.

Na teoria clássica de equações diferenciais parciais distinguem-se as equações pelo comportamento de suas soluções. Certas equações, denominadas hiperbólicas, produzem soluções de onda, as relações constitutivas convectivas produzem equações desse tipo; outras são satisfeitas por soluções de carácter difusivo ou acumulativo, essas são chamadas de parabólicas; e há ainda uma terceira classe de equações cujas soluções modelam distribuições estáticas, recebendo o nome de elípticas. Esse trabalho limita-se ao estudo de equações hiperbólicas, no entanto, menções ao caso parabólico são ocasionalmente pertinentes.

De tal forma, substituindo a relação (1.10) na equação (1.12), obtém-se uma **EDP quasilinear hiperbólica de primeira ordem** bastante geral, excluindo termos de fonte:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}, t, u(\mathbf{x}, t)) = 0. \quad (1.13)$$

A condição de \mathbf{F} ser solenoidal sobre as variáveis espaciais implica em

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial u} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (1.14)$$

Caso particulares da equação anterior de especial interesse são:

Equação de convecção linear uniforme

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.15)$$

onde \mathbf{a} é um vetor constante.

Equação de convecção linear não-uniforme

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + \mathbf{a}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.16)$$

onde \mathbf{a} é um campo vetorial solenoidal.

Equação de convecção não-linear uniforme

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}'(u(\mathbf{x}, t)) \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.17)$$

onde \mathbf{F} é uma função vetorial de u .

Equação de transporte

$$\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x}, t) + f'(u(\mathbf{x}, t))\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.18)$$

onde f é uma alguma função continuamente diferenciável de u e \mathbf{v} é um campo solenoidal.

Como mencionado, relações constitutivas convectivas produzem equações cujas soluções são incapazes de reproduzir o fenômeno de dissipação; em outras palavras, soluções de EDP hiperbólicas não exibem difusão. Dado que qualquer sistema natural apresenta algum mecanismo de dissipação, ainda que pequeno, essa é uma falta considerável do modelo. Uma correção espontânea é a de simplesmente introduzir o processo difusivo na relação constitutiva, isto é, adicionar o termo de Fick à relação (1.10),

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t, u(\mathbf{x}, t)) - \kappa \nabla u(\mathbf{x}, t). \quad (1.19)$$

Tal procedimento é satisfatório, entretanto, tem considerável impacto na teoria das equações diferenciais parciais que dele resultam. A não-linearidade do termo convectivo introduz sérias dificuldades à tal teoria, algumas contudo capazes de ser transpostas quando as equações são hiperbólicas, ou seja, κ é nulo. A presença do termo difusivo impede tais avanços e sugere a necessidade de uma teoria distinta para o tratamento das novas equações. De toda forma, o modelo hiperbólico se demonstra razoável quando a difusividade da propriedade é pequena e, assumindo continuidade das soluções com os parâmetros de suas respectivas equações, é bastante sensato olhar para as soluções de problemas hiperbólicos como casos-limites das soluções dos problemas parabólicos a eles associados quando κ tende a zero. Tal observação, embora pareça frívola, é o ponto fundamental naquilo que concerne à unicidade das soluções dos problemas hiperbólicos não-lineares.

1.4 Escoamento bifásico em meios porosos: um exemplo de modelagem

Da multitude de EDP hiperbólicas não-uniformes, um caso de especial interesse é o da equação de transporte. A equação é particularmente recorrente no campo da dinâmica de fluidos devido à ampla aplicabilidade dos campos de velocidade solenoidais. O nome da equação deriva do fato de que ela modela o transporte de uma grandeza u ao longo do escoamento definido por \mathbf{v} . A convecção da propriedade, no entanto, é controlada por uma função, o que resulta na relação constitutiva $\mathbf{F} = f(u)\mathbf{v}$ e por conseguinte na equação (1.18). As equações (1.15) e (1.16) são obviamente casos particulares da equação de transporte quando essa função de controle é proporcional a propriedade.

Uma área em que a não linearidade dessas funções tem importância fundamental é a teoria de escoamentos bifásicos em meios porosos.

1.4.1 A lei de Darcy

Na física de meios porosos, a relação fenomenológica que o campo de velocidades de uma fase material, denotada por α , tem com o seu campo de pressão é estabelecida pela famosa lei de Darcy, [9].

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \mathbb{K} \nabla P_\alpha. \quad (1.20)$$

A relação acima é mais geralmente enunciada quando em vez do campo de pressão se introduz o potencial hidráulico da fase. Todavia, para que efeitos gravitacionais não venham complicar a exposição, assume-se que influências decorrentes da gravidade são desprezíveis. O parâmetro \mathbb{K} , chamado de permeabilidade absoluta, é uma propriedade intrínseca ao meio poroso, isto é, não depende da natureza dos fluidos que o preenchem, usualmente concebida como um tensor de segunda ordem. Meios porosos em que \mathbb{K} não varia espacialmente são denominados homogêneos e aqueles em que tal propriedade pode ser satisfatoriamente modelada como um tensor escalar denomina-se isotrópicos. A permeabilidade absoluta é um parâmetro muito difícil de ser modelado dada a complexidade do sistema do qual provém. Mais ainda, os melhores modelos são em geral estocásticos, o que profundamente dificulta a análise dos problemas baseado na equação (1.20). Por essas razões, imagina-se na exposição que se segue o parâmetro do modo mais simples possível, logo restringindo o meio poroso ao caso homogêneo e isotrópico.

Dentre os demais parâmetros, μ_α representa a viscosidade dinâmica da fase, bem como P_α e k_α simbolizam respectivamente sua pressão e sua permeabilidade relativa. O chamado campo de velocidades darciano, denotado por \mathbf{v}_α , na verdade

representa a vazão volumétrica média, por unidade de área, da fase α , na medida que a lei de Darcy não modela o escoamento real de fluidos através de meios porosos, mas um escoamento quantitativamente equivalente a este, segundo algumas premissas de regime, definido sobre um meio contínuo munido de grandezas próprias e oriundas do processo de homogenização que estabelece a conexão entre o modelo de escoamento real e o de Darcy.

Saturação e permeabilidade relativa

A permeabilidade relativa de uma determinada fase é um parâmetro de indicação do quão móvel é a fase em questão dentro das possibilidades do meio. A esse respeito, é impossível conceber a condução de uma fase fluida num meio poroso sem aludir a grandeza de maior distinção da teoria: a **porosidade**, ou seja, a razão entre o volume ocupado por todas as fases fluidas e o volume da região efetivamente identificada com o meio poroso. Sendo uma simples razão volumétrica, no entanto, a porosidade não carrega consigo informações a respeito da topologia desses volumes, um dado de grande importância também na modelagem de permeabilidades. Se vista como uma grandeza atribuída a todo o meio, a porosidade perde bastante utilidade no arcabouço da teoria. Por essa razão, quando convém ao tratamento teórico, o parâmetro é definido com um campo material nos mesmos moldes da equação (1.4). O mesmo é válido para as outras grandezas da teoria.

Embora o corpo modelado seja na verdade o meio poroso-equivalente, ou o meio homogeneizado, imagens conceituais do meio poroso real e de sua dinâmica são bastante úteis principalmente porque elas revelam ou indicam a maneira com que certas propriedades estão vinculadas entre si. Um bom exemplo deste fato é oferecido pelo escoamento estacionário bifásico em um meio poroso. Caso se assuma que a permeabilidade de um meio é uma função de sua porosidade, então o que se conclui é que nesse tipo de regime a permeabilidade relativa *a uma dada fase* é uma função do volume poroso ocupado por ela, logo, uma função da fração da porosidade correspondente àquela fase. Isto porque em um escoamento estacionário se supõe que cada fase se distribui ao longo do meio segundo uma topologia fixa, o que na visão dinâmica da outra fase contribui como se o meio que ela efetivamente ocupa tem a porosidade reduzida pelo volume ocupado fase distinta. Denotando-se a porosidade do meio poroso por ϕ , tem-se então

$$\mathbb{K} \equiv \mathbb{K}(\phi),$$

implicando que a permeabilidade relativa a fase α é

$$\mathbb{K}_\alpha \equiv \mathbb{K}_\alpha(S_\alpha\phi).$$

O parâmetro S_α é denominado de saturação da fase α e indica a fração do volume poroso ocupado efetivamente por ela. Supõe-se que todo o volume poroso é

ocupado por alguma fase fluida, logo a equação

$$S_1 + S_2 = 1 \quad (1.21)$$

decorre para o escoamento bifásico.

A hipótese então estendida sobre a permeabilidade relativa a uma fase é a de que ela é composta do produto entre a permeabilidade do meio, termo que carrega toda a dependência com a porosidade, e uma função da saturação denominada permeabilidade relativa *da fase*, ou seja,

$$\mathbb{K}_\alpha = k_\alpha(S_\alpha)\mathbb{K}(\phi), \quad (1.22)$$

supõe-se ainda que tal relação permanece válida para um regime não-estacionário de escoamento.

1.4.2 Equações de conservação de massa

Com todas as grandezas do modelo apresentadas, a lei de conservação (1.6) fornece a estrutura básica para a derivação das equações do modelo. O princípio a ser utilizado é o da conservação de massa de cada fase participante. Em meios não-porosos a massa de um corpo material delimitado por uma região Ω é dada consoante a equação (1.14), onde a propriedade extensiva U toma o papel da massa e o seu campo material u introduz o campo de densidade do corpo. Quando o meio é poroso, entretanto, o volume da região não corresponde ao volume de um único corpo físico; massas fluidas ocupam apenas o volume poroso e uma dada fase somente uma fração deste volume, fração esta determinada pela respectiva saturação. De modo que o campo material correspondente a massa de uma fase fluida não abrange apenas a densidade da fase, mas também sua saturação e a porosidade do meio. Portanto,

$$M_\alpha[\Omega] = \int_{\Omega} \rho_\alpha S_\alpha \phi dV. \quad (1.23)$$

Conforme sugerido no começo desta seção, a relação constitutiva que modela o fluxo local de cada fase saturante de um meio poroso é aquela de que resulta a equação de transporte, onde o campo de velocidades por esta relação introduzido advém da lei de Darcy, (1.20). Dessa forma reduz-se a lei de conservação 1.6 ao caso em questão,

$$\frac{d}{dt} M_\alpha[\Omega] = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_\alpha S_\alpha \phi dV = \oint_{\partial\Omega} \rho_\alpha \frac{k_\alpha(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \mathbb{K}(\phi) \nabla P_\alpha \cdot \mathbf{n} dA$$

e, dada a equivalência entre a lei de conservação e a equação diferencial (1.12) quando seus parâmetros representam funções continuamente diferenciáveis, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_\alpha S_\alpha \phi) - \nabla \cdot \left(\rho_\alpha \frac{k_\alpha(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \mathbb{K}(\phi) \nabla P_\alpha \right) = 0.$$

Muitas outras hipóteses costumam ainda ser assumidas sobre a equação acima. Para regimes de escoamento onde não se espera uma compactação ou dilatação do meio poroso, a porosidade é com boa aproximação constante. Fases líquidas também apresentam pouca variação em suas densidades em respeito às variações na pressão a que se sujeitam. Essas duas observações simplificam consideravelmente as equações-modelos, definindo em contraponto as equações do escoamento bifásico de fases incompressíveis em um meio poroso rígido. Além disso, se o meio é considerado homogêneo em termos de sua porosidade, é permitido escrever a lei de conservação local de cada fase simplesmente como uma equação de transporte de sua saturação:

$$\frac{\partial S_\alpha}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k_\alpha(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P_\alpha \right) = 0.$$

A obtenção da distribuição da saturação de uma fase em um meio poroso que atende as premissas levantadas até este ponto representa o maior objetivo da modelagem de um escoamento bifásico em tais sistemas. Em mãos de semelhante distribuição, tem-se o conhecimento do conteúdo de cada fase numa região especificada, do fluxo de cada fase, ou seja, informação a respeito do modo e da intensidade de suas irrupções e erupções no meio, e, subjacente, a distribuição de saturação da outra fase, uma vez que ambas atendem a identidade (1.21). Este último fato permite constatar que o campo de velocidade total, isto é, a soma dos campos de velocidade de cada fase, é solenoidal. Dado que

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{\partial S_2}{\partial t} = 0,$$

tem-se

$$\nabla \cdot \left(\frac{k_1(S_1)}{\mu_1} \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P_1 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k_2(S_2)}{\mu_2} \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P_2 \right) = 0,$$

o que implica

$$\nabla \cdot \left(\frac{k_1(S_1)}{\mu_1} \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P_1 + \frac{k_2(S_2)}{\mu_2} \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P_2 \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{\phi} \right) = 0.$$

Quando efeitos associados à tensão superficial entre as fases fluidas podem ser desprezados, pode-se definir um único campo de pressão das fases fluidas, P , o

que simplifica tanto a expressão para \mathbf{v} quanto a equação que este campo satisfaz. Assim, reescreve-se

$$\mathbf{v} = - \left(\frac{k_1(S_1)}{\mu_1} + \frac{k_2(S_2)}{\mu_2} \right) \mathbb{K}(\phi) \nabla P, \quad (1.24)$$

o termo em parênteses é denominado mobilidade total das fases fluidas, sendo cada parcela conhecida pelo nome de mobilidade da fase. Para esse caso simplificado, a velocidade de cada fase é proporcional a velocidade total, permitindo que se reescreva a equação de transporte para a saturação de uma fase como

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{f(S_1)}{\phi} \mathbf{v} \right) &= 0, \\ f(S_1) &= \left(1 + \frac{\mu_1 k_2(1 - S_1)}{\mu_2 k_1(S_1)} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

A definição do campo de velocidade total, em conjunto com o fato de que tal campo é solenoidal na ausência de fontes, e a equação (1.25) constituem o modelo matemático básico do escoamento bifásico em meios porosos, conforme as restrições assumidas na derivação. A função f , reguladora do transporte da fase cuja saturação foi escolhida por parâmetro, é chamada de fluxo fracional e, obviamente, faz-se necessário suprir o modelo com as duas relações de permeabilidade relativa para que se possa enfim fechá-lo. Relações do tipo lei de potência são bastante usuais, já que na prática são obtidas de ajustes de dados obtidos de ensaios laboratoriais.

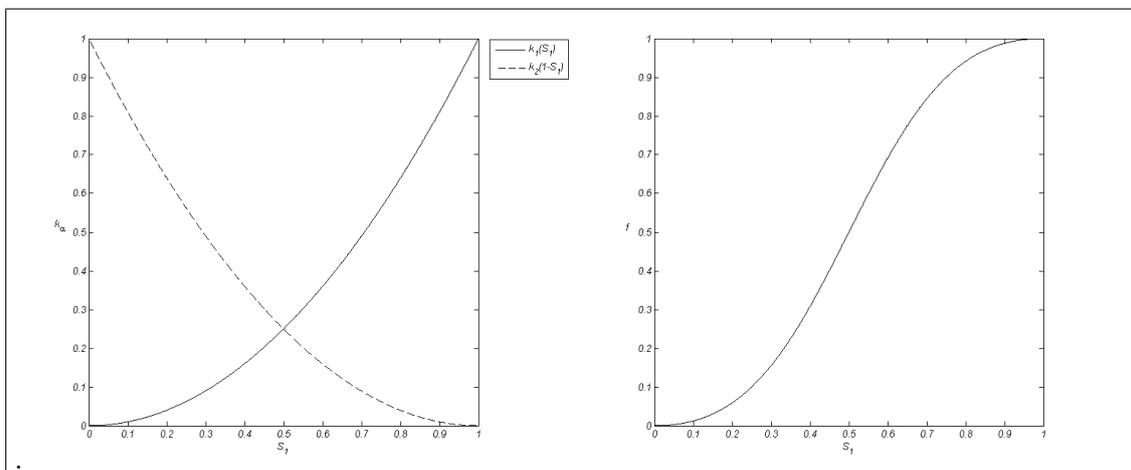


Figura 1.1: Permeabilidade relativa e fluxo fracional para um lei de potência parabólica, $k_\alpha = S_\alpha^2$, e $M = \frac{\mu_1}{\mu_2} = 1$

O tema permeabilidade relativa é contudo bastante intrincado, posto que a extensão feita sobre aquele raciocínio válido apenas para o regime estacionário (*ver*

equação (1.22)) tem diversas implicações. Adentrar neste assunto entretanto vai além do desejado para o presente trabalho. Ao leitor interessado, indica-se a obra *Movimiento de fluidos en reservorios de hidrocarburos*,[11].

CAPÍTULO 2

Rudimentos da teoria de problemas hiperbólicos

Neste capítulo é desenvolvida uma parte da teoria de equações lineares hiperbólicas enquanto são apresentadas aquelas ideias-chaves que orientam à construção do esquema numérico proposto no trabalho. Algumas definições são introduzidas e algumas proposições gerais, que concernem às soluções exatas das equações diferenciais, são apresentadas e provadas. Uma menção a respeito da notação utilizada a partir desse ponto por todo o resto do trabalho deve ser feita. Embora a notação compacta introduzida no capítulo 1 ofereça uma economia visual às equações, seu uso, na opinião do autor, empobrece a didática da exposição. Por esse motivo adota-se uma notação aberta e que explicitamente identifica a dimensão geométrica dos problemas. Abandona-se majoritariamente o uso de parciais na notação, substituindo-os por subscritos. Uma vez que as duas notações são de uso comum, acredita-se que a troca de uma notação pela outra quando conveniente não gera maiores infortúnios. Assume-se que todos os parâmetros envolvidos estão definidos sobre o espaço de triplas $\mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$, ou, quando explicitamente mencionado, sobre algum subconjunto do mesmo.

Todas as proposições apresentadas neste capítulo, bem como as suas respectivas provas, são próprias do autor. Muitas são pequenas extensões de resultados comumente encontrados em qualquer tratado da teoria. A falta por todo possível equívoco ou incongruência cometido ao longo do texto, no entanto, deve cair sobre aquele que o comete.

2.1 A equação de convecção linear

Considere o problema de Cauchy composto da equação da convecção linear em conjunto com a condição inicial $u_0 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.

$$\begin{aligned}u_t + au_x + bu_y &= 0, \quad a, b \in \mathbb{R} \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y)\end{aligned}\tag{2.1}$$

A solução de tal problema é bastante sugestiva quando se analisa a equação como um problema geométrico em seu domínio. O vetor $(u_x, u_y, u_t)^T$ representa o gradiente de uma função $u(x, y, t)$ que se supõe definida sobre $\mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$. A equação do problema (2.1) é equivalente então à condição de ortogonalidade

$$(a, b, 1) \cdot (u_x, u_y, u_t) = 0.$$

Logo, o gradiente de uma solução da equação é ortogonal ponto a ponto ao vetor $(a, b, 1)$, em outras palavras, a derivada direcional de u ao longo da direção definida por esse vetor é nula, o que por sua vez sugere que a solução é constante ao longo de cada uma das curvas da família de retas paralelas de inclinação definida pelo vetor. As retas no entanto partem todas do plano $t = 0$, onde uma condição inicial está definida. De maneira que a solução do problema é determinada simplesmente pela propagação do valor da condição u_0 sobre um ponto desse plano ao longo da reta da família que se origina nele.

O procedimento descrito acima para obtenção de uma solução para o problema simples apresentado, embora qualitativo, introduz alguns dos principais conceitos da teoria das equações diferenciais parciais hiperbólicas: primeiramente, a noção de propagação da condição inicial, ou correspondentemente a natureza ondulatória das soluções de um problema hiperbólico, e, em segundo lugar, a indicação de uma estrutura geométrica ao longo da qual essa propagação ocorre.

Com o intuito de introduzir algum rigor no solucionamento do problema e de, inclusive, tornar evidente os pontos essenciais da teoria, demonstra-se abaixo o que se entende por tal estrutura.

2.1.1 Curvas características

Seja $u : \mathbb{R}^2 \times [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ uma solução do problema (2.1), supondo que de fato existe uma solução, e seja $X : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$ a reta $X(s) =$

$(x(s), y(s), t(s))^T$ definida pela solução do problema

$$\begin{aligned}x'(s) &= a \\y'(s) &= b \\t'(s) &= 1 \\x(0) &= x_0 \\y(0) &= y_0 \\t(0) &= 0,\end{aligned}\tag{2.2}$$

onde x_0 e y_0 são coordenadas de um ponto arbitrário de \mathbb{R}^2 .

Ao se diferenciar a composição $u \circ X$, obtém-se então

$$\begin{aligned}\frac{d}{ds}u(X(s)) &= u_x(X(s))x'(s) + u_y(X(s))y'(s) + u_t(X(s))t'(s) \\ &= au_x(X(s)) + bu_y(X(s)) + u_t(X(s)).\end{aligned}$$

Uma vez que u é assumidamente uma solução de (2.1), o termo do lado direito da equação acima é nulo, de onde se conclui que u não muda de valor ao longo da reta parametrizada por X . Logo

$$u(x(s), y(s), t(s)) = u(x_0, y_0, 0) = u_0(x_0, y_0), \quad \forall s \geq 0.$$

O resultado acima sugere a seguinte proposição:

Proposição 2.1. *O problema de Cauchy para a equação de convecção linear, sumarizado em (2.1), tem solução única.*

Demonstração. A existência da solução foi estabelecida acima. Os valores da condição inicial são propagados ao longo das retas definidas como a solução do problema (2.2). Uma vez que todas as retas são paralelas, em cada ponto do domínio de u passa apenas uma única reta, implicando que a cada ponto um único valor de u está associado. Tal procedimento é exatamente o motivado pela discussão anterior a essa subsecção. A prova da unicidade da solução assim produzida é trivial, uma vez que a solução de um problema de Cauchy com condição inicial idênticamente nula é idênticamente nula. \square

As retas ao longo das quais a condição inicial é propagada são denominadas **curvas características**, ou simplesmente **características** do problema (2.1). Conforme mencionado e se tentará evidenciar no decorrer deste capítulo, o conceito é de grande valia no desenvolvimento de uma teoria para problemas hiperbólicos. Outro conceito de fundamental importância advém da observação que, para todos os pontos de uma característica, o valor que assumem depende somente da condição

inicial do problema em questão e do ponto de que parte a curva. O conjunto constituído por este único ponto é chamado de **domínio de dependência** dos pontos por que passa a característica que emana dele. Por sua vez o conjunto dos pontos que possuem um mesmo ponto em seu domínio de dependência compõe a **zona de influência** deste ponto.

2.1.2 Condições iniciais descontínuas e soluções generalizadas

O método das características, como a partir deste ponto será conhecido o procedimento de se derivar uma solução para o problema (2.1), ou para qualquer outro problema hiperbólico apresentado neste trabalho, propagando-se os valores da condição inicial ao longo de suas curvas características, permite que se escreva explicitamente a solução do problema em termos dos parâmetros que nele aparecem.

Seja (x, y, t) um ponto arbitrário do domínio da solução do problema (2.1), considere então a característica que passa por ele. De (2.2) decorre que

$$\begin{aligned}x &= x_0 + at, \\y &= y_0 + bt,\end{aligned}$$

onde se faz uso da igualdade entre s e t .

Uma vez que $u(x, y, t) = u_0(x_0, y_0)$, tem-se então

$$u(x, y, t) = u_0(x - at, y - bt) \tag{2.3}$$

por solução geral do problema (2.1). Pictoricamente, cada instantâneo da solução se identifica com o gráfico da função u_0 deslocado ao longo da direção do plano definida pelo par (a, b) .

No desenvolvimento das ideias acima, supôs-se que a solução u era contínua e diferenciável, o que, em razão do método proposto, se obtém caso a condição inicial u_0 atenda a essas condições. O método das características no entanto, bem como a fórmula (2.3), não parece requerê-las. Com efeito, caso se assuma que u_0 é uma função diferenciável por partes, suponha por exemplo que as regiões onde u_0 é contínua e diferenciável dividem o plano \mathbb{R}^2 em duas regiões disjuntas e ilimitadas, separadas por uma curva suave por partes, então por meio do método se constrói uma função u cujas regiões de diferenciabilidade, a cada $t \geq 0$, também dividem o plano em duas regiões ilimitadas separadas por uma curva suave por partes. Além disso, u satisfaz a equação da convecção linear em cada uma dessas regiões e atende à fórmula (2.3).

Funções com essas propriedades não são soluções do problema (2.1) no sentido estrito. Presumivelmente, por se tratar de um problema diferencial suas soluções

devem ser diferenciáveis. No entanto, a equação da convecção linear não é o elemento de significado fundamental do modelo. Como se demonstra no capítulo 1 do presente trabalho, ela deriva de uma lei de conservação sobre a qual adicionalmente se supõe diferenciabilidade dos parâmetros envolvidos. Tal requisito, contudo, não é necessário a todas as soluções da lei de conservação.

Proposição 2.2. *Seja $u(x, y, t) = u_0(x - at, y - bt)$, onde $u_0 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função integrável sobre todo o domínio, diferenciável por partes e cujas regiões de diferenciabilidade definem uma partição \mathcal{P}_0 do plano com um número finito de elementos, suponha também que as fronteiras dessas regiões são formadas por curvas suaves por partes, então para todo aberto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ de fronteira $\partial\Omega$ suave por partes, u satisfaz a lei de conservação*

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(x, y, t) dA = - \oint_{\partial\Omega} (u(x, y, t) \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}(x, y) dl, \quad (2.4)$$

com $\mathbf{v} = (a, b)^T$.

Demonstração. O primeiro ponto da prova consiste em se mostrar que a cada instante, $t \geq 0$, u também define uma partição \mathcal{P}_t do plano onde cada elemento da partição se identifica com uma região onde u é diferenciável. Para tanto, basta perceber que para cada instante as características compõem um mapeamento entre pontos do plano. Para qualquer ponto do plano (x_0, y_0) e algum $t \geq 0$ existe um único outro ponto (x, y) do plano. Assim, \mathcal{P}_t pode ser visualizada como um simples deslocamento de \mathcal{P}_0 ao longo da direção definida por \mathbf{v} . Considere então a partição de Ω definida pela intersecção do conjunto com os elementos de \mathcal{P}_t . A equação (2.4) pode então ser reescrita por

$$\frac{d}{dt} \sum_i \int_{\Omega_i} u(x, y, t) dA = - \sum_i \oint_{\partial\Omega_i} (u(x, y, t) \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}(x, y) dl,$$

onde Ω_i simboliza cada um dos elementos da partição restrita a Ω . Permutando-se a soma com a diferenciação e fazendo uso do fato de que u é diferenciável em cada uma das regiões, resulta em

$$\sum_i \int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial}{\partial t} u(x, y, t) + \nabla \cdot (u(x, y, t) \mathbf{v}) \right) dA = 0.$$

Para completar a demonstração, note que $u(x, y, t) = u_0(x - at, y - bt)$ anula cada um dos integrandos acima. \square

É evidente que as condições impostas à condição inicial u_0 na proposição acima não exaurem as possibilidades de solução para (2.4); provar, no entanto, que a

conservação é estabelecida por uma função $u(x, y, t) = u_0(x - at, y - bt)$, u_0 sendo uma função integrável qualquer, é uma tarefa um tanto mais complicada. Funções, como a que decorre da Proposição (2.2), que falham em satisfazer o critério de diferenciabilidade, não sendo, portanto, estritamente soluções do problema (2.1), mas que atendem a conservação descrita por (2.4) em qualquer aberto Ω de seu domínio, são denominadas de **soluções generalizadas** do problema, ou **soluções fracas**, aludindo ao fato de que estas soluções não preenchem rigorosamente os requisitos impostos às soluções de (2.1). A importância fundamental que a inclusão dessa classe de soluções tem dentro da teoria geral é facilmente identificada quando se trata de equações mais complexas.

2.1.3 A equação de convecção linear não-uniforme

O caso onde o campo de velocidade convectivo é não-uniforme, isto é, a e b em (2.1) não são constantes mas funções definidas sobre o $\mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$, não difere consideravelmente do caso uniforme, tratado aqui em detalhe. A condição que tais funções são diferenciáveis por todo o domínio garante a existência das soluções do problema (2.2) para todo t . A construção da solução segue portanto de forma muito semelhante à apresentada acima. Algumas distinções, contudo, são dignas de nota. A propagação da condição inicial não se dá mais por uma família de retas paralelas mas por uma família de curvas a dois parâmetros, a saber, coordenadas do plano sobre que está definida a condição inicial. A estrutura característica do problema em todo caso existe e está bem definida. Uma fórmula explícita para a solução geral do problema não estará disponível em geral, porém do ponto de vista quantitativo o valor da solução em qualquer ponto está determinado. Por último, soluções generalizadas são similarmente definidas, no entanto, a cinemática de uma curva de descontinuidade neste caso é normalmente bastante complexa.

2.2 Equações hiperbólicas quasilineares

No capítulo 1 se discutiu a natureza das leis de conservação e como, a partir de uma estrutura comum a todas elas, são derivadas diversas equações diferenciais parciais. O elemento responsável pela distinção de uma equação particular às outras é a relação constitutiva atribuída ao modelo, ou seja, a dependência funcional que o fluxo local \mathbf{f} tem com a variável u . Ainda naquele capítulo, foi mencionado que apenas nas equações onde essa relação constitutiva é uma função vetorial exclusiva dos parâmetros (x, y, t, u) se deduz o carácter hiperbólico, ou de onda, das soluções. No que se segue, pretende-se evidenciar o porquê da afirmação.

A equação (1.13) representa, como se pôs no último capítulo, um caso mais geral de EDP quasilinear hiperbólica de primeira ordem. Demonstrar que qualquer

problema de Cauchy envolvendo tal equação possui uma estrutura característica ao longo da qual os valores da condição inicial são propagados constitui o problema central da teoria das equações hiperbólicas. Tal problema é substancialmente complicado pela não-linearidade, atributo não introduzido na análise da secção anterior. É possível entretanto redeclarar o problema de um modo que facilite a argumentação e não necessite da solução de um problema tão complexo a priori.

Proposição 2.3. *Considere o problema abaixo*

$$\begin{aligned} u_t + f_u u_x + g_u u_y &= 0, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y). \end{aligned} \tag{2.5}$$

Se existe uma solução u definida sobre todo o domínio para o problema acima, o problema então possui um estrutura característica bem definida de onde se conclui o comportamento ondulatório de sua solução.

