Métodos de Volumes Finitos e Leis de Conservação

Bisoni, Lucas[1]

Quinelato, Thiago de Oliveira[2]

Resumo: As leis de conservação são sistemas de equações diferenciais parciais utilizados para representar fenômenos físicos de perfis diversos, cuja principal característica está associada à presença de variáveis conservadas. Este trabalho visa introduzir conceitos elementares relacionados à teoria das leis de conservação para, em seguida, discutir algumas estratégias numéricas que podem ser aplicadas para obter soluções aproximadas de problemas dessa natureza. Nesse contexto, são abordados os métodos de volumes finitos, com ênfase nos métodos do tipo *Essentially Non-Oscillatory* (ENO) e *Weighted Essentially Non-Oscillatory* (WENO). Em particular, durante a pesquisa, foi realizada a implementação de um método ENO de ordem 3 e um método WENO de ordem 5, ambos com discretização temporal baseada em um método de Runge-Kutta de ordem 3 *Strong Stability Preserving* (SSP). Os métodos implementados foram testados em problemas associados à equação de Burgers invíscida, permitindo avaliar sua capacidade de representar adequadamente a evolução das soluções e descrever fenômenos como a formação de choques e leques de rarefação.

Palavras-chave: Lei de Conservação; Sistema Hiperbólico; Métodos de Volumes Finitos; ENO; WENO.

INTRODUÇÃO

Grande parte dos fenômenos físicos são modelados através de equações diferenciais parciais (EDPs). A propagação de ondas sonoras, a condução de calor, o escoamento de líquidos e gases, o comportamento de campos elétricos — todos esses são eventos cujo comportamento pode ser descrito e, em alguns casos, até mesmo previsto utilizando métodos matemáticos próprios. Apesar dos constantes e acelerados avanços no estudo da teoria associada a essas equações, ainda existem diversos problemas em aberto e para os quais não foi possível determinar uma solução analítica, seja por sua complexidade ou mesmo inviabilidade.

Nesse contexto, os métodos numéricos emergem como ferramentas que permitem a obtenção de soluções aproximadas para alguns desses problemas através da utilização de recursos computacionais. Em particular, no âmbito das EDPs, uma das abordagens

[1]Universidade Federal do Paraná (UFPR); Licenciatura em Matemática; lucas.bisoni@ufpr.br
[2]Universidade Federal do Paraná (UFPR); Professor Orientador (DMAT); thiago.quinelato@ufpr.br

mais comuns para obter aproximações satisfatórias para as soluções são os métodos de volumes finitos (MVFs), uma família de métodos numéricos cujo funcionamento baseia-se na divisão do domínio em pequenos volumes de controle, chamados células, e na análise dos fluxos de uma ou mais grandezas de interesse que atravessam as interfaces dessas células.

É importante ressaltar que os métodos de volumes finitos podem ser utilizados em uma ampla gama de cenários. Em especial, eles são úteis na resolução de leis de conservação, sistemas de equações diferenciais nos quais alguma quantidade (como massa, momento, energia, etc.) permanece inalterada com o passar do tempo. Esse fato não decorre do acaso: a discretização utilizada nos MVFs é feita a partir da forma integral das leis de conservação, o que fornece uma estrutura de balanço dos fluxos através das interfaces celulares (o fluxo que deixa uma célula é o mesmo que entra na outra, com sinal oposto).

Diante disso, este trabalho tem como objetivo estudar aspectos teóricos e computacionais relacionados às leis de conservação hiperbólicas, com ênfase na formulação e implementação de métodos numéricos capazes de aproximar suas soluções. Inicialmente, vamos discutir algumas das definições e dos conceitos associados à teoria dos sistemas de leis de conservação para, em seguida, abordar a formulação dos métodos de volumes finitos, com destaque para os métodos do tipo *Essentially Non-Oscillatory* (ENO) e *Weighted Essentially Non-Oscillatory* (WENO). Por fim, serão exibidos resultados numéricos da implementação computacional de um método do tipo ENO de ordem 3 e de um método do tipo WENO de ordem 5, ambos acoplados a uma discretização temporal baseada em um método de Runge-Kutta de ordem 3 *Strong Stability Preserving* (SSP).

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Leis de Conservação

Conforme discutido anteriormente, nosso interesse está voltado para o estudo das leis de conservação. Por essa razão, iniciamos com a seguinte definição:

Definição 1: Uma *lei de conservação unidimensional* é um sistema de equações diferen-

ciais parciais que pode ser escrito na forma

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} = 0, \tag{1}$$

em que $\mathbf{q} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^m$ é um vetor de m componentes que representa funções desconhecidas (como temperatura, pressão, etc.), também chamadas *variáveis de estado*, e as quais queremos determinar, e $\mathbf{f}(\mathbf{q})$ é o vetor de fluxos. Por componentes, temos $\mathbf{q} = (q_1, \ldots, q_m)^T$ e $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = (f_1, \ldots, f_m)^T$.

Mais adequadamente, podemos nos referir a cada $q_i, 1 \leq i \leq m$ como a função densidade da i-ésima variável de estado, com a interpretação de que $\int_{x_1}^{x_2} q_i(x,t)dx$ é a quantidade total dessa variável no intervalo espacial $[x_1, x_2]$ e no tempo t. A ideia de "conservação" advém do fato de que a densidade total de cada q_i no sistema, isto é, o valor de $\int_{-\infty}^{+\infty} q_i(x,t)dx$, para cada $1 \leq i \leq m$, deve ser constante em relação ao tempo, mesmo que o perfil de q_i se modifique (como provavelmente acontecerá).

