

Sobre Variação Total e Convergência de Três Esquemas *Upwind* para Leis de Conservação

Giseli A. B. Lima, Valdemir G. Ferreira,

Depto de Matemática Aplicada e Estatística ICMC-USP, 13560-970, São Carlos, SP

E-mail: giabl@icmc.usp.br, pvgf@icmc.usp.br,

Resumo: *Três esquemas upwind de alta resolução originais para solução computacional de leis de conservação desenvolvidos no LCAD-ICMC-USP (ADBQUICKEST, TOPUS e o novo Esquema I) são analisados com respeito a variação total e a ordem de convergência. Em particular, os esquemas são aplicados aos casos de convecção de escalares e problemas de Riemann para as equações não lineares de Burgers e Euler. A partir dos resultados numéricos, constata-se que os esquemas apresentam resultados bastantes interessantes em todos os casos investigados.*

Palavras Chaves: *esquemas upwind, variação total, leis de conservação, TVD.*

1 Introdução

O desenvolvimento de aproximações *upwind* de alta resolução limitadas para leis de conservação continua atraindo um grande número de pesquisadores, devido aos desafios (difusão numérica) que elas ainda oferecem (ver, por exemplo, o trabalho recente de Waterson [10]). O problema maior é que, por um lado, os esquemas *upwind* de primeira ordem convencionais, tais como FOU (*First Order Upwind*) [2], geram soluções numéricas dissipativas e, por outro lado, os esquemas clássicos de alta resolução, tais como diferenças centradas e QUICKEST [4], produzem soluções numéricas dispersivas que, na maioria das vezes, acarretam oscilações numéricas. Assim, o que se busca, em geral (ver [1, 10]), são aproximações *upwind* que combinem os méritos desses dois tipos de esquemas (alta precisão e estabilidade incondicional). Neste contexto, diferentes esquemas *upwind* de alta resolução limitados têm sido propostos nas últimas décadas, entretanto do ponto de vista da modelagem numérica não existe até o presente um método plenamente robusto, de alta ordem (≥ 2) e eficiente para a resolução de leis gerais de conservação. Portanto, a proposta desse trabalho é um passo nessa direção. Em particular, são investigadas a variação total e a ordem de convergência dos esquemas originais ADBQUICKEST [2], TOPUS [8] e o novo Esquema I [5] quando aplicados a leis de conservação.

2 Esquemas *Upwind* em DVN e TVD

Os esquemas ADBQUICKEST [2], TOPUS [8] e Esquema I [5], desenvolvidos no LCAD-ICMC-USP/São Carlos, foram derivados no contexto DVN (Diagrama de Variáveis Normalizadas) de Leonard [4] e voltados para satisfação da restrição TVD (*Total Variation Diminishing*) de Harten [3]. Os três esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I podem atingir segunda ou terceira ordem de precisão em regiões suaves e primeira ordem nas vizinhanças de descontinuidades. Para derivação dos mesmos, foram consideradas duas moléculas computacionais como ilustradas na Figura 1. Nesta figura, as posições dos nós D (*Downstream*), U (*Upstream*) e R (*Remote-upstream*) dependem do sinal da variável convectada ϕ numa face f .

Considerando os valores não-normalizados ϕ_D e ϕ_R da propriedade genérica ϕ nos pontos D e R , respectivamente, são definidas as variáveis normalizadas (VN) (Leonard [4]) por

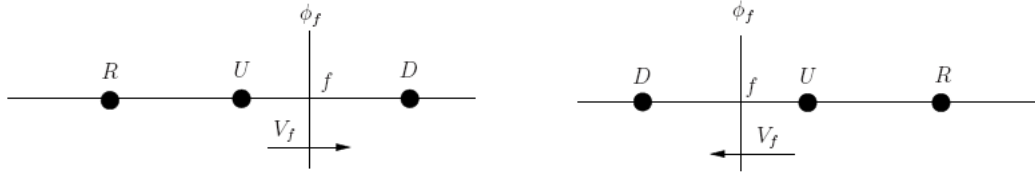


Figura 1: Moléculas computacionais mostrando as posições dos nós, com relação a face f e o sinal da velocidade de convecção nesta face.

$$\hat{\phi}_0 = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}. \quad (1)$$