Demonstração. Visto que a solução existe, note que ela é constante ao longo das curvas integrais do problema:

$$\begin{aligned} x'(t) &= f_u(x(t), y(t), t, u[t]), \\ y'(t) &= g_u(x(t), y(t), t, u[t]), \\ u'[t] &= 0, \\ x(0) &= x_0, \\ y(0) &= y_0, \\ u[0] &= u_0(x_0, y_0), \end{aligned}$$

onde $u[t] = u(x(t), y(t), t)$. A existência da solução portanto implica na existência da estrutura característica do problema. \square

A adição de termos de fonte não altera a classe das EDPs envolvidas desde que a ordem do termo seja igual ou inferior a ordem da equação. Para o caso das EDPs hiperbólicas quasilineares de primeira ordem, termos de fonte do tipo (1.7) podem ser facilmente introduzidos sem que a hiperbolicidade das equações seja perdida. Perceba que na presença de termos de fonte o valor que a solução do problema assume sobre uma curva característica deixa de ser constante para obedecer uma evolução ao longo de cada característica do problema. A introdução de um elemento difusivo, entretanto, se interpretada como a adição de um termo de fonte na equação, impossibilita uma construção semelhante. Perceba que na presença de um termo dissipativo a EDP do problema (2.5) é reescrita como

$$u_t + f_u u_x + g_u u_y = \kappa (u_{xx} + u_{yy}).$$

A aplicação do método das características a esse tipo de problemas não os reduz à solução de um sistema de equações ordinárias como antes, bem como não introduz a noção de que exista uma família de curvas ao longo das quais a condição inicial seja propagada.

A questão da existência de soluções para o problema (2.5) se revela muito intrincada para o caso geral, de campo não-linear e heterogêneo, de modo que uma simplificação bastante sensata e possivelmente recompensadora neste sentido, uma vez que o caso linear não apresenta dificuldades, é o de introduzir a não-linearidade de maneira uniforme.

2.3 Equação de convecção não-linear uniforme

Considere um problema de Cauchy envolvendo a equação (1.17), onde $\mathbf{F} = (f, g)^T$ é uma função vetorial exclusiva de u , e uma condição inicial suave $u_0 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, ou seja,

$$\begin{aligned} u_t + f'(u)u_x + g'(u)u_y &= 0, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y). \end{aligned} \tag{2.6}$$

Como argumentado na secção passada, o problema acima é hiperbólico e por isso se presta à aplicação do método das características. Se se supõe então a existência de $u : \mathbb{R}^2 \times [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ uma solução do problema e se considera, $X : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$, a curva $X(t) = (x(t), y(t), t)^T$ definida pela solução do problema

$$\begin{aligned} x'(t) &= f'(u(X(t))), \\ y'(t) &= g'(u(X(t))), \\ x(0) &= x_0, \\ y(0) &= y_0, \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde x_0 e y_0 são coordenadas de um ponto arbitrário de \mathbb{R}^2 , novamente, diferenciando-se a composição $u \circ X$ com respeito a t , obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds}u(X(s)) &= u_x(X(s))x'(s) + u_y(X(s))y'(s) + u_t(X(s))t'(s) \\ &= f'(u(X(s)))u_x(X(s)) + g'(u(X(s)))u_y(X(s)) + u_t(X(s)), \end{aligned}$$

uma vez que u é uma solução de (2.6). O valor da solução é conseqüentemente constante ao longo das curvas integrais de (2.7). Note ainda que, como $u(X(t)) = u_0(x_0, y_0)$, $\forall t \geq 0$, $f'(u(X(t)))$ e $g'(u(X(t)))$ também são constantes ao longo de uma curva integral; tais curvas são portanto semirretas.

Diferentemente do caso com a equação de convecção linear, curvas integrais distintas podem agora concorrer a algum ponto (x, y, t) . Esse cruzamento dificulta

a identificação dessas curvas com as características do problema, impossibilitando assim a construção de uma solução para (2.6) para todo t positivo como se supunha. A solução porém pode existir até um determinado tempo $T > 0$, o instante em que o primeiro cruzamento entre duas ou mais curvas ocorre, conhecido pelo nome de **tempo de quebra** do problema. Uma família de curvas a dois parâmetros pode então ser construída até T , isto é, a correspondência entre curvas integrais do problema (2.7) e curvas características do problema pode ser estabelecida até esse instante.

A proposição a seguir determina esse tempo T a partir dos parâmetros do problema.

Proposição 2.4. *O problema (2.6) tem solução única $\forall t \geq 0$ se a função, definida sobre todo \mathbb{R}^2 ,*

$$\Theta(x_0, y_0) = f''(u_0(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u_0(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)$$

é não-negativa. Caso contrário:

i) O problema ainda terá solução única, embora definida apenas para o intervalo $[0, T)$, com T determinado por

$$T = \min_{(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2} \frac{-1}{\Theta(x_0, y_0)}.$$

se a função Θ é estritamente negativa.

ii) O problema não tem solução.

Demonstração. Em contrapartida à expressão do resultado, a prova é razoavelmente simples; ela se baseia na ideia de se considerar a estrutura característica de um determinado problema como uma família de mapeamentos de pontos do plano em pontos do plano. Obviamente, esse mapeamento é bijetivo enquanto não houver cruzamento de curvas características.

Suponha que não há cruzamento entre características até um certo instante $T > 0$. Então para todo $t \in [0, T)$ as equações

$$\begin{aligned} x &= x_0 + f'(u(x_0, y_0))t \\ y &= y_0 + g'(u(x_0, y_0))t \end{aligned}$$

definem um mapa bijetivo entre o par de pontos (x_0, y_0) e (x, y) de \mathbb{R}^2 . Como $u(x, y, t) = u_0(x_0, y_0)$, $\forall t \in [0, T)$ e u_0 é continuamente diferenciável; a diferenciabilidade de u é regida pela continuidade dos termos das equações abaixo

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} u(x, y, t) &= \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) \frac{\partial x_0}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) \frac{\partial y_0}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} u(x, y, t) &= \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) \frac{\partial x_0}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) \frac{\partial y_0}{\partial y} \end{aligned}$$

Diferenciando implicitamente as equações do mapeamento, obtém-se o sistema linear

$$\begin{aligned} \left(1 + f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial x_0}{\partial x} + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial y_0}{\partial x} &= 1 \\ \left(1 + f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial x_0}{\partial y} + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial y_0}{\partial y} &= 0 \\ \left(g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial x_0}{\partial x} + \left(1 + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial y_0}{\partial x} &= 0 \\ \left(g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial x_0}{\partial y} + \left(1 + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t\right) \frac{\partial y_0}{\partial y} &= 1 \end{aligned}$$

cuja solução fornece

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_0}{\partial x} &= \frac{\left(1 + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t\right)}{\left(1 + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)\right) t\right)} \\ \frac{\partial y_0}{\partial x} &= \frac{-g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t}{\left(1 + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)\right) t\right)} \\ \frac{\partial x_0}{\partial y} &= \frac{-f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) t}{\left(1 + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)\right) t\right)} \\ \frac{\partial y_0}{\partial y} &= \frac{\left(1 + f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) t\right)}{\left(1 + \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)\right) t\right)} \end{aligned}$$

Note que todos os termos acima possuem um denominador comum; da mesma forma as derivadas $\frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$ são inversamente proporcionais a esse termo. Para um dado ponto $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ esse denominador se anula para um valor de t determinado por

$$-1$$

$$\frac{-1}{\left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0)\right) t}$$

Portanto, se, para todo $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$, tem-se a expressão acima negativa, a matriz jacobiana do mapa definido pela estrutura característica do problema é não-singular para todo $t \geq 0$, o que significa que as características nunca se cruzam e que a solução obtida pelo método é diferenciável. Equivalentemente, faz-se $T \rightarrow +\infty$. Por outro lado, se a expressão é estritamente positiva, uma vez que se supõe u diferenciável $\forall t \in [0, T)$, obtém-se

$$T = - \min_{(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2} \left(f''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial x_0} u_0(x_0, y_0) + g''(u(x_0, y_0)) \frac{\partial}{\partial y_0} u_0(x_0, y_0) \right)^{-1}.$$

Por fim, se a expressão não é nem estritamente positiva, nem não-positiva, o problema não tem solução no sentido usual da palavra, uma vez que o tempo de quebra correspondente é nulo. O enunciado da proposição resume essas ideias. \square

Perceba que a função Θ definida na proposição é idêntica ao divergente do campo de velocidade inicial $(f'(u_0), g'(u_0))$. Esse resultado oferece uma interpretação interessante para a proposição 2.4: somente problemas cujo campo de velocidade inicial tem divergência não-negativa admitem solução única para todo $t \geq 0$. É fácil ver inclusive que essa condição sobre o divergente do campo se estende para toda a solução, ou seja, a cada instante o campo $(f'(u), g'(u))$ tem divergência não-negativa. A prova dessa afirmação decorre do fato de que um problema de valor inicial que use a solução num determinado instante τ como condição inicial tem estágios idênticos ao problema de condição inicial original u_0 , apenas deslocados no tempo de τ . Se esse problema então violasse a condição de divergência não-negativa o problema não teria solução para todo t , o que implicaria o mesmo para o problema original.

Uma outra propriedade das soluções do problema (2.6) é a maneira com que essas soluções preservam os valores extremos da condição inicial u_0 . O significado preciso do que se afirma acima é escrito na próxima proposição, no entanto, a ideia subjacente é o fato de que, uma vez que a solução é obtida pelo método das características, os valores assumidos pela condição inicial são simplesmente propagados ao longo das características, de maneira que todo valor assumido por u é um valor assumido por u_0 , o que inclui os seus extremos globais. O resultado a seguir, contudo, é um pouco mais abrangente.

Proposição 2.5. *Seja $u(x, y, t)$ uma solução do problema (2.6). Então, para todo instante t no qual a solução está definida, u e a condição inicial u_0 têm o mesmo conjunto de valores extremos locais.*

Demonstração. Suponha que u possui um extremo local em (x, y, t) . Esse ponto está relacionado com um único ponto $(x_0, y_0, 0)$ através de alguma curva característica do problema. E, por isso, tem-se $u(x, y, t) = u_0(x_0, y_0)$. O fato de que $u_0(x_0, y_0)$ é também um extremo local de u_0 decorre da continuidade do mapeamento característico. Novamente, fixado t , considere a estrutura característica do problema como um mapeamento bijetivo de pontos do plano em pontos do plano. Como esse mapeamento é contínuo, $\forall \varepsilon > 0$ dado, existe um $\delta > 0$, tal que

$$|(x'_0, y'_0) - (x_0, y_0)| < \delta \Rightarrow |(x', y') - (x, y)| < \varepsilon,$$

onde $(x'_0, y'_0) \in \mathbb{R}^2$ e $(x', y') = (x'_0, y'_0) + \mathbf{f}'(u_0(x'_0, y'_0))t$. Como (x, y) é um ponto extremo, suponha que $u(x, y, t)$ seja, por exemplo, um máximo, então deve existir um δ' tal que

$$|(x', y') - (x, y)| < \delta' \Rightarrow u(x, y, t) \geq u(x', y', t).$$

Faça $\varepsilon = \delta'$ para obter a implicação

$$|(x'_0, y'_0) - (x_0, y_0)| < \delta \Rightarrow u(x, y, t) \geq u(x', y', t),$$

que resulta em

$$|(x'_0, y'_0) - (x_0, y_0)| < \delta \Rightarrow u_0(x_0, y_0) \geq u_0(x'_0, y'_0).$$

Logo, para todo máximo local de u num instante t existe um máximo correspondente em u_0 . Para o caso em que o valor extremo é mínimo, a prova segue de maneira análoga. Ainda, como o mapeamento característico é bijetivo, pode-se carregar o problema inverso de partir da solução num dado instante t e retrocedê-la à condição inicial u_0 de tal maneira que os papéis de u e u_0 no demonstrado acima se intercambiam, implicando portanto que todo valor extremo local de u_0 é também um valor extremo local de u . \square

A proposição acima informa que soluções do problema hiperbólico proposto não podem ultrapassar as cotas máxima e mínima estabelecidas pela condição inicial. Esse resultado, uma característica fundamental e distintiva das soluções de problemas hiperbólicos, naturalmente decorre da ausência de um mecanismo de dissipação no modelo. Note que não se espera o mesmo das soluções de problemas parabólicos, ou seja, com carácter difusivo. Ainda, perceba que na demonstração da proposição apenas continuidade local da solução é assumida, o que sugere uma extensão do resultado para soluções generalizadas do problema (2.6).

2.3.1 Soluções generalizadas

O desenvolvimento de soluções generalizadas para o problema (2.6), ou para o problema semelhante de condição inicial não-diferenciável, ou mesmo descontínua, fazendo uso do método das características, não é simples. Uma teoria geral dessas soluções para problemas verdadeiramente bidimensionais vai muito além do que se deseja apresentar neste trabalho. Por isso, restringe-se a exposição, a partir desse ponto, a problemas simples em cuja definição dos parâmetros se procura uma estrutura característica não muito complexa e que apresente algo de fundamental. Nesse sentido, a escolha de uma condição inicial adequada constitui o primeiro passo essencial.

Considere o problema (2.6) com a condição inicial

$$u_0(x_0, y_0) = \begin{cases} U_- & \text{se } x_0 < 0 \\ U_+ & \text{se } x_0 \geq 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

com U_- e U_+ reais distintos. O problema de Cauchy munido de uma condição inicial desse tipo é conhecido por problema de Riemann. Apesar da simplicidade

de u_0 , o comportamento das soluções generalizadas para este tipo de problema é bastante variado, uma vez que a estrutura característica do problema ainda depende das funções f e g , que definem o fluxo.

Linhas de deslizamento

Talvez a solução generalizada menos problemática de um problema de Riemann é obtida quando f é uma função identicamente nula de u . Neste caso, o problema é formalmente escrito por

$$\begin{aligned} u_t + g(u)_y &= 0, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y) \end{aligned} \tag{2.9}$$

onde u_0 é dado por (2.8). Rigorosamente, tal formulação apresenta problemas desde que não se pode garantir a priori a diferenciabilidade de u . Não obstante, considere a estrutura característica do problema. A condição inicial divide \mathbb{R}^2 em dois semiplanos. As características que partem de um mesmo semiplano são todas retas paralelas determinadas pelas equações

$$\begin{aligned} x &= x_0 \\ y &= y_0 + g'(u_0(x_0, y_0))t \\ t &= t \end{aligned}$$

de modo que os valores da condição inicial são simplesmente propagados paralelo à linha que separa os semiplanos. A solução fornecida pelo método é portanto idêntica à condição inicial:

$$u(x, y, t) = \begin{cases} U_- & \text{se } x < 0 \\ U_+ & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{2.10}$$

Entretanto, para aceitá-la como uma solução generalizada do problema é preciso ainda verificar se ela satisfaz a lei de conservação integral, da qual a EDP foi derivada, para todo aberto $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$. A demonstração desse fato é trivial e não será apresentada nesse texto.

A simplicidade da condição inicial utilizada entretanto eclipsa o atributo mais próprio desse tipo de problema. Suponha por exemplo que, em vez de constantes, U_- e U_+ sejam funções independentes de x_0 e os produtos $g''(U_-(y_0))U'_-(y_0)$ e $g''(U_+(y_0))U'_+(y_0)$ são ambos não-negativos. Então, fazendo uso do método das características e aplicando uma versão unidimensional da proposição 2.4, obtém-se uma solução para o problema dada por:

$$u(x, y, t) = \begin{cases} U_-(\psi_-(y, t)) & \text{se } x < 0 \\ U_+(\psi_+(y, t)) & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{2.11}$$

onde $\psi_-(y, t)$ e $\psi_+(y, t)$ satisfazem respectivamente

$$\begin{aligned}y &= \psi_-(y, t) + g'(U_-(\psi_-(y, t)))t \\y &= \psi_+(y, t) + g'(U_+(\psi_+(y, t)))t.\end{aligned}$$

Cada ramo da solução (2.11) então evolui independentemente do outro separados por uma **linha de deslizamento**, que para este problema coincide com a linha de separação dos ramos da condição inicial. Essa estrutura é recorrente em diversas soluções generalizadas do problema não-linear.

Ondas de choque

Considere o problema de Riemann

$$\begin{aligned}u_t + f(u)_x &= 0, \\u(x, y, 0) &= u_0(x, y),\end{aligned}\tag{2.12}$$

onde f é uma função convexa de u . Suponha também que $U_- > U_+$ na condição inicial.

A aplicação direta do método das características sobre este problema é frustrada pelo cruzamento das curvas integrais do problema auxiliar. A concorrência de retas com valores distintos a um mesmo ponto indica que não se pode esperar obter uma solução contínua para o problema. Ainda, o modo com que se deve lidar com tais soluções não é óbvio e com efeito não pode ser concluído a partir de uma análise carregada exclusivamente sobre a EDP do problema.

Como mencionado, soluções fracas rigorosamente não são soluções de EDP, uma vez que diferenciabilidade contínua no domínio não é um atributo dessas soluções. Elas antes satisfazem a lei de conservação integral de onde provém a equação diferencial de interesse. É sensato, por isso, procurar uma indicação de como proceder com soluções descontínuas analisando os critérios que uma solução de tal tipo deve atender para ser uma *solução* da lei de conservação. Sendo integrabilidade a propriedade-chave de qualquer uma dessas soluções, assume-se que os saltos em valor, exibidos por elas, são todos finitos e estão dispostos de modo que a sua densidade, definida sobre uma região qualquer do plano, é nula. Essas hipóteses levam à ideia de que soluções fracas descontínuas apresentam curvas de descontinuidade diferenciáveis por partes, dividindo pequenas vizinhanças de seus pontos em duas regiões, uma a montante do salto, também chamado choque, e outra a jusante dele.

Suponha que se tenha conhecimento da evolução de um pequeno segmento de uma curva de descontinuidade. Isto é, identifica-se uma curva de descontinuidade num dado instante t com o elemento correspondente de uma família de curvas a

um parâmetro, $(x(s, t), y(s, t), t)$. Olhar para a evolução de uma curva de descontinuidade no plano, portanto, é equivalente a considerar uma secção de superfície no espaço $\mathbb{R}^2 \times [0, +\infty)$ definida por tal família. Seja Ω então um domínio retangular do plano tal que, entre instantes t e $t + \tau$, há um segmento de uma curva de descontinuidade contido na região e considere a lei de conservação, da qual a EDP do problema é derivada, sobre Ω . Integrando a lei de conservação no tempo tem-se

$$\int_{\Omega} (u(x, y, t + \tau) - u(x, y, t)) \, dA + \int_t^{t+\tau} \oint_{\partial\Omega} \mathbf{F}(u(x, y, t)) \cdot \mathbf{n}(x, y) \, d\ell dt = 0.$$

O lado esquerdo da equação acima é equivalente a integral de superfície do campo definido por $(\mathbf{F}(u), u)$ sobre o contorno da caixa $\Omega \times [t, t + \tau]$. E, devido ao suposto, existe uma secção contida nesta caixa que separa duas regiões onde a solução é continuamente diferenciável. A condição que a lei de conservação naturalmente impõe sobre esta superfície é que o fluxo do campo $(\mathbf{F}(u), u)$ seja contínuo através da mesma, ou seja,

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{F}(u_-), u_-) \cdot \mathbf{N}(x, y, t) \, dA = \int_{\Gamma} (\mathbf{F}(u_+), u_+) \cdot \mathbf{N}(x, y, t) \, dA,$$

onde Γ denota a secção, \mathbf{N} seu campo normal e u_- e u_+ os valores da solução respectivamente a montante e a jusante do choque. Desde que Γ é parametrizada pela família $(x(s, t), y(s, t), t)$, $(y_s, -x_s, x_s y_t - x_t y_s)$ é paralelo a seu campo normal, o que permite reescrever a equação acima como

$$\int_{\Gamma} \{ [f(u_+) - f(u_-)] y_s - [g(u_+) - g(u_-)] x_s + [u_+ - u_-] (x_s y_t - x_t y_s) \} \, dA = 0.$$

Fazendo uso de uma variação do teorema da localização (proposição 1.1), conclui-se portanto que ao atravessar choques uma solução fraca do problema deve satisfazer

$$[f(u_+) - f(u_-)] y_s - [g(u_+) - g(u_-)] x_s + [u_+ - u_-] (x_s y_t - x_t y_s) = 0.$$

A fim de tornar o conteúdo geométrico do resultado acima mais evidente, perceba que $\mathbf{v}_c = (x_t, y_t)$ representa a velocidade da curva de descontinuidade no ponto $(x(s, t), y(s, t))$, enquanto $(y_s, -x_s)$ representa um vetor ortogonal a curva neste mesmo ponto. Sendo um vetor, no caso bidimensional, essa velocidade possui duas componentes: uma tangencial a curva, denominada velocidade de deslizamento, e outra ortogonal, chamada efetivamente de velocidade de choque. Introduzindo a notação $[[f(u)]] = f(u_+) - f(u_-)$, reescreve-se então a última equação

$$v_s \equiv \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{n} = \frac{[[\mathbf{F}(u)]]}{[[u]]} \cdot \mathbf{n}, \quad (2.13)$$

forma que evidencia a natureza da condição que deve satisfazer o salto em uma solução generalizada.

Em problemas hiperbólicos unidimensionais a equação (2.13) é conhecida pelo nome de **relação de Rankine-Hugoniot** em reconhecimento ao trabalho pioneiro desses dois cientistas no campo de ondas de choque em escoamentos unidimensionais.

De volta ao problema (2.12), observa-se então que a condição (2.13) sugere a criação de uma onda de choque cuja velocidade é dada por

$$v_s = \frac{f(U_+) - f(U_-)}{U_+ - U_-},$$

e a solução

$$u(x, y, t) = \begin{cases} U_- & \text{se } x < v_s t \\ U_+ & \text{se } x \geq v_s t \end{cases} \quad (2.14)$$

A função acima de fato é uma solução fraca do problema de Riemann posto. Ela satisfaz a equação diferencial nas regiões onde é continuamente diferenciável e atende a relação de Rankine-Hugoniot, logo é realmente uma solução da lei de conservação da qual a EDP do problema é derivada. No entanto, perceba que, enquanto a existência de soluções para o problema foi claramente estabelecida, a questão acerca da unicidade dessa solução é um tanto mais complexa. Com efeito, unicidade é um problema central na teoria de soluções generalizadas de leis de conservação hiperbólicas. Alguns argumentos para a elucidação desse problema são apresentados mais adiante ainda neste mesmo capítulo (*ver seção 2.4*), mas vale aqui a menção de que a solução encontrada é de fato única.

Problemas não-únicos necessitam de um critério de escolha para torná-los bem-postos. No caso da teoria de leis de conservação hiperbólicas tal critério é introduzido a partir do procedimento sugerido no final do último capítulo. A solução física de um problema hiperbólico, como é denominada a solução única e estável a pequenas perturbações, é a solução-limite do problema parabólico associado, tomada quando a difusividade κ deste problema tende a zero. Não é difícil demonstrar que a solução encontrada (2.14) é estável a pequenas perturbações da condição inicial. Demonstrar que ela é a solução-limite do problema parabólico

$$\begin{aligned} u_t + f(u)_x &= \kappa u_{xx}, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y), \end{aligned}$$

também não é complicado, uma vez que se supõe que a solução do problema é suave e da forma $w(x - v_s t)$, onde w é uma função suave e v_s é a velocidade de choque da solução do problema hiperbólico. (*Ver [25, página 29]*).

Ondas de rarefação e ondas de choque instáveis

Considere novamente o problema de Riemann proposto em (2.12), supondo agora, porém, que $U_- < U_+$. Tendo em vista o desenvolvimento do item anterior, uma ideia natural é propor uma solução idêntica a (2.14). Contudo, perceba que, diferentemente do último caso tratado, tal solução não é estável a pequenas perturbações na condição inicial. Substituindo, por exemplo, o salto inicial por um gradiente abrupto de extensão ϵ , ou seja, tomando

$$u^\epsilon(x, y) = \begin{cases} U_- & \text{se } x < 0 \\ U_- + (U_+ - U_-)\frac{x}{\epsilon} & \text{se } 0 \leq x < \epsilon \\ U_+ & \text{se } x \geq \epsilon \end{cases}$$

obtem-se um problema que pode ser facilmente resolvido pelo método das características. Com efeito a solução encontrada é

$$u^\epsilon(x, y, t) = \begin{cases} U_- & \text{se } x < f'(U_-)t \\ f'^{-1}\left(\frac{x - x_0(x, t)}{t}\right) & \text{se } f'(U_-)t \leq x < \epsilon + f'(U_+)t \\ U_+ & \text{se } x \geq \epsilon + f'(U_+)t \end{cases}$$

onde f'^{-1} denota a função inversa a f' , lembrando que f é uma função convexa, logo $f''(u) > 0, \forall u$, e $x_0(x, t)$, o mapa solução do problema

$$x = x_0 + f'\left(U_- + (U_+ - U_-)\frac{x_0}{\epsilon}\right)t,$$

$$y = y_0.$$

Note como a solução (2.14) e a solução perturbada acima são drasticamente diferentes. Não há saltos na solução perturbada, aliás, a perfil encontrado é contínuo. O gradiente abrupto inicial é ao longo do tempo suavizado, um resultado bastante intuitivo uma vez que ondas com valores mais altos de u se propagam com maior velocidade. É bastante interessante olhar para estrutura característica da solução perturbada a medida que o parâmetro de extensão do gradiente, ϵ , tende a zero. O feixe de retas características tem progressivamente seus pontos de origem restritos a um intervalo menor. No caso limite, é de se esperar que todos os pontos (x, t) do domínio do mapa, olhando apenas um único perfil desde que o problema é verdadeiramente unidimensional, convergirem para o ponto $(0, 0)$. Tal procedimento eficazmente produz uma solução para o problema (2.12) estável a pequenas perturbações na condição inicial, a saber,

$$u(x, y, t) = \begin{cases} U_- & \text{se } x < f'(U_-)t \\ f'^{-1}\left(\frac{x}{t}\right) & \text{se } f'(U_-)t \leq x < f'(U_+)t \\ U_+ & \text{se } x \geq f'(U_+)t \end{cases} \quad (2.15)$$

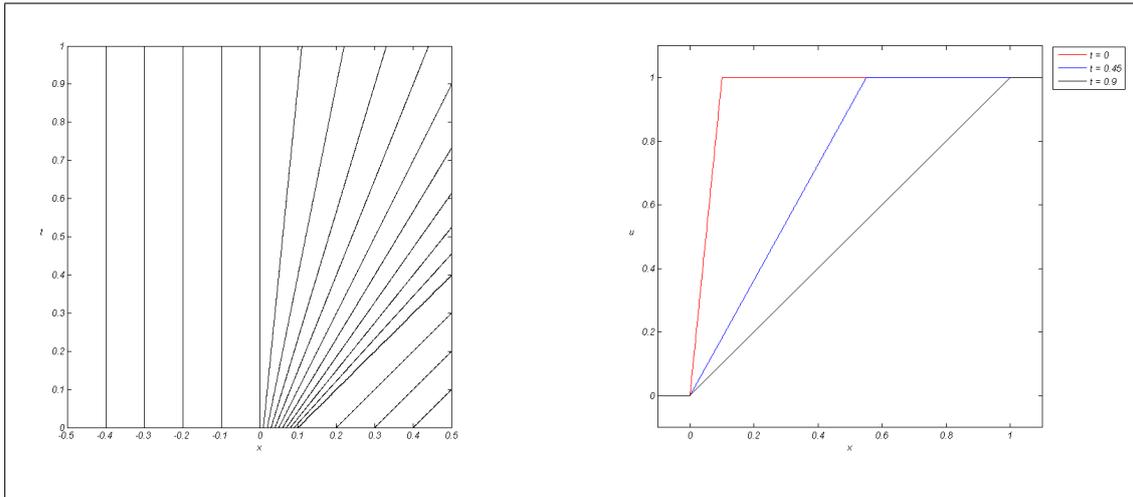


Figura 2.1: Estrutura característica e solução do problema de Riemann perturbado para o fluxo de Burgers, $f(u) = \frac{u^2}{2}$, com $U_- = 0$ e $U_+ = 1$, $\epsilon = 0.1$. O gráfico da solução é apresentado em três instantes diferentes.

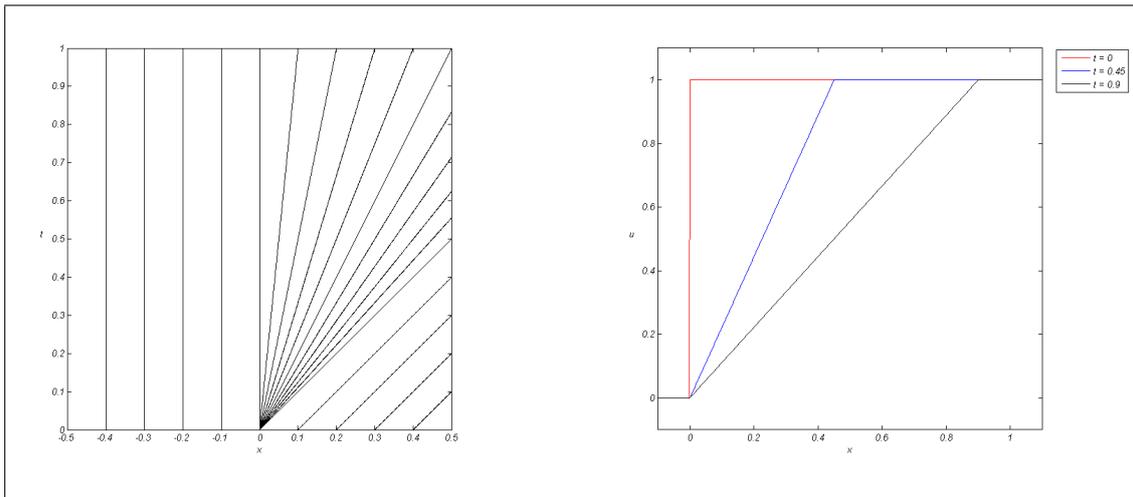


Figura 2.2: Estrutura característica e solução do problema de Riemann para o fluxo de Burgers, $f(u) = \frac{u^2}{2}$, com $U_- = 0$ e $U_+ = 1$. O gráfico da solução é apresentado em três instantes diferentes.

A solução (2.15) exibe um outro atributo comum das soluções generalizadas de leis de conservação hiperbólicas conhecido pelo nome de **onda de rarefação**, denominação motivada pela teoria unidimensional da dinâmica de gases, e a sua estrutura tem particular importância na teoria dessas soluções por representar a contrapartida fisicamente aceitável de um choque instável.

