

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIA EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
COMPUTACIONAL

Pablo César Rojas Oviedo

Desenvolvimento e simulação computacional de esquemas *upwind* baseados
em curvas de Bézier e interpolação de Hermite

Juiz de Fora

2024

Pablo César Rojas Oviedo

Desenvolvimento e simulação computacional de esquemas *upwind* baseados
em curvas de Bézier e interpolação de Hermite

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional. Área de concentração: Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Coorientador: Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha

Juiz de Fora

2024

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Oviedo, Pablo César Rojas.

Desenvolvimento e simulação computacional de esquemas upwind baseados em curvas de Bézier e interpolação de Hermite / Pablo César Rojas Oviedo. -- 2024.

108 f. : il.

Orientador: Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Coorientador: Bernardo Martins Rocha

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2024.

1. Upwind. 2. Bézier. 3. Hermite. 4. Limitador de fluxo. 5. Variáveis normalizadas. I. de Queiroz, Rafael Alves Bonfim, orient. II. Rocha, Bernardo Martins, coorient. III. Título.

Pablo Cesar Rojas Oviedo

Desenvolvimento e simulação computacional de esquemas upwind baseados em curvas de Bézier e interpolação de Hermite

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Modelagem Computacional. Área de concentração: Modelagem Computacional.

Aprovada em 26 de setembro de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Rafael Alves Bonfim de Queiroz - Orientador

Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Dr. Bernardo Martins Rocha - Coorientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Iury Higor Aguiar da Igreja

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Rodrigo Weber dos Santos

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Fernando Luiz Pio dos Santos

Prof.^a Dr. Laís Corrêa

Universidade Federal da Grande Dourados

Juiz de Fora, 27/09/2024.



Documento assinado eletronicamente por **Bernardo Martins Rocha, Professor(a)**, em 30/09/2024, às 08:44, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rafael Alves Bonfim de Queiroz, Usuário Externo**, em 01/10/2024, às 16:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Iury Higor Aguiar da Igreja, Professor(a)**, em 01/10/2024, às 17:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Laís Corrêa, Usuário Externo**, em 01/10/2024, às 19:49, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Fernando Luiz Pio dos Santos, Usuário Externo**, em 02/10/2024, às 17:44, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Weber dos Santos, Professor(a)**, em 30/10/2024, às 14:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **2008328** e o código CRC **59CBefd3**.

AGRADECIMENTOS

- À CAPES e FAPEMIG pelo suporte financeiro através da bolsa de doutorado.
- Ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da UFJF por todo apoio.
- Aos docentes Rafael e Bernardo pela orientação deste projeto de pesquisa.
- Aos membros da banca examinadora pela participação, sugestões e críticas.

RESUMO

Esta tese apresenta novas famílias de esquemas *upwind* para a aproximação dos termos convectivos de equações diferenciais parciais no contexto de diferenças finitas e volumes finitos. As famílias de esquemas denominadas SOBUS (*Second Order Bézier Upwind Scheme*), PUBICK (*Piecewise Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics*) e CUBICK (*Cubic Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics*) são propostas com base em curvas de Bézier quadráticas e cúbicas, respectivamente, enquanto a família de esquemas FDHPUS (*Fifth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme*) é baseada na interpolação de Hermite. Os esquemas PUBICK, CUBICK e FDHPUS satisfazem critérios de estabilidade e restrições para garantir uma solução limitada, tais como TVD (*Total Variation Diminishing*), CBC (*Convection Boundedness Criterion*) e BAIR (*Boundedness, Accuracy and Interpolative Reasonability*). Foi analisada a convergência das soluções numéricas ao serem adotados os esquemas propostos para resolver uma série de problemas 1D e 2D. Os resultados numéricos desses esquemas foram comparados com os de outros esquemas estabelecidos na literatura, mostrando boa concordância com soluções exatas e dados numéricos. Os resultados desta tese sugerem que os esquemas *upwind* baseados em curvas de Bézier e interpolação de Hermite são alternativas promissoras para resolver problemas dominados pela convecção.

Palavra-chave: *Upwind*. Curvas de Bézier. Interpolação de Hermite. Limitador de fluxo. Variáveis normalizadas. Dinâmica de fluidos. OpenFOAM.

ABSTRACT

This thesis presents new families of upwind schemes for approximating convective terms in partial differential equations within finite differences and finite volumes. The families of schemes termed SOBUS (*Second Order Bézier Upwind Scheme*), PUBICK (Piecewise Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics) and CUBICK (Cubic Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics) are proposed based on quadratic and cubic Bézier curves, respectively. In contrast, the FDHPUS family (Fifth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme) is based on Hermite interpolation. The PUBICK, CUBICK, and FDHPUS schemes satisfy stability criteria and constraints to ensure a bounded solution, such as TVD (Total Variation Diminishing), CBC (Convection Boundedness Criterion), and BAIR (Boundedness, Accuracy, and Interpolative Reasonability). The convergence of the numerical solutions was analyzed when the PUBICK, CUBICK, and FDHPUS schemes were adopted to solve a series of 1D and 2D problems. The numerical results of these schemes were compared with those of other established schemes in the literature, showing good agreement with exact solutions and numerical data. The results of this thesis suggest that *upwind* schemes based on Bézier curves and Hermite interpolation are promising alternatives for solving convection-dominated problems.

Keywords: Upwind. Bézier. Hermite. Flux limiter. Normalized variables. Fluid dynamics. OpenFOAM.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Posições D , R e U em relação à face computacional f e a velocidade v_f do fluxo.	23
Figura 2 – Esquemas convectivos de primeira ordem (FOU), de segunda ordem (SOU e CDS) e terceira ordem (QUICK) no NVD.	24
Figura 3 – Região do critério CBC em variáveis normalizadas.	25
Figura 4 – Região TVD geral (cinza) para o limitador de fluxo.	26
Figura 5 – Região do critério BAIR (verde) e região de critério TVD (cinza) em variáveis normalizadas.	27
Figura 6 – Região BAIR (verde) para o limitador de fluxo.	28
Figura 7 – Região TVD de segunda ordem (verde escuro com linhas cinza).	28
Figura 8 – Representação gráfica dos polinômios de Bernstein de graus 2 e 3.	33
Figura 9 – Curvas cúbicas de Bézier com 4 pontos de controle.	34
Figura 10 – O esquema SOBUS (linha sólida azul).	36
Figura 11 – Limitador de fluxo para o esquema SOBUS.	36
Figura 12 – O esquema PUBICK para $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ (linha sólida vermelha) está representado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (laranja).	40
Figura 13 – Limitador de fluxo do esquema PUBICK para $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ na região TVD de segunda ordem [1].	41
Figura 14 – Esquema CUBICK para $(a; b) = (0,5; 0,75)$ (linha sólida vermelha) está localizado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (azul).	44
Figura 15 – Limitador de fluxo para o esquema CUBICK $(a; b) = (0,5; 0,75)$ na região TVD de segunda ordem [1].	45
Figura 16 – Esquema CUBICK para $(a; b) = (0,25; 0,45)$ (linha sólida vermelha) está localizado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (azul).	47
Figura 17 – Limitador de fluxo para o esquema CUBICK $(a; b) = (0,25; 0,45)$ na região TVD de segunda ordem [1].	47
Figura 18 – Esquema FDHPUS para o valor $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$	50
Figura 19 – Limitador de fluxo para o esquema FDHPUS com $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$	51
Figura 20 – Representação de algumas esquemas polinomiais <i>upwind</i> derivados do esquema FDHPUS no NVD.	52
Figura 21 – Limitador de fluxo de alguns esquemas polinomiais <i>upwind</i> derivados do esquema FDHPUS.	53
Figura 22 – Célula computacional mostrando o ponto P de discretização dos termos convectivos, seus vizinhos, as faces envolvidas f e g na aproximação e a variável convectada ϕ sendo transportada com velocidade v_f na direção y	54

Figura 23 – Resultados das simulações do caso 1 (condição inicial suave) da equação de advecção linear usando $N = 320$ para os esquemas numéricos CUBICK, PUBICK, SOBUS e FDHPUS.	61
Figura 24 – Resultados das simulações do caso 1 (condição inicial suave) da equação de advecção linear usando $N = 320$ para os esquemas numéricos HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.	62
Figura 25 – Resultados das simulações do caso 2 da equação de advecção linear empregando os esquemas numéricos CUBICK, PUBICK, SOBUS e FDHPUS.	64
Figura 26 – Resultados das simulações do caso 2 da equação de advecção linear empregando os esquemas numéricos HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.	65
Figura 27 – Análise da restrição TVD para os esquemas CUBICK e PUBICK.	67
Figura 28 – Análise da restrição TVD para os esquemas PUBICK, SOBUS e FDHPUS.	68
Figura 29 – Análise da restrição TVD para os esquemas HPUS, ADBQUICKEST e TOPUS.	69
Figura 30 – Análise da restrição TVD para os esquemas SMART e FOU.	70
Figura 31 – Comparação dos esquemas <i>upwind</i> em relação à solução exata da equação da camada limite: (a) solução completa, (b) ampliação na região entre 0,90 e 0,97, e (c) ampliação na região entre 0,965 e 0,985.	73
Figura 32 – Equação de Burgers viscosa: comparação dos erros obtidos empregando os esquemas <i>upwind</i> ao longo do tempo usando a malha $N = 256$ e tempo final $t_f = 4$	74
Figura 33 – Comparação entre as soluções exata e numéricas da equação de Burgers inviscida obtidas empregando os esquemas <i>upwind</i>	77
Figura 34 – Comparação entre as soluções exata e numéricas da equação de Buckley-Leverett obtidas empregando os esquemas <i>upwind</i>	78
Figura 35 – Soluções numéricas do tubo de choque de Sod obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 50$	80
Figura 36 – Soluções numéricas do tubo de choque de Sod obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$	81
Figura 37 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$	82
Figura 38 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 300$	83
Figura 39 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher modificado obtidas com diferentes limitadores de fluxo.	85
Figura 40 – Caso 1: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$	86
Figura 41 – Caso 1: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 400$	87

Figura 42 – Caso 2: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$	88
Figura 43 – Caso 2: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 400$	89
Figura 44 – Representação do problema da cavidade com dimensão $d = 1$ m e componente x da velocidade $U_x = 1$ m/s.	90
Figura 45 – Comparação entre as soluções numéricas obtidas usando os limitadores TOPUS e CUBICK e as soluções de referência [2] em (a) $Re = 1000$ e (b) $Re = 10000$ para as componentes de velocidade U_x em $x = 0,5$ e U_y em $y = 0,5$, respectivamente.	91
Figura 46 – Gráfico de contorno da magnitude da velocidade (à esquerda) e linhas de corrente (à direita) do campo de velocidade para o caso com $Re = 10000$ utilizando os esquemas CUBICK e TOPUS.	92
Figura 47 – Esquemas polinomiais <i>upwind</i> que podem ser derivados do esquema EDHPUS.	101
Figura 48 – Limitador de fluxo de esquemas polinomiais <i>upwind</i> derivados do esquema EDHPUS.	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Condições para construir o esquema FDHPUS no NVD [3].	48
Tabela 2 – Valores obtidos através de diferenças divididas utilizando os dados da Tabela 1.	49
Tabela 3 – Esquemas polinomiais <i>upwind</i> que podem ser derivados do esquema FDHPUS (Equação (5.3)) a partir de escolhas dos parâmetros θ_1 e θ_2	51
Tabela 4 – Equação de advecção linear: estudo de convergência no domínio $\Omega = [-1; 1]$ com condição inicial suave utilizando os esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS, SOBUS, HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.	63
Tabela 5 – Equação da camada limite: estudo da convergência dos esquemas <i>upwind</i>	72
Tabela 6 – Equação de Burgers viscosa: estudo de convergência dos esquemas considerando a solução numérica.	75
Tabela 7 – Equação de Burgers viscosa: tempo computacional obtido ao empregar os esquemas <i>upwind</i> utilizando as malhas $N = 64, 128$ e 256	76
Tabela 8 – Erro $\ E\ _2$ entre as soluções numéricas e os dados de referência [2] para cada componente de velocidade: U_x em $x = 0,5$ ao longo do eixo y e U_y em $y = 0,5$ ao longo do eixo x	90
Tabela 9 – Tempos totais de execução (em segundos) para a solução numérica do problema da cavidade usando os esquemas TOPUS e CUBICK.	91
Tabela 10 – Comparação dos esquemas numéricos para diferentes problemas 1D.	94
Tabela 11 – Condições para construir o esquema EDHPUS no NVD [3], onde $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5 são parâmetros livres.	98
Tabela 12 – Cálculo de $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$ usando diferenças divididas com dados da Tabela 11.	99
Tabela 13 – Esquemas polinomiais <i>upwind</i> que podem ser derivados do esquema EDHPUS (equação (A.2)) escolhendo os parâmetros $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5	101

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADBQUICKEST	<i>ADaptative Bounded Quadratic Upstream for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms</i>
BAIR	<i>Boundedness, Accuracy and Interpolative Reasonability</i>
CBC	<i>Convection Boundedness Criterion</i>
CDS	<i>Central Differentiation Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CUBICK	<i>Cubic Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics</i>
CUBISTA	<i>Convergent and Universally Bound Interpolation Scheme for the Treatment of Advection</i>
EDPs	<i>Equações Diferenciais Parciais</i>
EDHPUS	<i>Eighth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme</i>
EPUS	<i>Eight-degree Polynomial Upwind Scheme</i>
FOU	<i>First-Order Upwind</i>
FDHPUS	<i>Fifth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme</i>
FDPUS-C1	<i>Five-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class</i>
HAWT	<i>Horizontal Axis Wind Turbines</i>
HPUS	<i>Hermite Polynomial Upwind Scheme</i>
MINMOD	<i>MINimum MODulus</i>
NVD	<i>Normalised Variable Diagram</i>
NV	<i>Normalised Variable</i>
NVF	<i>Normalised Variable Formulation</i>
PUBICK	<i>Piecewise Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics</i>
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics</i>
SDPUS-C1	<i>Six-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class</i>
SMART	<i>Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport</i>
SMARTER	<i>SMART Efficiently Revised</i>
SOBUS	<i>Second Order Bézier Upwind Scheme</i>
SOU	<i>Second-Order Upwind</i>
TOPUS	<i>Third-Order Polynomial Upwind Scheme</i>
TV	<i>Total Variation</i>
TVD	<i>Total Variation Diminishing</i>
VONOS	<i>Variable Order Non-Oscillatory Scheme</i>
WACEB	<i>Weighted Average Coefficient Assuring Boundedness</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

ϕ	Variável genérica não normalizada
$\hat{\phi}$	Variável genérica normalizada
D	Posição <i>Downstream</i> no estencil computacional
R	Posição <i>Remote-Upstream</i> no estencil computacional
U	Posição <i>Upstream</i> no estencil computacional
f	Face da célula computacional
t	Tempo
t_f	Tempo final
ψ	Função limitadora de fluxo
1D	Unidimensional
2D	Bidimensional
ν	Coefficiente de viscosidade
cfl	Número de Courant
Re	Número de Reynolds
Fr	Número de Froude
N	Número de células da malha 1D
\mathbf{U}	Velocidade do fluido
U_x	Componente x da velocidade \mathbf{U}
U_y	Componente y da velocidade \mathbf{U}
$]a; b[$	Intervalo aberto de a até b
$[a; b]$	Intervalo fechado de a até b
$(a; b)$	Ponto no plano cartesiano
δt	Espaçamento temporal
δx	Espaçamento espacial

SUMÁRIO

1	Introdução	15
1.1	Motivação	15
1.2	Revisão da Literatura	15
1.3	Objetivos	16
1.4	Organização da Tese	17
2	Modelagem Matemática	18
2.1	Equação de Advecção Linear	18
2.2	Equação de Convecção-Difusão	18
2.2.1	Equação da Camada Limite	19
2.2.2	Equação de Burgers Viscosa	19
2.2.3	Equação de Burgers Inviscida	20
2.2.4	Equação de Buckley-Leverett	20
2.3	Equações de Euler	21
2.4	Equações Instantâneas de Navier-Stokes	21
3	Conceitos Fundamentais dos Esquemas <i>Upwind</i>	23
3.1	Caracterização dos Esquemas <i>Upwind</i>	23
3.1.1	Formulação de Variável Normalizada	23
3.1.2	Diagrama de Variável Normalizada	23
3.1.3	Critério CBC	24
3.1.4	Critério TVD	24
3.1.5	Critério BAIR	26
3.2	Esquemas Numéricos Clássicos de Alta Resolução	27
3.2.1	TOPUS	27
3.2.2	SMART	29
3.2.3	HPUS	29
3.2.4	SMARTER	29
3.2.5	FDPUS-C1	29
3.2.6	SDPUS-C1	30
3.2.7	EPUS	30
3.2.8	ADBQUICKEST	30
3.2.9	MINMOD	31
3.2.10	Superbee	31
3.3	Estimativas de Erros	31
4	Esquemas <i>Upwind</i> Baseados nas Curvas de Bézier	32
4.1	Polinômios de Bernstein	32
4.2	Curvas de Bézier	33
4.3	Esquema Bézier de grau 2 (SOBUS)	34

4.4	Esquema Bézier de grau 2 por partes (PUBICK)	37
4.5	Esquema Bézier de grau 3 (CUBICK)	42
4.5.1	Esquema CUBICK para $a = 0,25$ e $b = 0,45$	46
5	Esquema <i>Upwind</i> Baseado na Interpolação de Hermite	48
5.1	Esquema FDHPUS	48
6	Discretização de Termos Convectivos com Esquemas <i>Upwind</i>	54
6.1	Esquema SOBUS	55
6.2	Esquema PUBICK	56
6.3	Esquema CUBICK	57
6.4	Esquema FDHPUS	58
7	Resultados Numéricos 1D e 2D	59
7.1	Problema 1D de Advecção Linear	59
7.1.1	Condição Inicial Suave	59
7.1.2	Condição Inicial na Forma de um “W”	60
7.1.3	Análise da Restrição TVD	66
7.2	Problemas 1D de Convecção-Difusão	71
7.2.1	Equação da Camada Limite	71
7.2.2	Equação de Burgers Viscosa	71
7.2.3	Equação de Burgers Inviscida	76
7.2.4	Equação de Buckley-Leverett	76
7.3	Problemas 1D de Riemann para as Equações de Euler	77
7.3.1	Tubo de Choque de Sod	79
7.3.2	Tubo de Choque de Shu-Osher	79
7.3.3	Tubo de Choque de Shu-Osher Modificado	79
7.3.4	Tubos de Choque de Toro	84
7.4	Escoamento 2D na Cavidade Quadrada	87
7.4.1	Desempenho Computacional	90
7.5	Discussão	92
8	Conclusões	95
8.1	Contribuições	96
8.2	Limitações	96
A	APÊNDICE A - Esquema EDHPUS	98
	REFERÊNCIAS	103

1 Introdução

1.1 Motivação

Muitos problemas de dinâmica dos fluidos em aplicações tecnológicas são caracterizados por fortes fenômenos de convecção, especialmente aqueles em regimes turbulentos e envolvendo escoamentos multifásicos. A obtenção de soluções numéricas representativas para essa classe de problemas é um desafio que exige um método numérico eficiente, robusto e preciso [4]. Por isso, esse tema tem se destacado como uma das principais áreas de interesse na comunidade científica moderna em CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Assim, o desenvolvimento de métodos numéricos para a aproximação dos termos convectivos em EDPs (Equações Diferenciais Parciais) é necessário. Na resolução numérica dessas equações, a precisão dos resultados é significativamente afetada pelo esquema numérico utilizado para tratar a convecção [5, 6].

A metodologia de CFD é utilizada, por exemplo, na energia eólica para simular as características aerodinâmicas de um HAWT (*Horizontal Axis Wind Turbine*) de grande escala, levando em consideração os efeitos de acoplamento do cisalhamento do vento. Os HAWTs, como conversores de energia eólica, são máquinas rotativas de grande porte que operam em um ambiente de fluxo constante [7].

A CFD também tem sido cada vez mais utilizada na pesquisa biomédica para estudar a hemodinâmica cardiovascular por meio de ferramentas de simulação que permitem prever o comportamento do fluxo sanguíneo circulatório no corpo humano. A simulação CFD, baseada em reconstruções luminiais 3D, pode ser usada para analisar campos de fluxo locais e perfis de fluxo resultantes de mudanças na geometria da artéria coronária, sendo capaz de identificar fatores de risco para o desenvolvimento e progressão da doença arterial coronariana [8].

1.2 Revisão da Literatura

Esquemas *upwind* de alta ordem são técnicas numéricas especializadas para aproximar termos de convecção em EDPs [5, 9, 10]. A ideia básica por trás dessas estratégias é utilizar um esquema numérico com a maior precisão possível em regiões suaves e adicionar dissipação numérica controlada em regiões de altos gradientes. Os principais objetivos desses esquemas são manter a estabilidade da solução numérica, garantir a convergência e resolver descontinuidades ou choques sem oscilações numéricas ou, em casos extremos, com oscilações limitadas [4].

Para que um esquema numérico atinja todos os objetivos mencionados acima, uma abordagem comum tem sido combinar as restrições do NVD (*Normalised Variable Diagram*) fornecidas por Leonard [3] ou limitadores de fluxo (Sweby [1] e Waterson [9])

com as restrições TVD (*Total Variation Diminishing*) de Harten [11] e CBC (*Convection Boundedness Criterion*) de Gaskell e Lau [12]. A restrição TVD visa alcançar uma variação limitada de propriedades físicas ao longo do tempo e impor autoajuste de acordo com gradientes locais. O critério CBC visa produzir uma solução limitada.

Muitas tentativas foram feitas para derivar um esquema *upwind* que atenda a todos os requisitos mencionados acima. Exemplos de alguns esquemas *upwind* populares propostos na literatura incluem: SMART (*Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport*) de Gaskell e Lau [12], WACEB (*Weighted Average Coefficient Assuring Boundedness*) de Song *et al.* [13], VONOS (*Variable Order Non-Oscillatory Scheme*) de Varonos e Bergeles [14], CUBISTA (*Convergent and Universally Bound Interpolation Scheme for the Treatment of Advection*) de Alves *et al.* [10], TOPUS (*Third-Order Polynomial Upwind Scheme*) de Queiroz [15], HPUS (*Hermite Polynomial Upwind Scheme*) de Gao *et al.* [16], SMARTER (*SMART Efficiently Revised*) de Choi [17], FDPUS-C1 (*Five-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class*) de Lima [18], SDPUS-C1 (*Six-Degree Polynomial Upwind Scheme of C1 Class*) de Lima [19], e EPUS (*Eight-degree Polynomial Upwind Scheme*) de Corrêa [20].

Diferentemente dos esquemas *upwind* de alta ordem mencionados anteriormente, o esquema TOPUS é um esquema *upwind* polinomial de grau 4, cujos coeficientes são determinados a partir das condições de Leonard [3] no NVD. Além disso, uma condição livre (α) foi usada para determinar o TOPUS. O parâmetro $\alpha \in [-2, 2]$ garante que o TOPUS satisfaça o critério CBC. Entretanto, este esquema possui duas limitações em sua formulação, a saber: (1) somente para α igual a 2 é garantido que o TOPUS satisfaça as restrições TVD, e (2) o TOPUS não satisfaz as condições BAIR (*Boundedness, Accuracy, and Interpolative Reasonability*) [21, 22] para $\alpha > 0$.

Dentro deste contexto, a principal motivação deste trabalho é desenvolver, analisar e implementar novos esquemas *upwind* que satisfaçam as condições de Leonard [3] no NVD, as restrições TVD [11], e as condições CBC [12] e BAIR [21, 22]. Para tanto, pretende-se demonstrar que é possível construir tais esquemas utilizando curvas de Bézier e interpolação de Hermite.

1.3 Objetivos

O objetivo principal desta tese é apresentar novas formulações para a aproximação numérica do termo convectivo de EDPs no contexto de diferenças finitas e volumes finitos. Em particular, são propostas formulações de alta ordem baseadas em curvas de Bézier e na interpolação de Hermite para a aproximação dos termos convectivos. Pretende-se avaliar numericamente cada formulação apresentada em problemas clássicos e *benchmark* da literatura.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Desenvolver uma nova família de esquemas *upwind* baseados em curvas de Bézier;
- Desenvolver uma nova família de esquemas *upwind* baseados na interpolação de Hermite;
- Implementar e avaliar computacionalmente os novos esquemas *upwind* propostos;
- Comparar as soluções dos esquemas propostos com as de outros esquemas *upwind* clássicos e com soluções analíticas.

1.4 Organização da Tese

A estrutura desta tese é a seguinte. No Capítulo 2 são apresentados os modelos matemáticos abordados neste trabalho, e o Capítulo 3 descreve os fundamentos teóricos dos esquemas. No Capítulo 4, é apresentada uma descrição dos esquemas baseados em curvas de Bézier. No Capítulo 5, é apresentada uma descrição dos esquemas baseados na interpolação de Hermite. No Capítulo 6, é apresentada a discretização dos esquemas propostos. No Capítulo 7, são apresentados os resultados de simulações numéricas realizadas em domínios unidimensional (1D) e bidimensional (2D), obtidos pelos esquemas apresentados. No Capítulo 8, são apresentadas as considerações finais, contribuições e limitações do trabalho.

2 Modelagem Matemática

Neste capítulo, apresentam-se as EDPs que serão usadas para validar e comprovar a estabilidade e convergência dos esquemas *upwind* propostos nesta tese.

