

O método de limitação de fluxos na solução da equação da advecção em malha estruturada

Péttersen Vinícius Pramiu¹, Rogério Luis Rizzi¹,
Claudia Brandelero Rizzi², Amarildo de Vicente³

¹UNIOESTE - Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Laboratório de Computação de Alto Desempenho
Rua Universitária, 2069. Jardim Universitário.
Caixa Postal 711 - CEP 85819-110 Cascavel, PR

ppramiu@gmail.com, rogeriorizzi@hotmail.com

²UNIOESTE - Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Colegiado do Curso de Ciência da Computação
Rua Universitária, 2069. Jardim Universitário.
Caixa Postal 711 - CEP 85819-110 Cascavel, PR

claudia_rizzi@hotmail.com

³UNIOESTE - Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Colegiado do Curso de Matemática
Rua Universitária, 2069. Jardim Universitário.
Caixa Postal 711 - CEP 85819-110 Cascavel, PR

amarildo@unioeste.br

Resumo. *Através da modelagem matemática é possível descrever o comportamento de alguns sistemas ou fenômenos reais em termos matemáticos, facilitando sua compreensão e estudo. A maioria das formulações matemáticas destes fenômenos conduzem a taxas de variação que dependem de duas ou mais variáveis, como tempo, distância, velocidade, densidade entre outras. Desta forma, muitas formulações são expressas na forma de equações diferenciais parciais (EDP's), que na maioria das vezes não possuem solução analítica, e devem ser resolvidas numericamente com auxílio computacional. Este artigo apresenta a solução numérica para a equação da advecção linear unidimensional utilizando métodos de alta resolução e funções de limitação de fluxo.*

1. Introdução

Com uma compreensão limitada da multiplicidade de variáveis interdependentes que compõem os sistemas ambientais, somos incapazes de descrever detalhadamente o que ocorre, mesmo se nos restringirmos aos aspectos físicos, tais como a circulação e o transporte de uma substância. Em frente a esta situação e visando planejar intervenções humanas no meio ambiente, recorre-se à modelagem, que nada mais é que uma idealização simplificada dos complexos sistemas naturais [1].

O transporte de substâncias em corpos de águas rasos é realizado através de uma série de mecanismos que são classificados como sendo aqueles que produzem os transportes advectivo e o difusivo. O transporte advectivo é realizado pelo campo de escoamento que é produzido por fatores astronômicos (marés), meteorológicos (ventos, chuvas), sazonais (descarga de água), por efeitos secundários (força de Coriolis) entre outros. O transporte difusivo deve-se principalmente aos efeitos da turbulência do escoamento.

A advecção descreve como a concentração é transportada pelo fluido num escoamento. Por exemplo, a fumaça produzida por uma fábrica é transportada ao longo da atmosfera graças às correntes de vento. No caso de rios, a advecção move o constituinte de montante a jusante, como resultado do movimento do fluido. Em corpos de água, a advecção é o principal mecanismo de transporte dos constituintes.

2. Leis de Conservação

Muitas das equações diferenciais parciais que aparecem nas ciências naturais são obtidas através de leis de conservação, que essencialmente expressam o fato de que alguma substância é balanceada, tal como energia ou um poluente. Por exemplo, a primeira lei da termodinâmica afirma que a variação de energia interna de um sistema é igual ao calor total adicionado ao sistema mais o trabalho realizado sobre o sistema.

Matematicamente, leis de conservação traduzem-se em equações integrais, em onde podem ser deduzidas equações diferenciais, na maior parte dos casos. Estas equações descrevem como o processo evolui com o tempo e isto faz com que elas também sejam chamadas de equações de evolução [2].

3. Método dos Volumes Finitos (MVF)

O Método de Volumes Finitos é uma abordagem para se obter uma versão discreta de uma EDP ou de uma equação integral (EI). Ele é fundamentado em uma abordagem física do problema representado pela equação. O seu desenvolvimento está intrinsicamente ligado ao fluxo entre regiões, ou volumes adjacentes, onde o fluxo de uma grandeza como massa ou energia, é a quantidade da grandeza que atravessa a fronteira do volume [3].

