

Universidade Federal Fluminense

AMILTON FERREIRA DA SILVA JUNIOR

Método dos Volumes Finitos para Equação de  
Convecção e Difusão em uma Dimensão Espacial

VOLTA REDONDA

2012

AMILTON FERREIRA DA SILVA JUNIOR

## Método dos Volumes Finitos para Equação de Convecção e Difusão em uma Dimensão Espacial

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

Orientador:

Simone Sousa Ribeiro

Coorientador:

Gustavo Benitez Alvarez

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

VOLTA REDONDA

2012

S586

Silva Junior, Amilton Ferreira da.

Método dos volumes finitos para equação de convecção e difusão em uma dimensão espacial / Amilton Ferreira da Silva Junior; Orientador: Simone Sousa Ribeiro; Coorientador: Gustavo Benitez Alvarez - Volta Redonda, 2012.

f.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia) – Universidade Federal Fluminense.

1. Esquemas centrais. 2. Leis de conservação. 3. Velocidade local de propagação. 4. Algoritmo REA. 5. Análise não linear. I. Ribeiro, Simone Sousa (orientador); Alvarez, Gustavo Benitez (coorientador). II. Título.

CDD 531.7

Método dos Volumes Finitos para Equação de Convecção e Difusão em  
Uma Dimensão Espacial

Amilton Ferreira da Silva Junior

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

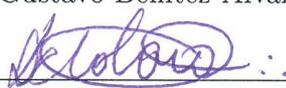
Aprovada por:



Prof. Simone Sousa Ribeiro, D.Sc. / IM-UFBA (Presidente)



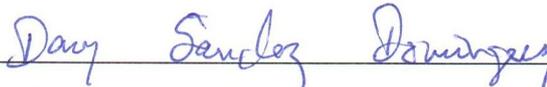
Prof. Gustavo Benitez Alvarez, D.Sc. / MCCT-UFF



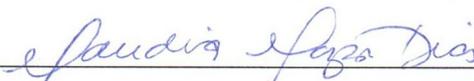
Prof. Diomar Cesar Lobão, Ph.D. / MCCT-UFF



Prof. Emerson Souza Freire, D.Sc. / MCCT-UFF



Prof. Dany Sanchez Dominguez, D.Sc. / DCET-UESC



Prof. Cláudia Mazza Dias, D.Sc. / IM-UFRRJ

Volta Redonda, RJ, 26 de setembro de 2012.

*Dedicatoria. À minha esposa Rosana e meu filho Augusto*

# Agradecimentos

À minha querida esposa Rosana e meu filho Augusto, que tudo representam para mim, por suportar os muitos momentos de minha ausência para que esta Pós-Graduação fosse concluída.

Aos meus pais Amilton e Maria das Graças, por tudo que fizeram por mim e por sempre acreditarem em minha capacidade de superação.

Aos meus sogros Sidney e Fátima pelo constante apoio que me tem sido dado.

Ao Programa de Pós-Graduação MCCT/EEIMVR/UFF, seus professores, funcionários e alunos, em especial à Professora Simone pelas excelente orientação e condução da presente dissertação.

A todos os demais que contribuíram para a realização deste trabalho.

## Resumo

Neste trabalho serão apresentados Métodos de Volumes Finitos em uma dimensão espacial, que se baseiam nas idéias de esquemas centrais em uma dimensão espacial para obter soluções numéricas aproximadas de leis de conservação lineares e não lineares, através do algoritmo *REA* (*Reconstruct, Evolve, Average*), proposto por Godunov [19].

Será realizada uma abordagem do Método de Diferenças Finitas Lax-Wendroff [26], trabalhando com a ideia de se obter um Método de Diferenças Finitas Lax-Friedrichs [17] de segunda ordem. Porém, este esquema de segunda ordem, produz oscilações espúrias na presença de descontinuidades. Com isso, o método de Lax-Friedrichs [17], originalmente de diferenças finitas, é reescrito como Método de Volumes Finitos segundo a abordagem do algoritmo *REA*. Em seguida, apresenta-se o Método de Volumes Finitos Nessyahu-Tadmor [31], de segunda ordem, como a extensão do método de primeira ordem Lax-Friedrichs [17], a partir do algoritmo *REA*. E finalmente, será apresentado o Método de Volumes Finitos Kurganov-Tadmor [23], também de segunda ordem, a partir da substituição, idealizada por Rusanov [36], de uma velocidade de propagação global, empregada nos esquemas numéricos Lax-Friedrichs [17] e Nessyahu-Tadmor [31], por uma velocidade calculada localmente em cada Problema de Riemann.

Os quatro métodos numéricos, Lax-Friedrichs [17], Lax-Wendroff [26], Nessyahu-Tadmor [31] e Kurganov-Tadmor [23], serão aplicados para aproximar soluções numéricas de leis de conservação lineares e não lineares, onde surgem alguns problemas quando se reduz o passo de tempo.

*Palavras-chave:* esquemas centrais, leis de conservação, velocidade local de propagação, algoritmo *REA*, difusão numérica.

## Abstract

In this paper we present a finite volume methods in one spatial dimension, which are based on the ideas of central schemes in one spatial dimension to obtain numerical solutions of linear and nonlinear conservation laws through the *REA* algorithm (*Reconstruct, Evolve, Average*) proposed by Godunov [19].

There will be an approach to the Lax-Wendroff [26] Finite Difference Method, working with the idea of getting a Lax-Friedrichs [17] Finite Difference Method of second order. However, this second-order scheme produces spurious oscillations in the presence of discontinuities. Thus, the Lax-Friedrichs [17] method, originally of finite difference, is rewritten as a finite volume according to the *REA* algorithm approach. Then we present Nessyahu-Tadmor [31] finite volume method, of second order, as the extension to the Lax-Friedrichs [17] method of first order, from the *REA* algorithm. And finally, is shown the Kurganov-Tadmor [23] Finite Volume Method, also of second order, from the replacement, designed by Rusanov [36], of a propagation speed of global numerical schemes used in the Lax-Friedrichs [17] and Nessyahu-Tadmor [31], for a speed calculated locally on each Riemann problem.

The four numerical methods, Lax-Friedrichs [17], Lax-Wendroff [26], Nessyahu-Tadmor [31] and Kurganov-Tadmor [23], will be applied to approximate numerical solutions of linear and nonlinear conservation laws, which arise in some problems by reducing the time step.

*Keywords:* central schemes, conservation laws, local speed of propagation, *REA* algorithm, numerical diffusion.

## Glossário

CFL	:	<i>Courant, Friedrichs e Lewy</i>
CPU	:	<i>Central Processing Unit</i>
EDO	:	Equação Diferencial Ordinária
EDP	:	Equação Diferencial Parcial
GRACE	:	<i>G</i> Raphing, <i>A</i> dvanced <i>C</i> omputation and <i>E</i> xploration of data
KT	:	<i>Kurganov-Tadmor</i>
LLF	:	<i>Local Lax-Friedrichs</i>
LW	:	<i>Lax-Wendroff</i>
LxF	:	<i>Lax-Friedrichs</i>
MDF	:	Método de Diferenças Finitas
MUSCL	:	<i>M</i> onotone <i>U</i> pstream-centered <i>S</i> chemes for <i>C</i> onservation <i>L</i> aws
MVF	:	Método de Volumes Finitos
NT	:	<i>Nessyahu-Tadmor</i>
PR	:	Problema de Riemann
PVI	:	Problema de Valor Inicial
REA	:	<i>R</i> econstruct, <i>E</i> volve, <i>A</i> verage
RUSA	:	<i>Rusanov</i>
R-H	:	<i>Rankine-Hugoniot</i>
SMR	:	Solução aproximada para uma malha bem refinada

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xv</b>
<b>Introdução</b>	<b>17</b>
<b>1 Leis de Conservação</b>	<b>19</b>
1.1 Problemas de propagação . . . . .	20
1.2 Derivação e interpretação física . . . . .	21
1.3 Curvas características . . . . .	24
1.3.1 Leis de conservação lineares . . . . .	24
1.3.2 Leis de conservação não lineares . . . . .	27
1.4 Formação de choque . . . . .	28
1.5 Problema de Riemann . . . . .	30
1.6 Soluções Fracas . . . . .	32
1.7 Soluções Descontínuas . . . . .	33
1.8 Condição de Entropia . . . . .	36
1.8.1 Condição de Entropia I - Função de Fluxo Convexa . . . . .	37
1.8.2 Condição de Entropia Inc - Função de Fluxo Não Convexa . . . . .	37
1.9 Difusão . . . . .	38
1.9.1 Transporte de massa e estados da matéria . . . . .	38

1.9.2	Fluxo de difusão . . . . .	39
1.10	Escoamento Bifásico . . . . .	39
<b>2</b>	<b>Esquemas centrais em 1D</b>	<b>45</b>
2.1	Introdução . . . . .	46
2.2	Método dos Volumes Finitos . . . . .	46
2.2.1	Discretização do espaço . . . . .	47
2.2.2	Discretizando a equação . . . . .	48
2.2.3	Lei de conservação na forma integral . . . . .	50
2.3	Método de Godunov - Algoritmo <i>REA</i> . . . . .	52
2.4	Condição de <i>CFL</i> ( <i>Courant, Friedrichs e Lewy</i> ) . . . . .	53
2.5	Método de Lax-Friedrichs (LxF) . . . . .	54
2.5.1	Método de Rusanov . . . . .	55
2.5.2	Método de Lax-Wendroff . . . . .	56
2.6	Lax-Friedrichs (LxF) - Algoritmo <i>REA</i> . . . . .	57
2.7	Método de Nessyahu-Tadmor (NT) . . . . .	60
2.8	Método de Kurganov-Tadmor (KT) . . . . .	66
2.9	Solução da equação de convecção-difusão . . . . .	77
2.9.1	Equação de convecção-difusão unidimensional . . . . .	77
2.9.2	Método KT com Diferenças Finitas para a Difusão . . . . .	77
2.9.3	Método KT com Médias Harmônicas para Difusão . . . . .	79
2.10	Método de Runge-Kutta . . . . .	80
<b>3</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>82</b>
3.1	Equação de convecção com fluxo linear . . . . .	84
3.1.1	Equação Linear . . . . .	84
3.2	Equação de convecção com fluxo não linear . . . . .	85

Sumário	ix
3.2.1 Equação de Burger's . . . . .	89
3.2.2 Equação de Buckley-Leverett . . . . .	98
3.3 Equações de convecção-difusão com fluxo não linear . . . . .	100
3.3.1 Equação de Burger's . . . . .	101
3.3.2 Equação de Buckley-Leverett . . . . .	102
<b>4 Conclusões e Trabalhos Futuros</b>	<b>105</b>
4.1 Conclusões . . . . .	105
4.2 Trabalhos Futuros . . . . .	106
<b>Referências</b>	<b>107</b>
<b>Apêndice A - Exemplos do Capítulo 1</b>	<b>110</b>
<b>Apêndice B - Códigos Computacionais</b>	<b>123</b>

## Lista de Figuras

1.1	<i>Problema Hiperbólico</i> - movimento de quatro moléculas de um produto químico em uma direção preferencial com velocidade $v$ . . . . .	20
1.2	<i>Problema Parabólico</i> - movimento de quatro moléculas de um produto químico, em um mesmo recipiente fechado em três instantes de tempo distintos. . . . .	20
1.3	<i>Problema Hiperbólico-Parabólico</i> - movimento de quatro moléculas de um produto químico em uma direção preferencial com velocidade $v$ . . . . .	21
1.4	Líquido ou gás fluindo através de um tubo com uma velocidade $v(x, t)$ . . . . .	22
1.5	Curva característica. . . . .	26
1.6	Ilustração da condição inicial para o problema de Riemann. . . . .	31
1.7	Solução do problema de Riemann no plano $x-t$ com $\bar{v} > 0$ . . . . .	31
1.8	Esboço da solução, Thomas [44]. . . . .	34
1.9	Gráfico da função de fluxo $f(s)$ no problema de escoamento bifásico. . . . .	40
1.10	Escoamento bifásico em meio poroso, Tanque de Provas Numérico da USP [1]. . . . .	41
1.11	Gráfico da derivada da função de fluxo $f(s)$ no problema de escoamento bifásico. . . . .	41
1.12	<i>Triple valued solution</i> , do problema unidimensional de escoamento bifásico. . . . .	42
1.13	Interseção de área da posição do choque. . . . .	42
1.14	Representação do choque vertical conectado a parte de cima da curva com o estado direito, $s_R$ . . . . .	43
2.1	Malha computacional. . . . .	48
2.2	Aproximação constante por partes. . . . .	49
2.3	Aproximação linear por partes. . . . .	49

2.4	Ilustração da lei de conservação (2.7), mostrando o balanço dos fluxos numéricos de saída $F_{j+1/2}^n$ e entrada $F_{j-1/2}^n$ na célula original $I_j$ . . . . .	52
2.5	Esquema Godunov explícito totalmente discreto. . . . .	52
2.6	Estimativa da velocidade de propagação global. . . . .	55
2.7	Esquema LxF em malha não deslocada. . . . .	58
2.8	Deslocamento da malha original em $\Delta X/2$ . . . . .	59
2.9	Esquema LxF em malha deslocada. . . . .	60
2.10	Construção do método de Nessyahu e Tadmor [31]. . . . .	65
2.11	Construção do método de Kurganov e Tadmor [23]. . . . .	76
3.1	Efeitos da difusão numérica, mostrando: (a) A solução exata; (b) O erro de dissipação; (c) O erro de dispersão, Anderson [3]. . . . .	83
3.2	Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico LxF para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	86
3.3	Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico LW para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	86
3.4	Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico NT para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	87
3.5	Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico KT para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	87
3.6	Solução aproximada da Equação Linear usando os quatro esquemas numéricos LxF, LW, NT e KT para condição de $CFL = 0,45$ . . . . .	88
3.7	Solução aproximada da Equação Linear usando os três esquemas numéricos LxF, NT e KT para condição de $CFL = 0,20$ . . . . .	88
3.8	Solução aproximada da Equação Linear usando os três esquemas numéricos LxF, NT e KT para condição de $CFL = 0,05$ . . . . .	89
3.9	Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico LxF para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	91
3.10	Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico LW para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	91

3.11 Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico NT para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	92
3.12 Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico KT para condições de $CFL$ diferentes. . . . .	92
3.13 Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT, $CFL = 0,45$ . . . . .	93
3.14 Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT, $CFL = 0,20$ . . . . .	93
3.15 Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT, $CFL = 0,05$ . . . . .	94
3.16 Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico LxF. . . . .	95
3.17 Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico NT. . . . .	95
3.18 Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico KT. . . . .	96
3.19 Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, $CFL = 0,60$ . . . . .	96
3.20 Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, $CFL = 0,20$ . . . . .	97
3.21 Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, $CFL = 0,05$ . . . . .	97
3.22 Solução aproximada da Equação de Buckley-Leverett usando os esquemas numéricos NT e KT . . . . .	99
3.23 Solução aproximada da Equação de Buckley-Leverett usando os esquemas numéricos NT e KT . . . . .	100
3.24 Solução aproximada da equação Burger's usando o esquema KT e coeficientes difusivos $D_1, D_2, D_3$ e $D_{14}$ . . . . .	102
3.25 Solução aproximada da Equação Buckley-Leverett usando o esquema KT e coeficientes difusivos $D_1, D_2, D_3$ e $D_{14}$ . . . . .	103
3.26 Solução aproximada da Equação Buckley-Leverett usando o esquema KT e coeficientes difusivos $D_1, D_2, D_3$ e $D_{14}$ . . . . .	104
A.1 Gráfico da condição inicial $s_0(x) = \sin(2\pi x)$ e das curvas característica com inclinação $\frac{1}{s_0(x)}$ , Thomas [44]. . . . .	111
A.2 Solução no tempo $t = 1$ . . . . .	112

A.3	Solução <i>triple valued function</i> , no tempo $t = 2$ . . . . .	113
A.4	Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)- (A.7), Thomas [44]. . . . .	115
A.5	Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)- (A.7), Exemplo 5, Thomas [44]. . . . .	115
A.6	Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)- (A.12), Thomas [44]. . . . .	116
A.7	Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)- (A.12), Exemplo 6, Thomas [44]. . . . .	117
A.8	Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)- (A.15), Exemplo 7, Thomas [44]. . . . .	119
A.9	Curvas Características para o Exemplo 9, Thomas [44]. . . . .	121
A.10	Solução Geométrica do Exemplo 9. . . . .	122

## Lista de Tabelas

2.1	Método de Runge-Kutta para os esquemas de segunda e terceira ordem no tempo. . . . .	81
3.1	Tempo de processamento para aproximação da Equação de Burger's, representada pela Figura 3.24. . . . .	101
3.2	Tempo de processamento para aproximação da Equação de Buckley-Leverett, representada pela Figura 3.25. . . . .	103
3.3	Tempo de processamento para aproximação da Equação de Buckley-Leverett, representada pela Figura 3.26. . . . .	104

## Lista de Símbolos

$x_j$	: Posição espacial.
$t^n$	: Tempo discreto para equação.
$\alpha_{CFL}$	: Número de <i>Courant</i> ou <i>CFL</i> .
$T_b$	: Tempo de quebra ou ruptura.
$s$	: Representa a solução analítica da quantidade conservada.
$s_L$	: Estado à esquerda ( <i>Left</i> ) do Problema de Riemann.
$s_R$	: Estado à direita ( <i>Right</i> ) do Problema de Riemann.
$f(s)$	: Função de fluxo linear ou não linear.
$D(s)$	: Coeficiente de difusão.
$S$	: Solução aproximada de $s$ na malha original.
$w$	: Solução aproximada de $s$ na malha deslocada.
$F_{j-1/2}^n$	: Fluxo numérico na fronteira $x_{j-1/2}$ , no tempo $n$ .
$a_{j-1/2}^n$	: Velocidade de propagação de onda $x_{j-1/2}$ , no tempo $n$ .
$x_{j+1/2,l}^n$	: Limite à esquerda de $x_{j+1/2}$ , no tempo $n$ .
$x_{j+1/2,r}^n$	: Limite à direita de $x_{j+1/2}$ , no tempo $n$ .
$I$	: Célula ou volume de controle na malha unidimensional.
$I_j$	: Célula centrada em $x_j$ na malha unidimensional.
$I_{j+1/2}$	: Célula deslocada centrada em $x_{j+1/2}$ na malha unidimensional.
$m$	: Massa.
$v$	: Velocidade.
$\bar{v}$	: Velocidade constante.
$C_0^1$	: Conjunto das funções testes $\phi$ .
$\text{supp}(\phi)$	: Suporte de $\phi$ .

$\Omega$	: Domínio espacial.
$\Psi$	: Domínio computacional.
$\mathcal{I}$	: Malha computacional.
$Int(I)$	: Interior de $I$ .
$Int(\Psi)$	: Interior de $\Psi$ .
$Front(I)$	: Fronteira de $I$ .
$Front(\Psi)$	: Fronteira de $\Psi$ .
$\bar{I}$	: Fecho de $I$ .
$\bar{\Psi}$	: Fecho de $\Psi$ .
$\Delta X$	: Dimensão de uma célula na malha espacial unidimensional.
$\Delta t$	: Passo de tempo.
$\Delta t_{cfl}$	: Passo de tempo restrito à condição $CFL$ .
$\Delta t_{RK}$	: Passo de tempo restrito à condição TRK.
$\delta$	: Pequena variação, vizinhança.
$\bar{S}_j$	: Média em célula em $I_j$ no tempo $n$ .
$\tilde{S}_j$	: Reconstrução polinomial da solução no tempo $n$ .
$S_x$	: Derivada numérica na direção $x$ .
$S^+$	: Valor intermediário à direita, em uma dimensão espacial.
$S^-$	: Valor intermediário à esquerda, em uma dimensão espacial.
$\bar{w}_j^{n+1}$	: Médias das soluções em uma malha não uniforme no futuro.
$\chi_j(x)$	: Função característica de $x$ .
$H_{j+1/2}$	: Fluxo numérico semi-discreto na fronteira $x_{j+1/2}$ para convecção.
$P_{j+1/2}$	: Fluxo numérico semi-discreto na fronteira $x_{j+1/2}$ para difusão.
$\phi$	: Função teste.
$\gamma$	: Curva parametrizada para o método das curvas características.
$\mathbb{Z}$	: Conjuntos dos números inteiros.
$\mathbb{R}$	: Conjuntos dos números reais.
$\mathbb{R}^+$	: Conjuntos dos números reais não negativos.
$1D$	: Espaço constituído por uma dimensão ( $\mathbb{R}$ ).
$2D$	: Espaço constituído por duas dimensões ( $\mathbb{R}^2$ ).
$3D$	: Espaço constituído por três dimensões ( $\mathbb{R}^3$ ).

# Introdução

Neste trabalho serão apresentadas leis de conservação escritas como uma classe de equações diferenciais parciais de primeira ordem. Estas leis de conservação avaliam a mudança no valor de uma substância física, contidos em uma região unidimensional, analisando o fluxo da substância física nas fronteiras desta região. De acordo com Thoe [42], Leveque [28] e De Azevedo [14], as leis de conservação modelam diversos fenômenos físicos, como por exemplo, a dinâmica dos fluidos, dinâmica dos gases, acústica, geofísica, biomecânica e engenharia de tráfego.

Durante a solução destas leis de conservação é comum o surgimento de descontinuidades conhecidas como choques ou ondas de rarefação. A solução ou captura destas descontinuidades é o grande desafio enfrentado pelos métodos numéricos. Com isso, neste trabalho será realizado o estudo de equações mais simples como a equação de convecção com fluxo linear e a equação de Burgers, que tem um papel muito importante tanto no entendimento das propriedades das leis de conservação quanto na aproximação das soluções pelos métodos numéricos.

Deve-se sempre analisar os resultados numéricos fornecidos pelo computador em relação a solução física do problema. Erros de programação ou de condições iniciais podem conduzir uma simulação a fornecer resultados visualmente plausíveis, mas fisicamente incompatíveis com o problema, Vista [45].

Segundo Maliska [29] em 2004, o método dos volumes finitos ou método dos volumes de controle, destaca-se dos demais métodos numéricos para aplicação em problemas de dinâmica dos fluidos computacional. Isto ocorre devido à sua capacidade de tratar adequadamente as não linearidades presentes nesses fenômenos.

De acordo com Schneider [39] em 2007, o processo de obtenção da solução numérica neste método pode ser dividido nas seguintes etapas: formulação do problema, discretização do domínio de cálculo, discretização do modelo matemático e obtenção da solução numérica.

Germer [18] em 2009, estudou a verificação de funções de interpolação na Equação

de Advecção-Difusão Unidimensional utilizando o Método de Volumes Finitos. Oliveira [32] em 2010, apresenta alguns métodos numéricos não oscilatórios aplicados às leis de conservação hiperbólicas unidimensionais.

Essa dissertação está dividida em quatro capítulos e dois apêndices:

- No Capítulo 1, serão apresentadas propriedades matemáticas para a aproximação da solução de equações na forma conservativa, ou forma divergente, essenciais para o desenvolvimento e aplicação dos métodos numéricos;
- No Capítulo 2, serão apresentados métodos numéricos para sistemas de equações, baseados na discretização das equações por volumes finitos, que são uma extensão dos métodos de Godunov [19];
- No Capítulo 3, serão aplicados os quatro esquemas numéricos estudados no Capítulo 2, Lax-Friedrichs [17], Lax-Wendroff [26], Nessyahu-Tadmor [31] e Kurganov-Tadmor [23], para aproximar soluções numéricas de leis de conservação lineares e não lineares. Finalizando, o Capítulo 4 com as conclusões e trabalhos futuros;
- No Apêndice A, serão apresentados 09 (nove) exemplos teóricos extraídos de Thomas [44], com objetivo de ilustrar alguns conceitos abordados no Capítulo 1;
- No Apêndice B, serão apresentados 03 (três) códigos computacionais na Linguagem *C*, utilizados para calcular e plotar soluções aproximadas de uma Equação de Convecção com a função de fluxo linear apresentada no Capítulo 3.

# Capítulo 1

## Leis de Conservação

Neste capítulo serão apresentadas propriedades matemáticas para a aproximação da solução de equações na forma conservativa, ou forma divergente, essenciais para o desenvolvimento e aplicação dos métodos numéricos, Thomas [44].

Na primeira Seção, 1.1, serão apresentados alguns conceitos sobre os fenômenos de propagação, que envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse em uma direção preferencial, ou seja, estão associados ao tipo de fenômeno físico e podem ser identificados de acordo com as equações diferenciais parciais que regem esses fenômenos. Na segunda Seção, 1.2, utiliza-se um problema de dinâmica dos fluidos unidimensional com a apresentação da forma integral básica das leis de conservação e sua forma diferencial. Na Seção 1.3, discute-se o método das curvas características, com exemplos de aplicação para leis de conservação lineares e não lineares, isto é, para a função de fluxo  $f(s)$  linear e não linear. Na Seção 1.4, identifica-se o tempo para o qual as características se interceptam primeiro,  $t = T_b$ , onde o ponto de interseção é denominado como o ponto de quebra (ou ruptura), em uma aplicação que será abordada no Capítulo 3, Resultados Numéricos. Nas Seções 1.5, 1.6, 1.7 e 1.8, serão apresentadas as propriedades matemáticas para solução de equações diferenciais parciais, que modelam as leis de conservação com uma condição inicial descontínua, além de alguns exemplos de aplicação.

Finalmente, nas Seções 1.9 e 1.10, apresenta-se a noção do transporte de massa e dos estados da matéria, seguido do escoamento que envolve duas fases, o óleo e a água, exemplificado pela equação de Buckley-Leverett, como um modelo deste tipo de escoamento.

## 1.1 Problemas de propagação

Os problemas de propagação envolvem a variação temporal das grandezas físicas de interesse em uma direção preferencial, ou seja, estão associados ao tipo de fenômeno físico e podem ser identificados de acordo com as equações diferenciais parciais que regem esses fenômenos, Bortoli [10]. Os fenômenos de propagação são modelados por Equações Diferenciais Hiperbólicas, Equações Diferenciais Parabólicas e Equações Diferenciais Hiperbólicas-Parabólicas. Quando apresentam mecanismos de dissipação de energia (por exemplo, na difusão de calor e no escoamento de fluidos viscosos), os fenômenos ditos dissipativos são descritos por **Equações Parabólicas**. Por outro lado, são representados por **Equações Hiperbólicas** que estão relacionadas a problemas de vibração ou de convecção, em que os fenômenos dissipativos (difusivos) são mínimos ou podem ser desprezados, Boyce [7] e Zill [47]. As Figuras 1.1, 1.3 e 1.2, ilustram exemplos de propagação para problemas Hiperbólicos, Parabólicos e Hiperbólicos-Parabólicos, respectivamente.

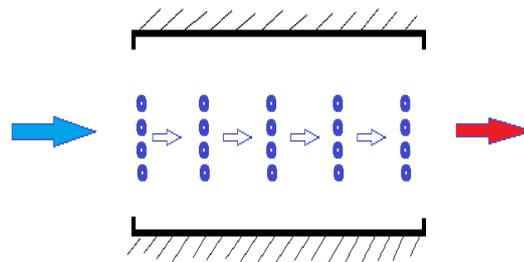


Figura 1.1: *Problema Hiperbólico* - movimento de quatro moléculas de um produto químico em uma direção preferencial com velocidade  $v$ .

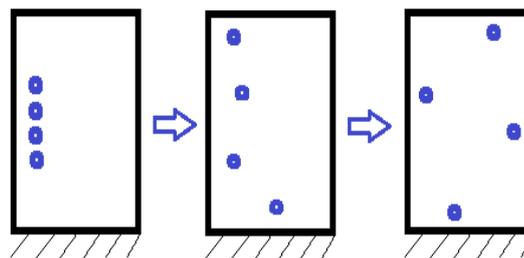


Figura 1.2: *Problema Parabólico* - movimento de quatro moléculas de um produto químico, em um mesmo recipiente fechado em três instantes de tempo distintos.

A solução física da Equação Hiperbólica é o limite da solução da Equação Parabólica quando a difusão tende para zero. Um exemplo clássico de Equação Hiperbólica é a Equação da Onda, onde uma leve perturbação numa região leva algum tempo para ser sentida em regiões mais distantes. No Capítulo 3, Resultados Numéricos, serão apresentados as soluções aproximadas de exemplos de Equação de Convecção (Equação Hiperbólica) e da

Equação de Convecção-Difusão (Equação Hiperbólica-Parabólica).

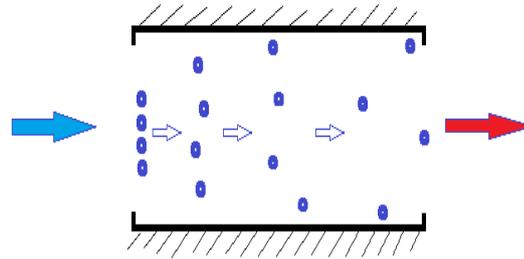


Figura 1.3: *Problema Hiperbólico-Parabólico* - movimento de quatro moléculas de um produto químico em uma direção preferencial com velocidade  $v$ .

## 1.2 Derivação e interpretação física

Para mostrar que as leis de conservação têm origem em princípios físicos, considere um problema bem simples de dinâmica dos fluidos, em que um líquido ou gás flui através de um tubo unidimensional com uma velocidade conhecida  $v(x, t)$ , que varia apenas com a distância  $x$  ao longo do tubo e com o tempo  $t$ , Figura 1.4.

Em problemas típicos de dinâmica dos fluidos deve-se considerar o movimento do fluido, isto é, a função velocidade  $v(x, t)$ , como parte da solução. No entanto, nos exemplos deste trabalho, assume-se que este campo de velocidades já é conhecido a priori e se deseja simplesmente modelar a concentração ou densidade de alguma espécie química presente no fluido (presente em pequenas quantidades que não afetam a dinâmica do fluido), Leveque [27].

Seja  $s(x, t)$ ,  $s : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ , a densidade de fluido no ponto  $(x, t)$  que se deseja determinar. A densidade é medida em unidade de massa por unidade de volume.

Seja  $\Omega$  um domínio espacial. Sabendo-se a densidade de massa do fluido  $s(x, t)$  no domínio  $\Omega$ , a massa total  $m(\Omega, t)$  do fluido é dada pela integral da densidade:

$$m(\Omega, t) = \int_{\Omega} s(x, t) dV. \quad (1.1)$$

No caso unidimensional, quando  $\Omega = [x_1, x_2]$ , a massa total no tempo  $t$  é:

$$\int_{x_1}^{x_2} s(x, t) dx. \quad (1.2)$$

Considerando que as paredes do tubo são impermeáveis e que a massa é conservada,

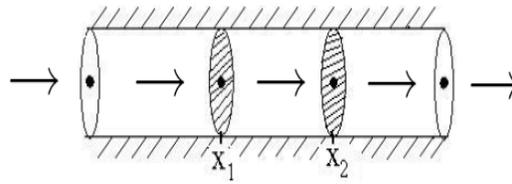


Figura 1.4: Líquido ou gás fluindo através de um tubo com uma velocidade  $v(x, t)$ .

a lei de conservação de massa garante que:

A variação de massa em  $\Omega$  é igual a menos o fluxo de massa que atravessa  $Front(\Omega)$ , onde  $Front(\Omega)$  representa a fronteira de  $\Omega$ , isto é,  $x_1$  e  $x_2$ , Leveque [27].

Seja  $F_i(t)$  (com  $i = 1, 2$ ) o fluxo de partículas que atravessa a fronteira de  $\Omega$ . Por convenção,  $F_i(t) > 0$  corresponde a um fluxo para a direita e  $F_i(t) < 0$  significa um fluxo para a esquerda, Leveque [27]. Uma vez que a massa total no intervalo  $[x_1, x_2]$  varia apenas devido ao fluxo em  $x_1$  e  $x_2$ , pode-se escrever:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} s(x, t) dx = -[F_2(t) - F_1(t)]. \quad (1.3)$$

A Equação (1.3) é a forma integral básica da lei de conservação, onde a taxa de variação da massa total é devida apenas aos fluxos através dos extremos. Para dar continuidade, é necessário determinar como as funções de fluxo  $F_i(t)$  estão relacionadas com  $s(x, t)$ , de forma que se obtenha uma equação que possa ser resolvida para  $s(x, t)$ . No caso de escoamento de fluido, o fluxo em cada ponto  $x$  no tempo  $t$  é simplesmente o produto da densidade  $s(x, t)$  pela velocidade  $v(x, t)$ :

$$f(x, t) = v(x, t) \cdot s(x, t). \quad (1.4)$$

A velocidade  $v(x, t)$  diz como as partículas estão se movendo e se ela é dada em centímetros por segundo, a densidade  $s(x, t)$  informa quantas gramas de um composto químico um centímetro de fluido contém. Então o produto, medido em gramas por segundo, é a taxa de passagem do composto químico por este ponto, Leveque [27].

Se  $v(x, t)$  é uma função conhecida, pode-se escrever a função fluxo como  $f(s, x, t)$ :

$$f(s, x, t) = v(x, t) \cdot s(x, t). \quad (1.5)$$

Em particular, se a velocidade é independente de  $x$  e  $t$ , então  $v(x, t) = \bar{v}$ , onde  $\bar{v}$  é alguma constante. Logo, pode-se escrever:

$$f(s) = \bar{v} \cdot s(x, t). \quad (1.6)$$

Neste caso o fluxo em qualquer ponto e tempo pode ser diretamente determinado a partir do valor da quantidade conservada naquele ponto e não depende explicitamente da localização do ponto no espaço e no tempo, Leveque [27].

Para uma função de fluxo  $f(s)$  que dependa apenas do valor de  $s(x, t)$ , a lei de conservação (1.3) pode ser reescrita como:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} s(x, t) dx = -[f(s(x_2, t)) - f(s(x_1, t))]. \quad (1.7)$$

O lado direito desta equação pode ser reescrito usando a notação padrão do cálculo, Leveque [27]:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} s(x, t) dx = - f(s(x, t)) \Big|_{x_1}^{x_2}. \quad (1.8)$$

O objetivo é achar uma função  $s(x, t)$  que satisfaça a Equação (1.8) para quaisquer valores de  $x_1$  e  $x_2$ . Uma forma mais simples de resolver este problema é transformar esta equação integral numa equação diferencial parcial que possa ser tratada pelas técnicas usuais. Para tal efeito, considere as funções  $s(x, t)$  e  $f(s(x, t))$  suficientemente diferenciáveis. A derivada temporal será passada para dentro do integrando, transformando o lado direito numa integral via Teorema Fundamental do Cálculo, definida por:

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} s(x, t) dx = - \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} f(s(x, t)) dx. \quad (1.9)$$

Arrajando-se a Equação (1.9) dentro de uma única integral, obtém-se:

$$\int_{x_1}^{x_2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} s(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} f(s(x, t)) \right] dx = 0. \quad (1.10)$$

Uma vez que esta integral deve ser nula para todos os valores  $x_1$  e  $x_2$ , tem-se que o integrando deve ser identicamente zero. Finalmente, isto fornece a equação diferencial parcial:

$$\frac{\partial}{\partial t} s(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} f(s(x, t)) = 0. \quad (1.11)$$

A Equação (1.11) é chamada a forma diferencial das leis de conservação. Pode ser reescrita na forma:

$$s(x, t)_t + f(s(x, t))_x = 0. \quad (1.12)$$

Em particular, para a função de fluxo (1.6),  $f(s) = \bar{v} \cdot s$ , a lei de conservação (1.12) se torna:

$$s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0, \quad (1.13)$$

uma lei de conservação linear e escalar.

### 1.3 Curvas características

Nesta seção serão usadas curvas no plano  $x-t$ , denominadas curvas características para resolver equação do tipo (1.12), para leis de conservação lineares e não lineares, com uma condição inicial  $s(x, 0)$ . A geometria das soluções geradas por curvas características permite resolver a equação do tipo (1.12) mesmo nos casos não lineares que, em geral, são de tratamento difícil.

#### 1.3.1 Leis de conservação lineares

Para leis de conservação lineares, isto é, com o fluxo  $f(s)$  linear, rescreve-se a equação (1.12) na forma não conservativa:

$$s_t + f(s)_s \cdot s_x = 0. \quad (1.14)$$

Como  $f(s)_s = \frac{d}{ds} f(s) = \bar{v}$ , para a função de fluxo (1.6),  $f(s) = \bar{v} \cdot s$ , pode-se escrever a equação (1.14) como a equação (1.13):

$$s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0, \quad (1.15)$$

onde  $\bar{v}$  é uma velocidade constante, independente de  $x$  e  $t$ .

Esta equação é chamada de equação de convecção, uma vez que ela modela a convecção de uma substância química, presente em pequenas concentrações na massa fluida, de maneira que a magnitude da concentração não tenha essencialmente qualquer efeito sobre a dinâmica do fluido.

A equação (1.15) no domínio  $-\infty < x < \infty$ ,  $t \geq 0$  em conjunto com a condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x),$$

pode ser escrita como um “Problema de Cauchy”, que consiste em solucionar o sistema

$$\begin{cases} s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0 \\ s(x, 0) = s_0(x) \end{cases}, \quad -\infty < x < \infty, t \geq 0. \quad (1.16)$$

A equação (1.16) é uma Equação Diferencial Parcial (EDP) escalar, linear, de coeficientes constante do tipo hiperbólica, cuja solução pode ser obtida pelo *método das curvas características*, que será descrito logo abaixo.

Seja  $\gamma(t) = s(x(t), t)$  uma curva parametrizada com um ponto inicial  $(x_0, 0)$  sobre o eixo- $x$ . Se restringirmos a função  $s(x, t)$  à curva  $\gamma(t)$ , isto é, se considerarmos a função  $s(x(t), t)$ , tem-se que a variação de  $s(x, t)$  ao longo da curva  $\gamma(t)$  será dada por:

$$\frac{d}{dt}\gamma(t) = \frac{d}{dt}s(x(t), t). \quad (1.17)$$

Usando a regra da cadeia obtém-se:

$$\frac{d}{dt}s(x(t), t) = s_t(x(t), t) + s_x(x(t), t) \frac{d}{dt}x(t). \quad (1.18)$$

Comparando o lado direito desta equação com a equação (1.16) obtém-se  $\frac{d}{dt}\gamma(t) = 0$ , ou seja,  $\gamma(t) = s(x(t), t) = \text{constante}$ . Logo, o valor de  $s(x(t), t)$  em cada ponto desta curva é o mesmo de  $s(x_0, 0)$ . Então  $s(x, t)$  é constante ao longo de trajetórias  $x(t)$  que se propaga com a velocidade característica  $\bar{v} = \frac{d}{dt}x(t)$ .