2.1 Equação de Advecção Linear

A equação de advecção linear 1D, que governa o transporte de quantidades escalares, é descrita pela seguinte EDP:

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

sendo que a é a velocidade constante, $u(x; t)$ é a variável de interesse definida no domínio espacial $\Omega = [x_L; x_R]$, com $t \in [0; t_f]$ e t_f é o tempo final de simulação. A seguinte condição inicial é considerada:

$$u(x; 0) = u_0(x), \quad x \in [x_L; x_R], \quad (2.2)$$

no qual $u_0(x)$ é uma função que descreve a condição inicial, e x_R e x_L são as extremidades direita e esquerda do domínio 1D, respectivamente. Condições de contorno periódicas nas partes esquerda $x = x_L$ ou direita $x = x_R$ do contorno são consideradas para a solução numérica [16]. A conhecida solução exata [23] para este problema é dada por:

$$u(x; t) = u_0(x - at). \quad (2.3)$$

2.2 Equação de Convecção-Difusão

A equação de convecção-difusão é uma EDP relevante para muitos problemas em CFD [24, 25]. Esta equação pode formar choques, mesmo para casos com condições iniciais suaves. Ela é resolvida para o intervalo de tempo $t \in [0; t_f]$ no domínio $\Omega = [x_L; x_R]$, nos quais x_L e x_R são os pontos de fronteira à esquerda e à direita, respectivamente.

A equação de convecção-difusão 1D é expressa por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (f(u)) = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (2.4)$$

com condição inicial definida por:

$$u(x; 0) = u_0(x), \quad x \in [x_L; x_R], \quad (2.5)$$

e sujeito às condições de contorno dadas por:

$$u(x_L; t) = u_L, \quad u(x_R; t) = u_R \quad (u_L \text{ e } u_R \text{ são constantes}), \quad (2.6)$$

sendo que $f(u)$ é a função de fluxo, ν é o coeficiente de viscosidade (constante), e u_L e u_R são os valores prescritos para $u(x; t)$ em x_L e x_R , respectivamente.

2.2.1 Equação da Camada Limite

A equação da camada limite é obtida considerando a equação (2.4) com $\nu > 0$ e a seguinte função de fluxo:

$$f(u) = au, \quad (2.7)$$

sendo que a é uma constante. Em particular, considera-se esta equação com $a = 1$ e coeficiente de viscosidade $\nu = 0,01$ ($Re = \frac{1}{\nu} = 100$), com a seguinte condição inicial:

$$u(x; 0) = 0, \quad (2.8)$$

e condições de contorno dadas por:

$$u(0; t) = 0 \quad \text{e} \quad u(1; t) = 1. \quad (2.9)$$

Para este caso, a equação de convecção-difusão 1D apresenta a seguinte solução analítica em estado estacionário [26]:

$$u(x) = \frac{\left(1 - \exp\left(\frac{x}{\nu}\right)\right)}{\left(1 - \exp\left(\frac{1}{\nu}\right)\right)}, \quad x \in [0, 1]. \quad (2.10)$$

2.2.2 Equação de Burgers Viscosa

A equação de Burgers 1D com viscosidade ν pode ser obtida da equação (2.4) considerando $\nu > 0$ e adotando:

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2. \quad (2.11)$$

No Capítulo 7, investiga-se um caso da equação viscosa de Burgers que apresenta solução analítica visando realizar o estudo de convergência numérica dos esquemas. O problema considerado é dado para $x \in \Omega = [0; 1]$ com as seguintes condições de contorno definidas por:

$$u(0; t) = u(1; t) = 0, \quad (2.12)$$

e uma condição inicial suave dada por:

$$u(x; 0) = \text{sen}(\pi x), \quad (2.13)$$

tal que a solução exata da série de Fourier [27] é dada por:

$$u(x; t) = 2\pi\nu \frac{\sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp(-n^2\pi^2\nu t) n \text{sen}(n\pi x)}{a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp(-n^2\pi^2\nu t) \cos(n\pi x)}, \quad (2.14)$$

sendo que os coeficientes são:

$$a_0 = \int_0^1 \exp\{-(2\pi\nu)^{-1}[1 - \cos(\pi x)]\} dx, \quad (2.15)$$

$$a_n = 2 \int_0^1 \exp\{-(2\pi\nu)^{-1}[1 - \cos(\pi x)]\} \cos(n\pi x) dx, \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.16)$$

2.2.3 Equação de Burgers Inviscida

A equação de Burgers inviscida, ou seja, sem viscosidade, pode ser obtida da equação (2.4) considerando $\nu = 0$ e adotando:

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2, \quad (2.17)$$

obtendo assim a equação de Burgers inviscida:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2}u^2 \right) = 0. \quad (2.18)$$

Considera-se a equação de Burgers sem viscosidade com solução analítica. O problema considerado é dado para $x \in \Omega = [0; 2\pi]$ com as seguintes condições de contorno:

$$u(0; t) = u(2\pi; t) = 0, \quad (2.19)$$

e uma condição inicial:

$$u(x; 0) = \text{sen}(x). \quad (2.20)$$

Desta forma, a solução exata de acordo com Platzman [28] é dada por:

$$u(x, t) = -2 \sum_n^{\infty} \frac{J_n(-nt)}{nt} \text{sen}(nx), \quad (2.21)$$

onde J_n é a função de Bessel de grau n definida por:

$$J_n(z) = \frac{z}{n\pi} \int_0^{\pi} \cos(n\theta - z \text{sen } \theta) \cos \theta d\theta. \quad (2.22)$$

2.2.4 Equação de Buckley-Leverett

A equação de Buckley-Leverett é utilizada para simular escoamentos multifásicos comumente aplicado pela indústria em problemas relacionados a recuperação de petróleo. A descoberta e extração de petróleo é um processo altamente complexo, no qual a modelagem matemática e a simulação numérica desempenham um papel crucial. Normalmente, ao perfurar um poço de petróleo, a pressão inicial é consideravelmente alta, o que facilita a extração do petróleo. No entanto, a velocidade do fluxo de petróleo diminui naturalmente com o tempo. Uma estratégia comum para manter um fluxo constante é a injeção de água, que ajuda a empurrar o petróleo em direção ao poço produtor (ver [29]).

A equação de Buckley-Leverett é obtida considerando a equação (2.4) com $\nu = 0$ e a seguinte função de fluxo:

$$f(u) = \frac{u^2}{u^2 + C(1-u)^2}, \quad (2.23)$$

sendo que C descreve a relação entre as viscosidades do fluido. Em particular, considera-se esta equação com $C = 1$ e $x \in \Omega = [0; 1]$, com a seguinte condição inicial:

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1, & x = 0, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.24)$$

Assim, temos que a solução analítica [30] é dada por:

$$u(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\sqrt{\left(\frac{-2x}{t} + \sqrt{\frac{4x}{t} + 1} - 1 \right) + 1} \right), & \frac{x}{t} < \frac{1}{2}(1 + \sqrt{2}), \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.25)$$

2.3 Equações de Euler

O sistema de EDPs de Euler constitui um sistema hiperbólico de leis de conservação que modelam, por exemplo, o problema do tubo de choque [31]. Estas equações tomam a forma vetorial dadas por:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad (2.26)$$

$$\mathbf{U}(x; 0) = \mathbf{U}_0(x), \quad x \in [0; x_R], \quad (2.27)$$

$$\mathbf{U}(0; t) = \mathbf{U}_L(t), \quad \mathbf{U}(x_R; t) = \mathbf{U}_R(t), \quad (2.28)$$

nos quais \mathbf{U} , \mathbf{F} e e são expressas por:

$$\begin{cases} \mathbf{U} = [\rho; \rho u; e]^T, \\ \mathbf{F} = [\rho u; \rho u^2 + p; u(e + p)]^T, \\ e = \frac{p}{(\gamma-1)} + \frac{1}{2}\rho u^2. \end{cases} \quad (2.29)$$

Em (2.28), $\mathbf{U}_L(t)$ e $\mathbf{U}_R(t)$ são, respectivamente, as condições de contorno em $x = x_L = 0$ e $x = x_R$ (ver detalhes na referência [31]). Em (2.29), as variáveis ρ , e e p são a densidade, a energia total e a pressão, respectivamente; e a constante $\gamma = 1,4$ (o gás é considerado ideal).

2.4 Equações Instantâneas de Navier-Stokes

No caso em que o fluido é considerado um meio homogêneo incompressível, a massa específica $\rho(\mathbf{x}; t) = \rho_0$ das partículas não varia durante o seu movimento, e as propriedades de transporte são constantes. As equações matemáticas das leis físicas de conservação, consideradas para a simulação de escoamentos em regime laminar neste trabalho, são as equações instantâneas de Navier-Stokes e continuidade, que são fundamentais na descrição do comportamento dos fluidos em movimento. Essas equações adimensionais são dadas por:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.31)$$

nos quais u_i é a i -ésima componente do campo de velocidade, p é a pressão cinemática (pressão dividida pela massa específica), $Re = LU_0/\nu$ e $Fr = U_0/\sqrt{L|\mathbf{g}|}$ são, respectivamente,

os números de Reynolds e Froude, e g_i é a i -ésima componente da aceleração gravitacional. O parâmetro ν é o coeficiente de viscosidade cinemática molecular (constante) do fluido, dado por $\nu = \mu/\rho$ (onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido), e U_0 e L são as escalas de velocidade e comprimento característicos, respectivamente. Para resolver o sistema formado por (2.30) e (2.31), são necessárias condições de contorno e iniciais apropriadas, dependendo do problema de dinâmica de fluidos a ser resolvido.

3 Conceitos Fundamentais dos Esquemas *Upwind*

Este capítulo apresenta alguns conceitos fundamentais relacionados aos esquemas *upwind* para o tratamento numérico do termo convectivo em EDPs, no contexto das metodologias de diferenças finitas e volumes finitos, incluindo a formulação de variável normalizada [3], o diagrama de variável normalizada [3] e os critérios CBC [12], TVD [11] e BAIR [21, 22]. Além disso, alguns esquemas *upwind* clássicos da literatura são apresentados, para posterior comparação com os esquemas desenvolvidos. Por fim, discutem-se as estimativas de erros $|E|_1$, $|E|_2$ e $|E|_\infty$ utilizadas nos resultados numéricos.

3.1 Caracterização dos Esquemas *Upwind*

3.1.1 Formulação de Variável Normalizada

A NVF (*Normalised Variable Formulation*) foi proposta por Leonard [3] para obter esquemas convectivos capazes de resolver gradientes elevados e simultaneamente manter a estabilidade das soluções numéricas. A seguir, relembra-se brevemente a NVF para definir e discutir os esquemas numéricos propostos neste trabalho.

Considere as posições D (*Downstream*), R (*Remote-upstream*) e U (*Upstream*) em relação a uma face computacional f do estêncil computacional, conforme ilustrado na Figura 1. Dentro desse contexto, a variável ϕ escrita em NV (*Normalised Variable*) é dada por:

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}, \quad (3.1)$$

nos quais ϕ_D e ϕ_R são os valores não normalizados da quantidade ϕ nos pontos D e R , respectivamente. A vantagem da NV é o fato de que o valor da interface $\hat{\phi}_f$ depende apenas de $\hat{\phi}_U$, pois $\hat{\phi}_D = 1$ e $\hat{\phi}_R = 0$.

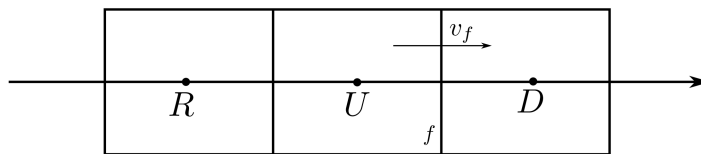


Figura 1 – Posições D , R e U em relação à face computacional f e a velocidade v_f do fluxo.

3.1.2 Diagrama de Variável Normalizada

Outra ferramenta valiosa neste contexto é o NVD, que foi desenvolvido por Leonard [3], para representar a relação entre as variáveis normalizadas $\hat{\phi}_f$ e $\hat{\phi}_U$. Por exemplo, na Figura 2 os esquemas FOU (*First-Order Upwind*) [32], SOU (*Second-Order Upwind*) [33], CDS (*Central Differentiation Scheme*) [34] e QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*) [3] são representados no NVD.

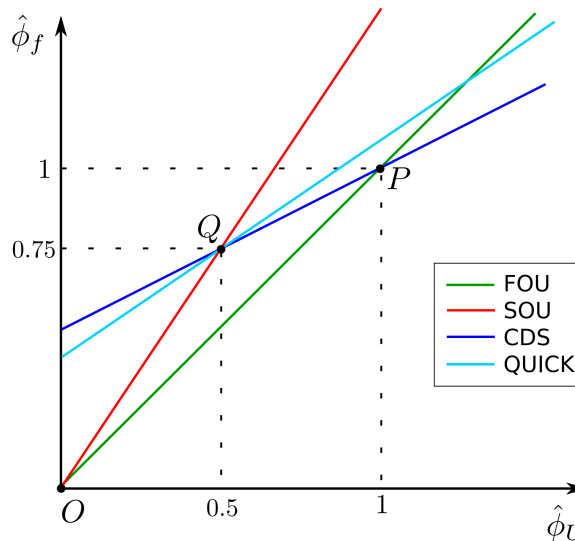


Figura 2 – Esquemas convectivos de primeira ordem (FOU), de segunda ordem (SOU e CDS) e terceira ordem (QUICK) no NVD.

De acordo com Leonard [3] qualquer esquema numérico, em geral não linear, que é escrito na abordagem NV que passa pelos pontos $O(0; 0)$, $P(1; 1)$, e $Q(0,5; 0,75)$ do NVD (ver Figura 2) atinge a segunda ordem de precisão. Além disso, se passar pelo ponto Q com inclinação de 0,75, caracteriza-se como um esquema de terceira ordem de precisão. É aconselhável [3] que para valores de $\hat{\phi}_U$ menores que 0 ou maiores que 1, deve-se usar o esquema *upwind* de primeira ordem (FOU), ou seja, $\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U$.

3.1.3 Critério CBC

Outro critério utilizado para caracterizar os esquemas numéricos é o critério conhecido como CBC, o qual foi proposto por Gaskell e Lau [12] e que descreve os requisitos para que o esquema forneça soluções limitadas. A Figura 3 ilustra a região CBC na abordagem de NV.

O critério CBC pode ser escrito matematicamente em NV pelas seguintes condições:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_f \in [\hat{\phi}_U; 1], & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.2)$$

3.1.4 Critério TVD

Outro critério importante para a estabilidade convectiva é o TVD proposto por Harten [11], que pode garantir que a solução numérica do esquema convectivo seja livre de oscilações espúrias e convergente.

A TV (*Total Variation*) de uma solução numérica $\{\phi_i^n\}$ é definida por:

$$TV(\phi^n) = \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n|, \quad (3.3)$$

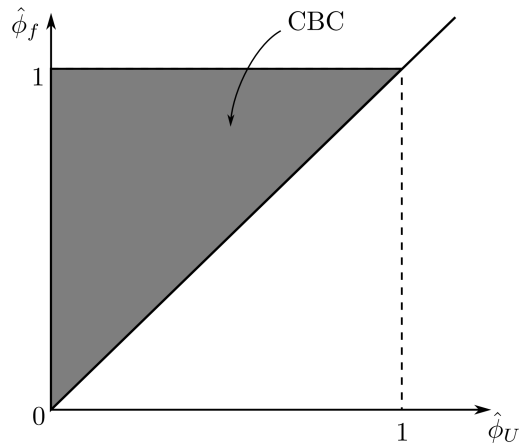


Figura 3 – Região do critério CBC em variáveis normalizadas.

em que n denota o nível de tempo e i refere-se à célula computacional onde uma aproximação para ϕ é calculada. Um esquema numérico é dito TVD se ele satisfaz o seguinte:

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n), \quad (3.4)$$

nos quais n e $n + 1$ referem-se a intervalos de tempo consecutivos. Observe que a restrição TVD foi convertida por Sweby [1] em um conjunto de restrições como segue:

$$\begin{cases} 0 \leq \psi(r) \leq \min(2r, 2), & \text{para } r > 0, \\ \psi(r) = 0, & \text{para } r \leq 0, \end{cases} \quad (3.5)$$

sendo que $\psi(r)$ é o limitador de fluxo que controla a difusividade, e r é usado para detectar um choque local dado pela razão de gradientes consecutivos:

$$r = \frac{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_g}{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_f}, \quad (3.6)$$

que, para malhas uniformes, pode ser reescrita como:

$$r = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_U}, \quad (3.7)$$

e, na abordagem NV é expresso como:

$$r = \frac{\hat{\phi}_U}{1 - \hat{\phi}_U}. \quad (3.8)$$

A partir dessas equações, as restrições TVD podem ser reescritas na formulação NV como sendo:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_f \in [\hat{\phi}_U; 2\hat{\phi}_U] & \text{e } \hat{\phi}_f \leq 1, & \text{para } \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.9)$$

Depois que o esquema convectivo é apresentado na abordagem NV, pode-se derivar seu limitador de fluxo associado reescrevendo o esquema original da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}\psi(r)(1 - \hat{\phi}_U). \quad (3.10)$$

A Figura 4 mostra a região do critério TVD, isto é, os limitadores de fluxo $\psi(r)$ que atendem a este critério devem estar compreendidos no interior desta região.

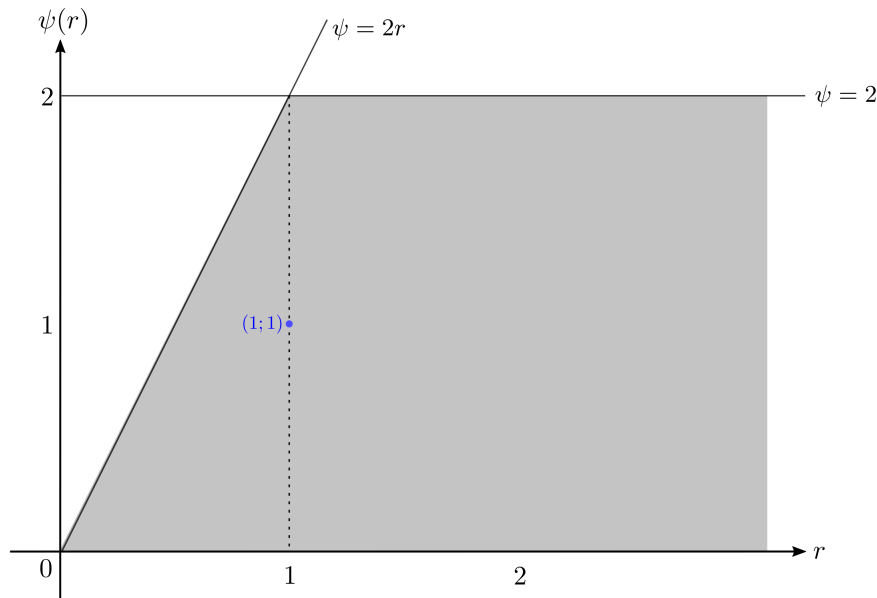


Figura 4 – Região TVD geral (cinza) para o limitador de fluxo.

3.1.5 Critério BAIR

Embora o critério CBC seja altamente indicativo de esquemas com soluções limitadas, a literatura especializada [21, 22, 35] indica que o critério CBC é apenas uma condição suficiente para garantir a limitação de esquemas convectivos. Wei *et al.* [22] e Hou *et al.* [21] propuseram um CBC melhorado, denominado BAIR, para superar essa limitação. Assim, a condição BAIR é uma condição necessária e suficiente para garantir a limitação e, pelo menos, a precisão de segunda ordem dos esquemas convectivos [36]. O critério BAIR pode ser escrito como:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_f \in \left[\frac{3}{2}\hat{\phi}_U; \frac{1}{2}(\hat{\phi}_U + 1) \right], & \text{para } 0 < \hat{\phi}_U < \frac{1}{2}, \\ \hat{\phi}_f \in \left[\frac{1}{2}(\hat{\phi}_U + 1); \frac{3}{2}\hat{\phi}_U \right] & \text{e } \hat{\phi}_f \leq 1, \quad \text{para } \frac{1}{2} \leq \hat{\phi}_U < 1, \\ \hat{\phi}_f = 0, & \text{para } \hat{\phi}_U = 0, \\ \hat{\phi}_f = 1, & \text{para } \hat{\phi}_U = 1, \\ \hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U, & \text{para } \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.11)$$

A Figura 5 ilustra a região do critério BAIR, isto é, os métodos que atendem a este critério devem estar compreendidos no interior desta região.

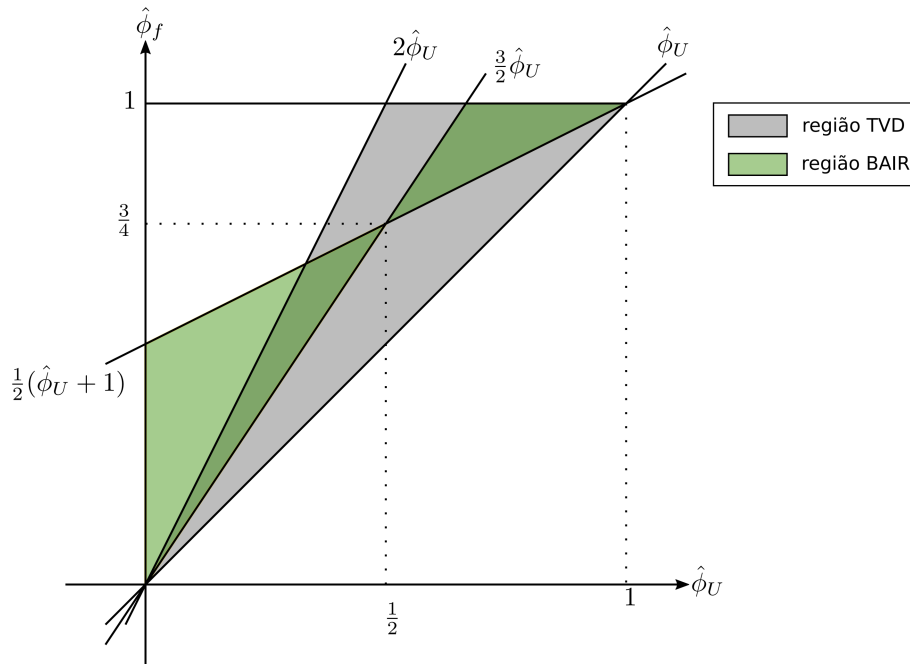


Figura 5 – Região do critério BAIR (verde) e região de critério TVD (cinza) em variáveis normalizadas.

A restrição BAIR pode ser expressa em um conjunto de restrições para o limitador de fluxo usando a equação (3.10) e as restrições (3.11) da seguinte forma:

$$\begin{cases} r \leq \psi(r) \leq 1, & \text{para } 0 < r < 1, \\ 1 \leq \psi(r) \leq \min(r, 2), & \text{para } 1 \leq r, \\ \psi(r) = 0, & \text{para } r \leq 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

A Figura 6 ilustra a região do critério BAIR para o limitador de fluxo.

Encontrando a interseção entre as regiões TVD (Figura 4) e BAIR (Figura 6) para o limitador de fluxo, obtém-se a região verde com linhas cinzas mostrada na Figura 7. A região obtida é chamada de região TVD de segunda ordem [1].

3.2 Esquemas Numéricos Clássicos de Alta Resolução

Nesta seção, apresentam-se alguns esquemas numéricos de alta ordem amplamente discutidos na literatura, como: SMART [12], TOPUS [15], HPUS [16], SMARTER [17], FDPUS-C1 [18], SDPUS-C1 [19], EPUS [20], ADBQUICKEST [37], MINMOD [38] e Superbee [39].

3.2.1 TOPUS

O esquema TOPUS foi desenvolvido por Queiroz [15]. É definido em NV por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \alpha \hat{\phi}_U^4 + (-2\alpha + 1) \hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{5\alpha-10}{4}\right) \hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{-\alpha+10}{4}\right) \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.13)$$

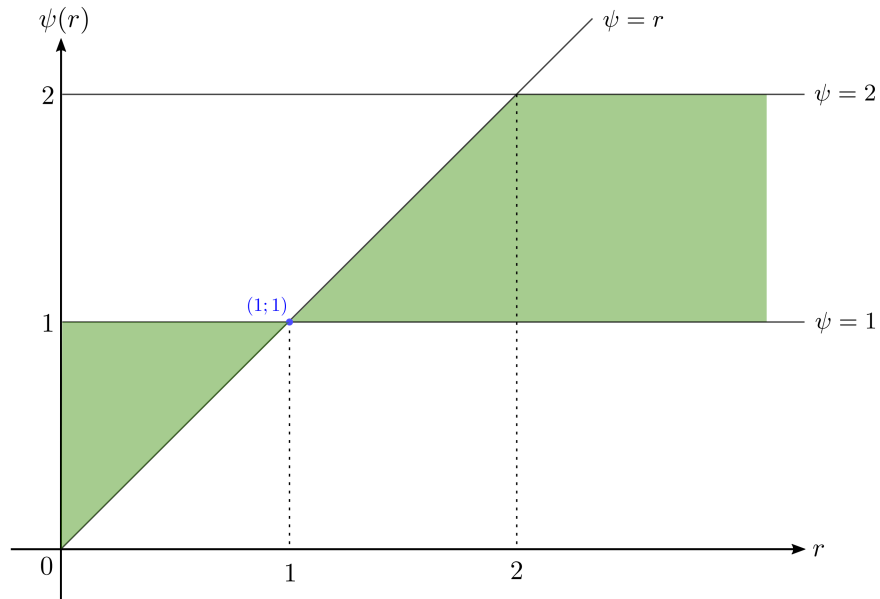


Figura 6 – Região BAIR (verde) para o limitador de fluxo.