Problemas de Riemann e o princípio da similaridade

Uma propriedade dos problemas de Riemann tratados até este ponto destacada pelas soluções apresentadas é a invariância desses problemas sob uma transformação de escala. Em termos precisos, considerando a priori o problema unidimensional (2.12), aplique sobre o problema, equação e condição inicial, a transformação

$$\begin{aligned}x &\rightarrow \alpha x, \\t &\rightarrow \alpha t, \\u &\rightarrow u,\end{aligned}$$

com $\alpha > 0$ arbitrário, e constate que o problema é inalterado pela transformação. Isto implica que se $u(x, t)$ é uma solução generalizada do problema, então $u(\alpha x, \alpha t)$ também é uma semelhante solução. Naturalmente, para aqueles problemas onde se espera uma única solução, $u(\alpha x, \alpha t) = u(x, t)$, o que por sua vez sugere a introdução de uma função φ , tal que $u(x, t) = \varphi\left(\frac{x}{t}\right)$, quando $t > 0$. O procedimento reduz a EDP a uma equação diferencial ordinária; para o problema-exemplo, tem-se

$$(f'(\varphi(z)) - z)\varphi'(z) = 0 \Rightarrow f'(\varphi(z)) - z = 0 \text{ ou } \varphi'(z) = 0,$$

onde $z = \frac{x}{t}$. A equação acima é válida enquanto a solução ou trecho da solução é diferenciável, portanto é particularmente útil na construção de soluções diferenciáveis por partes. Perceba que todas as soluções apresentadas para o problema (2.12) satisfazem alguma das condições trecho a trecho.

Fluxos não-convexos e o problema de Buckley-Leverett

Um último ponto a respeito das soluções de problemas de Riemann precisa ainda ser apresentado. Em todos os problemas expostos, a solução exhibe apenas um dos atributos: onda de choque, onda de rarefação, linha de deslizamento. Isso advém das restrições impostas aos problemas e não de sua própria natureza. É bastante fácil a propósito propor um problema de Riemann que exhiba uma onda de choque onde a curva de descontinuidade seja uma linha de deslizamento. Para a aparição conjunta de ondas de choque e ondas de rarefação em um mesmo problema basta, por exemplo, que se relaxe a condição da função componente do fluxo, f , ser convexa.

O exemplo mais famoso que demonstra essa situação é o problema de Buckley-Leverett, [7], que consiste de um problema de Riemann cuja condição inicial é dada por

$$u_0(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

e, adicionadas algumas simplificações paramétricas, da equação de transporte (1.25) munida de um campo de velocidades uniforme $\mathbf{v} = (v, 0)$ e um fluxo fracional

$$f(u) = \frac{u^2}{u^2 + M(1-u)^2}, \quad M > 0.$$

O fato de f ser não convexa e ter inclinação zero sobre os dois valores da condição inicial torna difícil inferir a estrutura característica de uma solução. Note que um choque estacionário apesar de satisfazer a equação diferencial do problema parte a parte não é uma solução generalizada do problema, posto que uma onda de choque de velocidade nula não satisfaz a relação de Rankine-Hugoniot deste problema. Por outro lado um choque de velocidade constante igual a unidade satisfaz a condição, mas não é estável a pequenas perturbações, como se demonstra a seguir. Uma boa prática, nem sempre facilmente realizável, é a de introduzir uma pequena perturbação na condição inicial como feito antes nesta secção. Não só o procedimento aduz mais informação a respeito da estrutura característica de uma solução do problema em questão, como também sugere a solução do problema estável a pequenas variações da condição inicial.

A estrutura característica do problema de condição inicial perturbada sugere a formação de uma onda de rarefação na proximidade de $x = 0$, uma vez que a inclinação das retas características decai no sentido de crescimento das abcissas. Por f não ser convexa essa tendência não é seguida por todas as retas oriundas do intervalo $[0, \epsilon]$; a partir de algum \bar{x} pertencente ao intervalo e correspondente ao valor de inflexão do fluxo, as inclinações começam a crescer gradativamente até voltarem totalmente à vertical em $x \geq \epsilon$. Assim, após um tempo $\tau(\epsilon)$, todas as características à direita do choque têm o mesmo valor, $u = 0$. Isso permite escrever as equações cinemáticas do salto como

$$\begin{aligned} \dot{x}_c &= \frac{f(u_-) v}{u_- \phi}, \\ x_c &= \epsilon - \epsilon u_- + f'(u_-) \frac{v}{\phi} t, \end{aligned}$$

para $t \geq \tau(\epsilon)$, já usando o fato de que as características ao lado esquerdo do choque devem provir da região de gradiente abrupto da condição inicial. O sistema resulta numa equação diferencial ordinária em termos de u_- :

$$\left[f'(u_-) - \frac{f(u_-)}{u_-} \right] \frac{v}{\phi} + \left(-\epsilon + f''(u_-) \frac{v}{\phi} t \right) \dot{u}_- = 0,$$

que pode ser escrita como uma equação diferencial ordinária exata, introduzindo-se um fator integrante $\mu = u_-$. A solução do problema acima é dada então

implicitamente por

$$(u_- f'(u_-) - f(u_-)) \frac{v}{\phi} t - \epsilon \frac{u_-^2}{2} = a, \quad a \in \mathbb{R}, \forall t \geq \tau(\epsilon),$$

no caso de $u_- f'(u_-) - f(u_-) \neq 0$, ou

$$u_-(t) = \bar{u} = \sqrt{\frac{M}{1+M}},$$

em caso contrário.

Deixando de lado a discussão do porquê as soluções não-estacionárias não representam o choque pós-transiente para o limite desejado do parâmetro ϵ , a estrutura característica resultante do problema, pois, é composta de uma onda de rarefação seguida de uma onda de choque de salto e velocidade variáveis até o instante específico τ quando salto e velocidade passam a ser constantes.

A medida que o parâmetro ϵ é reduzido, dado que a região transiente onde o choque é variável é envelopada pela estrutura da onda de rarefação e pelas características que partem da região $x > \epsilon$ (perceba que essa região está contida no intervalo $[0, \epsilon] \times [0, \tau]$), o comportamento transiente da onda de choque se restringe a uma região cada vez menor do espaço estendido, desaparecendo completamente no caso-limite do problema de Buckley-Leverett.

Desse modo, a solução estável a perturbações da condição inicial para tal problema é constituída de uma onda de rarefação cujas características colapsam sobre as características verticais provenientes da região $x > 0$. A curva de descontinuidade formada coincide com característica da rarefação que propaga o valor \bar{u} , logo

$$v_s = f'(\bar{u}) \frac{v}{\phi}.$$

A solução do problema de Buckley-Leverett é descrita então por

$$u(x, y, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq 0 \\ f'_{restr.}{}^{-1} \left(\frac{\phi x}{vt} \right) & \text{se } 0 \leq x < v_s t \\ 0 & \text{se } x \geq v_s t \end{cases} \quad (2.16)$$

onde \bar{u} representa o valor encontrado acima e $f'_r{}^{-1}$ simboliza a função inversa de f' quando restrita ao intervalo $[\bar{u}, 1]$. No caso mais simples com $M = 1$, tem-se $\bar{u} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e

$$f'_{restr.}{}^{-1}(z) = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{-z^2 - z + z\sqrt{1+4z}}}{2z}, \quad \forall z \in \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 1 \right]. \quad (2.17)$$

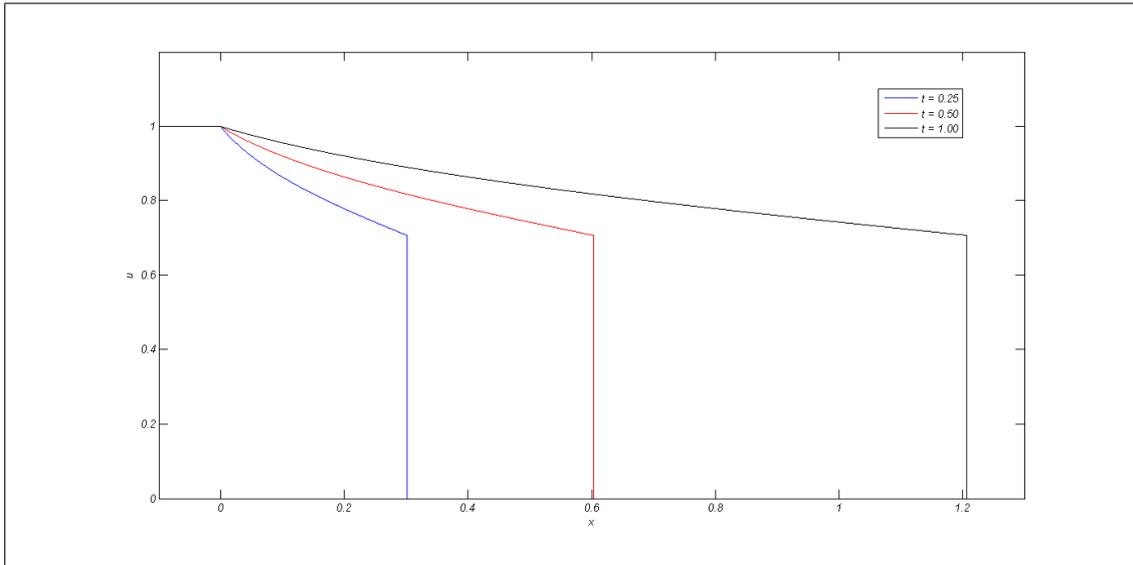


Figura 2.3: Perfil da solução do problema de Buckley-Leverett em três instantes distintos, exibindo a onda de rarefação seguida pela onda de choque, $\frac{v}{\phi} = 1$.

O problema de injeção

Uma variação do problema de Buckley-Leverett verdadeiramente bidimensional, porém bastante facilitada pela simetria, é o que pode ser chamada de problema de injeção. Considere novamente a equação de transporte (1.25) munida desta vez de um campo de velocidades com simetria radial dado por

$$\mathbf{v} = \frac{Q}{2\pi r^2} \mathbf{r},$$

onde r denota a distância de um ponto a partir de uma origem (para o caso deste problema específico, o ponto de injeção), \mathbf{r} representa o vetor posição em relação a este ponto e Q , a taxa de injeção. O campo acima é solenoidal para todo o plano, salvo a origem. Suponha também que o fluxo fracional é definido como anteriormente para o problema de Buckley-Leverett aqui apresentado.

Tomando por condição inicial

$$u_0(r) = \begin{cases} 1 & \text{se } r = 0 \\ 0 & \text{se } r > 0 \end{cases}$$

assume-se a existência de uma solução generalizada para o problema, $u(r, t)$, portanto que satisfaça a EDP abaixo nos trechos onde essa função é diferenciável:

$$u_t + \frac{f'(u)Q}{2\pi\phi r} u_r = 0.$$

Perceba contudo que o problema proposto sugere a adoção da variável $z = \frac{\pi\phi r^2}{Q}$, de modo que a equação acima é reescrita numa forma mais simples

$$u_t + f'(u)u_z = 0,$$

reduzindo então o problema de injeção ao problema de Buckley-Leverett. Isso implica que a mesma linha de raciocínio que gerou (2.16) permanece válida e de fato pode se esperar uma função similar como solução do problema de injeção definido em termos da variável z .

Com efeito a solução do problema de injeção é dada por

$$u(r, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } r = 0 \\ f_{restr}^{-1} \left(\frac{r^2}{\alpha t} \right) & \text{se } 0 \leq r < \sqrt{f'(\bar{u})\alpha t} \\ 0 & \text{se } r \geq \sqrt{f'(\bar{u})\alpha t} \end{cases} \quad (2.18)$$

com $\alpha = \frac{Q}{\pi\phi}$.

Note que a solução do problema de injeção consiste também de uma onda de rarefação seguida de uma onda de choque como no problema de Buckley-Leverett. As rarefações contudo apresentam silhuetas diferentes nos dois problemas, embora sejam geradas a partir da mesma função de fluxo fracional. Isso advém da razão no argumento de f_{restr}^{-1} . Ainda, mesmo mantendo-se o valor do salto nos dois problemas, a velocidade da onda de choque no problema de injeção não é constante; decai a medida que a frente se distancia do ponto de injeção.

2.4 Condições de entropia e unicidade de problemas hiperbólicos

A escolha de um critério de unicidade para soluções generalizadas de problemas hiperbólicos é uma das questões mais interessantes da teoria. A literatura que atende à natureza dessa escolha é vasta e as condições adicionais a serem impostas a estes problemas com o intuito de garantir a unicidade de suas soluções são diversas. No estado presente da teoria, entretanto, todos esses requisitos extras convergem para ideia de que a solução fisicamente aceitável de um problema hiperbólico é na verdade a solução-limite de um problema parabólico quando a difusividade do modelo de que advém a EDP do problema tende a zero (*ver equação (1.19)*). A suposição impõe certas propriedades sobre a solução-limite, propriedades estas que podem ser recriadas, ou colocado de uma forma mais apropriada, reimpostas em termos de outras condições que não necessitem a introdução de problemas de um carácter distinto, qual o é os problemas de natureza parabólica, à teoria. Esse

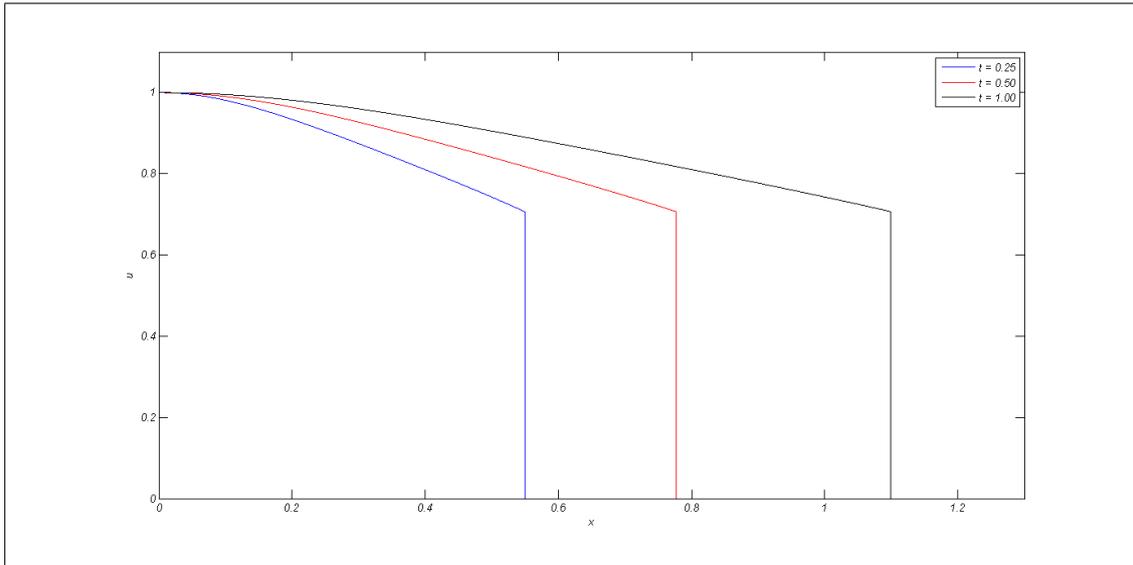


Figura 2.4: Perfil radial da solução do problema de injeção em três instantes distintos, exibindo a onda de rarefação seguida pela onda de choque, $\alpha = 1$.

raciocínio é o que justifica a definição de funções de entropia e o próprio critério de unicidade para problemas hiperbólicos em termos dessas funções. A respeito dessas condições de entropia, indica-se ao leitor interessado uma das referências [23] e [25] deste trabalho.

Esse procedimento entretanto não é o adotado neste trabalho, tendo em vista que a condição assumida aqui, a de estabilidade a pequenas perturbações da condição inicial, é mais simples e didática por requerer menos a introdução de novos conceitos, e porquanto novas definições. Sua exposição contudo é pouco rigorosa, no sentido que não se determina precisamente o que se entende por uma pequena perturbação da condição inicial do problema. Perceba por exemplo que, para o problema (2.12), se somente o valor do salto é perturbado sem que se o substitua por um gradiente abrupto, os problemas perturbado e original apresentam estruturas característica plenamente similares e de maneira alguma se esclarece a dúvida que motiva a perturbação do problema. Na medida que se guarda em mente que as soluções de interesse provém de um limite de funções continuamente diferenciáveis, dado que são soluções de um problema parabólico, a alternativa mais precisa que se pode dar à frase *estável a pequenas perturbações da condição inicial* é a de que a solução entrópica do problema original deve ser a função-limite das soluções de problemas hiperbólicos cujas condições iniciais pouco diferem da condição inicial original e são continuamente diferenciáveis. Essa resolução parece ser mais estrita do que necessário, uma vez que se pode determinar unicamente, até o tempo de quebra da solução, a estrutura característica de um problema em

que a condição inicial é contínua e somente diferenciável por partes, porém permite uma exposição mais clara do pretendido.

A noção de pouca diferença entre condições iniciais necessita analogamente ser enunciada com mais precisão; a maneira como se determina a proximidade de duas funções influencia o que se chama de pequeno. Dessa forma uma pequena perturbação no valor do salto de um problema de Riemann, por exemplo, pode ser devidamente tomada como uma pequena perturbação na condição se a medida de desvio é pontual, porém será infinita se essa medida de desvio for definida considerando todo o domínio.

Deixando essas questões a parte, para um problema de Riemann logo uma classe sugestiva de condições iniciais perturbadas são funções sigmoidais que aproximem razoavelmente os patamares da condição inicial original e substituam o salto por um gradiente abrupto. O tratamento desses problemas seguindo essa nova linha de pensamento, entretanto, não aduz outros resultados além daqueles já apresentados na secção anterior, fato justificado pela ressalva feita dois parágrafos acima.

Métodos numéricos em volumes finitos

Neste capítulo são apresentados os principais conceitos relacionados à formulação de métodos numéricos que produzam aproximações razoáveis a soluções de problemas hiperbólicos. A exposição é simples e informal, visando apenas corroborar as ideias utilizadas na criação do método proposto no capítulo seguinte. A nenhuma das proposições apresentadas aqui, espera-se ter dado uma prova contundente. A intenção, todavia, é de que tanto essas proposições quanto suas demonstrações forneçam um arcabouço intuitivo para aqueles que se enveredam pela formulação de métodos numéricos em volumes finitos para problemas multidimensionais onde a teoria matemática existente é escassa.

Uma referência merece distinção entre todas: *Finite volume methods for hyperbolic problems* por Randall J. LeVeque, [25]. Este capítulo é uma mera transcrição de algumas de suas ideias, possivelmente, defeituosa naquelas partes onde o transcrito deriva na direção das ideias e noções próprias a este autor.

3.1 Discretização, métodos numéricos e leis de conservação

Subjacente à formulação de qualquer método numérico, encontra-se a ideia da discretização de domínios e por decorrência a da discretização de parâmetros. Especificamente no que concerne a métodos numéricos para equações diferenciais parciais hiperbólicas, esse processo envolve a introdução de uma partição específica do espaço estendido, $\mathbb{R}^n \times [0, +\infty)$, e um procedimento com que se substitui, ou

mais propriamente, se aproxima uma solução exata do problema dentro do elemento da partição por um correspondente numérico. Este último passo pode ser feito de diversas maneiras. Por exemplo, pode-se considerar como valor representativo de cada elemento algum valor da solução na região ou mesmo uma média sua sobre a região definida. O método numérico então estará definido uma vez que se proponha um mecanismo de evolução para esses valores, isto é, uma lei iterativa que estabeleça como valores numéricos representativos num nível de iteração n determinam, ou são determinados pelos valores de um nível posterior. Quando a lei relaciona valores posteriores com valores anteriores, o método é dito ser **explícito**, quando do contrário, **implícito**. Métodos de ambas naturezas possuem vantagens e desvantagens próprias, contudo, dado o carácter da EDP envolvida no problema, um tipo particular de método pode ser mais adequado ou naturalmente sugestivo.

Restringindo a exposição para o caso bidimensional, assume-se uma partição \mathcal{P} do plano cujos elementos possuem área finita e contorno suave por partes, são ordenados de maneira arbitrária e rotulados conforme. Uma partição é definida também sobre o intervalo $[0, +\infty)$, o que introduz os níveis de iteração. Seja u então uma solução de um dado problema hiperbólico, supondo a integrabilidade de u por todo o domínio, o número

$$\bar{U}_i^n = \frac{1}{A_i} \int_{\Omega_i} u(x, y, t_n) dA, \quad (3.1)$$

define a projecção da solução sobre o elemento Ω_i no nível n . A lista desses valores representa a solução do problema no domínio, dentro das competências da partição; espera-se que essa representação se torne progressivamente melhor naquelas regiões onde u é contínua a medida que a área dos elementos diminui.

Suponha então que o problema em questão é regido pela lei de conservação (1.6) munida do fluxo local (1.10), desconsiderando o termo de fonte. Integrando essa lei, restrita a uma região Ω_i , entre os níveis n e $n+1$ e fazendo uso da definição acima, obtém-se

$$\bar{U}_i^{n+1} = \bar{U}_i^n - \frac{1}{A_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \oint_{\partial\Omega_i} \mathbf{F}(x, y, t, u(x, y, t)) \cdot \mathbf{n}(x, y) d\ell dt. \quad (3.2)$$

Perceba como a identidade acima insinua a definição de uma lei recorrência em termos dos graus de liberdade numéricos; basta que se conheça, ou se aproxime a integral ao lado direito em termos das projeções $\{\bar{U}_i^n\}$ ou $\{\bar{U}_i^{n+1}\}$ e possivelmente de alguns parâmetros geométricos para gerar um esquema numérico que atenda exata ou aproximadamente a lei de conservação.

Tais métodos compõem uma classe importante. Enquanto soluções fortes de problemas hiperbólicos satisfazem uma equação diferencial, que pode muitas vezes ser comum a mais de uma lei de conservação, soluções generalizadas do mesmo

problema atendem a uma lei de conservação específica. Assim, desejando-se propor um método numérico capaz de aproximar também semelhantes soluções, a lei de conservação, e, portanto, não a EDP, deve ser o alicerce em que está baseado o desenvolvimento do algoritmo. A observação não somente dá destaque a equação (3.2), já que qualquer lei iterativa dela derivada estará atendendo o critério, mas também ratifica a escolha das projeções da solução exata sobre os elementos de alguma partição como bons valores representativos. Os métodos que atendem a essa condição, os únicos de interesse neste trabalho, são denominados **conservativos**.

Além dos requisitos já impostos sobre a partição, soma-se o de cada elemento Ω_i de \mathcal{P} ter uma fronteira constituída por um número finitos de segmentos. Dado que todo segmento este é retificável, porque é suave, conclui-se então que a fronteira de cada elemento possui perímetro finito e esse resultado permite decompor a integral ao lado direito da equação (3.2) na soma

$$\sum_{j=1}^{N_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dl \, dt = \Delta t_n \sum_{j=1}^{N_i} F_{ij} \ell_{ij}, \quad (3.3)$$

com $\partial\Omega_i = \bigcup_j \Gamma_j$ e N_i simbolizando o números dos segmentos, introduzindo assim os fluxos numéricos médios F_{ij} . Note que cada um destes termos corresponde a média da componente normal do fluxo local sobre o produto $\Gamma_j \times [t_n, t_{n+1}]$.

Levando (3.3) à equação (3.2), obtém-se o molde da lei de iteração de um esquema conservativo:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \sum_{j=1}^{N_i} \frac{\Delta t_n \ell_{ij}}{A_i} F_{ij}. \quad (3.4)$$

O desenvolvimento desses métodos e consequentemente suas distinções seguem então da determinação dos fluxos numéricos em termos das variáveis computacionais e dos parâmetros geométricos introduzidos pela discretização. Tendo vista o exposto no capítulo anterior, no que concerne os problemas hiperbólicos, sabe-se que os valores dos fluxos numéricos estão fixados pela estrutura característica do problema. Essa observação tem diversas implicações, contudo, a que se deseja referir neste ponto é o fato de que, em um problema que condição inicial e fluxo impõem uma estrutura de velocidades características limitadas, para Δt_n pequenos, apenas o dado daqueles elementos mais próximos pode intervir no cômputo dos fluxos numéricos. Isto é, cada F_{ij} tem dependência funcional somente com as algumas variáveis de $\{U_i\}$ e não com a lista inteira desses valores, como poderia se supor *a priori*. No caso dos métodos explícitos, esse grupo de células, elementos da discretização, que podem contribuir com o fluxo numérico, e portanto com o valor representativo seguinte, de um elemento especificado, define o **domínio de dependência computacional** do elemento, DDC. Para métodos implícitos,

aquele grupo de células que tomam parte no cálculo dos fluxos delimita a **zona de influência computacional** desse elemento.

Quando se lida apenas com leis de conservação lineares, esquemas de natureza explícita ou implícita podem ser propostos razoavelmente com a mesma facilidade. A intromissão da não-linearidade num modelo, entretanto, favorece a formulação de métodos explícitos, uma vez que um método implícito requer uma inversão das funções que definem os fluxos numéricos antes que o esquema possa ser iterado. Métodos implícitos por outro lado são mais estáveis que métodos explícitos no sentido que é apropriadamente definido nas secções seguintes. Isso por sua vez permite simulações baseadas em Δt_n maiores, o que na prática implica em um menor número de iterações.

Apenas métodos numéricos explícitos são de interesse neste trabalho, de modo que se derruba o denotativo no restante desta exposição.

3.2 Convergência, consistência e estabilidade

O padrão apresentado na equação (3.4) foi estabelecido assumindo conhecimento da solução exata de uma lei de conservação entre os níveis n e $n + 1$ da iteração. Obviamente, tal conhecimento, se disponível, dispensaria a formulação de um método numérico. Entretanto, a construção é útil na medida que introduz e evidencia o papel dos parâmetros numéricos numa estrutura que imita aquela obedecida pelos valores médios de uma solução exata.

Desde que problemas hiperbólicos evoluem a partir de suas condições iniciais, é válido imaginar a formulação do problema numérico nos primeiros níveis de iteração. Partindo da condição inicial, poder-se-ia definir as projeções iniciais sobre essa própria função. Contudo, a integração de uma função arbitrária sobre um domínio qualquer pode em si encerrar um problema numérico. Mais ainda, no cálculo dos fluxos numéricos, admite-se a propagação característica da condição e novamente o cômputo de uma nova integral. Todos esses passos sugerem, em vista de que se procura verdadeiramente uma solução aproximada para o problema, a introdução de uma aproximação já na condição inicial que facilite simultaneamente as integrações envolvidas e a sua evolução local.

3.2.1 Reconstrução, evolução e projeção

O feito é obtido com a substituição da condição inicial por uma outra, usualmente, continuamente diferenciável até uma ordem estipulada, sobre cada célula da partição. A substituição é realizada de maneira que cada uma dessas funções aproxime com um erro determinado a restrição da condição inicial a cada um dos

elementos da discretização do domínio. Exigências quanto à continuidade e a diferenciabilidade dessas **reconstruções** nas fronteiras das células não são essenciais.

A noção de reconstrução interessa uma posição fundamental aos problemas de Riemann na formulação de métodos numéricos, dado que a reconstrução mais simples que se pode efetuar sobre qualquer função é uma constante por partes. Além disso, a **evolução** de semelhantes problemas é amplamente estudada e de análise favorecida por seu comportamento similar. (*Ver subsecção 2.3.1*)

Os fluxos numéricos médios providos da evolução dos problemas locais de Riemann definidos por uma reconstrução constante por partes introduzem a noção de funções de fluxo numérico, ou seja, as relações entre as projeções daquelas células pertencentes ao domínio de dependência computacional da célula em questão com os seus fluxos numéricos. Um caso simples, por exemplo, é aquele em que tais relações são expressas em termos de funções que envolvem apenas as projeções das células que compartilham um segmento do contorno,

$$F_{ij} \rightarrow \mathcal{F}_{ij}(U_i^n, U_j^n), \quad (3.5)$$

o que resulta na recorrência

$$U_i^1 = U_i^0 - \sum_{j=1}^{N_i} \frac{\Delta t_0 \ell_{ij}}{A_i} \mathcal{F}_{ij}(U_i^0, U_j^0).$$

Se suposto que as funções de fluxo numérico expressam o valor exato dos fluxos numéricos médios, então a projeção definida acima representa o valor exato da **projeção** da **evolução** da **reconstrução** da condição inicial. Em vez então de progredir a condição inicial caracteristicamente até um segundo nível de tempo t_2 , o que poderia resultar num problema tão complicado quanto o original, a ideia central da formulação de métodos numéricos em volumes finitos é a de que essa nova lista de projeções $\{U_i^1\}$ define em t_1 uma nova reconstrução que similarmente é evoluída pela lei iterativa definida por (3.4) munida das funções de fluxo numérico, gerando assim a lista de projeções do segundo nível de iteração. Essa sequência de reconstruções, evoluções e projeções segue indefinidamente, resultando em

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \sum_{j=1}^{N_i} \frac{\Delta t_n \ell_{ij}}{A_i} \mathcal{F}_{ij}(U_i^n, U_j^n). \quad (3.6)$$

O procedimento descrito acima é conhecido na literatura por algoritmo de Godunov em honra ao autor do trabalho seminal, [14], que o introduziu.

3.2.2 Convergência

Conjectura-se que a reconstrução gerada a partir da lista de valores $\{U_i^n\}$ aproxima satisfatoriamente a solução exata do problema hiperbólico proposto no ins-

tante t_n . Certamente, o procedimento introduzido pelo algoritmo de Godunov de se evoluir a reconstrução de um nível n em contrapartida a continuar com a evolução daquela do nível $n - 1$ soma outros erros à formulação; o mais comum e fácil de se identificar pelo tratamento de problemas de Riemann simples é a exibição de um comportamento difusivo ou dispersivo, ou de ambos, na solução numérica; comportamento este não compartilhado pela solução exata do problema hiperbólico. Na medida que difusão e dispersão são fenômenos acumulativos, não se espera, portanto, que a aproximação fornecida pelo método numérico persista como sendo razoável para tempos muito longos, ou, equivalentemente, para um número muito elevado de iterações. Essa observação introduz uma cota T na simulação e porquanto reformula a questão de quão bem a solução provida pelo esquema numérico aproxima uma solução exata do problema hiperbólico proposto.

A definição de convergência

Seja \mathcal{P} uma partição do plano que atenda os requisitos introduzidos na secção 3.1 e seja \mathcal{P}' um refinamento de \mathcal{P} que cumpra os mesmos requisitos dessa partição. Obviamente, semelhante refinamento concede mais maleabilidade às reconstruções, pois permite uma melhor adequação das variações daquelas funções que essas reconstruções substituem. Logo, parece sensata a ideia de que formular métodos em partições progressivamente mais finas acarreta em aproximações melhores.

A introdução de um refinamento contudo não se dá sem implicações. Perceba que diferentemente do **domínio de dependência real** de uma célula, DDR, isto é, aquela região de onde provêm as características que verdadeiramente contribuem com o fluxo na fronteira da célula em questão entre os instantes t_n e t_{n+1} , seu domínio de dependência computacional é uma escolha passível de alguma arbitrariedade e feita por quem propõe o método.