A quantidade líquida da grandeza que atravessa um volume de controle (VC), por unidade de tempo é calculada pela integração, sobre essas fronteiras, da diferença entre os fluxos que entram e os que saem do VC, o que é conseguido pela integração das equações. O MVF se constitui na aproximação da integração da equação diferencial sobre domínios discretos chamados volumes finitos.

3.1. Método upwind

Para problemas hiperbólicos, espera-se que as informações se propaguem como ondas que se deslocam ao longo das curvas características. Para um sistema de equações que tem várias ondas se propagando em velocidades diferentes e talvez em direções diferentes, é possível utilizar a estrutura da solução para determinar de forma mais adequada funções numéricas de fluxo. Essa idéia dá origem a métodos upwind, em que a informação para cada variável característica é obtida a partir da direção do fluxo de entrada. Para a equação da advecção escalar há apenas uma velocidade, que é positiva ou negativa. Assim um

método upwind normalmente é também um método direcional, baseado nos valores a montante ou a jusante do escoamento [4].

O método *upwind* considera a direção do fluxo no lado dos elementos da malha. A equação de advecção pura, linear e unidimensional é dada por:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + a \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

Pode-se construir uma aproximação de 1ª ordem por meio de diferenças upwind, obtendo o seguinte modelo discreto para a equação (1):

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \begin{cases} a \frac{\Delta t}{\Delta x} (Q_j^n - Q_{j-1}^n) & \text{se } a \geq 0 \\ a \frac{\Delta t}{\Delta x} (Q_{j+1}^n - Q_j^n) & \text{se } a < 0 \end{cases} \quad (2)$$

Para assegurar a estabilidade do esquema numérico (2), deve ser satisfeita a condição (3) dada por:

$$0 \leq a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (3)$$

A desigualdade (3) é conhecida na literatura como *Courant-Friedrichs-Lewy* ou condição (CFL).

3.2. Método de Lax-Wendroff

O esquema conhecido como Lax-Wendroff para a equação da advecção linear (1) pode ser derivado através de uma expansão em série de Taylor para Q_j^{n+1} , obtendo expressões para Q_x e Q_{xx} , a primeira e a segunda derivada de Q em relação a x , respectivamente. Realizando manipulações algébricas e substituindo as derivadas Q_x e Q_{xx} por diferenças centradas de 1ª e 2ª ordem respectivamente, obtêm-se uma aproximação para o método Lax-Wendroff como:

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (Q_{j+1}^n - Q_{j-1}^n) + \frac{a^2(\Delta t)^2}{2(\Delta x)^2} (Q_{j+1}^n - 2Q_j^n + Q_{j-1}^n) \quad (4)$$

No entanto, podemos reinterpretar (4) como um esquema de volumes finitos na forma conservativa cujas funções fluxo são como:

$$F_{j-1/2}^n = \frac{1}{2}a(Q_{j-1}^n + Q_j^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} a^2 (Q_j^n - Q_{j-1}^n) \quad (5)$$

e

$$F_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}a(Q_j^n + Q_{j+1}^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} a^2 (Q_{j+1}^n - Q_j^n) \quad (6)$$

3.3. Método de Beam-Warming

O método de Lax-Wendroff é um método de três pontos. No caso em que todos os autovalores de a são positivos, é possível usar uma fórmula unidirecional ao invés de fórmulas

centradas para aproximar as derivadas Q_x e Q_{xx} . Obtêm-se com esta abordagem o método descrito por:

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} a (3Q_j^n - 4Q_{j-1}^n + Q_{j-2}^n) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 a^2 (Q_j^n - 2Q_{j-1}^n + Q_{j-2}^n) \quad (7)$$

Este método é conhecido como Beam-Warming [5]. Escrevendo tal método na forma fluxo, obtêm-se as funções fluxos determinadas por:

$$F_{j-1/2}^n = aQ_{j-1}^n + \frac{1}{2}a \left(1 - a \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) (Q_{j-1}^n - Q_{j-2}^n) \quad (8)$$

e

$$F_{j+1/2}^n = aQ_j^n + \frac{1}{2}a \left(1 - a \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) (Q_j^n - Q_{j-1}^n) \quad (9)$$

4. Métodos de Alta Resolução

A solução numérica da equação da advecção requer adequados esquemas de aproximação para uma apropriada formulação. Esquemas lineares geralmente não fornecem uma boa acurácia, devido ao fato das soluções resultantes produzirem dispersão numérica e soluções fisicamente não realísticas. Alternativamente podem-se construir esquemas numéricos não lineares que empreguem o conceito de diminuição das variações totais (TVD - *Total Variation Diminishing*), de modo a obter soluções que convergem para a única solução física, com alta qualidade numérica [4].