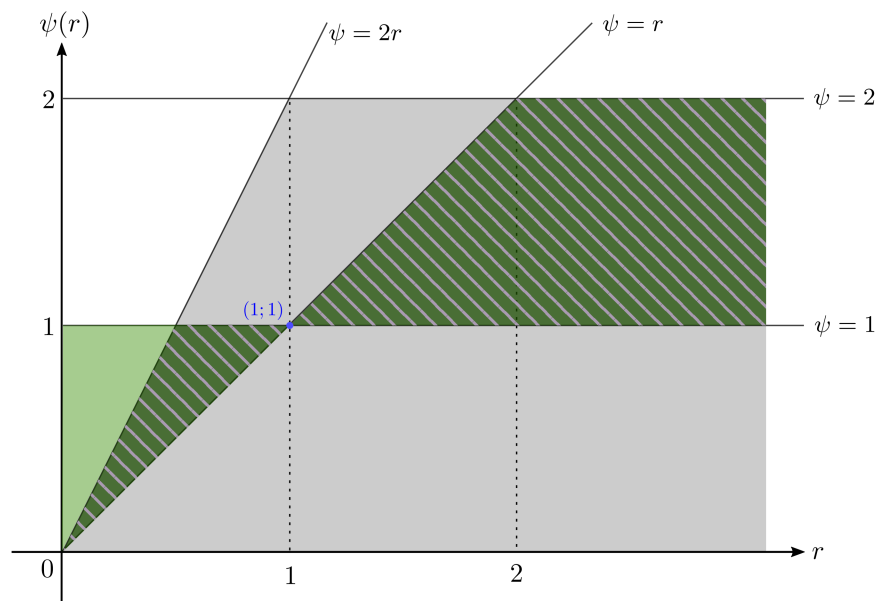


Figura 7 – Região TVD de segunda ordem (verde escuro com linhas cinza).

Para $\alpha \in [-2; 2]$, o esquema TOPUS está totalmente contido na região CBC. Para $\alpha = 2$, o esquema TOPUS é TVD.

A formulação do TOPUS no contexto de limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{0,5(|r| + r) [(-0,5\alpha + 1)r^2 + (\alpha + 4)r + (-0,5\alpha + 3)]}{(1 + |r|)^3} \right\}. \quad (3.14)$$

3.2.2 SMART

O esquema SMART foi desenvolvido por Gaskell e Lau [12], que em NV, é definido da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 3\hat{\phi}_U, & 0 \leq \hat{\phi}_U < \frac{1}{6}, \\ \frac{3}{4}\hat{\phi}_U + \frac{3}{8}, & \frac{1}{6} \leq \hat{\phi}_U \leq \frac{5}{6}, \\ 1, & \frac{5}{6} < \hat{\phi}_U \leq 1, \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.15)$$

A formulação em limitador de fluxo do SMART [40] é dada por:

$$\psi(r) = \max \{0; \min(4r; 0,75 + 0,25r; 2)\}. \quad (3.16)$$

3.2.3 HPUS

O esquema HPUS foi desenvolvido por Gao *et al.* [16]. Sua definição em NV é expressa por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U (-4\hat{\phi}_U^4 + 10\hat{\phi}_U^3 - 8\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U + 2), & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.17)$$

A formulação em limitador de fluxo do HPUS é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{(|r| + r)(r^3 + r^2 + 5r + 1)}{(1 + |r|)^4} \right\}. \quad (3.18)$$

3.2.4 SMARTER

O esquema SMARTER foi desenvolvido por Shin e Choi [17]. Sua formulação em NV é expressa por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \hat{\phi}_U^3 - 2,5\hat{\phi}_U^2 + 2,5\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.19)$$

Sua formulação de limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{0,5(|r| + r)(r + 3)}{(1 + |r|)^2} \right\}. \quad (3.20)$$

3.2.5 FDPUS-C1

O esquema FDPUS-C1 foi proposto por Lima [18]. O esquema é definido em NV por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -4\hat{\phi}_U^5 + 14\hat{\phi}_U^4 - 16\hat{\phi}_U^3 + 6\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.21)$$

O limitador de fluxo do esquema FDPUS-C1 é dado por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{0,5(|r| + r)(4r^2 + 12r)}{(1 + |r|)^4} \right\}. \quad (3.22)$$

3.2.6 SDPUS-C1

O esquema SDPUS-C1 foi proposto por Lima *et al.* [19]. É definido em NV por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (-24 + 4\gamma)\hat{\phi}_U^6 + (68 - 12\gamma)\hat{\phi}_U^5 + (-64 + 13\gamma)\hat{\phi}_U^4 + (20 - 6\gamma)\hat{\phi}_U^3 + \gamma\hat{\phi}_U^2 + \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.23)$$

Para $\gamma \in [4; 12]$, o esquema está contido na região TVD. Segundo Lima *et al.* [19], o esquema obteve melhores resultados para $\gamma = 12$. Sua formulação de limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{0,5(|r| + r) [(-8 + 2\gamma)r^3 + (40 - 4\gamma)r^2 + 2\gamma r]}{(1 + |r|)^5} \right\}. \quad (3.24)$$

3.2.7 EPUS

O esquema EPUS (*Eight-degree Polynomial Upwind Scheme*) foi proposto por Corrêa [20]. O esquema é definido em variáveis normalizadas por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -4(\lambda - 24)\hat{\phi}_U^8 + 16(\lambda - 23)\hat{\phi}_U^7 + (528 - 25\lambda)\hat{\phi}_U^6 + (19\lambda - 336)\hat{\phi}_U^5 \\ \quad + (80 - 7\lambda)\hat{\phi}_U^4 + \lambda\hat{\phi}_U^3 + \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (3.25)$$

Para $\lambda \in [16; 95]$, o esquema está contido na região TVD. Sua formulação de limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \frac{0,5(|r| + r) [(2\lambda - 32)r^4 + (160 - 4\lambda)r^3 + 2\lambda r^2]}{(1 + |r|)^7} \right\}. \quad (3.26)$$

3.2.8 ADBQUICKEST

O esquema ADBQUICKEST (*ADaptative Bounded Quadratic Upstream for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms*) foi proposto por Ferreira *et al.* [37]. O esquema é definido em NV por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (2 - |\theta|)\hat{\phi}_U, & 0 \leq \hat{\phi}_U < a, \\ \hat{\phi}_U + \frac{1}{2}(1 - |\theta|)(1 - \hat{\phi}_U) - \frac{1}{6}(1 - \theta^2)(1 - 2\hat{\phi}_U), & a \leq \hat{\phi}_U \leq b, \\ 1 - |\theta| + |\theta|\hat{\phi}_U, & b < \hat{\phi}_U \leq 1, \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases} \quad (3.27)$$

sendo que θ é o número de Courant; e os parâmetros a e b são:

$$a = \frac{2 - 3|\theta| + \theta^2}{7 - 9|\theta| + 2\theta^2}, \quad b = \frac{-4 + 3|\theta| + \theta^2}{-5 + 3|\theta| + 2\theta^2}. \quad (3.28)$$

Sua formulação de limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \max \left\{ 0; \min \left[2r; \frac{2 + \theta^2 - 3|\theta| + (1 - \theta^2)r}{3 - 3|\theta|}; 2 \right] \right\}. \quad (3.29)$$

3.2.9 MINMOD

O esquema MINMOD (*MINimum MODulus*) [38] é definido em NV da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \frac{3}{2}\hat{\phi}_U, & 0 \leq \hat{\phi}_U < \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}\hat{\phi}_U + \frac{1}{2}, & \frac{1}{2} \leq \hat{\phi}_U \leq 1, \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.30)$$

A formulação em limitador de fluxo desse esquema é dada por:

$$\psi(r) = \max \{0; \min (r; 1)\}. \quad (3.31)$$

3.2.10 Superbee

O esquema Superbee [39] é definido em NV da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2\hat{\phi}_U, & 0 \leq \hat{\phi}_U < \frac{1}{3}, \\ \frac{1}{2}(1 + \hat{\phi}_U), & \frac{1}{3} \leq \hat{\phi}_U < \frac{1}{2}, \\ \frac{3}{2}\hat{\phi}_U, & \frac{1}{2} \leq \hat{\phi}_U < \frac{2}{3}, \\ 1, & \frac{2}{3} \leq \hat{\phi}_U \leq 1, \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (3.32)$$

A formulação em limitador de fluxo desse esquema é dada por:

$$\psi(r) = \max \{0; \min (2r; 1); \min (r; 2)\}. \quad (3.33)$$

3.3 Estimativas de Erros

Nesta seção, são calculados os erros relativos entre as soluções numéricas e exatas em relação às normas L_1 , L_2 e L_∞ . Essas medidas de erros são calculadas nos estudos numéricos do Capítulo 7. A seguir, essas medidas são apresentadas nas seguintes equações:

$$\|E\|_1 = \frac{\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}}|}{\sum_{i=1}^N |\phi_{i,\text{exata}}|}, \quad (3.34)$$

$$\|E\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}})^2}{\sum_{i=1}^N (\phi_{i,\text{exata}})^2}}, \quad (3.35)$$

$$\|E\|_\infty = \frac{\max_{1 \leq i \leq n} |\phi_{i,\text{exata}} - \phi_{i,\text{numérica}}|}{\max_{1 \leq i \leq n} |\phi_{i,\text{exata}}|}, \quad (3.36)$$

nos quais $\phi_{i,\text{exata}}$ e $\phi_{i,\text{numérica}}$ são as soluções exata e numérica no nó i da malha computacional.

4 Esquemas *Upwind* Baseados nas Curvas de Bézier

A curva de Bézier foi desenvolvida independentemente pelo engenheiro da Renault, Pierre Bézier, em 1962, para auxiliar no projeto e na fabricação de automóveis assistidos por computador. Antes disso, em 1959, o engenheiro Paul de Casteljaou, da Citroën, desenvolveu um algoritmo eficiente para calculá-las [41], que ainda é usado até hoje. No entanto, como Pierre Bézier foi o primeiro a publicar um artigo sobre o assunto, essas curvas ficaram conhecidas como curvas de Bézier.

Devido às suas inúmeras propriedades, as curvas de Bézier são utilizadas em praticamente todos os sistemas e dispositivos de produção gráfica digital para a modelagem de curvas suaves. Por exemplo, elas são empregadas no design gráfico, na produção de videogames, e nos formatos de tipografia digital PostScript, TrueType e OpenType [42].

Neste capítulo, apresenta-se o desenvolvimento de novos esquemas do tipo *upwind*, denominados SOBUS, PUBICK e CUBICK. O esquema SOBUS é desenvolvido a partir das curvas quadráticas de Bézier, satisfazendo as condições de Leonard [3], as restrições CBC e a condição BAIR. Os esquemas PUBICK e CUBICK são desenvolvidos a partir das curvas de Bézier quadrática e cúbica, respectivamente, e satisfazem as condições de Leonard [3], as restrições TVD, CBC e a condição BAIR. Os resultados relacionados ao esquema CUBICK foram publicados em [43], enquanto alguns resultados do esquema PUBICK foram publicados em [44]. A seguir, alguns conceitos fundamentais são revisados para posterior apresentação dos esquemas.

4.1 Polinômios de Bernstein

Uma base para polinômios de grau n ou inferior, diferente da base canônica $\{1, t, \dots, t^n\}$, é fornecida pelos polinômios de Bernstein [45], que são usados para provar o teorema de Weierstrass da aproximação uniforme de funções contínuas por polinômios. Sua construção é baseada na fórmula do binômio de Newton, ou seja,

$$(a + b)^n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} a^i b^{n-i}, \quad (4.1)$$

em que

$$\binom{n}{i} = \frac{n!}{i!(n-i)!}, \quad (4.2)$$

fazendo $a = t$ e $b = 1 - t$, temos

$$1 = (t + 1 - t)^n = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} t^i (1 - t)^{n-i}. \quad (4.3)$$

Então, o i -ésimo polinômio de Bernstein de grau n , denotado por $B_i^n(t)$, é definido como:

$$B_i^n(t) = \binom{n}{i} t^i (1 - t)^{n-i}, \quad (4.4)$$

com $t \in [0; 1]$ e $i = 0, \dots, n$.

Por exemplo, para $n = 2$, os polinômios de Bernstein de grau 2 são dados por:

$$B_0^2(t) = (1 - t)^2, \quad B_1^2(t) = 2t(1 - t), \quad B_2^2(t) = t^2, \quad (4.5)$$

enquanto, para $n = 3$, os polinômios de Bernstein de grau 3 são dados por:

$$B_0^3(t) = (1 - t)^3, \quad B_1^3(t) = 3t(1 - t)^2, \quad B_2^3(t) = 3t^2(1 - t), \quad B_3^3(t) = t^3. \quad (4.6)$$

A Figura 8 apresenta os gráficos dos polinômios de Bernstein de grau 2 e 3.

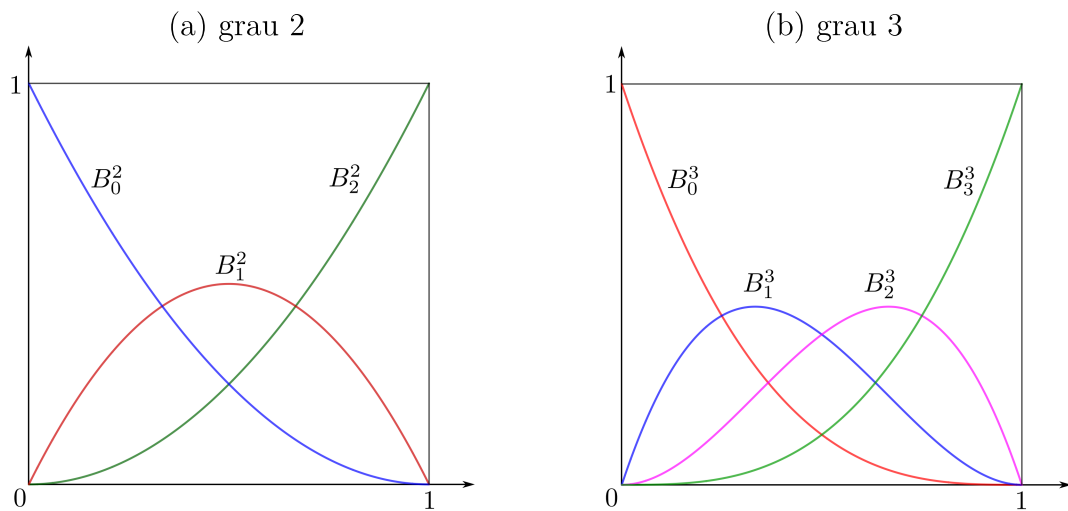


Figura 8 – Representação gráfica dos polinômios de Bernstein de graus 2 e 3.

4.2 Curvas de Bézier

As curvas de Bézier podem ser definidas por:

$$C(t) = \sum_{i=0}^n P_i B_i^n(t), \quad \text{para } t \in [0; 1], \quad (4.7)$$

nos quais os coeficientes P_i são chamados de vértices ou pontos de controle do polígono de controle $\{P_0, P_1, \dots, P_n\}$, enquanto $B_i^n(t)$ são os polinômios de Bernstein de grau n , conforme definidos anteriormente na equação (4.4). A Figura 9 mostra alguns exemplos de curvas de Bézier, que, para 4 pontos de controle, também são conhecidas como curvas cúbicas de Bézier.

A teoria e aplicabilidade das curvas de Bézier é vasta, veja [45] para mais detalhes. Aqui, apenas algumas propriedades importantes das curvas de Bézier são brevemente relatadas:

- A curva de Bézier $C(t)$ interpola os extremos do intervalo, isto é

$$C(0) = P_0, \quad C(1) = P_n; \quad (4.8)$$

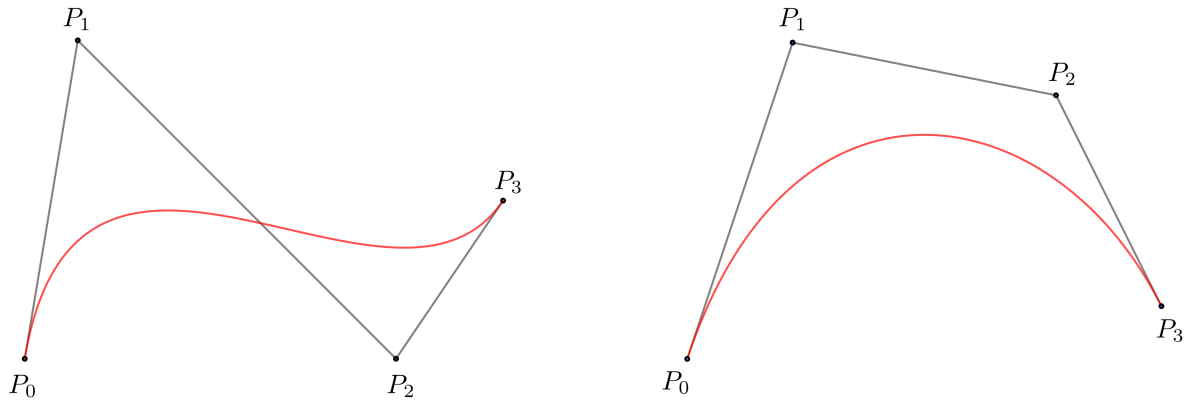


Figura 9 – Curvas cúbicas de Bézier com 4 pontos de controle.

- A curva está contida dentro do fecho convexo do polígono de controle;
- A curva de Bézier $C(t)$ é contínua e diferenciável em $[0; 1]$;
- A curva é invariante sobre transformações afins;
- Simetria: se invertermos o polígono de controle $\{P_0, \dots, P_n\}$, o gráfico é o mesmo que o correspondente a $\{P_n, \dots, P_0\}$, só que é percorrido na direção oposta.

4.3 Esquema Bézier de grau 2 (SOBUS)

Nesta seção, é apresentado um esquema *upwind* proposto nesta tese, baseado nas curvas quadráticas de Bézier [46], denominado SOBUS (*Second Order Bézier Upwind Scheme*). Ele foi criado assumindo que as variáveis normalizadas na interface da célula f , denotadas por $\hat{\phi}_f$ estão relacionadas a $\hat{\phi}_U$ pelas equações paramétricas da curva quadrática de Bézier para $0 < \hat{\phi}_U < 1$, e uma função linear (esquema FOU) para $\hat{\phi}_U \notin [0; 1]$. Para a construção da curva utiliza-se a equação (4.7) com os polinômios de Bernstein de grau 2 e os seguintes pontos de controle:

$$P_0 = (0; 0), \quad (4.9)$$

$$P_1 = (a; b), \quad (4.10)$$

$$P_2 = (1; 1), \quad (4.11)$$

onde P_0 e P_2 são os pontos extremos, e P_1 é o ponto interior definido pelos valores reais a e b .

Então, para este caso, a curva de Bézier tem a seguinte estrutura:

$$C(t) = \sum_{i=0}^2 P_i B_i^2(t) = (2at + (1 - 2a)t^2; 2bt + (1 - 2b)t^2), \quad (4.12)$$

cujas equações paramétricas para $C(t)$ são dadas por:

$$\hat{\phi}_U(t) = 2at + (1 - 2a)t^2, \quad (4.13)$$

$$\hat{\phi}_f(t) = 2bt + (1 - 2b)t^2. \quad (4.14)$$

O esquema SOBUS deve satisfazer as condições de Leonard [3], então a curva $C(t)$ deve passar pelo ponto $Q(0,5; 0,75)$ do NVD (ver Figura 2) com inclinação de 0,75 para atingir a terceira ordem de precisão. Portanto, deve existir um $t_0 \in [0; 1]$ que resolva o seguinte sistema:

$$\begin{cases} 0,5 &= 2at_0 + (1 - 2a)t_0^2, \\ 0,75 &= 2bt_0 + (1 - 2b)t_0^2, \\ 0,75 &= \left. \frac{d\hat{\phi}_f}{d\hat{\phi}_U} \right|_{t=t_0} = \frac{2b + 2(1 - 2b)t_0}{2a + 2(1 - 2a)t_0}. \end{cases} \quad (4.15)$$

A equação (4.15) consiste em um sistema de equações não lineares que pode ser resolvido para as incógnitas a , b e t_0 , obtendo-se os seguintes valores:

$$a = \frac{1}{6}(3 - \sqrt{3}), \quad b = \frac{3}{4} = 0,75, \quad t_0 = \frac{1}{2}(3 - \sqrt{3}). \quad (4.16)$$

A partir das equações (4.13) e (4.14), pode-se eliminar o parâmetro t para expressar $\hat{\phi}_f$ como uma função de $\hat{\phi}_U$, resultando na seguinte equação:

$$\hat{\phi}_f = \frac{1}{(1 - 2a)^2} \left[(1 - 2a)(1 - 2b)\hat{\phi}_U + 2(a - b) \left(a - \sqrt{a^2 + (1 - 2a)\hat{\phi}_U} \right) \right]. \quad (4.17)$$

Substituindo os valores de a , b na equação (4.17) obtém-se o esquema SOBUS em NV. Para $\hat{\phi}_U \notin [0; 1]$, o esquema FOU é utilizado, ou seja,

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\phi}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3}\right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{\phi}_U} \right), & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (4.18)$$

O esquema SOBUS pode ser definido em variáveis não normalizadas usando a equação (3.1) na equação (4.18) da seguinte forma:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left[-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\phi}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3}\right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{\phi}_U} \right) \right], & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases} \quad (4.19)$$

nos quais ϕ_D , ϕ_U e ϕ_R são previamente definidos (ver Figura 1) e $\hat{\phi}_U = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}$.

A Figura 10 mostra o esquema SOBUS em NV. Nota-se que esse esquema está dentro da região CBC e BAIR, mas não está dentro da região TVD.

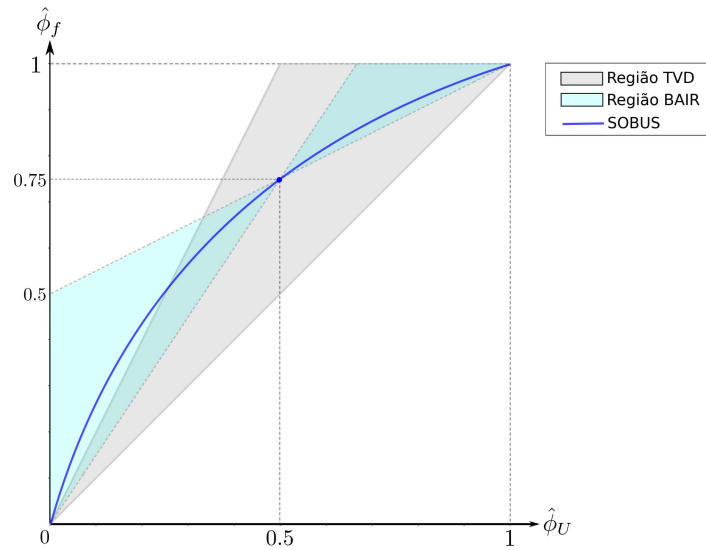


Figura 10 – O esquema SOBUS (linha sólida azul).

A função limitador de fluxo correspondente ao esquema SOBUS é obtido através das equações (3.8), (3.10) e (4.18). Segue a sua formulação:

$$\psi(r) = \begin{cases} -(2 + \sqrt{3})r - (1 + r) \left[\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{2} - (3 + 2\sqrt{3}) \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{6} \left(\frac{1-r}{1+r} \right)} \right], & r \geq 0, \\ 0, & r < 0. \end{cases} \quad (4.20)$$

O limitador de fluxo para o esquema SOBUS é mostrado na Figura 11, onde é possível ver que o limitador SOBUS está fora da região TVD de segunda ordem [1].

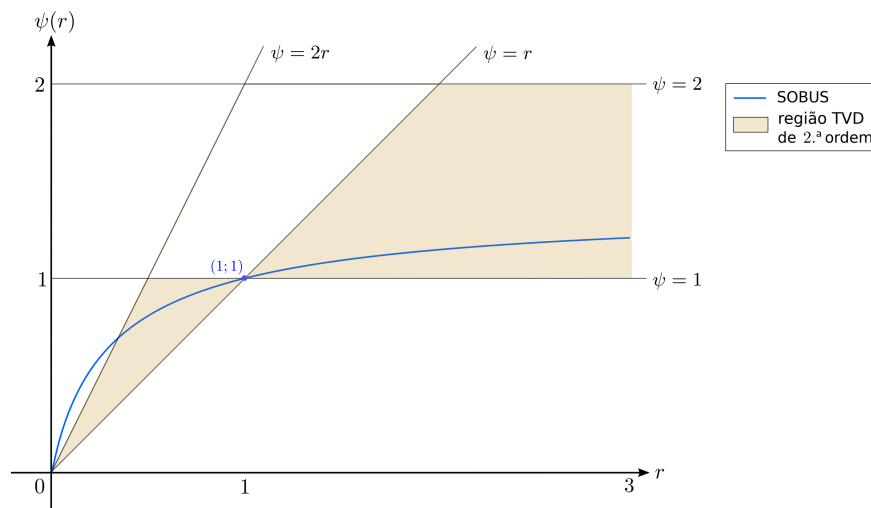


Figura 11 – Limitador de fluxo para o esquema SOBUS.