Note que um esquema tal qual (3.6) só é válido enquanto Δt_n corresponde a um intervalo de tempo em que a informação propagada por características oriundas de regiões não incluídas no domínio de dependência computacional da célula i tem pouca ou nenhuma participação no cômputo do fluxo exato através de seu contorno, isto é, enquanto o fato de negligenciar a participação dessas células na definição das funções de fluxo numérico introduz erro algum ou um erro pequeno.

O comentário acima sugere a seguinte proposição:

Proposição 3.1 (Condição de Courant–Friedrichs–Lewy, CFL). *É uma condição necessária à convergência de um método numérico a inclusão de um **subconjunto preponderante** do domínio de dependência real de cada célula, isto é, aquele determinado pela estrutura característica da solução exata do problema hiperbólico definido entre passos contíguos de uma iteração, em seu domínio de dependência computacional.*

Demonstração. Os argumentos das funções de fluxo numérico propostas para cada célula definem o seu DDC. Supondo que se obtenha o valor exato dos fluxos numéricos definidos pelo problema hiperbólico composto da lei de conservação e da reconstrução n entre os instantes t_n e t_{n+1} , uma descrição desses valores não podem ser feita sem que se tome em consideração o valor das projeções $\{U_j^n\}$ daquelas regiões de onde as características envolvidas provêm. Em outras palavras, supõe-se que os fluxos numéricos exatos são funções daquelas projeções em cujas células há um subconjunto do domínio de dependência real do problema. Desse modo, necessariamente, as funções de fluxo numérico de uma célula devem tomar essas mesmas projeções como argumento, senão todas, ao menos aquelas que têm maior peso no valor final. Eis a razão da ressalva *subconjunto preponderante* no enunciado da proposição. \square

Seja \mathcal{P} uma partição. A área do maior elemento de \mathcal{P} define o crivo da partição, δ . Uma sequência de refinamentos de \mathcal{P} pressupõe uma sequência de crivos progressivamente menores. Um mesmo esquema numérico aplicado sucessivamente sobre cada partição de uma tal sequência não será convergente se todas as variantes usarem a mesma partição temporal. Partindo da suposição que a norma dessa partição Δt_{max} é ótima para o esquema definido sobre \mathcal{P} , no sentido de que, se em qualquer um dos passos do método um intervalo $\Delta t_n > \Delta t_{max}$ for utilizado, a proposição 3.1 deixa de ser satisfeita, na medida que uma diminuição do crivo δ da partição implica numa redução do DDC de cada célula, para que o método seja convergente, o DDR dessa mesma célula precisa ser reduzido conforme. Esta última redução entretanto implica na necessidade de se delimitar aquelas características que contribuem com o fluxo real da célula a uma região mais próxima dela, o que implica em tempos de propagação menores e por conseguinte numa diminuição da norma Δt_{max} . Este resultado encontra-se resumido na proposição abaixo.

Proposição 3.2. *A norma da partição temporal, Δt_{max} , utilizada por um esquema numérico convergente é limitada ao crivo δ da partição \mathcal{P} sobre a qual o esquema está definido, no sentido de que $\Delta t_{max} \rightarrow 0$ a medida que $\delta \rightarrow 0$.*

O conceito de convergência não pode ser estabelecido quantitativamente sem que se introduza uma medida que caracterize o desvio da solução aproximada, fornecida pelo esquema numérico, à solução exata do problema. O erro cometido por um método numérico não é susceptível à uma única definição. Uma vez que reconstruções são funções definidas por todo o domínio, pode-se, por exemplo, definir o erro ponto a ponto do domínio num nível n ,

$$E(x, y, t_n) = U(x, y, t_n) - u(x, y, t_n),$$

Ou o erro por célula baseado na lista das projeções

$$E_i^n = U_i^n - \bar{U}_i^n.$$

Os dois erros podem ser relacionados se imposto a todas as reconstruções a propriedade

$$U_i^n = \frac{1}{A_i} \int_{\Omega_i} U(x, y, t_n) dA. \quad (3.7)$$

Desse modo, têm-se que o erro por célula num dado nível é a projeção do erro ponto a ponto na célula em questão.

Mais interessante para a análise de convergência de métodos numéricos, contudo, é o erro global cometido pela aproximação. A relação entre tal erro e alguma das definições de erro local é estabelecida através da adoção de uma norma $|\cdot|$. No decorrer deste capítulo, toma-se o erro por célula como a definição de erro local, de forma que as normas utilizadas são portanto definidas sobre o espaço das projeções $\mathbb{P}(\mathcal{P})$ de funções integráveis sobre o plano. Logo, uma norma avalia, sob algum critério de definição, a distância de dois elementos desse espaço; precisamente, a informação desejada de uma estimativa de erro global. Logo a definição

$$\mathcal{E}_n \equiv |\{E_i^n\}| = |\{U_i^n - \bar{U}_i^n\}|, \quad (3.8)$$

com as chaves simbolizando o fato que não se está tomando o valor absoluto de cada erro local mas a norma de um elemento de $\mathbb{P}(\mathcal{P})$.

Em posse dessas ideias, pode-se enfim dar um significado quantitativo ao conceito de convergência de um esquema numérico.

Definição 3.1. *Seja $T > 0$ um tempo fixado e considere uma sequência de refinamentos de uma partição \mathcal{P} que atenda os requisitos introduzidos na secção 3.1. Denotando por $|\cdot|$ alguma norma e supondo conhecida uma solução u do problema hiperbólico para a qual o esquema numérico fornece uma solução aproximada, o método é dito convergir em T para u segundo a norma escolhida, se*

$$\mathcal{E}_{N(\delta)} \rightarrow 0 \quad \text{a medida que } \delta \rightarrow 0,$$

onde $N(\delta)$ denota o nível da iteração correspondente ao tempo T , ou seja,

$$T = \sum_{n=0}^{N(\delta)} \Delta t_n.$$

É bastante interessante caracterizar a maneira com que essa convergência é estabelecida, assim, diz-se que um método é convergente de ordem r quando

$$\mathcal{E}_{N(\delta)} = \mathcal{O}(\delta^r).$$

3.2.3 Consistência

A definição de convergência apresentada e a noção de ordem de convergência são úteis, contudo, somente à avaliação de qualidade dos métodos propostos. Esquemas de ordem mais alta cometem erro globais menores do que aqueles de ordem mais baixa sobre uma mesma sequência de refinamentos de alguma partição. Essas ideias porém nada acrescentam naquilo que concerne à proposta de métodos convergentes.

De volta àquela linha de raciocínio que gerou a proposição 3.1, percebe-se a importância de se propor funções de fluxo numérico que emulem satisfatoriamente as propriedades da lei de conservação em sua forma integral introduzindo assim um erro pequeno a cada iteração. Qualquer condição que possa ser imposta sobre essas funções com tal intuito é dita ser uma condição de **consistência** do método numérico.

Uma condição de consistência fundamental é sugerida pela equação (3.2) e refletida sobre (3.3) quando se assume a propagação característica de uma condição inicial constante e uniforme por todo o domínio. Analogamente, quando todas as células do domínio de dependência computacional de uma célula possuem o mesmo valor de projeção, requer-se

$$\sum_{j=1}^{N_i} \mathcal{F}_{ij}[\bar{U}] \ell_{ij} = 0, \quad (3.9)$$

onde \bar{U} é o valor da projeção das células.

No estudo da consistência e, como se vê na subsecção seguinte, da estabilidade de esquemas explícitos convém representar a lei de recorrência que define o método em termos do operador numérico $\mathcal{N} : \mathbb{P}(\mathcal{P}) \rightarrow \mathbb{P}(\mathcal{P})$. Dessa maneira, o esquema mais geral pode ser escrito como

$$U^{n+1} = \mathcal{N}(U^n), \quad (3.10)$$

com $U^n = \{U_i^n\}$. Uma boa medida de consistência de um método é portanto o erro que o operador \mathcal{N} produz quando aplicado às projeções da solução exata do problema

$$\epsilon_n = \mathcal{N}(\bar{U}^n) - \bar{U}^{n+1}, \quad (3.11)$$

com efeito, o método será consistente com a lei de conservação até uma iteração $N(\delta)$, se, para quaisquer soluções fortes u , as únicas de que se pode esperar uma convergência ponto a ponto das reconstruções no limite, o número

$$\epsilon \equiv \max_{0 \leq n \leq N(\delta)} |\epsilon_n|$$

$$\epsilon \rightarrow 0 \quad \text{a medida que} \quad \delta \rightarrow 0.$$

3.2.4 Estabilidade

Tratando-se de métodos numéricos, um atributo fundamental e necessário a convergência é a capacidade de não amplificar os erros introduzidos a cada iteração.

A importância de um critério de estabilidade para esquemas numéricos é sugerida quando se compara a evolução do erro global da solução numérica pelo operador \mathcal{N} .

Seja $U^n = \bar{U}^n + E^n$. Da aplicação do operador, tem-se

$$\begin{aligned} E^{n+1} &= U^{n+1} - \bar{U}^{n+1} \\ &= \mathcal{N}(\bar{U}^n + E^n) - (\mathcal{N}(\bar{U}^n) - \epsilon_n) \\ &= (\mathcal{N}(\bar{U}^n + E^n) - \mathcal{N}(\bar{U}^n)) + \epsilon_n, \end{aligned}$$

o que demonstra como o erro numérico evolui a cada iteração, a primeira contribuição advindo da evolução do erro numérico do passo anterior pelo operador (a interpretação é facilmente sugerida se se supõe um operador linear) e a segunda introduzida pelo aqui chamado de **desvio de consistência** do operador no nível n .

Uma teoria de estabilidade visa o controle do primeiro desses termos, uma vez que o segundo é regido pela consistência do método.

Operadores coercivos

Um operador numérico \mathcal{N} é dito ser coercivo segundo alguma norma $|\cdot|$, dado que

$$|\mathcal{N}(U) - \mathcal{N}(U')| \leq |U - U'|, \quad (3.12)$$

para quaisquer U e U' pertencentes a $\mathbb{P}(\mathcal{P})$.

Proposição 3.3. *Se um método proposto é consistente e introduz um operador coercivo, então, o erro global $\mathcal{E}_{N(\delta)}$ é limitado e porquanto o método proposto é dito ser estável.*

Demonstração. Da definição do erro global \mathcal{E}_{n+1} e da equação de evolução dos erros, tem-se

$$\mathcal{E}_{n+1} \leq |\mathcal{N}(\bar{U}^n + E^n) - \mathcal{N}(\bar{U}^n)| + |\epsilon_n|.$$

Sendo o operador \mathcal{N} coercivo, tome $U = \bar{U}^n + E^n$ e $U' = \bar{U}^n$ na equação (3.12) e leve o resultado à equação acima para obter

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{n+1} &\leq |E^n| + |\epsilon_n| \\ &\leq \mathcal{E}_n + |\epsilon_n|. \end{aligned}$$

Recursivamente, obtém-se

$$\mathcal{E}_{N(\delta)} \leq \mathcal{E}_0 + \sum_{n=0}^{N(\delta)} |\epsilon_n|.$$

A consistência do método implica em desvios de consistência limitados, tem-se

$$\epsilon = \max_{0 \leq n \leq N(\delta)} |\epsilon_n|,$$

e logo

$$\mathcal{E}_{N(\delta)} \leq \mathcal{E}_0 + N(\delta)\epsilon.$$

□

O termo \mathcal{E}_0 representa o erro global inicial e provém da aproximação introduzida pela reconstrução da condição inicial do problema. Para soluções fortes do problema hiperbólico, espera-se que o erro tenda a zero a medida que o crivo da partição também tende a zero, ou seja, a medida que os valores das projeções progressivamente se confundem com os próprios valores da condição inicial real do problema. Assim, consistência e estabilidade são suficientes para provar que um esquema é convergente no caso de soluções fortes do problema hiperbólico. Este resultado quando restrito a problemas lineares representa o conhecido *teorema da equivalência de Lax*, [22].

3.2.5 Convergência de soluções generalizadas

Embora convergência possa ser estabelecida para soluções numéricas que aproximam soluções fortes de um problema hiperbólico, o critério não estabelece a que solução se está convergindo quando um mesmo método é aplicado a problemas de solução fraca. A observação sugere que convergência puramente não é suficiente quando do tratamento de problemas hiperbólicos quaisquer.

Uma teoria de convergência de métodos numéricos a soluções fisicamente aceitáveis ou entrópicas deve ser construída. Resultados apropriados ao espectro de semelhante teoria vai muito além do escopo deste trabalho, no entanto, um ou dois comentários podem ser inseridos aqui a fim de tranquilizar o desenvolvedor de esquemas numéricos no que diz respeito a este problema. O primeiro deles é que uma boa reconstrução de uma condição inicial pode ser encarada como uma perturbação desta última o que pode levar à convergência entre solução numérica e solução entrópica do problema original a medida que o crivo da partição tende a zero. O segundo, concerne a difusão mencionada no começo deste capítulo criada pelo procedimento de evolução no algoritmo de Godunov; essa difusão pode ser suficiente para trazer as soluções do problema parabólico resultante mais perto da solução física procurada do problema hiperbólico.

3.3 O algoritmo REP

O algoritmo de Godunov introduz a ideia de que a formulação de um método em volumes finitos para problemas hiperbólicos deve abranger cada um dos três processos: reconstrução, evolução e projeção, repetidamente a cada iteração. A esse respeito foi também mencionado que a reconstrução mais simples com que se pode trabalhar é constante por partes sobre cada célula da partição usada. Obviamente, reconstruções mais complexas podem ser introduzidas e, intuitivamente, espera-se que, à proporção que essas reconstruções oferecem um melhor ajuste às funções (condições iniciais de cada iteração) que se deseja evoluir, os métodos que delas resultam forneçam soluções numéricas que aproximem com mais precisão soluções exatas do problema.

De fato, o principal efeito que reconstruções mais sofisticadas apresentam sobre esquemas numéricos é uma melhora na ordem de convergência para aqueles problemas cuja solução exata esperada é forte. Por outro lado, o uso dessas reconstruções em métodos cujas soluções visadas aproximam soluções generalizadas descontínuas pode ser catastrófico se devidas precauções não forem tomadas. Isso porque em tais casos costumam surgir oscilações espúrias nas soluções numéricas. Para entender como as reconstruções são responsáveis por semelhantes eventos, indica-se a referência base de todo este capítulo, [25]. Métodos de **alta resolução**, como são chamados aqueles esquemas que apresentam uma ordem de convergência mais elevada e não exibem oscilações espúrias, no entanto, são possíveis através do uso de **limitadores**. Esses conceitos reaparecem no próximo capítulo dentro do contexto do método proposto neste trabalho.

Os pontos apresentados conferem ao algoritmo de Godunov a propriedade de ser estendido a reconstruções mais intrincadas que a constante por partes, a construção é conhecida na literatura pelo acrônimo REP em referência as iniciais dos três passos do algoritmo.

Definição 3.2 (Algoritmo REP). *Dada uma partição \mathcal{P} do plano e um problema hiperbólico composto de uma lei de conservação e uma condição inicial $u_0(x, y)$, partindo da lista de projeções U^0 de u_0 ,*

- i) Reconstrua uma função polinomial por partes $U^n(x, y)$ a partir da lista de projeções U^n que atenda a condição (3.7),*
- ii) Evolua o problema hiperbólico exata ou aproximadamente tomando $U^n(x, y)$ como condição inicial de t_n até t_{n+1} para obter $U^n(x, y, t_{n+1})$,*
- iii) Projete essa função sobre cada célula de \mathcal{P} para obter um novo conjunto de projeções U^{n+1} .*

Um Esquema Central para Leis de Conservação Hiperbólicas em Malhas Não-Estruturadas Triangulares

4.1 Esquemas Centrais

Da multitude de resultados geométricos baseados na estrutura característica de problemas de Riemann, que produziram ou auxiliaram a criação de tantos métodos numéricos satisfatórios para o caso unidimensional, apenas a intuição que eles sugerem parece ser de grande utilidade quando se depara com a complexidade dos problemas de dimensões mais altas. Qualquer tentativa de se manipular de modo rigoroso uma extensão do problema de Riemann com o intuito de se desenvolver um esquema em volumes finitos, genérico, para a resolução de problemas bidimensionais, por exemplo, se revela uma tarefa bastante difícil e mesmo contraproducente.

É por tal razão que ideias não relacionadas particularmente com a estrutura característica de um problema são tão estimadas.

O método de Lax-Friedrichs [23], o esquema central de alta resolução de Nessyahu-Tadmor [27] e, seu melhoramento, o esquema de Kurganov-Tadmor [21], todos caem na categoria de serem métodos numéricos não baseados na solução de problemas de Riemann (*non-Riemann solvers*), no sentido que esses métodos não são elaborados a partir da aplicação do método das características em tais problemas, e portanto não é surpreendente que seu conteúdo essencial e sua filosofia oriente a busca por métodos sólidos ainda mais gerais.

Arminjon *et al.* [2] propõem uma extensão bem-sucedida dos esquemas centrais de Lax-Friedrichs e Nessyahu-Tadmor para problemas bidimensionais em malhas triangulares não-estruturadas. O procedimento deles, no entanto, é centrado nos

nós da rede (*node-centered*) uma vez que os graus de liberdade do esquema são dispostos na posição desses pontos.

O maior propósito deste trabalho é o de propor um esquema similar, entretanto, um em que, em contrapartida, as variáveis sejam atribuídas às células triangulares da malha.

4.2 Introdução ao método proposto

O raciocínio impulsivo por trás de todo esquema central é o uso judicioso da lei de conservação para suprir aquela informação que, em um método baseado em solucionadores de Riemann, viria da estrutura característica do problema. Um avanço fundamental compartilhado por todos é a bipartição do intervalo de iteração entre passos sucessivos; isso com efeito introduz passos intermediários à computação. A maneira com que a inserção desses passos é feita especifica o esquema central.

4.2.1 Domínios computacionais e a proposta do problema

A simplicidade dos problemas de valor inicial frente a problemas com fronteiras e que por isso exigem a definição de condições de contorno não pode ser estendida aos métodos computacionais. Domínios computacionais são necessariamente limitados. Mais ainda, esses conjuntos possuem uma forma própria em decorrência dos algoritmos que os geram; são em geral regiões poligonais. Tais regiões por sua vez apresentam a vantagem analítica de sempre ser possível definir-lhes uma partição finita composta exclusivamente de outras regiões poligonais limitadas. Porquanto, no desenvolvimento do método numérico neste trabalho, faz-se uso das seguintes definições:

Definição 4.1. *Por um domínio computacional, entende-se uma região poligonal limitada, Π , de \mathbb{R}^2 .*

Definição 4.2. *Seja Π um domínio computacional, uma triangulação \mathcal{T}_h é um conjunto finito de regiões triangulares T_i que satisfaz os critérios:*

i) $\Pi = \bigcup_{T_i \in \mathcal{T}_h} T_i$

ii) *Se i e j são índices distintos e quaisquer, então $T_i \cap T_j$ ou é vazio, ou é constituído de um único vértice comum a duas regiões, ou é constituído de uma única aresta comum a duas regiões.*

A \mathcal{T}_h está associado o conjunto de pontos $\{(x_\alpha, y_\alpha)\}$ de \mathbb{R}^2 que definem os vértices dos triângulos.

Métodos numéricos em volumes finitos são derivados com base não em equações diferenciais parciais mas sim nas leis de conservação em sua forma integral das quais essas EDP provêm. Esse ponto de partida concede ao esquema final a prerrogativa de suas soluções serem capazes de aproximar com determinada precisão soluções fracas do problema de interesse e garante a conservação local (célula a célula) da propriedade modelada numericamente.

Considere u portanto uma solução de um problema hiperbólico qualquer, definido sobre um domínio computacional Π arbitrário, ou seja, u é uma função definida sobre $\Pi \times [0, T]$, com $T \in \mathbb{R}$ e $T > 0$, tal que, para todo $\Omega \subseteq \Pi$, u satisfaz

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u(x, y, t) \, dA = - \oint_{\partial\Omega} f(u(x, y, t))n_x + g(u(x, y, t))n_y \, dl, \quad (4.1)$$

onde f e g são funções diferenciáveis sobre \mathbb{R} e (n_x, n_y) são componentes do campo normal \mathbf{n} definido sobre os pontos de $\partial\Omega$, bem como u deve satisfazer simultaneamente as condições inicial e de contorno do problema.

Condições de contorno

As condições de contorno encontradas na maioria dos problemas são de apenas dois tipos: de valor prescrito ou condições de Dirichlet e de fluxo prescrito. Em consequência, é conveniente assumir que as condições de contorno estão definidas sobre dois subconjuntos de $\partial\Pi$ denotados por $\partial\Pi_D$ e $\partial\Pi_f$ sobre os quais estão definidas respectivamente as condições de valor prescrito e aquelas de fluxo prescrito. Isso introduz as funções $h_D : \partial\Pi_D \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ e $h_f : \partial\Pi_f \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ tais que, sendo u uma solução do problema,

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= h_D(x, y, t), \quad \forall (x, y, t) \in \partial\Pi_D \times [0, T] \\ f(u(x, y, t))n_x + g(u(x, y, t))n_y &= h_f(x, y, t), \quad \forall (x, y, t) \in \partial\Pi_f \times [0, T] \end{aligned}$$

No caso dos problemas hiperbólicos existe ainda um terceiro subconjunto de $\partial\Pi$, denotado $\partial\Pi_l$, tal que nenhuma condição de contorno lhe é especificada. Neste trabalho é assumido que as condições impostas sobre u na fronteira de Π são somente dos tipos aduzidos aqui. Por fim, $\partial\Pi = \partial\Pi_D \cup \partial\Pi_f \cup \partial\Pi_l$ e obviamente todos os três subconjuntos são disjuntos.

Descrição dos parâmetros

A cada elemento T_i de $\mathcal{T}_h(\Pi)$ relaciona-se um conjunto \mathcal{N}_i dos índices dos vértices da triangulação presentes na célula. Inversamente, a cada vértice α de $\mathcal{T}_h(\Pi)$ relaciona-se um conjunto \mathcal{N}_α dos índices dos triângulos que possuem α como vértice. Dada essas relações introduz-se a noção de uma malha auxiliar em Π associada a \mathcal{T}_h .

Definição 4.3. Denota-se por $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$ a partição única de Π de regiões poligonais cujos vértices são os baricentros dos triângulos de legenda \mathcal{N}_α e os pontos médios das arestas de \mathcal{T}_h que compartilham o nó α , se ele próprio não é um ponto de $\partial\Pi$; em caso contrário, as regiões são definidas da mesma maneira, acrescentando-se apenas o próprio ponto α como um vértice. \mathcal{D} é denominada a malha dual de Π com respeito a \mathcal{T}_h .

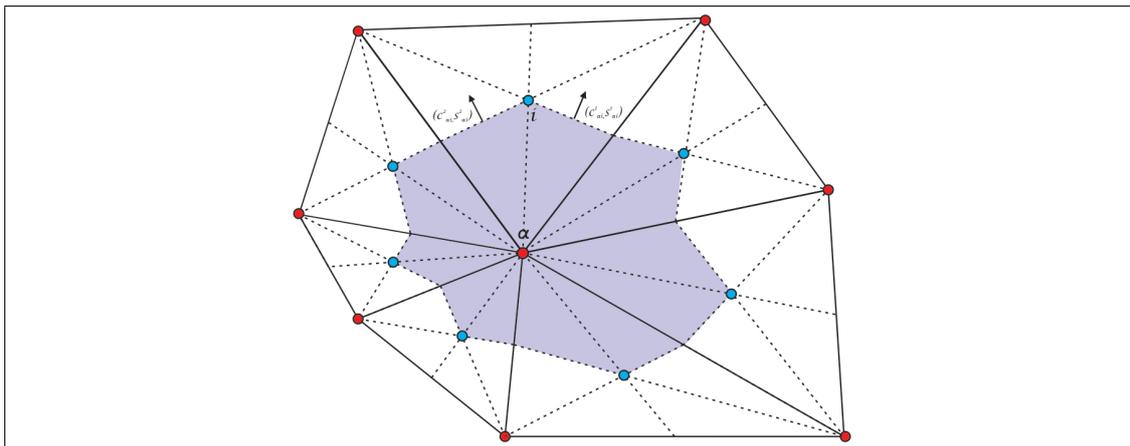


Figura 4.1: Uma triangulação de um domínio computacional Π qualquer com a malha auxiliar, definida por $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$, sotoposta.

Neste trabalho se faz um uso exaustivo de coordenadas e índices de pontos. Por uma questão de economia textual, frequentemente, como na definição acima, se intercambia os sentidos do índice e do ponto a que ele serve de legenda, utilizando um termo pelo outro, obviamente, quando esse uso não carrega problemas de entendimento. Mais ainda, uma distinção entre índices, já sugerida no texto, é adotada. Caracteres latinos fazem referência a elementos da malha definida por \mathcal{T}_h : a área do elemento T_i , $A(T_i)$ ou A_i , o baricentro (x_j, y_j) , etc. Em contraponto e similarmente, caracteres gregos indicam nós da malha original ou elementos da malha auxiliar definida por $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$, logo escreve-se: o vértice (x_β, y_β) , o elemento de \mathcal{D} , P_α .

Por fim, são recorrentes no desenvolvimento dos esquemas considerações a respeito dos conjuntos de pontos $\partial P_\alpha \cap T_i$ e $\partial T_i \cap P_\alpha$. Em especial, cada um desses conjuntos se identifica com dois segmentos de retas cujos vetores normais e comprimentos são parâmetros indispensáveis. Convém, portanto, introduzir a notação $(c_{\alpha i}^1, s_{\alpha i}^1)$, $(c_{\alpha i}^2, s_{\alpha i}^2)$ para representar as componentes dos vetores normais referentes a $\partial P_\alpha \cap T_i$, bem como $\ell_{\alpha i}^1$ e $\ell_{\alpha i}^2$ para os comprimentos dos segmentos, e $(c_{i\alpha}^1, s_{i\alpha}^1)$, $(c_{i\alpha}^2, s_{i\alpha}^2)$, $\ell_{i\alpha}^1$ e $\ell_{i\alpha}^2$, em se tratando de $\partial T_i \cap P_\alpha$.

4.2.2 Motivação e delineamento do método

A construção de qualquer método em volumes finitos que produza uma solução numérica sensata para aproximar u deve seguir o algoritmo REP (*ver secção 3.3*). Cada estágio do algoritmo apresenta certas arbitrariedades e dificuldades próprias que em si mesmas irão definir o esquema a ser proposto. Conforme sugerido na abertura desta secção, esquemas centrais bipartidos requerem o dobro do número de iterações a contar do passo inicial. Para alguma partição $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T$, introduz-se de fato um refinamento $0 = t_0 < t_{\frac{1}{2}} < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_{N-\frac{1}{2}} < t_N = T$, de maneira que não se definem apenas reconstruções sobre tempos de índices inteiros mas também aos de legenda fracionária e o procedimento com que se as define não é mesmo para tempos sucessivos. Essa distinção requer a introdução da partição secundária de \mathcal{H} , todavia, ainda intimamente relacionada a $\mathcal{T}_h, \mathcal{D}$. A necessidade de tais voltas é justificada pelo que concerne ao segundo passo do algoritmo, a evolução, desde que se negligencia o uso da informação oriunda da estrutura característica do problema em questão na obtenção dos fluxos em favor de uma resolução mais simples dos mesmos que priorize a lei de conservação que define o problema. Cada estágio será apresentado em detalhes no que se segue.

Primeira reconstrução

O primeiro estágio do algoritmo REP consiste de uma reconstrução polinomial por partes a partir dos valores médios das células. Restringindo a reconstrução a polinômios lineares por partes, toma-se

$$\bar{U}^0(x, y) = U_i^0 + a_i^0(x - x_i) + b_i^0(y - y_i), \quad \forall (x, y) \in T_i, \quad (4.2)$$

com $U_i^0 = \frac{1}{A_i} \int_{T_i} u_0(x, y) dA$, u_0 sendo a condição inicial do problema de interesse e (a_i^0, b_i^0) definindo as inclinações da reconstrução. Esses dois últimos parâmetros são funções do conjunto $\{U_i^0\}$ e das coordenadas dos nós da malha; essa relação funcional é um ponto fundamental na construção do método e é, portanto, discutida separadamente no decorrer deste capítulo, sendo aqui suficiente supor a sua existência.

Evolução e projeção auxiliar

A reconstrução definida em (4.2) não é necessariamente contínua e diferenciável, com efeito, usualmente, para aplicações de interesse ela não será. Esse fato torna o segundo estágio do algoritmo REP um passo bastante difícil se se pretende executá-lo de modo exato, ou mesmo, visando uma evolução aproximada por meio de algum procedimento que faça uso da estrutura característica do problema. Ainda que u , a solução exata do problema original, seja uma função diferenciável e, pois,

uma solução forte do problema (2.6), o problema, do qual a solução numérica que a aproxima deriva, parte de uma condição inicial, tipicamente, apenas diferenciável por partes. A estrutura característica de tal problema pode então ser complexa a ponto de inviabilizar o uso de uma solução exata, ainda que ela exista, na proposição de um método geral.

O argumento acima favorece a formulação de esquemas centrais, uma vez que para tais métodos o conceito de curvas características de um problema é apenas acessório e aquilo que possui significância e utilidade são os resultados diretamente provenientes da lei de conservação integral. No que concerne à elaboração de métodos em volumes finitos, as dificuldades associadas com a evolução do problema são equivalentes às relacionadas com a determinação da integral

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \oint_{\partial T_i} f(U^n(x, y, t))n_x + g(U^n(x, y, t))n_y \, dl \, dt, \quad (4.3)$$

onde $U^n(x, y, t) : \Pi \times [t_n, t_{n+1}] \rightarrow \mathbb{R}$ representa a evolução exata da reconstrução $\bar{U}^n(x, y)$. A introdução de uma malha auxiliar definida por \mathcal{D} e da bipartição do método visa contornar essas dificuldades.