Ademais, note que aqui estamos considerando $\mathbf{q}(x,t)$ como uma função que depende de uma variável espacial unidimensional. Se substituirmos x por um vetor $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, obtemos a seguinte versão mais geral:

Definição 2: Uma *lei de conservação n-dimensional* é um sistema de equações diferenciais parciais que pode ser escrito na forma

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F} = 0, \tag{2}$$

em que $\mathbf{q} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^m$ é um vetor de m variáveis conservadas e $\mathbf{F} = (\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_n)$ é o vetor dos vetores de fluxo, sendo cada $\mathbf{f}_i, 1 \leq i \leq n$ um vetor de fluxos por si só. Aqui, $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F}$ denota o divergente em relação a variável espacial $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, isto é,

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{F} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i}.$$

Assim, no caso de uma lei de conservação bidimensional, por exemplo, tem-se $\mathbf{x} = (x, y)$ e $\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}(x, y, t)$. Portanto, tomando $\mathbf{F} = (\mathbf{f}, \mathbf{g})$, o sistema ficaria

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{q})}{\partial y} = 0.$$

Analogamente, para o caso tridimensional, com $\mathbf{x} = (x, y, z)$ e $\mathbf{F} = (\mathbf{f}, \mathbf{g}, \mathbf{h})$, obtém-se

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{q})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{q})}{\partial z} = 0.$$

Ao longo deste trabalho, nosso foco estará voltado especialmente para as leis de conservação unidimensionais. Observe que podemos aplicar a regra da cadeia no segundo termo de (1), de modo a obter

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x}, \tag{3}$$

em que $\partial \mathbf{f}/\partial \mathbf{q}$ denota o jacobiano da função fluxo $\mathbf{f}(\mathbf{q})$. Observando a representação matricial, isso equivale a

$$\begin{pmatrix} \partial f_1(\mathbf{q})/\partial x \\ \partial f_2(\mathbf{q})/\partial x \\ \vdots \\ \partial f_m(\mathbf{q})/\partial x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial f_1(\mathbf{q})/\partial q_1 & \dots & \partial f_1(\mathbf{q})/\partial q_m \\ \partial f_2(\mathbf{q})/\partial q_1 & \dots & \partial f_2(\mathbf{q})/\partial q_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial f_m(\mathbf{q})/\partial q_1 & \dots & \partial f_m(\mathbf{q})/\partial q_m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial q_1/\partial x \\ \partial q_2/\partial x \\ \vdots \\ \partial q_m/\partial x \end{pmatrix},$$

que é válido, uma vez que, pela regra da cadeia em várias variáveis, chega-se que, para qualquer $1 \leq i \leq m$,

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{q})}{\partial x} = \frac{\partial f_i(q_1, \dots, q_m)}{\partial x} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f_i}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial x}.$$

Denotando por $A(\mathbf{q}) := \partial \mathbf{f}/\partial \mathbf{q}$ o jacobiano, conclui-se que a lei de conservação apresentando em (1) pode ser escrito na *forma quasilinear*

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + A(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0. \tag{4}$$

A forma quasilinear de uma lei de conservação é particularmente interessante para introduzir outro conceito de fundamental importância para nosso estudo: a noção de hiperbolicidade. Durante este trabalho, abordaremos exclusivamente leis de conservação hiperbólicas. Essa escolha deve-se à natureza dos problemas analisados, uma vez que, em sistemas hiperbólicos, as velocidades de propagação das ondas e das descontinuidades são sempre reais, característica fundamental para o desenvolvimento de métodos numéricos, especialmente no contexto dos métodos de volumes finitos.

Definição 3: Dizemos que um sistema do tipo (4) é *hiperbólico* se a matriz $A(\mathbf{q})$ é diagonalizável e possui um conjunto completo de autovalores reais. Em particular, o sistema será *estritamente hiperbólico* se ele for hiperbólico e todos os autovalores de $A(\mathbf{q})$ forem distintos.

Até o momento, apresentamos as leis de conservação a partir das derivadas parciais de $\mathbf{q}$. Essa representação, presente em (1) e (4), depende de hipóteses referentes à suavidade das quantidades conservadas presentes em $\mathbf{q}$ e, por essa razão, recebe o nome de *forma diferencial* da lei de conservação. Entretanto, no processo de dedução dessas equações a partir de princípios físicos, utilizam-se relações integrais atreladas à análise dessas quantidades conservadas em volumes de controle e suas interfaces. Na verdade, grande parte das leis de conservação são oriundas de fórmulas integrais e que só depois são escritas em sua formulação diferencial.