4.4 Esquema Bézier de grau 2 por partes (PUBICK)

Nesta seção, é apresentado o esquema PUBICK (*Piecewise Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics*), proposto nesta tese, que utiliza a curva quadrática de Bézier em dois subintervalos: para os valores $\hat{\phi}_U \in [0; 0,5]$ e $\hat{\phi}_V \in [0,5; 1]$. Em cada subintervalo, aplica-se a propriedade de interpolação da curva de Bézier nos extremos do intervalo. Assim, o ponto final da curva criada no intervalo $[0; 0,5]$ coincide com $(0,5; 0,75)$, e o ponto inicial da curva criada no intervalo $[0,5; 1]$ coincide com $(0,5; 0,75)$, satisfazendo uma das condições de Leonard, na qual a curva passa pelo ponto $(0,5; 0,75)$. Diferentemente do esquema SOBUS apresentado anteriormente, o esquema PUBICK satisfaz o critério TVD, como será mostrado. Trata-se, na verdade, de uma família de esquemas *upwind*, como discutido a seguir.

Para $\hat{\phi}_U \in [0; 0,5]$, usamos os pontos de controle $\{(0; 0), (\mu_1; \nu_1), (0,5; 0,75)\}$, com $n = 2$ na equação (4.7). Então, tem-se a seguinte curva quadrática de Bézier C_1 dada por:

$$C_1(t) = \sum_{i=0}^2 P_i B_i^2(t) = \left(2\mu_1 t + \left(\frac{1}{2} - 2\mu_1\right) t^2; 2\nu_1 t + \left(\frac{3}{4} - 2\nu_1\right) t^2 \right). \quad (4.21)$$

As equações paramétricas para $C_1(t)$ são:

$$\hat{\phi}_U(t) = 2\mu_1 t + \left(\frac{1}{2} - 2\mu_1\right) t^2, \quad (4.22)$$

$$\hat{\phi}_{1f}(t) = 2\nu_1 t + \left(\frac{3}{4} - 2\nu_1\right) t^2. \quad (4.23)$$

A curva $C_1(t)$ deve passar pelos pontos $O(0; 0)$ e $Q(0,5; 0,75)$ do NVD (ver Figura 2). Além disso, a curva deve passar pelo ponto $Q(0,5; 0,75)$ com inclinação de 0,75, segundo as condições de Leonard [3]. Portanto, deve existir $t_0 \in [0; 1]$ tal que se possa resolver o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0,5 = 2\mu_1 t_0 + \left(\frac{1}{2} - 2\mu_1\right) t_0^2, \\ 0,75 = 2\nu_1 t_0 + \left(\frac{3}{4} - 2\nu_1\right) t_0^2, \\ 0,75 = \left. \frac{d\hat{\phi}_{1f}}{dt} \right|_{t=t_0} = \frac{4\nu_1 + (3 - 8\nu_1)t_0}{4\mu_1 + (2 - 8\mu_1)t_0}. \end{array} \right. \quad (4.24)$$

Como a curva de Bézier interpola o ponto de controle final, tem-se que $t_0 = 1$. Então, substituindo na equação (4.24), obtém-se:

$$\nu_1 = \frac{3}{8}(2\mu_1 + 1). \quad (4.25)$$

Da equação (4.22) isolamos t :

$$t = \frac{1}{4\mu_1 - 1} \left(2\mu_1 \pm \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1 - 4\mu_1)\hat{\phi}_U} \right), \quad \hat{\phi}_U \in [0; 0,5], \quad \mu_1 \neq 0,25. \quad (4.26)$$

Por definição, nas curvas de Bézier $t \in [0; 1]$, mas ao analisar os sinais, tem-se que

$$t = \frac{1}{4\mu_1 - 1} \left(2\mu_1 + \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1 - 4\mu_1)\hat{\phi}_U} \right) \notin [0; 1] \quad (4.27)$$

e

$$t = \frac{1}{4\mu_1 - 1} \left(2\mu_1 - \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1 - 4\mu_1)\hat{\phi}_U} \right) \in [0; 1]. \quad (4.28)$$

Como a equação (4.28) satisfaz $t \in [0; 1]$, substituímos as equações (4.28) e (4.25) em (4.23) para expressar $\hat{\phi}_{1f}$ como uma função de $\hat{\phi}_U$, obtém-se:

$$\hat{\phi}_{1f} = \frac{3\mu_1\hat{\phi}_U}{(4\mu_1 - 1)} + \frac{3(2\mu_1 - 1) \left(2\mu_1 - \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1 - 4\mu_1)\hat{\phi}_U} \right)}{4(4\mu_1 - 1)^2}, \quad (4.29)$$

nos quais $\hat{\phi}_U \in [0; 0,5]$ e $\mu_1 \in]0; 0,5[- \{0,25\}$.

Para $\hat{\phi}_U \in [0,5; 1]$, usam-se os pontos de controle $(0,5; 0,75)$, $(\mu_2; \nu_2)$, $(1; 1)$. Então, tem-se a seguinte curva quadrática de Bézier C_2 :

$$\begin{aligned} C_2(t) &= \sum_{i=0}^2 Q_i B_i^2(t) \\ &= \left(\frac{1}{2} + (2\mu_2 - 1)t + \left(\frac{3}{2} - 2\mu_2 \right) t^2, \frac{3}{4} + \left(2\nu_2 - \frac{3}{2} \right) t + \left(\frac{7}{4} - 2\nu_2 \right) t^2 \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

As equações paramétricas para $C_2(t)$ são dadas por:

$$\hat{\phi}_U(t) = \frac{1}{2} + (2\mu_2 - 1)t + \left(\frac{3}{2} - 2\mu_2 \right) t^2, \quad (4.31)$$

$$\hat{\phi}_{2f}(t) = \frac{3}{4} + \left(2\nu_2 - \frac{3}{2} \right) t + \left(\frac{7}{4} - 2\nu_2 \right) t^2. \quad (4.32)$$

A curva $C_2(t)$ deve passar pelos pontos $Q(0,5; 0,75)$ e $P(1; 1)$ do NVD (ver Figura 2). Além disso, passar pelo ponto $Q(0,5; 0,75)$ com inclinação de 0,75 de acordo com as condições de Leonard [3]. Portanto, deve existir $t_1 \in [0; 1]$ tal que se possa resolver o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0,5 = \frac{1}{2} + (2\mu_2 - 1)t_1 + \left(\frac{3}{2} - 2\mu_2 \right) t_1^2, \\ 0,75 = \frac{3}{4} + \left(2\nu_2 - \frac{3}{2} \right) t_1 + \left(\frac{7}{4} - 2\nu_2 \right) t_1^2, \\ 0,75 = \frac{d\hat{\phi}_{2f}}{dt} \Big|_{t=t_1} = \frac{4\nu_2 - 3 + (7 - 8\nu_2)t_1}{4\mu_2 - 2 + (6 - 8\mu_2)t_1}. \end{array} \right. \quad (4.33)$$

Como a curva de Bézier interpola o ponto de controle inicial, tem-se que $t_1 = 0$. Então, substituindo no sistema (4.33) acima, obtém-se:

$$\nu_2 = \frac{3}{8}(2\mu_2 + 1). \quad (4.34)$$

Da equação (4.31), isola-se t :

$$t = \frac{1}{4\mu_2 - 3} \left(2\mu_2 - 1 \pm \sqrt{4\mu_2^2 - 8\mu_2\hat{\phi}_U + 6\hat{\phi}_U - 2} \right), \quad \hat{\phi}_U \in [0,5; 1], \quad \mu_2 \neq 0,75. \quad (4.35)$$

Por definição de curvas de Bézier $t \in [0; 1]$, mas analisando os sinais tem-se que:

$$t = \frac{1}{4\mu_2 - 3} \left(2\mu_2 - 1 + \sqrt{4\mu_2^2 - 2 + 2(3 - 4\mu_2)\hat{\phi}_U} \right) \notin [0; 1] \quad (4.36)$$

e

$$t = \frac{1}{4\mu_2 - 3} \left(2\mu_2 - 1 - \sqrt{4\mu_2^2 - 2 + 2(3 - 4\mu_2)\hat{\phi}_U} \right) \in [0; 1]. \quad (4.37)$$

Como a equação (4.37) satisfaz $t \in [0; 1]$, substituímos as equações (4.37) e (4.34) em (4.32) para expressar $\hat{\phi}_{2f}$ como uma função de $\hat{\phi}_U$, obtendo:

$$\hat{\phi}_{2f} = \frac{6\mu_2 - 5 + 4(3\mu_2 - 2)\hat{\phi}_U}{4(4\mu_2 - 3)} + \frac{(2\mu_2 - 1) \left(-2\mu_2 + 1 + \sqrt{4\mu_2^2 - 2 + 2(3 - 4\mu_2)\hat{\phi}_U} \right)}{4(4\mu_2 - 3)^2} \quad (4.38)$$

para $\hat{\phi}_U \in [0,5; 1]$ e $\mu_2 \in]0,5; 1[-\{0,75\}$.

A partir das equações (4.29) e (4.38), pode-se definir o esquema PUBICK em NV da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \frac{3\mu_1\hat{\phi}_U}{(4\mu_1-1)} + \frac{3(2\mu_1-1)\left(2\mu_1 - \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1-4\mu_1)\hat{\phi}_U}\right)}{4(4\mu_1-1)^2}, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,5[, \\ \frac{6\mu_2-5+4(3\mu_2-2)\hat{\phi}_U}{4(4\mu_2-3)} + \frac{(2\mu_2-1)\left(-2\mu_2+1+\sqrt{4\mu_2^2-2+2(3-4\mu_2)\hat{\phi}_U}\right)}{4(4\mu_2-3)^2}, & \hat{\phi}_U \in [0,5; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (4.39)$$

O esquema proposto PUBICK satisfaz os critérios CBC, TVD e BAIR se μ_1 e μ_2 obedecerem as seguintes condições:

$$\mu_1 \in \left[\frac{3}{10}; \frac{1}{2} \right[\quad \text{e} \quad \mu_2 \in \left] \frac{1}{2}; \frac{5}{6} \right] - \left\{ \frac{3}{4} \right\}. \quad (4.40)$$

Por exemplo, o esquema PUBICK para os valores de $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ pode ser escrito em NV usando a equação (4.39) da seguinte forma:

$$\phi_f = \begin{cases} \frac{9}{2}\hat{\phi}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{9 - 10\hat{\phi}_U}, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,5[, \\ \frac{3}{2}\hat{\phi}_U - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{7 - 6\hat{\phi}_U}, & \hat{\phi}_U \in [0,5; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (4.41)$$

De fato, o esquema PUBICK consiste em uma família de métodos, dos quais esquemas particulares podem ser derivados, uma vez que os parâmetros $\mu_1 \in \left[\frac{3}{10}; \frac{1}{2}\right[$ e $\mu_2 \in \left]\frac{1}{2}; \frac{5}{6}\right] - \left\{\frac{3}{4}\right\}$ sejam escolhidos. A Figura 12 mostra o esquema PUBICK para a escolha específica $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$. Pode-se observar que o esquema está inteiramente dentro das regiões TVD e BAIR, conforme definido anteriormente no Capítulo 3.

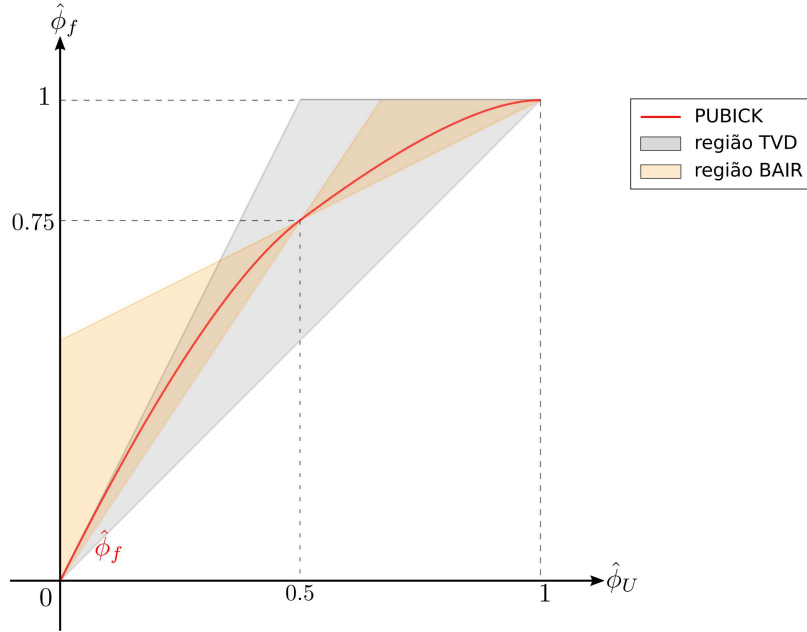


Figura 12 – O esquema PUBICK para $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ (linha sólida vermelha) está representado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (laranja).

O esquema PUBICK definido na equação (4.39) pode ser formulado em variáveis não normalizadas usando a equação (3.1), conforme segue:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left\{ \frac{3\mu_1\hat{\phi}_U}{(4\mu_1-1)} + \frac{3(2\mu_1-1)(2\mu_1 - \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1-4\mu_1)\hat{\phi}_U})}{4(4\mu_1-1)^2} \right\}, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,5[, \\ \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left\{ \frac{6\mu_2-5+4(3\mu_2-2)\hat{\phi}_U}{4(4\mu_2-3)} + \frac{(2\mu_2-1)(-2\mu_2+1+\sqrt{4\mu_2^2-2+2(3-4\mu_2)\hat{\phi}_U})}{4(4\mu_2-3)^2} \right\}, & \hat{\phi}_U \in [0,5; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (4.42)$$

com $\mu_1 \in \left[\frac{3}{10}; \frac{1}{2}\right[$ e $\mu_2 \in \left]\frac{1}{2}; \frac{5}{6}\right] - \left\{\frac{3}{4}\right\}$. ϕ_D , ϕ_U e ϕ_R previamente definidos (ver Figura 1).

Assim, o esquema PUBICK para os valores de $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ pode ser escrito em variáveis não normalizadas usando a equação (4.42), como segue:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left\{ \frac{9}{2} \hat{\phi}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2} \sqrt{9 - 10 \hat{\phi}_U} \right\}, & \hat{\phi}_U \in [0; 0,5[, \\ \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left\{ \frac{3}{2} \hat{\phi}_U - 1 + \frac{1}{2} \sqrt{7 - 6 \hat{\phi}_U} \right\}, & \hat{\phi}_U \in [0,5; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (4.43)$$

O limitador de fluxo correspondente ao esquema PUBICK é obtido usando as equações (3.8), (3.10) e (4.39), resultando em:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{2(1-\mu_1)r}{(4\mu_1-1)} + \frac{3(1+r)(2\mu_1-1)(2\mu_1 - \sqrt{4\mu_1^2 + 2(1-4\mu_1)\frac{r}{1+r}})}{2(4\mu_1-1)^2}, & 0 \leq r < 1, \\ \frac{6\mu_2-5+(2\mu_2-1)r}{2(4\mu_2-3)} + \frac{(1+r)(2\mu_2-1)(-2\mu_2+1 + \sqrt{4\mu_2^2-2+2(3-4\mu_2)\frac{r}{1+r}})}{2(4\mu_2-3)^2}, & 1 \leq r, \\ 0, & r < 0. \end{cases} \quad (4.44)$$

O limitador de fluxo do esquema PUBICK está dentro da região TVD de segunda ordem quando $\mu_1 \in \left[\frac{3}{10}; \frac{1}{2}\right[$ e $\mu_2 \in \left]\frac{1}{2}; \frac{5}{6}\right] - \left\{\frac{3}{4}\right\}$. O limitador de fluxo PUBICK para os valores de $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ é mostrado na Figura 13 usando o plano $r - \psi(r)$.

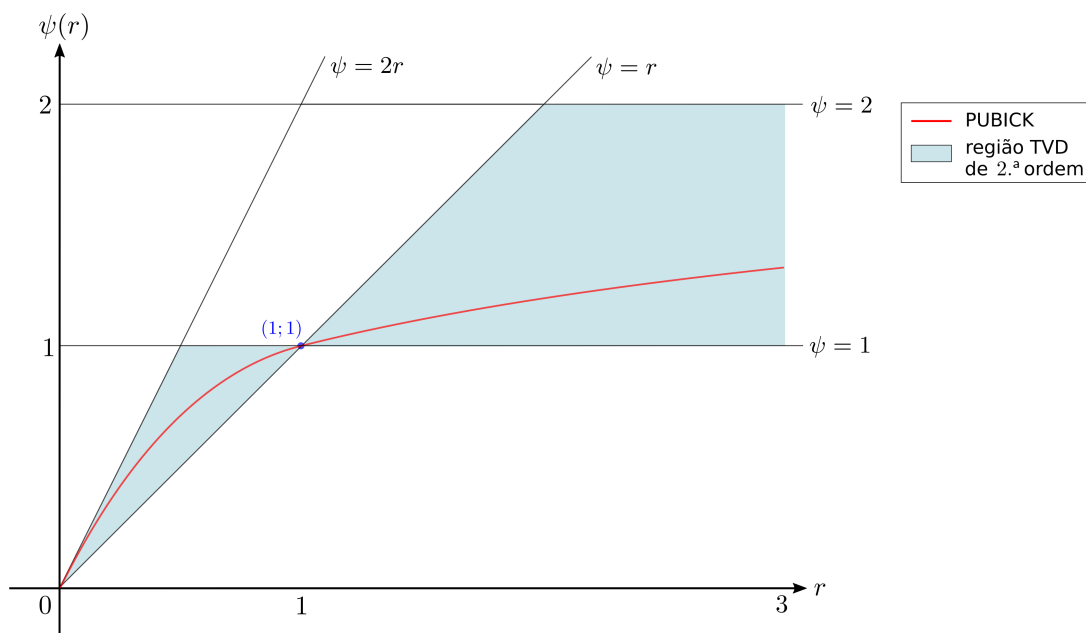


Figura 13 – Limitador de fluxo do esquema PUBICK para $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ na região TVD de segunda ordem [1].

4.5 Esquema Bézier de grau 3 (CUBICK)

Um esquema com solução limitada baseado em curvas cúbicas de Bézier [46], chamado CUBICK (*Cubic Upwind Bézier Interpolation for Convective Kinematics*), é proposto neste trabalho. Esse novo esquema também consiste em uma família de esquemas *upwind*, como é apresentado a seguir.

O esquema CUBICK é desenvolvido assumindo que as NV na interface da célula f , denotadas por $\hat{\phi}_f$, estão relacionadas a $\hat{\phi}_U$ pelas equações paramétricas da curva cúbica de Bézier para $0 < \hat{\phi}_U < 1$, e pelo esquema FOU para $\hat{\phi}_U \notin [0; 1]$. Para isso, a curva paramétrica de Bézier utiliza os seguintes pontos de controle:

$$P_0 = (0; 0), \quad (4.45)$$

$$P_1 = (a; b), \quad (4.46)$$

$$P_2 = (c; d), \quad (4.47)$$

$$P_3 = (1; 1), \quad (4.48)$$

onde P_0 e P_3 são os pontos extremos, e P_1 e P_2 os pontos interiores que são definidos pelos valores a , b , c e d .

Assim, a curva de Bézier tem a seguinte estrutura:

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_{i=0}^3 P_i B_i^3(t) \\ &= \left(3at(1-t)^2 + 3ct^2(1-t) + t^3; 3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3 \right), \end{aligned} \quad (4.49)$$

e as equações paramétricas para $C(t)$ são dadas por:

$$\hat{\phi}_U(t) = 3at(1-t)^2 + 3ct^2(1-t) + t^3, \quad (4.50)$$

$$\hat{\phi}_f(t) = 3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3. \quad (4.51)$$

Segundo Leonard [3], a curva $C(t)$ deve passar pelo ponto $(0,5; 0,75)$ com uma inclinação de $0,75$ para que o esquema tenha terceira ordem de precisão. Portanto, existe um $t_0 \in [0; 1]$ que satisfaz o seguinte sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0,5 = 3at_0(1-t_0)^2 + 3ct_0^2(1-t_0) + t_0^3, \\ 0,75 = 3bt_0(1-t_0)^2 + 3dt_0^2(1-t_0) + t_0^3, \\ 0,75 = \left. \frac{d\hat{\phi}_f}{dt} \right|_{t=t_0} = \frac{3b(1+3t_0^2-4t_0) + 3d(2t_0-3t_0^2) + 3t_0^2}{3a(1+3t_0^2-4t_0) + 3c(2t_0-3t_0^2) + 3t_0^2}. \end{array} \right. \quad (4.52)$$

É importante observar que, dados valores para a e b , as equações (4.52) representam um sistema de equações não lineares que pode ser resolvido para as incógnitas c , d e t_0 .

A seguir, são apresentados os passos para obter o esquema CUBICK. Inicialmente, escolhem-se $(a; b) = (0, 5; 0, 75)$ e resolve-se o sistema não linear (4.52) usando o algoritmo *Trust-region-dogleg* [47] para obter c , d e t_0 . Considerando seis casas decimais, seguem os valores aproximados obtidos: $c = 0, 247622$, $d = 0, 674287$ e $t_0 = 0, 645028$.

A partir das equações (4.50) e (4.51), podemos expressar $\hat{\phi}_f$ como uma função de $\hat{\phi}_U$. Para isso, primeiro reescreve-se a equação (4.50) como um polinômio de grau 3, dado por:

$$At^3 + Bt^2 + Ct + D = 0, \quad (4.53)$$

nos quais os coeficientes são dados por: $A = 1 + 3a - 3c$, $B = 3c - 6a$, $C = 3a$ e $D = -\hat{\phi}_U$.

Em seguida, a fórmula de Cardano [48] é aplicada à equação cúbica (4.53) para encontrar o valor de t , ou seja:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} - \frac{B}{3A}, \quad (4.54)$$

nos quais p , q e Δ são definidos como:

$$p = \frac{3AC - B^2}{3A^2}, \quad (4.55)$$

$$q = \frac{2B^3 - 9ABC + 27A^2D}{27A^3}, \quad (4.56)$$

$$\Delta = \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3. \quad (4.57)$$

Substituindo os valores escolhidos para $a = 0,5$, $b = 0,75$, e os valores obtidos para c e d na resolução do sistema (4.52), nas equações (4.54), (4.55), (4.56), (4.57), obtêm-se as expressões de t , q e Δ dadas por:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} + 0,428185, \quad (4.58)$$

$$q = 0,208517 - 0,569109\hat{\phi}_U, \quad (4.59)$$

$$\Delta = \frac{1}{4}q^2 + 0,001037, \quad (4.60)$$

Em seguida, substituindo $b = 0,75$ e o valor de d obtido na resolução do sistema (4.52) na equação (4.51), obtêm-se o esquema CUBICK específico, que é dado por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3, & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (4.61)$$

em que t depende de $\hat{\phi}_U$ através das equações (4.58), (4.59) e (4.60).

Os esquemas são explicitamente escritos aplicando a definição de NV, conforme expressa na equação (3.1), à expressão do valor normalizado interfacial $\hat{\phi}_f$. Esta abordagem é a mesma adotada por [5] para o esquema TOPUS.

Então, o esquema CUBICK definido na equação (4.61) para $(a; b) = (0,5; 0,75)$ pode ser formulado em variáveis não normalizadas usando a equação (3.1), como segue:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R)[3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3], & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases} \quad (4.62)$$

com ϕ_D , ϕ_U e ϕ_R previamente definidos (ver Figura 1).

A Figura 14 mostra o esquema CUBICK para a escolha particular $(a; b) = (0,5; 0,75)$. Pode-se observar que o esquema está inteiramente dentro das regiões TVD e BAIR.

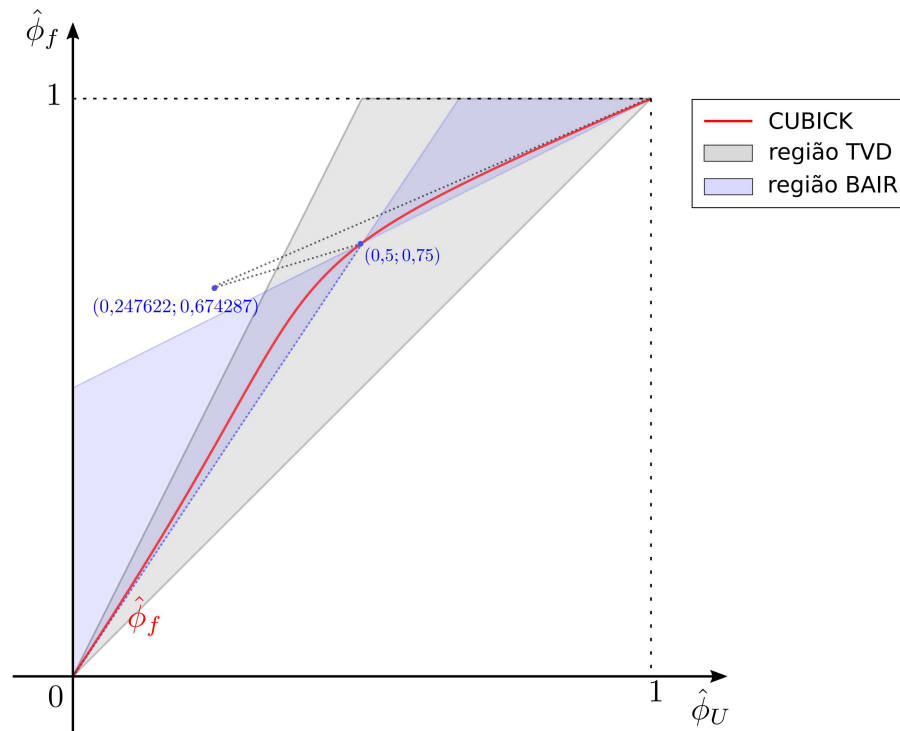


Figura 14 – Esquema CUBICK para $(a; b) = (0,5; 0,75)$ (linha sólida vermelha) está localizado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (azul).