Considere então a reconstrução determinada por (4.2) e suponha conhecida sua evolução exata $U^0(x, y, t)$ até um tempo t' . Desde que todas as curvas características do problema têm velocidades finitas de propagação, independentemente do que aconteça na vizinhança dos pontos da fronteira de uma célula i qualquer e uma vez que o dado inicial é diferenciável por partes, existe uma vizinhança em torno do baricentro, (x_i, y_i) , contida em T_i , com a propriedade de que, dentro de um suficientemente pequeno intervalo de tempo $[0, t_{\frac{1}{2}}^i]$ tal que $t_{\frac{1}{2}}^i \leq t'$, a restrição de $U^0(x, y, t)$ ao produto dessa vizinhança e o intervalo é diferenciável. Esse ponto sugere que se, como uma alternativa às integrais definidas por (4.3), cálculos semelhantes pudessem ser levados para o interior das células na vizinhança de seus baricentros, uma aproximação dessas novas integrais apelando para a diferenciabilidade local de $U^0(x, y, t)$ seria razoável. Note que, tal como definida $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$, qualquer fronteira, ∂P_α , de uma célula da malha auxiliar atende o sugerido requisito.

Faça então $t_{\frac{1}{2}} = \min t_{\frac{1}{2}}^i$ e considere $U^0(x, y, t)$; fazendo $\Omega = P_\alpha$ em (4.1) e integrando a equação resultante de 0 a $t_{\frac{1}{2}}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_{P_\alpha} U^0(x, y, t_{\frac{1}{2}}) \, dA - \int_{P_\alpha} \bar{U}^0(x, y) \, dA = \\ - \int_0^{t_{\frac{1}{2}}} \oint_{\partial P_\alpha} f(U^0(x, y, t))n_x + g(U^0(x, y, t))n_y \, dl \, dt. \end{aligned} \quad (4.4)$$

A partir do primeiro termo do lado esquerdo da equação anterior se define a

projeção auxiliar

$$U_\alpha^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{A_\alpha} \int_{P_\alpha} U^0(x, y, t_{\frac{1}{2}}) dA, \quad (4.5)$$

e o segundo termo é calculado explicitamente nas próximas secções deste capítulo. A integral do lado direito é similar à apresentada em (4.3), no entanto, com a diferença que, agora, em uma parte substancial (*assume-se*) da região de integração, o integrando é uma função diferenciável. Ainda, a segunda e a terceira integrais são respectivamente iguais às somas

$$\sum_{i \in N_\alpha} \int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^0(x, y) dA \quad e \quad (4.6)$$

$$\sum_{\substack{i \in N_\alpha \\ m=\{1,2\}}} \int_0^{t_{\frac{1}{2}}} \oint_{\partial P_\alpha \cap T_i} (f(U^0(x, y, t))c_{\alpha i}^m + g(U^0(x, y, t))s_{\alpha i}^m) dl dt. \quad (4.7)$$

Aproximação fundamental do método

Neste ponto é preciso introduzir a hipótese central do esquema proposto:

No cômputo da integral (4.7), supõe-se que os valores assumidos pela função $U^0(x, y, t)$ sobre os pontos de cada segmento da fronteira $\partial P_\alpha \cap T_i$ no intervalo $[0, t_{\frac{1}{2}}]$ são determinados respectivamente pela propagação dos valores de $\bar{U}^0(x, y)$ ao longo de curvas características que emanam da célula T_i , ou equivalentemente, para todo $(x, y, t) \in \partial P_\alpha \cap T_i \times [0, t_{\frac{1}{2}}]$, existe um ponto $(x_0, y_0) \in T_i$ tal que $U^0(x, y, t) = \bar{U}^0(x_0, y_0)$ e

$$\begin{aligned} x &= x_0 + f'(\bar{U}^0(x_0, y_0))t \\ y &= y_0 + g'(\bar{U}^0(x_0, y_0))t. \end{aligned}$$

A suposição acima é claramente não verdadeira, pois as características que interceptam pontos próximos às arestas de uma dada célula da malha original podem muito bem provir de células vizinhas em cuja interface com a célula em questão ondas de choque ou ondas de rarefação, por exemplo, são formadas. Contudo, escolhendo-se propriamente o intervalo $\delta t = t_{\frac{1}{2}} - 0$, a contribuição dessas outras células no cálculo da integral (4.7) talvez possa ser consideravelmente reduzida, tornando a hipótese acima uma boa aproximação. O procedimento sobretudo introduz erros adicionais na computação e pode inclusive afetar a consistência do método proposto neste trabalho. Todas essas questões infelizmente precisam de um tratamento *a posteriori*. A respeito do desvio de consistência introduzido pela aproximação, entretanto, pode-se constatar que ele tende a zero a medida que $\delta t \rightarrow 0$, dada a limitação no módulo das velocidades características.

Segunda reconstrução

Em posse dos valores das integrais (4.6) e (4.7), aproximados nesta última, deduz-se o valor das projeções $\left\{U_\alpha^{\frac{1}{2}}\right\}$ a partir da equação (4.4) e da definição (4.5). Uma nova reconstrução polinomial linear por partes é então introduzida sobre as células de $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$, isto é, define-se uma função

$$\bar{U}^{\frac{1}{2}}(x, y) = U_\alpha^{\frac{1}{2}} + a_\alpha^{\frac{1}{2}}(x - x_\alpha) + b_\alpha^{\frac{1}{2}}(y - y_\alpha), \quad \forall (x, y) \in P_\alpha, \quad (4.8)$$

onde novamente o par $(a_\alpha^{\frac{1}{2}}, b_\alpha^{\frac{1}{2}})$ representa o vetor de inclinações da reconstrução, que são funções do conjunto $\left\{U_\alpha^{\frac{1}{2}}\right\}$ e das coordenadas dos nós da malha \mathcal{T}_h .

Segunda evolução e projeção principal

Semelhante ao feito na primeira evolução, supõe-se conhecida a função $U^{\frac{1}{2}}(x, y, t)$, obtida da evolução de $\bar{U}^{\frac{1}{2}}(x, y)$, definida entre os instantes $t_{\frac{1}{2}}$ e t_1 , esse último escolhido segundo orientações equivalentes as que determinam o primeiro, aplica-se a lei de conservação (4.1) sobre cada célula T_i da malha original e integra-se a equação resultante, o que produz a equação

$$\begin{aligned} \int_{T_i} U^{\frac{1}{2}}(x, y, t_1) \, dA - \int_{T_i} \bar{U}^{\frac{1}{2}}(x, y) \, dA = \\ - \int_{t_{\frac{1}{2}}}^{t_1} \oint_{\partial T_i} f(U^{\frac{1}{2}}(x, y, t))n_x + g(U^{\frac{1}{2}}(x, y, t))n_y \, dl \, dt. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Similarmente, define-se a projeção principal por

$$U_i^1 = \frac{1}{A_i} \int_{T_i} U^{\frac{1}{2}}(x, y, t_1) \, dA \quad (4.10)$$

e identifica-se as integrais restantes com as somas

$$\sum_{\alpha \in N_i} \int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^{\frac{1}{2}}(x, y) \, dA \quad \text{e} \quad (4.11)$$

$$\sum_{\substack{\alpha \in N_i \\ m=\{1,2\}}} \int_{t_{\frac{1}{2}}}^{t_1} \oint_{\partial T_i \cap P_\alpha} \left(f(U^{\frac{1}{2}}(x, y, t))c_{i\alpha}^m + g(U^{\frac{1}{2}}(x, y, t))s_{i\alpha}^m \right) \, dl \, dt. \quad (4.12)$$

O problema referente ao cálculo de (4.12) é tratado de maneira semelhante ao da integral (4.7). A denominada aproximação fundamental é facilmente estendida e, obviamente, assumida para toda iteração do método, bastando trocar os papéis desempenhados pelas funções $U^0(x, y, t)$ e $\bar{U}^0(x, y)$ em seu enunciado, bem como o do intervalo $[0, t_{\frac{1}{2}}]$, por funções e intervalos análogos.

4.2.3 Estrutura geral do esquema

A recursividade dos passos delineados acima define o plano geral do método proposto. Perceba que apesar de reconstruções lineares por partes terem sido explicitamente aduzidas no texto, sua introdução não é de maneira alguma essencial às suposições tomadas para aproximação do cálculo das integrais de fluxo (4.7) e (4.12), a parte mais problemática no desenvolvimento do esquema numérico. Com efeito, a estrutura que se apresenta abaixo depende somente do fato de que as reconstruções utilizadas são polinomiais por partes, a primeira exigência do algoritmo REP. A apresentação de uma reconstrução linear tanto em (4.2) quanto em (4.8) foi motivada duplamente pelo uso que lhe é feito na literatura e neste trabalho e pelo impulso didático de se fornecer um exemplo àquela posição do texto.

A estrutura geral do esquema é resumida portanto no par de equações

$$U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{A_\alpha} \sum_{i \in N_\alpha} \left(\int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^n \, dA - \sum_{m=1}^2 \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \oint_{(\partial P_\alpha \cap T_i)_m} \left(f(U^n) c_{\alpha i}^m + g(U^n) s_{\alpha i}^m \right) dl \, dt \right), \quad (4.13)$$

$$U_i^{n+1} = \frac{1}{A_i} \sum_{\alpha \in N_i} \left(\int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} \, dA - \sum_{m=1}^2 \int_{t_{n+\frac{1}{2}}}^{t_{n+1}} \oint_{(\partial T_i \cap P_\alpha)_m} \left(f(U^{n+\frac{1}{2}}) c_{i\alpha}^m + g(U^{n+\frac{1}{2}}) s_{i\alpha}^m \right) dl \, dt \right), \quad (4.14)$$

onde se subentende as variáveis próprias de cada função nos integrandos em favor de uma exposição mais concisa.

4.3 A variação de baixa resolução

Nesta secção introduz-se efetivamente a primeira variação do esquema proposto neste trabalho. Ela é baseada numa reconstrução constante por partes nos dois estágios de cada iteração, o que reduz enormemente ambos desenvolvimento e exposição do método. Uma distinção sempre deve ser feita no tratamento das células de contorno, isto é, células que possuem ao menos uma de suas arestas na fronteira de Π , e, por isso, a apresentação do esquema se divide entre as duas subsecções seguintes.

4.3.1 Tratamento de células internas

Seja P_α uma célula interna da malha definida por $\mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$ e suponha que nenhuma aresta de T_i , tal que $i \in N_\alpha$, seja uma aresta de contorno. Considere a equação (4.13) para tal α .

Se $\bar{U}^n(x, y)$ é uma reconstrução constante por partes, então $\bar{U}^n(x, y) = U_i^n$, $\forall (x, y) \in T_i$. A aproximação fundamental do método portanto impõe que $f(U^n(x, y, t)) = f(U_i^n)$ e $g(U^n(x, y, t)) = g(U_i^n)$ para todo ponto do segmento da fronteira de ∂P_α incluso em T_i , o que permite facilmente calcular as integrais de fluxo e obter

$$U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = \sum_{i \in N_\alpha} \left(\frac{A_i}{3A_\alpha} U_i^n - \frac{\Delta t_n}{A_\alpha} (F_i^n (c_{\alpha i}^1 \ell_{\alpha i}^1 + c_{\alpha i}^2 \ell_{\alpha i}^2) + G_i^n (s_{\alpha i}^1 \ell_{\alpha i}^1 + s_{\alpha i}^2 \ell_{\alpha i}^2)) \right), \quad (4.15)$$

onde $F_i^n = f(U_i^n)$, $G_i^n = g(U_i^n)$, $\Delta t_n = t_{n+\frac{1}{2}} - t_n$, e se faz uso do fato de que $A(P_\alpha \cap T_i) = \frac{A_i}{3}$ para quaisquer P_α e T_i .

Similarmente, seja T_i uma célula interna da malha definida por $\mathcal{T}_h(\Pi)$, suponha que nenhuma aresta de P_α , tal que $\alpha \in N_i$, seja uma aresta de contorno, e considere a equação (4.14) para tal i .

Novamente, se $\bar{U}^{n+\frac{1}{2}}(x, y)$ é uma reconstrução constante por partes, então $\bar{U}^{n+\frac{1}{2}}(x, y) = U_\alpha^{n+\frac{1}{2}}$, $\forall (x, y) \in P_\alpha$. A aproximação fundamental do método impõe $f(U^{n+\frac{1}{2}}(x, y, t)) = f(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$ e $g(U^{n+\frac{1}{2}}(x, y, t)) = g(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$ para todo ponto de $\partial T_i \cap P_\alpha$, implicando em

$$U_i^{n+1} = \sum_{\alpha \in N_i} \left(\frac{1}{3} U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t_{n+\frac{1}{2}}}{A_i} \left(F_\alpha^{n+\frac{1}{2}} (c_{i\alpha}^1 \ell_{i\alpha}^1 + c_{i\alpha}^2 \ell_{i\alpha}^2) + G_\alpha^{n+\frac{1}{2}} (s_{i\alpha}^1 \ell_{i\alpha}^1 + s_{i\alpha}^2 \ell_{i\alpha}^2) \right) \right), \quad (4.16)$$

com $F_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = f(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$, $G_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = g(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$, $\Delta t_{n+\frac{1}{2}} = t_{n+1} - t_{n+\frac{1}{2}}$.

4.3.2 Condições de contorno

No tratamento das células de contorno, admite-se que cada aresta de $\mathcal{T}_h(\Pi)$ no contorno está incluída inteiramente em um dos conjuntos $\partial \Pi_D$, $\partial \Pi_f$, $\partial \Pi_l$. Essa hipótese é essencial para uma aplicação consistente das condições de contorno do problema. Perceba que as equações (4.13) e (4.14) quando aplicadas às células de contorno produzem exatamente as equações (4.15) e (4.16) com a adição de

dois novos termos, cada um deles advindo de uma aresta de contorno da célula. Constate que qualquer que seja a malha em uso numa iteração do método, uma célula de contorno admite no máximo duas arestas na fronteira de Π . A forma desses termos depende obviamente do tipo de condição a que as arestas estão submetidas e decorre naturalmente da lei de conservação.

Arestas com valor prescrito

Suponha que uma célula P_α ou T_i possua uma aresta, denotada por Γ_D , pertencente a $\partial\Pi_D$. Uma vez que sobre os pontos dessa aresta a solução exata do problema satisfaz $u(x, y, t) = h_D(x, y, t)$, naturalmente exige-se que a solução reconstruída satisfaça

$$U^n(x, y, t) = \bar{h}_D^n(x, y, t),$$

ou, respectivamente,

$$U^{n+\frac{1}{2}}(x, y, t) = \bar{h}_D^{n+\frac{1}{2}}(x, y, t),$$

onde \bar{h}_D^n e $\bar{h}_D^{n+\frac{1}{2}}$ são funções compatíveis com evolução da reconstrução e que satisfazem de modo exato ou aproximado as relações:

$$\begin{aligned} & \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_D} \left(f(\bar{h}_D^n) c_D + g(\bar{h}_D^n) s_D \right) dl dt \approx \\ & \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_D} \left(f(h_D) c_D + g(h_D) s_D \right) dl dt, \\ & \int_{t_{n+\frac{1}{2}}}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_D} \left(f(\bar{h}_D^{n+\frac{1}{2}}) c_D + g(\bar{h}_D^{n+\frac{1}{2}}) s_D \right) dl dt \approx \\ & \int_{t_{n+\frac{1}{2}}}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_D} \left(f(h_D) c_D + g(h_D) s_D \right) dl dt, \end{aligned}$$

onde (c_D, s_D) são as componentes do vetor normal à aresta. Perceba também que Γ_D não indica o mesmo conjunto de pontos em cada caso.

Do ponto de vista computacional, contudo, essas funções são pouco importantes, uma vez que os parâmetros de real interesse são os valores das integrais de fluxo sobre $\Gamma_D \times [t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$ ou $\Gamma_D \times [t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}]$ e esses valores podem ser obtidos diretamente das integrais que compõem o lado direito das duas relações acima.

Em suma, no caso de alguma célula P_α , ou T_i , apresentar uma aresta de contorno $\Gamma_D \subseteq \partial\Pi$, acrescenta-se à soma dos fluxos no lado direito da equação (4.15), ou (4.16), o termo

$$\mathcal{F}_D^n = \Delta t_n \ell_D \left(F_D^n c_D + G_D^n s_D \right), \quad (4.17)$$

ou termo

$$\mathcal{F}_D^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t_{n+\frac{1}{2}} \ell_D \left(F_D^{n+\frac{1}{2}} c_D + G_D^{n+\frac{1}{2}} s_D \right), \quad (4.18)$$

onde

$$F_D^n = \frac{1}{\Delta t_n \ell_D} \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_D} f(h_D) dl dt \quad \text{e} \quad G_D^n = \frac{1}{\Delta t_n \ell_D} \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_D} g(h_D) dl dt,$$

e $F_D^{n+\frac{1}{2}}, G_D^{n+\frac{1}{2}}$ são definidos analogamente.

Arestas de fluxo prescrito

Bastante parecido é o tratamento das arestas onde se prescreve uma condição de contorno com imposição no valor do fluxo. Desde que se impõe uma condição de contorno da forma $f(u)c_f + g(u)s_f = h_f$ à solução exata do problema, pode-se introduzir funções \bar{h}_f^n e $\bar{h}_f^{n+\frac{1}{2}}$ que compatibilizem uma condição de contorno semelhante com as evoluções das reconstruções e satisfaçam relações de fluxo similares às duas anteriores.

Novamente, essas funções pouco importam para o problema computacional e o que resulta é a adição de cada um dos termos apresentados abaixo à contribuição dos fluxos nas equações (4.15) e (4.16) respectivamente:

$$\mathcal{F}_f^n = \Delta t_n \ell_f H_f^n \quad (4.19)$$

e

$$\mathcal{F}_f^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t_{n+\frac{1}{2}} \ell_f H_f^{n+\frac{1}{2}}, \quad (4.20)$$

com

$$H_f^n = \frac{1}{\Delta t_n \ell_f} \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_f} h_f dl dt \quad \text{e} \quad H_f^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t_{n+\frac{1}{2}} \ell_f} \int_{t_{n+\frac{1}{2}}}^{t_{n+1}} \int_{\Gamma_f} h_f dl dt.$$

Arestas livres de prescrição

O último caso é o das arestas $\Gamma_l \in \partial \Pi_l$. Impor condições de contorno a toda a fronteira do domínio de um problema hiperbólico ou torna o problema mal-posto, ou, quando as condições são compatíveis com a evolução do problema, torna dispensável sua definição para todo o contorno. Na análise das soluções exatas de problemas bem-postos pouca atenção é dada aos pontos de $\partial \Pi_l$, uma vez que nenhuma condição lhes é imposta e sua situação decorre naturalmente da estrutura característica do problema. Isso, no entanto, não se dá da mesma maneira no tratamento computacional dessas arestas. Um erro comum entre principiantes de modelagem computacional é a negligência com o comportamento da solução neste

tipo de fronteira; impensadamente, acredita-se que pela falta de uma condição funcional de contorno, simplesmente, basta tratar das arestas internas e adicionar as contribuições das arestas de Dirichlet ou das de fluxo prescrito às fórmulas (4.15) e (4.16) quando lhes fizer sentido. O procedimento, contudo, é equivalente a atribuição de um fluxo nulo às arestas Γ_l , o que resulta na observação de uma acumulação ou espécie de represamento da solução numérica encontrada na vizinhança dessas arestas, onde normalmente se espera um trânsito ou escoamento desimpedido dos valores.

Com efeito, o tratamento correto desses pontos, cuja condição de contorno é realmente a ausência de uma identidade funcional e não a ausência plena de condição de contorno, é feito de maneira muito semelhante ao trato das outras condições de contorno já apresentadas. Por cada aresta $\Gamma_l \in \partial T_i$ ou segmento de $\Gamma_l \cap \partial P_\alpha$, adiciona-se a (4.16), ou (4.15), respectivamente, os termos

$$\mathcal{F}_l^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t_{n+\frac{1}{2}} \ell_l \left(F_l^{n+\frac{1}{2}} c_l + G_l^{n+\frac{1}{2}} s_l \right), \quad (4.21)$$

e

$$\mathcal{F}_l^n = \Delta t_n \ell_l \left(F_l^n c_l + G_l^n s_l \right), \quad (4.22)$$

onde

$$F_l^n = \frac{1}{\Delta t_n \ell_l} \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_l} f(U^n) dl dt \quad \text{e} \quad G_l^n = \frac{1}{\Delta t_n \ell_l} \int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \int_{\Gamma_D} g(U^n) dl dt,$$

e $F_l^{n+\frac{1}{2}}$, $G_l^{n+\frac{1}{2}}$ são definidos analogamente.

O cômputo das equações acima requer o uso de alguma aproximação, pois a evolução exata das reconstruções é apenas um dado suposto. Como antes, faz-se então uso da aproximação fundamental introduzida neste capítulo, o que para o esquema de baixa ordem implica em $F_l^n = f(U_i^n)$ e $G_l^n = g(U_i^n)$, se $\Gamma_l \in \partial T_i$, e $F_l^{n+\frac{1}{2}} = f(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$, $G_l^{n+\frac{1}{2}} = g(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}})$ para $\Gamma_l \cap \partial P_\alpha$.

4.4 O esquema de alta resolução

Todos os esquemas centrais referenciados na secção 4.1 têm uma outra propriedade em comum: apresentam muita difusão numérica. Os esquemas propostos neste trabalho, pertencendo à mesma família, não fogem da regra e sua própria construção sugere a razão para tanto. O uso da lei de conservação para contornar o problema do cálculo dos fluxos nas arestas da malha efetivamente homogeniza a informação da estrutura característica do problema dentro da região tomada como DDC de uma célula. Esse atributo impede os esquemas centrais, por exemplo,

de obterem uma convergência melhor na vizinhança de ondas de choque. Usualmente, duas providências são possíveis numa tentativa de atenuar esses efeitos: introduz-se uma reconstrução de maior grau, técnica que produz magníficos resultados na teoria de problemas unidimensionais e se define novas malhas, auxiliares, cuja configuração permita a criação de iterações menos difusivas.

4.4.1 A definição das inclinações

Introduzir uma reconstrução polinomial linear por partes da variável de interesse sobre as células de ambas as malhas, original e auxiliar, como já mencionado, estabelece o problema de definir o vetor de inclinações em cada célula como uma função das projeções da variável sobre a malha em questão e de parâmetros geométricos dessa última. O problema é ainda mais grave pelo fato de inexistir um teorema central na teoria de problemas bidimensionais, tal qual o é o teorema de Harten [19] na teoria unidimensional, a ditar sobre que condições se obtém um método que goze de uma ou outra certa propriedade de interesse. Mesmo a utilidade da extensão de conceitos de uma teoria para outra parece problemática. Tome por exemplo o conceito de métodos de variação total decrescente (*Total Variation Diminishing*) em que o próprio teorema supracitado está baseado e que é tão útil na confecção de métodos de alta resolução para problemas 1D; Goodman e LeVeque [16] demonstram que qualquer esquema conservativo para a solução de problemas hiperbólicos escalares em duas dimensões, que seja de variação total decrescente, é no máximo de primeira ordem em convergência, logo um método de baixa resolução.

Dentro desse cenário, pouco se sabe para que se exija algo das inclinações de reconstruções lineares. Todavia, uma condição se destaca no intuito de tornar essas reconstruções mais fidedignas nas aproximações que lhes fazem uso. Conforme proposto no Capítulo 2, soluções fortes de uma lei de conservação hiperbólica preservam os valores de seus extremos. Uma prova dessa afirmativa para soluções fracas não segue as linhas da demonstração apresentada naquele capítulo para o caso forte, uma vez que esta se baseia na continuidade desse tipo de solução. No entanto, mesmo soluções generalizadas possuem uma estrutura característica e, porquanto, assumem valores pertencentes à imagem da condição inicial. Se esse conjunto é limitado, tem-se por exemplo que qualquer solução generalizada de uma lei de conservação possui a imagem limitada e contida na imagem de sua condição inicial. Portanto, um máximo global de u é inferior ou igual ao máximo global de u_0 ; um mínimo da solução, por sua vez, é igual ou superior ao mínimo da condição inicial.

A conservação dos extremos nas soluções fortes e sua contraparte sugerida acima para soluções fracas introduzem o denominado *princípio dos extremos locais* na determinação do vetor das inclinações de uma reconstrução polinomial linear

por partes de um esquema.

Princípio dos extremos locais

Seja $\{U_i^n\}$ o conjunto das projeções da variável numérica U sobre a malha definida pela triangulação $\mathcal{T}_h(\Pi)$ e seja \mathcal{I}_i o conjunto das células vizinhas a uma célula interna arbitrária $T_i \in \mathcal{T}_h(\Pi)$, então o par (a_i^n, b_i^n) é tal que a reconstrução \bar{U}^n satisfaz

$$\min_{j \in \mathcal{I}_i} (U_j^n) \leq U_i^n + a_i^n(x_\beta - x_i) + b_i^n(y_\beta - y_i) \leq \max_{j \in \mathcal{I}_i} (U_j^n),$$

para todo β vértice de T_i .

O princípio obviamente se estende às malhas auxiliares, onde se introduz \mathcal{I}_α , de modo semelhante, como o conjunto de células vizinhas a uma célula arbitrária $P_\alpha \in \mathcal{D}(\mathcal{T}_h(\Pi))$, e se substitui (x_β, y_β) , as coordenadas dos vértices da célula T_i , pelas coordenadas (x_j, y_j) do baricentros das células que compartilham o nó α , bem como se acrescentam as coordenadas dos pontos médios das arestas que emanam deste nó como suporte no cálculo. No caso de células de borda do domínio em cujas arestas de contorno se prescreve uma condição de Dirichlet, o ponto médio da aresta, (x_D, y_D) , e o valor da condição, $h_D(x_D, y_D, t_n)$, são incluídos de forma similar.

Note que o princípio do extremos não estabelece a maneira com que se deve obter o vetor das inclinações ou a relação funcional do mesmo com projeções e parâmetros geométricos da malha, somente, limita definição desse vetor dentro do universo de suas possibilidades. Consequentemente, não revoga o elemento de arbitrariedade que persiste na escolha das inclinações de uma reconstrução. O princípio, no entanto, possui uma enunciação geométrica equivalente que é bastante útil à resolução dessa falta de unicidade.

Proposição 4.1. *Interpretando o par (a_i^n, b_i^n) como as coordenadas de um ponto em \mathbb{R}^2 , o conjunto universo de vetores de inclinação de uma célula T_i se identifica então com o plano inteiro. Para cada β vértice de T_i , cada condição exigida pelo princípio dos extremos locais restringe as inclinações que a satisfazem, tomadas isomorficamente por pontos do plano, a um semiplano. A intersecção de todos os semiplanos referentes a uma mesma célula i , por sua vez, define em \mathbb{R}^2 um domínio poligonal convexo, \mathcal{P}_i , de inclinações limitadas.*

Demonstração. O conjunto de todas as inclinações possíveis para uma reconstrução é o conjunto de todos os pares (a_i^n, b_i^n) , portanto o \mathbb{R}^2 . Dessa maneira, olhando para toda inclinação possível como um ponto do plano, cada condição do princípio é equivalente a definição de um semiplano em \mathbb{R}^2 . Perceba que para cada

célula vizinha a i o princípio determina duas condições. Note que a igualdade na condição define uma reta cujo vetor normal é dado pelo par $(x_\beta - x_i, y_\beta - y_i)$. Se a condição é a de mínimo então o semiplano em questão é composto por todos os pontos acima dessa reta, onde o sentido está definido pelo sentido daquele vetor. Se é a de máximo, o semiplano é o abaixo da reta. Isto é, todas as inclinações (pontos do plano) pertencentes a um desses semiplanos satisfazem a condição que os define. Constate que um semiplano é um conjunto convexo: entre quaisquer dois pontos de um semiplano se pode definir um segmento de reta de pontos do semiplano, caso contrário ter-se-ia um semiplano menos um conjunto de pontos, ou seja, um não-semiplano.

Agora, use o fato de que a intersecção de dois conjuntos convexos é sempre um conjunto convexo. Uma prova por contradição dessa afirmativa é bastante simples. Suponha que a intersecção de dois conjuntos convexos seja não convexa. Logo, existem ao menos dois pontos pertencentes a intersecção que não podem ser conectados por um segmento de reta cujos pontos são todos pontos deste conjunto. Entretanto, esses mesmos dois pontos são pontos de dois conjuntos convexos, portanto o único segmento de reta do plano que une esses dois pontos é composto de pontos de ambos os conjuntos, logo é composto de pontos da intersecção.

Assim, como o princípio em questão equivale à intersecção de vários semiplanos, o conjunto final é convexo. O fato de ser um polígono decorre de não entrar na construção outras curvas que não sejam retas. \square

Fazendo uso de uma proposição semelhante a 4.1, Lipnikov *et al.* [26] propõem inclinações limitadas baseadas num problema de minimização de solução única. Todavia, a construção adotada por esses autores, apesar de atender a uma variante do princípio dos extremos locais, falha em limitar satisfatoriamente as inclinações na medida que parte de um princípio de extremos onde a limitação é imposta sobre os baricentros das células vizinhas. O requerimento portanto não exige uma limitação estrita sobre os vértices da célula e por isso, facilmente, se propõe casos onde a reconstrução sobre um dos vértices ultrapassa os limites definidos para célula pelo princípio. Um efeito dessa violação observado comumente em simulações de problemas de cuja solução se pressupõe uma imagem limitada é a projeção da reconstrução excedendo um majorante ou indo aquém do valor de um minorante confiável ou fisicamente exigido.

O princípio do extremos locais enunciado neste capítulo utilizado em conjunto com a metodologia introduzida por aqueles autores corrige tais problemas.

Proposição 4.2. *Considere a função*

$$\mathcal{E}(a_i^n, b_i^n) = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{I}_i} [U_i^n + a_i^n(x_j - x_i) + b_i^n(y_j - y_i) - U_j^n]^2 \quad (4.23)$$

e assuma que a condição

$$\left(\sum_{j \in \mathcal{I}_i} (x_j - x_i)^2 \right) \left(\sum_{j \in \mathcal{I}_i} (y_j - y_i)^2 \right) - \left(\sum_{j \in \mathcal{I}_i} (x_j - x_i)(y_j - y_i) \right)^2 > 0$$

é verdadeira para todo $T_i \in \mathcal{T}_h$. Então existe um único par, denotado por $(\bar{a}_i^n, \bar{b}_i^n)$, que minimiza \mathcal{E} sobre \mathcal{P}_i .