Como  $\frac{d}{dt}x(t) = \bar{v}$ , as trajetórias  $x(t)$  são retas, logo,  $s(x(t), t)$  é constante sobre essas retas. Essas trajetórias são chamadas *curvas características* da equação diferencial parcial (1.16).

Desse modo, a construção geométrica da solução de um problema de valor inicial, como a equação (1.16), pode ser obtida através do estudo das curvas características.

Com isso, pode-se obter uma forma da solução do problema (1.16), onde  $x_0$  é a intersecção da curva característica que passa pelo ponto  $(x, t)$  com o eixo- $x$ . Assim, considerando que no caso linear a inclinação de todas as características é constante, igual a  $\frac{1}{\bar{v}}$ , a solução  $s(x, t)$  satisfaz:

$$\begin{cases} s(x, 0) = s_0(x_0) \\ t = \frac{1}{\bar{v}} \cdot (x - x_0) \Leftrightarrow x_0 = x - \bar{v} \cdot t. \end{cases} \quad (1.19)$$

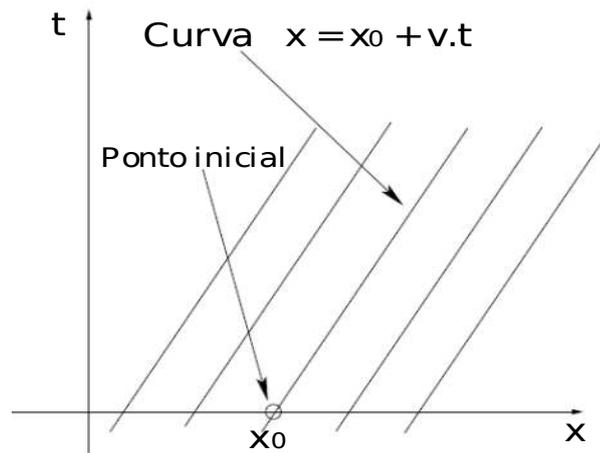


Figura 1.5: Curva característica.

Logo, a solução geral do problema (1.16) pode ser representada por uma função suave da forma:

$$s(x, t) = s_0(x - \bar{v} \cdot t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (1.20)$$

Com isso, à medida que o tempo evolui, os dados iniciais se propagam sem deformação para a direita (se  $\bar{v} > 0$ ) ou para esquerda (se  $\bar{v} < 0$ ) com a velocidade constante  $\bar{v}$ . A solução  $s(x, t)$  é constante ao longo de cada reta  $x = x_0 + \bar{v} \cdot t$ , que são conhecidas como as curvas características da equação.

Verifica-se então, que as características são as curvas no plano  $x-t$  que satisfazem as equações diferenciais ordinárias  $\frac{d}{dt}x(t) = \bar{v}$ ,  $x(0) = x_0$ . Derivando  $s(x, t)$  ao longo de uma destas curvas para encontrar a taxa de variação de  $s(x, t)$  ao longo da característica, descobre-se que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}s(x(t), t) &= \frac{\partial}{\partial t}s(x(t), t) + \frac{\partial}{\partial x}s(x(t), t) \cdot \frac{d}{dt}x(t) \\ &= s_t + s_x \cdot \bar{v} \\ &= s_t + \bar{v} \cdot s_x \\ &= 0, \end{aligned} \quad (1.21)$$

confirmando que  $s(x, t)$  é constante ao longo destas curvas características, Thomas [43] e [44]. No **Exemplo 1** do Apêndice A, serão encontradas as curvas características no tempo  $t_0 = 0$  para uma equação de convecção com a função de fluxo linear.

### 1.3.2 Leis de conservação não lineares

Para leis de conservação não lineares, o seguinte resultado análogo ao obtido em (1.20). Se  $s(x, t)$  é uma solução suficientemente suave do problema de valor inicial:

$$\begin{cases} s_t + f'(s) s_x = 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ s(x, 0) = s_0(x), & x \in \mathbb{R} \end{cases},$$

então  $s(x, t)$  satisfaz:

$$s(x, t) = s_0(x - f'(s(x, t)) \cdot t), \quad x \in \mathbb{R}, t > 0. \quad (1.22)$$

De fato, diferenciando  $s(x, t)$  ao longo de uma característica,

$$\begin{aligned} \frac{ds}{dt} &= \frac{\partial s}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial s}{\partial t} \frac{dt}{dt} \\ &= s_x \cdot f'(s) + s_t \\ &= 0, \end{aligned}$$

isto é,  $s$  é constante ao longo das curvas características.

**Observação 1.3.2.1:** Como  $s$  é constante ao longo de qualquer curva característica e as curvas características devem satisfazer

$$\frac{d}{dt}x(t) = f'(s(x(t), t)),$$

então as características são retas com equação  $x(t) = f'(s_0) \cdot t + x_0$ , onde  $s_0$  é o valor constante que  $s$  assume nesta característica, Thomas [44].

**Observação 1.3.2.2:** Para ambos os casos linear e não linear, as curvas características são retas, Thomas [44].

**Observação 1.3.2.3:** No caso linear, a inclinação de todas as curvas características são constante e iguais a  $\frac{1}{v}$ . No caso não linear, as inclinações serão  $\frac{1}{f'(s_0)}$  para cada valor de  $s_0$ , isto é, as inclinações serão diferentes. Considera-se então a equação não-linear escalar:

$$s_t + f(s)_x = 0, \quad (1.23)$$

onde  $f(s)$  é uma função não-linear de  $s$ . Assumindo que  $f(s)$  é convexa com  $f''(s) \geq 0$ , para todo  $s$  (ou, igualmente,  $f$  é não convexa com  $f''(s) < 0$ , para todo  $s$ ), Thomas [44].

O modelo mais famoso é a equação Burger's, em que  $f(s) = \frac{1}{2}s^2$ . Então pode-se

escrever a equação (1.23) como:

$$s_t + \left(\frac{1}{2}s^2\right)_x = s_t + s \cdot s_x = 0. \quad (1.24)$$

Note que esta equação é similar a uma equação de convecção (1.15),  $s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0$ , onde  $\bar{v}$  foi substituída por  $s$ . As características então satisfazem

$$\frac{d}{dt}x(t) = s(x(t), t) \quad (1.25)$$

e ao longo de cada característica,  $s(x(t), t)$  é constante, já que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}s(x(t), t) &= \frac{\partial}{\partial t}s(x(t), t) + \frac{\partial}{\partial x}s(x(t), t) \cdot \frac{d}{dt}x(t) \\ &= s_t + s \cdot s_x \\ &= 0. \end{aligned}$$

Além disso, pela equação (1.25), a inclinação  $\frac{d}{dt}x(t)$  também é constante. Assim, as características são linhas retas, determinadas pelos dados iniciais.

Se os dados iniciais são suaves, então estes podem ser usados para determinar a solução  $s(x(t), t)$  para  $t$  suficientemente pequeno, de maneira que as características não se cruzem. Nos **Exemplos 2** e **3** do Apêndice A, serão determinadas as características para o caso não linear.

Na próxima seção será determinado o tempo para o qual as características se interceptam pela primeira vez.

## 1.4 Formação de choque

A solução de uma lei de conservação pode ser suave em todo o domínio ou apenas em parte dele. O surgimento de discontinuidades pode estar relacionado aos dados iniciais descontínuos ou à inclusão de efeitos não lineares na equação ao longo do tempo. Esse efeito é conhecido como a formação de choque, Thomas [44] e Bezerra [6].

Para grandes valores de  $t$  da equação de Burger's (1.24) pode não haver uma solução única. Isso acontece quando as características se interceptam (ou cruzam), uma vez que  $s(x, 0)$  pode ser negativo em qualquer ponto.

O tempo para o qual as características se interceptam primeiro será denotado por  $t = T_b$ , onde o ponto de interseção é denominado como o ponto de quebra (ou ruptura).

Para encontrar o caso geral para  $T_b$ , serão usados os resultados obtidos na Seção 1.3, onde defini-se a seguinte curva característica:

$$x(t) = v(x_0) \cdot t + x_0.$$

Considera-se então, duas curvas características que partem da vizinhança de  $x_0 \in (x_0 - \delta, x_0 + \delta)$ ,  $\forall \delta > 0$ . Então pode-se escrever:

$$\begin{cases} x_1(t) = v(x_0 + \delta) \cdot t + (x_0 + \delta) \\ x_2(t) = v(x_0 - \delta) \cdot t + (x_0 - \delta) \end{cases} \quad (1.26)$$

O choque ocorre quando  $x_1(t)$  é igual a  $x_2(t)$ , ou seja, quando as duas curvas características da equação (1.26) se interceptam. Logo,

$$\begin{aligned} x_1(t) = x_2(t) &\Leftrightarrow & (1.27) \\ v(x_0 + \delta) \cdot t + (x_0 + \delta) &= v(x_0 - \delta) \cdot t + (x_0 - \delta) \Leftrightarrow \\ [v(x_0 + \delta) - v(x_0 - \delta)] \cdot t &= -2 \cdot \delta \Leftrightarrow \\ t &= \frac{-2 \cdot \delta}{[v(x_0 + \delta) - v(x_0 - \delta)]}. \end{aligned}$$

Tomando o limite, em ambos os lados da equação (1.27), quando  $\delta \rightarrow 0$ , tem-se

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} t &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{-2 \cdot \delta}{[v(x_0 + \delta) - v(x_0 - \delta)]} & (1.28) \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{-1}{\frac{[v(x_0 + \delta) - v(x_0 - \delta)]}{2 \cdot \delta}}. \end{aligned}$$

Das diferenças centradas, tem-se que  $v'(x_0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{[v(x_0 + \delta) - v(x_0 - \delta)]}{2 \cdot \delta}$ . Substituindo  $v'(x_0)$  em (1.28) obtém-se:

$$\begin{aligned} t &= -\frac{1}{v'(x_0)} & (1.29) \\ \Rightarrow T_b &= -\frac{1}{\min v'(x_0)}. \end{aligned}$$

No **Exemplo 4** do Apêndice A, será determinado o tempo  $T_b$ , em que há formação de choque.

O resultado desta interseção das características é que nesse ponto a solução terá mais de um valor. Com isso, quando ocorre a formação do choque, não se tem solução clássica ao longo da curva de descontinuidade da EDP.

Por outro lado, se não houver o cruzamento das curvas características e existir regiões do plano  $x-t$  onde essas curvas características não estão definidas, ocorrerá o fenômeno conhecido como *ondas de rarefação*. Quando ocorre a formação do leque de rarefação o problema em questão possui infinitas soluções, Thomas [44].

Com os **Exemplos 6** e **7** do Apêndice A, verifica-se que é possível preencher o espaço sem característica no mínimo de duas maneiras diferentes, Figuras A.7 e A.8.

## 1.5 Problema de Riemann

Segundo Rispoli [34], Riemann no meio do século XIX fez um experimento utilizando um tubo cilíndrico, longo e fino, contendo dois gases separados por uma membrana bem fina, onde esses gases deveriam ter pressões e densidades diferentes de ambos os lados da membrana. Com esse experimento, ele pretendia determinar o movimento dos gases quando a membrana fosse rompida. Este tipo de problema ficou conhecido como Problema de Riemann.

O Problema de Riemann consiste da equação (1.12) em conjunto com a condição inicial  $s(x, 0) = s_0(x)$ ,

$$\begin{cases} s(x, t)_t + f(s(x, t))_x = 0 & , x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ s(x, 0) = s_0(x) & , x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (1.30)$$

onde

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} s_L & \text{se } x < 0 \\ s_R & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (1.31)$$

veja Figura 1.6.

A forma da solução do Problema de Riemann dependerá da relação entre os estados à direita,  $s_R$ , e à esquerda,  $s_L$ , Thomas [44] e Bezerra [6].

$$s(x, t) = s_0(x - \bar{v}t) = \begin{cases} s_L & \text{se } x - \bar{v}t \leq 0 \\ s_R & \text{se } x - \bar{v}t > 0. \end{cases} \quad (1.32)$$

A condição inicial acima (1.31) tem uma descontinuidade em  $x = 0$  que se propaga para o interior do domínio  $x > 0$  percorrendo uma distância  $d = \bar{v}t$  depois de um tempo

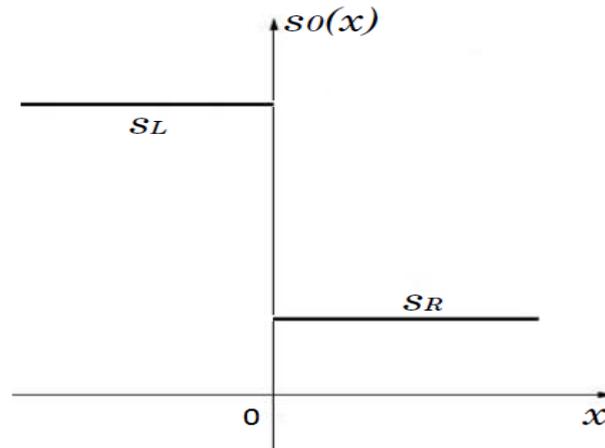


Figura 1.6: Ilustração da condição inicial para o problema de Riemann.

$t$ . Esta curva característica particular  $x = \bar{v}t$  separa as curvas características à esquerda, nas quais a solução tem valor  $s_L$ , daquelas curvas à direita, nas quais a solução tem valor  $s_R$ , veja Figura 1.7.

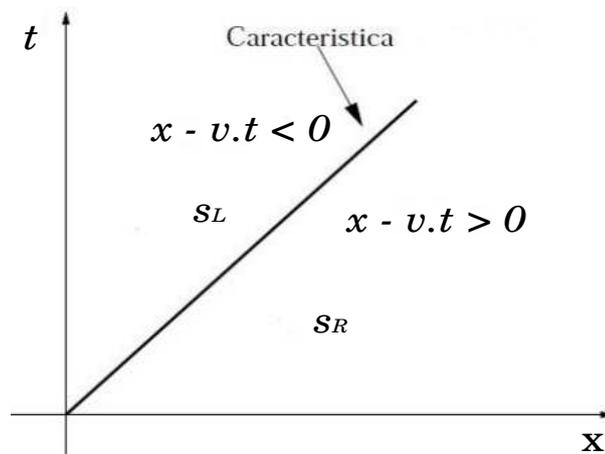


Figura 1.7: Solução do problema de Riemann no plano  $x-t$  com  $\bar{v} > 0$ .

Observe que a função (1.32) não pode ser solução de (1.16) em todo o plano  $x-t$ , por não ser diferenciável ao longo da reta  $x = \bar{v}t$ . A uma função da forma de (1.32) que satisfaz a equação diferencial em parte do domínio chama-se de solução fraca de (1.16). E uma função que satisfaz (1.16) em todo o domínio chama-se de solução clássica.

A solução é procurada em todo o domínio e não apenas em parte dele, logo a análise matemática do choque formado envolve a generalização da solução da lei de conservação ao longo da descontinuidade. Surge então a teoria das soluções fracas, Thomas [44] e Bezerra [6].

## 1.6 Soluções Fracas

Uma maneira natural de definir uma solução geral da equação (1.12) que não requer diferenciabilidade, é voltar para a forma integral da lei de conservação, e dizer que  $s(x, t)$  é uma solução generalizada, se

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

é satisfeita para todos  $x_1, x_2, t_1$  e  $t_2$ , Thomas [44].

Existe uma outra abordagem que resulta em uma formulação integral, que muitas vezes é mais conveniente para trabalhar. Esta é uma técnica matemática que pode ser aplicada de modo mais geral para reescrever uma equação diferencial numa forma em que não se exige tanta diferenciabilidade para se definir uma solução, Thomas [44].

A idéia básica é multiplicar a EDP por uma função teste  $\phi$  suave (diferenciável), integrar uma ou mais vezes ao longo de algum domínio, em geral o domínio da função teste  $\phi$ , e depois usar a integração por partes para passar as derivadas da função  $s$  para a função de teste suave  $\phi$ . O resultado é uma equação onde se exige menos diferenciabilidade em  $s$ .

Considerando a equação (1.12) com a seguinte condição inicial,

$$\begin{cases} s(x, t)_t + f(s(x, t))_x = 0 & , x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ s(x, 0) = s_0(x) & , x \in \mathbb{R} \end{cases} . \quad (1.33)$$

Definindo o conjunto das funções testes,  $C_0^1$ , como

$$C_0^1 = \{ \phi \in C^1 : [(x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty) : \phi(x, t) \neq 0] \subset [a, b] \times [0, T] \text{ para algum } a, b \text{ e } T \} .$$

Assim,  $\phi$  é continuamente diferenciável e anula-se fora do retângulo  $[a, b] \times [0, T]$ , no plano  $x-t$ . Pode-se dizer que  $\phi$  tem *suporte compacto* em  $\mathbb{R} \times [0, \infty)$ . O suporte de  $\phi$ , pode ser escrito por  $\text{supp}(\phi)$ , é o conjunto sobre o qual  $\phi \neq 0$ . Multiplicando a EDP (1.12) por  $\phi(x, t) \in C_0^1$  e depois integrar no espaço  $x$ , de  $-\infty$  a  $\infty$ , e no tempo  $t$ , de 0 a  $\infty$ , obtem-se:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s_t + f(s)_x] \phi(x, t) dx dt = 0. \quad (1.34)$$

Como  $\phi \in C_0^1$  e tem suporte compacto, segue que

$$\int_0^T \int_a^b [s_t + f(s)_x] \phi(x, t) dx dt = 0,$$

$$\Rightarrow \int_a^b \int_0^T s_t \phi(x, t) dt dx + \int_0^T \int_a^b f(s)_x \phi(x, t) dx dt = 0.$$

Integrando por partes a equação acima obtém-se,

$$0 = \int_a^b \left\{ [s\phi(x, t)]_{t=0}^{t=T} - \int_0^T s\phi_t(x, t) dt \right\} dx \tag{1.35}$$

$$+ \int_0^T \left\{ [f(s)\phi(x, t)]_{x=a}^{x=b} - \int_a^b f(s)\phi_x(x, t) dx \right\} dt,$$

$$\Rightarrow 0 = \int_a^b s(x, T)\phi(x, T) dx - \int_a^b s(x, 0)\phi(x, 0) dx - \int_a^b \int_0^T s\phi_t dt dx$$

$$+ \int_0^T f(s)\phi(b, t) dt - \int_0^T f(s)\phi(a, t) dt - \int_0^T \int_a^b f(s)\phi_x dx dt.$$

Uma vez que  $\phi(x, T) = \phi(a, t) = \phi(b, t) = 0$ , a equação (1.34) pode ser escrita como:

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s\phi_t + f(s)\phi_x] dx dt + \int_{-\infty}^\infty s_0\phi_0 dx = 0, \tag{1.36}$$

onde  $s_0 = s(x, 0)$  é a condição inicial e  $\phi_0 = \phi(x, 0)$ . Note que o suporte de  $\phi$  está contido em  $[a, b] \times [0, T]$  e é definido em  $\mathbb{R} \times [0, \infty)$  logo,  $\phi(x, 0)$  não precisa ser zero.

Com isso, prova-se que se  $s$  é uma solução clássica para o PVI (1.33) então  $s$  satisfaz (1.36) para todo  $\phi \in C_0^1$ , Thomas [44] e Bezerra [6].

No Apêndice A, serão apresentados os **Exemplos 5, 6 e 7**, onde uma determinada função é a solução fraca de um problema de valor inicial.

## 1.7 Soluções Descontínuas

No presente trabalho há o interesse em soluções  $s = s(x, t)$  que sejam suaves, com excessão de uma ou mais curvas no espaço  $x-t$  com saltos de descontinuidades. Dessa forma, tem-se:

**Proposição 1.7.1:** Seja  $C$  uma curva suave no plano  $x-t$  ( $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ ),  $x_C = x_C(t)$ , na qual  $s$ , uma solução fraca para o problema de valor inicial

$$\begin{cases} s_t + f(s)_x = 0, & x \in \mathbb{R} \text{ e } t > 0 \\ s(x, 0) = s_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \tag{1.37}$$

tem um salto de descontinuidade. Seja  $P(x_0, t_0)$ ,  $t_0 > 0$ , um ponto em  $C$ ,  $v = \frac{d}{dt}x_C(t_0)$ , e  $s_L, s_R$  os valores de  $s$  à esquerda e à direita de  $P$ , respectivamente. Então:

$$(s_L - s_R) \frac{d}{dt}x_C = f(s_L) - f(s_R), \tag{1.38}$$

Thomas [44].

**Demonstração:** Seja  $B$  uma bola centrada em  $P$  que não contém o ponto  $(x_C(0), 0)$ . Seja  $B_1$  e  $B_2$  as partes de  $B$  em cada lado da curva  $C$ , veja Figura 1.8, Thomas [44].

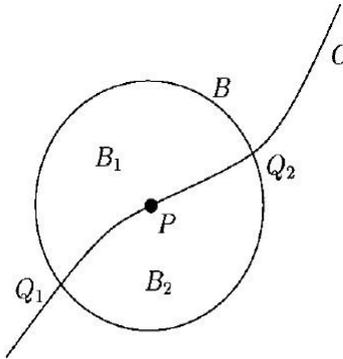


Figura 1.8: Esboço da solução, Thomas [44].

Como  $s$  é uma solução fraca para o problema (1.37),  $s$  deve satisfazer a equação (1.36),

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0\phi_0 dx = 0,$$

para todo  $\phi \in C_0^1$ . Para uma função  $\phi$  com suporte em  $B$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt \\ &= \int \int_{B_1} [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt + \int \int_{B_2} [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt, \end{aligned} \tag{1.39}$$

onde o segundo termo ( $t = 0$ ) da equação (1.36) não foi incluído porque  $\phi_0 = 0$  em  $B$ . O fato de  $s$  ser uma solução fraca e clássica em  $B_1$  e em  $B_2$  implica que  $s$  é uma solução clássica no interior de ambos  $B_1$  e  $B_2$  (isto é,  $s$  satisfaz  $s_t + f(s)_x = 0$  no interior de  $B_1$  e de  $B_2$ ), Thomas [44].

Aplicando-se o Teorema de Green, veja Guidorizzi [20], a equação (1.39) pode ser escrita como

$$0 = \int \int_{\partial B_1} \phi [-sdx + f(s) dt] + \int \int_{\partial B_2} \phi [-sdx + f(s) dt]. \tag{1.40}$$

Se considerarmos:

$$s_L(t) = \lim_{\substack{(x,t) \rightarrow 0 \\ (x,t) \in B_1}} s(x,t)$$

$$s_R(t) = \lim_{\substack{(x,t) \rightarrow 0 \\ (x,t) \in B_2}} s(x,t)$$

lembrando que  $x = x_C$  em  $C$ , e usando o fato de que  $\phi_0 = 0$  em  $\partial B$  (o contorno de  $B_1$  e  $B_2$ ), pode-se reescrever a equação (1.40) como

$$0 = \int_{Q_1}^{Q_2} \phi [-s_L dx + f(s_L) dt] - \int_{Q_1}^{Q_2} \phi [-s_R dx + f(s_R) dt], \quad (1.41)$$

onde o sinal negativo na frente da segunda integral é devido a integral de linha ao redor de  $B_2$  na equação (1.40) ser na direção oposta da primeira integral. Como  $dx = x'_C(t)dt$ , pode-se escrever a equação (1.41) como:

$$0 = \int_{Q_1}^{Q_2} \phi \left[ -(s_L - s_R) \frac{dx_C}{dt} + (f(s_L) - f(s_R)) \right] dt.$$

Como  $\phi$  é uma função arbitrária (em  $C_0^1$ ), obtem-se:

$$(s_L - s_R) \frac{d}{dt} x_C = (f(s_L) - f(s_R))$$

para cada ponto em  $C$ .

Chama-se  $v = \frac{d}{dt} x_C$  de velocidade de propagação da descontinuidade. Se  $[\cdot]$  for definido como salto em  $C$  (em geral,  $[f] = f_L - f_R$ ), pode-se escrever a equação (1.38) como:

$$\begin{aligned} v \cdot [s] &= [f(s)], \\ \Rightarrow v &= \frac{[f(s)]}{[s]}. \end{aligned} \quad (1.42)$$

A equação (1.42) é chamada de condição de salto ou condição de Rankine-Hugoniot (R-H). Nota-se que a condição de salto Rankine-Hugoniot (R-H) é uma condição que as soluções fracas para um problema de valor inicial tal como (1.37) devem satisfazer sobre um salto de descontinuidade. Esta condição não escolhe a solução fraca que se procura, com isso, as soluções fracas que não são físicas também satisfazem a condição de salto, Thomas [44] e Bezerra [6].

Nos **Exemplos 8 e 9** do Apêndice A, serão apresentadas as condições de salto para

equação de Burger's que podem ser utilizadas para obter informações da solução.

## 1.8 Condição de Entropia

Nas duas ultimas seções, verificou-se que as soluções fracas para leis de conservação podem conter descontinuidades que podem surgir da descontinuidade na condição inicial ou da interseção de curvas características, Thomas [44].

Neste trabalho pretende-se calcular numericamente as soluções (incluindo as descontinuidades) para leis de conservação. Uma maneira de escolher a solução fisicamente correta, é decidir pela solução viscosa. Esta solução é definida pelas funções  $s^D(x, t)$ , quando  $D \rightarrow 0$ . Portanto,  $s^D(x, t)$  é solução da equação viscosa:

$$s_t^D + f(s^D)_x = D s_{xx}^D, \quad (1.43)$$

com condição inicial  $s^D(x, 0) = s_0^D(x)$ , Thomas [44].

Existem várias razões para escolher a solução viscosa como a correta. Uma delas é que as equações que estamos resolvendo modelam situações físicas que incluem algum tipo de dissipação. Uma das características mais importante da solução viscosa é o seguinte resultado, Thomas [44].

**Proposição 1.8.1:** *Se uma solução viscosa existe, ela é uma solução fraca.*

**Demonstração:** Considerando a equação viscosa (1.43). Multiplica-se esta equação por uma função teste pertencente a  $C_0^2$  (onde  $\phi$  e  $\phi_x$  são nulas fora de algum retângulo fechado  $[a, b] \times [0, T]$ ) e realizando a integração como na equação (1.36), vista na Seção 1.6, com mais duas integrações por partes no termo viscoso, obtém-se:

$$-\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s^D \phi_t + f(s^D) \phi_x] dx dt - \int_{-\infty}^\infty s_0^D \phi_0 dx = D \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s^D \phi_{xx}] dx dt.$$

Fazendo  $D \rightarrow 0$ , considerando por hipótese  $s^D \rightarrow s$  e  $f(s^D) \rightarrow f(s)$ , verifica-se que a solução viscosa é uma solução fraca para equação (1.12)

$$s(x, t)_t + f(s(x, t))_x = 0.$$

Para situações físicas estáveis, sabemos que, em geral, devemos ter solução única. Se o modelo matemático não tem uma solução única, devem ser adicionadas algumas informações físicas para determinar a solução fisicamente correta, Thomas [44].

### 1.8.1 Condição de Entropia I - Função de Fluxo Convexa

A solução para a equação (1.36), contendo uma descontinuidade propagando com velocidade  $v$  é dita satisfazer a *Condição de Entropia I* se:

$$f'(s_L) > v > f'(s_R),$$

onde  $s_L$  e  $s_R$  são os valores da solução  $s$  à esquerda e à direita da descontinuidade, respectivamente, Thomas [44].

**Observação 1.8.1.1:** Para a equação de Burgers, qualquer salto de  $s_L$  para  $s_R$  com  $s_L > s_R$  que satisfaz a condição de salto ou condição de Rankine-Hugoniot (R-H) deverá satisfazer a *Condição de Entropia I*. Além disso, qualquer salto de  $s_L$  para  $s_R$  com  $s_L < s_R$  que satisfaz a condição de salto ou condição de Rankine-Hugoniot (R-H) não satisfaz a *Condição de Entropia I*, ver a demonstração em Thomas [44].

**Observação 1.8.1.2:** De uma maneira geral, para qualquer função de fluxo  $f(s)$  convexa, ou seja,  $f''(s) \geq 0$  ou  $f'(s)$  crescente, para todo  $s$ , qualquer salto de  $s_L$  para  $s_R$  com  $s_L > s_R$  que satisfaz a condição de salto, satisfaz a *Condição de Entropia I*, e qualquer salto de  $s_L$  para  $s_R$  com  $s_L < s_R$  que satisfaz a condição de salto, não satisfaz a *Condição de Entropia I*, Thomas [44].

**Observação 1.8.1.3:** A principal dificuldade das leis de conservação não é a existência de soluções, mas a unicidade delas. Segundo demonstrado por Smoller [38], para uma função de fluxo  $f(s)$  convexa de um *PVI* do tipo (1.30)

$$\begin{cases} s(x, t)_t + f(s(x, t))_x = 0 & , x \in \mathbb{R}, t > 0 \\ s(x, 0) = s_0(x) & , x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (1.44)$$

a solução  $s$  satisfaz a *Condição de Entropia I* sobre os saltos. Com isso, a solução  $s$  é a única solução para o *PVI* (1.44) que satisfaz a *Condição de Entropia I* e é uma solução viscosa para este *PVI*, Thomas [44].

### 1.8.2 Condição de Entropia Inc - Função de Fluxo Não Convexa

Existem exemplos de leis de conservação em que a função de fluxo  $f(s)$  não é convexa, ou seja,  $f''(s) < 0$  ou  $f'(s)$  decrescente, para todo  $s$ . Um exemplo é a equação de Buckley-Leverett que abordaremos mais a frente na Seção 1.10.

A solução para equação (1.36),

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0\phi_0 dx = 0,$$

com a função de fluxo  $f(s)$  não convexa, contendo uma descontinuidade, satisfaz a *Condição de Entropia Inc* se:

$$\frac{f(s_L) - f(s)}{s_L - s} \geq \frac{f(s_R) - f(s_L)}{s_R - s_L} \quad (1.45)$$

para todo  $s$  entre  $s_L$  e  $s_R$ , onde  $s_L$  e  $s_R$  são os valores da solução  $s$  à esquerda e à direita da descontinuidade, respectivamente, Thomas [44].

Como no caso em que  $f(s)$  é convexa, no caso não convexo, a solução  $s$  é única, sendo uma solução viscosa se  $s$  satisfaz a condição de entropia definida pela equação (1.45) sobre todos os saltos, Thomas [44].

Finalizando esta seção, segundo Thomas [44], se a função de fluxo  $f(s)$  é convexa, a solução do Problema de Riemann é um choque ou uma onda de rarefação. Quando  $f(s)$  não é convexa, a solução pode ser uma combinação de choques e rarefações.

## 1.9 Difusão

Robert Boyle (1627-1691) [35] foi o primeiro a reportar que um sólido (zinco) penetrou em uma moeda de cobre e formou um material dourado (latão = liga cobre-zinco). Porém, o fenômeno da difusão em sólidos foi formalmente comunicado em 1896 por Sir Roberts-Austen, estudando a difusão do ouro em chumbo, Barr [5].

### 1.9.1 Transporte de massa e estados da matéria

Da mesma forma que a corrente elétrica está associada ao transporte de cargas elétricas através de um fio condutor quando este está sujeito a uma diferença de potencial elétrico, a *difusão* está associada ao transporte de massa que ocorre em um sistema quando nele existe diferença de potencial, por exemplo, termodinâmico (que pode ser proporcional à diferença de concentração química, quando o sistema está em equilíbrio térmico).

Governada por diferentes mecanismos e manifestando-se com magnitudes bastante distintas, a difusão ocorre no interior de sólidos, líquidos e gases. Uma gota de tinta que se dilui na água, é um exemplo de difusão no interior de um líquido.

### 1.9.2 Fluxo de difusão

Considere que o fluxo do líquido ou gás do tubo, citado na Seção 1.2, não está escoando e possui velocidade zero. Então, de acordo com a equação de convecção (1.16),

$$s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0, \quad (1.46)$$

$s_t = 0$  e a condição inicial  $s(x, 0)_t = 0$ , ou seja, não sofrerá mudanças com o tempo. Todavia, se  $s(x, 0)_t$  não é constante no espaço, então haverá uma tendência de mudança devido a difusão molecular.

As moléculas individualmente se agitam e pulam em diferentes direções, ou seja, vai existir um fluxo de movimento da região onde a concentração ou densidade é maior para as regiões onde ela é menor.

Este fluxo é determinado segundo definição do cientista francês J.B.J. Fourier, em 1882 [30], a "*Lei de Fourier da condução de calor*" (que define a difusão de calor, em grande parte, da mesma forma que a difusão da concentração de produtos químicos), que diz que o fluxo difusivo é simplesmente proporcional ao gradiente de concentração de  $s$ , que no espaço unidimensional é simplesmente a derivada  $s_x$ . Com isso,

$$\text{fluxo difusivo de } s = f(s_x) = -D \cdot s_x, \quad (1.47)$$

onde  $D > 0$  é o *coeficiente de difusão* que depende da velocidades das partículas. O sinal negativo em (1.47) é necessária uma vez que o fluxo difusivo ocorre da maior para a menor concentração, ou seja, no sentido oposto ao fluxo positivo devido a convecção.

Substituindo (1.47) na equação (1.12),  $s_t(x, t) + f(s(x, t))_x = 0$ , obtem-se:

$$s_t = D \cdot s_{xx}, \quad (1.48)$$

que é conhecida como a *equação da difusão* para  $f(s_x)$  como definido em (1.47), Leveque [27].

## 1.10 Escoamento Bifásico

Como foi visto na Seção 1.8, se a função de fluxo  $f(s)$  é convexa, a solução do Problema de Riemann é um choque ou uma onda de rarefação. Quando  $f(s)$  não é convexa, a solução pode ser uma combinação de choques e rarefações. Um exemplo deste fenômeno, onde  $f(s)$  não é convexa, é a equação de Buckley-Leverett. Esta equação modela um escoamento

bifásico em um meio poroso, Leveque [28].

Uma aplicação clássica do escoamento bifásico em um meio poroso é a simulação de reservatório de petróleo. Em um primeiro estágio, chamado de recuperação primária, o reservatório é perfurado permitindo que o óleo saia do reservatório apenas devido à grande diferença de pressão. O fator de recuperação de petróleo durante a fase de recuperação primária é tipicamente 5% a 15% do volume total do reservatório, Leveque [28].

Após este estágio, existe ainda uma quantidade muito grande de óleo no meio poroso. O método padrão de recuperação secundária é injetar água dentro do reservatório através de poços de injeção. Esta água tem o objetivo de empurrar o óleo para fora do reservatório através dos poços de produção. A Figura 1.10 ilustra um escoamento envolve duas fases, o óleo e a água. A equação de Buckley-Leverett é um modelo simples deste tipo de escoamento. Em uma dimensão espacial, a equação é:

$$s_t + f(s)_x = 0 \quad (1.49)$$

com

$$f(s) = \frac{s^2}{s^2 + a \cdot (1 - s)^2} \quad (1.50)$$

onde  $a < 1$  é uma constante. Aqui  $s$  representa a saturação da água, isto é,  $0 < s < 1$ .

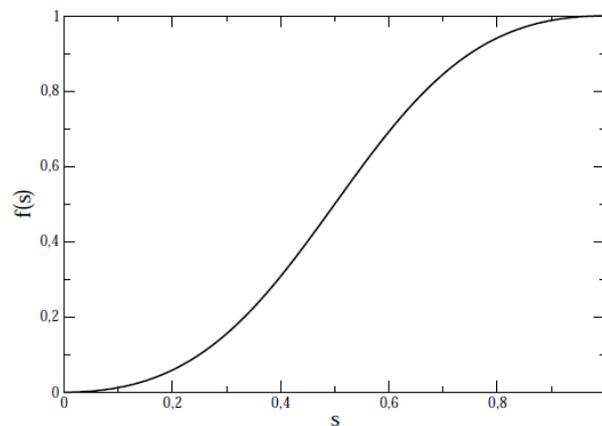


Figura 1.9: Gráfico da função de fluxo  $f(s)$  no problema de escoamento bifásico.

Considerando um meio poroso saturado, isto é, completamente tomado de fluido, a solução  $s$  da equação (1.49)-(1.50) nos diz a saturação do óleo  $s_0 = 1 - s$ .

Note que a função de fluxo (1.50) é não convexa com um único ponto de inflexão. A Figura 1.11 mostra a velocidade característica

$$f'(s) = \frac{2 \cdot a \cdot s \cdot (1 - s)}{[s^2 + a \cdot (1 - s)^2]^2} \quad (1.51)$$

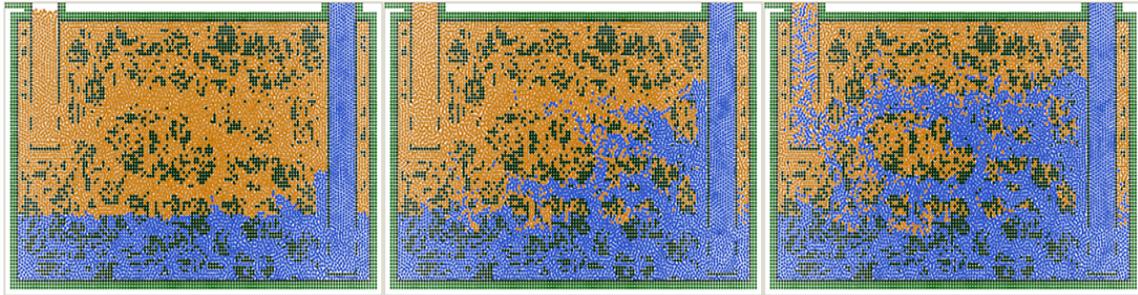


Figura 1.10: Escoamento bifásico em meio poroso, Tanque de Provas Numérico da USP [1].

que tem um máximo no ponto de inflexão.

Considere o Problema de Riemann com estados iniciais  $s_L = 1$  e  $s_R = 0$ , onde  $L$  indica esquerda e  $R$  indica direita. Seguindo as características, pode-se construir a “*triple valued solution*”, isto é, uma solução com três valores em cada ponto, Leveque [28]. Note que as velocidades características  $f'(s)$ , são dadas pela equação (1.51). Desta forma, a solução no tempo  $t$  é apenas o gráfico de “ $t \cdot f'(s)$ ” rotacionado, veja Figura 1.12.

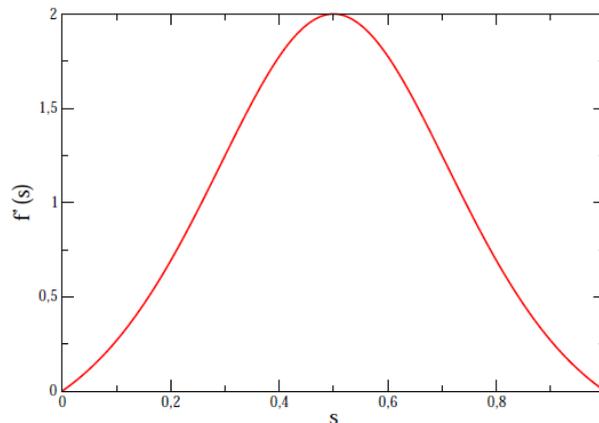


Figura 1.11: Gráfico da derivada da função de fluxo  $f(s)$  no problema de escoamento bifásico.