A função limitadora de fluxo correspondente ao esquema CUBICK é obtida usando as equações (3.8), (3.10) e (4.51), resultando em:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{6(d-c-b+a)t^2 + 6(b-a)t}{(3a-3c+1)t^2 + (1-3a)t + 1}, & r \geq 0, \\ 0, & r < 0, \end{cases} \quad (4.63)$$

em que o valor de t é definido como na equação (4.64), isto é:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} - \frac{B}{3A}, \quad (4.64)$$

e p , q e Δ são definidos como:

$$p = \frac{3AC - B^2}{3A^2}, \quad (4.65)$$

$$q = \frac{2B^3 - 9ABC}{27A^3} - \frac{1}{A} \left(\frac{r}{r+1} \right), \quad (4.66)$$

$$\Delta = \left(\frac{q}{2} \right)^2 + \left(\frac{p}{3} \right)^3. \quad (4.67)$$

Na equação (4.68), tem-se a função limitador de fluxo do esquema convectivo CUBICK para a escolha $(a; b) = (0,5; 0,75)$:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1,059987t^2 + 1,5t}{1,757134t^2 - 0,5t + 1}, & r \geq 0, \\ 0, & r < 0, \end{cases} \quad (4.68)$$

onde a variável t depende de r como segue:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} + 0,428185, \quad (4.69)$$

$$q = 0,208517 - 0,569109 \left(\frac{r}{1+r} \right), \quad (4.70)$$

$$\Delta = \frac{1}{4}q^2 + 0,001037. \quad (4.71)$$

Na Figura 15, o limitador de fluxo do CUBICK é mostrado inteiramente dentro da região TVD de segunda ordem.

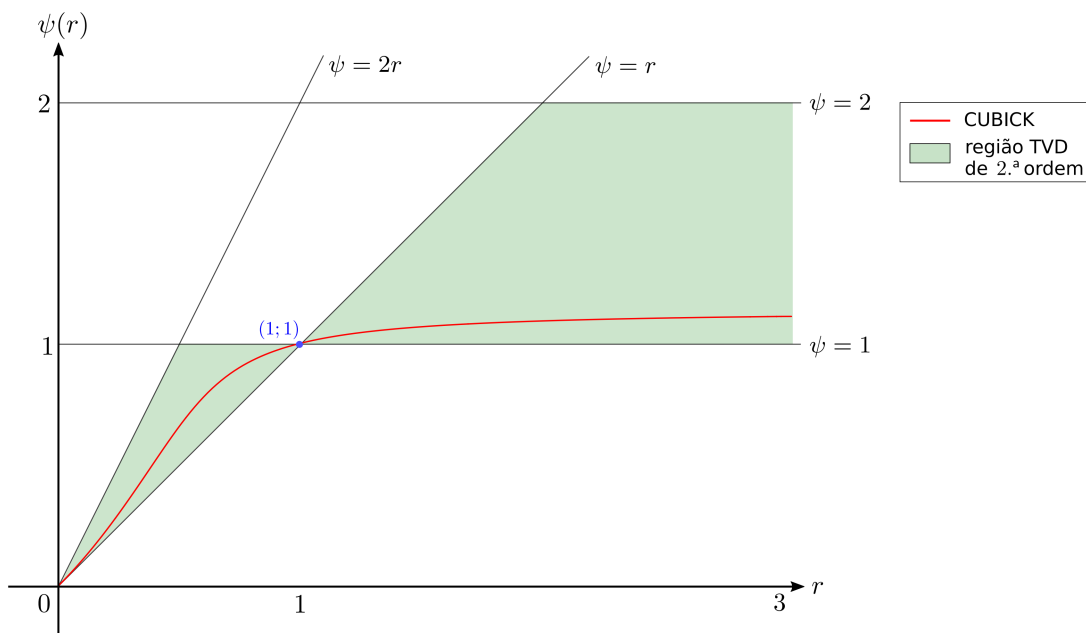


Figura 15 – Limitador de fluxo para o esquema CUBICK $(a; b) = (0,5; 0,75)$ na região TVD de segunda ordem [1].

4.5.1 Esquema CUBICK para $a = 0,25$ e $b = 0,45$

De fato, o CUBICK consiste em uma família de métodos a partir dos quais esquemas particulares podem ser derivados uma vez definidos os parâmetros $(a; b)$. A seguir, apresenta-se outro esquema CUBICK que será utilizado nas simulações numéricas do Capítulo 7 após considerar $a = 0,5$ e $b = 0,75$.

Para ilustrar a abordagem, um esquema criado com $(a; b) = (0,25; 0,45)$ é apresentado. Após resolver o sistema de equações (4.52), obtêm-se os valores de c , d e t_0 . Considerando seis casas decimais, resultam em $c = 0,256082$ e $d = 0,735437$ e $t_0 = 0,697269$.

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3 & , \quad \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U & , \quad \hat{\phi}_U \notin [0; 1], \end{cases} \quad (4.72)$$

em que t é calculado empregando as expressões (4.54), (4.55), (4.56) e (4.57), resultando em:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} + 0,248451, \quad (4.73)$$

$$q = 0,159129 - 1,018586\hat{\phi}_U, \quad (4.74)$$

$$\Delta = \frac{1}{4}q^2 + 0,007180. \quad (4.75)$$

Vale ressaltar que este esquema CUBICK com $(a; b) = (0,25; 0,45)$ também é totalmente limitado nas regiões TVD e BAIR conforme mostrado na Figura 16. O esquema CUBICK definido na equação (4.72) para $(a; b) = (0,25; 0,45)$ pode ser formulado em sua versão não normalizada usando a equação (3.1), como segue:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R)[3bt(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3] & , \quad \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U & , \quad \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

Para este esquema, a função do limitador de fluxo é dada por:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1,67613t^2 + 1,2t}{0,981754t^2 + 0,25t + 1}, & r \geq 0 \\ 0, & r < 0, \end{cases} \quad (4.76)$$

onde a variável t depende de r a partir das expressões (4.64), (4.65), (4.66) e (4.67), como segue:

$$t = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{q}{2}} - \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{q}{2}} + 0,248451, \quad (4.77)$$

$$q = 0,159129 - 1,018586 \left(\frac{r}{1+r} \right), \quad (4.78)$$

$$\Delta = \frac{1}{4}q^2 + 0,007180. \quad (4.79)$$

Na Figura 17 é representado o limitador de fluxo desse esquema, o qual está inteiramente dentro da região TVD de segunda ordem.

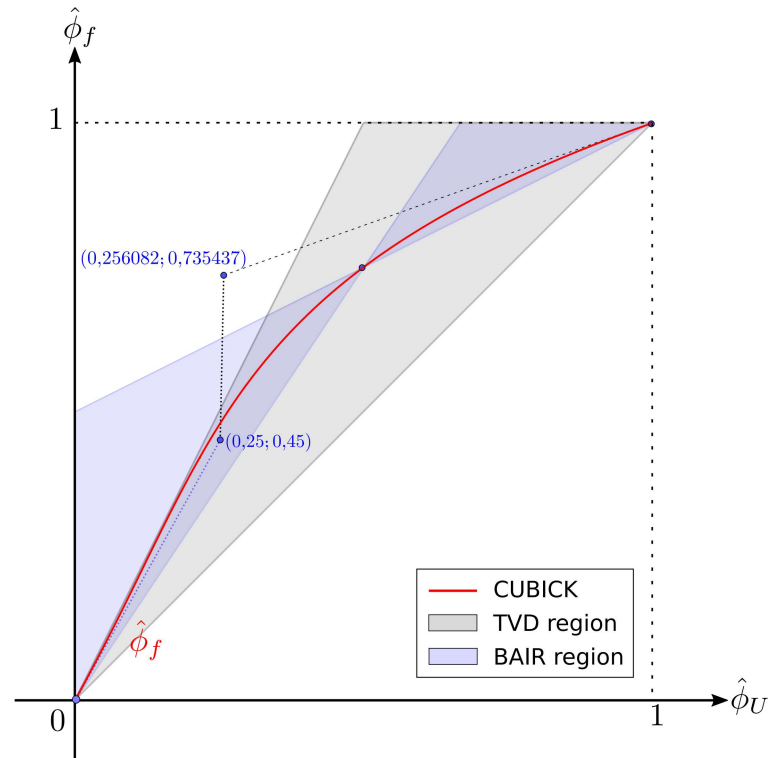


Figura 16 – Esquema CUBICK para $(a; b) = (0,25; 0,45)$ (linha sólida vermelha) está localizado nas regiões TVD (cinza) e BAIR (azul).

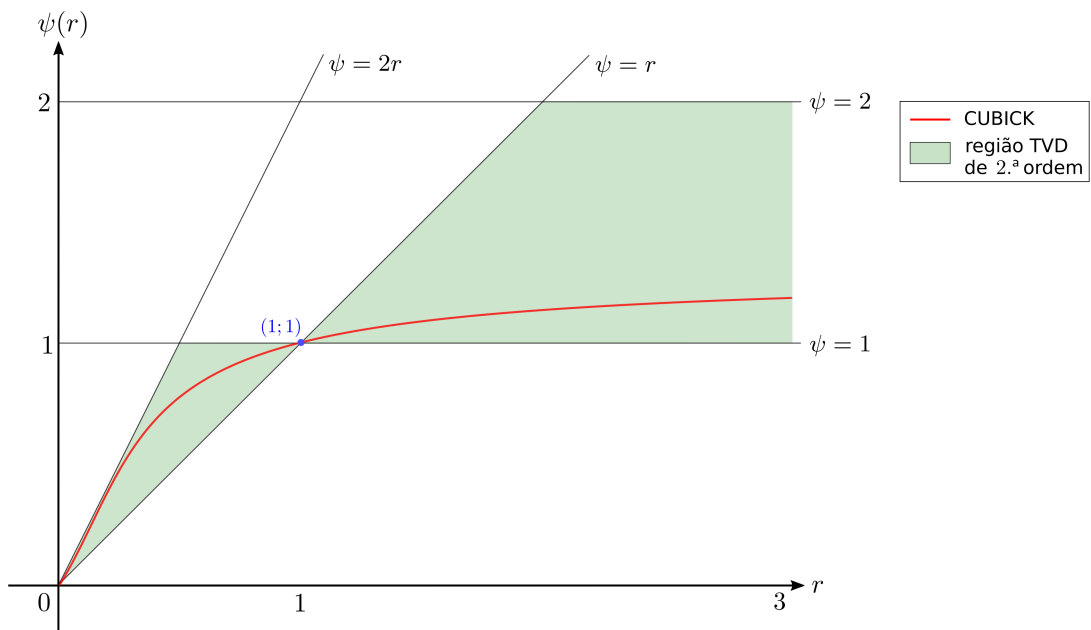


Figura 17 – Limitador de fluxo para o esquema CUBICK $(a; b) = (0,25; 0,45)$ na região TVD de segunda ordem [1].

5 Esquema *Upwind* Baseado na Interpolação de Hermite

Neste capítulo, é apresentado o desenvolvimento de um esquema polinomial *upwind* baseado na interpolação de Hermite, denominado FDHPUS. O esquema é fundamentado nos critérios de estabilidade da diminuição da variação total (TVD) e no critério de limitação de convecção (CBC). O esquema proposto pode ser visto como uma generalização de outros esquemas polinomiais presentes na literatura, como os esquemas TOPUS [5], HPUS [16], SMARTER [17] e FDPUS-C1 [18].

5.1 Esquema FDHPUS

Nesta seção, é apresentada a formulação geral dos esquemas *upwind* com base na interpolação de Hermite via diferenças divididas [49]. O esquema é denominado FDHPUS (*Fifth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme*). A formulação matemática geral desses esquemas é dada por:

$$\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) = h[\hat{\phi}_U^{(0)}] + \sum_{k=1}^n h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}](\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(0)})(\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(1)}) \dots (\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(k-1)}), \quad (5.1)$$

em que n é o grau do polinômio interpolador, os coeficientes $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$ do polinômio são obtidos recursivamente por meio de diferenças divididas de ordem k , e $\hat{\phi}_U \in [0, 1]$.

Para construir o esquema FDHPUS, considere a equação (5.1) com $n = 5$ e $\hat{\phi}_U^{(k)} \in \{0; 0,5; 1\}$ onde $k = 0, \dots, 5$. Para especificar os coeficientes do polinômio por meio de diferenças divididas [49], este esquema polinomial deve satisfazer as condições estabelecidas por Leonard [3] no NVD, ou seja, passar pelos pontos $O(0; 0)$, $Q(0,5; 0,75)$ e $P(1; 1)$, e apresentar inclinação igual a 0,75 em Q . Assim, constrói-se a Tabela 1 com θ_1 e θ_2 sendo parâmetros livres.

Ponto $(\hat{\phi}_U; \hat{\phi}_f)$ em NVD	$\hat{\phi}_U$	$\hat{\phi}_f$	$\hat{\phi}'_f(\hat{\phi}_U)$
$O(0; 0)$	0	0	θ_1
$Q(0,5; 0,75)$	0,5	0,75	0,75
$P(1; 1)$	1	1	θ_2

Tabela 1 – Condições para construir o esquema FDHPUS no NVD [3].

Da Tabela 1, usando diferenças divididas, obtêm-se os valores dos coeficientes $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$ conforme mostrado na Tabela 2.

Substituindo os valores obtidos na Tabela 2 na equação (5.1) com $n = 5$, obtêm-se

$\hat{\phi}_U^{(0)} = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}] = 0$		
$\hat{\phi}_U^{(1)} = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}] = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \hat{\phi}_U^{(1)}] = \theta_1$	
$\hat{\phi}_U^{(2)} = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}] = 1,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}] = 3 - 2\theta_1$
$\hat{\phi}_U^{(3)} = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}] = -1,5$
$\hat{\phi}_U^{(4)} = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}] = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}] = -0,5$
$\hat{\phi}_U^{(5)} = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(5)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}, \hat{\phi}_U^{(5)}] = \theta_2$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 2\theta_2 - 1$

$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(3)}] = -9 + 4\theta_1$		
$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(4)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(4)}] = 10 - 4\theta_1$	
$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 4\theta_2 - 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 4\theta_2 - 2$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 4(\theta_1 + \theta_2 - 3)$

Tabela 2 – Valores obtidos através de diferenças divididas utilizando os dados da Tabela 1.

a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) &= h[\hat{\phi}_U^{(0)}] + \sum_{k=1}^5 h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}](\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(0)})(\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(1)}) \dots (\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(k-1)}) \\
&= 0 + (\theta_1)(\hat{\phi}_U) + (3 - 2\theta_1)(\hat{\phi}_U)^2 + (-9 + 4\theta_1)(\hat{\phi}_U)^2(\hat{\phi}_U - 0,5) \\
&\quad + (10 - 4\theta_1)(\hat{\phi}_U)^2(\hat{\phi}_U - 0,5)^2 + 4(\theta_1 + \theta_2 - 3)(\hat{\phi}_U)^2(\hat{\phi}_U - 0,5)^2(\hat{\phi}_U - 1) \\
&= 4(\theta_1 + \theta_2 - 3)\hat{\phi}_U^5 - 2(6\theta_1 + 4\theta_2 - 17)\hat{\phi}_U^4 + (13\theta_1 + 5\theta_2 - 34)\hat{\phi}_U^3 \\
&\quad - (6\theta_1 + \theta_2 - 13)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U. \tag{5.2}
\end{aligned}$$

Da equação (5.2), obtém-se o esquema FDHPUS formulado em NV, que para $\hat{\phi}_U \notin [0; 1]$, adota-se o esquema FOU, ou seja:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 4(\theta_1 + \theta_2 - 3)\hat{\phi}_U^5 - 2(6\theta_1 + 4\theta_2 - 17)\hat{\phi}_U^4 + (13\theta_1 + 5\theta_2 - 34)\hat{\phi}_U^3 \\ - (6\theta_1 + \theta_2 - 13)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \tag{5.3}$$

Por exemplo, o esquema FDHPUS para os valores de $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$ pode ser escrito em NV usando a equação (5.3), como segue:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} -6\hat{\phi}_U^5 + 16\hat{\phi}_U^4 - 14,5\hat{\phi}_U^3 + 4\hat{\phi}_U^2 + 1,5\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \tag{5.4}$$

Aplicando a definição de NV (ver equação (3.1)) na equação (5.4), o esquema

FDHPUS em variáveis não normalizadas pode ser escrito da seguinte forma:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left[4(\theta_1 + \theta_2 - 3)\hat{\phi}_U^5 - 2(6\theta_1 + 4\theta_2 - 17)\hat{\phi}_U^4 + (13\theta_1 + 5\theta_2 - 34)\hat{\phi}_U^3 - (6\theta_1 + \theta_2 - 13)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U \right], & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (5.5)$$

Assim, o esquema FDHPUS para os valores de $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$ pode ser escrito em variáveis não normalizadas usando a equação (5.5), como segue:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left[-6\hat{\phi}_U^5 + 16\hat{\phi}_U^4 - 14,5\hat{\phi}_U^3 + 4\hat{\phi}_U^2 + 1,5\hat{\phi}_U \right], & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (5.6)$$

A Figura 18 mostra o esquema FDHPUS para os valores de $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$. Pode-se observar que o esquema está inteiramente dentro das regiões TVD e BAIR.

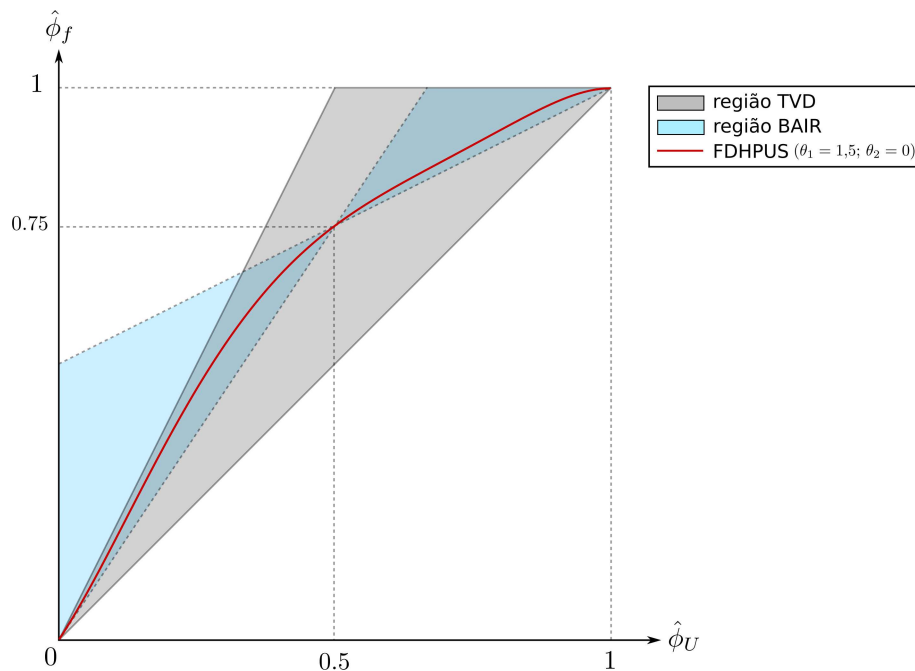


Figura 18 – Esquema FDHPUS para o valor $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$.

O esquema FDHPUS é TVD quando $\theta_1 \in [1; 1,942]$ e $\theta_2 \in [0; 1]$, ou quando $\theta_1 = 2$ e $\theta_2 = 1$. Este esquema respeita as restrições TVD e BAIR quando $\theta_1 \in [1,5; 1,942]$ e $\theta_2 \in [0; 0,465]$.

O limitador de fluxo correspondente ao esquema FDHPUS é obtido através das

equações (3.8), (3.10) e (5.3), resultando em:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{2r[(1-\theta_2)r^3 + (\theta_1 + 2\theta_2 - 1)r^2 - (2\theta_1 + \theta_2 - 9)r + (\theta_1 - 1)]}{(1+r)^4}, & r \geq 0, \\ 0, & r < 0. \end{cases} \quad (5.7)$$

O limitador de fluxo para o esquema FDHPUS é mostrado na Figura 19 para $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$ no plano $r - \psi(r)$. Nota-se que o limitador está inteiramente na região TVD de segunda ordem [1].

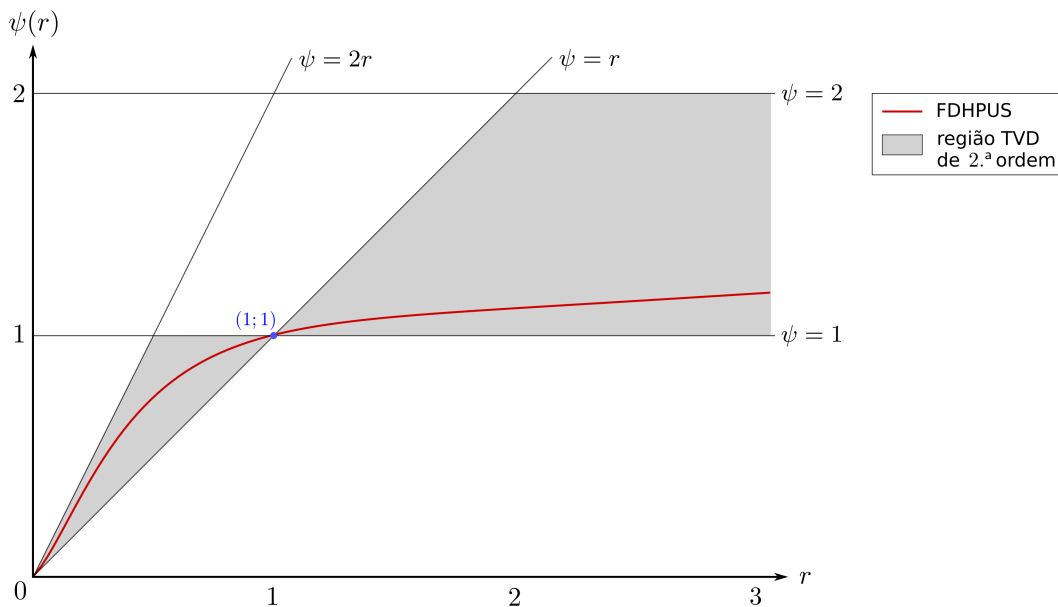


Figura 19 – Limitador de fluxo para o esquema FDHPUS com $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$.

É possível relacionar o esquema FDHPUS com alguns esquemas polinomiais *upwind* conhecidos, dependendo dos valores escolhidos para θ_1 e θ_2 , conforme apresentado na Tabela 3.

Esquema polinomial	θ_1	θ_2	Critério		
			CBC	TVD	BAIR
SMARTER [17]	2,5	0,5	X	-	X
TOPUS [5]	$\frac{-\alpha+10}{4}$	$\frac{\alpha+2}{4}$	X	X	-
FDPUS-C1 [18]	1	1	X	X	-
HPUS [16]	2	0	X	-	X

Tabela 3 – Esquemas polinomiais *upwind* que podem ser derivados do esquema FDHPUS (Equação (5.3)) a partir de escolhas dos parâmetros θ_1 e θ_2 .

A Figura 20 mostra os esquemas polinomiais TOPUS ($\alpha = 2$) [5], HPUS [16],

SMARTER [17], FDPUS-C1 [18] e FDHPUS ($\theta = 1,5; \theta_2 = 0$) em variáveis normalizadas. É importante ressaltar que o esquema TOPUS é CBC e TVD apenas para $\alpha = 2$.

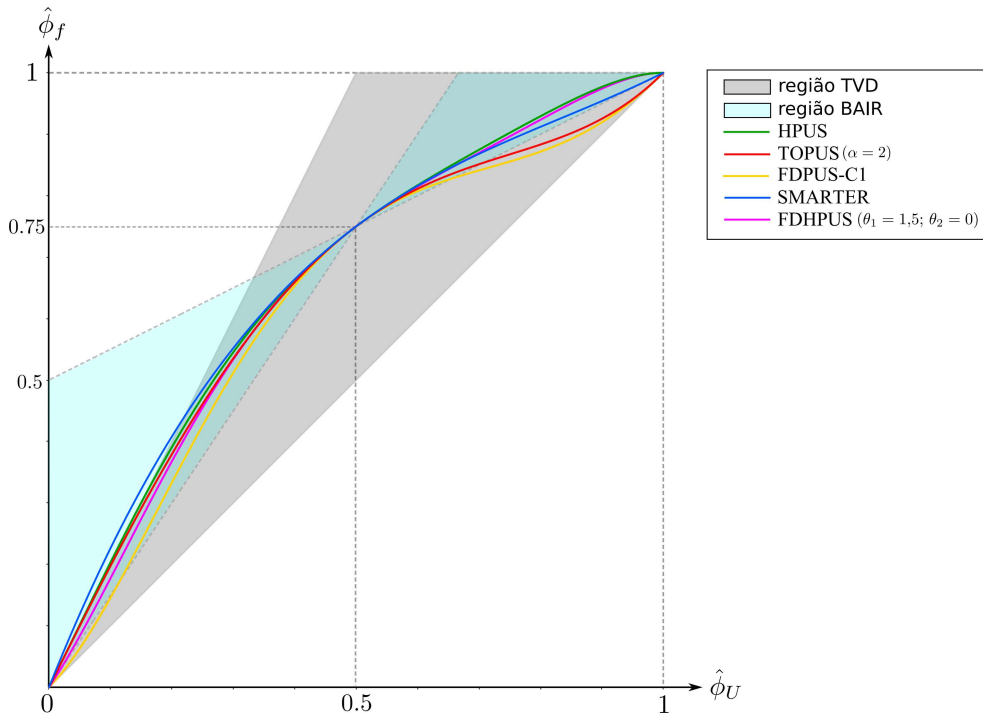


Figura 20 – Representação de algumas esquemas polinomiais *upwind* derivados do esquema FDHPUS no NVD.