A transformação (1) é um conceito importante para derivação de esquemas *upwind*, uma vez que qualquer esquema que utilize apenas os pontos D , R e U pode ser representado de forma funcional simplificada por $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U)$, pois $\hat{\phi}_D = 1$ e $\hat{\phi}_U = 0$. Essa relação é frequentemente representada no DVN de Leonard (ver os detalhes em [4]). Nesse contexto, Leonard afirma que qualquer esquema (para $\hat{\phi}_U \in [0, 1]$, em geral não linear), formulado em VN que passe pelos pontos $O(0,0)$, $P(1,1)$ e $Q(0.5,0.75)$ do DVN é de segunda ordem de precisão; e se ele também passar pelo ponto Q com inclinação 0.75 é de terceira ordem. Leonard recomenda também que para os valores de $\hat{\phi}_U \notin [0, 1]$, $\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U)$ deve ser aproximada pelo esquema FOU.

Outro conceito importante é a restrição TVD, introduzida por Harten [3]. Trata-se de uma ferramenta matemática que combina monotonicidade e alta ordem de precisão. Formalmente, considera-se uma sequência de aproximações discretas $\phi(t) = \phi_i(t)_{i \in \mathbf{Z}}$ e define-se a *Total Variation* (TV) por

$$TV(\phi(t)) = \sum_{i \in \mathbf{Z}} |\phi_{i+1}(t) - \phi_i(t)|. \quad (2)$$

Assim, para que um esquema tenha caráter TVD este deve satisfazer

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n), \quad \forall n. \quad (3)$$

Em resumo, os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I são descritos, respectivamente, como segue:

– O esquema ADBQUICKEST, proposto originalmente por Ferreira et. al [2], combina monotonicidade com alta precisão, enquanto assegura flexibilidade, uma vez que ele possui o número de Courant $\theta = \delta t / \delta x$ como parâmetro livre. Em VN ele é definido por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \\ (2 - \theta)\hat{\phi}_U & \text{se } 0 < \hat{\phi}_U < a \\ \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}(1 - |\theta|)(1 - \hat{\phi}_U) - \frac{1}{6}(1 - \theta^2)(1 - 2\hat{\phi}_U) & \text{se } a \leq \hat{\phi}_U \leq b, \\ 1 - \theta + \hat{\phi}_U & \text{se } b < \hat{\phi}_U < 1, \end{cases} \quad (4)$$

em que $a = \frac{2 - |\theta| + \theta^2}{7 - 6\theta - 3|\theta| + 2\theta^2}$ e $b = \frac{-4 + 6\theta - 3|\theta| + \theta}{-5 + 6\theta - 3|\theta| + 2\theta}$.

– O esquema TOPUS, proposto por Queiroz [8], se constitui parte de um polinômio de grau quatro determinado a partir das condições de Leonard. Em VN ele é dado por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \alpha\hat{\phi}_U^4 + (-2\alpha + 1)\hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{5\alpha - 10}{4}\right)\hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{-\alpha + 10}{4}\right)\hat{\phi}_U & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U \leq 1 \\ \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (5)$$

Para que a restrição TVD seja satisfeita $\alpha \in [0, 2]$ (ver [8]), em que os melhores resultados são obtidos para $\alpha = 2$.

- O novo Esquema I, em fase de desenvolvimento, está sendo derivado, para $\hat{\phi}_U \in [0, 1]$, como sendo parte de um polinômio de grau cinco definido por $\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) = \sum a_k \hat{\phi}_U^k$, $k = 0, \dots, 5$. Para $\hat{\phi}_U \notin [0, 1]$ está sendo considerado $\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) = \hat{\phi}_U$. Os coeficientes a_k são determinados impondo-se as condições de Leonard discutidas acima e $\hat{\phi}_f'(0) = 1$ e $\hat{\phi}_f'(1) = 1$. Assim, a relação funcional $\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U)$ em toda reta é diferencialmente contínua, que implica, segundo Lin e Chieng [6], em um melhor comportamento convergente em malhas grosseiras. Em VN, o esquema é dado por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -4\hat{\phi}_U^5 + 14\hat{\phi}_U^4 - 16\hat{\phi}_U^3 + 6\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U & \text{se } 0 \leq \hat{\phi}_U \leq 1 \\ \hat{\phi}_U & \text{se } \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (6)$$