Demonstração. Dadas a forma funcional de \mathcal{E} e a condição exigida pela proposição, tem-se estabelecida a existência de um único ponto crítico da função em todo plano, e, de fato, um mínimo. Se tal ponto é um ponto de \mathcal{P}_i , basta denotá-lo por $(\bar{a}_i^n, \bar{b}_i^n)$. Se por outro lado o mínimo global de \mathcal{E} não é um ponto de \mathcal{P}_i , o ponto do conjunto em que a função apresenta seu valor mínimo pertence à alguma curva de nível da função de valor superior. A existência de algum ponto com essa propriedade decorre da aplicação do teorema dos valores extremos à restrição de \mathcal{E} a \mathcal{P}_i . Perceba que a restrição é contínua e seu domínio, compacto. Para a prova da unicidade desse ponto, primeiro, constate que um ponto interior de \mathcal{P}_i não pode ser um ponto de mínimo da função sem que seja um ponto crítico da mesma, portanto, como o enunciado da proposição impõe a existência de um único ponto crítico da função e se supõe, neste caso, que ele é externo ao conjunto, um ponto de mínimo de \mathcal{E} em \mathcal{P}_i não é um ponto interior. Por consequência é um ponto de fronteira. Segundo, perceba que as curvas de nível da função são elipses e que os valores assumidos por \mathcal{E} nos pontos interiores à região delimitada por uma curva de nível sua qualquer são menores que o valor assumido pela função na curva. Admita então que a curva de nível cujo valor minimiza a função em \mathcal{P}_i intercepte o conjunto em dois pontos. O segmento de reta que une esses dois pontos é secante à elipse, logo interno à região que a tem como fronteira. Pela convexidade de \mathcal{P}_i esse segmento é também composto de pontos do conjunto. Mas assim conclui-se que há pontos de \mathcal{P}_i sobre os quais \mathcal{E} assume valores menores que o valor que minimiza a função no conjunto, uma contradição. Portanto o ponto de mínimo de \mathcal{E} é um único ponto de $\partial\mathcal{P}_i$. \square

A proposição acima é escrita de maneira obviamente similar para reconstruções sobre a malha auxiliar. Ainda, em caso de T_i , ou P_α , ser uma célula de contorno em que a alguma de suas arestas de fronteira é prescrita uma condição de contorno tipo Dirichlet, o ponto médio da aresta em questão, bem como o valor da condição de contorno no ponto e no instante da reconstrução, é incluído qual um dos pontos da vizinhança de i .

A proposição 4.2 define portanto um vetor de inclinações para reconstrução polinomial linear baseado na minimização de uma função. Esse vetor é único e respeita o princípio dos extremos locais. As projeções dessa reconstrução sobre a

malha distinta àquela em que foi definida são parâmetros essenciais do esquema e se identificam com as somas

$$\frac{1}{A_\alpha} \sum_{i \in N_\alpha} \int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^n \, dA \quad \text{e} \quad \frac{1}{A_i} \sum_{\alpha \in N_i} \int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} \, dA$$

apresentadas nas equações (4.13) e (4.14).

Conforme mencionado, as integrais envolvidas são passíveis de cálculo exato. De fato,

$$\int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^n \, dA = (U_i^n - \bar{a}_i^n x_i - \bar{b}_i^n y_i) \frac{A_i}{3} + \bar{a}_i^n \left(\int_{P_\alpha \cap T_i} x \, dA \right) + \bar{b}_i^n \left(\int_{P_\alpha \cap T_i} y \, dA \right).$$

As duas últimas integrais são proporcionais às coordenadas do baricentro da região $P_\alpha \cap T_i$. Respectivamente, são iguais à

$$\left(\frac{5x_\alpha + 7x_i}{12} \right) \frac{A_i}{3} \quad \text{e} \quad \left(\frac{5y_\alpha + 7y_i}{12} \right) \frac{A_i}{3},$$

o que resulta em

$$\int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^n \, dA = \left(U_i^n + \frac{5}{12} \bar{a}_i^n (x_\alpha - x_i) + \frac{5}{12} \bar{b}_i^n (y_\alpha - y_i) \right) \frac{A_i}{3}. \quad (4.24)$$

Similarmente,

$$\int_{P_\alpha \cap T_i} \bar{U}^{n+\frac{1}{2}} \, dA = U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} \frac{A_i}{3} - \left(\frac{7}{12} \bar{a}_\alpha^{n+\frac{1}{2}} (x_\alpha - x_i) + \frac{7}{12} \bar{b}_\alpha^{n+\frac{1}{2}} (y_\alpha - y_i) \right) \frac{A_i}{3}. \quad (4.25)$$

4.4.2 Evolução

Definidas as reconstruções, passa-se ao cálculo das integrais de fluxo, o que, conforme discutido na subsecção 4.2.2, não se pretende neste trabalho fazê-lo de forma exata.

Mesmo assumindo uma reconstrução linear por partes e a aproximação fundamental do método proposto, o cômputo de integrais como

$$\int_{t_n}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \oint_{(\partial P_\alpha \cap T_i)_m} f(U^n) \, dl \, dt,$$

apresenta ainda algumas dificuldades. Recorde que a aproximação consiste em atribuir aos pontos de $(\partial P_\alpha \cap T_i)_m$ em cada instante $t \in [t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$,

$$U^n(x, y, t) = U_i^n + \bar{a}_i^n(x_0 - x_i) + \bar{b}_i^n(y_0 - y_i),$$

tal que (x_0, y_0) satisfaz (*ver aproximação fundamental do método*)

$$\begin{aligned} x &= x_0 + f'(U_i^n + \bar{a}_i^n(x_0 - x_i) + \bar{b}_i^n(y_0 - y_i))(t - t_n), \\ y &= y_0 + g'(U_i^n + \bar{a}_i^n(x_0 - x_i) + \bar{b}_i^n(y_0 - y_i))(t - t_n). \end{aligned}$$

Para se determinar a evolução, *aproximada*, da reconstrução, e a partir dela as integrais de fluxo, é preciso portanto encontrar os pontos $\{(x_0, y_0)\}$ de onde provêm as características da solução. Não obstante, resolver o sistema de equações acima não é uma tarefa trivial, considerando-se f e g arbitrários. Faz-se necessário então, querendo-se manter alguma simplicidade na formulação final, introduzir novas aproximações, desta vez sobre as funções que definem o fluxo, com o fim de solucionar o problema da determinação desses pontos.

Funções de fluxos quadráticas

A esse respeito, percebe-se que se ambas, f e g , forem funções quadráticas, uma vez que \bar{U}^n é uma função linear quando restrita a uma célula, as composições $f'(\bar{U}^n)$ e $g'(\bar{U}^n)$ serão também funções lineares. Isso permite que se determine facilmente as coordenadas de um ponto (x_0, y_0) dada uma tripla (x, y, t) . Desse modo, suponha que

$$\begin{aligned} f(u) &= F_2 + F_1(u - u^*) + F_0(u - u^*)^2 \\ g(u) &= G_2 + G_1(u - u^*) + G_0(u - u^*)^2, \end{aligned} \tag{4.26}$$

onde os parâmetros em letras maiúsculas e u^* representam constantes reais. Obtém-se então do sistema linear decorrente

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{[1 + 2G_0\bar{b}_i^n(t - t_n)]x - 2F_0\bar{b}_i^n(t - t_n)y}{1 + 2F_0\bar{a}_i^n(t - t_n) + 2G_0\bar{b}_i^n(t - t_n)} + \\ &\quad \frac{[2(G_1F_0 - G_0F_1)\bar{b}_i^n - (F_1 + 2F_0k_i^n)](t - t_n)}{1 + 2F_0\bar{a}_i^n(t - t_n) + 2G_0\bar{b}_i^n(t - t_n)} \\ y_0 &= \frac{-2G_0\bar{a}_i^n(t - t_n)x + [1 + 2F_0\bar{a}_i^n(t - t_n)]y}{1 + 2F_0\bar{a}_i^n(t - t_n) + 2G_0\bar{b}_i^n(t - t_n)} - \\ &\quad \frac{[2(G_1F_0 - G_0F_1)\bar{a}_i^n + (G_1 + 2G_0k_i^n)](t - t_n)}{1 + 2F_0\bar{a}_i^n(t - t_n) + 2G_0\bar{b}_i^n(t - t_n)}, \end{aligned} \tag{4.27}$$

onde $k_i^n = U_i^n - u^* - \bar{a}_i^n x_i - \bar{b}_i^n y_i$.

Assumindo que as expressões têm sentido para todo $t \in [t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$ independentemente da célula em questão e, assim, carregando-as para dentro da reconstrução, fornece-se uma expressão aproximada para a evolução do problema. O cálculo de uma integral de fluxo como a apresentada no começo desta secção pode então ser facilmente realizado em cada segmento da fronteira. Contudo, a expressão obtida para essas integrais, resolvendo-as exatamente, é extensa e envolve logaritmos dos parâmetros. Dado que se tem a necessidade de tornar o intervalo de tempo pequeno, nada mais natural do que usar essa condição para aproximar um cálculo, que, apesar de exato, não passa de uma aproximação. Com esse propósito, toma-se $\theta_i^n = 2(F_0 \bar{a}_i^n + G_0 \bar{b}_i^n)$, e denota-se $\bar{\theta}_n = \max |\theta_i^n|$ para introduzir a condição necessária

$$t_{n+\frac{1}{2}} - t_n \ll \frac{1}{\bar{\theta}_n}, \quad \text{se } \bar{\theta}_n \neq 0.$$

Tal critério não somente torna as expressões (4.27) válidas para toda célula como permite sua simplificação e a simplificações das expressões subsequentes. De fato, tem-se

$$\begin{aligned} x_0 = x - [F_1 + 2F_0 (k_i^n + \bar{a}_i^n x + \bar{b}_i^n y)] (t - t_n) + \\ 2(G_1 F_0 - G_0 F_1) \bar{b}_i^n (t - t_n) + \mathcal{O}([t - t_n]^2) \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$\begin{aligned} y_0 = y - [G_1 + 2G_0 (k_i^n + \bar{a}_i^n x + \bar{b}_i^n y)] (t - t_n) - \\ 2(G_1 F_0 - G_0 F_1) \bar{a}_i^n (t - t_n) + \mathcal{O}([t - t_n]^2). \end{aligned}$$

Levando então essas expressões à reconstrução e posteriormente esta às equações (4.26), finalmente, reduz-se o problema à integração das aproximações

$$\begin{aligned} f(U^n) = [F_2 - F_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1)(t - t_n)] + \\ [F_1 - 2F_0(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1)(t - t_n) - 2F_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0)(t - t_n)] \varphi_i^n(x, y) + \\ F_0 [1 - 4(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0)(t - t_n)] \varphi_i^n(x, y)^2 + \mathcal{O}([t - t_n]^2), \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} g(U^n) = [G_2 - G_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1)(t - t_n)] + \\ [G_1 - 2G_0(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1)(t - t_n) - 2G_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0)(t - t_n)] \varphi_i^n(x, y) + \\ G_0 [1 - 4(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0)(t - t_n)] \varphi_i^n(x, y)^2 + \mathcal{O}([t - t_n]^2), \end{aligned}$$

com $\varphi_i^n(x, y) = k_i^n + \bar{a}_i^n x + \bar{b}_i^n y$, $\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0 = \bar{a}_i^n F_0 + \bar{b}_i^n G_0$ e $\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1 = \bar{a}_i^n F_1 + \bar{b}_i^n G_1$.

Os pontos ao longo de um segmento $(\partial P_\alpha \cap T_i)_m$ estão dispostos ao longo da reta de direção definida pelo vetor $(-1)^m (-s_{\alpha i}^m, c_{\alpha i}^m)$ que cruza o baricentro (x_i, y_i) ,

por isso

$$\begin{aligned}x &= x_i - (-1)^m s_{\alpha i}^m \ell, \\y &= y_i + (-1)^m c_{\alpha i}^m \ell,\end{aligned}$$

onde $\ell \in [0, \ell_{\alpha i}^m]$. A parametrização permite escrever

$$\varphi_i^n(x, y) \equiv \varphi_i^n(\ell) = \Delta U_i^n + (\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m) \ell,$$

onde se introduz a notação $\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m = (-1)^m (-\bar{a}_i^n s_{\alpha i}^m + \bar{b}_i^n c_{\alpha i}^m)$, $\Delta U_i^n = U_i^n - u^*$. A inserção dessa expressão nas equações (4.29) e a integração das mesmas sobre $(\partial P_\alpha \cap T_i)_m \times [t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$ leva às definições dos termos de fluxo do método para o caso específico de funções quadráticas

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{\alpha i}^m &= \left[F_2 - F_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1) \frac{\Delta t_n}{2} \right] \ell_{\alpha i}^m + \\&\quad \left(\Delta U_i^n + \frac{\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m}{2} \ell_{\alpha i}^m \right) \left[F_1 - 2F_0(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1) \frac{\Delta t_n}{2} - 2F_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0) \frac{\Delta t_n}{2} \right] \ell_{\alpha i}^m + \\&\quad \left(\Delta U_i^{n2} + \Delta U_i^n (\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m) \ell_{\alpha i}^m + \frac{(\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m)^2}{3} \ell_{\alpha i}^{m2} \right) \times \\&\quad \left[1 - 4(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0) \frac{\Delta t_n}{2} \right] F_0 \ell_{\alpha i}^m + \mathcal{O}(\Delta t_n^2),\end{aligned}\tag{4.30}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\alpha i}^m &= \left[G_2 - G_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1) \frac{\Delta t_n}{2} \right] \ell_{\alpha i}^m + \\&\quad \left(\Delta U_i^n + \frac{\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m}{2} \ell_{\alpha i}^m \right) \left[G_1 - 2G_0(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_1) \frac{\Delta t_n}{2} - 2G_1(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0) \frac{\Delta t_n}{2} \right] \ell_{\alpha i}^m + \\&\quad \left(\Delta U_i^{n2} + \Delta U_i^n (\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m) \ell_{\alpha i}^m + \frac{(\sigma_i^n \cdot \mathbf{t}_{\alpha i}^m)^2}{3} \ell_{\alpha i}^{m2} \right) \times \\&\quad \left[1 - 4(\sigma_i^n \cdot \mathbf{f}_0) \frac{\Delta t_n}{2} \right] G_0 \ell_{\alpha i}^m + \mathcal{O}(\Delta t_n^2).\end{aligned}\tag{4.31}$$

Tomando as expressões definidas acima em conjunto com a equação (4.24) e substituindo-as pelas integrais que lhes correspondem em (4.13), apresenta-se abaixo a primeira fórmula de recursão do método de alta ordem proposto, embora restrito a fluxos quadráticos:

$$\begin{aligned}U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{A_\alpha} \sum_{i \in N_\alpha} \left(\frac{A_i}{3} \left(U_i^n + \frac{5}{12} \bar{a}_i^n (x_\alpha - x_i) + \frac{5}{12} \bar{b}_i^n (y_\alpha - y_i) \right) - \right. \\&\quad \left. \Delta t_n \sum_{m=1}^2 \left(\mathcal{F}_{\alpha i}^m c_{\alpha i}^m + \mathcal{G}_{\alpha i}^m s_{\alpha i}^m \right) \right).\end{aligned}\tag{4.32}$$

O segundo estágio do método é derivado de maneira semelhante. As reconstruções são definidas sobre P_α em vez de T_i e passo a passo considerações equivalentes são tomadas, culminando em expressões bastante similares para $\mathcal{F}_{i\alpha}^m$ e $\mathcal{G}_{i\alpha}^m$, os fluxos aproximados através da fronteira definida pelo segmento $(\partial T_i \cap P_\alpha)_m$, às demonstradas em (4.30) e (4.31); basta que se permuta α e i e se substitua n por $n + \frac{1}{2}$ para se obter as fórmulas que definem tais fluxos. De maneira que a segunda recursão do método é escrita como

$$U_i^{n+1} = \sum_{\alpha \in N_i} \left(\frac{1}{3} \left(U_\alpha^{n+\frac{1}{2}} - \frac{7}{12} \bar{a}_\alpha^{n+\frac{1}{2}} (x_\alpha - x_i) - \frac{7}{12} \bar{\alpha}_i^{n+\frac{1}{2}} (y_\alpha - y_i) \right) - \frac{\Delta t_{n+\frac{1}{2}}}{A_i} \sum_{m=1}^2 \left(\mathcal{F}_{i\alpha}^m c_{i\alpha}^m + \mathcal{G}_{i\alpha}^m s_{i\alpha}^m \right) \right). \quad (4.33)$$

Por fim, as condições de contorno são implementadas segundo às técnicas descritas na subsecção 4.3.2.

Interpolação

A imposição de funções de fluxos quadráticas no apresentado acima é particularmente importante por duas razões. A primeira delas é didática, uma vez que por meio dessas funções simples se apresenta muito bem a problemática da determinação de uma aproximação sensata dos fluxos; aliás, casos clássicos como o fluxo convectivo linear e fluxo de Burgers são também contemplados. A segunda razão é prática. Funções quaisquer podem, sempre e com a precisão que se queira, ser interpoladas dentro de algum intervalo. Uma interpolação permite então que se trabalhe localmente com funções de fluxo quadráticas, validando e fazendo uso de todo o tratamento supracitado.

Suponha que U_i^n não é um extremo de sua vizinhança, define-se então o intervalo

$$I_i^n = \left[U_{min} = \min_{j \in \mathcal{I}_i} (U_j^n), \max_{j \in \mathcal{I}_i} (U_j^n) = U_{max} \right] \quad \text{onde } j \in \mathcal{I}_i.$$

Note que $U_i^n \in I_i^n$. Dadas f e g quaisquer, introduz-se as funções quadráticas \bar{f}_i^n e \bar{g}_i^n definidas sobre I_i^n e obtidas por interpolação parabólica sobre os respectivos suportes

$$\begin{aligned} & \{(U_{min}, f(U_{min})), (U_i^n, f(U_i^n)), (U_{max}, f(U_{max}))\}, \\ & \{(U_{min}, g(U_{min})), (U_i^n, g(U_i^n)), (U_{max}, g(U_{max}))\}. \end{aligned}$$

Especificamente, tem-se

$$\begin{aligned} \bar{f}_i^n(u) &= f(U_i^n) + F_1(u - U_i^n) + F_0(u - U_i^n)^2 \\ \bar{g}_i^n(u) &= g(U_i^n) + G_1(u - U_i^n) + G_0(u - U_i^n)^2, \end{aligned} \quad (4.34)$$

onde F_0 e F_1 estão definidos pela solução do sistema linear

$$\begin{pmatrix} (U_{max} - U_i^n)^2 & (U_{max} - U_i^n) \\ (U_i^n - U_{min})^2 & -(U_i^n - U_{min}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(U_{max}) - f(U_i^n) \\ f(U_{min}) - f(U_i^n) \end{pmatrix}$$

e similarmente estão definidos G_0 e G_1 .

Os parâmetros apresentados em (4.34) quando então inseridos correspondentemente no lugar dos parâmetros em vista nas expansões (4.30) e (4.31) fornecem uma aproximação para os fluxos do caso geral. As fórmulas (4.32) e (4.33) permanecem válidas, uma vez que o tratamento para a segunda recursão do método não é distinto do apresentado acima, caso o erro introduzido pela interpolação ao cômputo dos fluxos não seja de ordem maior do que o erro cometido na derivação do método para o caso de fluxo quadrático.

4.5 Generalização do esquema proposto para sua aplicação à equação de transporte

A fim de tornar o esquema aqui proposto aplicável a problemas que envolvam a equação de transporte, (1.18), deve-se considerar no cômputo dos fluxos numéricos a heterogeneidade dos fluxos locais introduzida pelo campo de velocidades $\mathbf{v}(x, y, t)$. Seguindo *pari passu* a construção adotada na subsecção 4.4.2, assume-se a priori que a função reguladora do transporte, $f(u)$, é quadrática. O carácter vetorial do fluxo local deste modelo advém inteiramente do campo de velocidades.

Embora o solucionamento do problema equivalente ao que fornece a equação (4.27) para o caso uniforme seja bastante mais complicado para o caso geral da equação de transporte, uma aproximação simples pode ser introduzida de maneira que toda a formulação apresentada até este ponto a partir da equação (4.27), e incluindo-a, seja satisfatoriamente utilizável para a construção de um esquema que proponha soluções numéricas a problemas de transporte.

Perceba que a estrutura característica de problema de transporte é definida pelo sistema

$$\begin{aligned} x' &= f'(u)v_1(x, y, t), \\ y' &= f'(u)v_2(x, y, t). \end{aligned} \tag{4.35}$$

Independentemente do fato do sistema acima ser facilmente solucionável ou não, tudo o que há interesse de se determinar é como o par de pontos (x_0, y_0) e (x, y) são conectados pela estrutura característica do problema dentro do intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1}]$. Como tal intervalo é suposto pequeno, o próprio sistema (4.35) fornece uma maneira de se estabelecer aproximadamente a relação entre esses dois pontos.

De fato, tem-se

$$\begin{aligned} x_0 &= x - f'(U_i^n + \bar{a}_i^n(x_0 - x_i) + \bar{b}_i^n(y_0 - y_i))v_1(x, y, t)(t - t_n) + \mathcal{O}(\Delta t_n^2), \\ y_0 &= y - f'(U_i^n + \bar{a}_i^n(x_0 - x_i) + \bar{b}_i^n(y_0 - y_i))v_2(x, y, t)(t - t_n) + \mathcal{O}(\Delta t_n^2). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Desse ponto em diante as fórmulas (4.27), (4.28), (4.29) são todas válidas desde que se substitua

$$\begin{aligned} F_a &\rightarrow v_1(x, y, t)f_a, \\ G_a &\rightarrow v_2(x, y, t)f_a, \end{aligned}$$

com f_a , $a = \{0, 1, 2\}$, simbolizando os coeficientes do polinômio que define a função reguladora do transporte, $f(u)$ (*ver equação (4.26)*). A integração das equações (4.29) resulta em fórmulas idênticas a (4.30) e (4.31) com o campo de velocidades integrado sobre os segmentos que compõem os conjuntos $\partial P_\alpha \cap T_i$ ou $\partial T_i \cap P_\alpha$. O procedimento introduz o problema da quadratura desse campo sobre essas regiões. O modo usado neste trabalho utiliza *a regra do trapézio* para a aproximação deste cálculo.

Dessa maneira nas fórmulas (4.30) e (4.31), os símbolos F_a e G_a devem ser substituídos por

$$\begin{aligned} F_a &\rightarrow \left(\frac{v_1(x_i^m, y_i^m, t_n) + v_1(x_i, y_i, t_n) + v_1(x_i^m, y_i^m, t_{n+\frac{1}{2}}) + v_1(x_i, y_i, t_{n+\frac{1}{2}})}{4} \right) f_a, \\ G_a &\rightarrow \left(\frac{v_1(x_i^m, y_i^m, t_n) + v_1(x_i, y_i, t_n) + v_1(x_i^m, y_i^m, t_{n+\frac{1}{2}}) + v_1(x_i, y_i, t_{n+\frac{1}{2}})}{4} \right) f_a, \end{aligned}$$

onde (x_i^m, y_i^m) , com $m = \{1, 2\}$, simboliza as coordenadas dos pontos médios das arestas de T_i que concorrem ao nó α .

Fórmulas equivalentes são escritas para a segunda evolução, substituindo t_n por $t_{n+\frac{1}{2}}$, $t_{n+\frac{1}{2}}$ por t_{n+1} e i por α nas expressões acima.

4.6 O algoritmo IMPES

Na modelagem de escoamentos bifásicos em meios porosos, o campo de velocidade total, definido pela equação (1.24), está relacionado com o gradiente de pressão do meio. Reforçando a condição de que \mathbf{v} é solenoidal, tem-se a equação

$$\nabla \cdot \left(\left(\frac{k_1(S)}{\mu_1} + \frac{k_2(1-S)}{\mu_2} \right) \frac{\mathbb{K}(\phi)}{\phi} \nabla P \right) = 0.$$

Dado que não existe dependência temporal explícita na equação acima, qualquer problema proposto em seus termos e que subentenda um campo de saturação

para meio, ainda que instantâneo, define um problema elíptico para a variável P . Tais problemas, sendo de outra natureza, requerem tratamentos analítico e numérico distintos dos apresentados ao longo deste texto cujo foco incide sobre problemas hiperbólicos. Dado o acoplamento das variáveis S e P , na simulação de escoamentos bifásicos em meios porosos, uma estratégia tem de ser adotada para que se trate os problemas elíptico e hiperbólico separadamente. Do ponto de vista computacional, a ausência do elemento temporal sugere a formulação de esquemas implícitos para a sua solução numérica, isto é, esquemas em que não se estabelece um mecanismo de iteração baseado num conjunto conhecido ou proposto de valores. Não há entretanto nenhum impedimento à proposição de métodos explícitos para o tratamento numérico desses problemas. Métodos de tipo falso-transiente ou métodos de relaxação, ambos explícitos, são úteis e comumente utilizados, [20].

Problemas elípticos dispensam condições iniciais e, pois, são inteiramente fixados pelas condições de contorno prescritas. Um esquema implícito, proposto para tais problemas, em geral, tem a forma de um sistema linear

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

onde todos os graus de liberdade numéricos compõem o vetor \mathbf{x} , as componentes de \mathbf{b} são expressões das condições de contorno e termos de fonte, quando eles existem, e a matriz A constitui o análogo numérico dos operadores diferenciais, ou integrais, que tomam parte no problema exato. A solução numérica é portanto determinada por

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b},$$

desde que a matriz seja não singular, um critério necessário em problemas de solução única. Para o problema em questão o acoplamento entre as variáveis de interesse resulta numa dependência de A , e possivelmente numa dependência também de \mathbf{b} , com $\{S_i^n\}$, ou seja, com as projeções da variável numérica que corresponde à saturação, o análogo computacional à distribuição de saturação no meio poroso.

As pressões $\{P_i^n\}$ obtidas da inversão de tal sistema definem portanto o campo de pressão numérico que corresponde à distribuição $\{S_i^n\}$ e conjuntamente à distribuição de permeabilidades e à de porosidades fornecidas. Esses valores de P podem ser então pós-processados de maneira que se obtenha um correspondente numérico do campo de velocidades \mathbf{v} , ou, como é a situação de muitos esquemas, a vazão média através das arestas da malha (o produto $\bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} \ell$) é fornecida como um resultado imediato da simulação. Naturalmente, o problema hiperbólico associado a equação (1.25) pode ser agora resolvido entre dois níveis de iteração, n e $n + 1$, interpolando-se o campo de velocidades ou, dependendo do método, fazendo uso direto das vazões pelas arestas. Em posse da distribuição $\{S_i^{n+1}\}$, uma nova lista de projeções $\{P_i^{n+1}\}$ pode ser novamente gerada pelo esquema implícito, de

modo que se tem estabelecido o algoritmo para o tratamento de problemas em escoamentos bifásicos em meios porosos, conhecido na literatura pelo acrônimo de língua inglesa IMPES (*implicit pressure and explicit saturation*).

Aplicações e testes com resultados

Neste capítulo são apresentadas algumas aplicações do método proposto, bem como testes de convergência sobre os esquemas de baixa e alta resolução. A principal intenção desses testes é a de estimar a ordem de convergência dos métodos e a partir disto avaliar o ganho de se introduzir um esquema de **alta resolução** para a solução de um problema. Testes de convergência presumem a adoção de uma norma com que se compute o erro numérico global (*ver Capítulo 3*). Para as análises carregadas aqui toma-se por padrão a norma L_1 , ou simplesmente a norma 1, definida pela expressão

$$|U|_1 = \sum_{i=1}^I |U_i| A_i,$$

com U_i denotando a projeção em cada célula e A_i a área de cada triângulo.

Sob tal escolha de norma tem-se por definição do erro global a expressão

$$\mathcal{E}_N = \sum_{i=1}^I |U_i - \bar{U}_i| A_i, \tag{5.1}$$

onde N representa o número de iterações e \bar{U}_i a projeção da solução exata do problema em questão. Também, naqueles problemas cujas soluções são fortes, faz-se uso da norma máxima, E_∞ . Tal norma é simplesmente definida como o valor absoluto do maior componente da lista, o que implica em E_∞ expressar a maior diferença em valor absoluto entre as projeções da solução numérica e da solução exata.

5.1 Equação da convecção linear

Considere a aplicação do esquema proposto sobre o problema

$$u_t + \frac{1}{\sqrt{2}}u_x + \frac{1}{\sqrt{2}}u_y = 0,$$
$$u(x, y, 0) = e^{-(x^2+y^2)}.$$

Abaixo, apresenta-se um comparativo entre os esquemas de baixa resolução e de alta resolução quando definidos sobre uma malha triangular estruturada de crivo $\delta = 0.005$, $I = 20000$. O domínio computacional é um quadrado de lado 10 centrado na origem, em que não se prescreve condições de contorno na fronteira.

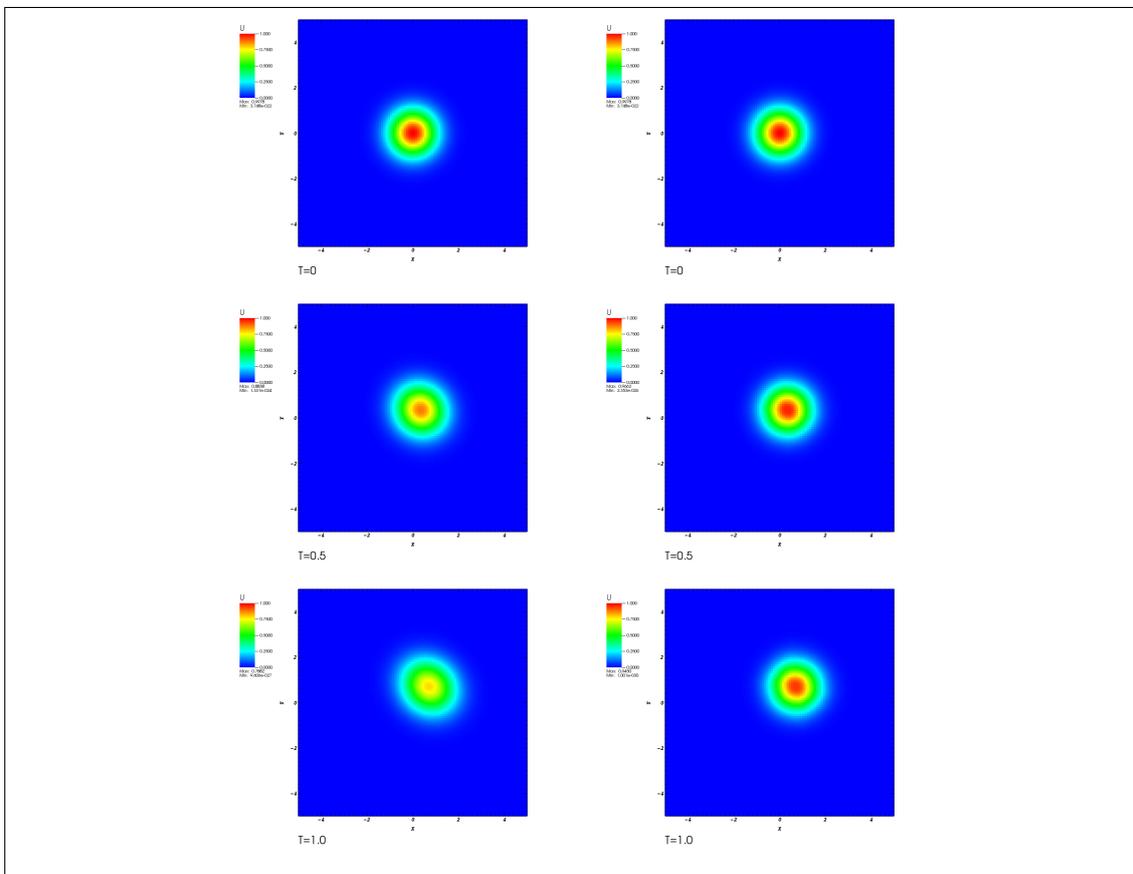


Figura 5.1: Comparativo entre esquemas de baixa resolução (coluna esquerda) e de alta resolução (coluna direita). Número de iterações duplas, $N = 34$, $\Delta t = 0.02 + 0.01$.