Desse modo, a partir de uma lei de conservação em sua forma diferencial, é possível, sob hipóteses adequadas de suavidade, obter uma *forma integral* equivalente que representa o mesmo fenômeno físico. É a partir dessa ideia que se fundamenta a seguinte proposição:

Proposição 4: Considere a lei de conservação unidimensional representada em (1) e o domínio de integração $V = [x_1, x_2] \times [t_1, t_2]$ no plano $x \times t$. Nesse caso, a equação (1) pode ser descrita através da *forma integral*

$$\frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t)dx = \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t)) - \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t)), \tag{5}$$

ou, equivalentemente,

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t_2)dx = \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t_1)dx + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t))dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t))dt. \tag{6}$$

Demonstração. Integrando a forma diferencial da lei de conservação em $[x_1, x_2]$, obtém-se

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t}dx + \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x}dx = 0. \tag{7}$$

Pela fórmula de integração de Leibniz e supondo $\mathbf{q}$ suficientemente suave, temos que

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t) dx.$$

Além disso, pelo Teorema Fundamental do Cálculo, aplicado em cada componente de $\mathbf{f}(\mathbf{q})$, chega-se que

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

Substituindo as duas expressões obtidas em (7) e reorganizando os termos, obtemos justamente

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t) dx = \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t)) - \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t)).$$

Agora, vamos provar a equivalência dessa expressão com (6). Ora, integrando (5) temporalmente, chegamos em

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t) dx \right] = \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t)) dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t)) dt,$$

e aplicando novamente o Teorema Fundamental do Cálculo e reorganizando as expressões, chegamos a

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t_2) dx = \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{q}(x,t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_1,t)) dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_2,t)) dt,$$

como queríamos provar. □

Esse resultado também pode ser estendido para o caso n-dimensional. A demonstração é análoga e usa o Teorema da Divergência de Gauss.

Proposição 5: Considere a lei de conservação n-dimensional representada em (2) e o domínio de integração $V \subset \mathbb{R}^n$ limitado e com fronteira lipschitziana ∂V. Nesse caso, a equação (2) pode ser descrita através da *forma integral* dada por

$$\frac{d}{dt} \int_V \mathbf{q}(\mathbf{x},t) d\mathbf{x} + \int_{\partial V} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0, \tag{8}$$

em que $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal e exterior à superfície ∂V.

A representação integral das leis de conservação é essencial para a dedução dos

métodos de volumes finitos.

MÉTODOS DE VOLUMES FINITOS

Para iniciar nossas discussões referentes aos MVFs, considere o seguinte problema de valor inicial dado pela lei de conservação unidimensional

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} = 0, \quad \text{com} \quad \mathbf{q}(x,0) = \mathbf{q_0}(x), \quad -\infty < x < \infty, \quad t \geq 0. \tag{9}$$

Podemos discretizar o semiplano $x \times t^+$ a partir de uma malha uniforme com passo espacial Δx e passo temporal Δt, definindo os pontos $x_j := j\Delta x, j \in \mathbb{Z}$ e $t_n := n\Delta t, n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Além disso, também vamos definir os pontos intermediários

$$x_{j-1/2} := x_j - \frac{\Delta x}{2} \quad \text{e} \quad x_{j+1/2} := x_j + \frac{\Delta x}{2}, \quad \text{para todo } j \in \mathbb{Z}.$$

Vamos denotar por $\mathcal{C}_j$, e denominar j-ésima célula, cada intervalo $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$. Considere o valor Q_j^n como uma aproximação da média de $\mathbf{q}$ sobre a j-ésima célula $\mathcal{C}_j$ no tempo t_n, isto é,

$$Q_j^n \approx \frac{1}{\Delta x}\int_{\mathcal{C}_j} \mathbf{q}(x,t_n)dx = \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q}(x,t_n)dx. \tag{10}$$

Note que $x_{j+1/2} - x_{j-1/2} = \Delta x$.

Nosso objetivo com a aplicação de um método numérico de volumes finitos será construir uma função $Q_{\Delta t}(x,t)$ constante por partes de modo que a função assume o valor Q_j^n na célula $\mathcal{C}_j$ ao longo do intervalo de tempo $[t_n, t_{n+1})$. Em outras palavras, estamos construindo uma aproximação do tipo

$$Q_{\Delta t}(x,t) = Q_j^n, \quad \text{para todo } (x,t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [t_n, t_{n+1}).$$

A partir da condição inicial $\mathbf{q_0}(x)$ pode-se construir um estado inicial Q^0 em que

$$Q^0(x,t) := Q_j^0 = \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q_0}(x)dx, \quad \text{para todo } (x,t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [0, t_1).$$

A ideia agora é evoluir esse estado temporalmente, obtendo $Q^1(x,t)$ que descreva o perfil da solução nas células no próximo instante de tempo, e repetir esse procedimento

para obter aproximações $Q^2(x,t), Q^3(x,t)$, etc. análogas, de modo a construir a solução $Q_{\Delta t}(x,t)$. Assim, cada $Q^n : \mathbb{R} \times [t_n, t_{n+1}) \longrightarrow \mathbb{R}^m$ está definida por

$$Q^n(x,t) := Q_j^n, \quad \text{para cada } (x,t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [t_n \times t_{n+1}).$$

De modo geral, a construção de cada estado Q^{n+1} é feita a partir do estado imediatamente anterior Q^n, caracterizando um método de passo simples. Entretanto, também é possível efetuar a atualização de Q^{n+1} a partir de mais de um estado anterior, configurando um método de passo múltiplo.

Finalmente, ainda permanece pendente a pergunta: como os métodos de volumes finitos efetuam essa construção?