3 Resultados Numéricos

Nesta seção, são apresentados os resultados numéricos obtidos com os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I para advecção de escalares e problemas de Riemann para equações de Burgers e Euler. Em particular, estimativas para a ordem de convergência p e as TV dos métodos numéricos são consideradas. As leis de conservação são definidas por

$$u_t + f(u)_x = 0,$$

em que u é a variável conservada e $f(u)$ o fluxo analítico. Três casos testes são analisados: (1) a equação de advecção linear em que $f(u) = u$; (2) a equação não linear de Burgers com fluxo exato $f(u) = \frac{1}{2}u^2$; e (3) as equações de Euler da dinâmica dos gases em que o vetor de variáveis conservadas é $u = (\rho, \rho v, E)^T$ e a função fluxo definida por $f(u) = (\rho v, \rho v^2 + P, v(E + P))^T$, sendo ρ , v , ρv , E e P a densidade, a velocidade, a quantidade de movimento, a energia total e a pressão, respectivamente.

Teste 1: Neste teste, são consideradas duas condições iniciais: *Caso a*), em que a equação de advecção linear, com $x \in [-1, 1]$, é suplementada com

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & -1/3 \leq x \leq 1/3, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

e *Caso b*), em que a equação de advecção linear, com $x \in [-\pi, \pi]$, é suplementada com $u_0(x) = \text{sen}(x)$. Em ambos os casos *Caso a*) e *Caso b*), as condições de contorno adotadas são Dirichlet homogêneas.

No *Caso a*), analisa-se a restrição TVD para os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I. Para isso, é calculada a TV a cada passo no tempo usando-se 100, 200 e 400 células computacionais, com $\theta = 0.5$ e $t_f = 4.0$ (tempo final de simulação). Na Figura 2 estão apresentadas as comparações entre a solução exata e as soluções numéricas obtidas com cada esquema e as TVs (a malha de 400 é desconsiderada, pois a TV numérica converge para TV exata com 200 células). Por essa figura, ve-se claramente que as aproximações são satisfatórias e que os esquemas satisfazem à restrição TVD, uma vez que os valores das TVs decrescem ou permanecem constantes, da mesma forma como ocorre com a TV exata ($TV = 4$). Em particular, observa-se, por essa mesma figura, que o Esquema I forneceu melhores resultados que o ADBQUICKEST e competitivos com os do TOPUS.

O *Caso b*) tem como propósito investigar a precisão dos esquemas em regiões suaves. Para tanto, são calculados o erro relativo E_h e a ordem de convergência p . Os resultados são gerados em malhas uniformes com 20, 40, 80 e 160 células computacionais, com $\theta = 0.5$ e $t_f = 1$. Os dados obtidos estão apresentados na Tabela 1, onde é possível constatar que o esquema ADBQUICKEST apresenta maior ordem de convergência.

Teste 2: Neste teste resolve-se o problema de Riemann para a equação de Burgers, definida em $[0, 2\pi]$, com $u(x, 0) = \text{sen}(x)$. As condições de contorno nesse teste são também Dirichlet homogêneas. A solução exata desse problema é dada por (ver [7])