Uma estratégia para obter uma solução que seja TVD é adicionar aos esquemas numéricos um termo que corrige oscilações que surgem nas proximidades das discontinuidades ou no entorno dos altos gradientes de concentração. Assim, a idéia é usar uma “média ponderada”, de um método conservativo de primeira ordem, com outro conservativo de segunda ordem, de modo que próximo das discontinuidades o peso maior é do método de primeira ordem e, portanto, para um fluxo de baixa ordem (\mathcal{F}_L). Em regiões de solução suave, o peso é maior para o método de segunda ordem e, portanto, para um fluxo de alta ordem (\mathcal{F}_H) [7] e [4]. O fluxo é calculado como sendo uma média ponderada (uma combinação convexa) dessas contribuições, onde o fator de ponderação é a função limitadora do fluxo.

No caso geral, isso significa que um método não linear pode ser visto como sendo um método linear, mais uma correção de alta ordem. As funções fluxo para o método de limitação de fluxo são especificadas por:

$$F_{j-1/2}^n = \mathcal{F}_L(Q_{j-1}, Q_j) + \phi(\theta)_{j-1/2}^n [\mathcal{F}_H(Q_{j-1}, Q_j) - \mathcal{F}_L(Q_{j-1}, Q_j)] \quad (10)$$

e

$$F_{j+1/2}^n = \mathcal{F}_L(Q_j, Q_{j+1}) + \phi(\theta)_{j+1/2}^n [\mathcal{F}_H(Q_j, Q_{j+1}) - \mathcal{F}_L(Q_j, Q_{j+1})] \quad (11)$$

Se $\phi(\theta) = 0$ o método fica reduzido a um método de baixa ordem, enquanto que se $\phi(\theta) = 1$ obtêm-se um método de alta ordem. A função $\phi(\theta)$ é denominada *função limitadora de fluxo*, cujo valor depende da suavidade da função monitora θ num dado

intervalo. Variando os valores da função limitadora $\phi(\theta)$, obtêm-se métodos de solução com distintas ordens de acurácia. Os valores assumidos para $\phi(\theta)$, neste trabalho são:

Para aproximações não TVD	Para aproximações TVD
upwind: $\phi(\theta) = 0$;	minmod: $\phi(\theta) = \minmod(1, \theta)$
Lax-Wendroff: $\phi(\theta) = 1$;	van Leer: $\phi(\theta) = \frac{\theta + \theta }{1 + \theta }$
Beam-Warming: $\phi(\theta) = \theta$;	superbee: $\phi(\theta) = \max(0, \min(1, 2\theta), \min(2, \theta))$

Uma forma de identificar métodos TVD é através da análise gráfica da função $\phi(\theta)$ no plano $\theta - \phi$. Um método TVD deve manter a curva $\phi(\theta)$ na região sombreada (TVD) mostrada na Figura 1(a). A Figura 1(b) também mostra as funções $\phi(\theta)$ para os métodos Lax-Wendroff, Beam-Warming e upwind. Todas essas funções se encontram fora da região sombreada para alguns valores de θ , confirmando que esses métodos não são TVD. Esta análise gráfica de ϕ foi apresentada pela primeira vez por [8], que analisou uma ampla classe de métodos limitadores de fluxo para leis de conservação não-linear.