É notável a diferença entre as soluções providas pelos esquemas. Primeiramente, o esquema de alta resolução exibe uma diminuição satisfatória da difusão

numérica quando comparado com o esquema de baixa resolução. Para uma melhor visualização, considere o corte ao longo da diagonal $x = y$, apresentado na figura a seguir.

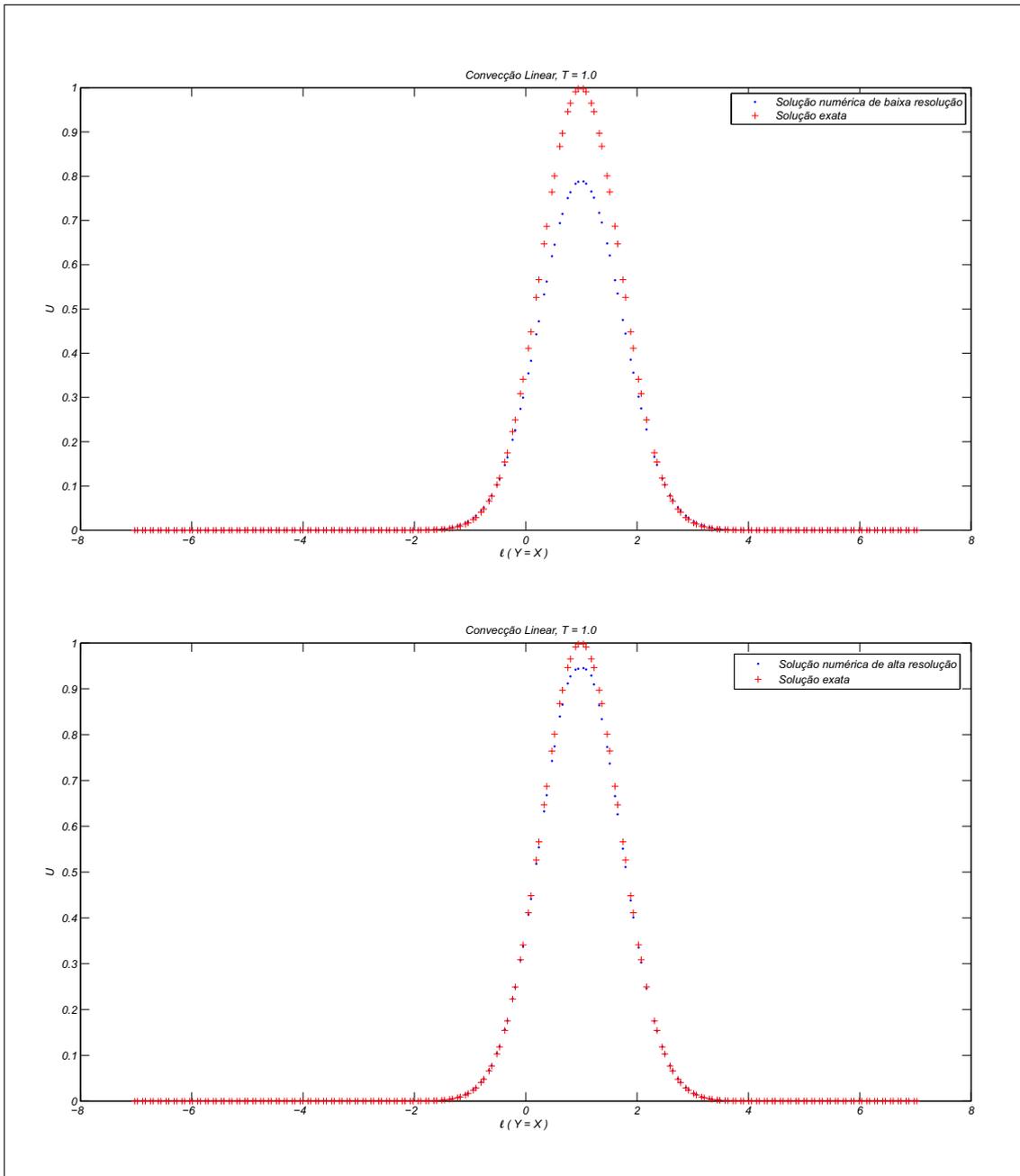


Figura 5.2: Corte na diagonal do domínio exibindo as projeções das células calculadas para ambos esquemas e para solução exata.

A segunda propriedade do esquema de alta resolução é a de, virtualmente, eliminar a anisotropia numérica apresentada pela solução computada através do esquema de baixa resolução.

A precisão de ambos os esquemas em torno do extremo da solução é baixa; um ponto, entretanto, já esperado tendo em vista a reconstrução do esquema de baixa ordem e a maneira com que é feita a limitação no esquema de alta resolução.

5.1.1 Teste de convergência

A aplicação sucessiva dos esquemas em malhas de crivos gradativamente menores permite estimar a ordem de convergência do método proposto. Os parâmetros pertinentes a essa estimativa das simulações realizadas encontram-se sumarizados nas tabelas abaixo.

δ	Δt	E_1	E_∞
0.5000	0.3000	3.0933	0.6986
0.0488	0.1000	1.3612	0.4280
0.0050	0.0300	0.5891	0.2103

Tabela 5.1: Parâmetros de simulação tendo por uso o esquema de baixa resolução.

Os erros E_1 e E_∞ são referentes ao tempo final da simulação $T = 1.0$. Cada Δt é com efeito composto de duas parcelas; a primeira delas é a usada naquelas iterações onde a discretização do domínio é feita pela malha dual e, para o caso estruturado apresentado aqui, compõe exatamente dois terços de Δt .

Os valores introduzidos na tabela 5.1 exibem os seguintes ajustes:

$$\begin{aligned}
 \Delta t &= 0.4334 \delta^{0.4999}, \\
 E_1 &= 3.9908 \delta^{0.3601}, \\
 E_\infty &= 0.8697 \delta^{0.2605}.
 \end{aligned}
 \tag{5.2}$$

A relação entre Δt e δ não é surpreendente. A ordem de convergência segundo a norma L_1 é um tanto maior do que a ordem obtida pela norma máxima. Isto se deve ao fato de que os erros definidos por essa norma são profundamente afetados pela baixa precisão do esquema no entorno de extremos. Para a norma 1, tal efeito é menos marcante, uma vez que o erro computado provém de contribuições de todas as células. Para mais detalhes a esse respeito, considere [25, Sec. 8.5].

Contudo, a observação mais interessante a ser feita é a de que o método de baixa resolução não é de *primeira ordem* no sentido estrito do termo. Perceba que tal nomenclatura advém do desenvolvimento de métodos para problemas unidimensionais, logo, pode-se esperar alguma inadequação dessa importação de termos e

conceitos. De fato, ainda que se introduza algum parâmetro h , comprimento crivo-equivalente, a fim de que se traduza os expoentes de ordem obtidos para números mais comuns à análise de problemas unidimensionais, o esquema de baixa resolução ainda será de ordem inferior a um ($2 \times 0.3601 = 0.7202$, segundo a norma L_1 , por exemplo). A priori, pode-se conjecturar que semelhante incompatibilidade pode ser resolvida através da adoção de norma mais própria, porém, dada a equivalência entre normas, o resultado variará pouco e entre os limites definidos pelas ordens já demonstradas aqui, caso tal medida venha ser tomada.

Dessa forma, a melhor justificativa para os resultados provém do fato de que o esquema proposto é central. O domínio de dependência computacional que o método define para cada célula, sendo uma vizinhança de células a sua volta, é envolve mais região do que é realmente necessário para o cômputo dos fluxos. Esse atributo introduz por sua vez difusão numérica excessiva ao esquema e consequentemente afeta sua convergência.

Espera-se que essas e outras falhas do esquema de baixa ordem sejam parcialmente corrigidas com sua substituição pelo esquema de alta resolução. Abaixo, apresenta-se os dados

δ	Δt	E_1	E_∞
0.5000	0.3000	2.2572	0.5955
0.0488	0.1000	0.3683	0.2039
0.0050	0.0300	0.0843	0.0539

Tabela 5.2: Parâmetros de simulação tendo por uso o esquema de alta resolução.

De onde se calculam os ajustes

$$\begin{aligned}
 \Delta t &= 0.4334 \delta^{0.4999}, \\
 E_1 &= 3.5219 \delta^{0.7141}, \\
 E_\infty &= 0.8957 \delta^{0.5214}.
 \end{aligned}
 \tag{5.3}$$

Da razão entre os respectivos expoentes de ordem, tem-se o ganho computacional do esquema de alta resolução em relação ao de baixa naquilo que concerne a ordem de convergência desses métodos. Pode-se, inclusive, dar um novo sentido ao termo *de segunda ordem*, na medida que os expoentes de ordem estimados para o esquema de alta resolução são com boa aproximação o dobro daqueles estimados para o de baixa.

5.2 O problema de Buckley-Leverett

O problema de Buckley-Leverett, apresentado na última parte da seção 2.3.1, tem importância fundamental na teoria de transportes bifásicos em meios porosos. Do ponto de vista da análise computacional de métodos numéricos, o problema é rico porque a sua solução, equação (2.16), simultaneamente, exibe dois elementos próprios de soluções generalizadas das equações hiperbólicas lineares: uma onda de rarefação e uma onda de choque. A fim de que se possa comparar as soluções numéricas obtidas através do método proposto com a solução exata do problema sem introduzir tantas dificuldades, assume-se a escolha de parâmetros que resultam na solução (2.17).

O problema exato então é descrito conforme

$$\begin{aligned}u_t + f'(u)u_x &= 0, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y),\end{aligned}$$

$$\text{com } f'(u) = \frac{2u(1-u)}{[u^2+(1-u)^2]^2} \text{ e } u_0(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } x > 0 \end{cases}.$$

5.2.1 Malha estruturada sobre domínio estendido

O problema numérico, por sua vez, trata da lei de conservação do qual a EDP acima deriva sobre um domínio computacional Π definido pelo retângulo de vértices $\{(-1, 0), (2, 0), (2, 1), (-1, 1)\}$ no plano. Diferentemente do problema de Cauchy de onde a solução exata deriva, o problema numérico-equivalente deve ser munido também de condições de contorno. Ao segmento de reta da fronteira contido na reta $x = -1$, prescreve-se a condição $u(x, y, t) = 1$. No segmento oposto, $x = 2$, por se tratar de um problema escalar hiperbólico, não se impõe condição alguma. Enfim, por se tratar de um problema de fato unidimensional, a ausência de fluxos paralelos ao eixo das ordenadas implica na prescrição de uma condição de fluxo prescrito nula, $h_f = 0$, nos segmentos da fronteira restantes.

É notório o efeito da malha em ambas soluções (*Ver* 5.3 e 5.4). A estruturação causa uma espécie de deriva na direção y que resulta do modo com que os domínios de dependência computacional de cada célula estão definidos. Perceba que as células que compõem o triângulo inferior de cada quadrado são atingidas pela onda de choque antes das células triângulo-superior. O DDC daquelas células possui um elemento a montante e dois a jusante, todos triângulos superiores, sendo que um desses últimos encontra-se numa linha de células inferior. O método então força com que cada célula contribua com uma célula da linha inferior a sua, explicando assim a deriva. O efeito é menos expressivo na linha superior do domínio justamente porque não existem células linha acima. O método de alta resolução

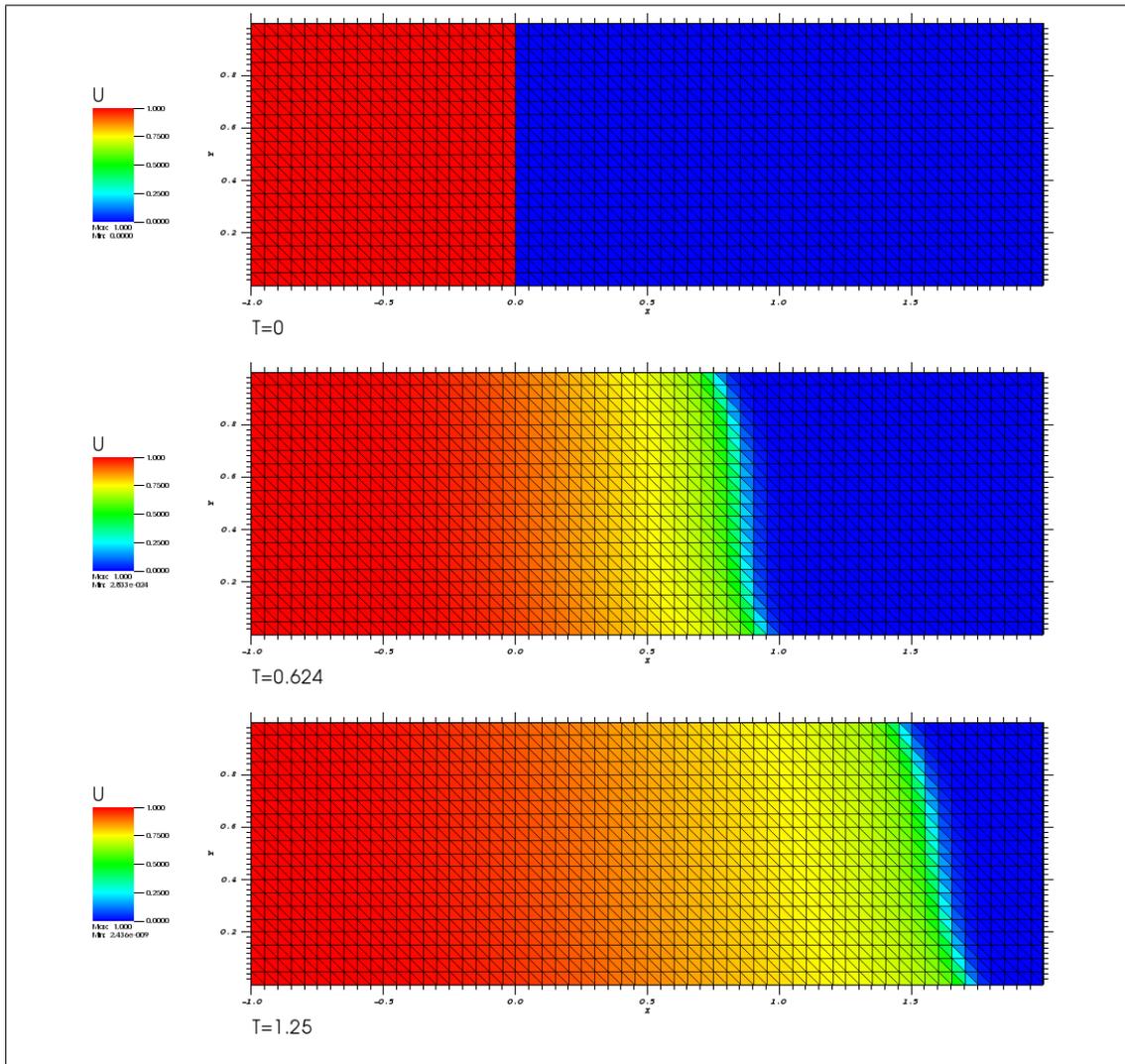


Figura 5.3: Solução numérica para o problema de Buckley-Leverett segundo o esquema de baixa resolução proposto. Malha triangular estruturada. $\delta = 0.00125$, $I = 2400$, $N = 104$, $\Delta t = 0.08 + 0.04$.

atenua o fenômeno, entretanto, é incapaz de extingui-lo, uma vez que opera de maneira semelhante sobre as células da malha. Persistindo-se no uso de malhas estruturadas, o problema pode ser corrigido caso alterado o tipo das condições de contorno nas fronteiras paralelas ao eixo das abcissas. Uma condição de contorno periódica em vez das condições de fluxo nulo prescritas são também compatíveis com o problema exato e resolvem bem a questão da deriva numérica.

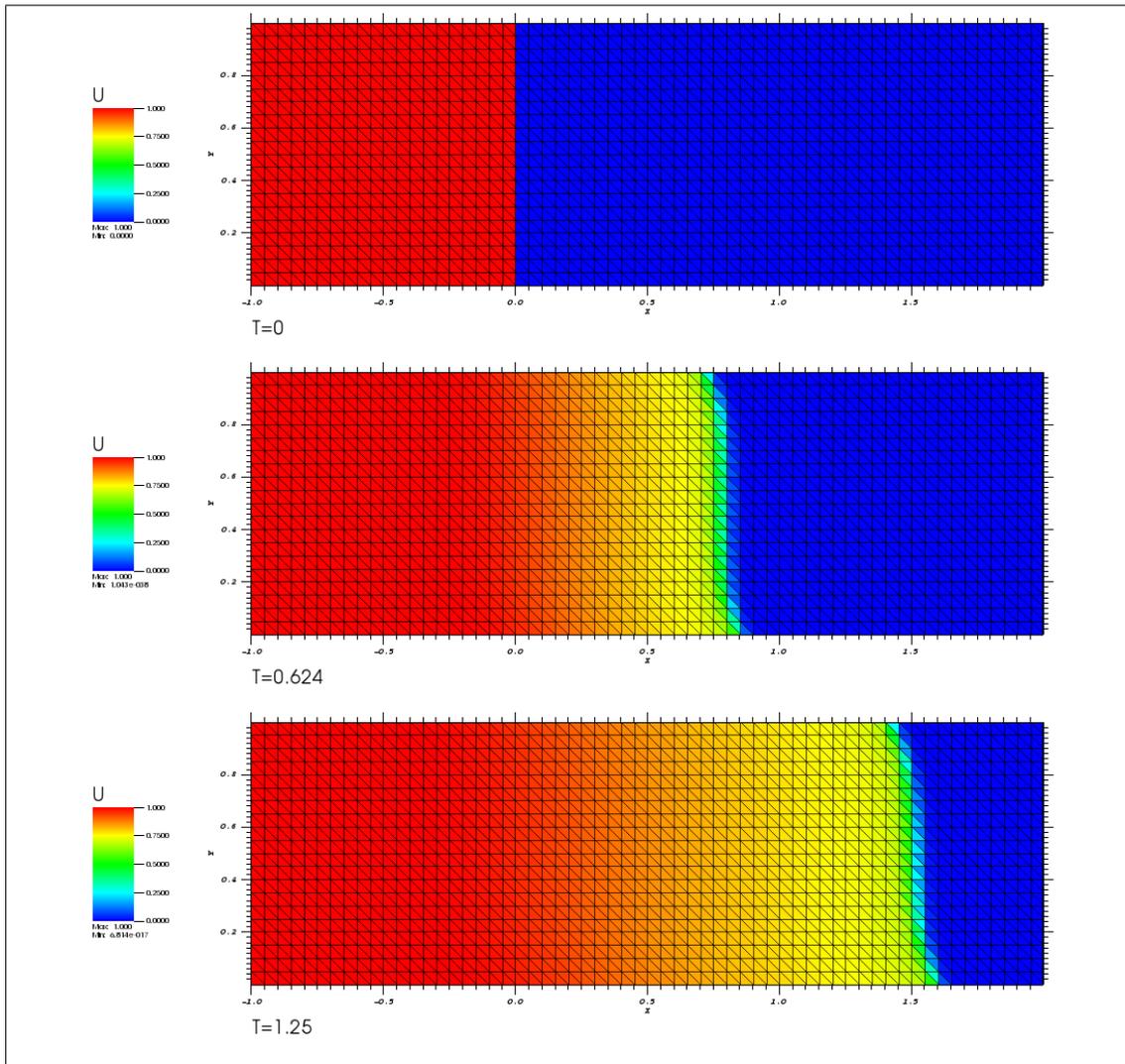


Figura 5.4: Solução numérica para o problema de Buckley-Leverett segundo o esquema de alta resolução proposto. Malha triangular estruturada. $\delta = 0.00125$, $I = 2400$, $N = 104$, $\Delta t = 0.08 + 0.04$.

Teste de convergência

Tomando uma faixa horizontal no centro do domínio, figura 5.5, pode-se comparar efetivamente os resultados dos esquemas com a solução exata do problema. Note como o esquema de alta resolução não somente resolve melhor o choque e a rarefação, mas também a cúspide da solução exata em $x = 0$. Esse trecho introduz uma zona de baixa precisão, semelhante a que resulta de um choque, na medida que a derivada da solução em relação a x ao longo dessa linha não é contínua.

Dado que a região definida pela onda de rarefação apresenta limites problemáticos

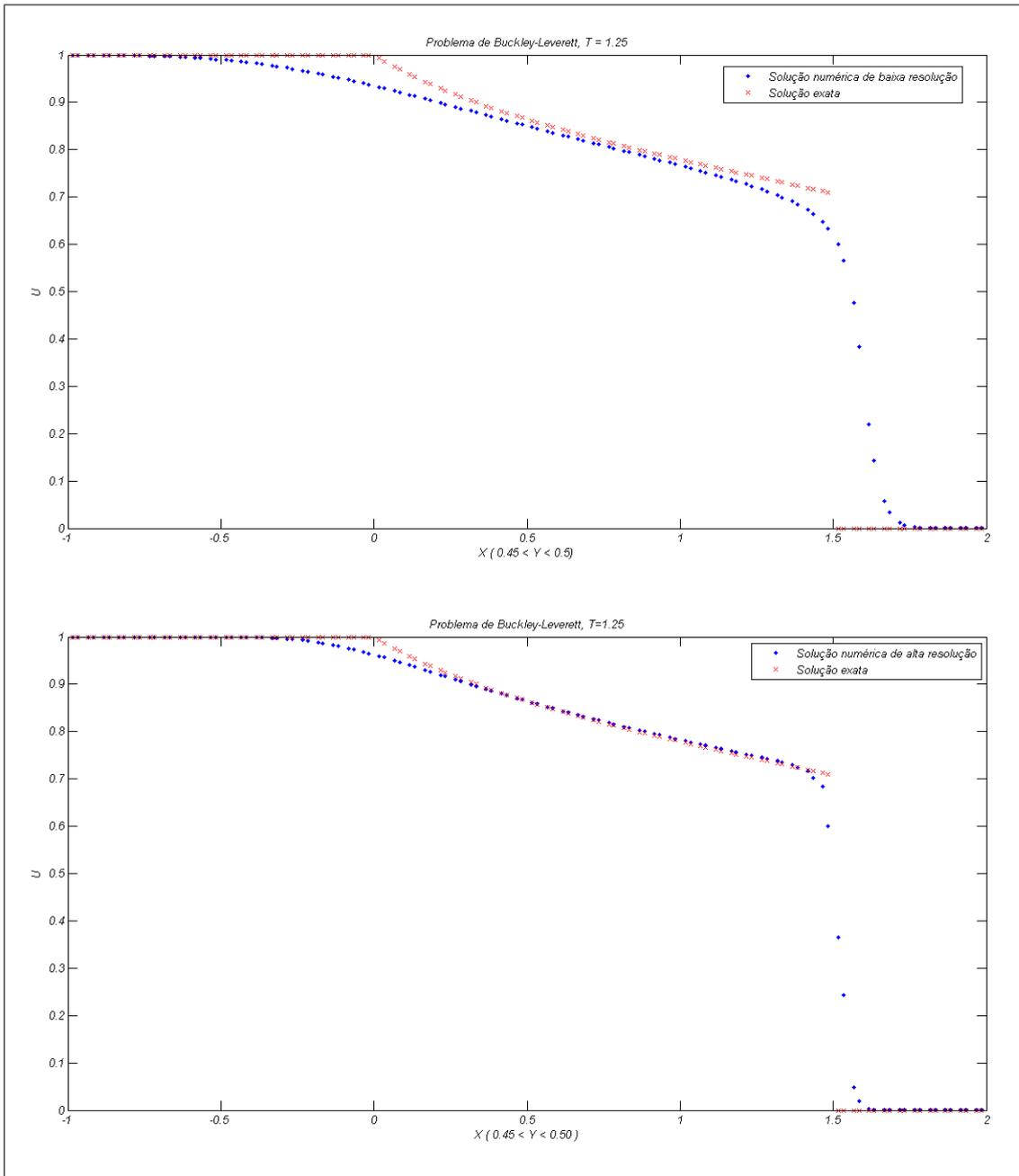


Figura 5.5: Comparativo entre as duas soluções numéricas obtidas para o problema de Buckley-Leverett com a sua solução exata.

do ponto de vista numérico, não é de se espantar que os esquemas apresentem uma baixíssima ordem de convergência.

Os resultados estão resumidos na tabela a seguir:

δ	Δt	E_1^{baixa}	E_1^{alta}
0.0200	0.0500	0.0820	0.0491
0.0050	0.0270	0.0552	0.0301
0.0013	0.0120	0.0404	0.0172

Tabela 5.3: Parâmetros de simulação. Os erros são calculados sobre a faixa definida pelos limites exatos da onda de rarefação, isto é, $[0, 1.5] \times [0, 1]$, em $T = 1.25$.

Implicando nos ajustes:

$$\begin{aligned}
\Delta t &= 0.3869 \delta^{0.5147}, \\
E_1^{baixa} &= 0.2196 \delta^{0.2553}, \\
E_1^{alta} &= 0.2183 \delta^{0.3783},
\end{aligned} \tag{5.4}$$

que sugerem enfim um ganho de ordem de convergência de 1.482 do esquema de alta resolução perante o esquema de baixa resolução.

5.2.2 Malha não-estruturada sobre domínio restringido

Duas modificações podem ser feitas sobre a simulação acima com o intuito de mitigar alguns atributos indesejados da solução numérica. A primeira delas diz respeito à malha utilizada no cálculo. Um particionamento do domínio que, tendo em vista o mecanismo de cômputo das soluções numéricas, não introduza uma deriva numérica sistemática deve sanar o problema apresentado pelas soluções da secção anterior, sem que tenha a necessidade de se alterar a natureza das condições de contorno. Porquanto, a adoção de uma malha não-estruturada parece ser uma medida mais sensata quando do tratamento de problemas via esquemas centrais. A segunda modificação surge da constatação que o trecho da solução anterior a onda de rarefação é de pouco interesse, uma vez que se constata facilmente que a solução por essa região é constante. Ainda, restringindo o domínio à zona de rarefação e a pós-choque, poderia se assumir a exclusão do problema o problema de resolução da cúspide.