Como o problema a ser modelado é físico, espera-se encontrar uma solução fisicamente correta. Para achar o valor e a posição do choque, usa-se a regra da igualdade de área. Esta regra diz que as regiões **A** e **B** da Figura 1.13 devem ser iguais para garantir a conservação de massa.

Passa-se agora a descrever de forma reduzida a aplicação da regra da igualdade de área que pode ser vista com mais detalhes em Whitham [46] e Guinot [21].

Como foi afirmado acima, existe apenas um valor de  $x$  para cada valor de  $s$  entre de  $s_L$  e  $s_R$ . Portanto, a solução é melhor representada na forma de  $x = x(s)$ . Nesta forma,

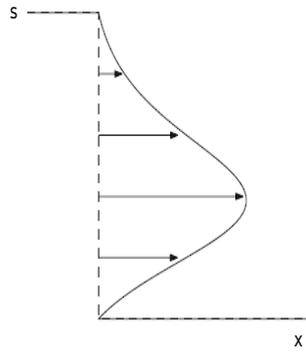


Figura 1.12: *Triple valued solution*, do problema unidimensional de escoamento bifásico.

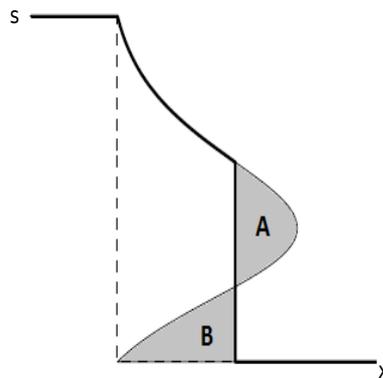


Figura 1.13: Interseção de área da posição do choque.

o Problema de Riemann é

$$x(s, 0) = x_0 , \text{ para } s_R < s < s_L.$$

Depois de um pequeno intervalo de tempo  $\Delta t$ , um ponto do perfil de saturação  $s$  se desloca a uma distancia  $\Delta X = f'(s) \cdot \Delta t$ . Portanto, aplicando diretamente o método das características tem-se a seguinte solução para qualquer tempo  $t > 0$ .

$$x(s, t) = x_0 + f'(s) \cdot \Delta t , \text{ para } s_R < s < s_L.$$

O perfil resultante desta solução é mostrado na Figura 1.14 abaixo pela linha vermelha.

A regra da igualdade de área consiste em substituir a parte da solução que assume três valores por um choque vertical conectado a parte de cima da curva com o estado direito,  $s_R$ , do Problema de Riemann, veja Figura 1.14.

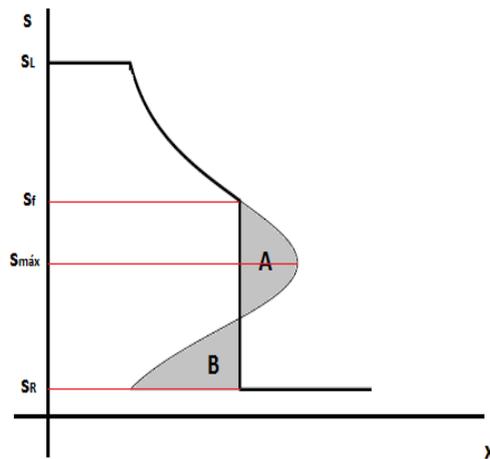


Figura 1.14: Representação do choque vertical conectado a parte de cima da curva com o estado direito,  $s_R$ .

A solução correta portanto é:

$$s(x, t = 0) = \begin{cases} x_0 + f'(s_f) \cdot t, & s_R < s \leq s_f \\ x_0 + f'(s) \cdot t, & s_f \leq s < s_L \end{cases},$$

onde  $s_f$  é a saturação do choque, devendo ser encontrada pela regra da igualdade de área, por ser desconhecida. Esta regra da igualdade diz que a área à esquerda do novo perfil com choque, **B**, deve ser igual a área à esquerda do perfil original, **A**. Uma vez que os dois perfis representam a mesma solução para  $s_R < s < s_L$ , é suficiente impor a igualdade das áreas para partes inferiores dos perfis, isto é, para  $s_R < s < s_f$ . A igualdade das áreas é escrita abaixo:

$$\int_{s_R}^{s_f} f'(s_f) \cdot t \cdot ds \text{ (com choque)} = \int_{s_R}^{s_f} f'(s) \cdot t \cdot ds \text{ (original)}. \quad (1.52)$$

A integral no lado esquerdo da equação (1.52) representa a área, **B**, à esquerda do perfil com o choque, enquanto a integral à direita representa a área, **A**, à esquerda do perfil original. Como  $t$  é independente da variável de integração, pode ser colocado para fora da integral e ser cancelado em ambos os lados da equação (1.52). Note também que,  $f'(s_f) =$  constante. Desta forma, a equação (1.52) simplifica-se:

$$(s_f - s_R) \cdot f'(s_f) = \int_{s_R}^{s_f} f'(s) ds.$$

Usando o Teorema Fundamental do Cálculo, veja Guidorizzi [20], obtem-se

$$(s_f - s_R) \cdot f'(s_f) = f(s_f) - f(s_R).$$

Quando  $s_R = 0$ , obtem-se a expressão

$$s_f = \frac{f(s_f)}{f'(s_f)} \quad (1.53)$$

Usa-se o método de Newton para encontrar o valor de  $s_f$ , Leveque [28]. A velocidade do choque para este caso, pode ser encontrada usando a condição de Rankine-Hugoniot

$$v = \frac{f(s_f) - f(s_R)}{s_f - s_R} = \frac{f(s_f)}{s_f}$$

A interpretação física da solução do perfil com o choque  $s_f$  diz que assim que a água é bombeada para dentro do reservatório, ela desloca imediatamente uma porção  $s_f$  de óleo. Após do choque, existe uma mistura de água e óleo com cada vez menos óleo a medida que o tempo  $t$  evolui, e no poço de produção (digamos  $x = 1$ ) obtem-se petróleo.

No Capítulo 3 serão apresentados dois exemplos para aproximação da solução da equação de Buckley-Leverett, com uma condição inicial descontínua. O primeiro exemplo com a função de fluxo  $f(s)$  igual a citada acima (1.50),

$$f(s) = \frac{s^2}{s^2 + (1-s)^2} \quad (1.54)$$

e o segundo exemplo com a função de fluxo  $f(s)$  dada por

$$f(s) = \left( -\frac{s^2 \cdot (1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right). \quad (1.55)$$

## Capítulo 2

### Esquemas centrais em $1D$

A tarefa de um esquema numérico é transformar as derivadas de uma ou mais equações diferenciais em um conjunto de equações algébricas que contenham a variável dependente, ou incógnita, Schneider [39].

Ao se fazer a aproximação numérica da equação diferencial, espera-se obter o valor da variável dependente em um número finito de pontos no domínio, ou seja, de forma discreta. À medida que o número de pontos aumenta, é de se esperar que o valor numérico obtido aproxime-se do valor exato da variável. O número de pontos do domínio deve ser escolhido de modo a haver um equilíbrio entre o erro numérico tolerado e o esforço computacional permitido, Schneider [39].

Neste capítulo, serão apresentadas as idéias básicas do Método de Volumes Finitos (MVF) em  $1D$ , para obter soluções numéricas aproximadas de leis de conservação lineares e não lineares através do Algoritmo *REA* (*Reconstruct, Evolve, Average*), proposto por Godunov [19].

Vamos iniciar o estudo pelo Método de Diferenças Finitas Lax-Friedrichs (Lax [25] e Friedrichs [17]), publicado em 1954, que é um esquema central de primeira ordem, e base de todos os outros esquemas centrais. Serão apresentadas duas abordagens diferentes com o objetivo de reduzir o erro numérico do método Lax-Friedrichs. A primeira, proposta por Rusanov [36] em 1961, baseada na idéia de calcular a velocidade de propagação da onda em cada Problema de Riemann e a segunda, por Lax e Wendroff [26] em 1960, trabalhando com a idéia de se obter um esquema Lax-Friedrichs de segunda ordem. Em seguida, o método de Lax e Friedrichs, originalmente de diferenças finitas, é reescrito como MVF segundo a abordagem do Algoritmo *REA*. Em 1990, Nessyahu e Tadmor [31], apresentaram o Método de Volumes Finitos Nessyahu-Tadmor, um esquema numérico de

segunda ordem como a extensão do Método de Diferenças Finitas Lax-Friedrichs, a partir do Algoritmo *REA*. Em seguida, no ano de 2000, Kurganov e Tadmor [23] apresentaram o Método de Volumes Finitos Kurganov-Tadmor, originalmente derivado do Método de Volumes Finitos Nessyahu-Tadmor, a partir da substituição, idealizada por Rusanov [36], de uma velocidade de propagação global, empregada nos métodos Lax-Friedrichs e Nessyahu-Tadmor, por uma velocidade calculada localmente em cada Problema de Riemann.

## 2.1 Introdução

As leis de conservação, tratadas neste trabalho, serão escritas como *Equações Diferenciais Hiperbólicas* do tipo (1.11) :

$$\frac{\partial}{\partial t}s(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}f(s(x, t)) = 0, \quad (2.1)$$

e posteriormente, como *Equações Diferenciais Hiperbólicas-Parabólicas*

$$\frac{\partial}{\partial t}s(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}f(s(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(s(x, t)) \frac{\partial s(x, t)}{\partial x} \right], \quad (2.2)$$

sujeitas à condição inicial,

$$s(x, 0) = s_0(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (2.3)$$

onde  $s = s(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$  é uma quantidade conservada tal como densidade, massa e energia,  $f(s)$  é chamada função de fluxo e o  $D(s(x, t))$  é coeficiente de difusão.

Na Seção 2.9 será aproximada a solução da equação de convecção-difusão utilizando o esquema numérico de Kurganov-Tadmor com Método de Diferenças Finitas e Médias Harmônicas para a Difusão. Finalmente, na Seção 2.10 será apresentado um método numérico iterativo para resolver uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) em cada volume de controle, o Método de Runge-Kutta.

## 2.2 Método dos Volumes Finitos

O Método dos Volumes Finitos (MVF) tem recebido uma especial atenção da comunidade científica devido à sua propriedade conservativa e principalmente pela qualidade dos resultados alcançados, os quais serão discutidos nesta seção.

Durante a solução iterativa de problemas do tipo (2.1)-(2.3) e (2.2)-(2.3), as equações

que governam estes fenômenos físicos são discretizadas e resolvidas. A discretização pode ser resumida como a transformação de uma equação diferencial parcial em uma equação algébrica. Neste trabalho será utilizado o Método dos Volumes Finitos (MVF) em uma dimensão espacial.

O MVF é baseado na realização de balanços de massa, de quantidade de movimento e/ou de energia sobre um volume de controle determinado, onde os fluxos das variáveis em questão atravessam as faces do volume. O MVF é usado com bastante sucesso para aproximar soluções de uma grande variedade de leis de conservação do tipo (1.7),

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} s(x, t) dx = f(s(x_1, t)) - f(s(x_2, t)), \quad (2.4)$$

como na Mecânica dos Fluidos e em muitas outras áreas de engenharia onde a teoria é governada por sistemas conservativos escritos na forma integral sobre um volume de controle. Segundo Bortoli [10] todos os métodos de discretização utilizados para resolver escoamentos tendem para os seguintes objetivos:

- solução de escoamentos em geometrias complexas;
- conservação das propriedades do fluido localmente;
- redução do tempo computacional utilizado.

Em uma dimensão, o MVF é caracterizado por subdividir o domínio espacial em intervalos de tamanhos finitos não sobrepostos, que são os volumes de controle, e calcular uma aproximação da lei de conservação na forma integral, do tipo (2.4), em cada um destes volumes de controle, onde em cada passo de tempo atualiza-se estes valores usando aproximações das integrais do fluxo  $f(s)$ .

### 2.2.1 Discretização do espaço

Para resolver numericamente uma lei de conservação serão utilizados esquemas que são derivados da discretização da equação (2.4) sobre uma região do plano  $x-t$  em um conjunto de pontos separados entre si por uma distância  $\Delta X$  na direção  $x$  e  $\Delta t$  na direção  $t$ . A esse conjunto de pontos chama-se malha.

Em MVF, deve-se primeiro dividir o domínio computacional  $\Psi \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$  em uma coleção de volumes de controle  $I$ , com dimensão finita (volumes finitos), ou seja, criar

uma malha computacional cujo domínio será denotado por  $\mathcal{I}$ , com  $I \in \mathcal{I}$ .

$$\bigcup_{I \in \mathcal{I}} \bar{I} = \bar{\Psi},$$

onde  $\bar{I} = \text{Int}(I) \cup \text{Front}(I)$  e  $\bar{\Psi} = \text{Int}(\Psi) \cup \text{Front}(\Psi)$ .

Para dois volumes de controle distintos  $I_i$  e  $I_j$ , a interseção é no máximo um ponto, quando o domínio está contido em uma dimensão espacial, ou um lado de um retângulo, por exemplo, quando o domínio está contido em um espaço de duas dimensões.

A malha conterà células do tipo  $I_j := (x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$  de largura fixa  $\Delta X = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$  e um passo de tempo  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ . Veja a Figura 2.1. Chama-se esta malha de original ou não deslocada e define-se os seus pontos  $(x_j, t^n)$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned} x_j &= j \cdot \Delta X, & j &= \dots, -1, 0, 1, \dots \\ t^n &= n \cdot \Delta t, & n &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

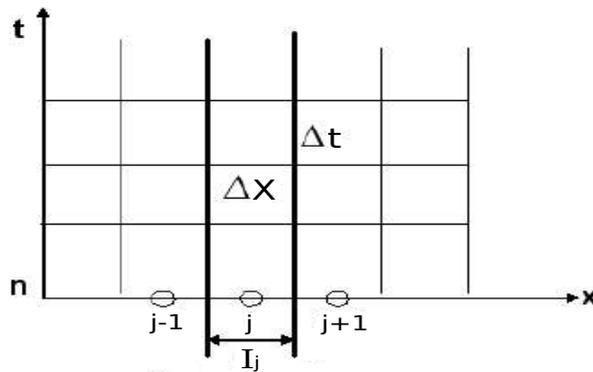


Figura 2.1: Malha computacional.

Para definir a malha deslocada, basta fazer um deslocamento de  $\Delta X/2$  para a direita nas células da malha original. Desta forma, as células serão do tipo  $I_{j+1/2} := (x_j, x_{j+1})$  cujo centro é  $x_{j+1/2} = x_j + \Delta X/2$ , ponto de fronteira das células da malha original.

### 2.2.2 Discretizando a equação

A solução  $s_0(x)$  será aproximada por uma função polinomial  $\tilde{S}(x, 0)$  constante por partes em cada célula  $I_j$ , para os esquemas de primeira ordem,

$$s_0(x) = s(x, 0) = \tilde{S}(x, 0) \approx \sum_j \tilde{S}_j(x) \cdot \chi_j(x) = \sum_j \bar{S}_j \cdot \chi_j(x), \quad \forall x \in I_j,$$

onde

$$\bar{S}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta X} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t^n) dx,$$

$\chi_j(x) = 1$  se  $x \in I_j$  e  $\chi_j(x) = 0$ , caso contrário. Veja a Figura 2.2. Para os esquemas de

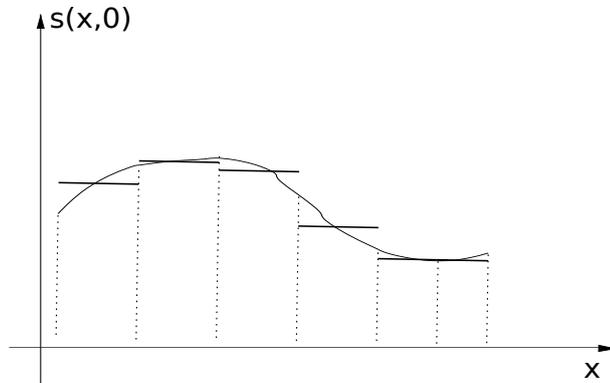


Figura 2.2: Aproximação constante por partes.

segunda ordem, serão utilizadas aproximações de segunda ordem lineares por partes do tipo **MUSCL** (*Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws*), Ribeiro [33], reconstruídas a partir de valores constantes por partes, através de uma expressão da forma

$$s(x, 0) \approx \sum_j \tilde{S}_j(x) \cdot \chi_j(x) = \sum_j [\bar{S}_j + (S_x)_j \cdot (x - x_j)] \cdot \chi_j(x), \quad x \in I_j, \quad (2.5)$$

onde  $\chi_j(x) = 1$  se  $x \in I_j$  e  $\chi_j(x) = 0$ , caso contrário. Veja a Figura 2.3. Os valores  $(S_x)_j$  são aproximações das derivadas  $\frac{\partial}{\partial x} s(x_j, 0)$ . Sua precisão de segunda ordem é garantida se a derivada numérica satisfaz a condição

$$(S_x)_j = \left. \frac{\partial s}{\partial x} \right|_{x=x_j, t=0} + \mathcal{O}(\Delta X).$$

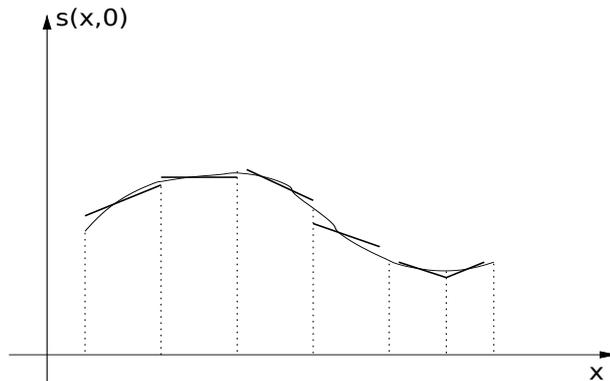


Figura 2.3: Aproximação linear por partes.

Um conceito fundamental ligado ao MVF para resolver numericamente equações do tipo (2.1)-(2.3) e (2.2)-(2.3), é o de média em célula. Para cada  $I_j \in \mathcal{I}$  obtém-se:

$$\bar{S}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta X} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t^n) dx, \quad (2.6)$$

que representa o valor médio da solução  $s(x, t^n)$ , onde  $x \in I_j$ .

### 2.2.3 Lei de conservação na forma integral

Existem duas boas razões para considerar a forma integral das leis de conservação, Bezerra [6]:

- A derivação das equações modelo é baseada em princípios de conservação físicos, expressos como integrais em volumes de controle;
- A formulação integral exige menor regularidade da solução, expandindo a classe de soluções possíveis, podendo incluir soluções descontínuas.

Escrevendo a lei de conservação (2.1) na forma integral, onde a taxa de variação da quantidade total de uma substância com massa específica  $s(x, t)$  em um volume de controle fixo  $I_j$  é igual ao fluxo total da substância através da fronteira de  $I_j := (x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$ . Assim, obtém-se:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t) dx = f(s(x_{j-1/2}, t)) - f(s(x_{j+1/2}, t)). \quad (2.7)$$

Integrando no tempo de  $t^n$  a  $t^{n+1}$  a equação (2.7) fica:

$$\begin{aligned} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t^n) dx &= \\ &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1/2}, t)) dt. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Com isso, dividindo toda a equação (2.8) por  $\Delta X$ , pode-se reescrever as integrais espaciais em termos do conceito de médias em células (2.6),

$$\bar{S}_j^{n+1} = \bar{S}_j^n + \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1/2}, t)) dt \right]. \quad (2.9)$$

As integrais do fluxo não podem ser calculadas de forma exata, uma vez que os valores de  $s(x_{j\pm 1/2}, t)$  variam com o tempo ao longo das fronteiras  $x = x_{j\pm 1/2}$  de cada célula, pois

são soluções do Problema de Riemann

$$s(x, t^n) = \begin{cases} \bar{S}_j^n, & x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2} \\ \bar{S}_{j+1}^n, & x_{j+1/2} < x < x_{j+3/2} \end{cases}.$$

Porém, pode-se aproximar estas integrais numericamente, estimando um valor médio  $F_{j\pm 1/2}^n$ , tal que

$$\begin{cases} F_{j-1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1/2}, t)) dt \\ F_{j+1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1/2}, t)) dt \end{cases}. \quad (2.10)$$

Para problemas hiperbólicos, como a informação se propaga com velocidade finita, é razoável supor que os valores de  $F_{j-1/2}^n$  e  $F_{j+1/2}^n$  dependam apenas das médias das células vizinhas,  $\bar{S}_{j-1}^n$ ,  $\bar{S}_j^n$  e  $\bar{S}_j^n$ ,  $\bar{S}_{j+1}^n$ , respectivamente. Logo,

$$F_{j-1/2}^n = \mathcal{F}(\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n) \quad \text{e} \quad F_{j+1/2}^n = \mathcal{F}(\bar{S}_j^n, \bar{S}_{j+1}^n),$$

onde  $\mathcal{F}$  é um fluxo numérico entre as respectivas células.

O esquema explícito totalmente discreto para a lei de conservação (2.1),

$$s_t(x, t) + f(s(x, t))_x = 0,$$

é dado por:

$$\begin{aligned} \bar{S}_j^{n+1} &= \bar{S}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta X} [F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n] \\ &= \bar{S}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta X} [\mathcal{F}(\bar{S}_j^n, \bar{S}_{j+1}^n) - \mathcal{F}(\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n)]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Este é um método explícito totalmente discreto (discreto no espaço e no tempo). Em um método explícito, o valor da variável dependente na etapa seguinte é calculado usando os valores das etapas anteriores.

A Figura 2.4 ilustra este método explícito totalmente discreto, onde as funções de fluxo numérico, por exemplo,  $F_{j+1/2}^n = \mathcal{F}(\bar{S}_j^n, \bar{S}_{j+1}^n)$  são obtidas da solução de problemas de Riemann locais,

$$s(x, t^n) = \begin{cases} \bar{S}_j^n, & x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2} \\ \bar{S}_{j+1}^n, & x_{j+1/2} < x < x_{j+3/2} \end{cases}.$$

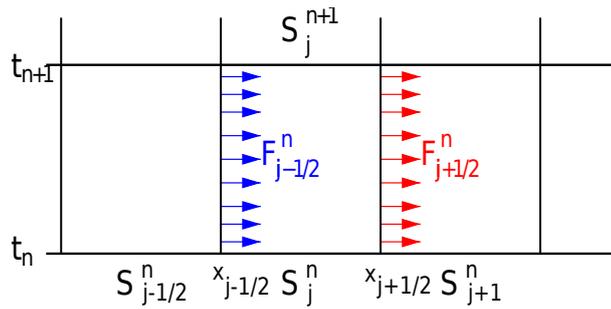


Figura 2.4: Ilustração da lei de conservação (2.7), mostrando o balanço dos fluxos numéricos de saída  $F_{j+1/2}^n$  e entrada  $F_{j-1/2}^n$  na célula original  $I_j$ .

### 2.3 Método de Godunov - Algoritmo *REA*

O método de Godunov [19] é um método conservativo da forma (2.11), que exige a solução exata de uma sequência de problemas de Riemann para o cálculo do fluxo numérico. O problema é que esta solução exata a cada passo de tempo, na prática, tem um alto custo computacional, devido a necessidade da utilização de pacotes de *Riemann Solvers*. Veja a Figura 2.5.

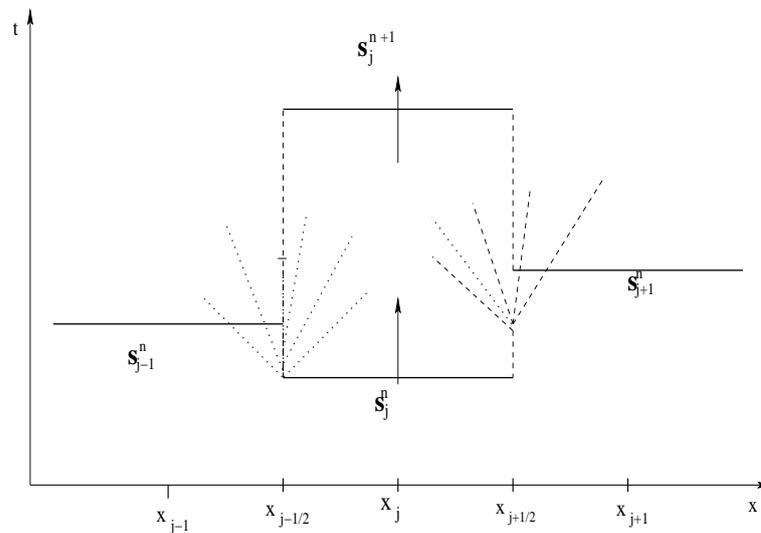


Figura 2.5: Esquema Godunov explícito totalmente discreto.

Para evitar a solução de problemas de Riemann locais, nestes esquemas abaixo, desloca-se a malha em  $\Delta X/2$ , obtendo uma solução em malha deslocada. O novo volume de controle então será  $[x_j, x_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ .

Uma base para a construção de diversos esquemas numéricos do tipo de Godunov para leis de conservação é o Algoritmo *REA* (*Reconstruct, Evolve, Average*), Godunov [19]. Esta abordagem consiste basicamente nas seguintes etapas:

**Reconstruct (reconstrução):** Aproxima-se a solução no tempo  $t^n$ ,  $s(x, t^n)$ , por uma função polinomial  $\tilde{S}^n(x, t^n)$  por partes, em cada célula  $I_j$  no tempo  $t^n$ .

**Evolve (evolução):** Evolui a Equação Hiperbólica (2.1) de forma exata ou aproximada com os dados iniciais estabelecidos no passo anterior e obtém  $s(x, t^{n+1})$  com os dados iniciais do passo **R**.

**Average (cálculo da média):** Finalmente calcula-se as novas médias em célula  $\bar{S}_j^{n+1}$  sobre cada célula fazendo

$$\bar{S}_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta X} \int_{I_j} s(x, t^{n+1}) dx.$$

Repete-se então, sucessivamente este algoritmo até o instante de tempo final. O Algoritmo *REA* será aplicado na construção dos Métodos Lax-Friedrichs [17], Nessyahu-Tadmor [31] e Kurganov-Tadmor [23].

## 2.4 Condição de *CFL* (*Courant, Friedrichs e Lewy*)

Nesta seção será apresentada a condição de estabilidade de *CFL* utilizada neste trabalho pelos métodos Lax-Friedrichs [17], Nessyahu-Tadmor [31] e Kurganov-Tadmor [23]. Richard *Courant*, Kurt *Friedrichs* e Hans *Lewy* em um artigo escrito em 1928 [12], com uma tradução em inglês em 1967 [13], usaram o método de diferenças finitas como uma ferramenta analítica para provar a existência de soluções de determinadas equações diferenciais parciais.

A ideia básica do trabalho deles é definir uma sequência de soluções aproximadas, provar que elas convergem quando a malha é refinada, e então mostrar que a função limite deve satisfazer a equação diferencial parcial, obtendo a existência de uma solução. No momento em que Courant, Friedrichs e Lewy estavam provando a convergência dessas sequências eles identificaram que uma condição necessária para estabilidade é que o domínio de dependência do esquema numérico deve conter o domínio de dependência da equação diferencial parcial quando se diminui os passos  $\Delta t$  e  $\Delta X$ , Leveque [27].

Segundo Leveque [27], a condição de *CFL* exige que a distância percorrida durante um intervalo de tempo, deve ser menor do que uma célula, ou seja,  $|f'(s) \cdot \Delta t| \leq \Delta X$ . A quantidade  $\alpha_{CFL} = \max \left| f'(s) \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right|$  é conhecido como número de *Courant* ou número *CFL*. Uma condição necessária para que um método numérico explícito, como o ilustrado na Figura 2.5, seja estável é que o número de *CFL* seja no máximo 1. Neste trabalho, o

número de  $CFL$  será definido por:

$$\alpha_{CFL} = \max \left| f'(s) \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right| \leq 1. \quad (2.12)$$

onde  $\Delta t_{cfl}$  é um passo de tempo restrito à condição  $CFL$ .

## 2.5 Método de Lax-Friedrichs (LxF)

Reconhecido como protótipo dos esquemas centrais, o Método de Diferenças Finitas (MDF) de Lax-Friedrichs é um esquema central canônico de primeira ordem que possui estrutura simples e de fácil implementação, Lax-Friedrichs [17].

O método LxF tem a grande limitação de ser um método de primeira ordem com erro de truncamento  $\mathcal{O}((\Delta X)^2/\Delta t)$ , bastante difusivo, principalmente quando é necessário diminuir o passo de tempo, Leveque [27].

Na sua forma clássica o método explícito de Lax-Friedrichs pode ser escrito como

$$\bar{S}_j^{n+1} = \frac{\bar{S}_{j-1}^n + \bar{S}_{j+1}^n}{2} - \frac{\Delta t_{cfl}}{2\Delta X} [f(\bar{S}_{j+1}^n) - f(\bar{S}_{j-1}^n)] \quad (2.13)$$

e com fluxo numérico definido por

$$\mathcal{F}(\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n) = \frac{1}{2} [f(\bar{S}_{j-1}^n) + f(\bar{S}_j^n)] - \frac{\Delta X}{2\Delta t_{cfl}} (\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n), \quad (2.14)$$

Na Figura 2.6 pode-se observar que Lax e Friedrichs fizeram uma estimativa muito grande da velocidade de propagação da onda, um valor global maior que o máximo de todas as inclinações características.

$$\frac{\Delta X}{\Delta t_{cfl}} \geq \max_s |f'(s)|.$$

Como a velocidade global é maior ou igual a todas as velocidades características, segue que o passo de tempo fica muito reduzido. Devido à precisão de  $\mathcal{O}((\Delta X)^2/\Delta t)$ , segue que quanto menor o passo de tempo, maior o erro numérico introduzido.

Duas abordagens diferentes foram implementadas com o objetivo de reduzir o erro numérico do método Lax-Friedrichs [17]. A primeira, proposta por Rusanov [36], baseou-se na idéia de calcular a velocidade de propagação da onda em cada Problema de Riemann. Na segunda, Lax e Wendroff [26] trabalharam na idéia de se obter um esquema Lax-Friedrichs [17] de segunda ordem. A seguir, serão apresentadas estas duas abordagens.

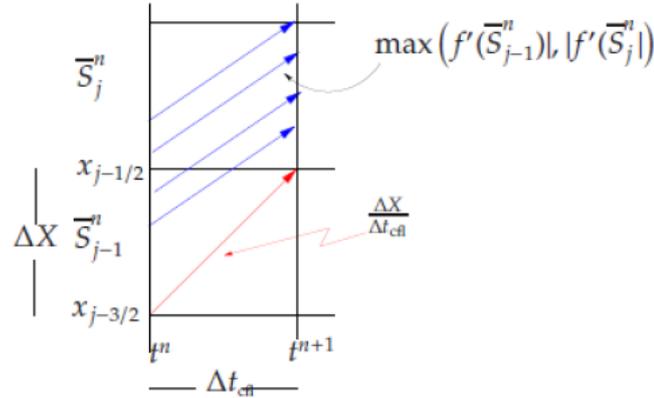


Figura 2.6: Estimativa da velocidade de propagação global.

### 2.5.1 Método de Rusanov

Rusanov [36] propôs uma pequena modificação no método de Lax-Friedrichs, conseguindo reduzir o erro numérico, agora da ordem de  $\mathcal{O}(\Delta X)$ , que não cresce quando se torna necessário reduzir o passo de tempo.

Supondo, por simplicidade, que a função de fluxo é convexa e considerando o Problema de Riemann

$$s(x, t^n) = \begin{cases} \bar{S}_{j-1}^n, & x_{j-3/2} < x < x_{j-1/2} \\ \bar{S}_j^n, & x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2} \end{cases},$$

segue da condição de  $CFL$  (2.12) que:

$$\frac{\Delta X}{\Delta t_{cfl}} \geq \max\{|f'(\bar{S}_{j-1}^n)|, |f'(\bar{S}_j^n)|\} = a_{j-1/2}^n. \quad (2.15)$$

Então, Rusanov substituiu a velocidade de propagação global  $\Delta X/\Delta t_{cfl}$  no fluxo numérico (2.14), do método de Lax-Friedrichs, pela velocidade local  $a_{j-1/2}^n$  estimada em cada Problema de Riemann, obtendo o novo fluxo numérico,

$$\mathcal{F}(\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n) = \frac{1}{2} [f(\bar{S}_{j-1}^n) + f(\bar{S}_j^n)] - \frac{a_{j-1/2}^n}{2} (\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n).$$

Por esta razão, o método de Rusanov também é conhecido como método de Lax-Friedrichs Local ou LLF, do inglês "*Local Lax-Friedrichs*". Este novo esquema pode ser escrito na forma semi-discreta, onde somente a variável espacial é discretizada, Kurganov e Tadmor [23].

### 2.5.2 Método de Lax-Wendroff

O método de Lax-Wendroff [26] para a equação (1.15),

$$s_t + \bar{v} \cdot s_x = 0,$$

é baseado na expansão da série de Taylor no tempo  $t$ :

$$s(x, t_{n+1}) = s(x, t_n) + \Delta t \cdot s_t(x, t_n) + \frac{1}{2} \cdot (\Delta t)^2 \cdot s_{tt}(x, t_n) + \dots \quad (2.16)$$

A partir da equação (1.15) tem-se que:

$$s_t = -\bar{v} \cdot s_x.$$

Diferenciando em relação ao tempo tem-se:

$$s_{tt} = -\bar{v} \cdot s_{xt} = \bar{v}^2 \cdot s_{xx},$$

onde

$$s_{xt} = s_{tx} = (-\bar{v} \cdot s_x)_x.$$

Usando estas expressões para  $s_t$  e  $s_{tt}$  em (2.16) obtém-se:

$$s(x, t_{n+1}) = s(x, t_n) - \Delta t \cdot \bar{v} \cdot s_x(x, t_n) + \frac{1}{2} \cdot (\Delta t)^2 \cdot \bar{v}^2 \cdot s_{xx}(x, t_n) + \dots \quad (2.17)$$

Mantendo apenas os três primeiros termos do lado direito e substituindo as derivadas espaciais por aproximações de diferenças finitas centradas, obtém-se um método explícito de segunda ordem, chamado método de Lax-Wendroff [26]:

$$S_j^{n+1} = S_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta X} \cdot \bar{v} \cdot (S_{j+1}^n - S_{j-1}^n) + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{\Delta X} \right)^2 \cdot \bar{v}^2 \cdot (S_{j+1}^n - 2S_j^n + S_{j-1}^n). \quad (2.18)$$

Esta derivação do método é baseado em uma interpretação de diferenças finitas, sendo o valor pontual  $s(x_j, t_n)$  aproximado por  $\bar{S}_j^n$ . No entanto, pode-se reinterpretar o esquema (2.18) como um MVF

$$\begin{aligned} S_j^{n+1} &= S_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta X} \left[ \bar{v} \frac{1}{2} (S_{j+1}^n - S_{j-1}^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta X} \bar{v}^2 (S_{j+1}^n - 2S_j^n + S_{j-1}^n) \right] \\ &= S_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta X} \left[ \left( \bar{v} \frac{1}{2} S_{j+1}^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta X} \bar{v}^2 (S_{j+1}^n - S_j^n) \right) - \left( \bar{v} \frac{1}{2} S_{j-1}^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta X} \bar{v}^2 (S_j^n - S_{j-1}^n) \right) \right] \\ &\Rightarrow S_j^{n+1} = S_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta X} \left[ F_{j+\frac{1}{2}}^n - F_{j-\frac{1}{2}}^n \right], \end{aligned}$$

com a função de fluxo definida como:

$$\begin{cases} F_{j+\frac{1}{2}}^n = \bar{v} \frac{1}{2} S_{j+1}^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta X} \bar{v}^2 (S_{j+1}^n - S_j^n) \\ F_{j-\frac{1}{2}}^n = \bar{v} \frac{1}{2} S_{j-1}^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta X} \bar{v}^2 (S_j^n - S_{j-1}^n) \end{cases} \quad (2.19)$$

Note que o fluxo (2.19) pode ser considerado como um fluxo médio com adição de um fluxo difusivo. Observe que para obter o método explícito de segunda ordem Lax-Wendroff (2.18), combina-se os três primeiros termos da série de Taylor (2.17), cujo erro dominante pode ser expressado pela equação

$$s_{ttt} = -\bar{v}^3 \cdot s_{xxx}$$

Segundo Anderson [3], a solução obtida por um esquema de diferenças finitas possui erros dissipativos se o termo principal do erro local de truncamento possui ordem par. Se este erro possui um termo principal com ordem ímpar, então o esquema passa a ter erros dispersivos. Os erros dispersivos normalmente produzem oscilações nos resultados junto a ondas íngremes, o que pode provocar instabilidade numérica. Com o intuito de corrigir esta falha, utiliza-se normalmente limitadores de fluxo ou uma viscosidade artificial.

Como neste esquema numérico o erro possui um termo principal com ordem ímpar, este esquema de segunda ordem, produz oscilações espúrias na presença de discontinuidades, sendo necessário adicionar uma difusão numérica (ou viscosidade artificial) para eliminar essas oscilações, Leveque [28].

## 2.6 Lax-Friedrichs (LxF) - Algoritmo *REA*

Diante da falha do método Lax-Wendroff [26], Tadmor [31] teve a ideia de fazer um novo tipo de extensão do método Lax-Friedrichs [17] de segunda ordem, mas agora usando um Lax-Friedrichs reformulado para MVF.

Reescrevendo o método Lax-Friedrichs aplicando o Algoritmo *REA* obtem-se:

**Passo R (reconstrução):** Em um esquema de primeira ordem, aproxima-se a solução no tempo  $t^n$ ,  $s(x, t^n)$ , por uma função polinomial  $\tilde{S}^n(x, t^n)$  constante por partes,

$$s(x, t^n) = \sum_j \tilde{S}_j^n(x) \cdot \chi_j(x) = \sum_j \bar{S}_j^n \cdot \chi_j(x), \quad \forall x \in I_j,$$

onde  $\chi_j(x) = 1$  se  $x \in I_j$  e  $\chi_j(x) = 0$ , caso contrário.

É importante ressaltar que esta reconstrução respeita a conservação de massa, isto é,

$$\frac{1}{\Delta X} \int_{I_j} \tilde{S}_j^n(x) dx = \bar{S}_j^n.$$

**Passo E (evolução):** Deseja-se encontrar a solução  $s(x, t^{n+1})$  no futuro em cada célula  $I_j$ . Para isso, integra-se a lei de conservação (2.1),

$$s_t(x, t) + f(s(x, t))_x = 0,$$

sobre o volume de controle  $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$ .