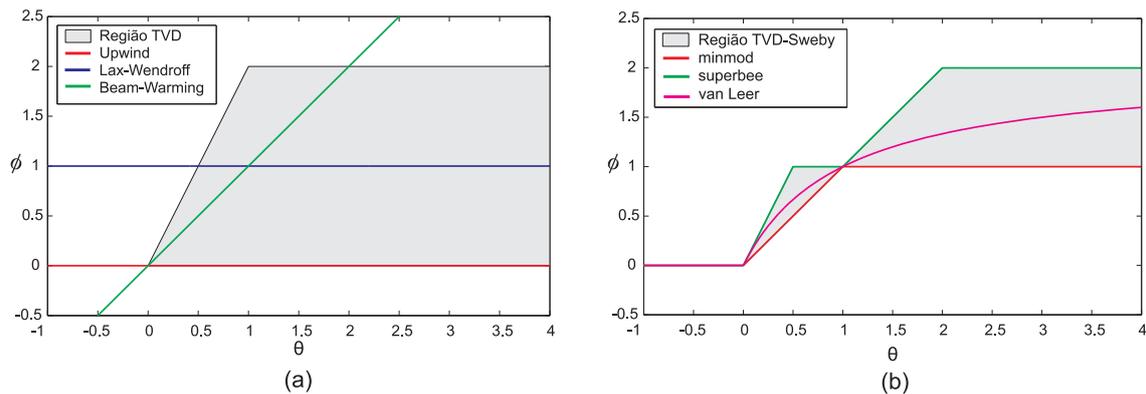


Figura 1: (a) Esquemas numéricos e região TVD. (b) Funções limitadoras e região TVD-Sweby.

Consequentemente, as funções limitadoras devem reconhecer a especificação das discontinuidades ou dos altos gradientes e isso pode ser realizado através da análise da suavidade da solução com auxílio de *funções monitoras*, que são especificadas por:

$$\theta_{j-1/2} \equiv \frac{\Delta Q_{I-1/2}}{\Delta Q_{j-1/2}} \quad \text{ou} \quad \theta_{j+1/2} \equiv \frac{\Delta Q_{I+1/2}}{\Delta Q_{j+1/2}}, \quad I = \begin{cases} j-1, & a > 0 \\ j+1, & a < 0 \end{cases} \quad (12)$$

Tais funções geralmente são obtidas utilizando-se os gradientes da solução em pontos consecutivos da malha e de modo a considerar a direção do escoamento, de modo que a função limitadora de fluxo é escrita em função do quociente dos gradientes que dependem da direção do escoamento.

Essas considerações estão presentes no método de limitação de fluxo desenvolvido por Sweby, que mostrou condições necessárias e suficientes para a limitação da variação total da solução utilizando-se de métodos e abordagens desenvolvidas originalmente por Harten, Roe, Van Leer e outros pesquisadores [9]. O método de limitação de fluxo de Sweby toma como ponto de partida uma integração conservativa dos fluxos

numéricos. Se esses fluxos não estiverem definidos nas faces das células, onde geralmente se estabelece o volume de controle, eles devem ser obtidos através de interpolação. A escolha da função interpoladora fornece o tipo e a ordem da aproximação de modo que uma grande variedade de esquemas de interpolação pode ser construída [8].

O método de limitação de fluxos considera que o valor do fluxo numérico pode ser escrito como a soma de um termo difusivo upwind de primeira ordem com um termo antidifusivo. A parte antidifusiva de alta ordem é multiplicada por uma função limitadora de fluxo que é função não linear, razão upwind de gradientes consecutivos. O clássico método de primeira ordem upwind, que é a base de modernos métodos de alta resolução, foi desenvolvido inicialmente para sistemas lineares. Sua extensão foi proposta por Godunov, sendo tal abordagem fundamentada na solução do problema de Riemann. Porém, o método de Godunov é de primeira ordem gerando grande difusão numérica.

Ao longo das últimas décadas foram desenvolvidos uma grande variedade de métodos de ordem superior objetivando minimizar os problemas de difusão que são intrínsecos de métodos de primeira ordem. Porém, se os métodos de primeira ordem tendem a apresentar difusão numérica, os métodos de ordem mais alta tendem a apresentar oscilações não físicas, geralmente denominadas de dispersões numéricas [4].