A Figura 21 mostra o limitador de fluxo para os esquemas polinomiais HPUS, SMARTER, TOPUS ($\alpha = 2$), FDPUS-C1 e FDHPUS ($\theta = 1,5; \theta_2 = 0$). Nota-se que apenas o esquema FDHPUS ($\theta = 1,5; \theta_2 = 0$) está dentro da região TVD de segunda ordem.

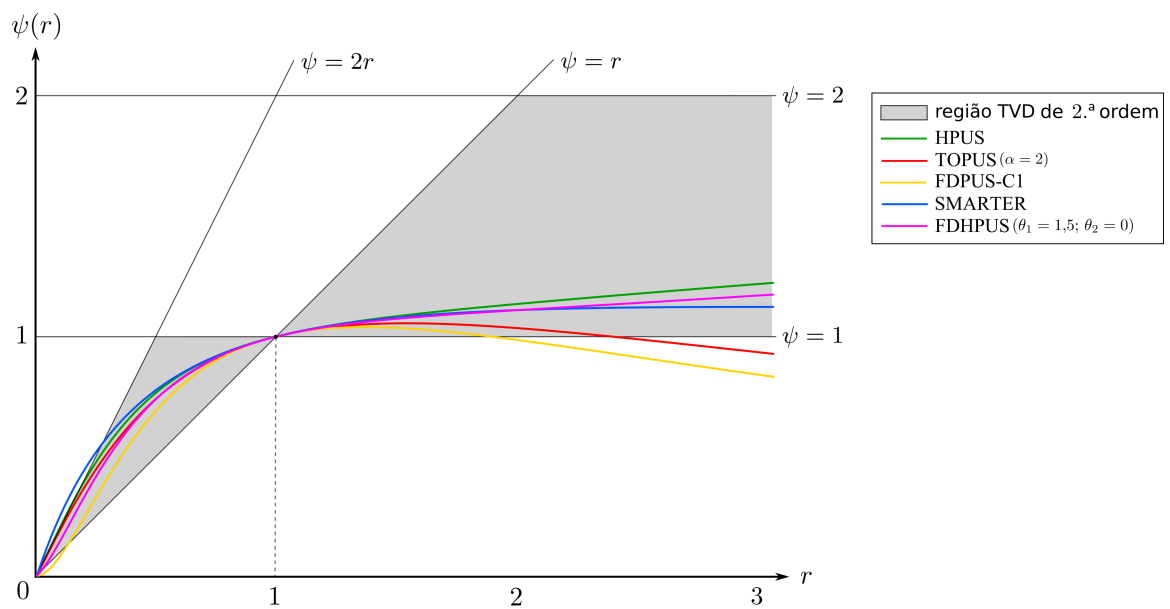


Figura 21 – Limitador de fluxo de alguns esquemas polinomiais *upwind* derivados do esquema FDHPUS.

6 Discretização de Termos Convectivos com Esquemas *Upwind*

Este capítulo apresenta uma breve introdução de como os termos convectivos são discretizados utilizando os esquemas *upwind* propostos neste trabalho.

Considerando um domínio 2D, uma forma típica para discretização do termo convectivo de EDPs pode ser dada na seguinte forma:

$$\frac{\partial(u_j\phi)}{\partial x_j} \Big|_P = - \left(\frac{\partial(u\phi)}{\partial x} \Big|_P + \frac{\partial(v\phi)}{\partial y} \Big|_P \right), \quad (6.1)$$

em que ϕ é a variável convectada (por exemplo, componentes da velocidade u , v) e u_j a velocidade de convecção. O ponto P em (6.1) representa a posição em que o termo convectivo é avaliado. Por exemplo, a Figura 22 ilustra esse ponto P de avaliação, bem como as posições D , R e U , e as faces f e g das células computacionais.

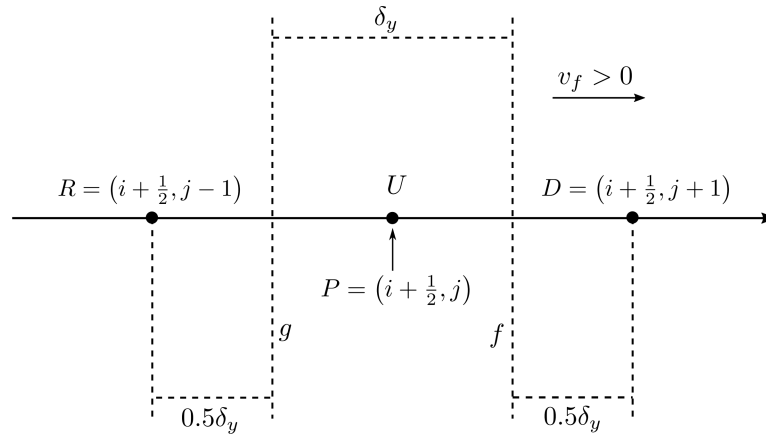


Figura 22 – Célula computacional mostrando o ponto P de discretização dos termos convectivos, seus vizinhos, as faces envolvidas f e g na aproximação e a variável convectada ϕ sendo transportada com velocidade v_f na direção y .

As derivadas no lado direito da expressão (6.1) são aproximadas no ponto P através de derivada central por

$$\frac{\partial(u\phi)}{\partial x} \Big|_P \approx \frac{(u\phi) \Big|_f - (u\phi) \Big|_g}{\delta x} = \frac{u_f\phi_f - u_g\phi_g}{\delta x}, \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial(v\phi)}{\partial y} \Big|_P \approx \frac{(v\phi) \Big|_f - (v\phi) \Big|_g}{\delta y} = \frac{v_f\phi_f - v_g\phi_g}{\delta y}. \quad (6.3)$$

Por simplicidade e sem perda de generalidade, considera-se a variável $\phi = u$ em (6.3) sendo transportada com velocidade v_f na direção y (ver Figura 22). Nesse caso,

$P = (i + \frac{1}{2}, j)$, $f = j + \frac{1}{2}$, $g = j - \frac{1}{2}$, e a derivada é estimada por:

$$\left. \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right|_{(i+\frac{1}{2},j)} = \frac{(v_f u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - v_g u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})}{\delta y}, \quad (6.4)$$

nos quais as velocidades v_f e v_g são aproximadas, respectivamente, utilizando as médias aritméticas:

$$\begin{aligned} v_f &= v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \frac{(v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}})}{2}, \\ v_g &= v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \frac{(v_{i+1,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}})}{2}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Para completar a aproximação, são empregados os esquemas propostos neste trabalho em variáveis não normalizadas. Em particular, são considerados os métodos e as seguintes escolhas:

- o esquema SOBUS definido na equação (4.19);
- o esquema PUBICK para os valores $\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$ definido na equação (4.43);
- o esquema CUBICK para os valores $a = 0,5$ e $b = 0,75$ definido através da equação (4.62);
- e o esquema FDHPUS para os valores $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$ definido na equação (5.6).

Portanto, os valores da propriedade transportada u nas posições $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})$ e $(i + \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2})$ são obtidos utilizando-se os pontos vizinhos D , R e U , que são definidos com base na direção das velocidades de convecção (sinais de v_f e v_g).

Como todo esquema *upwind* de alta resolução, os esquemas SOBUS, PUBICK, CUBICK e FDHPUS utilizam três pontos essenciais do domínio computacional (D , U e R) para estimar a variável convectada. No entanto, podem ocorrer valores fora do domínio de solução para as células computacionais que estão próximas às fronteiras. Nesses casos, o esquema FOU é empregado para garantir a estabilidade e a precisão da solução.

A seguir serão detalhadas as aproximações para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ e $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ para cada esquema para diferentes casos de v_f e v_g em D , R e U . Nas aproximações a seguir, a variável normalizada \hat{u}_U é calculada desta forma:

$$\hat{u}_U = \frac{u_U - u_R}{u_D - u_R}.$$

6.1 Esquema SOBUS

- Aproximação para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U são definidas como $D = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j)$, respectivamente.

O valor $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é então obtido como:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-1} + \left(u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j-1} \right) \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{u}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{u}_U} \right) \right\}, & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+2} + \left(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j+2} \right) \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{u}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{u}_U} \right) \right\}, & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g \geq 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-2} + \left(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-2} \right) \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{u}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{u}_U} \right) \right\}, & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j-1}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $U = (i + \frac{1}{2}, j)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+1} + \left(u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j+1} \right) \left\{ -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{u}_U + \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \left(-\frac{(3-\sqrt{3})}{2} + 3\sqrt{\frac{2-\sqrt{3}}{6} + \frac{\sqrt{3}}{3}\hat{u}_U} \right) \right\}, & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

6.2 Esquema PUBICK

- Aproximação para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U são definidas como $D = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j)$, respectivamente.

O valor $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é então obtido como:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-1} + (u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}) \left(\frac{9}{2}\hat{u}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{9 - 10\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0; 0,5], \\ u_{i+\frac{1}{2},j-1} + (u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}) \left(\frac{3}{2}\hat{u}_U - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{7 - 6\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0,5; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j+2}) \left(\frac{9}{2}\hat{u}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{9 - 10\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0; 0,5[, \\ u_{i+\frac{1}{2},j+2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j+2}) \left(\frac{3}{2}\hat{u}_U - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{7 - 6\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0,5; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1}, & \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$
- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g \geq 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-2}) \left(\frac{9}{2}\hat{u}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{9 - 10\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0; 0,5[, \\ u_{i+\frac{1}{2},j-2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-2}) \left(\frac{3}{2}\hat{u}_U - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{7 - 6\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0,5; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j-1}, & \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$
- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $U = (i + \frac{1}{2}, j)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+1} + (u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j+1}) \left(\frac{9}{2}\hat{u}_U - \frac{9}{2} + \frac{3}{2}\sqrt{9 - 10\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0; 0,5[, \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1} + (u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j+1}) \left(\frac{3}{2}\hat{u}_U - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{7 - 6\hat{u}_U} \right), & \hat{u}_U \in [0,5; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

6.3 Esquema CUBICK

Seja a função polinomial $\mathcal{F}(t) = 2,25t(1-t)^2 + 3dt^2(1-t) + t^3$ do esquema CUBICK em análise. O parâmetro d é obtido da resolução do sistema não linear (4.52), o qual $d = 0,674287$ considerando seis casas decimais. O valor de t , que depende \hat{u}_U , é calculado através da equação (4.58).

- Aproximação para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U são definidas como $D = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j)$, respectivamente. O valor de $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é então obtido como:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-1} + (u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}) \mathcal{F}(t), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j+2}) \mathcal{F}(t), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1}, & \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g \geq 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-2}) \mathcal{F}(t), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j-1}, & \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $U = (i + \frac{1}{2}, j)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+1} + (u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j+1}) \mathcal{F}(t), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

6.4 Esquema FDHPUS

- Aproximação para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f \geq 0$; nesse caso, as posições D , R e U são definidas como $D = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j)$. O valor $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é então obtido como:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-1} + (u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j-1}) (-6\hat{u}_U^5 + 16\hat{u}_U^4 + \\ \quad -14,5\hat{u}_U^3 + 4\hat{u}_U^2 + 1,5\hat{u}_U), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ quando $v_f < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j+2}) (-6\hat{u}_U^5 + 16\hat{u}_U^4 + \\ \quad -14,5\hat{u}_U^3 + 4\hat{u}_U^2 + 1,5\hat{u}_U), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j+1}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g \geq 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j - 2)$ e $U = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j-2} + (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-2}) (-6\hat{u}_U^5 + 16\hat{u}_U^4 + \\ \quad -14,5\hat{u}_U^3 + 4\hat{u}_U^2 + 1,5\hat{u}_U), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j-1}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1], \end{cases}$$

- para $u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ quando $v_g < 0$: $D = (i + \frac{1}{2}, j - 1)$, $R = (i + \frac{1}{2}, j + 1)$, $U = (i + \frac{1}{2}, j)$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j+1} + (u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j+1}) (-6\hat{u}_U^5 + 16\hat{u}_U^4 + \\ \quad -14,5\hat{u}_U^3 + 4\hat{u}_U^2 + 1,5\hat{u}_U), & \hat{u}_U \in [0; 1], \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \text{para } \hat{u}_U \notin [0; 1]. \end{cases}$$

7 Resultados Numéricos 1D e 2D

Este capítulo tem como objetivo demonstrar o comportamento, a validade, a flexibilidade e a robustez das famílias de esquemas CUBICK, PUBICK e do esquema SOBUS, baseados em curvas de Bézier descritos no Capítulo 4, bem como da família de esquemas FDHPUS, baseada na interpolação de Hermite, descrita no Capítulo 5. Os esquemas foram implementados em código próprio e também no ambiente computacional `OpenFOAM` [50], projetado para resolver problemas em dinâmica de fluidos computacional. Além disso, o esquema FOU e esquemas *upwind* de alta ordem, como ADBQUICKEST, HPUS, MINMOD, SMART, Superbee e TOPUS também foram implementados para comparação com os esquemas propostos.

Para todos os experimentos numéricos apresentados aqui, a discretização temporal do problema correspondente foi tratada utilizando o método de Euler explícito, que é de primeira ordem. No problema de convecção-difusão, a derivada segunda no espaço foi discretizada via esquema numérico de segunda ordem. Os métodos foram avaliados na solução numérica da equação de advecção linear, da equação de difusão-convecção, das equações de Euler, e no problema *benchmark* do escoamento incompressível bidimensional em uma cavidade quadrada, também conhecido como *lid-driven cavity*. Erros e taxas de convergência foram estimados e comparados entre os diferentes métodos e casos explorados neste trabalho.

O esquema CUBICK proposto foi avaliado usando as seguintes opções para os parâmetros $(a; b) \in \{(0,5; 0,75), (0,25; 0,45)\}$. O esquema PUBICK foi avaliado com $(\mu_1; \mu_2) \in \{(3/10; 5/6), (0,493; 0,57)\}$. O esquema FDHPUS foi avaliado usando os parâmetros $\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$. Em todos os experimentos numéricos com o esquema TOPUS, foi adotado $\alpha = 2$, seguindo recomendações da literatura [5].

7.1 Problema 1D de Advecção Linear

7.1.1 Condição Inicial Suave

Para o primeiro caso de teste, o problema (2.1) foi resolvido considerando $a = 1$, o domínio $\Omega = [-1; 1]$ e uma condição inicial suave [51], dada por:

$$u_0(x) = \text{sen}^4(\pi x). \quad (7.1)$$

As malhas numéricas compostas por $N = \{80; 160; 320; 640\}$ células computacionais, com espaçamentos dados por $\delta x = \frac{2}{N}$, foram adotadas para os experimentos. O tempo final da simulação foi considerado como $t_f = 0,5$, e o espaçamento temporal $\delta t = 0,001\delta x$.

As Figuras 23 e 24 mostram os resultados dos esquemas numéricos na resolução da equação de advecção linear com esta condição inicial. A partir dos resultados, pode-se

observar que todos os esquemas forneceram resultados aceitáveis e apresentaram boas aproximações para a solução exata conhecida.

A Tabela 4 a seguir apresenta os erros, bem como as estimativas da ordem de precisão para os esquemas CUBICK, PUBICK, SOBUS, FDHPUS, HPUS [16], ADBQUICKEST [37], TOPUS [5], SMART [12] e FOU [32]. Os resultados dos esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS e SOBUS apresentaram precisões e taxas de convergência similares as obtidas por TOPUS, SMART, HPUS e ADBQUICKEST, utilizados para fins de comparação. Além disso, pode-se observar na tabela que, com exceção do esquema FOU, os diferentes esquemas preservaram uma precisão de segunda ordem no caso do erro $\|E\|_1$ (norma L_1). Nota-se também que o esquema ADBQUICKEST apresentou erros menores do que os outros esquemas; em seguida, vêm os esquemas SMART, SOBUS e PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$ e $\mu_2 = \frac{5}{6}$).

7.1.2 Condição Inicial na Forma de um “W”

O próximo caso explora um cenário mais desafiador proposto por Wei e Gu [52]. O problema consiste em resolver a equação (2.1) com $a = 1$, no domínio $\Omega = [-1; 1]$, e a seguinte condição inicial na forma de um “W”:

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0; 0, 2] \cup (0, 6; 0, 8], \\ 4x - 0, 6, & x \in (0, 2; 0, 4], \\ -4x + 2, 6, & x \in (0, 4; 0, 6], \\ 0, & x \in [-1; 0) \cup (0, 8; 1]. \end{cases} \quad (7.2)$$

Para este caso, foram adotadas as seguintes condições: $N = 400$, espaçamento $\delta x = 0,005$, $\delta t = 0,5\delta x$ e tempo final da simulação igual a $t_f = 0,125$. Os resultados numéricos usando os vários esquemas *upwind* mencionados anteriormente são apresentados nas Figuras 25 e 26. Pode-se notar que as soluções obtidas pelos esquemas CUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), PUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), FDHPUS, HPUS, ADBQUICKEST e TOPUS estão em boa concordância com a solução exata. Como esperado, o esquema FOU também apresenta uma precisão razoável com alguma difusão numérica, enquanto os esquemas SMART e SOBUS apresentam oscilações próximas às descontinuidades na solução; isso pode ocorrer porque os esquemas SMART e SOBUS não atendem os critérios de estabilidade TVD.

Vale ressaltar a difusão numérica dos métodos observada nas simulações do problema com uma onda em forma de “W” em movimento. Neste problema com descontinuidades, a solução numérica usando os esquemas CUBICK, PUBICK e FDHPUS apresentou reduzida difusão numérica, ao contrário do que ocorreu com os esquemas FOU, SMART e SOBUS. O esquema FOU exibe um comportamento difusivo que suaviza os extremos da solução. Já os esquemas SMART e SOBUS introduziram efeitos dispersivos que levaram a oscilações

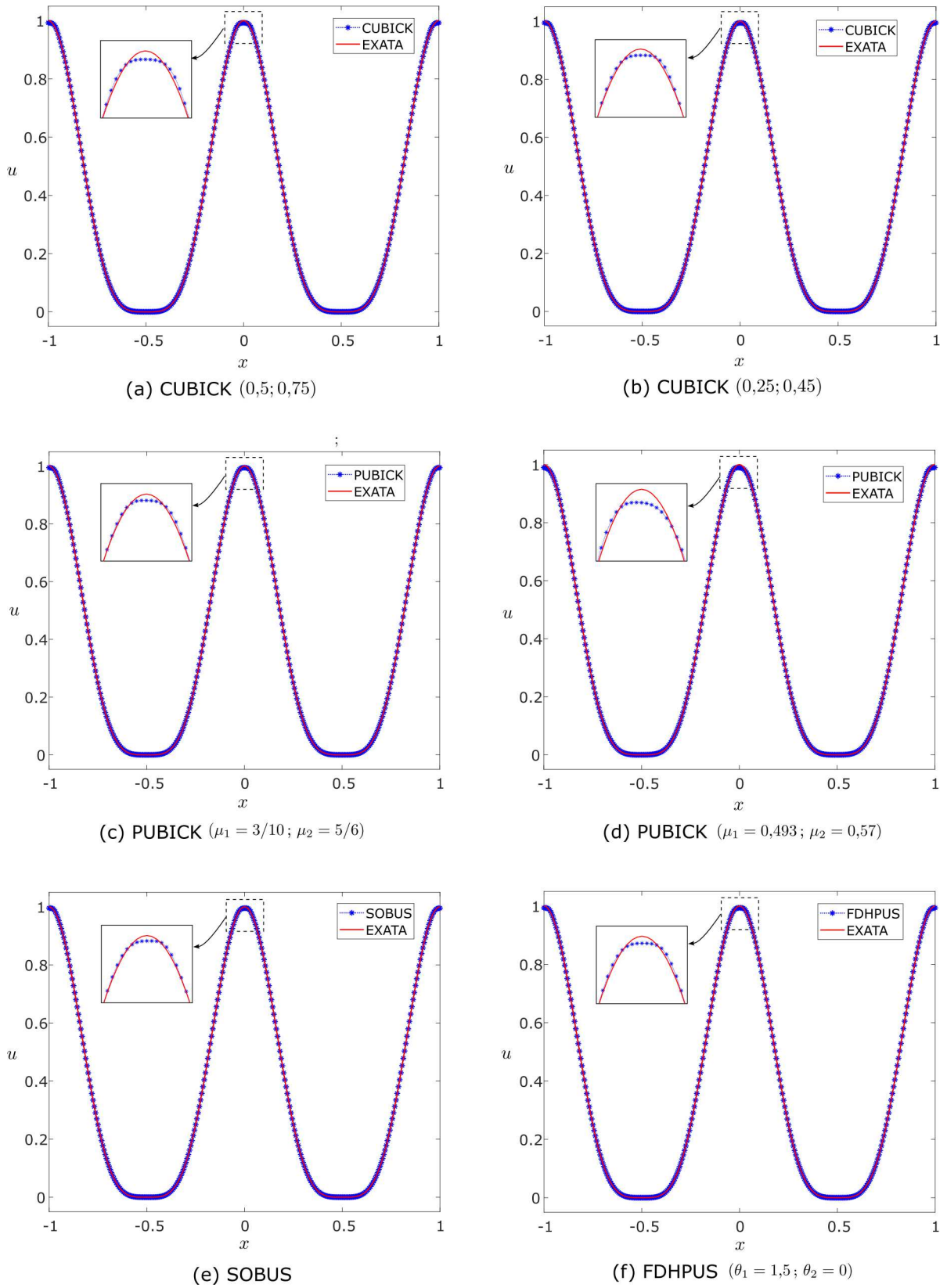
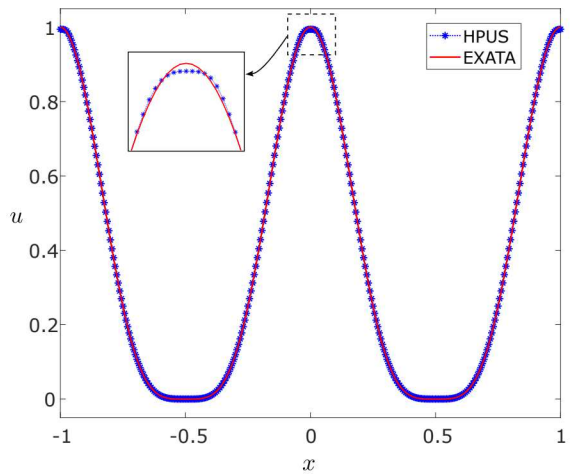
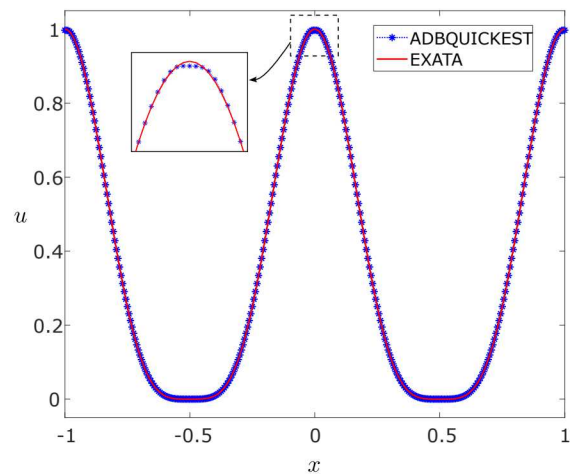


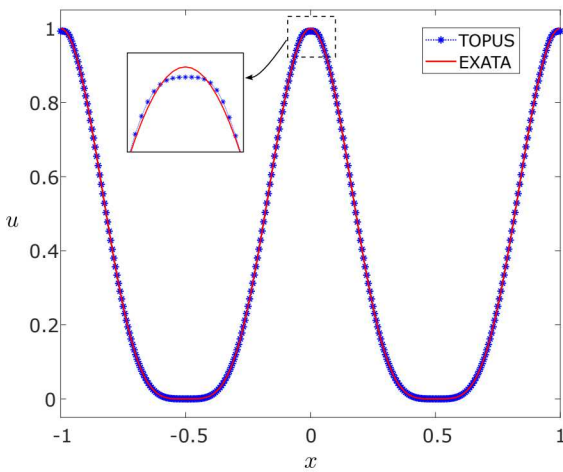
Figura 23 – Resultados das simulações do caso 1 (condição inicial suave) da equação de advecção linear usando $N = 320$ para os esquemas numéricos CUBICK, PUBICK, SOBUS e FDHPUS.



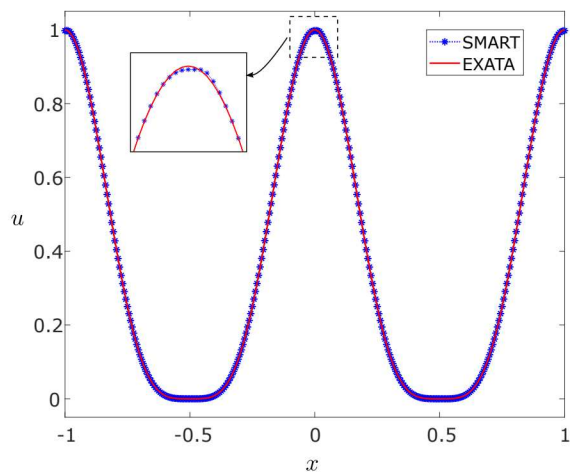
(g) HPUS



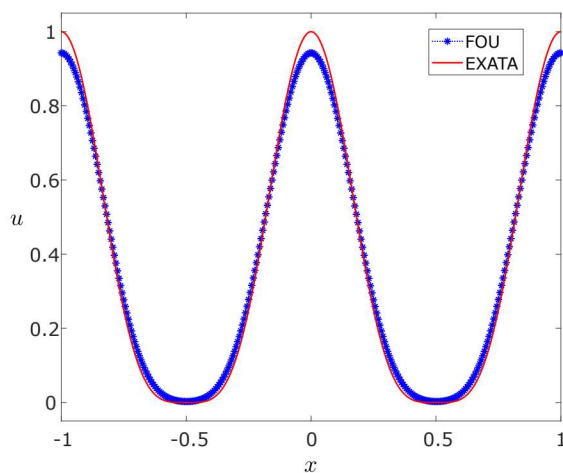
(h) ADBQUICKEST



(i) TOPUS



(j) SMART



(k) FOU

Figura 24 – Resultados das simulações do caso 1 (condição inicial suave) da equação de advecção linear usando $N = 320$ para os esquemas numéricos HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.