Após o cálculo das integrais espaciais, divide-se toda a equação por  $\Delta X$  e obtém-se a nova média em célula no futuro:

$$\bar{S}_j^{n+1} = \bar{S}_j^n + \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1/2}, t)) dt \right]. \quad (2.20)$$

A Figura 2.7 mostra a construção da solução  $\bar{S}_j^{n+1}$ .

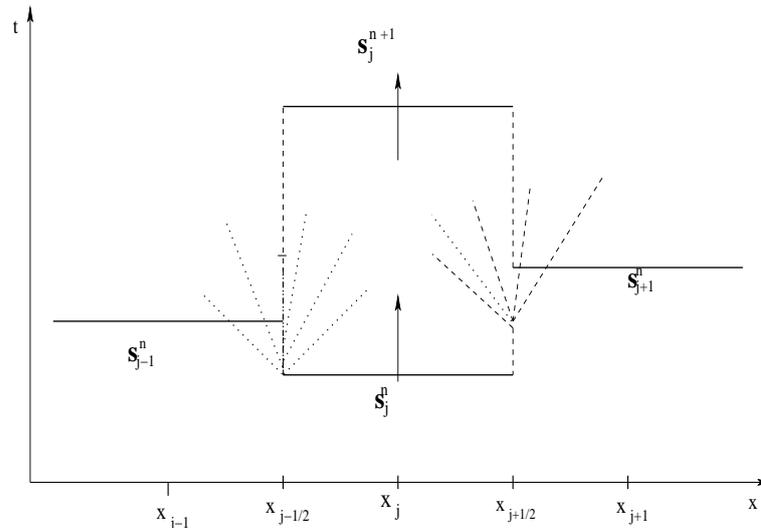
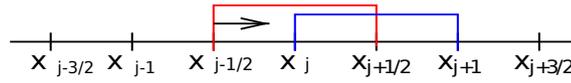


Figura 2.7: Esquema LxF em malha não deslocada.

O conhecimento de  $s(x_{j-1/2}, t)$  e  $s(x_{j+1/2}, t)$ , definido em (2.20) exige a solução numérica de um Problema de Riemann. Para evitar sua solução, desloca-se a malha em  $\Delta X/2$ , obtendo uma solução em malha deslocada sobre um novo volume de controle  $[x_j, x_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$ . Veja a Figura 2.8.

Repete-se os passos da evolução como na equação (2.20) com um novo volume de controle e um novo passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ , sujeito à condição *CFL* em malha deslocada,

$$\frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \cdot \max_s |f'(s)| \leq \frac{1}{2}, \quad (2.21)$$


 Figura 2.8: Deslocamento da malha original em  $\Delta X/2$ .

chega-se ao esquema de Lax-Friedrichs em malha deslocada:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Delta X} \int_{x_j}^{x_{j+1}} s(x, t^{n+1}) dx &= \frac{1}{\Delta X} \int_{x_j}^{x_{j+1}} s(x, t^n) dx + \frac{1}{\Delta X} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1/2}, t)) dt \\
 &\quad - \frac{1}{\Delta X} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1/2}, t)) dt \\
 &= \frac{1}{\Delta X} \int_{x_j}^{x_{j+1}} s(x, t^n) dx + \frac{1}{\Delta X} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\bar{S}_j^n) dt \\
 &\quad - \frac{1}{\Delta X} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(\bar{S}_{j+1}^n) dt.
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Da média em célula (2.6),

$$\bar{S}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta X} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} s(x, t^n) dx,$$

pode-se escrever a equação (2.22) como:

$$\bar{S}_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2} [\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n] + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} [f(\bar{S}_j^n) - f(\bar{S}_{j+1}^n)].$$

A Figura 2.9 ilustra a construção da solução  $\bar{S}_{j+1/2}^{n+1}$ .

**Passo A (projeção ou cálculo da média):** Com as soluções em malha deslocada, obtém-se as soluções aproximadas  $\bar{S}_j^{n+1}$  na malha original. A solução  $s(x, t^{n+1})$  é aproximada por uma função polinomial por partes,

$$s(x, t^{n+1}) = \sum_j \tilde{S}_{j+1/2}^{n+1}(x) \cdot \chi_{j+1/2}(x).$$

onde  $\chi_{j+1/2}(x) = 1$  se  $x \in I_{j+1/2}$  e  $\chi_{j+1/2}(x) = 0$ , caso contrário. Como o método de LxF é de primeira ordem, usa-se a função polinomial constante em cada célula

$$\tilde{S}_{j+1/2}^{n+1}(x) = \bar{S}_{j+1/2}^{n+1}.$$

Logo, a solução aproximada  $\bar{S}_j^{n+1}$ , no tempo  $t^{n+1}$ , projetada na malha original será dada

por

$$\begin{aligned} \bar{S}_j^{n+1} &= \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1/2}}^{x_j} \bar{S}_{j-1/2}^{n+1} dx + \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} \bar{S}_{j+1/2}^{n+1} dx \right] \\ &= \frac{\bar{S}_{j-1/2}^{n+1} + \bar{S}_{j+1/2}^{n+1}}{2} \\ &= \frac{1}{4} (\bar{S}_{j-1}^n + 2\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n) + \frac{\Delta t_{cfl}}{2\Delta X} [f(\bar{S}_{j+1}^n) - f(\bar{S}_{j-1}^n)]. \end{aligned}$$

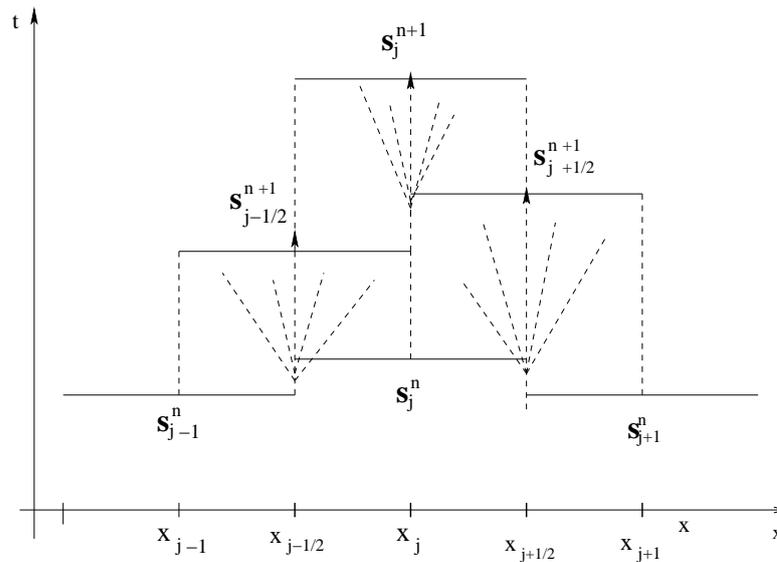


Figura 2.9: Esquema LxF em malha deslocada.

Seguindo o Algoritmo *REA*, a extensão do método LxF a esquemas de segunda ordem como os MVF Nessyahu-Tadmor [31] e Kurganov-Tadmor [23] se torna bastante simples e natural, prevenindo que oscilações não físicas apareçam na presença de descontinuidades ou valores altos dos gradientes das soluções. Consideremos dois esquemas de segunda ordem, que serão apresentadas em seguida, são não oscilatórios, conservativos e de fácil implementação.

## 2.7 Método de Nessyahu-Tadmor (NT)

Uma alternativa para reduzir a excessiva dissipação numérica do esquema LxF, de ordem  $\mathcal{O}((\Delta X)^2/\Delta t)$ , é o emprego de esquemas de alta ordem, tal como o desenvolvido por Nessyahu e Tadmor [31], em 1990, onde as aproximações de primeira ordem constantes por partes do esquema LxF são substituídas por aproximações de segunda ordem lineares por partes reconstruídas a partir de valores constantes, através de uma expressão da forma,

$$\tilde{S}_j^n(x) \approx \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n \cdot (x - x_j),$$

Do esquema numérico LxF em malha deslocada, Figura 2.9, constrói-se o esquema numérico NT, com o volume de controle definido por

$$\bigcup_{i=j, j+1} I_i \times [t^n, t^{n+1}]. \quad (2.23)$$

Pode-se escrever  $s(x, t + \Delta t)$ , em termos de sucessivas soluções de Problemas de Riemann (*Generalized Riemann Problems*), sem mútuas interseções, Nessyahu e Tadmor [31]. Veja a Figura 2.10.

$$s(x, t + \Delta t) = GR(x, t + \Delta t; L_j(x, t), L_{j+1}(x, t)), \quad x_j < x < x_{j+1}.$$

Seguindo os passos do Algoritmo *REA*:

**Passo R (reconstrução):** Aproxima-se a solução no tempo  $t^n$  usando funções polinomiais lineares por partes,

$$s(x, t^n) \approx \sum_j \tilde{S}_j^n(x) \cdot \chi_j(x) = \sum_j \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n (x - x_j) \cdot \chi_j(x), \quad x \in I_j, \quad (2.24)$$

onde  $\chi_j(x) = 1$  se  $x \in I_j$  e  $\chi_j(x) = 0$ , caso contrário. Aqui, os valores  $(S_x)_j^n$  são aproximações das derivadas  $\frac{\partial}{\partial x} s(x_j, t)$ .

A escolha da derivada numérica é uma das etapas mais importantes na implementação dos métodos discutidos neste trabalho, porque ela vai determinar a ordem de precisão do método bem como garantir a propriedade não oscilatória do mesmo, Ribeiro [33]. Para garantir uma precisão de segunda ordem, o vetor de derivadas numéricas  $(S_x)_j^n$  deve satisfazer a condição:

$$(S_x)_j^n = s_x(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\Delta X). \quad (2.25)$$

De forma análoga, as derivadas numéricas  $(f_x)_j^n$  devem satisfazer a condição:

$$(f_x)_j^n = f(s(x_j, t^n))_x + \mathcal{O}(\Delta X). \quad (2.26)$$

Segundo Ribeiro [33], a família de derivadas discretas parametrizadas pelo parâmetro  $\theta$

com  $1 \leq \theta \leq 2$ , pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} (S_x)_j^n &= \text{MM}\theta \frac{1}{\Delta X} \{\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n, \bar{S}_{j+1}^n\} \\ &:= \text{MM} \left( \theta \frac{\Delta S_{j+1/2}^n}{\Delta X}, \frac{\Delta S_{j-1/2}^n - \Delta S_{j+1/2}^n}{2\Delta X}, \theta \frac{\Delta S_{j-1/2}^n}{\Delta X} \right), \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde  $\Delta S_{j+1/2}^n$  denota a diferença centrada,  $\Delta S_{j+1/2}^n = \bar{S}_{j+1}^n - \bar{S}_j^n$ , e MM representa o limitador não linear MinMod definido por

$$\text{MinMod}(q_1, q_2, \dots, q_n) = \begin{cases} \min_j \{q_j\}, & \text{se } q_j > 0 \quad \forall j, \\ \max_j \{q_j\}, & \text{se } q_j < 0 \quad \forall j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

As derivadas  $(f(S)_x)_j^n$  podem ser calculadas da mesma forma ressaltando que  $\Delta f(S)_{j+1/2}^n := f_{j+1}^n - f_j^n := f(\bar{S}_{j+1}^n) - f(\bar{S}_j^n)$ .

Define-se as derivadas numéricas no futuro em malha deslocada usando o limitador MM:

$$(S_x)_{j-1/2}^{n+1} = \text{MM}(\Delta \bar{S}_j^{n+1}, \Delta \bar{S}_{j-1}^{n+1}), \quad (S_x)_{j+1/2}^{n+1} = \text{MM}(\Delta \bar{S}_j^{n+1}, \Delta \bar{S}_{j+1}^{n+1}), \quad (2.28)$$

onde  $\Delta \bar{S}_i^{n+1} = \bar{S}_{i+1/2}^{n+1} - \bar{S}_{i-1/2}^{n+1}$  para  $i = j-1, j, j+1$ . Um outro exemplo de limitador de inclinação é o UNO, definido em função do limitador MM

$$(S_x)_j^n = \text{MM} \left\{ \Delta S_{j-}^n + \frac{1}{2} \text{MM}(\Delta^2 \bar{S}_{j-1}^n, \Delta^2 \bar{S}_j^n), \Delta S_{j+}^n - \frac{1}{2} \text{MM}(\Delta^2 \bar{S}_j^n, \Delta^2 \bar{S}_{j+1}^n) \right\}.$$

O limitador de inclinação UNO é o menos difusivo, quando comparado ao MM. A sua desvantagem é o uso de um conjunto grande (5 pontos) para o cálculo das derivadas numéricas quando comparado com o conjunto de 3 pontos usado pelo limitador MM, Ribeiro [33].

É importante ressaltar que estas reconstruções lineares respeitam a conservação de massa,

$$\frac{1}{\Delta X} \int_{I_j} \tilde{S}_j^n(x) dx = \bar{S}_j^n. \quad (2.29)$$

**Passo E (evolução):** Deseja-se encontrar as soluções no futuro em cada célula  $I_j$ . Integrando a lei de conservação (2.1),

$$s_t(x, t) + f(s(x, t))_x = 0,$$

sobre cada volume de controle (2.23) e dividindo toda a equação por  $\Delta X$ , obtem-se as novas médias em célula no futuro  $\bar{S}_{j-1/2}^{n+1}$  e  $\bar{S}_{j+1/2}^{n+1}$ . Com isso, pode-se definir:

- $[x_{j-1}, x_j] \times [t^n, t^{n+1}]$  para obter  $\bar{S}_{j-1/2}^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j-1/2}^{n+1} = & \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1}}^{x_{j-1/2}} \tilde{S}_{j-1}^n(x) dx + \int_{x_{j-1/2}}^{x_j} \tilde{S}_j^n(x) dx \right] \\ & - \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_j, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1}, t)) dt \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Aplicando a regra do ponto do meio, pode-se aproximar as integrais temporais:

$$\begin{cases} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_j, t)) dt \approx f(S_j^{n+1/2}) \Delta t \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j-1}, t)) dt \approx f(S_{j-1}^{n+1/2}) \Delta t \end{cases} \quad (2.31)$$

substituindo as equações (2.24) e (2.31) em (2.30) obtem-se:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j-1/2}^{n+1} = & \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1}}^{x_{j-1/2}} \bar{S}_{j-1}^n dx + (S_x)_{j-1}^n \int_{x_{j-1}}^{x_{j-1/2}} (x - x_{j-1}) dx \right] \\ & + \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1/2}}^{x_j} \bar{S}_j^n dx + (S_x)_j^n \int_{x_{j-1/2}}^{x_j} (x - x_j) dx \right] \\ & + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \left[ f(S_{j-1}^{n+1/2}) + f(S_j^{n+1/2}) \right] \end{aligned}$$

então,

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j-1/2}^{n+1} = & \frac{1}{2} (\bar{S}_{j-1}^n + \bar{S}_j^n) + \frac{\Delta X}{8} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_j^n] \\ & + \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \left[ f(S_{j-1}^{n+1/2}) + f(S_j^{n+1/2}) \right]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

- $[x_j, x_{j+1}] \times [t^n, t^{n+1}]$  para obter  $\bar{S}_{j+1/2}^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j+1/2}^{n+1} = & \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} \tilde{S}_j^n(x) dx + \int_{x_{j+1/2}}^{x_{j+1}} \tilde{S}_{j+1}^n(x) dx \right] \\ & - \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_j, t)) dt \right]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Novamente aplicando a regra do ponto do meio, aproxima-se as integrais temporais,

$$\begin{cases} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_{j+1}, t)) dt \approx f(S_{j+1}^{n+1/2}) \Delta t \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(s(x_j, t)) dt \approx f(S_j^{n+1/2}) \Delta t \end{cases} \quad (2.34)$$

substituindo (2.24) e (2.34) em (2.33) obtém-se,

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} \bar{S}_j^n dx + (S_x)_j^n \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} (x - x_j) dx \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j+1/2}}^{x_{j+1}} \bar{S}_{j+1}^n dx + (S_x)_{j+1}^n \int_{x_{j+1/2}}^{x_{j+1}} (x - x_{j+1}) dx \right] \\ &+ \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \left[ f(S_j^{n+1/2}) + f(S_{j+1}^{n+1/2}) \right] \end{aligned}$$

então,

$$\begin{aligned} \bar{S}_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{2}(\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n) + \frac{\Delta X}{8}[(S_x)_j^n - (S_x)_{j+1}^n] \\ &+ \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \left[ f(S_j^{n+1/2}) + f(S_{j+1}^{n+1/2}) \right], \end{aligned} \quad (2.35)$$

onde o valor médio  $S_j^{n+1/2}$  é determinado combinando a série de Taylor no tempo com a equação (2.1),

$$s_t(x, t_n) = -f(s(x, t_n))_x.$$

Logo,

$$\begin{aligned} s(x, t_{n+1/2}) &= s(x, t_n) + \frac{\Delta t_{cfl}}{2} \cdot s_t(x, t_n) + \left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2 \cdot s_{tt}(x, t_n) + \dots \\ &= s(x, t_n) - \frac{\Delta t_{cfl}}{2} \cdot f(s(x, t_n))_x + \mathcal{O}(\Delta t_{cfl}^2). \end{aligned}$$

Com isso,

$$S_j^{n+1/2} = S_j^n - \frac{\Delta t_{cfl}}{2} \cdot (f(S)_x)_j^n,$$

onde o termo  $(f(S)_x)_j^n$  representa um valor aproximado da derivada numérica da função de fluxo  $f(s(x = x_j, t^n))$  em relação à variável  $x$  e satisfaz à condição

$$(f(S)_x)_j^n = \left. \frac{\partial f(s)}{\partial x} \right|_{x=x_j, t=t^n} + \mathcal{O}(\Delta X)$$

para garantir a precisão de segunda ordem do método.

**Passo A (projeção):** Com as soluções em malha deslocada, obtém-se as soluções aproximadas  $\bar{S}_j^{n+1}$  na malha original inclinando as médias no futuro, obtidas em (2.32) e (2.35). Como o método NT é de segunda ordem, novamente usa-se a aproximação linear por partes em cada célula

$$\begin{cases} \tilde{S}_{j-1/2}^{n+1}(x) \approx \bar{S}_{j-1/2}^{n+1} + (S_x)_j^{n+1}(x - x_{j-1/2}) \\ \tilde{S}_{j+1/2}^{n+1}(x) \approx \bar{S}_{j+1/2}^{n+1} + (S_x)_j^{n+1}(x - x_{j+1/2}) \end{cases} \quad (2.36)$$

Projetando  $\bar{S}_j^{n+1}$  na malha original, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \bar{S}_j^{n+1} &= \frac{1}{\Delta X} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} S(x, t^{n+1}) dx \\ &= \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1/2}}^{x_j} \tilde{S}_{j-1/2}^{n+1}(x) dx + \int_{x_j}^{x_{j+1/2}} \tilde{S}_{j+1/2}^{n+1}(x) dx \right]. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Substituindo as reconstruções lineares (2.36) na equação (2.37) obtém-se:

$$\bar{S}_j^{n+1} = \frac{\bar{S}_{j-1/2}^n + \bar{S}_{j+1/2}^n}{2} - \frac{\Delta X}{8} [(S_x)_{j-1/2}^{n+1} - (S_x)_{j+1/2}^{n+1}]. \quad (2.38)$$

E agora, substituindo as equações (2.32) e (2.35) na (2.38) obtém-se a solução média  $\bar{S}_j^{n+1}$ , no tempo  $t^{n+1}$ , projetada na malha original do esquema de segunda ordem totalmente discreto de Nessyahu-Tadmor [31]:

$$\begin{aligned} \bar{S}_j^{n+1} &= \frac{(\bar{S}_{j-1}^n + 2\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n)}{4} + \frac{\Delta X}{16} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_{j+1}^n] \\ &\quad + \frac{\Delta X}{8} [(S_x)_{j-1/2}^{n+1} - (S_x)_{j+1/2}^{n+1}] + \frac{\Delta t_{cfl}}{2\Delta X} [f(S_{j-1}^{n+1/2}) - f(S_{j+1}^{n+1/2})]. \end{aligned} \quad (2.39)$$

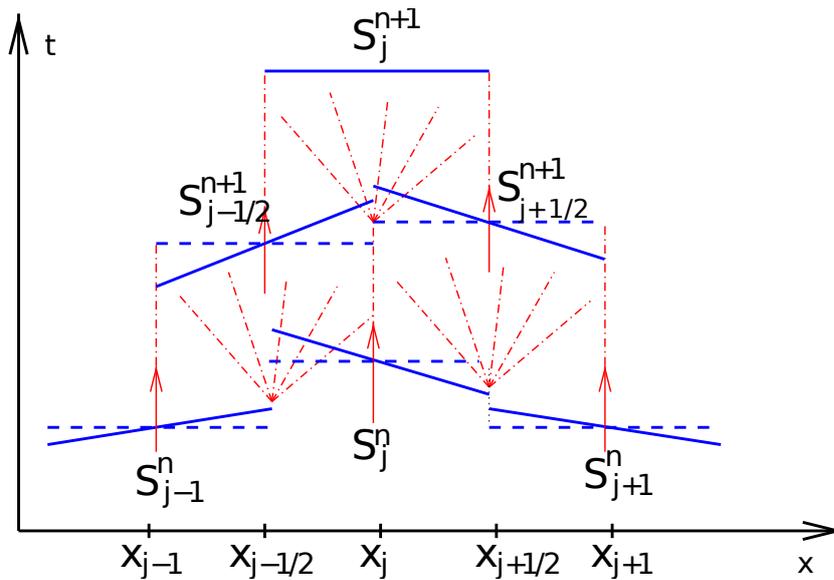


Figura 2.10: Construção do método de Nessyahu e Tadmor [31].

Para finalizar, se subtrair  $\bar{S}_j^n$ , em ambos os lados, e depois dividir toda equação por

$\Delta t_{cfl}$  obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{(\bar{S}_j^{n+1} - \bar{S}_j^n)}{\Delta t_{cfl}} &= \frac{(\bar{S}_{j-1}^n - 2\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n)}{4\Delta t_{cfl}} + \frac{\Delta X}{16\Delta t_{cfl}} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_{j+1}^n] \\ &+ \frac{\Delta X}{8\Delta t_{cfl}} [(S_x)_{j-1/2}^{n+1} - (S_x)_{j+1/2}^{n+1}] \\ &+ \frac{1}{2\Delta X} [f(S_{j-1}^{n+1/2}) - f(S_{j+1}^{n+1/2})]. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Em seguida calcula-se o limite quando  $\Delta t_{cfl} \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \frac{(\bar{S}_j^{n+1} - \bar{S}_j^n)}{\Delta t_{cfl}} &= \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{(\bar{S}_{j-1}^n - 2\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n)}{4\Delta t_{cfl}} \right\} \\ &+ \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{\Delta X}{16\Delta t_{cfl}} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_{j+1}^n] \right\} \\ &+ \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{\Delta X}{8\Delta t_{cfl}} [(S_x)_{j-1/2}^{n+1} - (S_x)_{j+1/2}^{n+1}] \right\} \\ &- \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{2\Delta X} [f(S_{j+1}^{n+1/2}) - f(S_{j-1}^{n+1/2})] \right\}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Analisando a equação (2.41) acima, pode-se verificar que o lado direito diverge quando  $\Delta t_{cfl} \rightarrow 0$ . Logo, o esquema NT não admite formulação semi-discreta.

A seguir, será abordado o esquema apresentado por Kurganov e Tadmor [23], que utiliza uma formulação semi-discreta, com maior precisão das informações sobre as velocidades de propagação nas fronteiras de cada célula.

## 2.8 Método de Kurganov-Tadmor (KT)

Seguindo a abordagem feita na seção 2.7, pode-se escrever o esquema de Kurganov e Tadmor [23] que utiliza uma formulação semi-discreta, onde somente o espaço é discretizado, com um erro numérico da ordem de  $\mathcal{O}((\Delta X)^3)$ .

Sem a excessiva dissipação presente nos métodos LxF e NT, quando passos de tempo pequenos são empregados, no esquema numérico KT passa-se a calcular o passo de evolução não sobre as células da malha (de dimensão fixa), mas sim sobre novas células, de tamanho proporcional ao passo de tempo em cada volume de controle, Kurganov e Tadmor [23].

Idealizada por Rusanov [36], a substituição da velocidade de propagação global fixa

$\Delta X/\Delta t_{cfl}$ , empregada nos métodos LxF e NT, por uma velocidade  $a_{j\pm 1/2}^n$  calculada localmente em cada Problema de Riemann, garante esta mudança. Da condição de  $CFL$  (2.12), pode-se escrever:

$$\frac{\Delta X}{\Delta t_{cfl}} \geq \max\{|f'(\bar{S}_{j-1}^n)|, |f'(\bar{S}_j^n)|\} = a_{j-1/2}^n \quad (2.42)$$

e

$$\frac{\Delta X}{\Delta t_{cfl}} \geq \max\{|f'(\bar{S}_j^n)|, |f'(\bar{S}_{j+1}^n)|\} = a_{j+1/2}^n. \quad (2.43)$$

Chama-se por  $\Delta x_{j\pm 1/2}^n$  o comprimento do leque de Riemann em torno de  $x_{j\pm 1/2}$  no tempo  $t^n$ . Das equações (2.42) e (2.43), tem-se:

$$\begin{aligned} \Delta x_{j+1/2}^n &= x_{j+1/2,r}^n - x_{j+1/2,l}^n \\ &= (x_{j+1/2} + a_{j+1/2}^n \cdot \Delta t_{cfl}) - (x_{j+1/2} - a_{j+1/2}^n \cdot \Delta t_{cfl}) \\ &= 2a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Por simetria, facilmente chega-se a  $\Delta x_{j-1/2}^n = 2a_{j-1/2}^n \Delta t_{cfl}$ . No esquema KT, utiliza-se volumes de controle menores, onde em cada passo de tempo, integra-se sobre os intervalos

$$\{[x_{j-1/2,l}^n, x_{j-1/2,r}^n] \cup [x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,l}^n] \cup [x_{j+1/2,l}^n, x_{j+1/2,r}^n]\} \times [t^n, t^{n+1}].$$

Seguindo os passos do Algoritmo *REA*:

**Passo R (reconstrução):** Como no esquema NT, aproxima-se a solução no tempo  $t^n$  usando funções polinomiais lineares por partes,

$$s(x, t^n) \approx \sum_j \tilde{S}_j^n(x) \cdot \chi_j(x) = \sum_j \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n \cdot (x - x_j) \cdot \chi_j(x), \quad x \in I_j, \quad (2.45)$$

onde  $\chi_j(x) = 1$  se  $x \in I_j$  e  $\chi_j(x) = 0$ , caso contrário. Novamente, como no esquema NT, os valores  $(S_x)_j^n$  são aproximações das derivadas  $\frac{\partial}{\partial x} s(x, t)$ . Sua precisão de segunda ordem é garantida se a derivada numérica satisfaz

$$(S_x)_j^n = \left. \frac{\partial s}{\partial x} \right|_{x=x_j, t=t^n} + \mathcal{O}(\Delta X).$$

A característica não oscilatória dos esquemas centrais reside na escolha apropriada destas aproximações das derivadas. Como na seção anterior, a derivada numérica  $(S_x)_j^n =$

$S_x(x_j, t^n)$  será aproximada usando a definição de MinMod (2.27):

$$\begin{aligned} (S_x)_j^n &= \text{MM}\theta \frac{1}{\Delta X} \{\bar{S}_{j-1}^n, \bar{S}_j^n, \bar{S}_{j+1}^n\} \\ &:= \text{MM} \left( \theta \frac{\Delta S_{j+1/2}^n}{\Delta X}, \frac{\Delta S_{j-1/2}^n - \Delta S_{j+1/2}^n}{2\Delta X}, \theta \frac{\Delta S_{j-1/2}^n}{\Delta X} \right). \end{aligned} \quad (2.46)$$

A equação (2.46) é representada pela função:

- minmod(int j, double s[ ])

no código computacional "Kurganov-Tadmor" do Apêndice B. Em particular, para a derivada numérica  $(S_x)_{j+1/2}^{n+1} = S_x(x_{j+1/2}, t^{n+1})$ , é necessário calcular o comprimento dos intervalos de:

- $w_{j+1/2}^{n+1}$  a  $w_{j+1}^{n+1}$ :  $I_1 = [x_{j+1/2,l}^n, x_{j+3/2,l}^n]$ 

$$\begin{aligned} \Rightarrow | [x_{j+1/2,l}^n, x_{j+3/2,l}^n] | &= (x_{j+3/2,l}^n - x_{j+1/2,l}^n) \\ &= ((x_{j+3/2}^n - a_{j+3/2}^n \cdot \Delta t_{cfl}) - (x_{j+1/2}^n - a_{j+1/2}^n \cdot \Delta t_{cfl})) \\ &= ((x_{j+3/2}^n - x_{j+1/2}^n) + (a_{j+1/2}^n - a_{j+3/2}^n) \cdot \Delta t_{cfl}) \\ &= \Delta X + (a_{j+1/2}^n - a_{j+3/2}^n) \cdot \Delta t_{cfl}; \end{aligned} \quad (2.47)$$

- $w_j^{n+1}$  a  $w_{j+1/2}^{n+1}$ :  $I_2 = [x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,r}^n]$ 

$$\Rightarrow | [x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,r}^n] | = \Delta X + (a_{j+1/2}^n - a_{j-1/2}^n) \cdot \Delta t_{cfl}. \quad (2.48)$$

onde o comprimento (2.48) foi determinado de maneira análoga ao (2.47), Kurganov e Tadmor [23]. É importante, novamente ressaltar, que estas reconstruções lineares respeitam a conservação de massa, por exemplo,

$$\frac{1}{\Delta X} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{S}_j^n(x) dx = \bar{S}_j^n.$$

**Passo E (evolução):** Novamente deseja-se encontrar as soluções no futuro  $t^{n+1}$  em cada célula  $I_j$ . Estima-se as velocidades locais de propagação da onda nas fronteiras de cada célula. Da equação (2.15),

$$\max\{|f'(\bar{S}_{j-1}^n)|, |f'(\bar{S}_j^n)|\} = a_{j-1/2}^n,$$

pode-se escrever,

$$a_{j-1/2}^n = \max\left\{|f'(S_{j-1/2}^-)|, |f'(S_{j-1/2}^+)|\right\},$$

onde o termo  $S_{j-1/2}^+$  denota o valor da solução  $s(x, t)$  sobre a reconstrução linear por partes  $\tilde{S}_j^n(x)$  no ponto  $(x_{j-1/2}, t^n)$  e  $S_{j-1/2}^-$  o valor da solução  $s(x, t)$  sobre a reconstrução linear por partes  $\tilde{S}_{j-1}^n(x)$  no mesmo ponto  $(x_{j-1/2}, t^n)$ . Estes termos são valores intermediários à direita e à esquerda de  $x_{j-1/2}$ , respectivamente. Estes valores intermediários são calculados sobre as reconstruções lineares por partes (2.45) da seguinte maneira

$$\begin{aligned} S_{j-1/2}^+ &= \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n \cdot (x_{j-1/2} - x_j) \cdot 1 \\ &= \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n \cdot \left(-\frac{\Delta X}{2}\right) \\ &= \bar{S}_j^n - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} S_{j-1/2}^- &= \bar{S}_{j-1}^n + (S_x)_{j-1}^n \cdot (x_{j-1/2} - x_{j-1}) \cdot 1 \\ &= \bar{S}_{j-1}^n + (S_x)_{j-1}^n \cdot \left(\frac{\Delta X}{2}\right) \\ &= \bar{S}_{j-1}^n + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j-1}^n. \end{aligned}$$

De forma análoga:

$$S_{j+1/2}^+ = \bar{S}_{j+1}^n - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}^n \quad \text{e} \quad S_{j+1/2}^- = \bar{S}_j^n + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n.$$

Estes valores intermediários estão representados na Figura 2.11.

Desta maneira, para se obter a solução  $\bar{S}_j^{n+1}$  no próximo passo de tempo, deve-se integrar a lei de conservação em cada volume de controle:

$$\left\{ \begin{array}{l} [x_{j-1/2,l}^n, x_{j-1/2,r}^n] \times [t^n, t^{n+1}] \\ [x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,l}^n] \times [t^n, t^{n+1}] \\ [x_{j+1/2,l}^n, x_{j+1/2,r}^n] \times [t^n, t^{n+1}] \end{array} \right. . \quad (2.49)$$

Na Figura 2.11, observa-se que a solução é suave no intervalo  $[x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,l}^n]$  e que os leques de Riemann se localizam nos intervalos  $[x_{j-1/2,l}^n, x_{j-1/2,r}^n]$  e  $[x_{j+1/2,l}^n, x_{j+1/2,r}^n]$ , onde

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{j-1/2,l}^n := x_{j-1/2}^n - a_{j-1/2}^n \Delta t_{cfl} \\ x_{j-1/2,r}^n := x_{j-1/2}^n + a_{j-1/2}^n \Delta t_{cfl} \\ x_{j+1/2,l}^n := x_{j+1/2}^n - a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl} \\ x_{j+1/2,r}^n := x_{j+1/2}^n + a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl} \end{array} \right. \quad (2.50)$$

Para calcular as soluções no futuro  $\bar{w}_{j-1/2}^{n+1}$ ,  $\bar{w}_j^{n+1}$  e  $\bar{w}_{j+1/2}^{n+1}$ , deve-se integrar a lei de Conservação em cada volume de controle (2.49). Através da aproximação linear por partes pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \bar{w}_{j-1/2}^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x_{j-1/2}^n} \left[ \int_{x_{j-1/2,l}^n}^{x_{j-1/2,r}^n} s(x, t^{n+1}) dx \right] \\ &= \frac{1}{\Delta x_{j-1/2}^n} \left[ \int_{x_{j-1/2,l}^n}^{x_{j-1/2}^n} \tilde{S}_{j-1}(x, t^n) dx + \int_{x_{j-1/2}^n}^{x_{j-1/2,r}^n} \tilde{S}_j(x, t^n) dx \right] \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_{j-1/2}^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j-1/2,r}(t)) - f(s_{j-1/2,l}(t))] dt \\ &= \frac{\bar{S}_{j-1}^n + \bar{S}_j^n}{2} + \frac{\Delta X - a_{j-1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_j^n] \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_{j-1/2}^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j-1/2,r}(t)) - f(s_{j-1/2,l}(t))] dt, \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_j^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x_j^n} \int_{x_{j-1/2,r}^n}^{x_{j+1/2,l}^n} \tilde{S}_j(x, t^n) dx \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_j^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j+1/2,l}(t)) - f(s_{j-1/2,r}(t))] dt \\ &= \bar{S}_j^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{4} (a_{j-1/2}^n - a_{j+1/2}^n) (S_x)_j^n \\ &\quad - \frac{1}{\Delta x_j^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j+1/2,l}(t)) - f(s_{j-1/2,r}(t))] dt \end{aligned} \quad (2.52)$$

e

$$\begin{aligned}
 \bar{w}_{j+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}^n} \left[ \int_{x_{j+1/2,l}^n}^{x_{j+1/2,r}^n} s(x, t^{n+1}) dx \right] \\
 &= \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}^n} \left[ \int_{x_{j+1/2,l}^n}^{x_{j+1/2}^n} \tilde{S}_j(x, t^n) dx + \int_{x_{j+1/2}^n}^{x_{j+1/2,r}^n} \tilde{S}_{j+1}(x, t^n) dx \right] \\
 &\quad - \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j+1/2,r}(t)) - f(s_{j+1/2,l}(t))] dt \\
 &= \frac{\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta X - a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_j^n - (S_x)_{j+1}^n] \\
 &\quad - \frac{1}{\Delta x_{j+1/2}^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} [f(s_{j+1/2,r}(t)) - f(s_{j+1/2,l}(t))] dt.
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

Se a condição de *CFL* em malha deslocada

$$\frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \cdot \max_s |f'(s)| \leq \frac{1}{2}$$

é satisfeita, então as funções  $f(s_{j+1/2,r}(t))$ ,  $f(s_{j+1/2,l}(t))$ ,  $f(s_{j-1/2,r}(t))$  e  $f(s_{j-1/2,l}(t))$  são diferenciáveis em  $t$ . Desta forma, as integrais temporais podem ser calculadas numericamente usando a regra do ponto do meio:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(S(x_{j+1/2,r}, t)) dt \approx f(S_{j+1/2,r}^{n+1/2}) \Delta t_{cfl} \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(S(x_{j+1/2,l}, t)) dt \approx f(S_{j+1/2,l}^{n+1/2}) \Delta t_{cfl} \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(S(x_{j-1/2,r}, t)) dt \approx f(S_{j-1/2,r}^{n+1/2}) \Delta t_{cfl} \\ \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(S(x_{j-1/2,l}, t)) dt \approx f(S_{j-1/2,l}^{n+1/2}) \Delta t_{cfl} \end{array} \right. . \tag{2.54}$$

Substituindo (2.54) em (2.51), (2.52) e (2.53) obtém-se:

$$\begin{aligned}
 \bar{w}_{j-1/2}^{n+1} &= \frac{\bar{S}_{j-1}^n + \bar{S}_j^n}{2} + \frac{\Delta X - a_{j-1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_{j-1}^n - (S_x)_j^n] \\
 &\quad - \frac{1}{2a_{j-1/2}^n} [f(S_{j-1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) - f(S_{j-1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2))],
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_j^{n+1} = & \bar{S}_j^n + \frac{\Delta t_{cfl}}{4} (a_{j-1/2}^n - a_{j+1/2}^n) (S_x)_j^n \\ & - \left[ \frac{\left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right)}{1 - \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) (a_{j-1/2}^n + a_{j+1/2}^n)} \right] \\ & \cdot [f(S_{j+1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) - f(S_{j-1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2))] \end{aligned} \quad (2.56)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{w}_{j+1/2}^{n+1} = & \frac{\bar{S}_j^n + \bar{S}_{j+1}^n}{2} + \frac{\Delta X - a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl}}{4} [(S_x)_j^n - (S_x)_{j+1}^n] \\ & - \frac{1}{2a_{j+1/2}^n} [f(S_{j+1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) - f(S_{j+1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2))] . \end{aligned} \quad (2.57)$$

**Passo A (projeção):** Uma vez conhecidas as soluções sobre as células da malha deslocada, geradas a partir de informações sobre as velocidades de propagação nas extremidades de cada volume de controle, realiza-se a projeção sobre a malha original  $I_j$  para se obter um valor médio aproximado  $\bar{S}_j^{n+1}$  da solução  $s(x, t^{n+1})$ .