$$u(x, t) = -2 \sum_n \frac{J_n(-nt)}{nt} \text{sen}(nx),$$

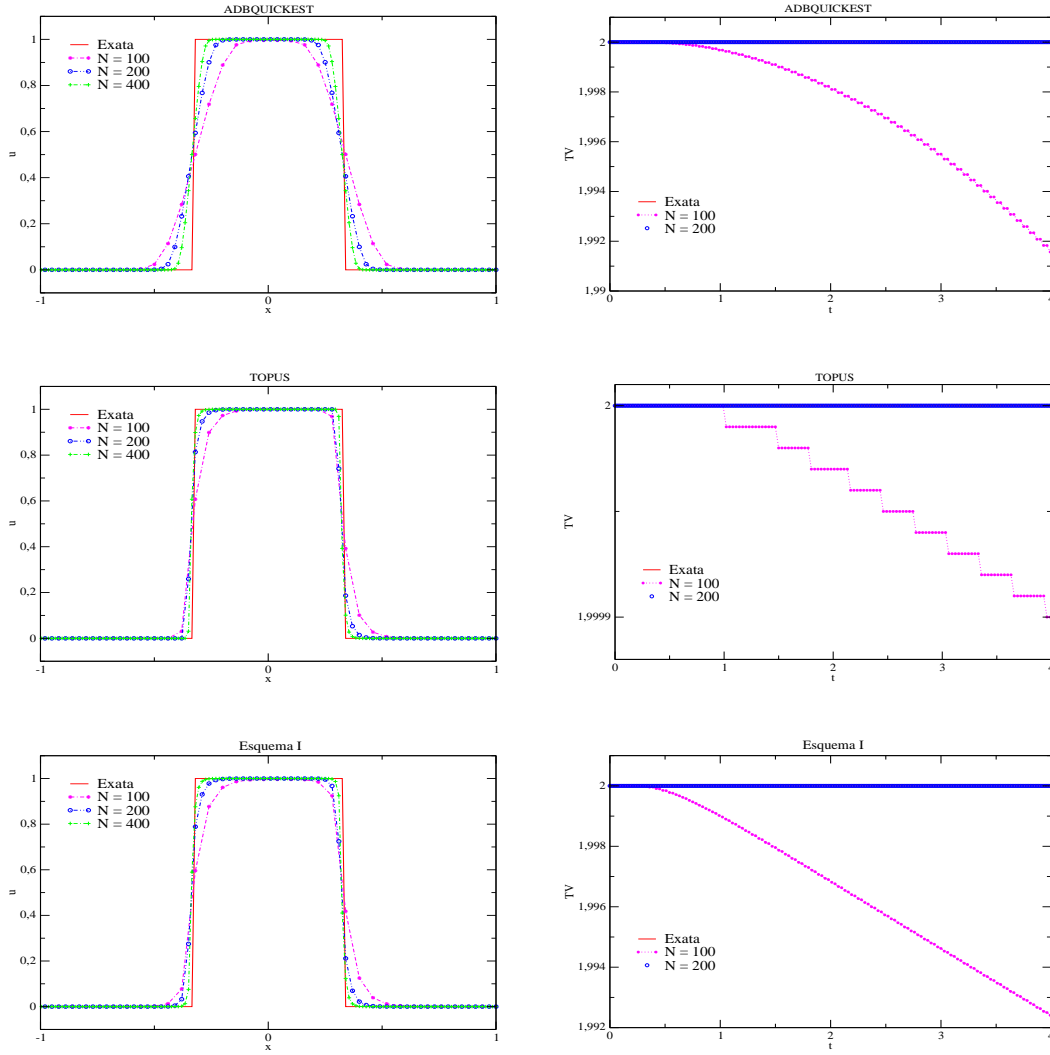


Figura 2: Comparações das soluções numéricas e exata (à esquerda) e as TVs exatas e numéricas (à direita) para a equação de advecção.

em que J_n é a função de Bessel. Para a simulação são considerados dois casos *Caso a)* e *Caso b)*, ambos com $\theta = 0.3$.

No *Caso a)*, a restrição TVD é investigada para os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I, usando-se 100, 200, 400 e 800 células computacionais e $t_f = 0.25$ (antes do choque). Na Figura 3 estão mostrados a distribuição do erro absoluto, em função de x (em escala logarítmica), entre a solução exata e a numérica obtida com o Esquema I na malha 400 e as TVs (a exata e as derivadas dos esquemas). Por essa figura, constata-se que um limitante superior para o erro é menor que 10^{-3} , o que implica boa concordância entre as soluções exata e calculada. Nota-se também que todos os esquemas são TVD, uma vez que ao se refinar a malha as TVs numéricas tendem à TV exata.

No *Caso b)*, objetiva-se estimar o erro relativo E_h e a ordem p usando-se cada um dos esquemas. Os resultados numéricos foram obtidos nas malhas 20, 40, 80 e 160 células computacionais e $t_f = 0.25$ (antes do choque) os quais estão apresentados na Tabela 2. Por essa tabela, constata-se, nesse caso não linear, que o esquema TOPUS apresenta melhor estimativa para p .