Vamos retomar a forma integral da lei de conservação unidimensional dada em (6), considerando $V = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [t_n, t_{n+1})$. Assim, temos que

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q}(x, t_{n+1})dx = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q}(x, t_n)dx + \\ + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j-1/2}, t))dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j+1/2}, t))dt.$$

Dividindo por Δx e aproximando $\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{q}(x, t_n)dx \approx Q_j^n$, como indicado em (10), chegamos em

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{1}{\Delta x}\left(\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j+1/2}, t))dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j-1/2}, t))dt\right). \qquad (11)$$

Perceba que as integrais restantes representam o fluxo que passa pelas interfaces direita e esquerda da célula $\mathcal{C}_j$, respectivamente, no intervalo temporal $[t_n, t_{n+1})$. Ao calcularmos o fluxo médio que passa por essas interfaces ao longo do intervalo de tempo especificado, digamos,

$$F_{j+1/2}^n \approx \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(\mathbf{q}(x_{j+1/2}, t))dt,$$

encontramos a expressão

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n). \qquad (12)$$

A ideia aqui é que as aproximações $F_{j+1/2}^n$ e $F_{j-1/2}^n$ são determinadas nas inter-

faces das células a partir de algum fluxo numérico, cuja definição depende do método escolhido. Esses fluxos são então utilizados na expressão (12) para realizar a atualização temporal das médias celulares, obtendo, assim, a aproximação numérica da solução no instante seguinte.

É importante ressaltar que a expressão (12), que apresenta passo de tempo baseado no método de Euler explícito, não é a única maneira de efetuar a atualização temporal. Existem outros métodos que realizam este processo de maneira mais ou menos apropriada, dependendo do contexto, e que apresentam as suas próprias particularidades.

MÉTODOS ENO E WENO

Em particular, neste trabalho, vamos direcionar a nossa atenção para uma família específica de MVFs: os métodos dos tipos *Essentially Non-Oscillatory* (ENO) e *Weighted Essentially Non-Oscillatory* (WENO). A sua principal vantagem está na capacidade que eles apresentam de reduzir as oscilações espúrias que surgem próximo a descontinuidades na solução numérica oriundas do fenômeno de Gibbs.

Vamos descrever o procedimento a partir do qual os métodos ENO e WENO promovem a atualização temporal de Q^n para Q^{n+1} no caso de uma lei de conservação escalar, isto é, $m = 1$. Primeiramente, precisamos aproximar o valor de $q(x, t_n)$ a partir das médias Q_j^n nas interfaces $x_{j+1/2}$. Para tanto, podemos utilizar a interpolação de Lagrange. Contudo, uma vez que temos acesso a todas as informações de Q^n, podemos efetuar essa interpolação a partir de diferentes pontos, os quais levarão a diferentes aproximações.

Em particular, considere os conjuntos $S_1 = \{\mathcal{C}_{j-2}, \mathcal{C}_{j-1}, \mathcal{C}_j\}$, $S_2 = \{\mathcal{C}_{j-1}, \mathcal{C}_j, \mathcal{C}_{j+1}\}$ e $S_3 = \{\mathcal{C}_j, \mathcal{C}_{j+1}, \mathcal{C}_{j+2}\}$, os quais chamaremos de *estênceis*. Cada um desses estênceis pode ser utilizado para originar uma diferente aproximação do valor de $q(x_{j+1/2}, t_n)$.

Inicialmente, vamos considerar o estêncil S_1. Note que, se tentássemos aproximar o valor de $q(x_{j+1/2}, t_n)$ diretamente a partir dos valores de Q^n, teríamos uma incongruência: o valor que queremos aproximar é pontual, calculado pela função em um ponto espacial específico, enquanto os valores Q_j^n são médias celulares. Por essa razão, considere a função

$$\mathcal{Q}(x) := \int_{x_{-1/2}}^{x} q(\xi, t_n) d\xi.$$

A ideia aqui é aplicar a interpolação de Lagrange para construir um polinômio $P(x)$

que aproxime a função $\mathcal{Q}(x)$. Em seguida, ao derivarmos $P(x)$, obtemos um polinômio $P'(x) = p_1(x)$ que aproxima $q(x, t_n)$. Dessa forma, ao avaliar $p_1(x)$ na interface $x_{j+1/2}$, obtemos uma aproximação para o valor pontual $q(x_{j+1/2}, t_n)$. Ao efetuar este processo, obtemos a aproximação

$$q(x_{j+1/2}, t_n) \approx q^{(1)}_{j+1/2} = \frac{1}{3}Q^n_{j-2} - \frac{7}{6}Q^n_{j-1} + \frac{11}{6}Q^n_j, \tag{13}$$

que é uma reconstrução polinomial à esquerda de terceira ordem.

Aplicando um raciocínio análogo para os estênceis S_2 e S_3, obtemos as aproximações

$$q^{(2)}_{j+1/2} = -\frac{1}{6}Q^n_{j-1} + \frac{5}{6}Q^n_j + \frac{1}{3}Q^n_{j+1} \quad \text{e}$$
$$q^{(3)}_{j+1/2} = \frac{1}{3}Q^n_j + \frac{5}{6}Q^n_{j+1} - \frac{1}{6}Q^n_{j+2}.$$

No caso dos métodos do tipo ENO, o objetivo é evitar incluir regiões de descontinuidade no estencil utilizado para a reconstrução. Para tanto, o método escolhe uma das aproximações obtidas (que, no nosso caso, são $q^{(1)}_{j+1/2}$, $q^{(2)}_{j+1/2}$ e $q^{(3)}_{j+1/2}$) utilizando como critério a suavidade local dos polinômios aplicados na reconstrução a partir de diferenças divididas.