A extensão do método de Godunov para ordens superiores deu origem aos métodos de alta acurácia. Algumas importantes classes de tais métodos de alta resolução introduzem limitações nos fluxos numéricos de modo a controlar a difusão e a dispersão numéricas. Uma questão crucial é como e quando limitar tais fluxos numéricos. Um critério matemático nesse sentido é aquele desenvolvido por Harten quando da formulação do conceito de TVD (Total Variation Diminishing).

A variação total da solução TVD de uma equação diferencial não pode ser crescente ao longo do tempo, de modo que um esquema numérico com essa propriedade até poderá apresentar alguma difusão numérica, mas nunca apresentará oscilações numéricas, pois se mostra que métodos TVD implicam na preservação da monotonicidade e na positividade da solução numérica. Empregando a formulação de Sweby, pode-se construir um esquema de solução tipo fluxo limitado, que emprega uma função limitadora de fluxo [4].

Para obter uma solução TVD para a equação diferencial da advecção, deve-se mostrar que tais funções devem satisfazer as condições definidas pelo teorema de Harten para equações puramente hiperbólicas. Porém, existem trabalhos que utilizam essas mesmas considerações para obter funções limitadoras de fluxo específicas para equação da advecção, de modo que sejam empregadas na solução de alta qualidade numérica [6].

4.1. Resultados e Discussão

Nesta seção serão apresentados alguns resultados obtidos a partir da equação da advecção pura unidimensional, utilizando as estratégias mencionadas nas seções anteriores. Tomando a equação (1) discretizada na forma de volumes finitos:

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n) \quad (13)$$

De acordo com [4], resulta que uma discretização de (1) segundo a abordagem

(13) é dada por:

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - v(Q_j - Q_{j-1}) - 0,5v(1 - v)\phi(\theta_{j+1/2}) \cdot (Q_{j+1} - Q_j) - \phi(\theta_{j-1/2}) \cdot (Q_j - Q_{j-1}) \quad (14)$$

sendo $v = a\Delta t/\Delta x$ o número de Courant. Admitindo como condição inicial:

$$Q(x, 0) = \text{sech}((z + 3/5) \cdot 20) + (5z - 0,5) \cdot H(z - 0, 1) + (1,5 - 5z) \cdot H(z - 0,3) - H(z - 0,5) \quad (15)$$

e condições de contorno periódicas [10]. A implementação foi realizada em Matlab e os gráficos obtidos são mostrados nas Figuras 2 e 3.