Esquema	N	erro $\ E\ _1$	ordem $\ E\ _1$	erro $\ E\ _2$	ordem $\ E\ _2$	erro $\ E\ _\infty$	ordem $\ E\ _\infty$
CUBICK (0,5; 0,75)	80	$2,378 \times 10^{-2}$	—	$2,809 \times 10^{-2}$	—	$4,783 \times 10^{-2}$	—
	160	$5,997 \times 10^{-3}$	1,987	$8,870 \times 10^{-3}$	1,663	$1,898 \times 10^{-2}$	1,333
	320	$1,487 \times 10^{-3}$	2,012	$2,678 \times 10^{-3}$	1,728	$7,276 \times 10^{-3}$	1,383
	640	$3,604 \times 10^{-4}$	2,045	$7,912 \times 10^{-4}$	1,759	$2,733 \times 10^{-3}$	1,413
CUBICK (0,25; 0,45)	80	$1,655 \times 10^{-2}$	—	$2,078 \times 10^{-2}$	—	$3,843 \times 10^{-2}$	—
	160	$4,363 \times 10^{-3}$	1,924	$6,334 \times 10^{-3}$	1,714	$1,470 \times 10^{-2}$	1,386
	320	$1,079 \times 10^{-3}$	2,015	$1,869 \times 10^{-3}$	1,761	$5,489 \times 10^{-3}$	1,421
	640	$2,642 \times 10^{-4}$	2,031	$5,430 \times 10^{-4}$	1,783	$2,019 \times 10^{-3}$	1,443
PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$) ($\mu_2 = \frac{5}{6}$)	80	$1,579 \times 10^{-2}$	—	$2,000 \times 10^{-2}$	—	$3,751 \times 10^{-2}$	—
	160	$4,113 \times 10^{-3}$	1,941	$6,174 \times 10^{-3}$	1,696	$1,448 \times 10^{-2}$	1,374
	320	$1,031 \times 10^{-3}$	1,996	$1,846 \times 10^{-3}$	1,742	$5,475 \times 10^{-3}$	1,403
	640	$2,558 \times 10^{-4}$	2,011	$5,457 \times 10^{-4}$	1,759	$2,046 \times 10^{-3}$	1,420
PUBICK ($\mu_1 = 0,493$) ($\mu_2 = 0,57$)	80	$3,650 \times 10^{-2}$	—	$3,718 \times 10^{-2}$	—	$5,787 \times 10^{-2}$	—
	160	$1,115 \times 10^{-2}$	1,711	$1,298 \times 10^{-2}$	1,518	$2,465 \times 10^{-2}$	1,231
	320	$3,023 \times 10^{-3}$	1,883	$4,050 \times 10^{-3}$	1,680	$1,015 \times 10^{-2}$	1,280
	640	$7,747 \times 10^{-4}$	1,964	$1,256 \times 10^{-3}$	1,689	$4,097 \times 10^{-3}$	1,309
SOBUS	80	$1,367 \times 10^{-2}$	—	$1,724 \times 10^{-2}$	—	$3,306 \times 10^{-2}$	—
	160	$3,684 \times 10^{-3}$	1,892	$5,167 \times 10^{-3}$	1,739	$1,245 \times 10^{-2}$	1,409
	320	$9,246 \times 10^{-4}$	1,994	$1,512 \times 10^{-3}$	1,773	$4,602 \times 10^{-3}$	1,436
	640	$2,256 \times 10^{-4}$	2,035	$4,381 \times 10^{-4}$	1,787	$1,682 \times 10^{-3}$	1,452
FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$) ($\theta_2 = 0$)	80	$1,863 \times 10^{-2}$	—	$2,278 \times 10^{-2}$	—	$4,093 \times 10^{-2}$	—
	160	$4,824 \times 10^{-3}$	1,950	$7,084 \times 10^{-3}$	1,685	$1,598 \times 10^{-2}$	1,357
	320	$1,214 \times 10^{-3}$	1,991	$2,127 \times 10^{-3}$	1,736	$6,074 \times 10^{-3}$	1,396
	640	$2,964 \times 10^{-4}$	2,034	$6,278 \times 10^{-4}$	1,761	$2,271 \times 10^{-3}$	1,419
HPUS	80	$1,628 \times 10^{-2}$	—	$2,017 \times 10^{-2}$	—	$3,739 \times 10^{-2}$	—
	160	$4,295 \times 10^{-3}$	1,923	$6,208 \times 10^{-3}$	1,700	$1,442 \times 10^{-2}$	1,375
	320	$1,074 \times 10^{-3}$	1,999	$1,853 \times 10^{-3}$	1,744	$5,435 \times 10^{-3}$	1,407
	640	$2,654 \times 10^{-4}$	2,017	$5,452 \times 10^{-4}$	1,765	$2,020 \times 10^{-3}$	1,428
ADBQUICKEST	80	$8,096 \times 10^{-3}$	—	$1,087 \times 10^{-2}$	—	$2,440 \times 10^{-2}$	—
	160	$1,597 \times 10^{-3}$	2,341	$2,890 \times 10^{-3}$	1,911	$8,289 \times 10^{-3}$	1,558
	320	$3,150 \times 10^{-4}$	2,343	$7,555 \times 10^{-4}$	1,935	$2,806 \times 10^{-3}$	1,563
	640	$5,953 \times 10^{-5}$	2,403	$1,928 \times 10^{-4}$	1,970	$9,408 \times 10^{-4}$	1,577
TOPUS	80	$2,244 \times 10^{-2}$	—	$2,718 \times 10^{-2}$	—	$4,643 \times 10^{-2}$	—
	160	$5,634 \times 10^{-3}$	1,994	$8,378 \times 10^{-3}$	1,698	$1,818 \times 10^{-2}$	1,353
	320	$1,401 \times 10^{-3}$	2,008	$2,484 \times 10^{-3}$	1,754	$6,885 \times 10^{-3}$	1,401
	640	$3,364 \times 10^{-4}$	2,058	$7,236 \times 10^{-4}$	1,779	$2,558 \times 10^{-3}$	1,428
SMART	80	$9,482 \times 10^{-3}$	—	$9,899 \times 10^{-3}$	—	$1,962 \times 10^{-2}$	—
	160	$2,456 \times 10^{-3}$	1,949	$2,851 \times 10^{-3}$	1,796	$6,655 \times 10^{-3}$	1,560
	320	$6,207 \times 10^{-4}$	1,984	$8,391 \times 10^{-4}$	1,765	$2,316 \times 10^{-3}$	1,523
	640	$1,554 \times 10^{-4}$	1,998	$2,495 \times 10^{-4}$	1,750	$9,458 \times 10^{-4}$	1,292
FOU	80	$2,190 \times 10^{-1}$	—	$1,818 \times 10^{-1}$	—	$1,873 \times 10^{-1}$	—
	160	$1,211 \times 10^{-1}$	0,855	$1,023 \times 10^{-1}$	0,829	$1,066 \times 10^{-1}$	0,814
	320	$6,402 \times 10^{-2}$	0,920	$5,473 \times 10^{-2}$	0,903	$5,718 \times 10^{-2}$	0,898
	640	$3,296 \times 10^{-2}$	0,958	$2,837 \times 10^{-2}$	0,948	$2,966 \times 10^{-2}$	0,947

Tabela 4 – Equação de advecção linear: estudo de convergência no domínio $\Omega = [-1; 1]$ com condição inicial suave utilizando os esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS, SOBUS, HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.

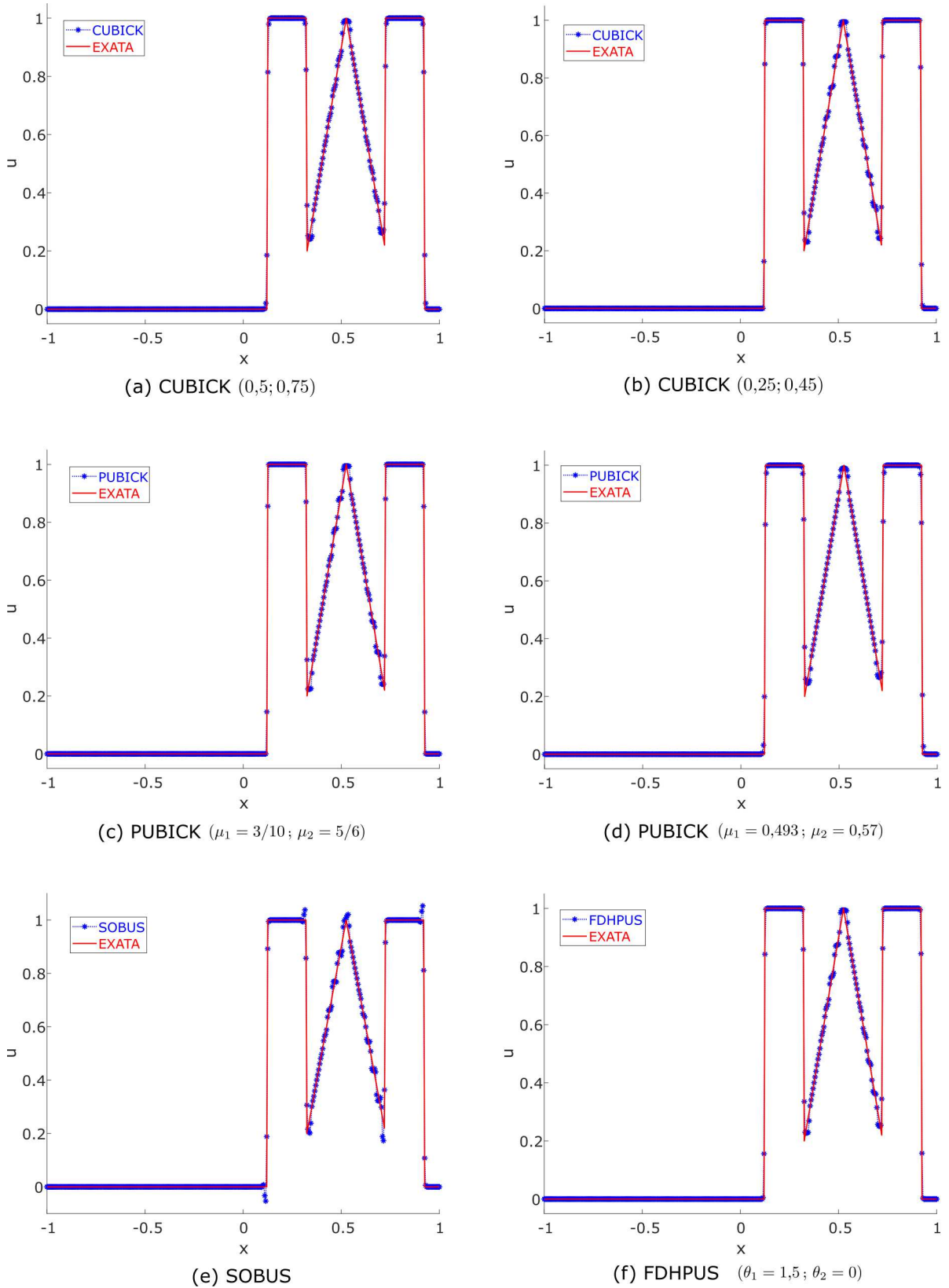
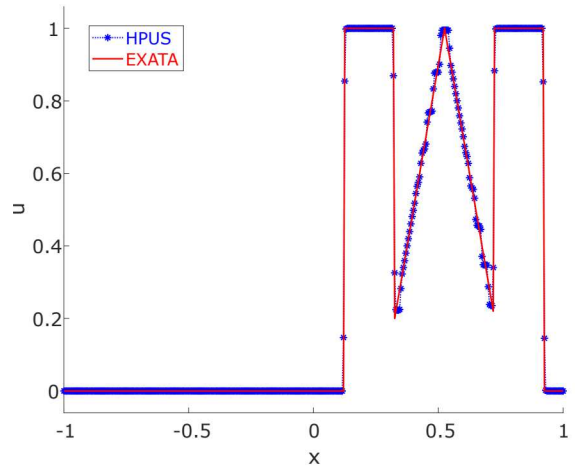
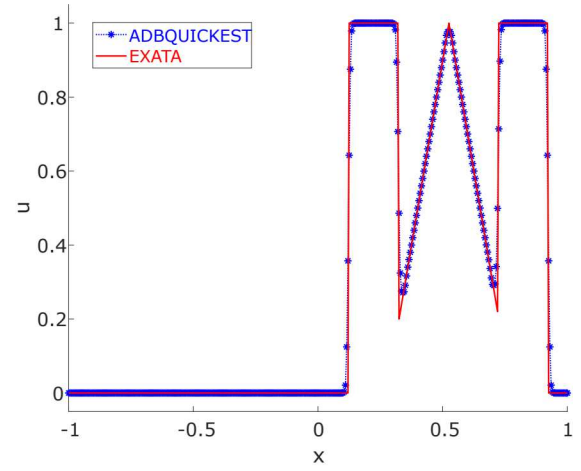


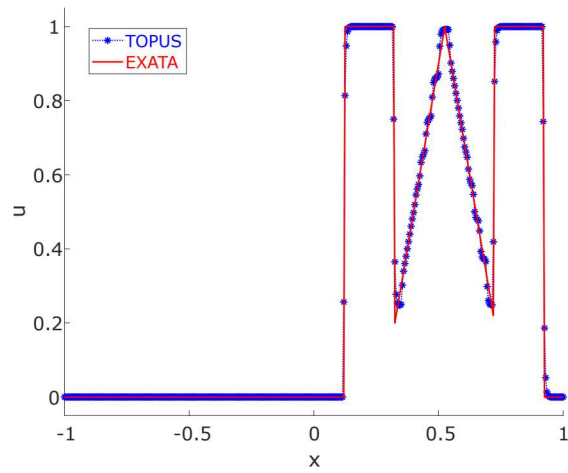
Figura 25 – Resultados das simulações do caso 2 da equação de advecção linear empregando os esquemas numéricos CUBICK, PUBICK, SOBUS e FDHPUS.



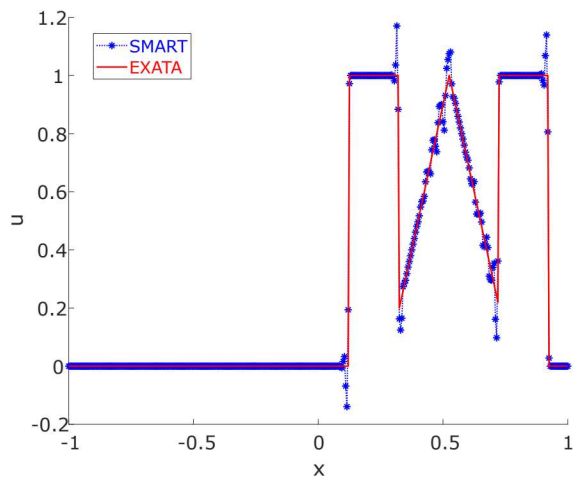
(g) HPUS



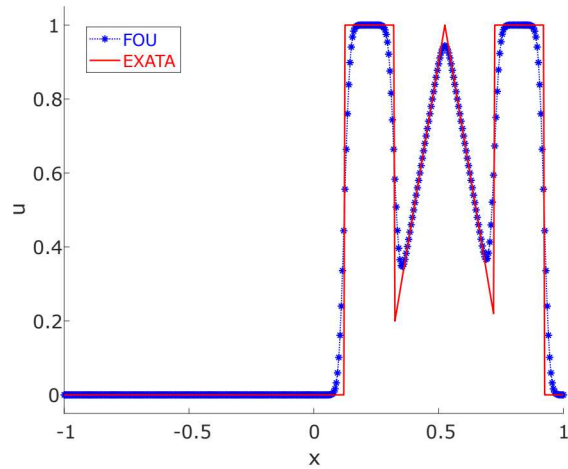
(h) ADBQUICKEST



(i) TOPUS



(j) SMART



(k) FOU

Figura 26 – Resultados das simulações do caso 2 da equação de advecção linear empregando os esquemas numéricos HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU.

não físicas. Por outro lado, os picos no perfil advectado foram adequadamente capturados pelos esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS, HPUS e TOPUS.

7.1.3 Análise da Restrição TVD

Neste caso, a restrição TVD é analisada para os esquemas propostos: CUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), PUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), SOBUS, FDHPUS; e para os esquemas HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU. Para isso, considerou-se a equação de advecção linear (2.1) com $a = 1$, no domínio $x \in [-1; 5]$, e a seguinte condição inicial:

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [-\frac{1}{3}; \frac{1}{3}], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.3)$$

Para esta análise, foram utilizadas as malhas $N = 50, 100$ e 200 , com espaçamento $\delta x = \frac{6}{N}$, $\delta t = 0,5\delta x$, e tempo final $t_f = 4$.

No lado esquerdo das Figuras 27, 28, 29 e 30 são apresentadas as soluções dos esquemas mencionados para as malhas $N = 50, 100$ e 200 . Na parte direita dessas figuras, é apresentada a análise da TV (equação (3.3)) dos esquemas.

Na Figura 27, pode-se observar que a TV do esquema CUBICK (0,5; 0,75) para as malhas $N = 100$ e $N = 200$ converge para a TV exata ($TV(u(t)) = 2$); e, para a malha $N = 50$, o valor da TV diminui com o tempo devido à maior dissipação numérica do método para essa discretização. Como a TV do esquema converge para o valor exato, não apresenta oscilações e não aumenta com o tempo, comprova-se de forma computacional que o esquema é TVD (equação (3.4)). Para o esquema CUBICK (0,25; 0,45), observa-se que, nas malhas $N = 100$ e $N = 200$, a TV também converge para o valor exato, enquanto, na malha $N = 50$, a TV diminui. Para o esquema PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$; $\mu_2 = \frac{5}{6}$), a TV para as malhas $N = 50, 100$ e 200 converge para a TV exato, comprovando que o esquema também é TVD.

Na Figura 28, a TV para a malha $N = 200$ do esquema PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$) converge para a TV exata, enquanto a TV para as malhas $N = 50$ e 100 diminui. Como a TV do PUBICK não aumenta e converge para a TV exata quando a malha é refinada, isso mostra que o esquema é TVD. Para o esquema SOBUS, pode-se notar no lado esquerdo da figura que o esquema apresenta oscilações na convergência de suas malhas, enquanto no lado direito da figura observa-se que as TV para as malhas $N = 50, 100$ e 200 não diminuem nem convergem para a TV exata, apresentando oscilações e aumentando o valor da TV com o tempo. Esse comportamento era esperado, já que o esquema não é TVD. Para o esquema FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$ e $\theta_2 = 0$), a TV para as malhas $N = 100$ e 200 converge para a TV exato, enquanto a TV para a malha $N = 50$ diminui com o tempo, verificando que o esquema é TVD.

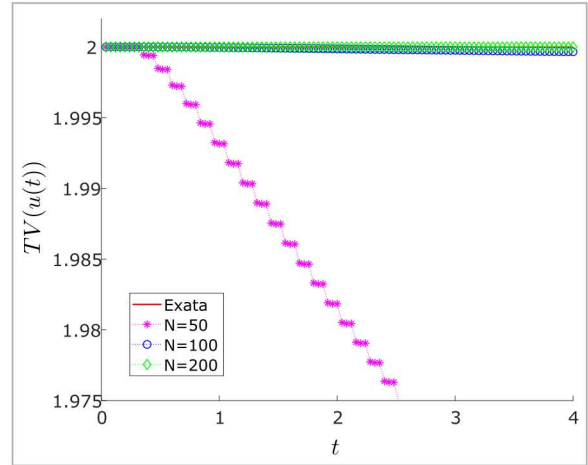
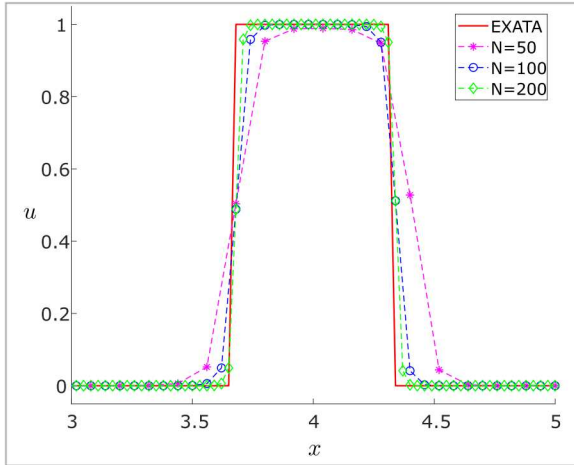
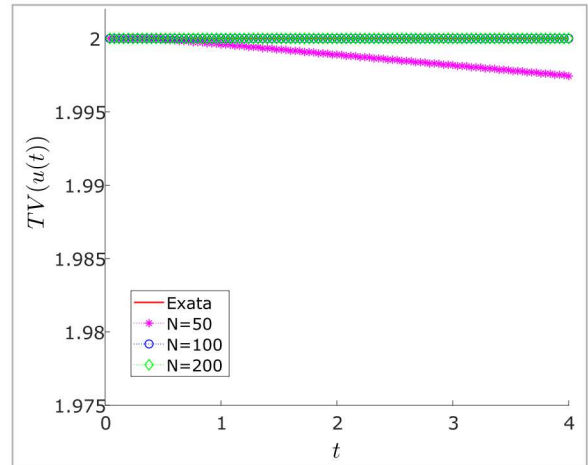
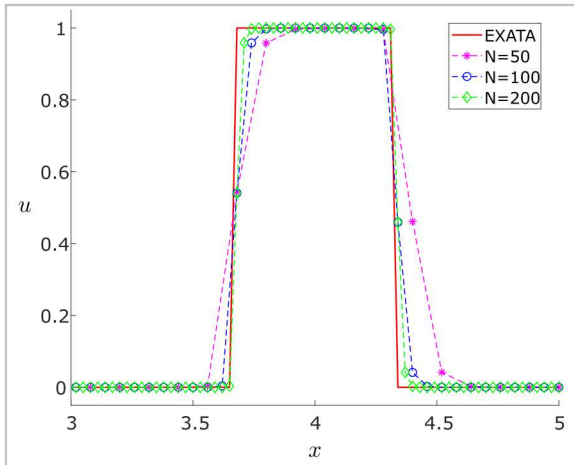
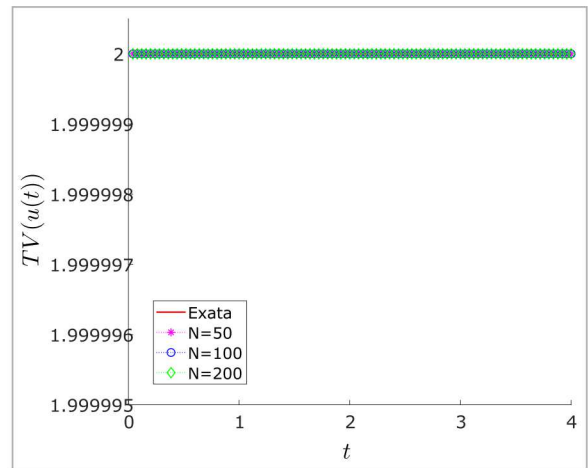
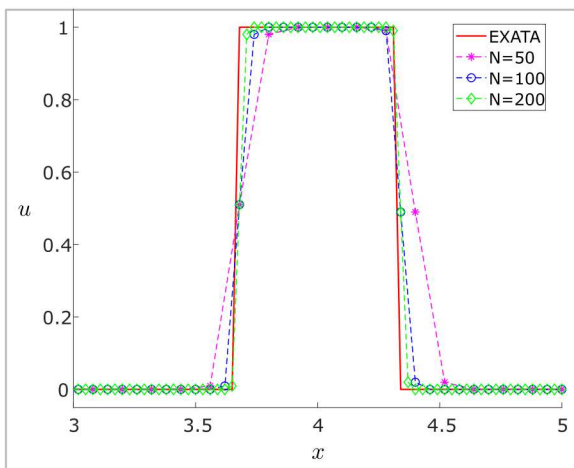
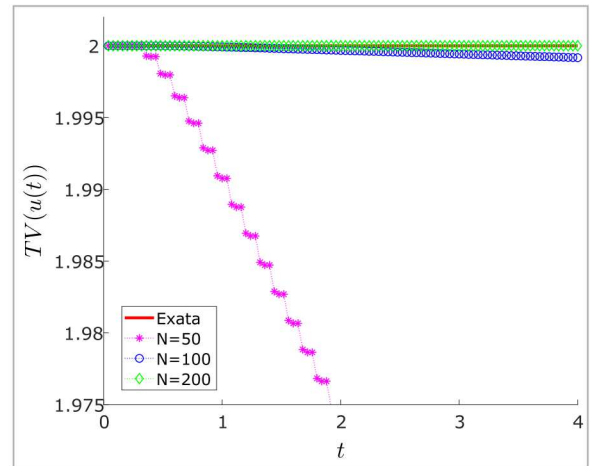
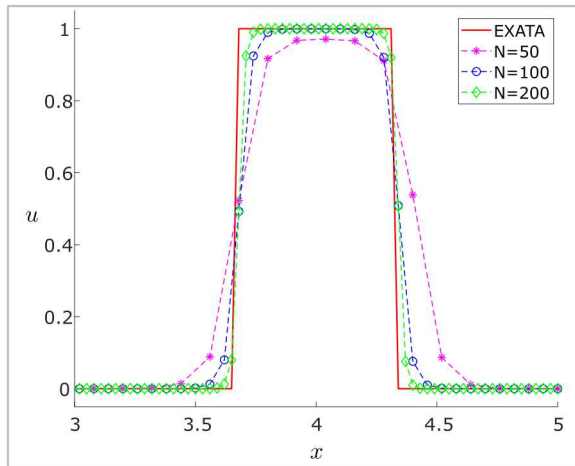
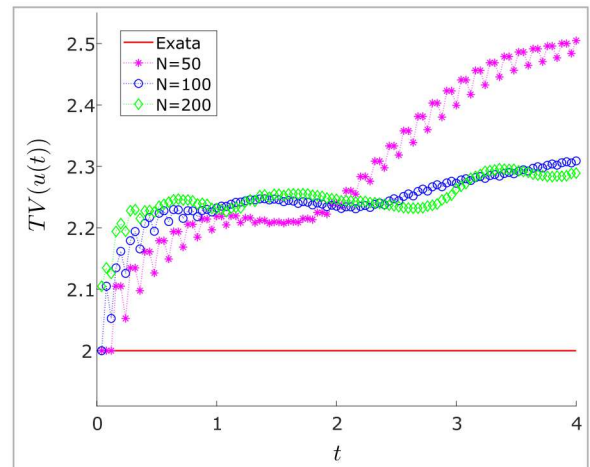
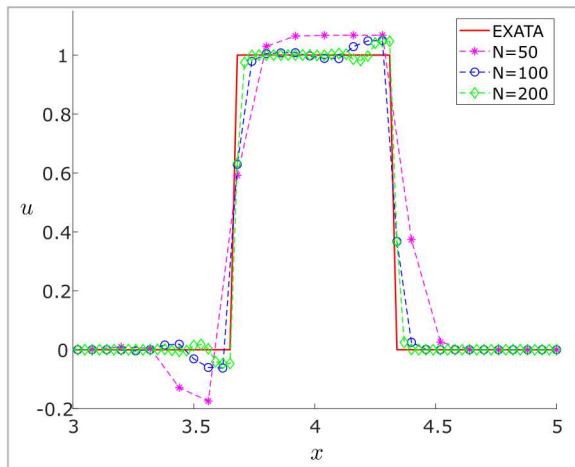
(a) CUBICK $(0,5; 0,75)$ (b) CUBICK $(0,25; 0,45)$ (c) PUBICK $(\mu_1 = 3/10; \mu_2 = 5/6)$

Figura 27 – Análise da restrição TVD para os esquemas CUBICK e PUBICK.