Por outro lado, no caso dos métodos do tipo WENO, a aproximação adotada é uma combinação das reconstruções obtidas com pesos não lineares w_j. No exemplo desenvolvido, tem-se que

$$q(x_{j+1/2}, t_n) \approx w_1 q^{(1)}_{j+1/2} + w_2 q^{(2)}_{j+1/2} + w_3 q^{(3)}_{j+1/2}, \tag{14}$$

em que cada $w_j \geq 0, 1 \leq j \leq 3$, é definido a partir de um indicador de suavidade $\beta_j, 1 \leq j \leq 3$, que determina qual a sua influência na construção da aproximação final. Uma forma comum de definir os indicadores de suavidade é

$$\beta_j = \sum_{l=1}^{k} \Delta x^{2l-1} \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{d^l}{dx^l} p_j(x) \right)^2 dx,$$

em que k é o grau do polinômio p_j.

A partir desses indicadores de suavidade, no nosso exemplo, definimos os pesos

não lineares por

$$w_j = \frac{\alpha_j}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad \text{e} \quad \alpha_j = \frac{\gamma_j}{(\epsilon + \beta_j)^2},$$

em que $j \in \{1, 2, 3\}$, ϵ é um número muito pequeno, $\gamma_1 = \frac{1}{10}$, $\gamma_2 = \frac{3}{5}$ e $\gamma_3 = \frac{3}{10}$. Os valores de $\gamma_j, 1 \leq j \leq 3$, foram escolhidos para que a combinação

$$\gamma_1 q_{j+1/2}^{(1)} + \gamma_2 q_{j+1/2}^{(2)} + \gamma_3 q_{j+1/2}^{(3)}$$

correspondesse a uma aproximação de quinta ordem feita sobre o estêncil que vai de $\mathcal{C}_{j-2}$ a $\mathcal{C}_{j+2}$. Para mais detalhes, recomenda-se a consulta de Du et al. (2016).

Após determinar um valor para $q(x_{j+1/2}, t_n)$, é possível calcular uma aproximação $F_{j+1/2}^n$ através de um fluxo numérico. Um dos tipos mais comuns de fluxo considerados é o fluxo de Godunov, definido por

$$\hat{f}(a, b) := \begin{cases} \min\limits_{a \leq x \leq b} f(q), & \text{se } a \leq b, \\ \max\limits_{b \leq x \leq a} f(q), & \text{se } a > b. \end{cases}$$

A ideia é que podemos aproximar

$$F_{j+1/2}^n = \hat{f}(q_{j+1/2}^{n,-}, q_{j+1/2}^{n,+}),$$

em que $q_{j+1/2}^{n,-}$ representa o estado reconstruído à esquerda da interface (com a reconstrução igual à que vimos anteriormente), enquanto $q_{j+1/2}^{n,+}$ representa o estado reconstruído à direita (com a reconstrução utilizando o estêncil de maneira espelhada).

Determinado o valor do fluxo, pode-se aplicar uma atualização temporal como, por exemplo, a apresentada em (12), para reconstruir todo o próximo estado Q_j^{n+1}.

METODOLOGIA

A metodologia adotada para o desenvolvimento deste trabalho foi a revisão bibliográfica, com ênfase no estudo de livros e revisão de artigos, discussão das ideias exploradas em seminários semanais e a implementação de modelos computacionais, bem como a averiguação dos resultados obtidos através dessas implementações.

Em especial, para a introdução das noções de leis de conservação, hiperbolicidade

e métodos de volumes finitos, foram utilizadas como referência LeVeque (1992), LeVeque (2002) e Toro (2009). Para o desenvolvimento das ideias associadas aos métodos ENO e WENO, foi consultado Du et al. (2016).

Em relação à implementação computacional, foram desenvolvidos os algoritmos para o método do tipo ENO de ordem 3 e o método do tipo WENO de ordem 5 descritos na seção anterior. Escolheu-se a linguagem Python devido à sua acessibilidade e versatilidade, em conjunto com as bibliotecas NumPy, Matplotlib e SciPy.

Ademais, a evolução temporal foi realizada utilizando um método de Runge-Kutta de terceira ordem *Strong Stability Preserving* (SSP), assim como proposto por Shu e Osher (1988). Essa escolha foi realizada visando otimizar a solução numérica, permitindo avaliar o comportamento dos métodos implementados sem que a discretização temporal introduzisse uma redução significativa na ordem de precisão espacial.

Para avaliação das implementações, foram realizados dois experimentos baseados na equação de Burgers invíscida: um cuja solução gera à formação de um choque e outro de um leque de rarefação. Os resultados foram comparados com as soluções analíticas, permitindo reconhecer e investigar as suas características, bem como analisar o comportamento das aproximações numéricas em diferentes condições.

RESULTADOS

A seguir, vamos investigar alguns dos principais resultados numéricos obtidos através de nossa implementação dos métodos ENO e WENO.