Inclinando as médias no futuro, obtidas em (2.55), (2.56) e (2.57), através da aproximação linear por partes em cada célula tem-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{w}_{j-1/2}^{n+1}(x) = \bar{w}_{j-1/2}^{n+1} + (S_x)_{j-1/2}^{n+1} (x - x_{j-1/2}) \\ \tilde{w}_j^{n+1}(x) = \bar{w}_j^{n+1} \\ \tilde{w}_{j+1/2}^{n+1}(x) = \bar{w}_{j+1/2}^{n+1} + (S_x)_{j+1/2}^{n+1} (x - x_{j+1/2}) \end{array} \right. . \quad (2.58)$$

Observe que não será necessário inclinar  $\bar{w}_j^{n+1}$  de (2.58), já que a solução é suave no intervalo  $[x_{j-1/2,r}^n, x_{j+1/2,l}^n]$ . Com isso, solução média  $\bar{S}_j^{n+1}$  projetada na malha original será dada por

$$\bar{S}_j^{n+1} = \frac{1}{\Delta X} \left[ \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j-1/2,r}} \tilde{w}_{j-1/2}^{n+1}(x) dx + \int_{x_{j-1/2,r}}^{x_{j+1/2,l}} \tilde{w}_j^{n+1}(x) dx + \int_{x_{j+1/2,l}}^{x_{j+1/2}} \tilde{w}_{j+1/2}^{n+1}(x) dx \right] \quad (2.59)$$

Com a reconstrução no futuro em (2.58), pode-se escrever (2.59) como

$$\begin{aligned}
 \bar{S}_j^{n+1} &= \frac{1}{\Delta X} \left\{ \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j-1/2,r}} [\bar{w}_{j-1/2}^{n+1} + (S_x)_{j-1/2}^{n+1}(x - x_{j-1/2})] dx \right\} \\
 &+ \frac{1}{\Delta X} \left\{ \int_{x_{j-1/2,r}}^{x_{j+1/2,l}} [\bar{w}_j^{n+1}] dx \right\} \\
 &+ \frac{1}{\Delta X} \left\{ \int_{x_{j+1/2,l}}^{x_{j+1/2}} [\bar{w}_{j+1/2}^{n+1} + (S_x)_{j+1/2}^{n+1}(x - x_{j+1/2})] dx \right\}.
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

Substituindo os valores de (2.55), (2.56) e (2.57) em (2.60), subtraindo  $\bar{S}_j^n$  e dividindo por  $\Delta t_{cfl}$ , ambos os lados, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Delta t_{cfl}} (\bar{S}_j^{n+1} - \bar{S}_j^n) &= \frac{a_{j+1/2}^n}{2\Delta X} \cdot \left\{ \left[ \bar{S}_{j+1}^n - \frac{\Delta X}{2} \cdot (S_x)_{j+1}^n \right] - \left[ \bar{S}_j^n - \frac{\Delta X}{2} \cdot (S_x)_j^n \right] \right\} \\
 &- \frac{a_{j-1/2}^n}{2\Delta X} \cdot \left\{ \left[ \bar{S}_j^n - \frac{\Delta X}{2} \cdot (S_x)_j^n \right] - \left[ \bar{S}_{j-1}^n - \frac{\Delta X}{2} \cdot (S_x)_{j-1}^n \right] \right\} \\
 &- \frac{1}{2\Delta X} \left\{ \left[ f(S_{j+1/2,r}^{n+1/2}) + f(S_{j+1/2,l}^{n+1/2}) \right] - \left[ f(S_{j-1/2,r}^{n+1/2}) + f(S_{j-1/2,l}^{n+1/2}) \right] \right\} \\
 &+ \mathcal{O}(\Delta t_{cfl}),
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

onde:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 f(S_{j-1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) := f(S_{j-1/2,l}^{n+1/2}) \\
 f(S_{j-1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2)) := f(S_{j-1/2,r}^{n+1/2}) \\
 \\
 f(S_{j+1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) := f(S_{j+1/2,l}^{n+1/2}) \\
 f(S_{j+1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2)) := f(S_{j+1/2,r}^{n+1/2})
 \end{array} \right. .$$

Usando a fórmula de Taylor no passo de tempo  $t^{n+1/2}$  em conjunto com a lei de conservação (2.1),

$$s_t(x, t) + f(s(x, t))_x = 0 \Rightarrow s_t(x, t) = -f(s(x, t))_x$$

pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
 S_{j+1/2,l}^{n+1/2} &:= S_{j+1/2,l}^n + \frac{\Delta t}{2} (S_{j+1/2,l}^n)_t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\
 \Rightarrow S_{j+1/2,l}^{n+1/2} &:= S_{j+1/2,l}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{j+1/2,l}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t^2)
 \end{aligned}$$

onde, da fórmula de Taylor e da equação (2.50),  $x_{j+1/2,l}^n := x_{j+1/2}^n + a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl}$ , chega-se a relação para  $S_{j+1/2,l}^n$ :

$$\begin{aligned}
 S_{j+1/2,l}^n &:= \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n (x_j^n - x_{j+1/2,l}^n) \\
 &\Rightarrow S_{j+1/2,l}^n := \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n (x_j^n - (x_{j+1/2}^n + a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl})) \\
 &\Rightarrow S_{j+1/2,l}^n := \bar{S}_j^n + (S_x)_j^n \left( \frac{\Delta X}{2} - a_{j+1/2}^n \Delta t_{cfl} \right) \\
 &\Rightarrow S_{j+1/2,l}^n := \bar{S}_j^n + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n + \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) ((S_x)_j^n a_{j+1/2}^n \Delta X).
 \end{aligned}$$

Logo:

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{j+1/2,l}^{n+1/2} := S_{j+1/2,l}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{j+1/2,l}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ S_{j+1/2,l}^n := \bar{S}_j^n + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n + \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) ((S_x)_j^n \cdot a_{j+1/2}^n \cdot \Delta X) \end{array} \right., \quad (2.62)$$

e as demais equações podem ser determinadas de maneira análoga a equação (2.62),

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{j+1/2,r}^{n+1/2} := S_{j+1/2,r}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{j+1/2,r}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ S_{j+1/2,r}^n := \bar{S}_{j+1}^n - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}^n + \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) ((S_x)_{j+1}^n \cdot a_{j+1/2}^n \cdot \Delta X) \end{array} \right., \\
 \left\{ \begin{array}{l} S_{j-1/2,l}^{n+1/2} := S_{j-1/2,l}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{j-1/2,l}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ S_{j-1/2,l}^n := \bar{S}_{j-1}^n - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j-1}^n + \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) ((S_x)_{j-1}^n \cdot a_{j-1/2}^n \cdot \Delta X) \end{array} \right., \\
 \left\{ \begin{array}{l} S_{j-1/2,r}^{n+1/2} := S_{j-1/2,r}^n - \frac{\Delta t}{2} f(S_{j-1/2,r}^n)_x + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ S_{j-1/2,r}^n := \bar{S}_j^n - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n + \left( \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right) ((S_x)_j^n \cdot a_{j-1/2}^n \cdot \Delta X) \end{array} \right. .$$

Agrupando os termos semelhantes, calcula-se o limite quando  $\Delta t_{cfl} \rightarrow 0$  na equação (2.61),

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \bar{S}_j(t) &= \frac{a_{j+1/2}(t)}{2\Delta X} \left[ \left( S_{j+1}(t) - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}(t) \right) - \left( S_j(t) + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j(t) \right) \right] \\
 &\quad - \frac{a_{j-1/2}(t)}{2\Delta X} \left[ \left( S_j(t) - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j(t) \right) - \left( S_{j-1}(t) + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}(t) \right) \right] \\
 &\quad - \frac{1}{2\Delta X} \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left[ (f(S_{j+1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) + f(S_{j+1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2))) \right. \\
 &\quad \left. - (f(S_{j-1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) + f(S_{j-1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2))) \right].
 \end{aligned} \quad (2.63)$$

Como supõe-se que a função de fluxo  $f$  é contínua, os limites são calculados usando a continuidade:

$$\begin{aligned}
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} f(S_{j+1/2,l}(t + \Delta t_{cfl}/2)) &= f \left( \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \left[ S_{j+1/2,l}(t) - \frac{\Delta t_{cfl}}{2} f((S_{j+1/2,l})_x(t)) \right] \right) \\
 &= f \left( \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} S_{j+1/2,l}(t) \right) \\
 &= f \left( \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} \bar{S}_j(t) + \Delta X \cdot (S_x)_j(t) \left( \frac{1}{2} - \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} a_{j+1/2}(t) \right) \right) \\
 &= f \left( \bar{S}_j(t) + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j(t) \right) = f \left( S_{j+1/2}^-(t) \right) \\
 \Rightarrow \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} f(S_{j+1/2,r}(t + \Delta t_{cfl}/2)) &= f \left( \bar{S}_{j+1}(t) - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}(t) \right) = f \left( S_{j+1/2}^+(t) \right).
 \end{aligned}$$

Substituindo os limites em (2.63), pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \bar{S}_j(t) &= -\frac{1}{2\Delta X} \left[ \left( f(S_{j+1/2}^+(t)) + f(S_{j+1/2}^-(t)) \right) - \left( f(S_{j-1/2}^+(t)) + f(S_{j-1/2}^-(t)) \right) \right] \\
 &\quad + \frac{a_{j+1/2}(t)}{2\Delta X} \left[ S_{j+1/2}^+(t) - S_{j+1/2}^-(t) \right] - \frac{a_{j-1/2}(t)}{2\Delta X} \left[ S_{j-1/2}^+(t) - S_{j-1/2}^-(t) \right],
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

onde, os passos da evolução são calculados sobre as reconstruções lineares

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} S_{j+1/2,r}^{n+1/2} := S_{j+1/2}^+(t) := \bar{S}_{j+1}(t) - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j+1}^n(t) \\
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} S_{j+1/2,l}^{n+1/2} := S_{j+1/2}^-(t) := \bar{S}_j(t) + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n(t) \\
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} S_{j-1/2,r}^{n+1/2} := S_{j-1/2}^+(t) := \bar{S}_j(t) - \frac{\Delta X}{2} (S_x)_j^n(t) \\
 \lim_{\Delta t_{cfl} \rightarrow 0} S_{j-1/2,l}^{n+1/2} := S_{j-1/2}^-(t) := \bar{S}_{j-1}(t) + \frac{\Delta X}{2} (S_x)_{j-1}^n(t)
 \end{array} \right. .$$

Estes valores intermediários estão representados pelas funções:

- `smaisfrente(int j, double s[ ])`,
- `smenosfrente(int j, double s[ ])`,
- `smaisback(int j, double s[ ])`,
- `smenosback(int j, double s[ ])`,

respectivamente, no código computacional "Kurganov-Tadmor" do Apêndice B.

Em cada célula  $I_j$ , resolve-se uma equação diferencial da saturação no tempo. Com os novos fluxos numéricos convectivos definidos por:

$$H_{j+1/2}(t) = \frac{f(S_{j+1/2}^+(t)) + f(S_{j+1/2}^-(t))}{2} - \frac{a_{j+1/2}(t)}{2} (S_{j+1/2}^+(t) - S_{j+1/2}^-(t)) \quad (2.65)$$

e

$$H_{j-1/2}(t) = \frac{f(S_{j-1/2}^+(t)) + f(S_{j-1/2}^-(t))}{2} - \frac{a_{j-1/2}(t)}{2} (S_{j-1/2}^+(t) - S_{j-1/2}^-(t)), \quad (2.66)$$

obtem-se o esquema KT [23] na forma conservativa. Substituindo (2.65) e (2.66) em (2.64), obtem-se:

$$\frac{d}{dt} \bar{S}_j(t) = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(t) - H_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right]. \quad (2.67)$$

Estes fluxos numéricos (2.65)-(2.66) estão representados pelas funções:

- Hmais(int j, double s[ ]),
- Hmenos(int j, double s[ ]),

respectivamente, no código computacional "Kurganov-Tadmor" do Apêndice B.

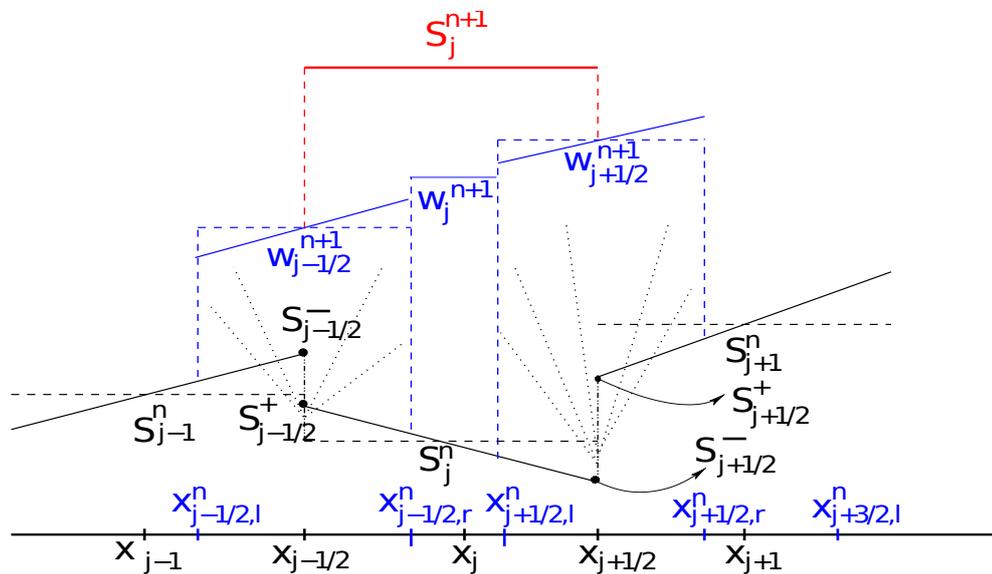


Figura 2.11: Construção do método de Kurganov e Tadmor [23].

Os *Leques de Riemann* estão dentro do domínio onde se calcula cada média, não necessitando de *Riemann Solvers*, *Jacobianas* e *Decomposição Característica*, Ribeiro [33]. Com isso, as médias são tomadas sobre leques de Riemann de tamanhos variados proporcionais ao passo de tempo, o que permite escrever o esquema central (2.67) na forma

semi-discreta como um sistema de equações diferenciais ordinárias, que pode ser acoplado a um método para resolução de sistemas de Equações Diferenciais adequado. Na Seção 2.10 será apresentado o Método de Runge-Kutta para resolver estes sistemas de EDO.

## 2.9 Solução da equação de convecção-difusão

Nesta seção, será apresentada a equação de convecção-difusão unidimensional. Em seguida, será abordada a utilização do esquema numérico KT [23] para aproximar a solução de uma equação puramente convectiva em conjunto com Método de Diferenças Finitas e Médias Harmônicas, respectivamente, para aproximar a solução de uma equação puramente difusiva.

### 2.9.1 Equação de convecção-difusão unidimensional

No fenômeno da gota de tinta que se dilui na água, citado na Subseção 1.9.1 do Capítulo 1, a convecção tem um papel maior que a difusão no transporte de massa. Se fosse somente a difusão, levaria muito tempo para perceber colorir a água. Porém, nos sólidos, por exemplo, não existe a convecção e pode-se afirmar que o transporte de massa é tipicamente por difusão.

Com isso, num escoamento de fluido mais geral deve ocorrer simultaneamente o fenômeno de convecção e de difusão. Desta forma, este fluxo será expresso por

$$f(s, s_x) = \bar{v} \cdot s - D \cdot s_x,$$

e a lei de conservação torna-se

$$s_t + (\bar{v} \cdot s - D \cdot s_x)_x = 0.$$

Assumindo  $D$  constante, resulta na equação de *convecção-difusão*:

$$s_t + \bar{v} \cdot s_x = D \cdot s_{xx}. \quad (2.68)$$

### 2.9.2 Método KT com Diferenças Finitas para a Difusão

Considere a parte difusiva

$$s_t - (D(s)s_x)_x = 0, \quad (2.69)$$

onde  $D(s) = D$  será considerado constante, em particular  $D = 1$ .

Através da expansão da Série de Taylor para derivada segunda no espaço obtém-se:

$$\bar{S}_{j+1}^n = \bar{S}_j^n + (\Delta X) \left( \frac{\partial s}{\partial x} \right)_j^n + \frac{(\Delta X)^2}{2!} \left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{(\Delta X)^3}{3!} \left( \frac{\partial^3 s}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots + \frac{(\Delta X)^m}{m!} \left( \frac{\partial^m s}{\partial x^m} \right)_j^n \quad (2.70)$$

e

$$\bar{S}_{j-1}^n = \bar{S}_j^n - (\Delta X) \left( \frac{\partial s}{\partial x} \right)_j^n + \frac{(\Delta X)^2}{2!} \left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n - \frac{(\Delta X)^3}{3!} \left( \frac{\partial^3 s}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots + \frac{(\Delta X)^m}{m!} \left( \frac{\partial^m s}{\partial x^m} \right)_j^n \quad (2.71)$$

Somando (2.70) e (2.71) pode-se escrever:

$$\bar{S}_{j+1}^n + \bar{S}_{j-1}^n = 2\bar{S}_j^n + 2\frac{(\Delta X)^2}{2!} \left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n + 2\frac{(\Delta X)^4}{4!} \left( \frac{\partial^4 s}{\partial x^4} \right)_j^n + \dots + 2\frac{(\Delta X)^m}{m!} \left( \frac{\partial^m s}{\partial x^m} \right)_j^n,$$

então,

$$2\frac{(\Delta X)^2}{2!} \left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n = \bar{S}_{j+1}^n + \bar{S}_{j-1}^n - 2\bar{S}_j^n - 2\frac{(\Delta X)^4}{4!} \left( \frac{\partial^4 s}{\partial x^4} \right)_j^n - \dots - 2\frac{(\Delta X)^m}{m!} \left( \frac{\partial^m s}{\partial x^m} \right)_j^n,$$

que implica em,

$$\left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n \approx \frac{(\bar{S}_{j+1}^n - \bar{S}_j^n) - (\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n)}{(\Delta X)^2}. \quad (2.72)$$

Em cada célula  $I_j$ , resolve-se uma equação diferencial da saturação no tempo. Esta equação pode ainda ser escrita na forma conservativa, onde o fluxo numérico difusivo pode ser aproximado por,

$$P_{j+1/2}(t) \approx \frac{S_{j+1}(t) - S_j(t)}{\Delta X} \quad (2.73)$$

e

$$P_{j-1/2}(t) \approx \frac{S_j(t) - S_{j-1}(t)}{\Delta X}. \quad (2.74)$$

Substituindo (2.73) e (2.74) em (2.72) obtém-se:

$$\left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j^n \approx \left[ \frac{P_{j+1/2}(t) - P_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right]. \quad (2.75)$$

Juntando a parte convectiva (2.67),

$$\frac{d}{dt} \bar{S}_j(t) = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(t) - H_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right], \quad (2.76)$$

e a difusiva (2.75), obtém-se o esquema conservativo semi-discreto do método de segunda ordem KT com Diferenças Finitas para a Difusão

$$\frac{d}{dt} \bar{S}_j(t) = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(t) - H_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right] + \left[ \frac{P_{j+1/2}(t) - P_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right]. \quad (2.77)$$

### 2.9.3 Método KT com Médias Harmônicas para Difusão

Considere novamente a parte difusiva (2.69),

$$s_t - (D(s)s_x)_x = 0,$$

e substituindo  $Q(s) = D(s)s_x$ , pode-se escrever

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [Q(s)]_{t=t^n}^{x=x_j} \approx \frac{(Q_{j+1/2}^n - Q_{j-1/2}^n)}{\Delta X}. \quad (2.78)$$

Para o cálculo das Médias Harmônicas  $M_{H,j+1/2}^n$  e  $M_{H,j-1/2}^n$  serão utilizados os vizinhos  $[D(\bar{S}_j^n), D(\bar{S}_{j+1}^n)]$  e  $[D(\bar{S}_{j-1}^n), D(\bar{S}_j^n)]$ , respectivamente,

$$\begin{cases} M_{H,j+1/2}^n = \left( \frac{2}{\frac{1}{D(\bar{S}_{j+1}^n)} + \frac{1}{D(\bar{S}_j^n)}} \right) = \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_j^n) \cdot D(\bar{S}_{j+1}^n)}{D(\bar{S}_j^n) + D(\bar{S}_{j+1}^n)} \right) \\ M_{H,j-1/2}^n = \left( \frac{2}{\frac{1}{D(\bar{S}_j^n)} + \frac{1}{D(\bar{S}_{j-1}^n)}} \right) = \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_{j-1}^n) \cdot D(\bar{S}_j^n)}{D(\bar{S}_{j-1}^n) + D(\bar{S}_j^n)} \right) \end{cases} \quad (2.79)$$

onde,

$$\begin{cases} Q_{j+1/2}^n \approx (M_{H,j+1/2}^n)((Sx)_{j+1/2}^n) \approx (M_{H,j+1/2}^n) \left( \frac{\bar{S}_{j+1}^n - \bar{S}_j^n}{\Delta X} \right) \\ Q_{j-1/2}^n \approx (M_{H,j-1/2}^n)((Sx)_{j-1/2}^n) \approx (M_{H,j-1/2}^n) \left( \frac{\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n}{\Delta X} \right) \end{cases} \quad (2.80)$$

Substituindo (2.80) e (2.79) em (2.78) pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} [Q(s)]_{t=t^n}^{x=x_j} \approx & \frac{1}{\Delta X} \left[ \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_j^n) \cdot D(\bar{S}_{j+1}^n)}{D(\bar{S}_j^n) + D(\bar{S}_{j+1}^n)} \right) \left( \frac{\bar{S}_{j+1}^n - \bar{S}_j^n}{\Delta X} \right) \right] \\ & - \frac{1}{\Delta X} \left[ \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_{j-1}^n) \cdot D(\bar{S}_j^n)}{D(\bar{S}_{j-1}^n) + D(\bar{S}_j^n)} \right) \left( \frac{\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n}{\Delta X} \right) \right]. \end{aligned}$$

Portanto, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \right)_j \approx & \frac{1}{\Delta X} \left[ \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_j^n) \cdot D(\bar{S}_{j+1}^n)}{D(\bar{S}_j^n) + D(\bar{S}_{j+1}^n)} \right) \left( \frac{\bar{S}_{j+1}^n - \bar{S}_j^n}{\Delta X} \right) \right] \\ & - \frac{1}{\Delta X} \left[ \left( \frac{2 \cdot D(\bar{S}_{j-1}^n) \cdot D(\bar{S}_j^n)}{D(\bar{S}_{j-1}^n) + D(\bar{S}_j^n)} \right) \left( \frac{\bar{S}_j^n - \bar{S}_{j-1}^n}{\Delta X} \right) \right]. \end{aligned}$$

Esta equação pode ainda ser escrita na forma conservativa, onde o fluxo numérico difusivo

pode ser aproximado por,

$$P_{j+1/2}(t) \approx \left( \frac{2.D(\bar{S}_j(t)).D(\bar{S}_{j+1}(t))}{(\bar{S}_j(t)) + (\bar{S}_{j+1}(t))} \right) \left( \frac{\bar{S}_{j+1}(t) - \bar{S}_j(t)}{\Delta X} \right) \quad (2.81)$$

e

$$P_{j-1/2}(t) \approx \left( \frac{2.D(\bar{S}_{j-1}(t)).D(\bar{S}_j(t))}{D(\bar{S}_{j-1}(t)) + D(\bar{S}_j(t))} \right) \left( \frac{\bar{S}_j(t) - \bar{S}_{j-1}(t)}{\Delta X} \right). \quad (2.82)$$

Novamente, juntando a parte convectiva (2.67),

$$\frac{d}{dt}\bar{S}_j(t) = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(t) - H_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right], \quad (2.83)$$

obtem-se o esquema conservativo semi-discreto do método de segunda ordem KT, agora com Médias Harmônicas para a Difusão

$$\frac{d}{dt}\bar{S}_j(t) = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(t) - H_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right] + \left[ \frac{P_{j+1/2}(t) - P_{j-1/2}(t)}{\Delta X} \right]. \quad (2.84)$$

## 2.10 Método de Runge-Kutta

Nesta seção será apresentado um método numérico para resolver Equações Diferenciais Ordinárias (EDO), a partir das formulações semi-discretas (2.77) e (2.84), descritas nas duas seções anteriores.

O método de Runge-Kutta pode ser entendido como um aperfeiçoamento do método de Euler com uma melhor estimativa da derivada da função, que busca uma melhor estimativa da derivada, Kurganov e Tadmor [23].

Um método de Runge-Kutta de ordem  $n$  possui um erro da ordem de  $\mathcal{O}((\Delta X)^{n+1})$ , enquanto o método de Euler possui um erro da ordem  $\mathcal{O}(\Delta X)$ .

A partir das formulações semi-discretas (2.77) e (2.84), resolve-se numericamente uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) em cada célula  $I_j$ . Para isso, esta EDO será discretizada introduzindo um passo de tempo, através do método de Runge-Kutta com precisão de segunda ou terceira ordem.

O passo de tempo introduzido para resolver numericamente esta EDO será denotado por  $\Delta t_{RK}$ , onde RK são as iniciais de Runge e Kutta, que para os exemplos numéricos unidimensionais, é suficiente exigir a restrição, Shu [40], Shu e Osher [41] e de Butcher [11]:

$$\frac{\Delta t_{RK}}{\Delta X} \cdot \max_s |f'(s)| < TRK, \quad (2.85)$$

onde  $1 \leq TRK \leq 1,5$  para garantir a estabilidade do esquema numérico de Kurganov-Tadmor. O termo  $TRK$  significa Tempo do Runge-Kutta, obtido experimentalmente por exemplos de aplicações numéricas observados nos trabalhos de Shu [40], Shu e Osher [41] e de Butcher [11].

Escrevendo o lado direito das equações (2.77) e (2.84) como  $R[w]$ , para diferenciação central com a função  $w = \{w_j\}$  tem-se:

$$R[w] = - \left[ \frac{H_{j+1/2}(w) - H_{j-1/2}(w)}{\Delta X} \right] + \left[ \frac{P_{j+1/2}(w) - P_{j-1/2}(w)}{\Delta X} \right].$$

Esta equação está representada pela função:

```
- funcaoC(int j, double s[ ])
```

no código computacional "Kurganov-Tadmor" do Apêndice B.

Em termos do esquema avançado no tempo de Euler,  $w + \Delta t \cdot R[w]$ , pode-se considerar uma família de esquemas de Runge-Kutta descrita da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} S^1 &= S^n + \Delta t_{cfl}^n \cdot R[S^n] \\ S^{\ell+1} &= \eta_\ell \cdot S^n + (1 - \eta_\ell) \cdot (S^\ell + \Delta t_{cfl}^n \cdot R[S^\ell]), \quad \ell = 1, 2, \dots, p-1 \\ S^{n+1} &= S^{(p)} \end{aligned}$$

onde os valores de  $\eta_\ell$  para os esquemas de segunda e terceira ordem no tempo estão dispostos na Tabela 2.1, Kurganov e Tadmor [23].

Tabela 2.1: Método de Runge-Kutta para os esquemas de segunda e terceira ordem no tempo.

<b>Método de Runge-Kutta</b>		
	$\eta_1$	$\eta_2$
Esquema de segunda ordem ( $p = 2$ )	$\frac{1}{2}$	-
Esquema de terceira ordem ( $p = 3$ )	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{3}$

## Capítulo 3

# Resultados Numéricos

Neste capítulo serão aplicados os quatro esquemas numéricos estudados no Capítulo 2, LxF, LW, NT e KT, para aproximar soluções numéricas de leis de conservação lineares e não lineares.

Para geração dos resultados foi utilizado um notebook **SONY VAIO**, modelo **PCG-7184L**, com processador **Intel Core 2 DUO**, memória **4GB RAM** e disco rígido de **320GB**.

O sistema operacional utilizado foi **Linux Ubuntu 11.04**. Para geração dos códigos computacionais foi utilizada a **linguagem de programação C** e o compilador **GCC**, com geração de arquivos de saída de dados (extensão **".dat"**). Para geração dos gráficos foi utilizada ferramenta iterativa **GRACE** (*GRaphing, Advanced Computation and Exploration of data*).

Serão apresentados alguns problemas enfrentados quando tenta-se aproximar numericamente a solução de uma lei de conservação, tais como o aumento da difusão numérica (ou erro numérico), na medida que o passo de tempo diminui em consequência da condição de *CFL*, que estará restrita à equação (2.12) do Capítulo 2, dada por:

$$\alpha_{CFL} = \max \left| f'(s) \frac{\Delta t_{cfl}}{\Delta X} \right| \leq 1. \quad (3.1)$$

De acordo com Anderson [3], a Figura 3.1 ilustra os efeitos da difusão numérica na simulação de uma descontinuidade. Nessa figura, (a) mostra a solução exata, (b) representa uma solução numérica típica obtida por esquemas de primeira ordem, que são dissipativos, e como consequência “suavizam” gradientes, e (c) corresponde à solução numérica típica de esquemas de segunda ordem, os quais são dispersivos e, conseqüentemente, geram oscilações não-físicas na solução.

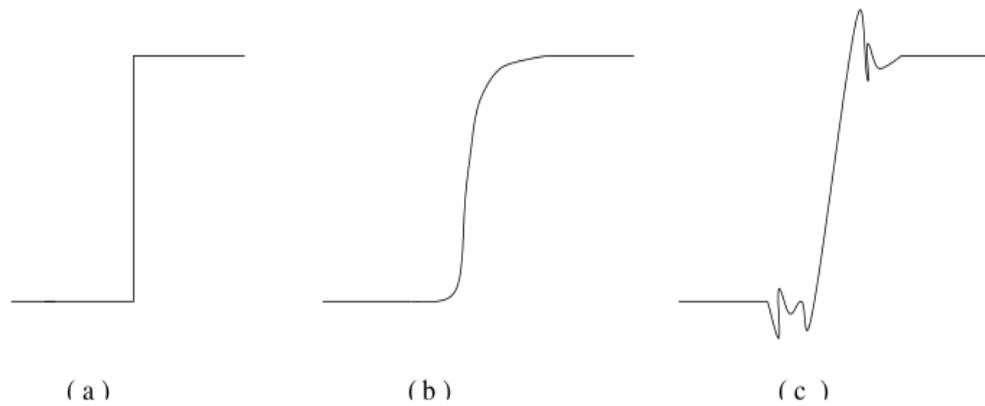


Figura 3.1: Efeitos da difusão numérica, mostrando: (a) A solução exata; (b) O erro de dissipação; (c) O erro de dispersão, Anderson [3].

Em todas as aplicações, com a condição inicial descontínua, será calculada a velocidade de propagação da descontinuidade  $v = \frac{d}{dt}x_C$ , definida na Seção 1.7 do Capítulo 1, pela equação (1.42)

$$v = \frac{(f(s_L) - f(s_R))}{(s_L - s_R)} = \frac{[f(s)]}{[s]}. \quad (3.2)$$

Será calculada também, a distância percorrida pela descontinuidade  $x_C = v \cdot t$  e a solução aproximada para uma malha bem refina (**SMR**) da respectiva condição inicial.

Na primeira Seção 3.1, será apresentada uma aplicação em que se aproxima a solução de uma equação de convecção com fluxo linear,  $f(s) = s$ , e condição inicial descontínua. Nesta aplicação, serão usados os esquemas numéricos LxF, LW, NT e KT, associados à mudanças da condição de  $CFL$ , verificando o aumento da difusão numérica em cada esquema numérico e posteriormente estes esquemas serão comparados. Na Seção 3.2, repete-se a aplicação descrita na Seção 3.1, para a equação de convecção com fluxo não linear de Burger's e condição inicial descontínua. Em seguida, será aplicado o Exemplo 4 do Apêndice A, onde a solução da equação Burger's será aproximada, com uma condição inicial contínua, individualmente nos esquemas numéricos Lax-Friedrichs, Nessyahu-Tadmor e Kurganov-Tadmor, com mudança da condição de  $CFL$ , verificando o aumento da difusão numérica em cada esquema numérico e posteriormente os esquemas são comparados. Finalizando a Seção 3.2, serão apresentados duas aplicações, onde a solução da equação de convecção com fluxo não linear de Buckley-Leverett será aproximada com esquemas numéricos Nessyahu-Tadmor (NT) e Kurganov-Tadmor (KT), número de  $CFL = 0.45$  e condição inicial descontínua. Na primeira aplicação, será utilizada a função de fluxo

(1.50),

$$f(s) = \frac{s^2}{s^2 + (1-s)^2}$$

e na segunda aplicação, será utilizada a função de fluxo (1.55),

$$f(s) = \left( -\frac{s^2 \cdot (1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right),$$

vistas na Seção 1.10 do Capítulo 1.

Finalizando este capítulo, na Seção 3.3, serão apresentados três aplicações com o esquema Kurganov-Tadmor (KT) aproximando a solução da equação de convecção-difusão com fluxo não linear e condição inicial descontínua. Será utilizada a condição de  $CFL = 0.45$ , para todas as aplicações, alterando apenas os coeficientes de difusão constantes  $D_i$ , comparando o tempo de processamento (CPU) para cada um destes coeficientes de difusão, por meio das Tabelas 3.1, 3.2 e 3.3. Na primeira aplicação, com a equação de Burger's e as duas últimas, referentes a Equação Buckley-Leverett, como as da Seção 3.2 utilizando as função de fluxo (1.50) e (1.55), respectivamente, já vistas na Seção 1.10 do Capítulo 1.

## 3.1 Equação de convecção com fluxo linear

Começando com uma equação de convecção com fluxo linear,  $f(s) = s$ , e condição inicial descontínua. Será aplicada individualmente, nos esquemas numéricos LxF, LW, NT e KT, a mudança da condição de  $CFL$ , com os valores 0.45, 0.20 e 0.05, para verificar o aumento da difusão numérica em cada esquema numérico e posteriormente, em uma mesma figura, com exceção do Método de Diferenças Finitas LW.

### 3.1.1 Equação Linear

Vamos utilizar os quatro esquemas numéricos para aproximar a solução da equação linear dada por

$$s_t + s_x = 0, \quad x \in (0, 1), \quad t \in (0, 1/2), \quad (3.3)$$

com condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } x > 0 \end{cases}.$$

Onde considera-se a função de fluxo  $f(s) = s \Rightarrow f'(s) = 1$ .

As soluções numéricas para estas aplicações foram calculadas no tempo  $T_{total} = 0.5$ , com tamanho da malha computacional  $N = 100$  pontos e os valores de  $CFL$  considerados foram 0.45, 0.20 e 0.05, respectivamente.

A velocidade de propagação da descontinuidade (3.2) será dada por

$$v = \frac{(f(1) - f(0))}{(1 - 0)} = 1,$$

em consequência, a distância percorrida pela descontinuidade  $x_C = v \cdot t$  será

$$x_C = 1 \cdot 0.5 = 0.5. \quad (3.4)$$

As Figuras 3.2 e 3.4 mostram as soluções para os métodos LxF e NT, respectivamente. Elas indicam que diminuindo o número de  $CFL$  e, conseqüentemente, o passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ , deixando fixo o espaçamento  $\Delta X$  da malha, as soluções numéricas geradas pelos esquemas numéricos LxF e NT. No tempo  $t = 0.5$ , como visto acima em (3.4), localiza o salto aproximadamente em  $x = 0.5$ . Porém, a descontinuidade está fortemente suavizada, sofrendo um aumento da difusão numérica. O mesmo não acontece no esquema numérico KT, veja Figura 3.5.

Na Figura 3.3, observa-se que no esquema numérico LW não é possível determinar exatamente onde ocorre o salto, devido às oscilações. Assim, verifica-se que o Método de Diferenças Finitas Lax-Wendroff (LW) fornece-nos a velocidade correta de propagação da descontinuidade mas, não resolve adequadamente a descontinuidade pois seu termo principal é um termo dispersivo. Por este motivo, este esquema numérico não será utilizado nas aplicações mostradas nas Figuras 3.6, 3.7 e 3.8, onde se compara, em um mesmo gráfico, a difusão numérica dos esquemas numéricos LxF, NT e KT, à medida que o passo de tempo diminui em consequência da condição de  $CFL$ .

## 3.2 Equação de convecção com fluxo não linear

Nesta seção, repete-se a aplicação descrita na primeira Seção 3.1, para a equação de convecção com fluxo não linear de Burger's e condição inicial descontínua. Em seguida, aplica-se o Exemplo 4 do Apêndice A, onde a solução da equação Burger's é aproximada com uma condição inicial contínua, variando a condição de  $CFL$  e comparando os esquemas numéricos LxF, LW, NT e KT.

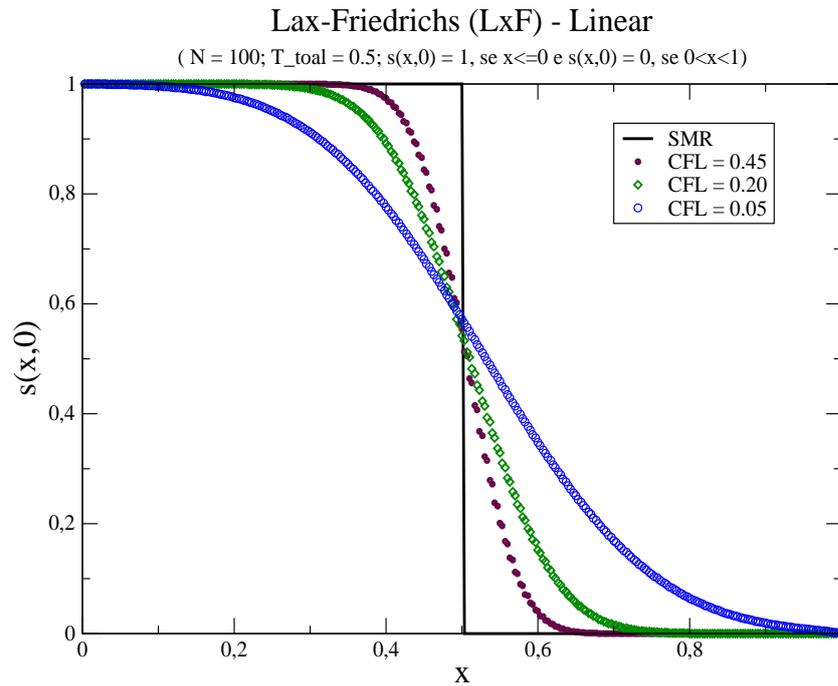


Figura 3.2: Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico LxF para condições de  $CFL$  diferentes.