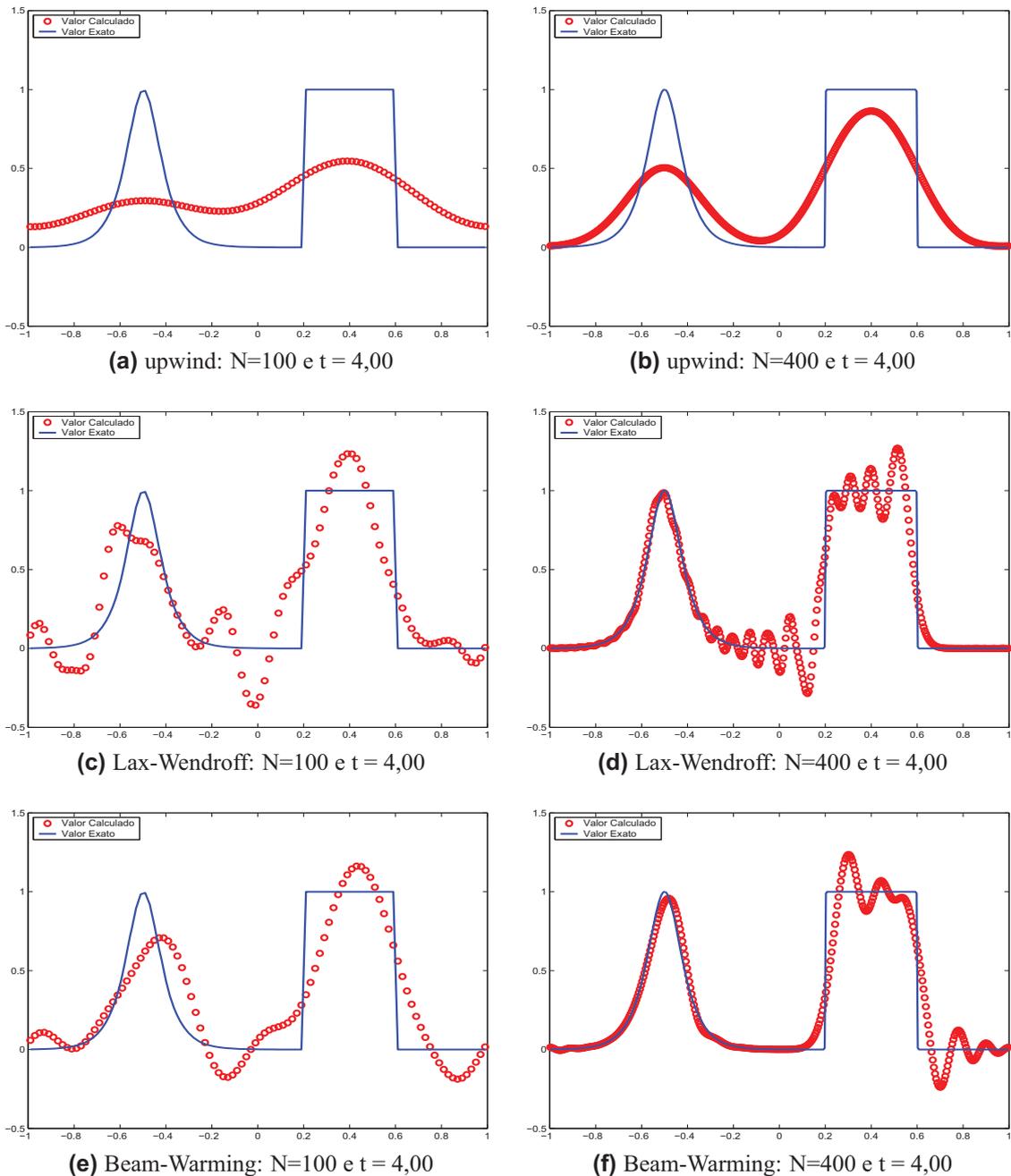


Figura 2: Solução da equação da advecção com métodos lineares ou de alta ordem que não satisfazem a propriedade TVD.

Ao comparar o comportamento típico dos métodos upwind, Lax-Wendroff e Beam-Warming na Figura 2, fica evidente o amortecimento da solução para o método upwind, que é um método de 1ª ordem altamente difusivo. Já os métodos de 2ª ordem Lax-Wendroff e Beam-Warming apresentam oscilações puramente numéricas nas proximidades dos pontos onde não existem derivadas. Isto deve-se ao fato que tais métodos não preservam monotonicidade por não estarem completamente inseridos na região TVD como visto na Figura 1(a).