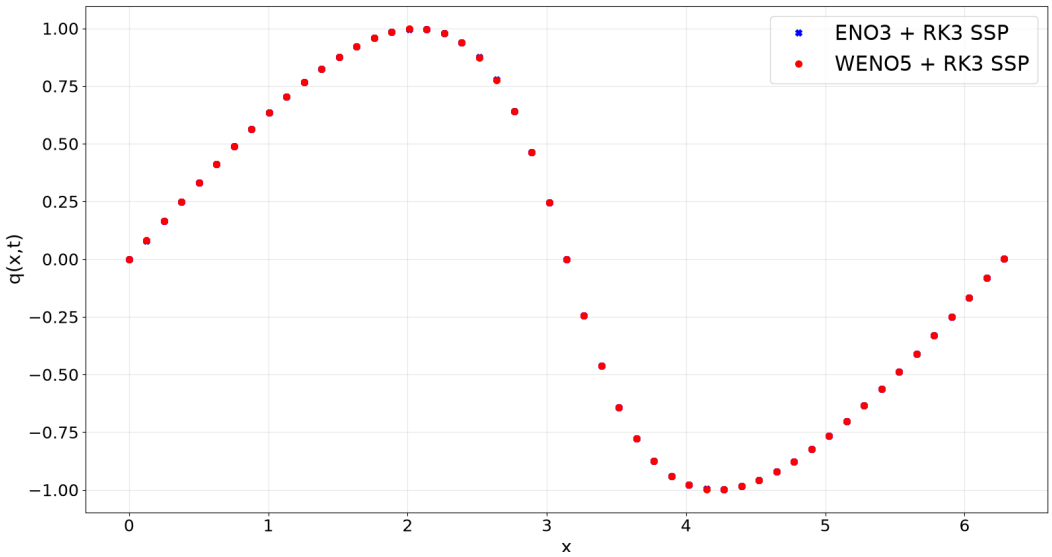
EXPERIMENTO 1: FORMAÇÃO DE CHOQUE

Inicialmente, consideramos o caso da equação de Burgers invíscida, dada por

$$\frac{\partial q}{\partial t} + q\frac{\partial q}{\partial x} = 0, \tag{15}$$

com condição inicial $q(x,0) = \mathrm{sen}(x)$ e condições de contorno periódicas. Podemos analisar o comportamento do sistema ao longo do tempo. Considerando uma malha com $nx = 50$ células espaciais em $[0, 2\pi]$, $nt = 14$ intervalos temporais e tempo total $T = 0{,}5$, chega-se no seguinte perfil:

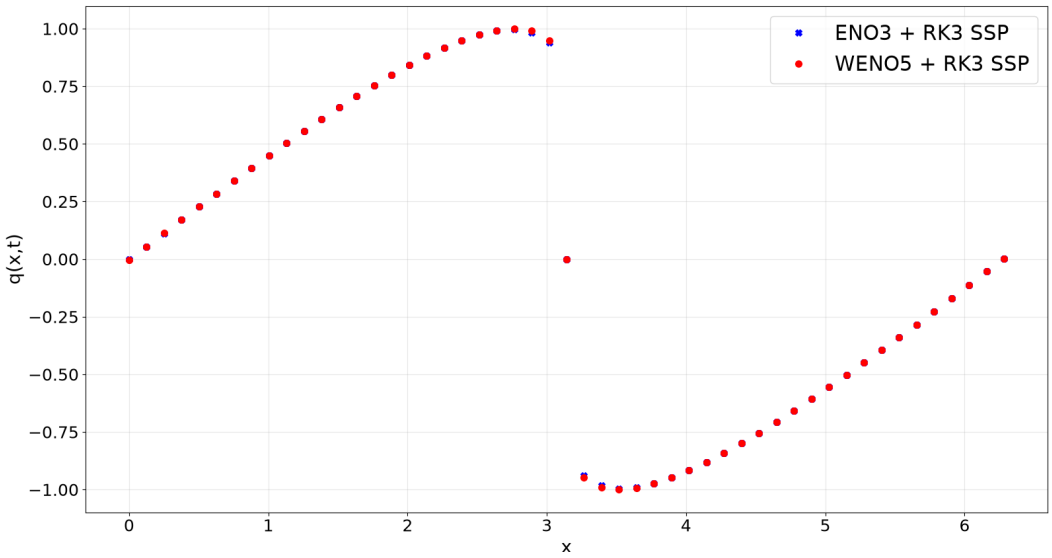
Figura 1 – Burgers com $T = 0{,}5$.



Fonte: os próprios autores.

Agora, considerando $nx = 50$, $nt = 32$ e o tempo total $T = 1{,}2$, obtém-se:

Figura 2 – Burgers com $T = 1{,}2$.



Fonte: os próprios autores.

As figuras 1 e 2 nos permitem visualizar o processo de formação de uma onda de choque a partir de uma condição inicial contínua. Esse comportamento é característico da equação de Burgers e revela a capacidade dos métodos ENO3 e WENO5 de representar a evolução da solução mesmo em regiões próximas a descontinuidades. Ambos métodos apresentaram resultados satisfatórios e quase não apresentaram distinções perceptíveis

na aproximação da solução do problema.