Teste 3: Este teste, conhecido como tubo de choque de Shu-Osher [9], é formulado pelas equações de Euler, para $x \in [-1, 3]$, e pela equação de estado $P = (\gamma - 1)(E - \frac{1}{2}\rho u^2)$ ($\gamma = 1.4$),

Esquemas	N	L_1 Erro	p	L_2 Erro	p	L_∞ Erro	p
ADBQUICKEST	20	0.2736 e-1	—	0.3182 e-1	—	0.5287 e-1	—
	40	0.7997 e-2	1.775	0.1121 e-1	1.505	0.2580 e-1	1.092
	80	0.2521 e-2	1.665	0.4532 e-2	1.306	0.1200 e-1	1.047
	160	0.7952 e-3	1.664	0.1821 e-2	1.315	0.6231 e-2	0.945
TOPUS	20	0.4347 e-1	—	0.4549 e-1	—	0.6070 e-1	—
	40	0.1427 e-1	1.606	0.1708 e-1	1.411	0.3099 e-1	0.969
	80	0.4651 e-2	1.617	0.6917 e-2	1.304	0.1821 e-1	0.766
	160	0.1482 e-2	1.649	0.2821 e-2	1.293	0.1134 e-1	0.683
Esquema I	20	0.5211 e-1	—	0.5434 e-1	—	0.7255 e-1	—
	40	0.1651 e-2	1.657	0.1981 e-1	1.455	0.3718 e-1	0.964
	80	0.5611 e-2	1.557	0.8244 e-2	1.264	0.2258 e-1	0.719
	160	0.1801 e-2	1.638	0.3452 e-2	1.255	0.1393 e-1	0.696

Tabela 1: Teste de convergência: erros nas normas L_1 , L_2 e L_∞ e estimativas para ordem de convergência.

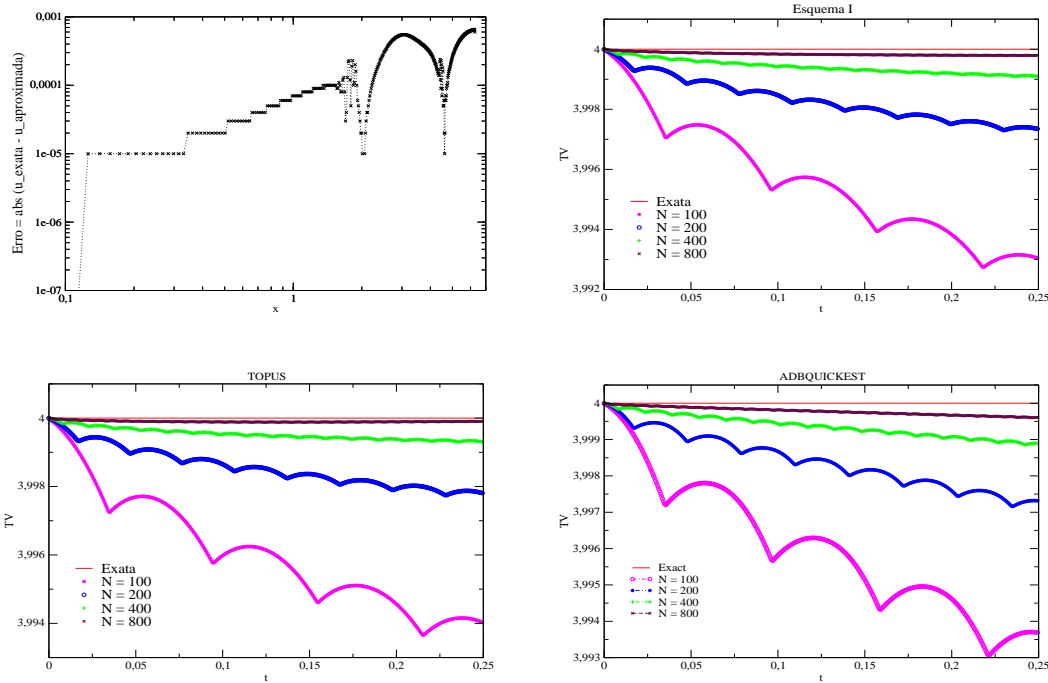


Figura 3: Distribuição do erro absoluto e as TVs exata e numéricas. A primeira figura à esquerda corresponde a ao cálculo com o Esquema I e as demais às TVs.

suplementadas com as condição inicial e de contorno dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{u}_0(x) = \begin{cases} (3.86, 2.63, 10.33)^T, & x < -0.8, \\ (1 + 0.2\text{sen}(5x), 0, 1)^T, & x \geq -0.8, \end{cases}$$

$$\mathbf{u}(-1, t) = \mathbf{u}_L(t) = (\rho_L(t), u_L(t), P_L(t))^T \quad \mathbf{u}(3, t) = \mathbf{u}_R(t) = (\rho_R(t), u_R(t), P_R(t))^T.$$