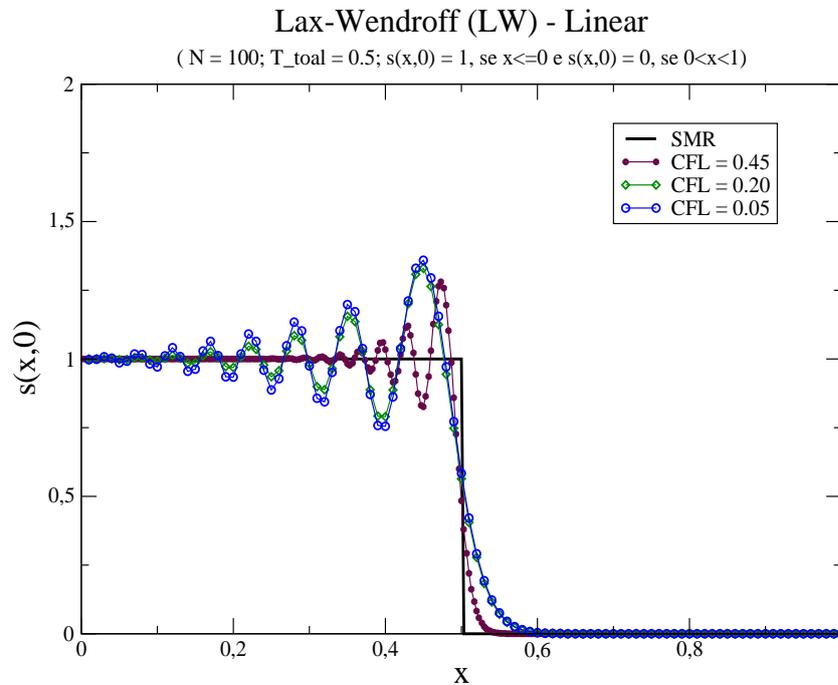


Figura 3.3: Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico LW para condições de  $CFL$  diferentes.

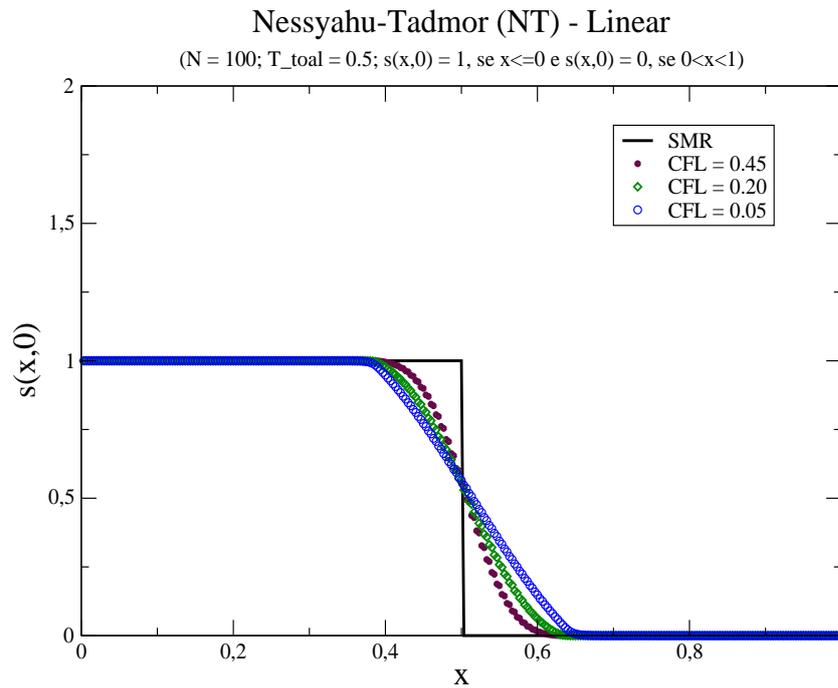


Figura 3.4: Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico NT para condições de  $CFL$  diferentes.

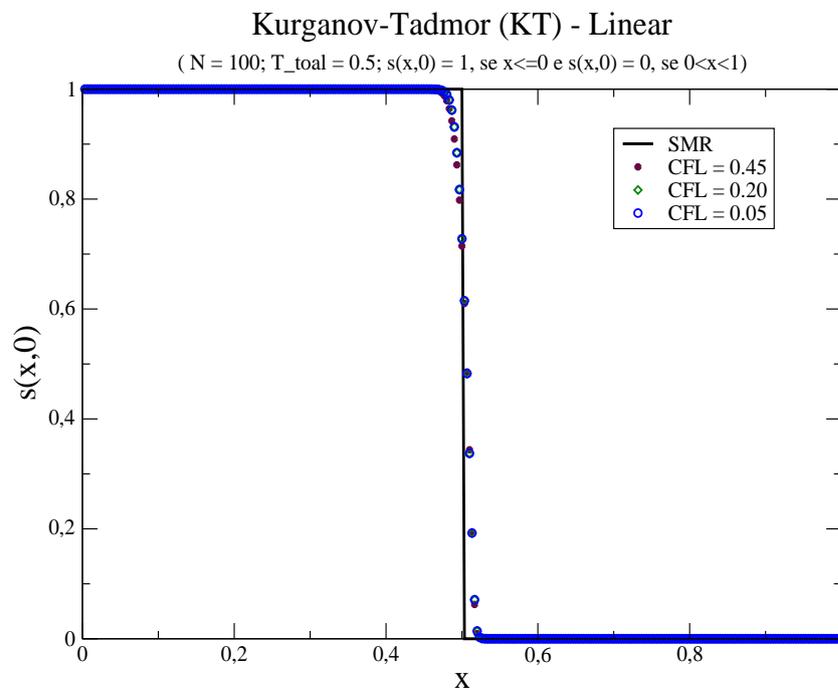


Figura 3.5: Solução aproximada da Equação Linear usando o esquema numérico KT para condições de  $CFL$  diferentes.

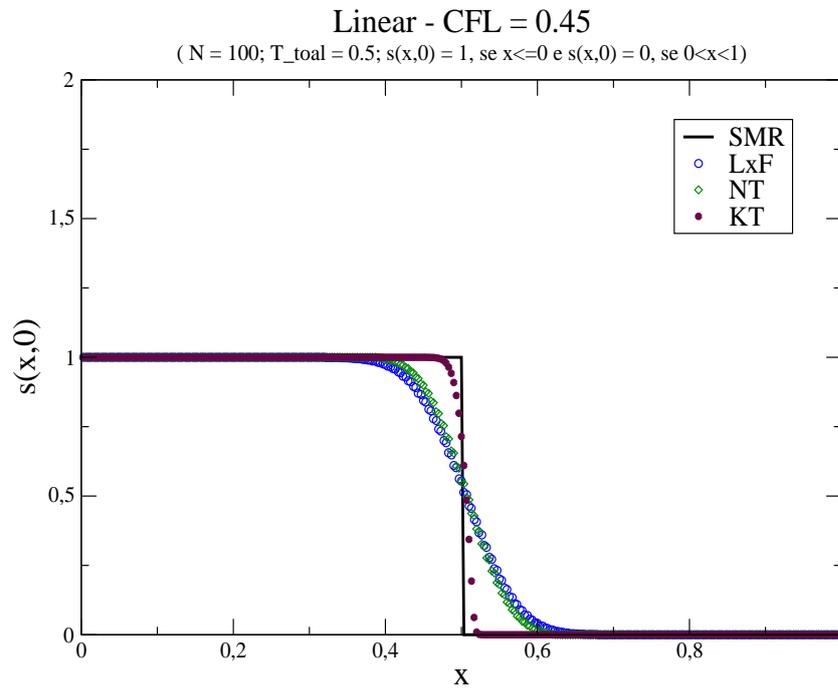


Figura 3.6: Solução aproximada da Equação Linear usando os quatro esquemas numéricos LxF, LW, NT e KT para condição de  $CFL = 0,45$ .

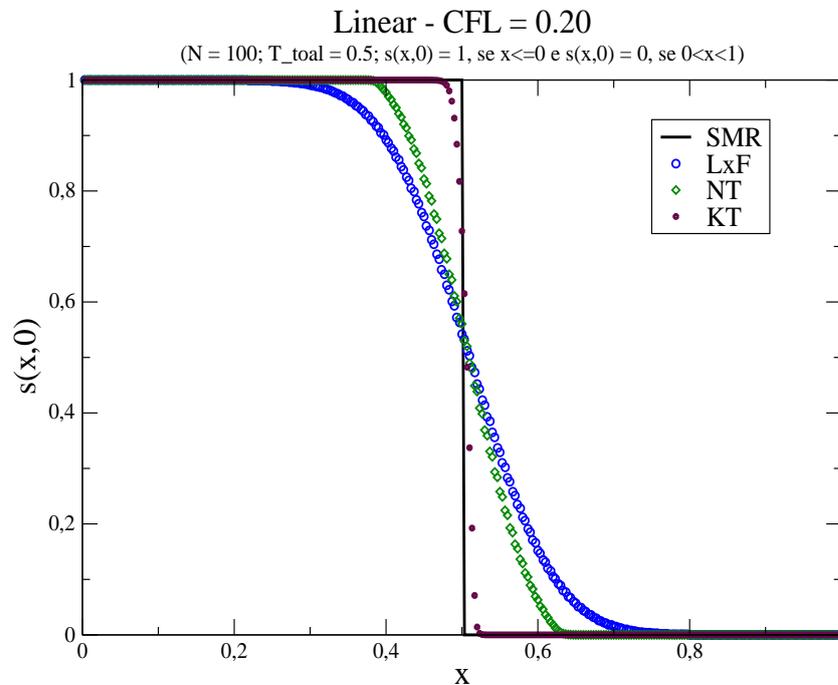


Figura 3.7: Solução aproximada da Equação Linear usando os três esquemas numéricos LxF, NT e KT para condição de  $CFL = 0,20$ .

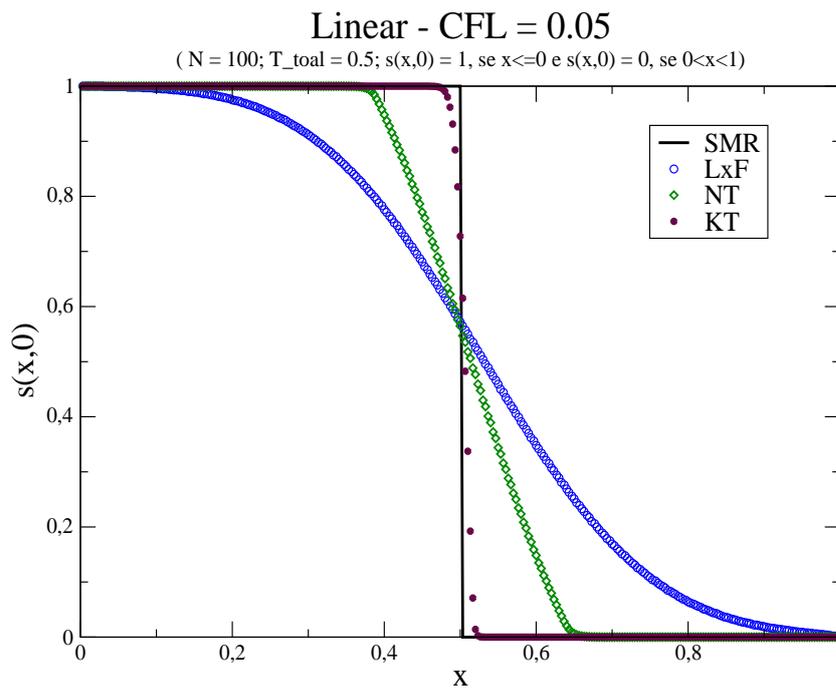


Figura 3.8: Solução aproximada da Equação Linear usando os três esquemas numéricos LxF, NT e KT para condição de  $CFL = 0,05$ .

Finalizando esta seção, através de duas aplicações, aproximamos a solução da equação de convecção com fluxo não linear de Buckley-Leverett com esquemas numéricos LxF, NT e KT, em uma mesma figura, com uma condição inicial descontínua e condição de  $CFL = 0.45$ . Na primeira aplicação utiliza-se a função de fluxo (1.50), e na segunda a função de fluxo (1.55), vistas na Seção 1.10 do Capítulo 1.

### 3.2.1 Equação de Burger's

- Aproximando a solução da equação de Burger's:

$$s_t + f(s)_x = 0, \quad x \in (0,1), \quad t > 0 \quad (3.5)$$

com condição inicial

$$s(x,0) = s_0(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } x > 0 \end{cases}. \quad (3.6)$$

Onde considera-se a função de fluxo  $f(s) = \left(\frac{s^2}{2}\right) \Rightarrow f'(s) = s$ .

As soluções numéricas para estas aplicações foram calculadas no tempo  $T_{total} = 1$ , tamanho da malha computacional  $N = 100$  pontos e os valores de  $CFL$  considerados

foram 0.45, 0.20 e 0.05, respectivamente.

No Exemplo 8 do Apêndice A, foi calculada a velocidade de propagação da descontinuidade para a equação de Burger's. Para esta aplicação, a velocidade será descrita como

$$v = \frac{(s_L + s_R)}{2} = \frac{(1 + 0)}{2} = \frac{1}{2}.$$

Em consequência, a distância percorrida pela descontinuidade  $x_C = v \cdot t$  será

$$x_C = 0.5 \cdot 1 = 0.5.$$

As Figuras 3.9 e 3.11 correspondentes aos métodos LxF e NT, respectivamente, novamente indicam que diminuindo o número de  $CFL$  e, conseqüentemente, o passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ , deixando fixo o espaçamento  $\Delta X$  da malha, as soluções numéricas geradas pelos esquemas LxF e NT no tempo  $T_{total} = 1$  localiza o salto aproximadamente em  $x = 0.5$ . Porém, a descontinuidade continua suavizada, sofrendo um aumento da difusão numérica. O mesmo, como na aplicação anterior, não acontece no esquema numérico KT, veja Figura 3.12.

Observando a Figura 3.10, verifica-se que no esquema numérico Lax-Wendroff não é possível decidir exatamente onde ocorre o salto, devido às oscilações. Com isso, o Método de Diferenças Finitas Lax-Wendroff (LW) fornece-nos a velocidade correta de propagação da descontinuidade mas, não resolve adequadamente a descontinuidade, tanto para a equação com a função de fluxo linear, quanto para equação com a função de fluxo não linear, devido as oscilações. Novamente, este esquema numérico não será incluído nas Figuras 3.13, 3.14 e 3.15, onde em um mesmo gráfico, compara-se a difusão numérica dos esquemas numéricos LxF, NT e KT, à medida que o passo de tempo diminui em consequência da condição de  $CFL$ .

- Considerando agora a equação de Burger's (3.5), com a condição inicial contínua dada por:

$$s(x, 0) = 0.5 + \sin x, \quad \text{para } 0 \leq x \leq 6.5. \quad (3.7)$$

Aproxima-se com os esquemas numéricos LxF, NT e KT, a solução desta equação.

No Exemplo 4 do Apêndice A, é calculado o tempo de quebra  $T_b$  em que há formação

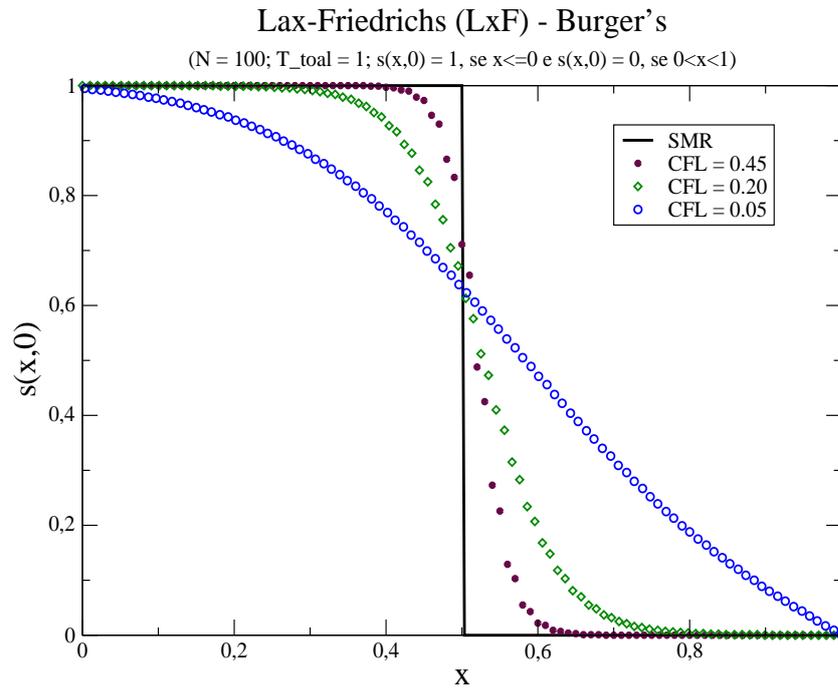


Figura 3.9: Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico LxF para condições de *CFL* diferentes.

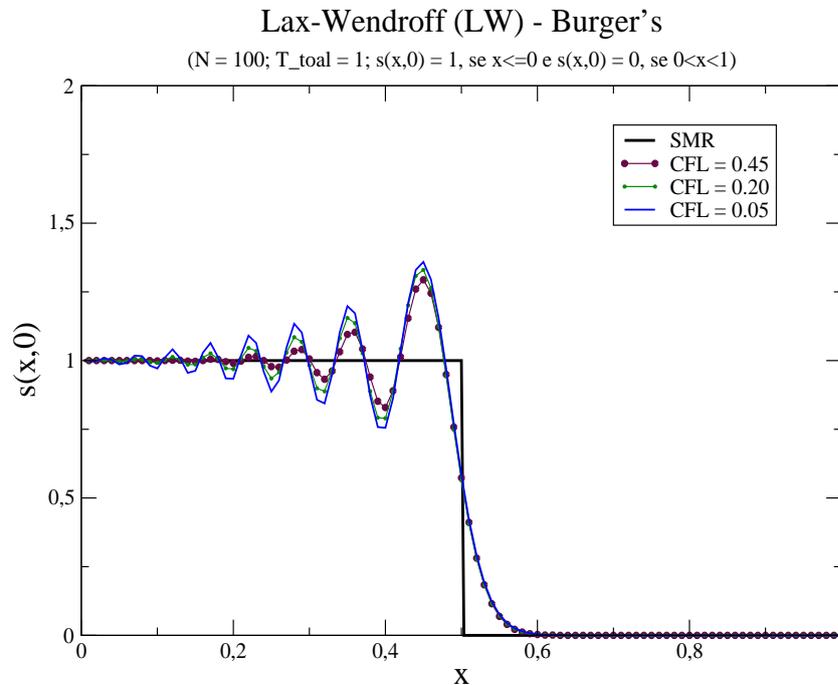


Figura 3.10: Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico LW para condições de *CFL* diferentes.

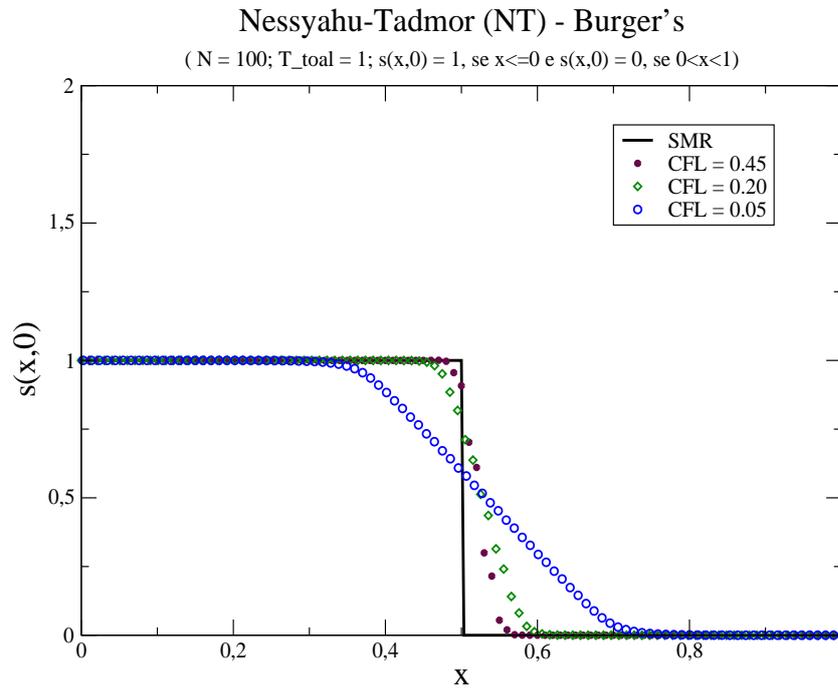


Figura 3.11: Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico NT para condições de  $CFL$  diferentes.

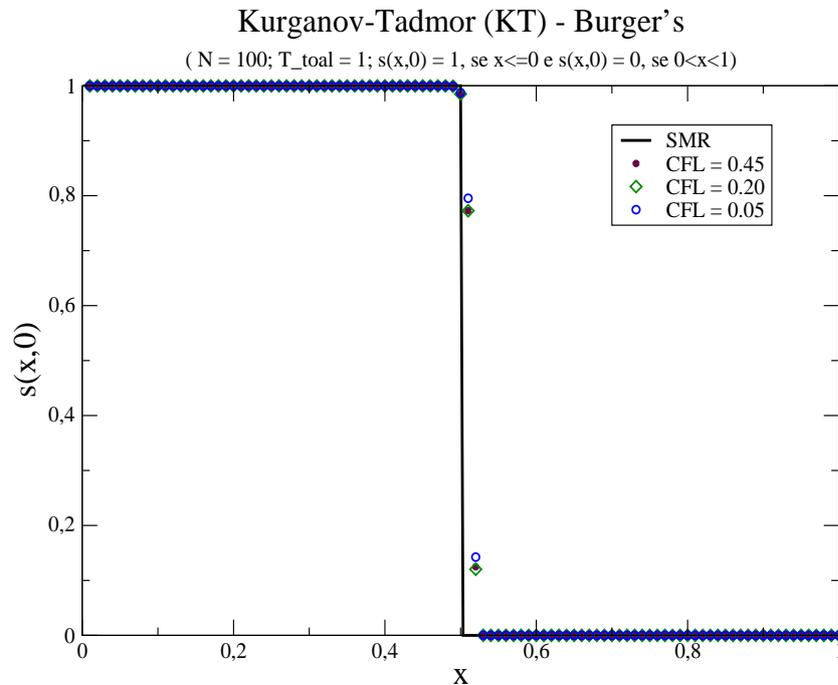


Figura 3.12: Solução aproximada da equação de Burger's usando o esquema numérico KT para condições de  $CFL$  diferentes.

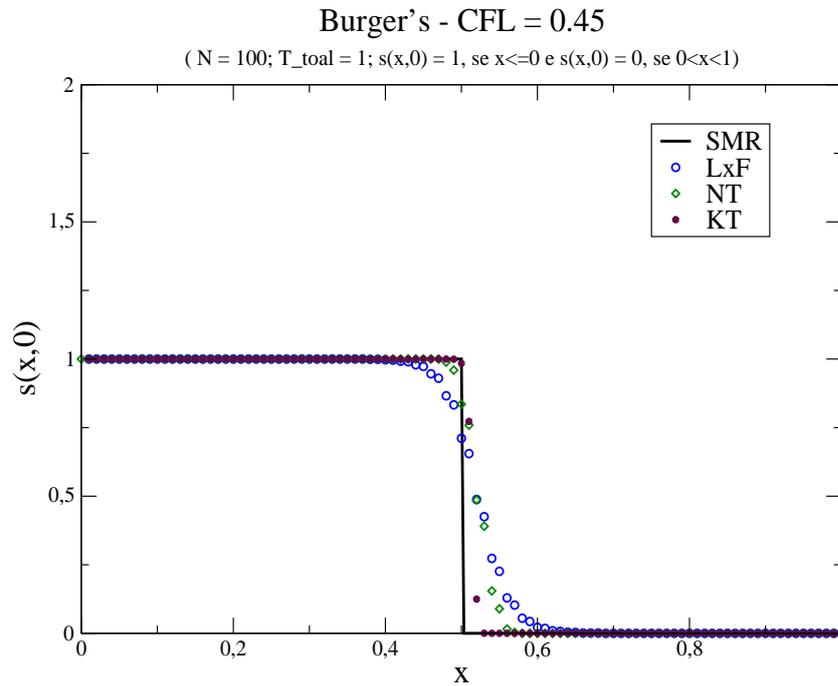


Figura 3.13: Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT,  $CFL = 0,45$ .

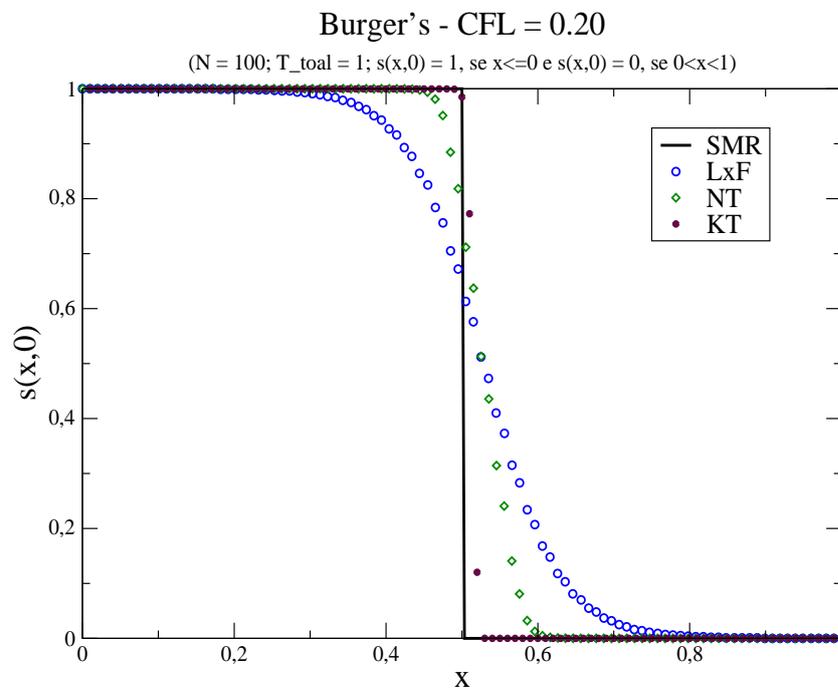


Figura 3.14: Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT,  $CFL = 0,20$ .

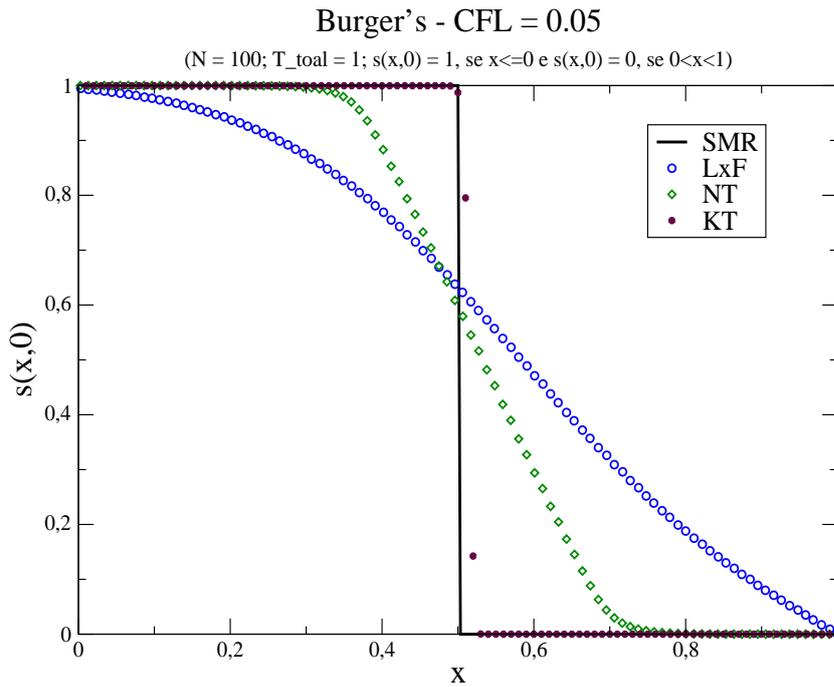


Figura 3.15: Solução aproximada da equação de Burger's, com a condição inicial descontínua, esquemas numéricos LxF, NT e KT,  $CFL = 0,05$ .

de choque para este exemplo,

$$\begin{aligned}
 T_b &= -\frac{1}{\min v'(x_0)} \\
 &= -\frac{1}{\min \cos(x)} \\
 &= -\frac{1}{(-1)} \\
 \Rightarrow T_b &= 1,
 \end{aligned}$$

onde a solução no tempo  $t$  é dada por

$$s(x, t) = 0.5 + \sin(x_0) = 0.5 + \sin(x - st). \tag{3.8}$$

Observou-se também, que para um tempo posterior ao choque, por exemplo  $t = 2$ , a solução, se existisse, seria uma *triple valued function*, isto é, uma solução com três valores em cada ponto, cujo gráfico é mostrado na Figura A.3 do Apêndice A.

$$s(x, 2) = 0.5 + \sin(x - 2s(x, 2)). \tag{3.9}$$

A malha computacional usada é de  $N = 100$  pontos e os números de  $CFL$  considerados são 0.60, 0.20 e 0.05, para cada um dos esquemas numéricos.

As Figuras 3.16 e 3.17, indicam que mesmo com a condição inicial contínua, diminuindo o número de  $CFL$  e, conseqüentemente, o passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ , deixando fixo o espaçamento  $\Delta X$  da malha, as soluções numéricas geradas pelos esquemas LxF e NT sofrem de crescente difusão numérica. O mesmo, como nas aplicações anteriores, não acontece com esquema numérico KT, veja a Figura 3.18.

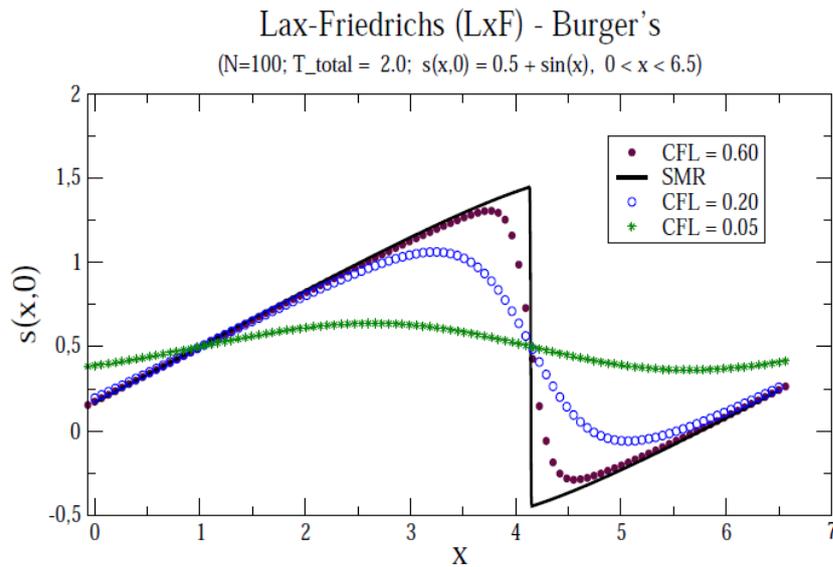


Figura 3.16: Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico LxF.

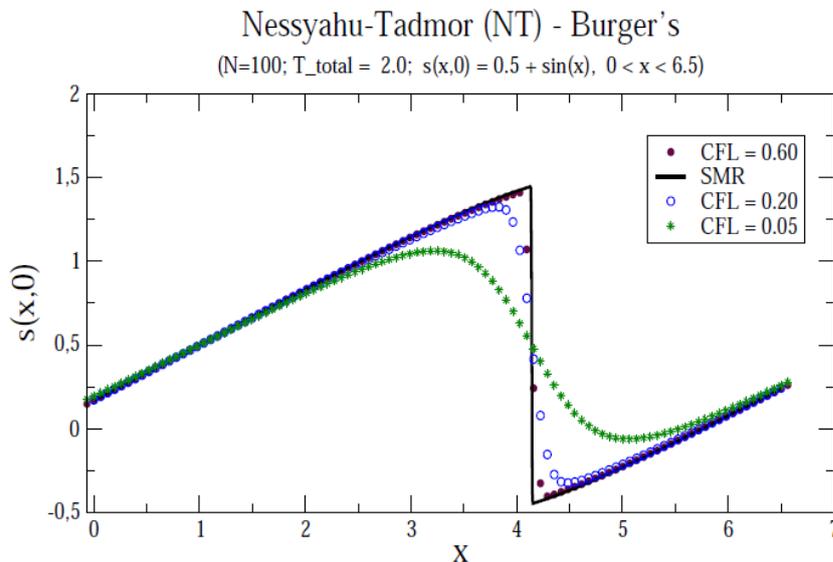


Figura 3.17: Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico NT.

Nas Figuras 3.19, 3.20 e 3.21, compara-se em um mesmo gráficos a difusão numérica dos esquemas numéricos LxF, NT e KT, à medida que o passo de tempo diminui.

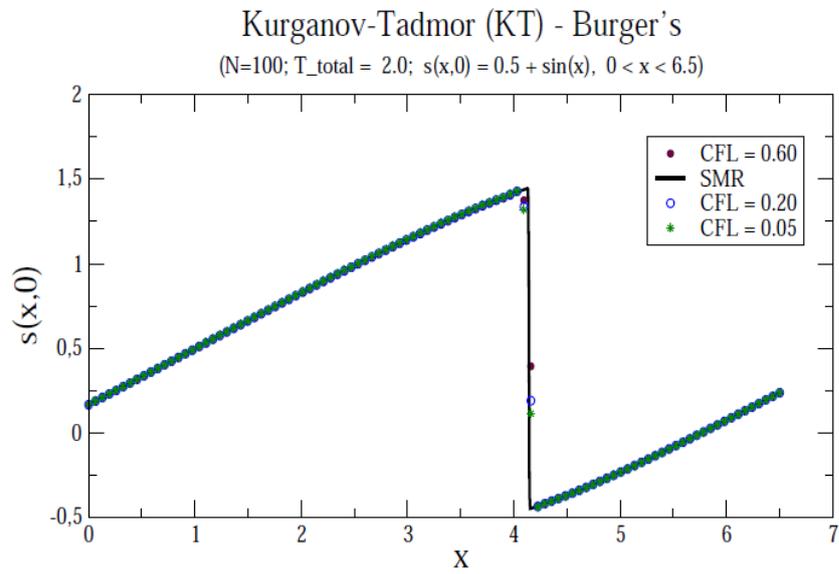


Figura 3.18: Solução aproximada da equação de Burger's, esquema numérico KT.

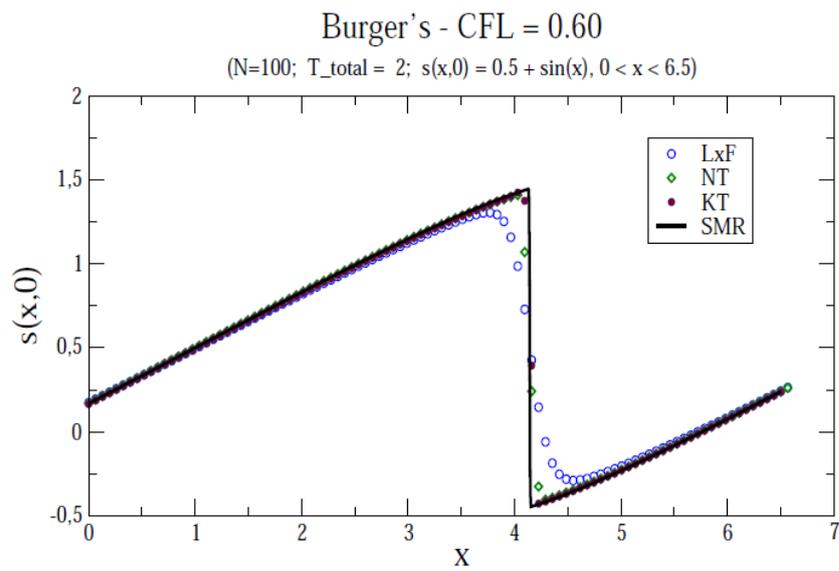


Figura 3.19: Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, CFL = 0,60.

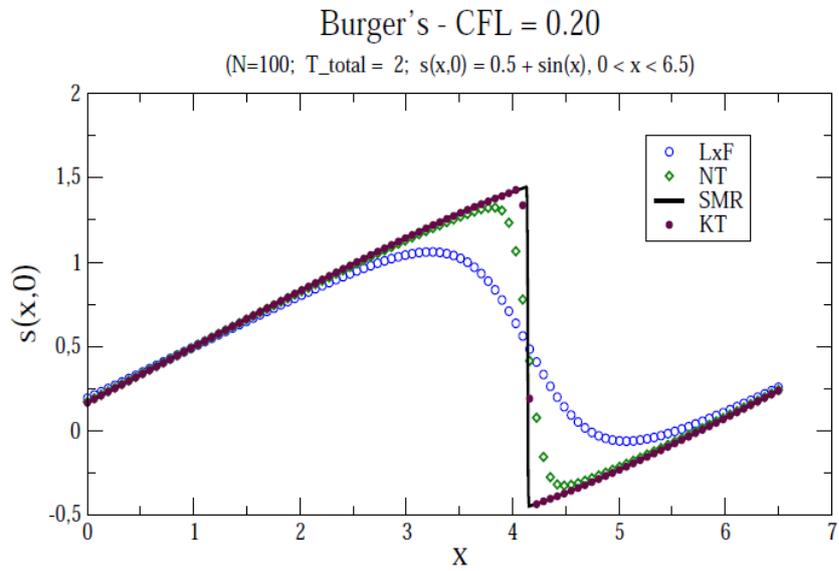


Figura 3.20: Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, CFL = 0, 20.

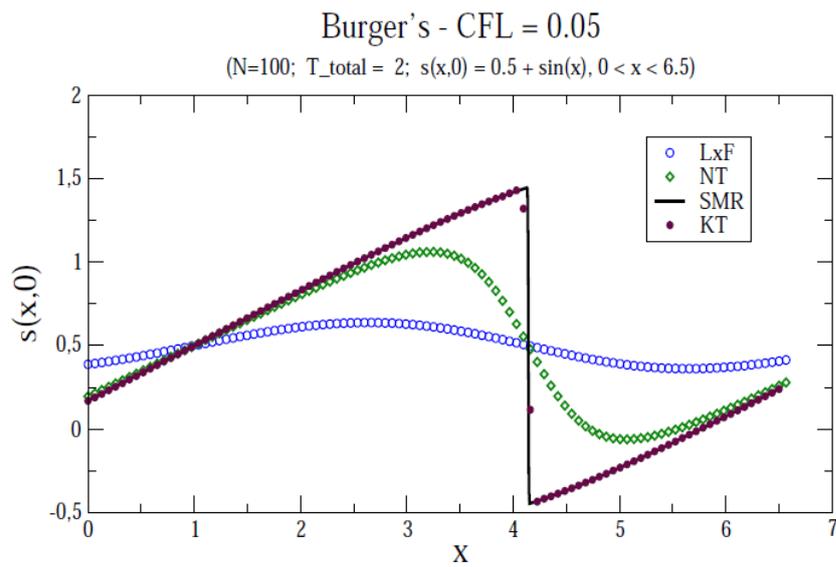


Figura 3.21: Aproximação da equação de Burger's, LxF, NT e KT, CFL = 0, 05.