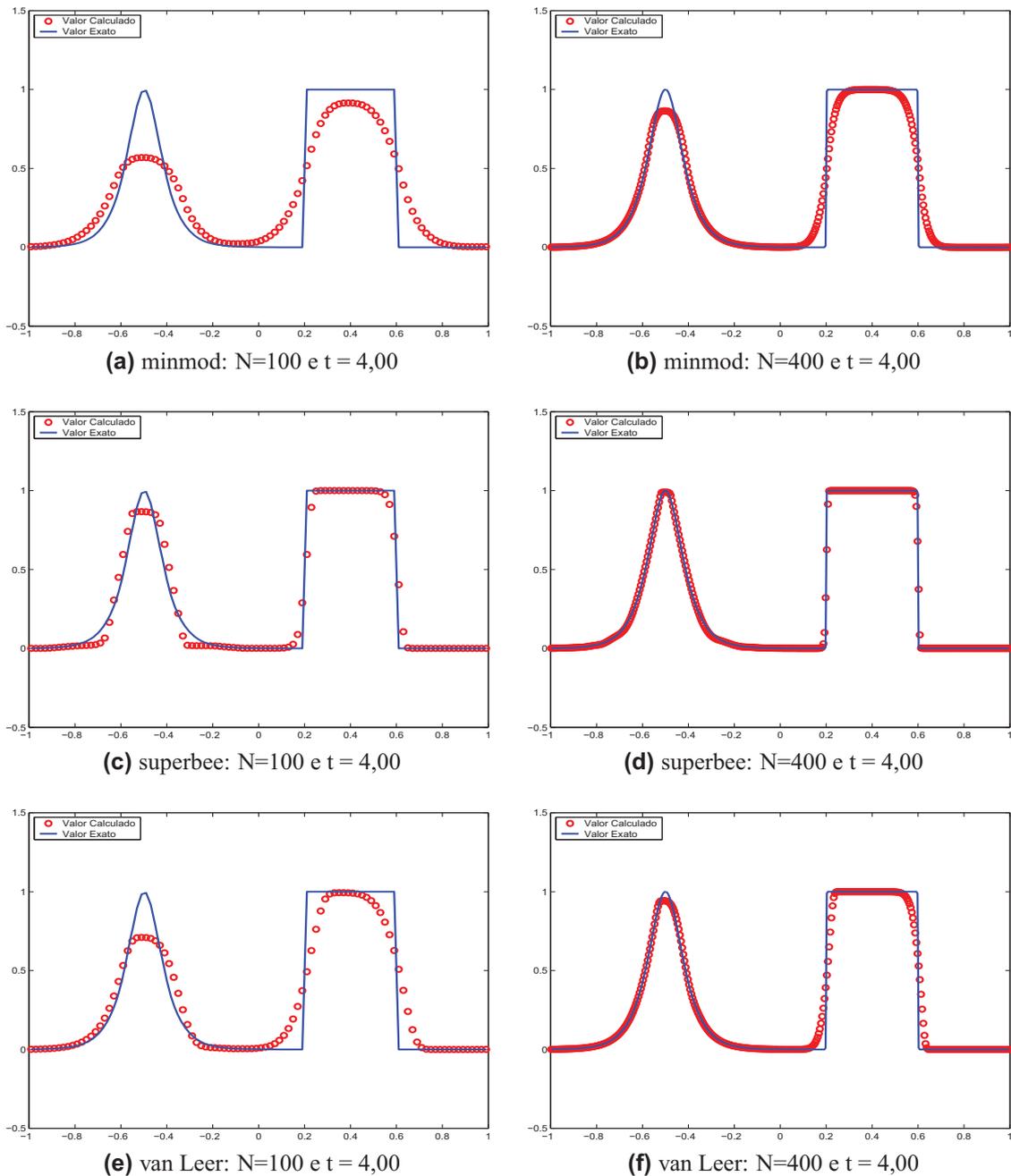


Figura 3: Solução da equação da advecção com diferentes métodos de alta resolução que satisfazem a propriedade TVD.

O algoritmo implementado neste trabalho para comparação entre os métodos, cujos resultados são exibidos nas Figuras 2 e 3, utilizando como condição inicial a expressão (15) e condições de contorno periódicas, é descrito por:

Dados de Entrada

Esquema numérico, Intervalo, tempo de parada, condição inicial;

Início

Calcula Δz ;

Calcula Δt ;

Calcula número do Courant;

Calcula solução exata: Q_{ex}

enquanto $t \leq t_{parada}$ **faça**

$t \leftarrow t + \Delta t$;

Aplica esquema escolhido;

Calcula solução numérica: Q_{calc}

fim enquanto

$E_1 \leftarrow$ métrica L_1 ;

$E_2 \leftarrow$ métrica L_2 ;

Imprime gráficos;

Uma análise pode ser realizada mais detalhadamente através do emprego de apropriadas métricas, visando a comparação entre os métodos. Para isto foram utilizadas duas expressões para o cálculo do erro relativo entre a solução analítica e a solução numérica. As expressões são as normas L_1 e L_2 especificadas respectivamente por:

$$\|E_h\|_1 = \frac{\sum_{i=1}^N |Q_{ex} - Q_{calc}|}{\sum_{i=1}^N |Q_{ex}|} \quad \text{e} \quad \|E_h\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Q_{ex} - Q_{calc})^2}{\sum_{i=1}^N (Q_{ex})^2}} \quad (16)$$

A Tabela 1 mostra os erros relativos para solução da equação da advecção para diferentes métodos, diferentes números de pontos (N) da malha e tempos de execução. Os métodos utilizados foram: upwind, Lax-Wendroff, Beam-Warming e funções limitadoras: minmod, superbee e van Leer. Valores próximos a zero indicam melhor solução.