A solução de referência, nesse caso não linear, é gerada pelo esquema FOU usando-se 1600 células computacionais. As soluções aproximadas obtidas com os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I são geradas nas malhas 200, 400 e 800, com $\theta = 0.3$ e $t_f = 1$. Na Figura 4 estão apresentadas a solução de referência e as soluções numéricas na malha 800, assim como a TV gerada por cada esquema. Verifica-se neste caso que o esquema ADBQUICKEST apresenta os melhores resultados e os resultados com TOPUS e Esquema I mostraram-se semelhantes.

Esquemas	N	L_1 Erro	p	L_2 Erro	p	L_∞ Erro	p
ADBQUICKEST	20	0.5831 e-2	—	0.7117 e-2	—	0.1205 e-1	—
	40	0.2701 e-2	1.111	0.2928 e-2	1.281	0.4572 e-2	1.398
	80	0.1335 e-2	1.016	0.1446 e-2	1.017	0.2308 e-2	0.985
	160	0.6263 e-3	1.091	0.6895 e-3	1.069	0.1681 e-2	1.079
TOPUS	20	0.4710 e-2	—	0.6263 e-2	—	0.1189 e-1	—
	40	0.1632 e-2	1.538	0.2113 e-2	1.567	0.4231 e-2	1.491
	80	0.6556 e-3	1.316	0.7875 e-3	1.424	0.2006 e-2	1.076
	160	0.3666 e-3	0.838	0.4069 e-3	0.952	0.7536 e-3	1.412
Esquema I	20	0.5087 e-2	—	0.6858 e-2	—	0.1332 e-1	—
	40	0.1744 e-2	1.543	0.2381 e-2	1.526	0.5073 e-2	1.393
	80	0.7115 e-3	1.296	0.8800 e-3	1.436	0.2290 e-2	1.147
	160	0.3804 e-3	0.903	0.5240 e-3	1.053	0.8838 e-3	1.373

Tabela 2: Teste de convergência: erros nas normas L_1 , L_2 e L_∞ e estimativas para a ordem de convergência.