### 3.2.2 Equação de Buckley-Leverett

Finalizando a Seção 3.2, serão apresentadas duas aplicações, onde aproxima-se a solução da equação de convecção com fluxo não linear de Buckley-Leverett com esquemas numéricos NT e KT, em uma mesma figura, com uma condição inicial descontínua e condição de  $CFL = 0.45$ . Serão utilizadas duas funções de fluxo distintas (1.50) e (1.55), respectivamente, vistas na Seção 1.10 do Capítulo 1.

- Será aproximada, com os esquemas numéricos NT e KT, a solução da Equação de Buckley-Leverett,

$$s_t + f(s)_x = 0, \quad x \in (-1, 2), \quad t > 0$$

com condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 1, & -1 < x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < 2 \end{cases},$$

e função de fluxo dada por  $f(s) = \left( \frac{s^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$ .

As soluções numéricas para esta aplicação foram calculadas no tempo  $T_{total} = 0.5$ , tamanho da malha computacional  $N = 300$  pontos e  $CFL = 0.45$ .

A velocidade de propagação da descontinuidade (3.2), para esta aplicação será dada por

$$v = \frac{(f(0) - f(1))}{(0 - 1)} = 1,$$

em consequência, a distância percorrida pela descontinuidade  $x_C = v \cdot t$  será

$$x_C = 1 \cdot 0.5 = 0.5.$$

Observando a Figura 3.22, verifica-se que o esquema numérico KT possui a melhor solução aproximada para Equação de Buckley-Leverett, quando comparado com o esquema numérico NT, para a função de fluxo dada por  $f(s) = \left( \frac{s^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$ .

- Aproximando, novamente, com os esquemas numéricos NT e KT, a solução da Equação de Buckley-Leverett,

$$s_t + f(s)_x = 0, \quad x \in (-1, 1), \quad t > 0$$

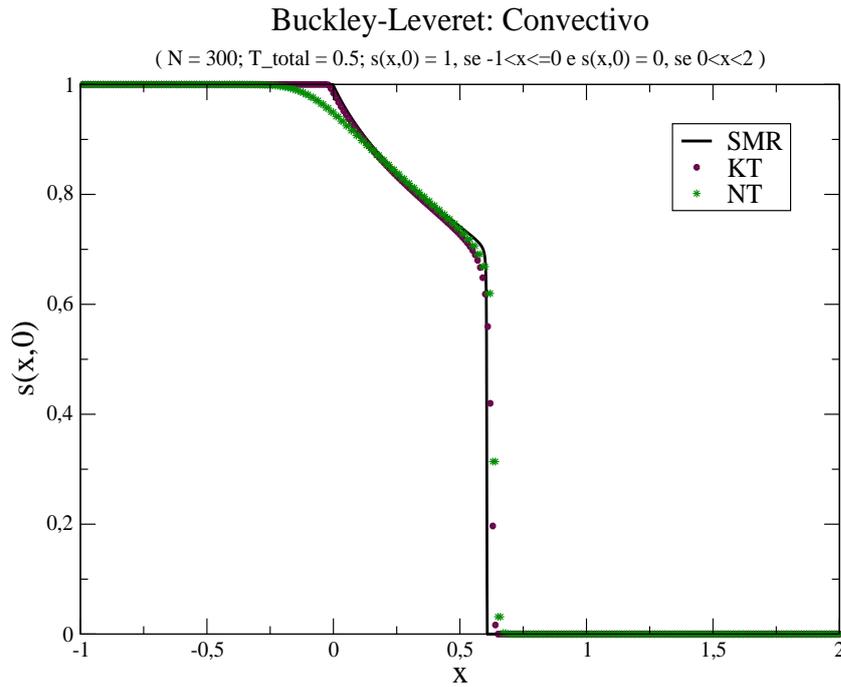


Figura 3.22: Solução aproximada da Equação de Buckley-Leverett usando os esquemas numéricos NT e KT

com condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 0, & -1 < x \leq 0 \\ 1, & 0 < x < 1 \end{cases},$$

e função de fluxo dada por  $f(s) = \left( -\frac{s^2(1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$ .

As soluções numéricas para esta aplicação foram calculadas no tempo  $T_{total} = 1.0$ , tamanho da malha computacional  $N = 200$  pontos e  $CFL = 0.45$ .

A velocidade de propagação da descontinuidade (3.2), para esta aplicação será dada por

$$v = \frac{(f(0) - f(1))}{(0 - 1)} = 0,$$

em consequência, a distância percorrida pela descontinuidade  $x_C = v \cdot t$  será

$$x_C = 0 \cdot 1 = 0.$$

Logo, o sistema está estacionado.

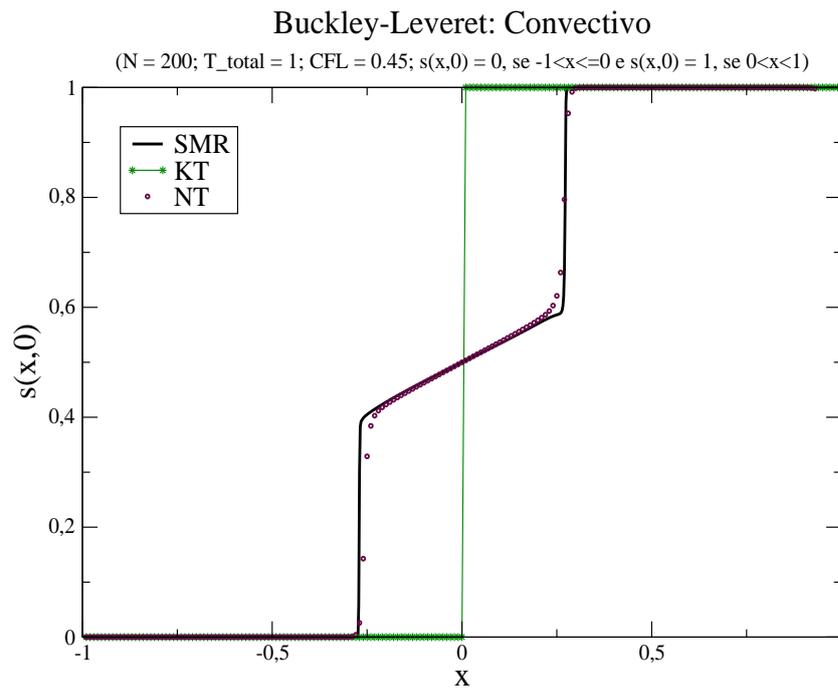


Figura 3.23: Solução aproximada da Equação de Buckley-Leverett usando os esquemas numéricos NT e KT

Observa-se na Figura 3.23 que o esquema numérico NT apresenta uma boa aproximação da **SMR**. Porém, solução aproximada do esquema numérico KT não corresponde com a solução física desta equação de convecção, com a função de fluxo não linear  $f(s) = \left( -\frac{s^2(1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$ .

Segundo Aziz [4], quando a equação diferencial não está bem posta, a mesma pode possuir mais de uma solução em problemas puramente hiperbólicos não lineares. Com isso, o esquema numérico pode convergir para uma das soluções matematicamente possível, mas fisicamente incorreta. Este problema pode ser contornado adicionando restrições ao modelo matemático, como por exemplo a introdução de termos que considerem pequenas viscosidades.

Na próxima seção este mesmo exemplo será aplicado para equações de convecção-difusão, acrescentando e variando os coeficientes de difusão  $D_i$ .

### 3.3 Equações de convecção-difusão com fluxo não linear

Considere a equação de convecção-difusão do tipo

$$s_t + f(s)_x = (D(s)s_x)_x, \quad D(s) \geq 0, \quad (3.10)$$

sujeitas à condição inicial,

$$s(x, 0) = s_0(x), \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

onde  $s = s(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$  é uma quantidade conservada e  $f(s)$  é chamada função de fluxo.

Com o esquema numérico KT, serão aplicados três exemplos, um exemplo para equação de convecção-difusão de Burger's e dois exemplos para equação de convecção-difusão de Buckley-Leverett, como as dos exemplos da Seção 3.3.2. Para todos exemplos a condição inicial  $s(x, 0) = s_0(x)$  será descontínua, número de  $CFL = 0.45$  e os coeficientes de difusão constantes  $D_1, D_2, D_3$  e  $D_{14}$ . Por meio das Tabelas 3.1, 3.2 e 3.3, poderá ser observado o tempo de processamento (CPU) para cada um destes coeficientes de difusão.

### 3.3.1 Equação de Burger's

Utilizando o esquema de Kurganov-Tadmor (KT) para aproximar a solução da equação de Burger's

$$s_t + f(s)_x = (D \cdot s_x)_x, \quad x \in (0, 3), \quad t > 0, \tag{3.11}$$

com condição inicial,

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 1, & 0 < x \leq 1 \\ 0, & 1 < x < 3 \end{cases}.$$

Onde considera-se  $D(s) = D > 0$  constante e a função de fluxo  $f(s) = \left(\frac{s^2}{2}\right)$ .

As soluções numéricas foram calculadas no tempo  $T_{total} = 1$ , tamanho da malha  $N = 300$  pontos, condição de  $CFL = 0.45$  e quatro coeficientes de difusão  $D_i$ .

Tabela 3.1: Tempo de processamento para aproximação da Equação de Burger's, representada pela Figura 3.24.

$D_i=1E-i=10^{-i}$	Tempo de processamento (segundos)
$D_1=1E-1=10^{-1}$	0.960000
$D_2=1E-2=10^{-2}$	0.900000
$D_3=1E-3=10^{-3}$	0.870000
$D_{14}=1E-14=10^{-14}$	0.670000

A Tabela 3.1 relaciona o tempo de processamento para Equação de Burger's com quatro coeficientes de difusão  $D_i$  distintos apresentados na Figura 3.24. Observa-se que o tempo de processamento pode ser reduzido com a diminuição do coeficiente de difusão,

ou seja, a solução aproximada com coeficiente de difusão  $D_1 = 10^{-1}$  apresenta um custo computacional maior quando comparada à solução com o coeficiente de difusão  $D_{14} = 10^{-14}$ .

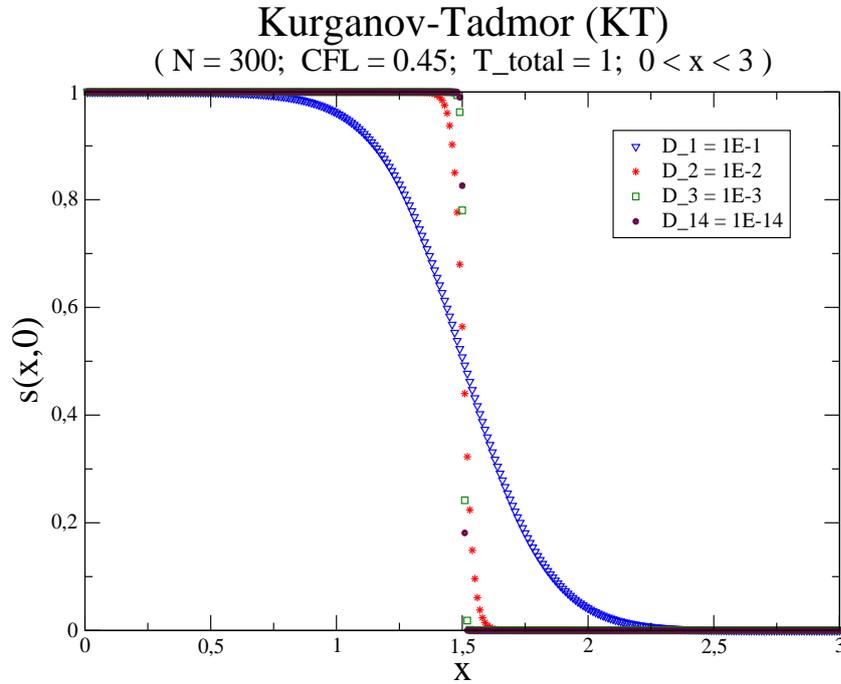


Figura 3.24: Solução aproximada da equação Burger's usando o esquema KT e coeficientes difusivos  $D_1$ ,  $D_2$ ,  $D_3$  e  $D_{14}$ .

### 3.3.2 Equação de Buckley-Leverett

- Considere a Equação de Buckley-Leverett

$$s_t + f(s)_x = (D \cdot s_x)_x, \quad x \in (-1, 2), \quad t > 0, \quad (3.12)$$

com condição inicial,

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 1, & -1 < x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < 2 \end{cases}.$$

Onde foi considerado  $D(s) = D > 0$  constante e a função de fluxo  $f(s) = \left( \frac{s^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$ .

As soluções numéricas foram calculadas no tempo  $T_{total} = 0.5$ , tamanho da malha  $N = 300$ ,  $CFL = 0.45$  e quatro coeficientes difusivos  $D_i$ . A Tabela 3.2 relaciona o tempo de processamento para Equação de Buckley-Leverett com quatro coeficientes de difusão

$D_i$  distintos apresentados na Figura 3.25. Novamente, observa-se que o tempo de processamento pode ser reduzido com a diminuição do coeficiente de difusão, ou seja, a solução aproximada com coeficiente de difusão  $D_1 = 10^{-1}$  apresenta um custo computacional maior quando comparada à solução com o coeficiente de difusão  $D_{14} = 10^{-14}$ .

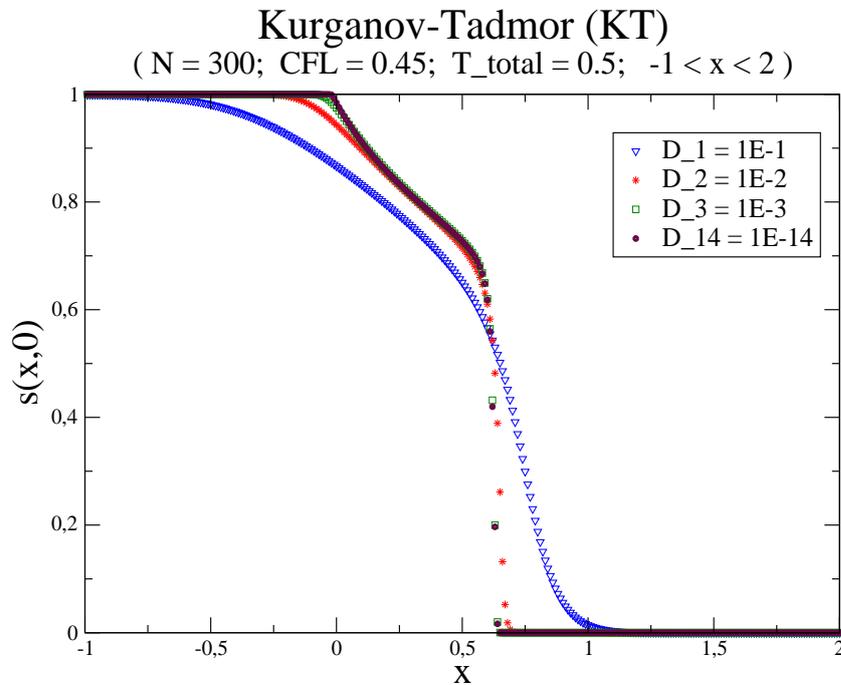


Figura 3.25: Solução aproximada da Equação Buckley-Leverett usando o esquema KT e coeficientes difusivos  $D_1, D_2, D_3$  e  $D_{14}$ .

- Considere agora a Equação de Buckley-Leverett (3.12),  $x \in (-1, 1)$ , com a função de fluxo  $f(s) = \left( -\frac{s^2(1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right)$  e condição inicial

$$s(x, 0) = s_0(x) = \begin{cases} 0, & -1 < x \leq 0 \\ 1, & 0 < x < 1 \end{cases},$$

As soluções numéricas foram calculadas no tempo  $T_{total} = 1$ , tamanho da malha

Tabela 3.2: Tempo de processamento para aproximação da Equação de Buckley-Leverett, representada pela Figura 3.25.

$D_i=1E-i=10^{-i}$	Tempo de processamento (segundos)
$D_1=1E-1=10^{-1}$	2.740000
$D_2=1E-2=10^{-2}$	1.170000
$D_3=1E-3=10^{-3}$	0.130000
$D_{14}=1E-14=10^{-14}$	0.080000

$N = 200$ ,  $CFL = 0.45$  e quatro coeficientes difusivos  $D_i$ . A Tabela 3.3 relaciona o tempo

Tabela 3.3: Tempo de processamento para aproximação da Equação de Buckley-Leverett, representada pela Figura 3.26.

$D_i=1E-i=10^{-i}$	Tempo de processamento (segundos)
$D_1=1E-1=10^{-1}$	0.510000
$D_2=1E-2=10^{-2}$	0.430000
$D_3=1E-3=10^{-3}$	0.040000
$D_{14}=1E-14=10^{-14}$	0.030000

de processamento para Equação de Buckley-Leverett com quatro coeficientes de difusão  $D_i$  distintos apresentados na Figura 3.26. Novamente, observa-se que o tempo de processamento pode ser reduzido com a diminuição do coeficiente de difusão, ou seja, a solução aproximada com coeficiente de difusão  $D_1 = 10^{-1}$  apresenta um custo computacional maior quando comparada à solução com o coeficiente de difusão  $D_{14} = 10^{-14}$ .

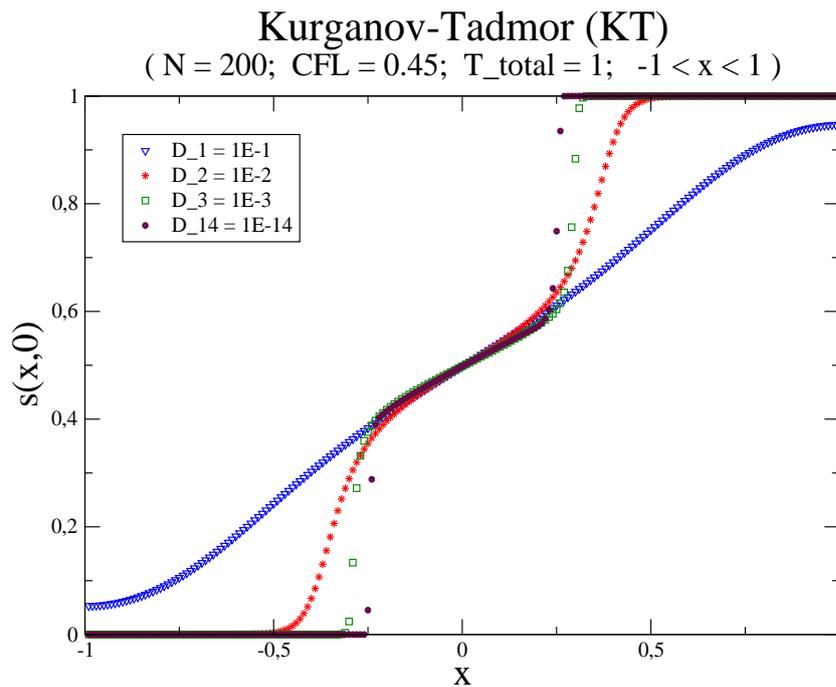


Figura 3.26: Solução aproximada da Equação Buckley-Leverett usando o esquema KT e coeficientes difusivos  $D_1$ ,  $D_2$ ,  $D_3$  e  $D_{14}$ .

## Capítulo 4

# Conclusões e Trabalhos Futuros

### 4.1 Conclusões

Neste trabalho foram apresentadas as idéias básicas do Método de Volumes Finitos (MVF) em  $1D$ , para obter soluções numéricas aproximadas de leis de conservação lineares e não lineares, através do *Algoritmo REA* (Reconstruct, Evolve, Average), proposto por Godunov [19].

No Capítulo 3, Resultados Numéricos, observou-se que o Método de Diferenças Finitas (MDF) Lax e Wendroff [26] fornece a velocidade correta de propagação da descontinuidade mas, produz oscilações espúrias na presença de descontinuidades, para leis de conservação lineares e não lineares, e não resolve adequadamente a descontinuidade pois seu termo principal é um termo dispersivo.

Verificou-se que as soluções numéricas geradas nos exemplos do Capítulo 3, pelos esquemas numéricos Lax-Friedrichs [17] e Nessyahu-Tadmor [31], estão fortemente suavizadas, sofrendo um aumento da difusão numérica, principalmente com a diminuição do número da condição de  $CFL$  e, conseqüentemente, o passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ . O mesmo não acontece no esquema numérico Kurganov-Tadmor [23].

Na formulação semi-discreta do esquema numérico Kurganov-Tadmor [23], foi apresentado o método iterativo de Runge-Kuta, para resolver uma equação diferencial ordinária em cada célula  $I_j$ , onde os leques de Riemann estão dentro do domínio onde se calcula cada média em célula. Com isso, as médias são tomadas sobre leques de Riemann de tamanhos variados proporcionais ao passo de tempo, não sofrendo de aumento da difusão numérica com a diminuição do número da condição de  $CFL$  e, conseqüentemente, o passo de tempo  $\Delta t_{cfl}$ . Por isso, pode-se escrever o esquema numérico Kurganov-Tadmor

(KT) nas formas semi-discretas (2.77) e (2.84), como um sistema de equações diferenciais ordinárias.

O esquema numérico Kurganov-Tadmor [23], apesar de parecer ser um método numérico muito bom para capturar choques, convergiu para uma das soluções matematicamente possível, mas fisicamente incorreta, como foi observado na Figura 3.23, da equação de convecção não linear de Buckley-Leverett com a função de fluxo (1.55),

$$f(s) = \left( -\frac{s^2 \cdot (1-s)^2}{s^2 + (1-s)^2} \right),$$

vista nos Capítulos 1 e Capítulo 3.

Finalizando, observou-se na Secção 3.3 por meio das Tabelas 3.1, 3.2 e 3.1, que nas três aplicações para equação de convecção-difusão, tempo de processamento pode ser reduzido com a diminuição do coeficiente de difusão, ou seja, a solução aproximada com coeficiente de difusão  $D_1 = 10^{-1}$  apresenta um custo computacional maior quando comparada à solução com o coeficiente de difusão  $D_{14} = 10^{-14}$ .

## 4.2 Trabalhos Futuros

A continuação deste trabalho, seria sua extensão para maiores dimensões no espaço,  $2D$  e  $3D$ .

Aplicação em diversos problemas, como nas áreas de Mecânica dos fluidos, Dinâmica dos gases, Acústica e Biomecânica.

## Referências

- [1] TANQUE DE PROVAS NUMÉRICO DA USP, World Wide Web, [www.tpn.usp.br](http://www.tpn.usp.br), "Acessado em 07/2012".
- [2] ABREU, E.; PEREIRA, F.; RIBEIRO, S.. *Central schemes for porous media flows*, Computational and Applied Mathematics, 28(1):87–110, 2009.
- [3] ANDERSON, D. A.; TANNEHILL, J. C.; PLETCHER, R. H.. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Nova York, 1984.
- [4] AZIZ, K.; SETTARI, A.. *Petroleum Reservoir Simulation*, Elsevier Applied Science Publishers, London and New York, 1979.
- [5] BARR, L. W. *The Origin of Quantitative Diffusion Measurements in Solids. A Centenary View in: Diffusion in Materials*, DIMAT 96, H. Mehrer, Chr. Herzig, N. A. Stolwijk, H. Bracht (Eds.), Scitec Publications, 1–9 (1997).
- [6] BEZERRA, D. J.. *Métodos Numéricos para Leis de Conservação*, Dissertação, ICMC/USP, São Carlos, SP, 2003.
- [7] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*, LTC editora, 7a edição, 2002.
- [8] BORGES, M. R.; FURTADO, F.; PEREIRA, F.; SOUTO, H. P. A.. *Scaling analysis for the tracer flow problem in self-similar permeability fields*, Multiscale Modeling Simulation, 7(3):1130–1147, 2008.
- [9] BORGES, M. R.; MURAD, M. A.; FURTADO, F.; PEREIRA, F.. *A new multiscale scheme for computing statistical moments in single phase flow in heterogeneous porous media*, Advances in Water Resources, 32:361–382, 2009.
- [10] BORTOLI, L. A.. *Introdução à Dinâmica dos Fluidos Computacional*, Porto Alegre/RS, UFRGS, 2000.
- [11] BUTCHER, J. C.. *The Numerical analysis of ordinary differential equations. Runge-Kutta and general linear methods*, John Wiley, Chichester, 1987.
- [12] COURANT, R.; FRIEDRICHS, K. O.; LEWY, H.. *Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik*, Math. Ann. 100, 32–74, 1928.
- [13] COURANT, R.; FRIEDRICHS, K. O.; LEWY, H.. *On the partial difference equations of mathematical physics*, IBM Journal, Vol. 11, pp. 215-234, 1967.
- [14] DE AZEVEDO, A. V. F.; ESCHENAZI, C. S.. *Leis de conservação com aplicações ao tráfego nas cidades*. II Bienal da Sociedade Brasileira de Matemática, Salvador 2004.

- [15] ESCHENAZI, C. S.. *Leis de Conservação e Aplicações ao Tráfego nas Cidades*, 1o Colóquio da Região Sudeste, UFMG, Belo Horizonte, MG, 2011.
- [16] FERZIGER, J. H.; PERIC, M.. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Comm. Pure Appl. Math., 7:345–392, 1954.
- [17] FRIEDRICH, K. O.. *Symmetric hyperbolic linear differential equations*, Comm. Pure Appl. Math., 7:345–392, 1954.
- [18] GERMER, E. M.. *Verificação de funções de interpolação em advecção-difusão 1D com volumes finitos*, Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2009.
- [19] GODUNOV, S. K.. *A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics*, Mat. Sb. (N.S.), 1959.
- [20] GUIDORIZZI, HAMILTON L.. *Um Curso de Cálculo*. Vol. 3, 5a ed., LTC, Rio de Janeiro, Brasil, 2001.
- [21] GUINOT, V.. *Godunov Type Schemes: An Introduction for Engineers*, Elsevier Science, 2003.
- [22] KREYISZIG, E.. *Advanced Engineering Mathematics*, Wiley, 8ed., 1999.
- [23] KURGANOV, A.; TADMOR, E.. *New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws e convection-diffusion equations*, J. Comput. Phys., 2000.
- [24] CORREA, L.; LIMA, G. A. B.; FERREIRA, V. G.. *Metodologia para desenvolvimento de esquemas upwind de alta resolução*, Matemática Aplicada; v. 57, 139 p.,SBMAC, UNESP, São Carlos, SP, 2011.
- [25] LAX, P. D.. *Weak solutions of non-linear hyperbolic equations e their numerical computation*, Comm. Pure Appl. Math., 7:159–193, 1954.
- [26] LAX, P. D.; WENDROFF B.. *Systems of conservation laws*, *Communications in Pure and Applied Mathematics*, 13, pp. 217-237, 1960.
- [27] LEVEQUE, R. J.. *Numerical Methods for Conservation Laws*, Lectures in Mathematics, ETH Zurich, 2ed., 1992.
- [28] LEVEQUE, R. J.. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge Texts in Applied Mathematics, University of Cambridge, 2004.
- [29] MALISKA, C. R.. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, LTC, 2ed., 2004.
- [30] MIRANDA, J. M.; LUIS, J. F.; COSTA, P. T.; SANTOS, F. A. M.. *Fundamentos de Geofísica*, Cap. 6, Fluxo de Calor, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Portugal, 2000.
- [31] NESSYAHU, H.; TADMOR, E.. *Nonoscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws*, J. Comput. Phys., 1990.

- [32] OLIVEIRA, M. H.. *Métodos numéricos não oscilatórios aplicados às leis de conservação hiperbólicas unidimensionais*, Dissertação, UFU, Uberlândia, MG, 2010.
- [33] RIBEIRO, S. S.. *Novos Esquemas Centrais de Diferenças Finitas para a Simulação de Escoamentos Multifásicos em Reservatórios de Petróleo*, Tese de D.Sc., IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, 2007.
- [34] RISPOLI, V. C.. *Estudo Analítico e Numérico de um Modelo para Escoamento Trifásico*, ICEx/UNB, Brasília, DF, 2007.
- [35] ROBERTS-AUSTEN, W. C.. *Bakerian Lecture on the Diffusion in Metals, Phil. Trans. Roy. Soc.*, Part I: Diffusion of Molten Metals, 383–403, Part II: Diffusion of Solid Metals, 404–415. A 187, 383, 1896.
- [36] RUSANOV, V. V.. *The calculation of the interaction of non-stationary shock waves with barriers*, Ž. Vyčisl. Mat. i Mat. Fiz., 1961.
- [37] SANTOS SOBRINHO, C. L. S.. *A Aplicação do Ensino de História da Ciência em uma Aprendizagem Significativa da Disciplina Química*, Dissertação, UNIGRANRIO, Duque de Caxias, RJ, 2010.
- [38] SMOLLER, J.. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, New York, 1983.
- [39] SCHNEIDER, F. A.. *Verificação de Soluções Numéricas em Problemas Difusivos e Advectivos com Malhas Não-Uniformes*, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos, UFPR, Curitiba, 2007.
- [40] SHU, C. W.. *Total variation diminishing time discretizations*, SISSC, 1988.
- [41] SHU, C. W.; OSHER, S.. *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes*, Journal of Computational Physics, 1988.
- [42] THOE, D. W.; ZACHMANOGLU, E. C.. *Introduction to Partial Differential Equation with applications*. Dover, 1986.
- [43] THOMAS, J. W.. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*, Texts in Applied Mathematics 22, Springer-Verlag, NY, 1995.
- [44] THOMAS, J. W.. *Numerical Partial Differential Equations: Conservation Laws and Elliptic Equations*, Texts in Applied Mathematics 33, Springer-Verlag, NY, 1999.
- [45] VISTA, R. C.. *Estimativa do erro de discretização analítico na solução de equações diferenciais utilizando o método de volumes finitos*, Tese de D.Sc., IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, 2010.
- [46] WHITHAM, G.. *Linear and nonlinear waves*, Wiley New York, 1974.
- [47] ZILL, D. G.; CULLEN, M. R.. *Equações Diferenciais - Volume 2*, 3.ed., São Paulo: Makron Books, 434p., 2001.

## APÊNDICE A - Exemplos do Capítulo 1

Neste Apêndice serão apresentados 09 (nove) exemplos teóricos extraídos de Thomas [44], com objetivo de ilustrar alguns conceitos abordados no Capítulo 1.

**Exemplo 1.** *Seja  $s_t + s_x = 0$  uma equação linear com a condição inicial dada por  $s_0(x) = 0.5 + \sin(x)$ ,  $x \in [0, 1]$ , deseja-se encontrar as curvas características no tempo  $t_0 = 0$  para uma equação de convecção linear.*

**Solução:** Nesse exemplo  $\bar{v} = 1$  e  $\frac{1}{\bar{v}} = 1$ . Logo, a curva característica para o caso linear, relacionada com o ponto  $x_0$  será dada por

$$x(t) = \bar{v} \cdot t + x_0 = t + x_0.$$

Ao longo destas curvas características  $s(x, t)$  é constante e seu valor em qualquer ponto  $(x, t)$  é dado por

$$s(x, t) = s_0(x_0, 0) = s_0(x_0) = 0.5 + \sin(x_0) = 0.5 + \sin(x - t), \quad (\text{A.1})$$

pois aqui  $x_0 = x - t$ .

**Exemplo 2.** *Considere a equação de Burger's em  $[0, 1]$*

$$s_t + \left(\frac{1}{2}s^2\right)_x = 0 \quad (\text{A.2})$$

com a condição inicial  $s_0(x) = \sin(2\pi x)$ ,  $x \in [0, 1]$ .

**Solução:** Nesse caso, tem-se  $f(s) = \frac{1}{2}s^2$  e  $f'(s) = s$ . A curva característica relacionada com o ponto  $x_0$  será dada por:

$$x(t) = f'(s_0) \cdot t + x_0 = \sin(2\pi x_0) \cdot t + x_0.$$

Na Figura A.1, será apresentado o gráfico da condição inicial  $s_0(x) = \sin(2\pi x)$  (curva pontilhada) e das retas características, onde o eixo vertical representa ambos  $s_0$  e  $t$ ,

possibilitando a apresentação dos gráficos de  $s_0$  e das características ao mesmo tempo. Note que para cada ponto  $x_0 \in [0, 1]$  a inclinação da característica é  $\frac{1}{s_0(x_0)} = \frac{1}{\sin(2\pi x_0)}$ . Verifica-se ainda que as características se interceptam ao longo da linha vertical  $x = 0$ , que é característica associada com  $x_0 = \frac{1}{2}$  e todas as curvas características se interceptam ao longo desta linha, devido a simetria na condição inicial.

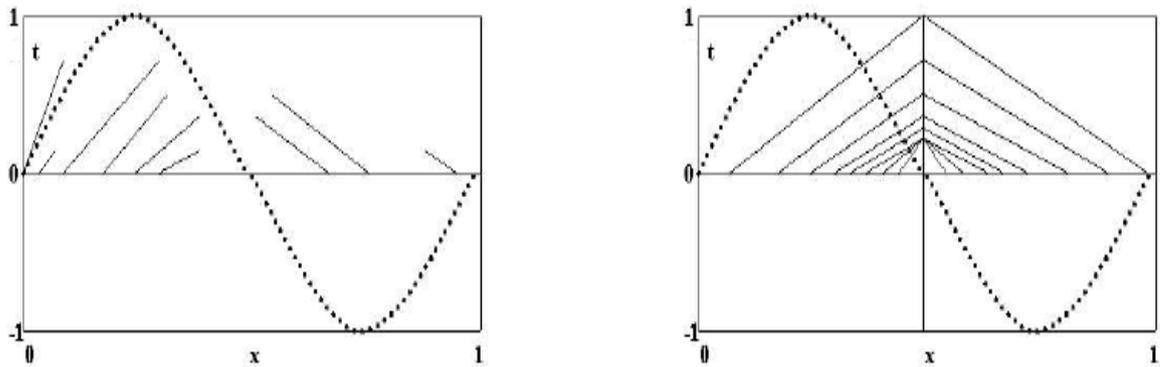


Figura A.1: Gráfico da condição inicial  $s_0(x) = \sin(2\pi x)$  e das curvas característica com inclinação  $\frac{1}{s_0(x)}$ , Thomas [44].

O significado da interseção das características é que nesse ponto a solução terá mais de um valor.

**Exemplo 3.** *Seja a mesma equação de Burger's do exemplo anterior, porém com a condição inicial  $s_0(x) = 0.5 + \sin(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}$ ,  $t > 0$ .*

**Solução:** A curva característica relacionada com o ponto  $x_0$  será dada por

$$x(t) = f'(s_0) \cdot t + x_0 = (0.5 + \sin(x_0)) \cdot t + x_0.$$

A solução deste problema no tempo  $t$  será dada por:

$$s(x, t) = s_0(x_0, 0) = s_0(x_0) = 0.5 + \sin(x_0) = 0.5 + \sin(x - st), \tag{A.3}$$

pois aqui  $x_0 = x - st$ , Thomas [44].

**Exemplo 4.** *Determine o tempo em que há formação de choque para equação de Burger's*

dada por

$$s_t + \left(\frac{1}{2}s^2\right)_x = 0 \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0$$

$$s(x, 0) = 0.5 + \sin(x) \quad x \in \mathbb{R}$$

**Solução:** Aplicando diretamente a equação (1.29), determinada acima para o caso geral, obtém-se:

$$\begin{aligned} T_b &= -\frac{1}{\min v'(x_0)} \\ &= -\frac{1}{\min \cos(x)} \\ &= -\frac{1}{(-1)} \\ &\Rightarrow T_b = 1. \end{aligned}$$

Como foi visto na seção 1.3, a solução para este exemplo no tempo  $t$  é dada por:

$$s(x, t) = 0.5 + \sin(x_0) = 0.5 + \sin(x - st). \tag{A.4}$$

No sentido clássico, a solução só existe até o tempo de quebra  $T_b = 1$ , como mostra a Figura A.2.

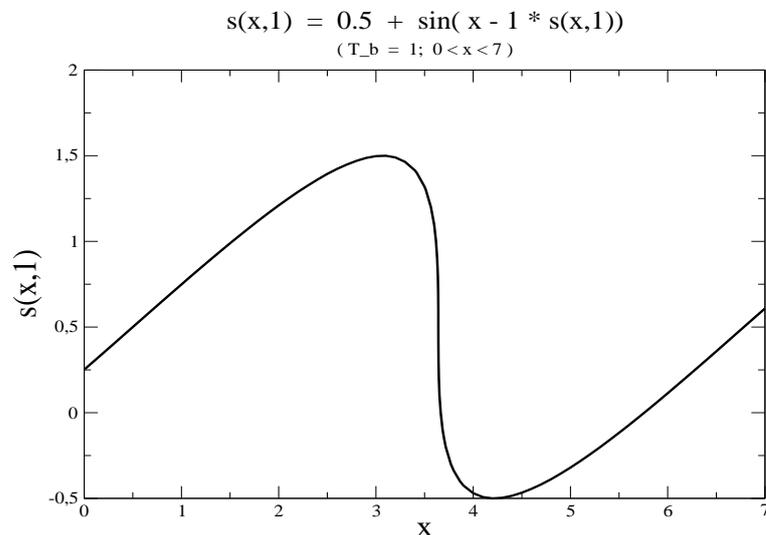


Figura A.2: Solução no tempo  $t = 1$ .

Para um tempo posterior ao choque, por exemplo  $t = 2$ , a solução, se existisse, seria uma *triple valued function*, isto é, uma solução com 03 (três) valores em cada ponto, cujo gráfico é mostrado na Figura A.3.

$$s(x, 2) = 0.5 + \sin(x - 2s). \tag{A.5}$$

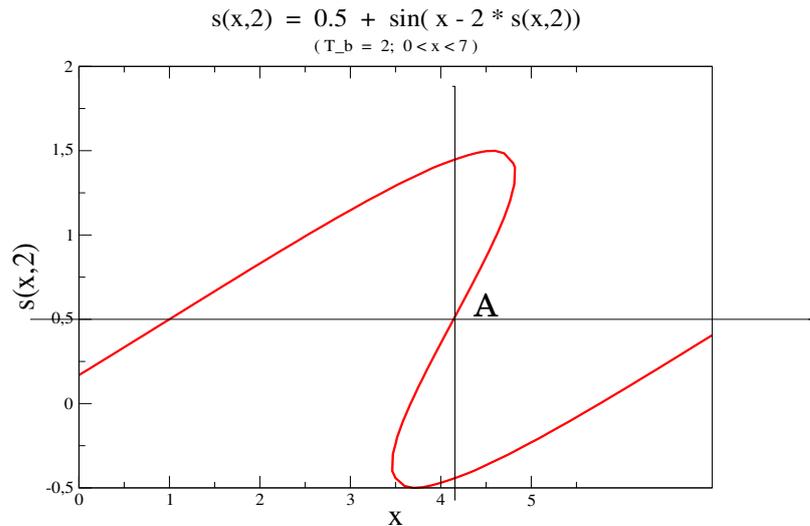


Figura A.3: Solução *triple valued function*, no tempo  $t = 2$ .