Esquema	Tempo	N	$\ E_h\ _1$	$\ E_h\ _2$	Esquema	Tempo	N	$\ E_h\ _1$	$\ E_h\ _2$
upwind	2,00	100	0,7407	0,7443	Beam Warming	2,00	100	0,4400	0,3813
		200	0,5347	0,5301			200	0,2592	0,2760
		400	0,3719	0,3882			400	0,1545	0,2096
	4,00	100	0,9617	1,0166		4,00	100	0,5290	0,4355
		200	0,7407	0,7447			200	0,3579	0,3293
		400	0,5343	0,5296			400	0,2106	0,2419
Lax Wendroff	2,00	100	0,4443	0,3730	minmod	2,00	100	0,2949	0,3212
		200	0,2656	0,2611			200	0,1670	0,2250
		400	0,1716	0,2076			400	0,0939	0,1658
	4,00	100	0,5784	0,4503		4,00	100	0,3957	0,4015
		200	0,3535	0,3167			200	0,2262	0,2698
		400	0,2204	0,2378			400	0,1260	0,1925
superbee	2,00	100	0,1188	0,1591	van Leer	2,00	100	0,1905	0,2465
		200	0,0501	0,1037			200	0,1008	0,1783
		400	0,0208	0,0687			400	0,0552	0,1334
	4,00	100	0,1313	0,1694		4,00	100	0,2463	0,2919
		200	0,0658	0,1099			200	0,1307	0,2034
		400	0,0243	0,0694			400	0,0702	0,1499

Tabela 1: Erros relativos para os esquemas de resolução.

Como mostrado na Figura 3, os métodos minmod, superbee e van Leer por serem não lineares apresentam uma boa aproximação à solução exata. Isso deve-se ao fato que

estes métodos utilizam segunda (ou mais alta) ordem de acurácia. Em regiões próximas àqueles pontos onde não existem derivadas é realizada uma ponderação, via função limitadora, de modo que nesses pontos, são empregados métodos de baixa ordem que impedem o aparecimento de oscilações de origem numérica.

5. Conclusões

Embora a equação da advecção aqui utilizada seja linear e unidimensional, verificou-se que os métodos não lineares reduzem as oscilações numéricas geradas nas proximidades de pontos que não possuem derivadas, permitindo obter alta qualidade numérica na solução de problemas do tipo hiperbólicos (equação da advecção).

6. Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq/UNIOESTE pelo auxílio financeiro e incentivo à pesquisa.

Referências

- [1] Wrobel, L. C., *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos - Vol. 1.*, Associação Brasileira de Recursos Hídricos - ABRH, Rio de Janeiro - RJ, 1989.
- [2] Biezuner, R. J., “Equações Diferenciais Parciais I/II,” Notas de aula, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Minas Gerais - MG, 2010.
- [3] Fortuna, A. O., *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo - SP, 2000.
- [4] Randall, L., *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, Cambridge - UK, 2004.
- [5] Warming, R. F. and Beam, R. M., “Upwind second order difference schemes and applications in aerodynamics,” *AIAA J.*, 1976, pp. p. 1241–1249.
- [6] Harten, A., “High resolution schemes for conservation laws,” *Journal Computational Physics*, Vol. 49, 1983, pp. p. 357–393.
- [7] Rizzi, R. L., *Modelo Computacional Paralelo para a Hidrodinâmica e para o Transporte de Substâncias Bidimensional e Tridimensional*, Tese de doutorado em ciência da computação - instituto de informática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre - RS, 2002.
- [8] Sweby, P. K., “High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 21, October 1984, pp. p. 995–1011.
- [9] Laney, C. B., *Computational Gasdynamics*, Cambridge University Press, New York - NY, 1998.
- [10] Shen, J., “Finite Volume Method and Riemann Solvers in Matlab: Numerical Solutions of Partial Differential Equations,” Project, University of Waterloo, 2007.