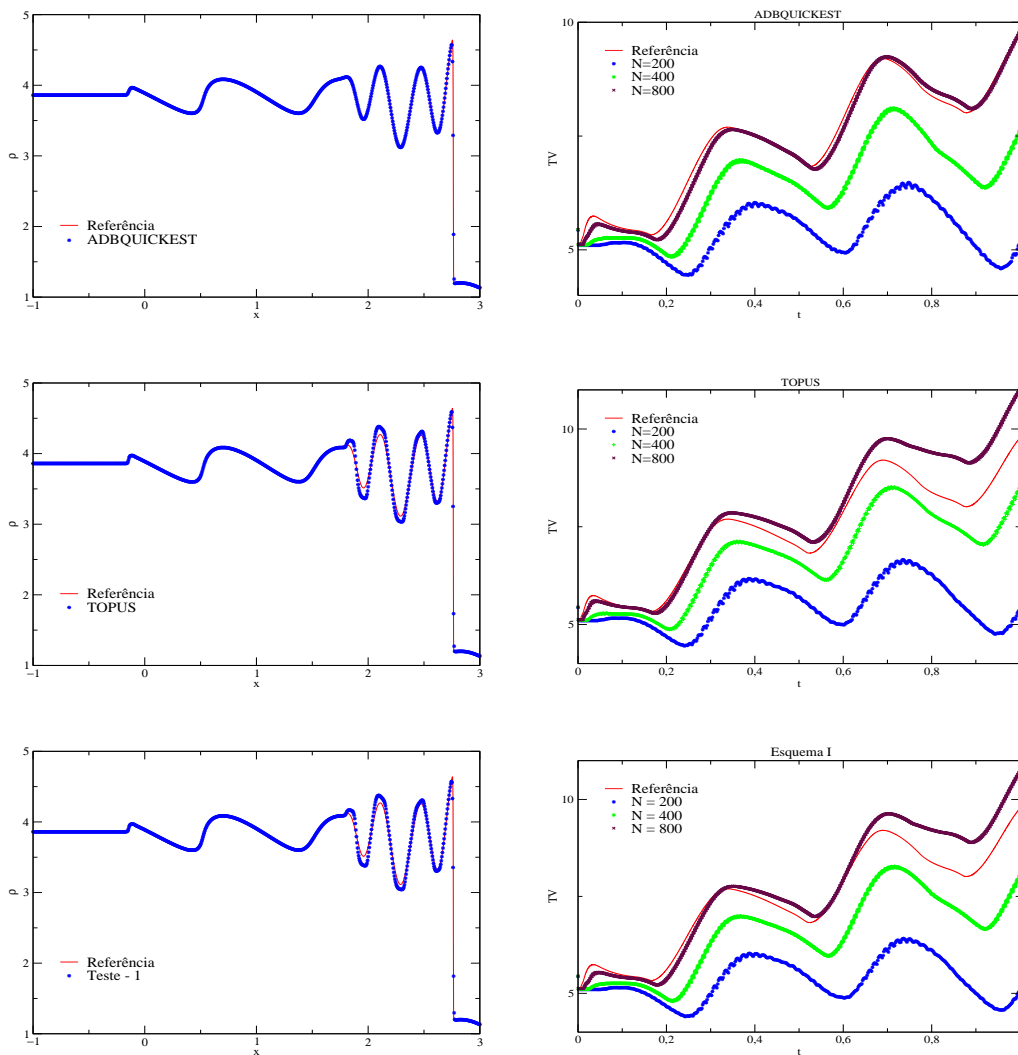


Figura 4: Comparações das soluções numéricas e de referência (à esquerda) e as TVs exatas e numéricas (à direita) para as equações de Euler.

4 Conclusões

Neste trabalho, foram apresentados três esquemas *upwind* de alta resolução, desenvolvidos no LCAD-ICMC-USP (ADBQUICKEST, TOPUS e Esquema I), para a solução numérica de leis de conservação. A partir dos resultados obtidos, ficou claro o bom desempenho destes esquemas. Para o futuro, estão previstas melhorias e aplicações do Esquema I com o objetivo de simular problemas complexos de escoamentos de fluidos, tais como escoamentos com superfícies livres 2D e 3D. Objetiva-se, também, análise das propriedades de simetria e dos parâmetros livres dos esquemas ADBQUICKEST e TOPUS.

5 Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro concedido pela FAPESP (2008/01258-3 e 2004/16064-9) e CNPq (300479/2008-5).

Referências

- [1] V.G. Ferreira, R.A.B. Queiroz, R.G. Cuenca, F.A. Kurokawa, C.M. Oishi, G.A.B. Lima and S. McKee. An upwind differencing scheme for conservation laws and related fluid dynamics problems, *Journal of Computational Physics*, Submetido.
- [2] V.G. Ferreira, F.A. Kurokawa, R.A.B. Queiroz, M.K. Kaibara, C.M. Oishi, J.A. Cuminato, A. Castelo, M.F. Tomé, and S. McKee. Assessment of a high-order finite difference upwind scheme for the simulation of convection-diffusion problems, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 60 (2009) 1-26.
- [3] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, *Journal of Computational Physics*, 49 (1983) 357-393.
- [4] B.P. Leonard. Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8 (1988) 1291-1318.
- [5] G.A.B. Lima, “Desenvolvimento, análise e implementação de esquemas upwind polinomiais de alta resolução com aplicação em escoamentos incompressíveis não-estacionários com superfícies livres”, Qualificação de Mestrado, ICMC-USP, 2009.
- [6] H. Lin and C.C. Chieng. Characteristic-based flux limiters of an essentially third-order flux-splitting method for hyperbolic conservation laws, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 13 (1991) 287-307.
- [7] G.W. Platzmant, “An exact integral of complet spectral equation for unsteady one-dimensional flow”, Manuscript received, The University of Chicago, 1964.
- [8] R.A.B. Queiroz, “Desenvolvimento e teste de esquemas upwind de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres”, Dissertação de Mestrado, ICMC-USP, 2009.
- [9] C.W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes *Journal of Computational Physics*, 83 (1989) 32-78.
- [10] N.P. Waterson. A symmetric formulation for flux-limited convection schemes, *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 56 (2008) 1575-1581.