Para calcular a abscissa  $x_0$  do ponto de choque  $A = (x_0, s_0)$ , usa-se regra de igualdade de área, observando que o valor de  $s_0$  é o ponto médio do valor máximo  $s_{\text{máx}}$  e do valor mínimo  $s_{\text{mim}}$  da solução. Eles correspondem aos valores da solução nos seus pontos de quebra  $T_b$ , que são raízes de

$$s' = \cos(x - 2s)(1 - 2s) = 0,$$

Se  $(1 - 2s = 0)$  na expressão acima, então  $s = 0.5$  satisfaz a equação.

Como  $(x_0, s_0)$  tem que ser solução da equação implícita (A.5), então

$$0.5 = 0.5 + \sin(x_0 - 1) \implies x_0 = 1 + k\pi, \forall k \in \mathbb{Z},$$

Thomas [44]. No Capítulo 3, este exemplo será aplicado para aproximar a solução da equação de Burger's.

**Exemplo 5.** *Demonstre que*

$$s(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq \frac{t}{2} \\ 0 & \text{se } x > \frac{t}{2} \end{cases} \tag{A.6}$$

é uma solução fraca para equação de Burger's (A.2),  $s_t + \left(\frac{1}{2}s^2\right)_x = 0 \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0$

$$s_0(x) = s(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq 0 \\ 0 & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

**Solução:** Sejam  $\phi \in C_0^1$  e  $a, b$  e  $T$  tais que  $\text{supp } p(\phi) \subset [a, b] \times [0, T]$ . Então,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty [s\phi_t + f(s)\phi_x] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0\phi_0 dx \\ = & \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0\phi_0 dx \\ = & \int_0^T \int_a^b \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_a^b s_0\phi_0 dx \\ = & \int_0^T \int_a^{\frac{t}{2}} \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_0^T \int_{\frac{t}{2}}^b \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt \\ & + \int_a^0 s_0(x)\phi(x, 0)dx + \int_0^b s_0(x)\phi(x, 0)dx \\ = & \int_0^T \int_a^{\frac{t}{2}} \left[ \phi_t + \frac{1}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_a^0 \phi(x, 0)dx \\ = & \int_a^{\frac{t}{2}} \int_0^T \phi_t dt dx + \frac{1}{2} \int_0^T \int_a^{\frac{t}{2}} \phi_x dx dt + \int_a^0 \phi(x, 0)dx \\ = & \int_a^0 \int_0^T \phi_t dt dx + \int_0^{\frac{T}{2}} \int_{2x}^T \phi_t dt dx + \frac{1}{2} \int_0^T \int_a^{\frac{t}{2}} \phi_x dx dt + \int_a^0 \phi(x, 0)dx \\ = & \int_a^0 [\phi(x, T) - \phi(x, 0)] dx + \int_0^{\frac{T}{2}} [\phi(x, T) - \phi(x, 2x)] dx \\ & + \frac{1}{2} \int_0^T \left[ \phi\left(\frac{t}{2}, t\right) - \phi(0, t) \right] dt + \int_a^0 \phi(x, 0)dx \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} = & - \int_0^{\frac{T}{2}} \phi(x, 2x) dx + \frac{1}{2} \int_0^T \phi\left(\frac{t}{2}, t\right) dt \\ = & - \frac{1}{2} \int_0^T \phi\left(\frac{y}{2}, y\right) dy + \frac{1}{2} \int_0^T \phi\left(\frac{t}{2}, t\right) dt = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Note que na passagem (A.8) para (A.9) usou-se o fato de que  $\phi(x, T) = \phi(a, t) = 0$  para eliminar o primeiro, terceiro e o sexto termo, cancela-se o segundo com o sétimo, e substitui  $y = 2x$  no quarto termo. Assim, a função  $s$  dada por (A.6) é uma solução fraca para o problema de valor inicial (A.2)-(A.7).

Na Figura A.4, as características associadas ao problema acima se interceptam, logo deve-se encontrar uma solução fraca. Observa-se que a solução ao longo das características

em  $x < 0$  é diferente da solução ao longo das características em  $x > 0$ . Logo, existe uma descontinuidade ao longo da curva  $x = \frac{t}{2}$ .

**Observação 4:** A linha de descontinuidade de uma solução fraca é chamada de *Choque* se as características em ambos os lados da descontinuidade convergirem para o choque.

Se fizermos  $a_L = f'(s_L)$  e  $a_R = f'(s_R)$  onde  $s_L$  e  $s_R$  são os valores de  $s$  nos lados esquerdo e direito da descontinuidade. Então, uma descontinuidade será um choque se

$$a_L > v > a_R \tag{A.10}$$

onde  $v$  é a velocidade de propagação da descontinuidade, que será definida em (1.42). Verifica-se que no caso do Exemplo 5 tem-se  $a_L = 1$ ,  $a_R = 0$  e  $v = \frac{1}{2}$ , então a condição (A.10) é satisfeita e logo a descontinuidade na solução (A.6) é um choque.

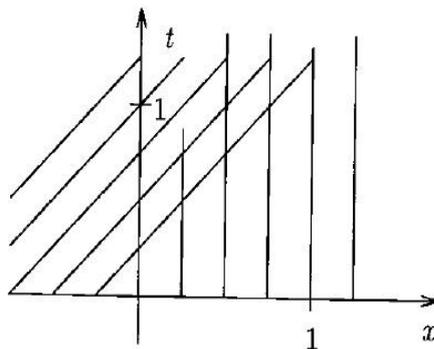


Figura A.4: Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)-(A.7), Thomas [44].

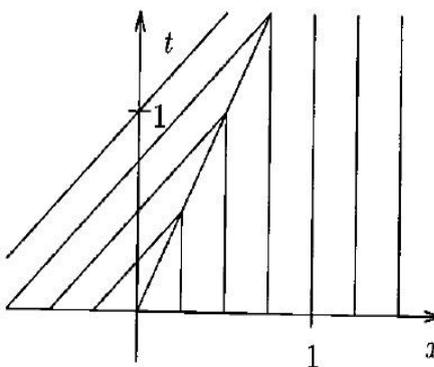


Figura A.5: Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)-(A.7), Exemplo 5, Thomas [44].

**Exemplo 6.** *Pode-se mostrar, seguindo o mesmo procedimento do exemplo anterior que*

$$s(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq \frac{t}{2} \\ 1 & \text{se } x > \frac{t}{2} \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

*é uma solução fraca para equação de Burger's (A.2) com condição inicial*

$$s_0(x) = s(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 0 \\ 1 & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

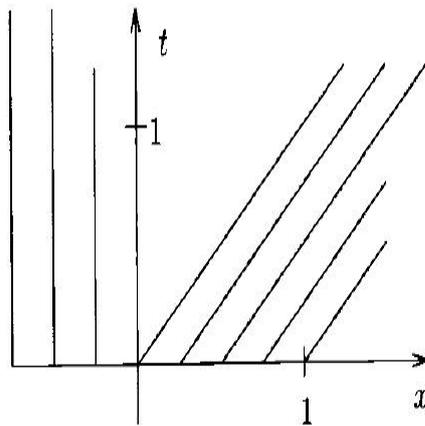


Figura A.6: Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)-(A.12), Thomas [44].

**Solução:** Sejam  $\phi \in C_0^1$  e  $a, b$  e  $T$  tais que  $\text{supp } \phi \subset [a, b] \times [0, T]$ . Então,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0(x)\phi(x, 0)dx \\ &= \int_0^T \int_a^b \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_a^b s_0(x)\phi(x, 0)dx \\ &= \int_0^T \int_{\frac{t}{2}}^b \left[ \phi_t + \frac{1}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\ &= \int_0^{\frac{T}{2}} \int_0^{2x} \phi_t dt dx + \int_{\frac{T}{2}}^b \int_0^T \phi_t dt dx + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\frac{t}{2}}^b \phi_x dx dt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\ &= \int_0^{\frac{T}{2}} [\phi(x, 2x) - \phi(x, 0)] dx + \int_{\frac{T}{2}}^b [\phi(x, T) - \phi(x, 0)] dx \\ & \quad + \frac{1}{2} \int_0^T \left[ \phi(b, t) - \phi\left(\frac{t}{2}, t\right) \right] dt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\ &= \int_0^{\frac{T}{2}} \phi(x, 2x)dx - \frac{1}{2} \int_0^{\frac{T}{2}} \phi(y, 2y)2dy = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Novamente, no passo (A.13), usa-se o fato de que  $\phi(x, T) = \phi(b, t) = 0$ , para eliminar o segundo, quarto e o sétimo termo e  $y = \frac{t}{2}$  no sexto termo. Assim, a função  $s$  dada por (A.11) é uma solução fraca para o problema de valor inicial (A.2)-(A.12).

Como no Exemplo 5, verifica-se que a velocidade de propagação da descontinuidade na solução (A.11) é  $v = \frac{1}{2}$ . Como  $a_L = 0$  e  $a_R = 1$  para este último caso, a condição (A.10) não é satisfeita, logo a descontinuidade na solução (A.11) não é um choque.

As características da equação de Burger's com condição inicial (A.12) são ilustradas na Figura A.6.

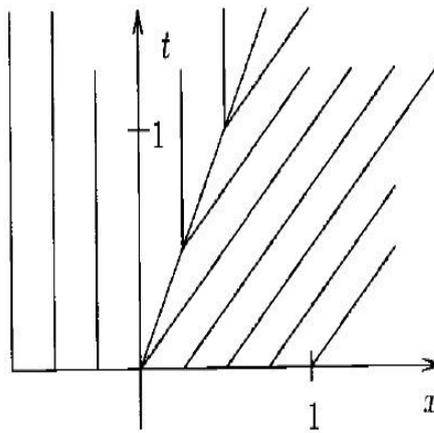


Figura A.7: Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)-(A.12), Exemplo 6, Thomas [44].

Oberva-se a presença de uma região do plano  $x-t$  sem característica. Com isso, a solução do Exemplo 6 corresponde à ocupação desta região, como é mostrado na Figura A.7.

Nota-se que, nesse caso, como as características em cada lado da curva  $x = \frac{t}{2}$  estão saindo da descontinuidade, esta descontinuidade não é um choque; é uma rarefação.

**Exemplo 7.** *Pode-se mostrar, novamente, que*

$$s(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ \frac{x}{t} & \text{se } 0 \leq x < t \\ 1 & \text{se } x > t \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

*é uma solução fraca para equação de Burger's (A.2) com condição inicial*

$$s_0(x) = s(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 0 \\ 1 & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

**Solução:** Sejam  $\phi \in C_0^1$  e  $a, b$  e  $T$  tais que  $\text{supp } p(\phi) \subset [a, b] \times [0, T]$ . Então,

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_{-\infty}^\infty s_0(x)\phi(x, 0)dx \\
 = & \int_0^T \int_a^b \left[ s\phi_t + \frac{s^2}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_a^b s_0(x)\phi(x, 0)dx \\
 = & \int_0^T \int_0^t \left[ \frac{x}{t}\phi_t + \frac{1}{2}\frac{x^2}{t^2}\phi_x \right] dxdt + \int_0^T \int_t^b \left[ \phi_t + \frac{1}{2}\phi_x \right] dxdt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\
 = & \int_0^T \int_x^T \frac{x}{t}\phi_t dt + \int_0^T \int_0^t \frac{x^2}{2t^2}\phi_x dxdt + \int_0^T \int_0^x \phi_t dt dx + \int_T^b \int_0^T \phi_t dt dx \\
 & + \frac{1}{2} \int_0^T \int_t^b \phi_x dxdt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\
 = & \int_0^T \left\{ \left[ \frac{x}{t}\phi(x, t) \right]_{t=x}^{t=T} - \int_x^T \left( -\frac{x}{t^2} \right) \phi dt \right\} dx \quad (\text{integrando por partes}) \\
 & + \int_0^T \left\{ \left[ \frac{x^2}{2t^2}\phi(x, t) \right]_{x=0}^{x=t} - \int_0^t \left( \frac{x}{t^2} \right) \phi dx \right\} dt \quad (\text{integrando por partes}) \\
 & + \int_0^T [\phi(x, x) - \phi(x, 0)] dx + \int_T^b [\phi(x, T) - \phi(x, 0)] dx \\
 & + \frac{1}{2} \int_0^T [\phi(b, t) - \phi(t, t)] dt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\
 = & \int_0^T \left[ \frac{x}{T}\phi(x, T) - \phi(x, x) \right] dx + \int_0^T \int_x^T \frac{x}{t^2}\phi dt dx + \int_0^T \frac{1}{2}\phi(t, t)dt \\
 & - \int_0^T \int_0^t \frac{x}{t^2}\phi dxdt + \int_0^T \phi(x, x)dx - \int_0^b \phi(x, 0)dx \\
 & - \frac{1}{2} \int_0^T \phi(t, t)dt + \int_0^b \phi(x, 0)dx \\
 = & 0
 \end{aligned}$$

Novamente usa-se o fato de que  $\phi(x, T) = \phi(b, t) = 0$ , como nos exemplos anteriores.

A solução do Exemplo 7 corresponde à ocupação da região sem característica com um leque de curvas características como mostra a Figura A.8.

Nota-se que é possível preencher o espaço sem característica no mínimo de duas maneiras diferentes, Figuras A.7 e A.8, que são compatíveis com a formulação fraca do problema.

Assim, a função  $s$  dada por (A.14), também é uma solução fraca para o problema de valor inicial (A.2)-(A.15) e pode-se concluir que soluções fracas para problemas de valor inicial podem não ser únicas.

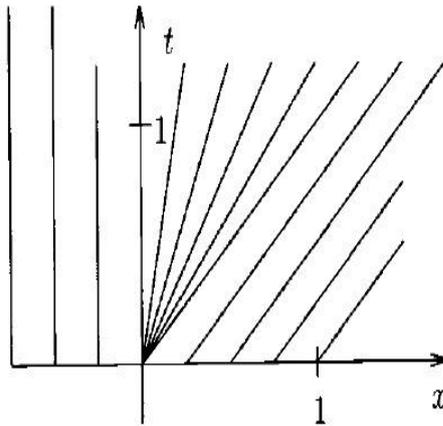


Figura A.8: Curva características associadas com o problema de valor inicial (A.2)-(A.15), Exemplo 7, Thomas [44].

**Exemplo 8.** Considere a equação de Burger's

$$s_t + \left(\frac{1}{2}s^2\right)_x = 0 \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0 \tag{A.16}$$

com a condição inicial

$$s_0(x) = s(x, 0) = \begin{cases} s_L, & \text{se } x < 0 \\ s_R, & \text{se } x \geq 0 \end{cases},$$

onde  $s_L$  e  $s_R$  são constantes.

**Solução:** Usando a condição de salto pode-se determinar a velocidade de propagação desta descontinuidade. De fato, para equação de Burger's  $f(s) = \frac{1}{2}s^2$ , assim a condição R-H sobre o salto é

$$\begin{aligned} v(s_L - s_R) &= \frac{1}{2}(s_L^2 - s_R^2), \\ \Rightarrow v &= \frac{(s_L + s_R)}{2}. \end{aligned} \tag{A.17}$$

E portanto, a velocidade de propagação da descontinuidade é a média da solução a esquerda e a direita da descontinuidade.

**Observação 5:** Da **Proposição 1** e do exemplo acima observa-se que:

- A solução do Exemplo 1 tem uma descontinuidade com a velocidade de propagação dada por  $v = \frac{1}{2}$  e esta descontinuidade deverá se propagar sobre a curva  $x = \frac{t}{2}$ , que

é a solução da equação diferencial

$$\frac{d}{dt}x_C = v = \frac{1}{2}, \quad x_C(0) = 0.$$

Note que  $v$  pode ser calculado pela fórmula  $v = \frac{(s_L + s_R)}{2}$ .

- A solução do Exemplo 1 deve satisfazer a condição de salto sobre a curva  $x = \frac{t}{2}$ :

$$v(s_L - s_R) = \frac{1}{2} = f(s_L) - f(s_R) = \frac{1}{2}1^2 - \frac{1}{2}0^2 = \frac{1}{2}$$

(que é o mesmo que  $v = \frac{(s_L + s_R)}{2}$ ).

- No Exemplo 2 o procedimento para obtenção da velocidade de propagação da descontinuidade é idêntico ao realizado para o Exemplo 1.
- Como a solução do Exemplo 3 é contínua (não há salto de descontinuidade), não é relevante considerar a condição de salto em relação a esta solução.

**Exemplo 9.** *O problema de valor inicial para equação de Burger's (A.16) com condição inicial*

$$s_0(x) = s(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } x < 0 \\ 1 - x & \text{se } 0 \leq x < 1 \\ 0 & \text{se } x \geq 1 \end{cases}, \quad (\text{A.18})$$

**Solução:** As características para o problema (A.18) são dadas por

$$x = \begin{cases} t + x_0 & \text{se } x_0 < 0 \\ (1 - x_0)t + x_0 & \text{se } 0 \leq x_0 < 1 \\ x_0 & \text{se } x_0 \geq 1 \end{cases}.$$

Essas retas interceptam-se primeiramente em  $(x, t) = (1, 1)$ , isto é, o ponto de ruptura é  $T_b = 1$ , veja Figura A.9.

Se  $x < t < 1$ , então  $x = t + x_0$  para algum  $x_0 < 0$  e portanto  $s = s_0(x_0) = 1$ ; se  $t < x < 1$ ,  $x = (1 - x_0)t + x_0$  para algum  $x_0 \in [0, 1]$ , logo

$$s = s_0(x_0) = 1 - x_0 = 1 - \frac{x - t}{1 - t} = \frac{1 - x}{1 - t};$$

finalmente, se  $t < 1 < x$ , então  $s = s_0(x) = 0$ . Portanto, a solução do problema (A.18)

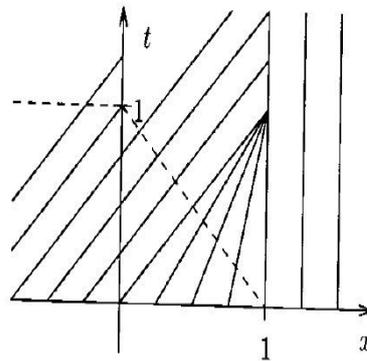


Figura A.9: Curvas Características para o Exemplo 9, Thomas [44].

definida para  $0 \leq t < 1$ , é:

$$s(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } x < t < 0 \\ \frac{(1-x)}{(1-t)} & \text{se } t \leq x < 1 \\ 0 & \text{se } t < 1 \leq x \end{cases} .$$

Pode-se observar que a função  $s$  definida acima não é uma solução clássica pois  $s \notin C^1(\mathbb{R} \times (0, 1))$ , as derivadas parciais de  $s$  não estão definidas ao longo dos segmentos de reta  $\{(t, t) : 0 \leq t < 1\}$  e  $\{(1, t) : 0 \leq t < 1\}$ , pois são as características passando por  $(0, 0)$  e  $(1, 0)$ , respectivamente, e a condição inicial não é diferenciável em  $x = 0$  e  $x = 1$ .

Para  $t \geq 1$ , tem-se uma "condição inicial", para  $t = 1$ , dada por:

$$s_0(x) = s(x, 1) = \begin{cases} 1 & \text{se } x < 1 \\ 0 & \text{se } x \geq 1. \end{cases}$$

Usando os resultados do Exemplo 5, desta seção, existirá uma solução na qual esta descontinuidade deverá se propagar sobre a curva característica definida por

$$\frac{d}{dt}x_C = v = \frac{1}{2}, \quad x_C(1) = 1,$$

ou  $x_C = \frac{(t+1)}{2}$ . Assim, uma solução para  $t \geq 1$  é:

$$s(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } x < \frac{(t+1)}{2} \\ 0 & \text{se } x \geq \frac{(t+1)}{2}, \end{cases} \tag{A.19}$$

onde as curvas características associadas a esta solução são mostradas na Figura A.9.

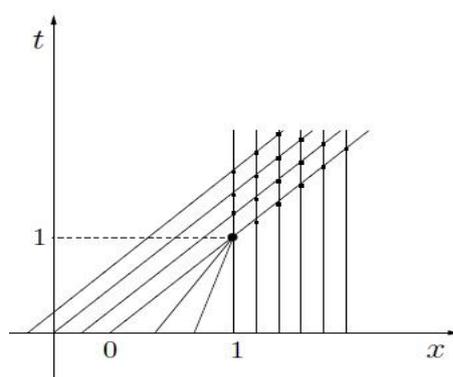


Figura A.10: Solução Geométrica do Exemplo 9.

Observe na Figura A.10 que para  $t \leq 1$  a solução geométrica é única. O mesmo não acontece para  $t \geq 1$ , cuja solução foi definida acima em (A.19).

## APÊNDICE B – Códigos Computacionais

Neste Apêndice serão apresentados 03 (três) códigos computacionais na Linguagem C, utilizados para calcular e plotar soluções aproximadas de uma Equação de Convecção com a função de fluxo linear  $f(s) = s$ , Equação (3.5), representada na Figura 3.6 do Capítulo 3.

```

/*Kurganov-Tadmor*/

/*Para o Problema de Valor Inicial*/
/* s(x,t)_t + f(s(x,t))_x = 0 com condicao inicial descontinua
   s(x,0) = s0(x) */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define N 100 /* Partição do intervalo em x. */
#define T_TOTAL 0.5
#define THETA 2.0 /* MinMod */
#define CFL 0.45
#define COMPRIMENTO 1.0

//**** DECLARACAO DE VARIAVEIS *****/

double dx; // espaçamento na malha espacial x
double s_zero[N+2]; // valor inicial do método RK
double s_um[N+2]; // primeira previsão do RK
double s_dois[N+2]; // segunda previsão do RK

double dt; // valor do passo de tempo calculado com CFL
double tempo_acumulado; // tempo acumulado durante a iteração.
double velocidade_superior[N+1];
double velocidade_inferior[N+1];
double impressao, aux; // frequencia de impressao
int i, celula, m, contador; // todos contadores
double s_inj;

//***** DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO FLUXO *****/
double flux (double a)
{
    return a;
}

```

```

/***** devflux RETORNA A DERIVADA DO FLUXO *****/
double devflux (double a)
{
    return 1;
}

/* Fluxo difusivo c/ D constante*/
double flux_dif (double a)
{
    return 0.0;
}

/***** CALCULO DO MINIMO ENTRE DOIS NUMEROS *****/
double minimo (double a, double b)
{
    if (a < b)
        return a;
    else return b;
}

/***** CALCULO DO MAXIMO ENTRE DOIS NUMEROS *****/
double maximo (double a, double b)
{
    if (a < b)
        return b;
    else return a;
}

/***** CÁLCULO DO MÍNIMO ENTRE DOIS NÚMEROS *****/
/*A função minmod define o minmod dada a posição na malha em x
e o vetor solução s. Seleciona o menor em módulo. */
double minmod (int j, double s[])
{
    double a,b,c,d, a1, a2;
    if ((j == 0) || (j == N)) return 0.0;
    else {
        a = (THETA*( (s[j] - s[(j-1)])/dx ));
        b = (( (s[(j+1)] - s[(j-1)])/2.0*dx ));
        c = (THETA*( (s[(j+1)] - s[j])/dx ));
        if ((a > 0) && (b > 0) && (c > 0))
            return minimo(a, minimo(b,c));
        else if ((a < 0) && (b < 0) && (c < 0))
            return maximo(a, maximo(b,c));
        else return 0.0;
    }
}

```

```

/* smaisfrente fornece o valor intermediário s+[j+1/2]. */
double smaisfrente (int j, double s[])
{
    return s[(j+1)] - (dx/2.0) * ( minmod((j+1), s) );
}

/*smenosfrente fornece o valor intermediário s-[j+1/2]. */
double smenosfrente (int j, double s[])
{
    return s[j] + (dx/2.0) * ( minmod(j, s) );
}

/*smaisback fornece o valor intermediário s+[j-1/2]. */
double smaisback (int j, double s[])
{
    return s[j] - (dx/2.0) * ( minmod(j, s) );
}

/*smenosback fornece o valor intermediário s-[j-1/2]. */
double smenosback (int j, double s[])
{
    return s[(j-1)] + (dx/2.0) * ( minmod((j-1), s) );
}

//Calculo da velocidade de propagacao a^{+}
double VeloMais (int j, double s[])
{
    double m,n;
    m = fabs ( devflux(smaisfrente(j,s)) );
    n = fabs ( devflux(smenosfrente(j,s)) );
    if (m > n) return m;
    else return n;
}

//Calculo da velocidade de propagacao a^{-}
double VeloMenos (int j, double s[])
{
    double m,n;
    if (j==1)
    {
        n = fabs ( devflux(s_inj) );
        m = fabs ( devflux(smaisback(1,s)) );
    }
    else
    {
        n = fabs ( devflux(smenosback(j,s)) );
        m = fabs ( devflux(smaisback(j,s)) );
    }
    if (m > n)
        return m;
    else return n;
}

```

```

/* Definição de H[j-1/2] */
double Hmenos (int j, double s[])
{
    double result;
    double fluxo;
    if (j == 1)
    {
        result = flux(smaisback(j,s));
    }
    else
    {
        fluxo = (flux(smaisback(j,s)) + flux(smenosback(j,s))) /2.0;
        result = fluxo - (VeloMenos(j,s)/2.0)*(smaisback(j,s) - smenosback(j,s));
    }
    return result;
}

/* Definição de H[j+1/2] */
double Hmais (int j, double s[])
{
    double result;
    double fluxo;
    if (j == N)
    {
        result = flux(smenosfrente(j,s));
    }
    else {
        fluxo = (flux(smaisfrente(j,s)) + flux(smenosfrente(j,s))) /2.0;
        result = fluxo - (VeloMais(j,s)/2.0)*(smaisfrente(j,s) - smenosfrente(j,s));
    }
    return result;
}

/* Fluxo numerico difusivo na fronteira esquerda j-1/2*/
double Pmenos (int j, double s[])
{
    double result;
    double den;
    if (j == 1)
    {
        den = (flux_dif(s[j]) + flux_dif(s[j]));
        if (den < 1e-14) return 0.0;
        else
            return 0.0;
    }
    else
    {
        den = (flux_dif(s[j]) + flux_dif(s[j-1]));
        if (den < 1e-14) return 0.0;
        else return 2.0*(flux_dif(s[j-1])*flux_dif(s[j]))*(s[j]-s[j-1])/den;
    }
}

```

```

/* Fluxo numerico difusivo na fronteira direita j+1/2*/
double Pmais (int j, double s[])
{
    double result;
    double den;
    if (j == N)
    {
        s[j+1] = s[j];
        den = (flux_dif(s[j]) + flux_dif(s[j+1]));
        if (den < 1e-14) return 0.0;
        else
            return 2.0*(flux_dif(s[j])*flux_dif(s[j+1]))*(s[j+1]-s[j])/den;
    }
    else
    {
        den = (flux_dif(s[j+1]) + flux_dif(s[j]));
        if (den < 1e-14) return 0.0;
        else
            return 2.0*(flux_dif(s[j])*flux_dif(s[j+1]))*(s[j+1]-s[j])/den;
    }
}
/* R[s] da EDO */
double funcao_C (int j, double s[])
{
    return (-1.0/dx)*(Hmais(j,s)-Hmenos(j,s)) + (1.0/(dx*dx))*(Pmais(j,s) - Pmenos(j,s));
}

/* Função que imprime os resultados */
void imprime (double s[])
{
    int n;
    for (n = 1; n<=N; n++){
        printf ("%lf %lf\n", (double)n * dx, s[n]);
    }
    printf ("\n");
}

/***** PROGRAMA PRINCIPAL *****/
main()
{
    dx = (COMPRIMENTO)/(N*1.0); /* Valor de dx */
    for (m=0; m<= N; ++m){
        if(m<=1)
        {
            s_zero[m] = 1;
        }
        else
        {
            s_zero[m] = 0;
        }
    }
    /* CONDIÇÃO CFL */
    dt = (dx * CFL)/devflux(1);

    /* Runge-Kutta */
    tempo_acumulado = dt;
    while (tempo_acumulado < T_TOTAL)
    {
        for (celula=1; celula<=N; celula++)
        {
            s_um[celula] = s_zero[celula] + dt * funcao_C(celula, s_zero);
        }
        for (celula=1; celula<=N; celula++)
            s_dois[celula] = (0.5 * s_zero[celula]) + 0.5*(s_um[celula] + dt
            * funcao_C(celula, s_um));
        for (celula=1; celula<=N; celula++)
        {
            s_zero[celula] = s_dois[celula];
        }
        if (tempo_acumulado + dt > T_TOTAL)
            dt = T_TOTAL - tempo_acumulado;
        tempo_acumulado += dt;
    }
    imprime(s_dois);
}

```

```

/*Lax-Fredricks*/

/*Para o Problema de Valor Inicial*/
/* s(x,t)_t + f(s(x,t))_x = 0 com condicao inicial descontinua
   s(x,0) = s0(x) */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define N 100 /* Partição do intervalo em x. */
#define T_TOTAL 0.5
#define CFL 0.45
#define COMPRIMENTO 1.0

//***** DECLARAÇÃO DE VARIÁVEIS *****/
double dx; //espaçamento na malha espacial x
double s_zero[N+1]; // valor inicial do método RK
double s_um[N+1]; // primeira previsão do RK
double fluxo[N+1]; //Fluxo nos valores intermediários
double dt; //valor passo de tempo calculado com CFL
double tempo_acumulado; //tempo acumulado durante a iteração.
double aux_lf, TIME_STEP;
int i, a, cell, m, contador; //todos contadores

//***** DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO FLUXO *****/
double flux (double a)
{
    return a;
}
//***** devflux RETORNA A DERIVADA DO FLUXO *****/
double devflux (double a)
{
    return 1;
}
void Fluxo_vector(void)
{
    int j;
    for (j=2; j<=N; j++)
    {
        fluxo[j] = flux(s_zero[j]);
    }
}
double laxFred (int j, double s[])
{
    return 0.5*(s[j-1] + s[j+1]) - (aux_lf * (fluxo[j+1] - fluxo[j-1]));
}
// Calcular o valor máximo da derivada do fluxo com o fim de obter o DeltaT.
double maxdevflux(double s[])
{
    double max;
    double a;
    int j;
    max = fabs(devflux(s[1]));
    for (j = 2; j <= N; j++)
    {
        a = fabs(devflux(s[j]));
        if (max < a) max = a;
    }
    return max;
}
/*Função que imprime os resultados */
void imprime (double s[])
{
    int n;
    for (n = 1; n<=N; n++)
    {
        printf ("%6.3f%20.3f\n", 0.0 +(double)n * dx, s[n]);
    }
    printf ("\n");
}

```

```
/****** PROGRAMA PRINCIPAL *****/
main()
{
    dx = (COMPRIMENTO)/(N*1.0); /* Valor de dx */

    /* Gerar a condição inicial s_zero */
    for (m=0; m<= N; ++m)
    {
        if(m<=1)
        {
            s_zero[m] = 1.0;
        }
        else
        {
            s_zero[m] = 0;
        }
    }
    /* CONDIÇÃO CFL */
    dt = (dx * CFL)/devflux(1.0);
    fluxo[0] = 1.0;
    fluxo[1] = 1.0;
    a = 1; //Variável auxiliar para impressão.
    aux_lf = (dt/(2.0 * dx));
    tempo_acumulado = dt;
    Fluxo_vector();
    contador = 0;
    while (tempo_acumulado < T_TOTAL)
    {
        for (cell=1; cell < N; cell++)
        {
            s_um[cell] = laxFred(cell, s_zero);
        }

        for (cell=1; cell < N; cell++)
        {
            s_zero[cell] = s_um[cell];
        }
        tempo_acumulado += dt;
        Fluxo_vector();
    }
    imprime(s_um);
}
```

```

/*Nessyahu-Tadmor*/

/*Para o Problema de Valor Inicial*/
/* s(x,t)_t + f(s(x,t))_x = 0 com condicao inicial descontinua
   s(x,0) = s0(x) */

//Aqui vamos fazer tratamento de fronteira.
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define N 100 /* Partição do intervalo em x. */
#define T_TOTAL 0.5
#define THETA 2.0 /* MinMod */
#define CFL 0.45
#define COMPRIMENTO 1.0

////////***** DECLARAÇÃO DE VARIÁVEIS *****////////
double dx; //espacmento na malha espacial x
double s_zero[N+1]; //valor inicial no tempo t.
double s_dois[N+1]; //valor final no tempo t + dt
double s_um[N+1]; //solucao no tempo t + dt/2.
double fluxo[N+1]; //fluxo
double devfluxo[N+1]; //Derivada numerica do fluxo.
double dev_szero[N+1]; //vetor minmod
double dt; //valor passo de tempo calculado com CFL
double tempo_acumulado; //tempo acumulado dsrante a iteracao.
double lambda; //lambda = dt/dx.
double time_steps; //Numero de passos de tempo
double limite_inferior; //lim_inf inicial
double fronteira_u, fronteira_fluxo;
////////***** DECLARACAO DAS FUNCOES *****////////
////////***** DEFINICAO DA FUNCAO fluxo *****////////
double flux (double a)
{
    return a;
}
////////***** devflux RETORNA A DERIVADA DO fluxo *****////////
double devflux (double a)
{
    return 1;
}
////////***** CALCULO DO MINIMO ENTRE DOIS NUMEROS *****////////
double minimo (double a, double b)
{
    if (a < b)
        return a;
    else return b;
}
////////***** CALCULO DO MAXIMO ENTRE DOIS NUMEROS *****////////
double maximo (double a, double b)
{
    if (a < b)
        return b;
    else return a;
}
////////***** Funcao sinal *****////////
//FUNCAO SERAH USADA PARA DEFINIR INCLINACAO UNO
double sgn(double a)
{
    if (a >= 0.0) return 1.0;
    else return -1.0;
}
//FUNCAO SERAH USADA PARA DEFINIR INCLINACAO UNO
double xymin(double a, double b)
{
    double sgn();
    double minimo();
    return 0.5*(sgn(a)+sgn(b))*(minimo(fabs(a), fabs(b)));
}

```

```

/*A função minmod define o minmod dada a posição na malha em x
 e o vetor solução s. Seleciona o menor em módulo. */
double minmod(int j, double *s)
{
    double a,b,c;
    double minimo();
    double maximo();
    double UNO_X();
    if ((j>=3) && (j<=N-2)) return UNO_X(j,s);
    else
    {
        a = THETA*( s[j] - s[j-1] );
        b = ( s[j+1] - s[j-1] )/(2.0);
        c = THETA*( s[j+1] - s[j] );
        if (a*b*c < 1e-20)
            return 0.0;
        else if ((a>0) && (b>0) && (c>0))
            return minimo(a,minimo(b,c));
        else if ((a<0) && (b<0) && (c<0))
            return maximo(a,maximo(b,c));
        else return 0.0;
    }
}
/** A FUNCAO UNO DEFINE A DERIVADA NUMERICA **/
double ds1_X(int j, double *s)
{
    return s[j+1] - s[j];
}

double ds2_X(int j, double *s)
{
    double ds1_X();
    return ds1_X(j+1,s) - ds1_X(j,s);
}

double UNO_X(int j, double *s)
{
    double xymin();
    double ds1_X(), ds2_X();
    double sx;
    sx = xymin(ds1_X(j-1,s)+0.5*xymin(ds2_X(j-2,s),ds2_X(j-1,s)),
              ds1_X(j,s)-0.5*xymin(ds2_X(j-1,s),ds2_X(j,s)));
    return sx;
}

//A proxima funcao calcula o vetor derivada de s_zero e armazena-o
//em um vetor.

void derivada_szero(double s[])
{
    int j;
    for(j = 0; j <= N-1; j++)
    {
        dev_szero[j] = minmod(j,s);
    }
}

/*A funcao devfluxo_vector calcula o vetor derivada do fluxo
tomando os dados de s_zero[] para ser usado no calculo de s_um[].
So' preciso do vetor fluxo no calculo da solucao no tempo final. */
void devfluxo_vector(void)
{
    int j;
    for (j=0; j<=N-1; j++)
    {
        devfluxo[j] = devflux(s_zero[j])*dev_szero[j];
    }
}

void imprime (double s[])
{
    int n;
    for (n = 0; n<=N; n++)
    {
        printf ("%lf %lf\n", 0.0 + (double)n * dx, s[n]);
    }
    printf ("\n");
}

```

```

/***** PROGRAMA PRINCIPAL *****/
main()
{
  dx = (COMPRIMENTO)/(N*1.0); /* Valor de dx */
  for (m=0; m<=N; ++m)
  {
    if(m<=1)
    {
      s_zero[m] = 1;
      s_um[m] = 1;
      s_dois[m] = 1;
    }
    else
    {
      s_zero[m] = 0;
      s_um[m] = 0;
      s_dois[m] = 0;
    }
  }
  /* CONDIÇÃO CFL */
  dt = (dx * CFL)/devflux(1.0);
  lambda = dt/dx;
  a = 1; //jiavel asxiliar para impressao.
  tempo_acumulado = 0.0;
  while (tempo_acumulado <= T_TOTAL)
  {
    tempo_acumulado += dt;
    derivada_szero(s_zero);
    devfluxo_vector();
    //Aproximacao para o tempo do meio.
    //0 passo predictor.
    for (celula=2; celula <= N-1; celula++)
    {
      s_um[celula] = s_zero[celula] - 0.5*lambda*devfluxo[celula];
    }
    //0 passo corretor.
    for (celula=1; celula <= N-1; celula++)
    {
      s_dois[celula] = 0.5*(s_zero[celula+1] + s_zero[celula-1]) +
        0.25*(dev_szero[celula-1] - dev_szero[celula+1]) -
        lambda*0.5*(flux(s_um[celula+1]) - flux(s_um[celula-1]));
    }
    //Atribuicao de s_dois para s_zero e o ciclo se repete
    for (celula=0; celula <= N-1; celula++)
    {
      s_zero[celula] = s_dois[celula];
    }
  }
  imprime(s_dois);
}

```