As figuras 5.6 e 5.7 ilustram como a deriva sistemática exibida em 5.3 e 5.4 é eliminada nas simulações sobre malhas não-estruturadas. A restrição do domínio, entretanto, não corrige o problema na cúspide da onda de rarefação. A solução obtida ainda subestima as projeções próximo a $x = 0$. A simulação apresentada aqui na figura 5.8 foi feita trocando a implementação da condição de contorno de Dirichlet nas iterações definidas sobre a malha dual. Em vez de se considerar o fluxo associado aos valores prescritos (*ver* Subsec. 4.3.2), toma-se esses valores como as projeções de cada um dos nós do contorno respectivo. O resultado é um melhor ajuste da onda de rarefação na vizinhança da cúspide, contudo, observa-se

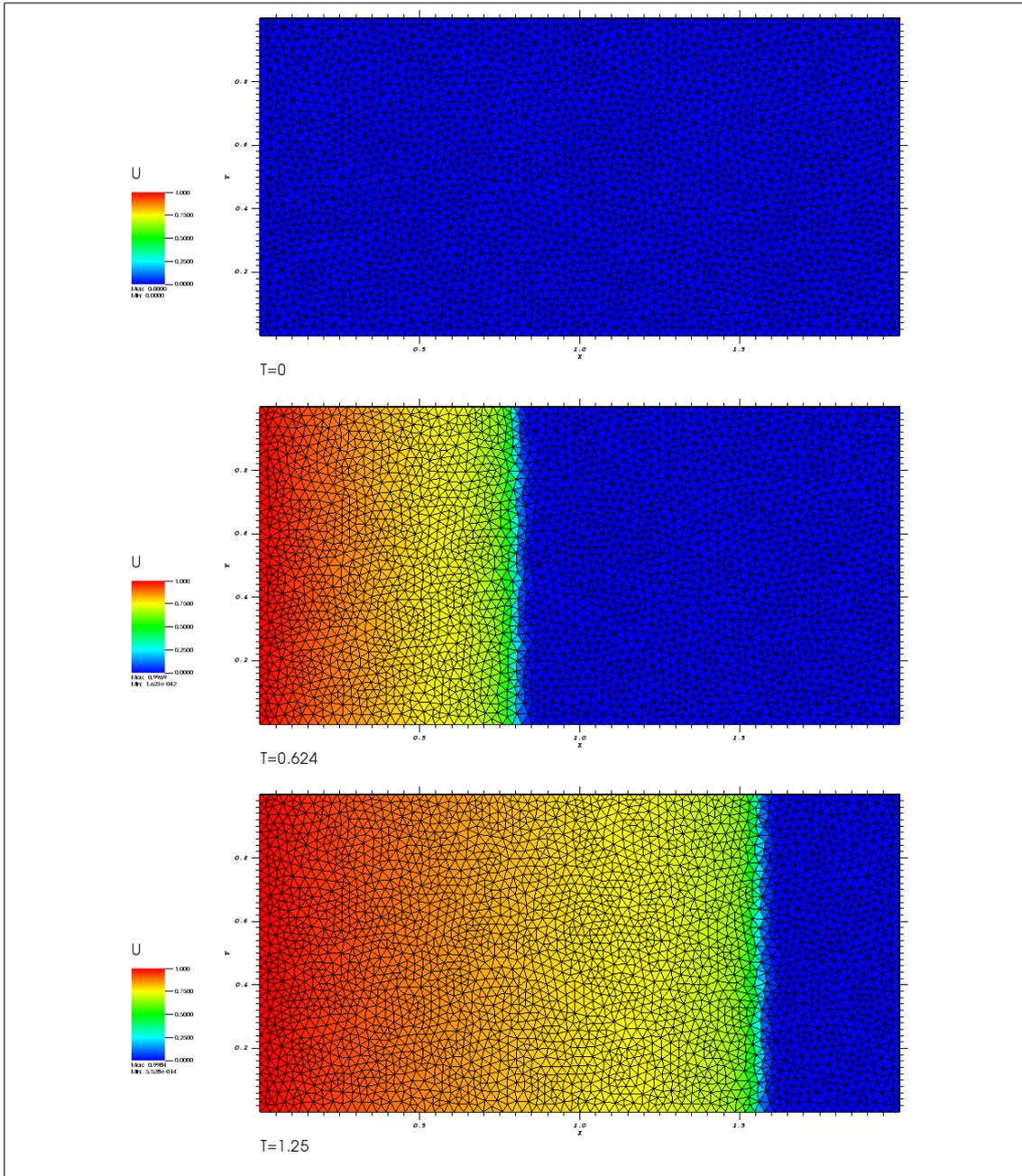


Figura 5.6: Solução numérica para o problema de Buckley-Leverett segundo o esquema de baixa resolução proposto. Malha triangular não-estruturada. $\delta = 0.000663$, $I = 5720$, $N = 167$, $\Delta t = 0.005 + 0.0025$.

uma superestimação consistente dos valores numéricos em relação aos da solução exata projetada. Conjectura-se que essa diferença advém de um fluxo difusivo

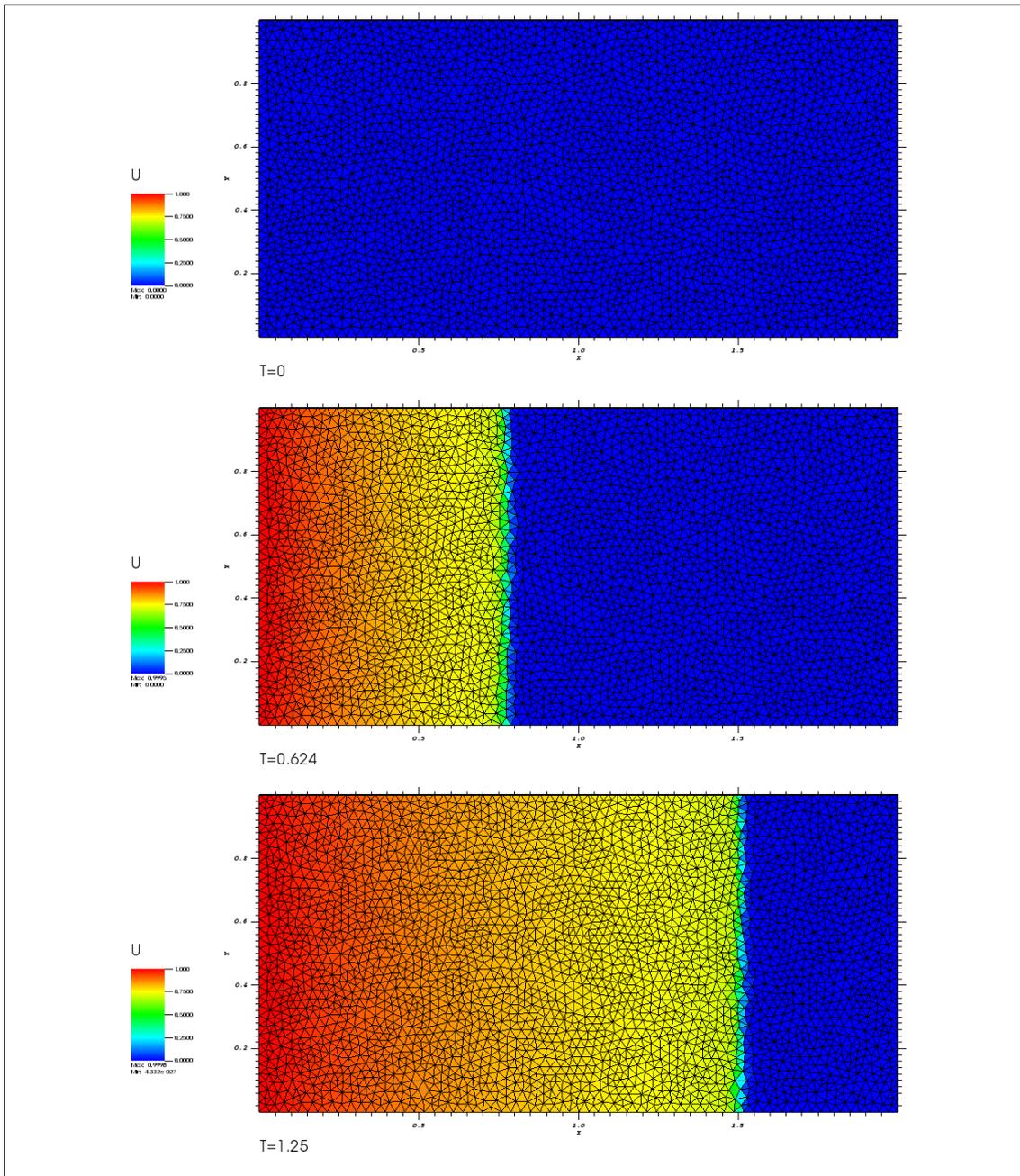


Figura 5.7: Solução numérica para o problema de Buckley-Leverett segundo o esquema de alta resolução proposto. Malha triangular não-estruturada. $\delta = 0.000663$, $I = 5720$, $N = 167$, $\Delta t = 0.005 + 0.0025$.

excessivo na vizinhança da linha $x = 0$, uma vez que a cada iteração completa o valor sobre as células da malha dual presentes nesta vizinhança é restaurado.

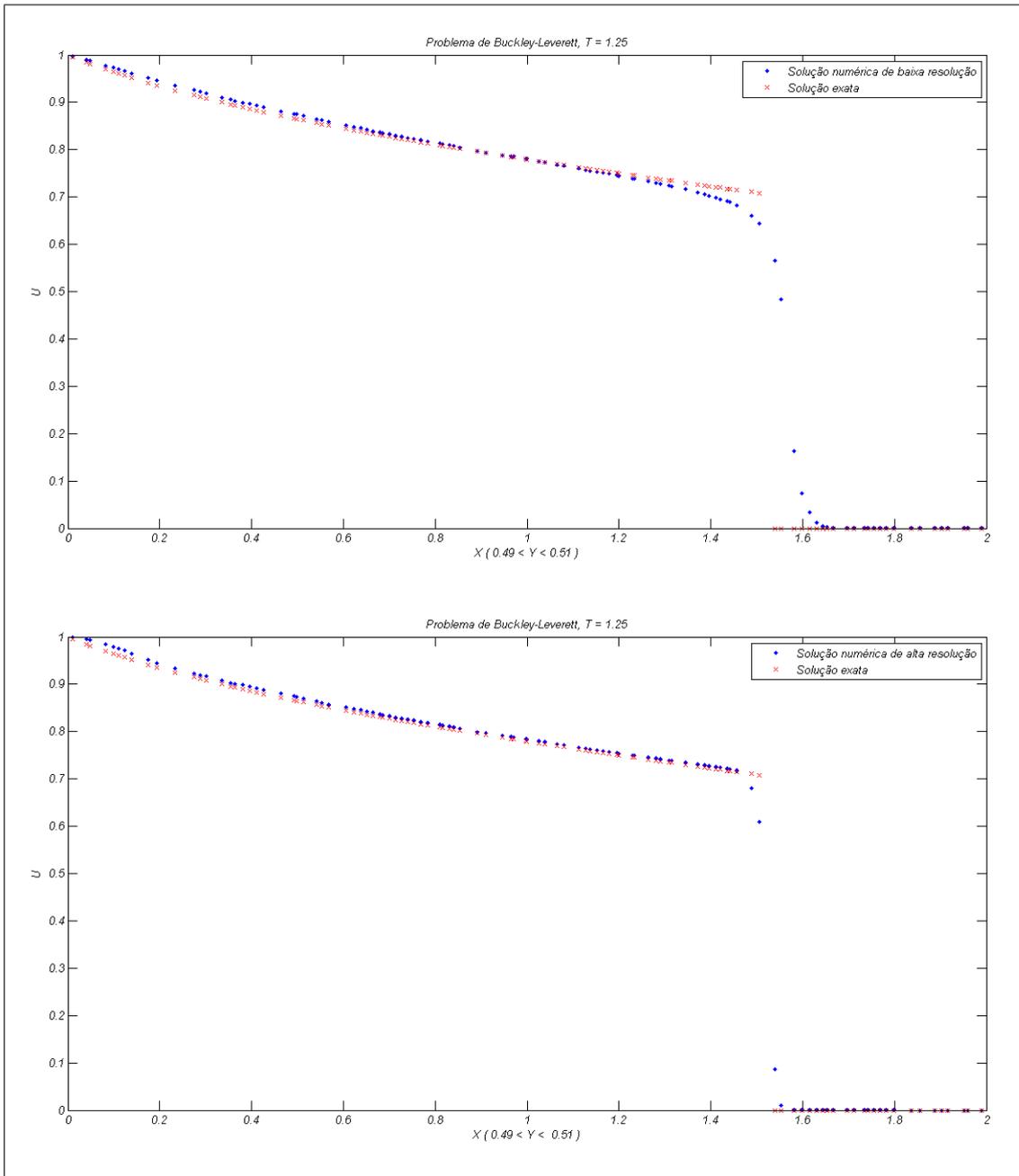


Figura 5.8: Comparativo entre as duas soluções numéricas obtidas para o problema de Buckley-Leverett com a sua solução exata.

Teste de convergência

Dispõem-se os seguintes dados para um teste de convergência usando as modificações introduzidas.

δ	Δt	E_1^{baixa}	E_1^{alta}
0.0104	0.0300	0.0209	0.0314
0.00330	0.0150	0.0191	0.0158
0.000663	0.00750	0.0121	0.00810

Tabela 5.4: Parâmetros de simulação. Os erros são calculados sobre a faixa definida pelos limites exatos da onda de rarefação, isto é, $[0, 1.5] \times [0, 1]$, em $T = 1.25$.

Perceba como o erro global para o esquema de baixa resolução é menor do que o do esquema de alta resolução na simulação que usa o crivo mais grosso. Tal comportamento é sistematicamente observado em simulações com crivos grossos; isto se deve ao fato de que próximo a $x = 0$ há uma superestimação dos valores em ambos os esquemas, sendo inclusive um pouco mais nítida no esquema de alta resolução dada a menor difusão numérica, entretanto, por ser mais difusivo, a solução de baixa ordem cruza a linha da solução exata ainda na região pré-choque, enquanto a solução de alta ordem permanece superestimando-a. Esse salto das soluções contudo decai com a diminuição do crivo da malha utilizada, a partir de um certo valor, tem-se portanto o comportamento esperado dos erros de ambos os métodos.

Dos dados da tabela 5.4, obtém-se os seguintes ajustes

$$\begin{aligned}
 \Delta t &= 0.2885 \delta^{0.4991}, \\
 E_1^{baixa} &= 0.0625 \delta^{0.2041}, \\
 E_1^{alta} &= 0.2449 \delta^{0.4875}.
 \end{aligned}
 \tag{5.5}$$

Percebe-se um grande ganho em ordem de convergência entre os dois esquemas, embora as constantes de proporcionalidade entre os erros não sejam compatíveis a ponto de justificar uma comparação fidedigna. Acredita-se que essa diferença advenha também do comportamento distinto das soluções. É possível porém confrontar o erro do esquema de alta ordem para o caso de malha estruturada, equação (5.4), e o erro do esquema de alta ordem definido acima. O ganho é de quase 29% deste último em relação ao prévio.

5.3 Rotação de corpo rígido

Um problema hiperbólico linear e de campo de velocidades heterogêneo razoavelmente simples é o chamado problema de rotação de corpo rígido. Trata-se de um problema de valor inicial, determinado pela equação

$$u_t + \omega y u_x - \omega x u_y = 0.$$

Para a simulação demonstrada neste trabalho, toma-se $\omega = 2\pi$ e utiliza-se a condição inicial

$$u_0(x, y) = \frac{1}{1 + 10(\sqrt{4x^2 + y^2} - 1)^2}.$$

A solução exata de tal problema é bastante simples: a condição inicial u_0 rotacionada no sentido horário por um ângulo igual a $2\pi T$.

Para a simulação utilizou-se um domínio computacional definido por um quadrado $[-2, 2] \times [-2, 2]$. A malha adotada é não-estruturada, porém composta majoritariamente de triângulos equiláteros (*ver figura 5.9*). O tempo total da simulação é de 0.25 unidades de tempo, o que corresponde a uma rotação por um ângulo $\frac{\pi}{2}$ da condição inicial.

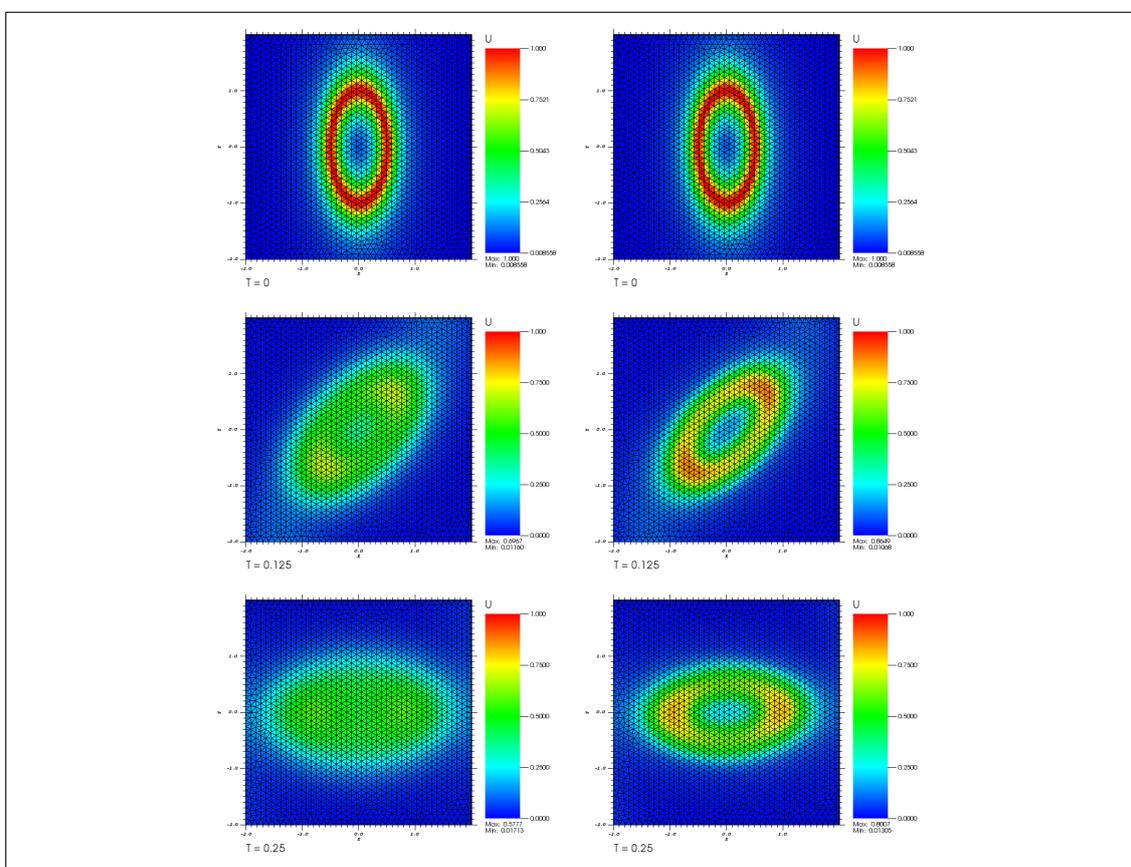


Figura 5.9: Comparativo entre as soluções numéricas para o problema de rotação de corpo rígido. Três instantâneos da solução de baixa resolução estão desenhados na coluna esquerda, enquanto o mesmo para a solução de alta resolução pode ser visualizado na coluna direita. Parâmetros da simulação: $\delta = 0.0056$, $I = 3548$, $N = 42$, $\Delta t = 0.004 + 0.002$.

O método se demonstra razoável também para esse problema linear heterogêneo. A convergência na vizinhança de extremos locais é consistentemente afetada pela técnica de limitação das inclinações utilizadas, contudo o esquema de alta resolução é capaz de conter bastante a difusão numérica quando comparado com o esquema de baixa ordem, fato facilmente observado pela perseverança do mínimo local da solução dentro do intervalo de tempo considerado.

Nenhum teste de convergência é apresentado para este caso. Entretanto os erros segundo as normas L_1 e L_∞ são apresentados para ambos os esquemas respectivamente nas figuras 5.10, para o esquema de baixa resolução, e 5.11, para o de alta. Apesar de ser bastante difusivo, o método exibe relativamente pouca dispersão e nenhum erro de fase, a julgar pelos gráficos das soluções, é manifestado.

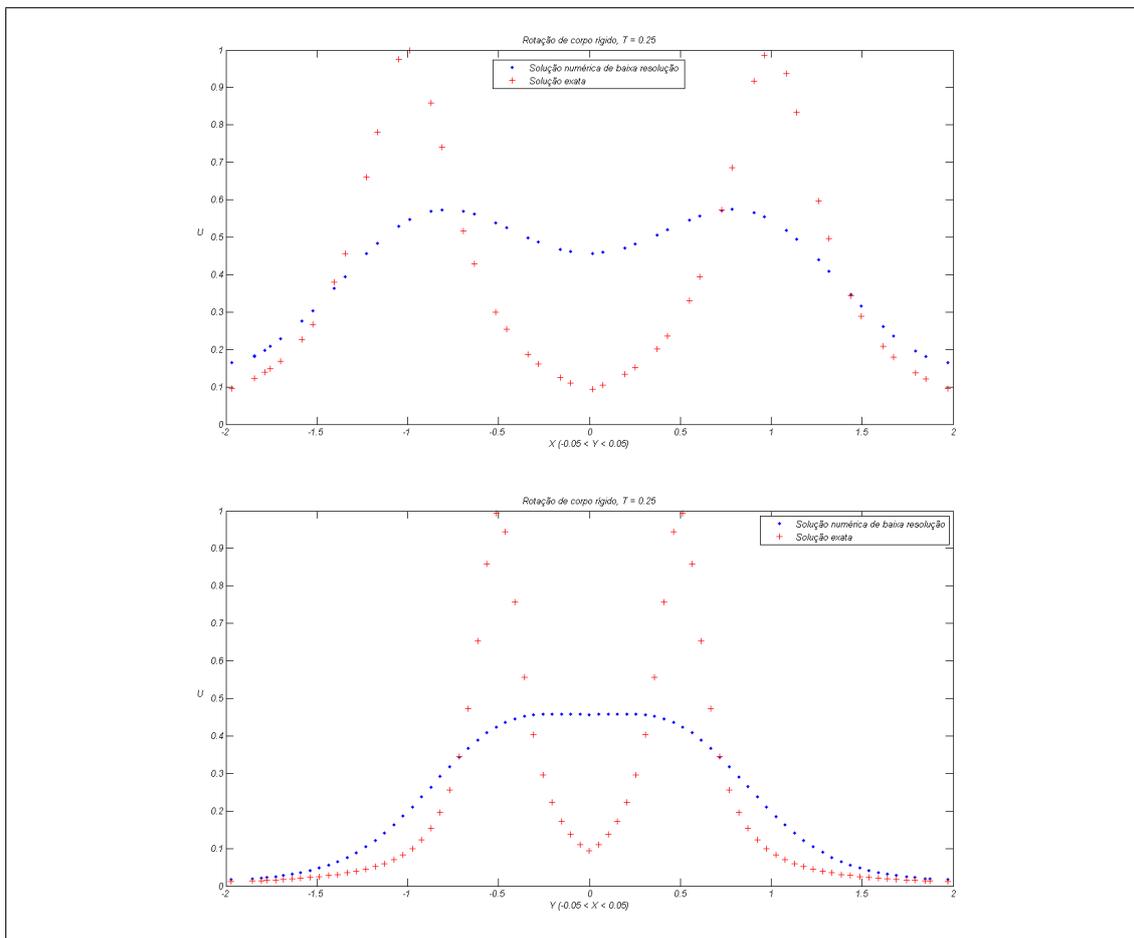


Figura 5.10: Cortes longitudinal e transversal do domínio exibindo o perfil da solução numérica de baixa ordem. $E_1 = 1.3109$ e $E_\infty = 0.5696$.

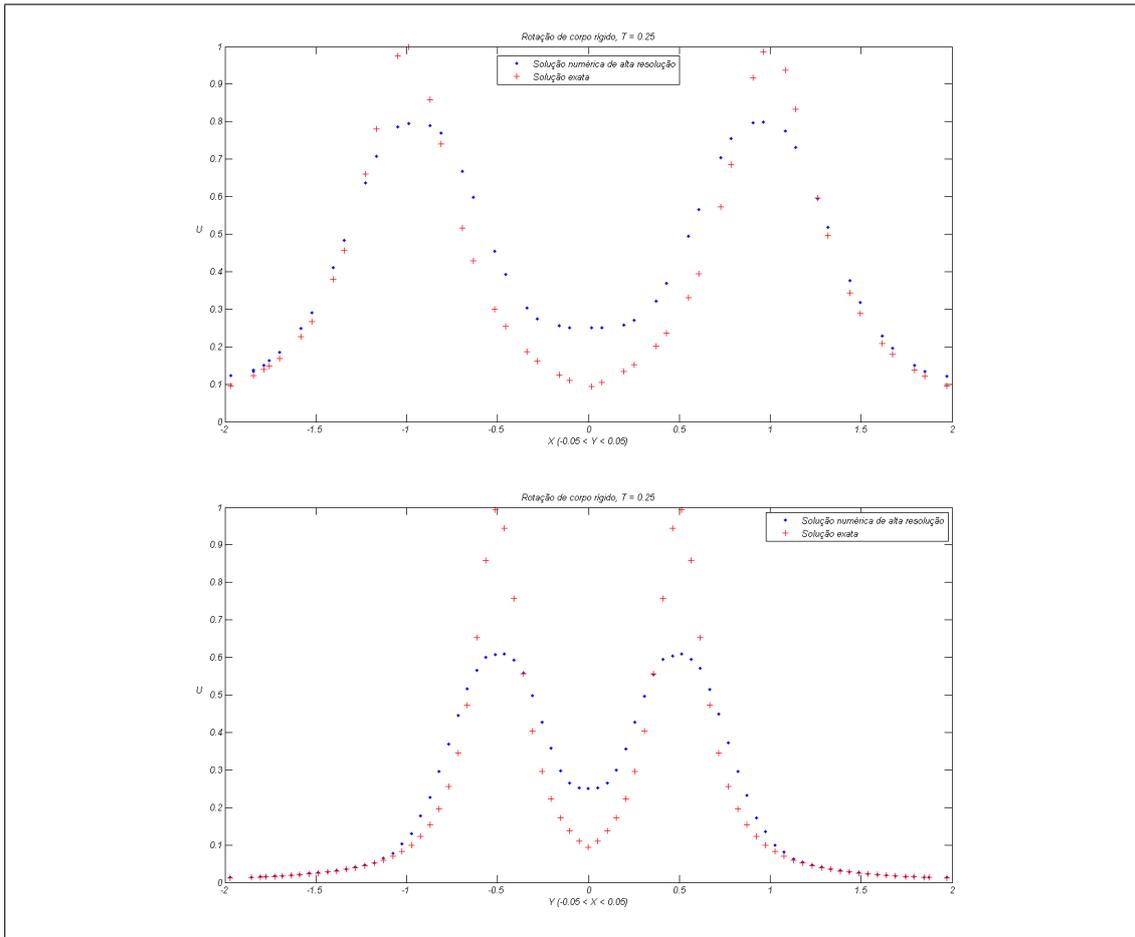


Figura 5.11: Cortes longitudinal e transversal do domínio exibindo o perfil da solução numérica de alta resolução. $E_1 = 0.5774$ e $E_\infty = 0.3867$.

Observações e considerações finais

Métodos em volumes finitos, no que diz respeito ao tratamento de problemas hiperbólicos não-lineares multidimensionais, padecem da falta de uma teoria matemática robusta, desde a escolha e o fechamento de um conjunto específico de conceitos, considerados fundamentais para o desenvolvimento de semelhante teoria, até uma escassez de resultados gerais de que se constituiria tal teoria em si. O cunho artesanal presente em tantos esquemas propostos na literatura, principalmente naqueles baseados em solucionadores de Riemann, não eximindo, contudo, esquemas centrais (sem escusas, inclusive, para o proposto neste trabalho), é consequência direta desse fato.

É desconhecido por este autor um corpo qualquer de proposições que permita a um desenvolvedor de métodos numéricos tirar conclusões *a priori* das soluções de um esquema em estudo ou que o guie de uma forma matematicamente rigorosa na construção de um método.

Assim, toda tentativa de rigor pretendida neste trabalho é frustrada dado o contraste da necessidade de uma exposição breve e de rápida execução com a dificuldade natural dos problemas envolvidos. Não obstante, acredita-se ter conseguido expressar os resultados dentro de um nível satisfatório e respeitando as formalidades julgadas necessárias.

Algumas questões permanecem abertas e portanto constituem objetos de estudo futuro. A mais premente concerne à estabilidade do método proposto.

Para problemas lineares uma prova de que os esquemas que derivam do método são todos estáveis, dado que o passo de tempo seja especificamente limitado, existe. O resultado não foi incluído neste trabalho, como se pretendia originalmente, em parte pelo fato de que não se fez uso de seu principal produto em nenhuma das simulações de problemas lineares apresentadas: a determinação do Δt_{max} a ser usado em cada iteração a fim de que o esquema permaneça estável. A prova

segue de modo muito parecido ao apresentado na referência [1], estabelecendo que os esquemas propostos são coercivos segundo a norma L_∞ desde que o Δt seja limitado por um valor determinado. Uma condição semelhante para problemas não-lineares ainda não foi encontrada e por essa razão os passos de tempo utilizados nas simulações exibidas neste trabalho foram todos fixados por tentativa e erro. A falta de uma estimativa mais expedita para o Δt inviabiliza, por exemplo, a entrada de campos de velocidade explicitamente dependentes do tempo nos esquemas, caso o limite do módulo desse campo varie bastante a cada iteração, uma vez que assim o passo de tempo tem de ser ajustado manualmente a cada iteração.

Por último, sendo de grande interesse prático a equação da saturação, há a necessidade de se acoplar o esquema explícito de alta resolução aqui proposto a algum esquema implícito que resolva o problema da pressão e paralelamente forneça o campo de velocidades, com o intuito de se obter um simulador de escoamentos bifásicos em meios porosos.

Referências Bibliográficas

- [1] P. Arminjon and M.-C. Viallon. Convergence of a finite volume extension of the nessyahu-tadmor scheme on unstructured grids for a two-dimensional linear hyperbolic. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 36:738–771, 1999.
- [2] P. Arminjon, M.-C. Viallon, and A. Madrane. A finite volume extension of the lax-friedrichs and nessyahu-tadmor schemes for conservation laws on unstructured grids. *Inter. J. Comput. Fluid Dynamics*, 9, 1998.
- [3] Jorge Balbás and Eitan Tadmor. Central station. <http://www.cscamm.umd.edu/centpack/publications/>, 2013.
- [4] George Keith Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000.
- [5] M. Berzins and J.M. Ware. Positive cell-centered finite volume discretization methods for hyperbolic equations on irregular meshes. *Applied Numerical Mathematics*, 16:417–438, 1995.
- [6] J. P. Boris and D. L. Book. Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works. *Journal of computational physics*, 11(1):38–69, 1973.
- [7] Se. E. Buckley and M.Ci. Leverett. Mechanism of fluid displacement in sands. *Trans. AIME*, 146:107–116, 1942.
- [8] D. Chandler. *Introduction to modern statistical mechanics*. Oxford University Press, 1987.

- [9] R.E. Collins. *Flow of fluids through porous media*. PennWell Publishing Company, 1976.
- [10] Richard Courant and David Hilbert. *Methods of mathematical physics*, volume 2. Wiley, 1966.
- [11] Marcelo Crotti. *Movimiento de fluidos en reservorios de hidrocarburos*. 2004.
- [12] A.I. Delis and I.K. Nikolos. A novel multidimensional solution reconstruction and edge-based limiting procedure for unstructured cell-centered finite volumes with application to shallow water dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 71(5):584–633, 2013.
- [13] Michael G. Edwards. Global and local central non-upwind finite volume schemes for hyperbolic conservation laws in porous media. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 2009.
- [14] S. K. Godunov. A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik*, 47, 271–306, translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226, 1969, 1959.
- [15] O. Gonzalez and A. M. Stuart. *A first course in continuum mechanics*. Cambridge University Press, 2008.
- [16] J. B. Goodman and R. J. LeVeque. On the accuracy of stable schemes for 2d scalar conservation laws. *Math. Comp.*, 45, pp. 15–21, 1985.
- [17] Jonathan B Goodman and Randall J LeVeque. A geometric approach to high resolution tvd schemes. *SIAM journal on numerical analysis*, 25(2):268–284, 1988.
- [18] Morton E. Gurtin. *An introduction to continuum mechanics*. Elsevier, 1982.
- [19] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 49, pp. 357–393, 1983.
- [20] Charles Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*, volume 1. Butterworth-Heinemann, 2007.
- [21] A. Kurganov and E. Tadmor. New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection–diffusion equations. *J. Comput. Phys.*, 160, pp. 214–282, 2000.

- [22] P. D. Lax and R. D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Comm. Pure Appl. Math.*, 9, 267–293, 1956.
- [23] Randall J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhauser Verlag, 1992.
- [24] Randall J LeVeque. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(2):627–665, 1996.
- [25] Randall J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [26] K. Lipnikov, D. Svyatskiy, and Y. Vassilevski. A monotone finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polygonal meshes. *J. Comput. Phys.* 229, 4017–4032, 2010.
- [27] H. Nessyahu and E. Tadmor. Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 87, pp. 408–463, 1990.
- [28] PL Roe. Characteristic-based schemes for the euler equations. *Annual review of fluid mechanics*, 18(1):337–365, 1986.
- [29] Peter K Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM journal on numerical analysis*, 21(5):995–1011, 1984.
- [30] Bram van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. In *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, pages 163–168. Springer, 1973.
- [31] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics*, 14(4):361–370, 1974.
- [32] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme iii. upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 23(3):263–275, 1977.
- [33] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of computational physics*, 23(3):276–299, 1977.
- [34] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of computational Physics*, 32(1):101–136, 1979.