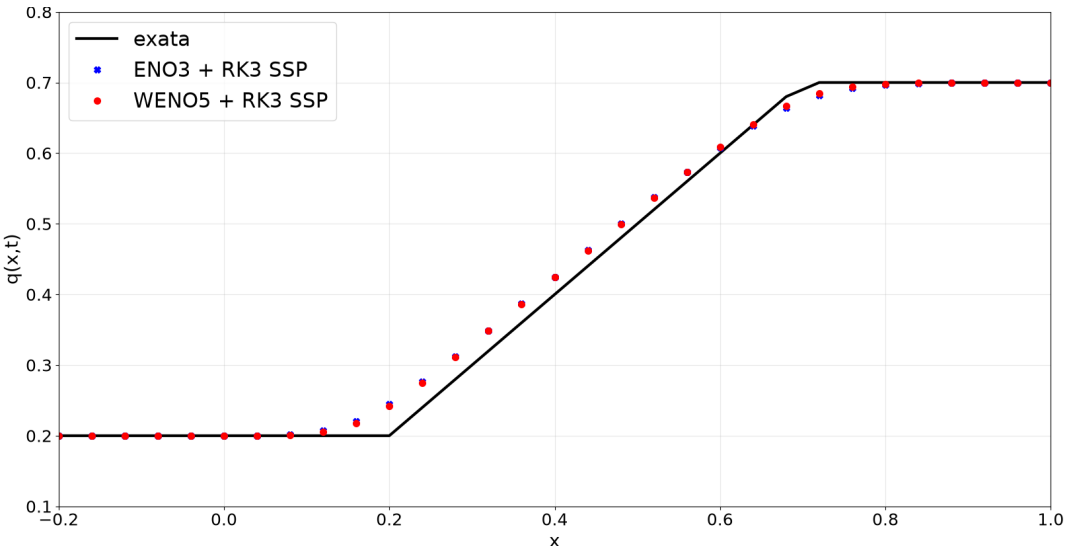
EXPERIMENTO 2: LEQUE DE RAREFAÇÃO

Para este segundo experimento, consideramos novamente a equação de Burgers invíscida (15), agora com condição inicial dada pelo problema de Riemann, isto é,

$$q_0(x) = \begin{cases} 0{,}2, & \text{se } x < 0, \\ 0{,}7, & \text{se } x > 0. \end{cases}$$

Aplicando os métodos ENO e WENO com $nx = 50$ células espaciais, $nt = 84$ intervalos temporais, tempo final $T = 1$ e condições de contorno constantes, obtém-se o seguinte estado final:

Figura 3 – Leque de Rarefação (Estado Final)



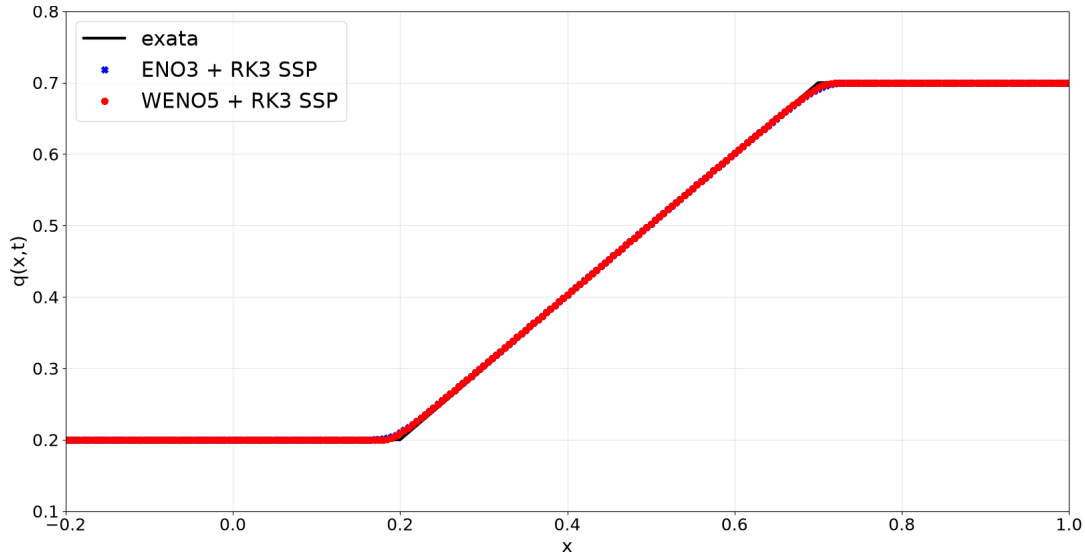
Fonte: os próprios autores.

Nesse cenário, observa-se que ambos métodos numéricos foram capazes de reproduzir de maneira satisfatória o fenômeno de rarefação. Além disso, nota-se que, para este experimento, a aproximação obtida pelo método WENO apresentou uma precisão um pouco maior do que aquela obtida pelo método ENO.

É importante ressaltar que a utilização de uma malha mais refinada pode contribuir para uma representação mais precisa da solução, especialmente na região de transição entre os estados constantes. Por exemplo, ao considerarmos $nx = 400$ células espaciais

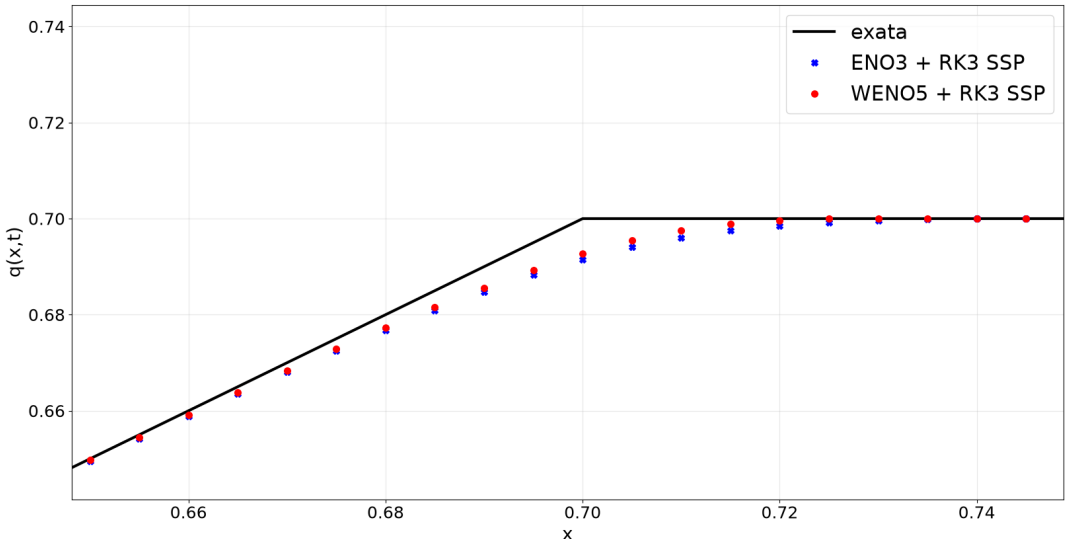
e $nt = 667$ intervalos temporais, adquirimos a seguinte aproximação:

Figura 4 – Leque de Rarefação (Estado Final Refinado)



Fonte: os próprios autores.

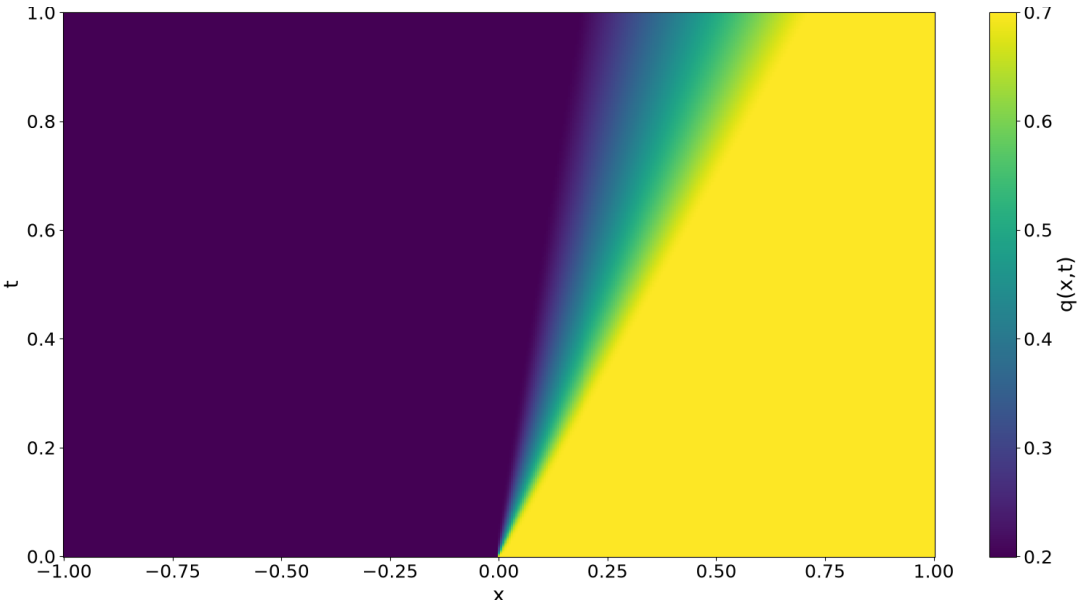
Figura 5 – Rarefação Aproximado (Estado Final Refinado)



Fonte: os próprios autores.

Por fim, ainda podemos utilizar as reconstruções feitas para obter um mapa de calor que indica a transformação do estado inicial ao longo do tempo. Por exemplo, considerando $T = 1, nx = 400$ e $nt = 667$, o método WENO nos fornece o seguinte perfil de avanço temporal da solução:

Figura 6 – Leque de Rarefação (Mapa de Calor)



Fonte: os próprios autores.

Perceba que a figura 6 representa justamente o processo de formação do leque de rarefação, com é esperado para esse problema de valor inicial.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Diante do exposto, conclui-se que as leis de conservação hiperbólicas representam uma classe importante de sistemas de equações diferenciais parciais capazes de descrever uma ampla gama de fenômenos físicos e que apresentam uma rica teoria, a qual foi introduzida brevemente.

Ademais, buscou-se destacar o papel dos métodos de volumes finitos na construção de aproximações numéricas para leis de conservação. Em especial, a sua formulação baseada na evolução das médias celulares permite preservar as quantidades conservadas e revela-se uma abordagem adequada para situações em que a solução pode apresentar descontinuidades, por exemplo.

Por fim, a implementação computacional estabelece uma relação entre aspectos teóricos e computacionais, permitindo a verificação do comportamento das leis de conservação com o passar do tempo de maneira direta. Em particular, a escolha dos métodos ENO e WENO mostrou-se especialmente relevante, uma vez que, por se tratarem de métodos de alta ordem, eles são capazes de produzir resultados relativamente precisos mesmo

com um baixo número de intervalos espaciais.

REFERÊNCIAS

DU, Q. et al. **Handbook of Numerical Methods for Hyperbolic Problems:** basic and fundamental issues. v. 17. Amsterdam: Elsevier, 2016.

LAMBERT, W. J. **Método dos Volumes Finitos para Leis de Conservação**. 2002. 105 f. Dissertação (Mestrado em Matemática) - Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

LEVEQUE, R. J. **Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

LEVEQUE, R. J. **Numerical Methods for Conservation Laws**. 2. ed. Berlim: Birkhauser, 1992.

SHU, C.-W; OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. **Journal of Computational Physics**, Amsterdam, v. 77, n. 2, p.439 — 471, 1988.

TORO, E. F. **Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics:** A practical introduction. 3. ed. Berlim: Springer, 2009.