(d) PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$)

(e) SOBUS

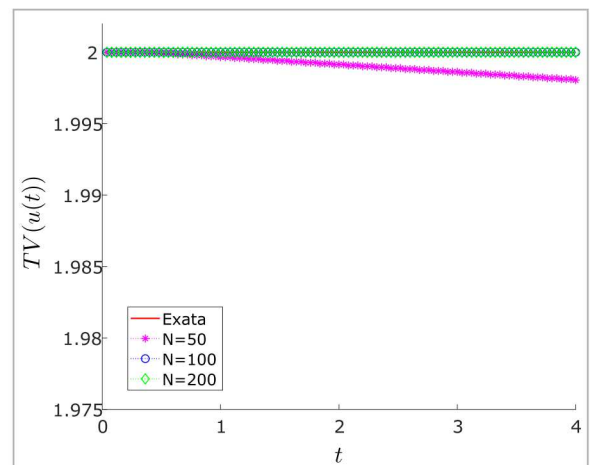
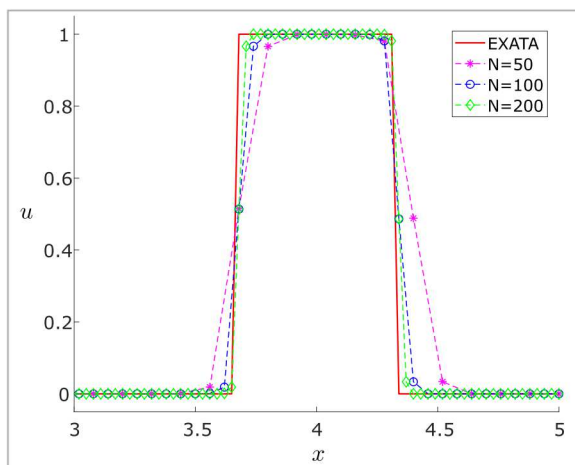
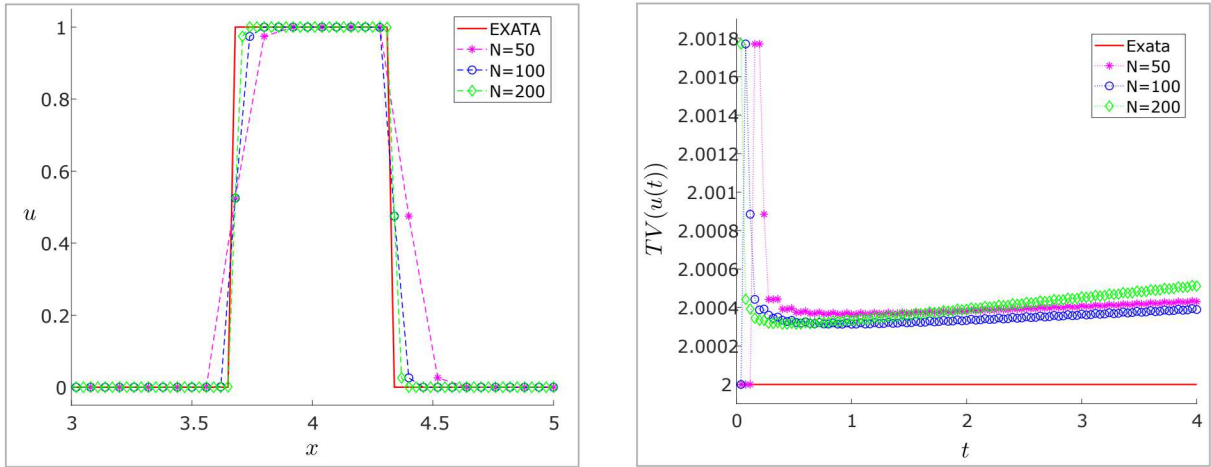
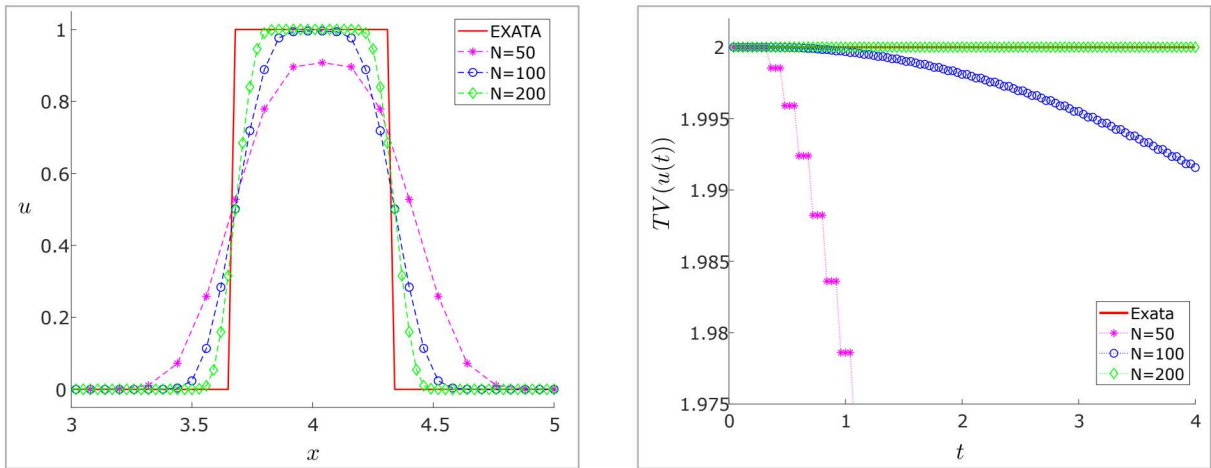
(f) FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$; $\theta_2 = 0$)

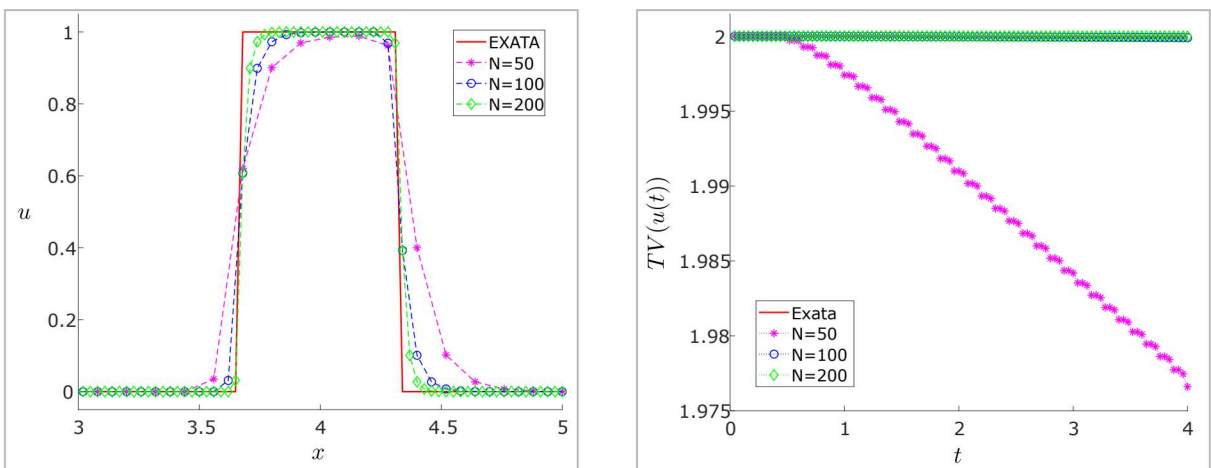
Figura 28 – Análise da restrição TVD para os esquemas PUBICK, SOBUS e FDHPUS.



(g) HPUS

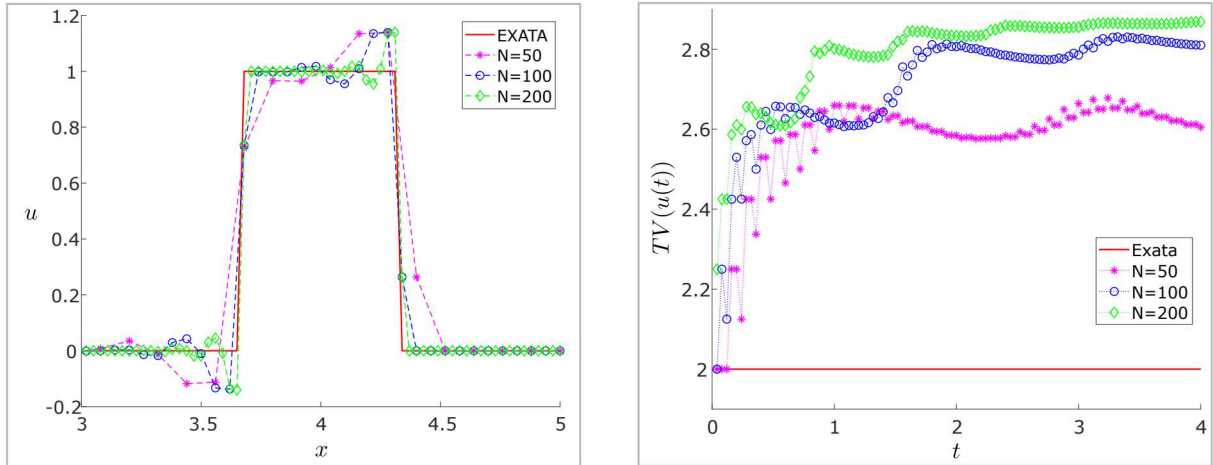


(h) ADBQUICKEST

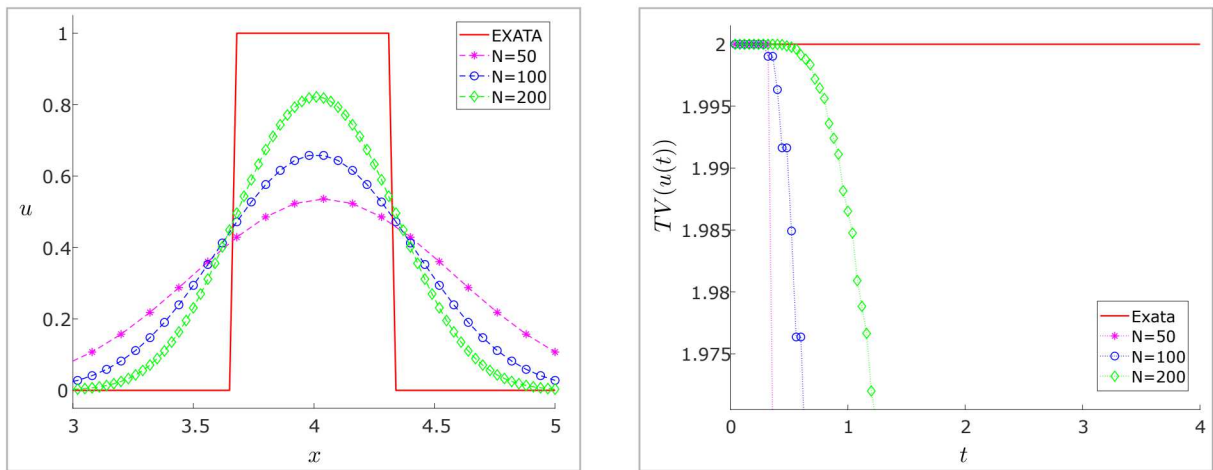


(i) TOPUS

Figura 29 – Análise da restrição TVD para os esquemas HPUS, ADBQUICKEST e TOPUS.



(j) SMART



(k) FOU

Figura 30 – Análise da restrição TVD para os esquemas SMART e FOU.

Na Figura 29, pode-se verificar que o esquema HPUS não é TVD, pois a TV para as malhas $N = 50, 100$ e 200 apresenta oscilações, não converge para a TV exata e aumenta com o tempo. Por outro lado, pode-se observar que o esquema ADBQUICKEST é TVD, pois a TV converge para o valor esperado. O esquema TOPUS também é TVD, já que a TV converge para o valor exato no estudo com as malhas $N = 50, 100$ e 200 .

Por fim, a Figura 30 mostra a análise computacional da TV para os esquemas SMART e FOU. O esquema SMART apresenta oscilações na solução numérica para as malhas $N = 50, 100$ e 200 , e a TV aumenta com o tempo, concluindo-se assim, como esperado, o esquema não é TVD. Já para o esquema FOU, observa-se que a solução aproximada possui um alto nível de dissipação numérica e, conseqüentemente, a TV para as malhas $N = 50, 100$ e 200 diminui com o tempo, sem apresentar oscilações ou crescimento, verificando que o esquema é TVD.

Pode-se notar que as soluções obtidas pelos esquemas analisados: CUBICK (ambas escolhas de parâmetros), PUBICK (ambas escolhas de parâmetros), FDHPUS, HPUS, ADBQUICKEST e por TOPUS estão em boa concordância com a solução exata. Diferentemente dos esquemas SMART e SOBUS que apresentaram oscilações em suas soluções numéricas, verificando no cálculo de sua TV, que os esquemas SMART e SOBUS não são TVD. Pode-se notar também que o esquema PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$, $\mu_2 = \frac{5}{6}$), apresentou melhor convergência em relação à TV para as malhas analisadas em direção à TV exata.

Utilizando a malha $N = 50$, conclui-se que os esquemas ADBQUICKEST, TOPUS, CUBICK (0,5; 0,75) e PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$) apresentaram maior difusão numérica, pois a TV diminui rapidamente com o tempo. Assim, o PUBICK ($\mu_1 = 3/10$; $\mu_2 = 5/6$) foi o único esquema que praticamente não apresentou difusão numérica, independentemente da malha utilizada.

7.2 Problemas 1D de Convecção-Difusão

7.2.1 Equação da Camada Limite

A seguir, a equação da camada limite (2.7) foi resolvida utilizando os esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS, SOBUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART, HPUS e FOU. A Tabela 5 apresenta estimativas, em diversas normas, da taxa de convergência para esses esquemas, usando as malhas computacionais $N = \{512; 1024; 2048; 4096\}$ com o espaçamentos $\delta x = \frac{1}{N}$. As simulações foram realizadas com $\delta t = 0,01\delta x$, $Re = 100$ e $t_f = 0,5$.

A partir da Tabela 5, pode-se observar que os esquemas CUBICK, PUBICK, SOBUS, FDHPUS, HPUS, TOPUS e SMART se aproximam da precisão de segunda ordem, enquanto o esquema ADBQUICKEST não consegue atingi-la, e o esquema FOU atinge a primeira ordem, como esperado. Neste estudo, o esquema SMART obteve os menores erros numéricos, seguido pelo esquema SOBUS e pelo esquema CUBICK (0,25; 0,45).

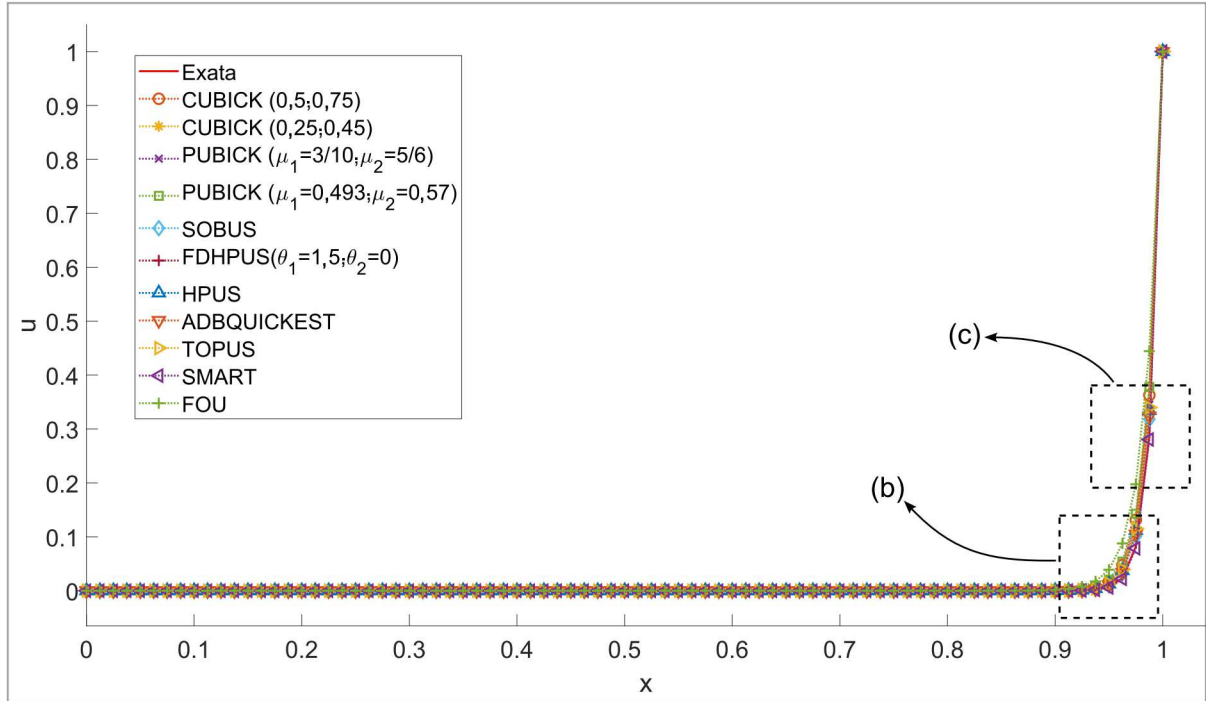
As soluções numéricas e exatas usando a malha $N = 80$ são mostradas na Figura 31, que foram obtidas com os esquemas CUBICK, PUBICK, FDHPUS, SOBUS, ADBQUICKEST, TOPUS, SMART e FOU. Os resultados dos esquemas PUBICK, FDHPUS, SOBUS, ADBQUICKEST, TOPUS e SMART estão de acordo com a solução exata e são bastante semelhantes entre si, como pode ser observado nas Figuras 31-(a), 31-(b) e 31-(c).

7.2.2 Equação de Burgers Viscosa

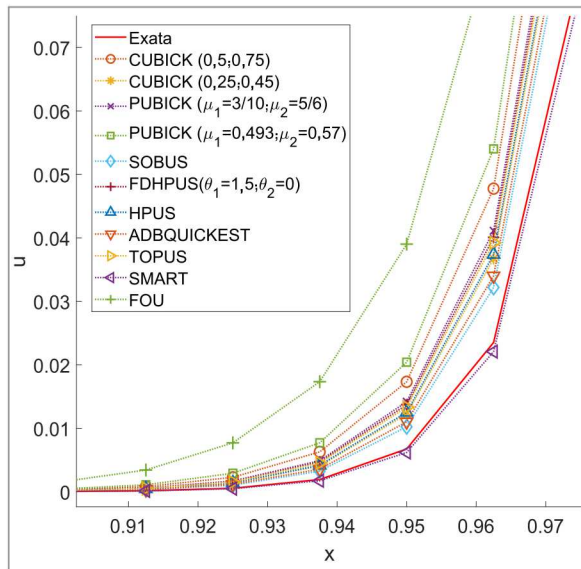
Em seguida, é apresentado um estudo numérico para a equação viscosa de Burgers (2.11). O estudo de convergência foi realizado considerando malhas com espaçamentos dados por $\delta x = 1/N$, onde $N = \{32; 64; 128; 256\}$, para avaliar os esquemas CUBICK, PU-

Esquema	N	erro $\ E\ _1$	ordem $\ E\ _1$	erro $\ E\ _2$	ordem $\ E\ _2$	erro $\ E\ _\infty$	ordem $\ E\ _\infty$
CUBICK (0,5; 0,75)	512	$2,969 \times 10^{-3}$	—	$2,108 \times 10^{-3}$	—	$1,211 \times 10^{-3}$	—
	1024	$5,577 \times 10^{-4}$	2,412	$3,948 \times 10^{-4}$	2,417	$2,154 \times 10^{-4}$	2,491
	2048	$1,183 \times 10^{-4}$	2,237	$8,370 \times 10^{-5}$	2,238	$4,460 \times 10^{-5}$	2,272
	4096	$2,711 \times 10^{-5}$	2,126	$1,918 \times 10^{-5}$	2,125	$1,010 \times 10^{-5}$	2,142
CUBICK (0,25; 0,45)	512	$2,147 \times 10^{-3}$	—	$1,524 \times 10^{-3}$	—	$8,710 \times 10^{-4}$	—
	1024	$4,639 \times 10^{-4}$	2,210	$3,284 \times 10^{-4}$	2,215	$1,792 \times 10^{-4}$	2,281
	2048	$1,074 \times 10^{-4}$	2,110	$7,599 \times 10^{-5}$	2,111	$4,050 \times 10^{-5}$	2,146
	4096	$2,580 \times 10^{-5}$	2,058	$1,825 \times 10^{-5}$	2,058	$9,616 \times 10^{-6}$	2,074
PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$) ($\mu_2 = \frac{5}{6}$)	512	$3,310 \times 10^{-3}$	—	$2,350 \times 10^{-3}$	—	$1,342 \times 10^{-3}$	—
	1024	$6,222 \times 10^{-4}$	2,412	$4,404 \times 10^{-4}$	2,416	$2,403 \times 10^{-4}$	2,482
	2048	$1,280 \times 10^{-4}$	2,281	$9,054 \times 10^{-5}$	2,282	$4,824 \times 10^{-5}$	2,316
	4096	$2,842 \times 10^{-5}$	2,171	$2,011 \times 10^{-5}$	2,171	$1,059 \times 10^{-5}$	2,188
PUBICK ($\mu_1 = 0,493$) ($\mu_2 = 0,57$)	512	$1,453 \times 10^{-2}$	—	$1,029 \times 10^{-2}$	—	$5,862 \times 10^{-3}$	—
	1024	$3,581 \times 10^{-3}$	2,521	$2,533 \times 10^{-3}$	2,022	$1,381 \times 10^{-3}$	2,085
	2048	$8,608 \times 10^{-4}$	2,057	$6,087 \times 10^{-4}$	2,057	$3,243 \times 10^{-4}$	2,091
	4096	$2,021 \times 10^{-4}$	2,091	$1,429 \times 10^{-4}$	2,091	$7,526 \times 10^{-5}$	2,107
SOBUS	512	$1,946 \times 10^{-3}$	—	$1,382 \times 10^{-3}$	—	$7,896 \times 10^{-4}$	—
	1024	$4,410 \times 10^{-4}$	2,142	$3,122 \times 10^{-4}$	2,146	$1,703 \times 10^{-4}$	2,213
	2048	$1,047 \times 10^{-4}$	2,075	$7,406 \times 10^{-5}$	2,076	$3,947 \times 10^{-5}$	2,110
	4096	$2,547 \times 10^{-5}$	2,040	$1,802 \times 10^{-5}$	2,039	$9,492 \times 10^{-6}$	2,056
FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$) ($\theta_2 = 0$)	512	$2,534 \times 10^{-3}$	—	$1,799 \times 10^{-3}$	—	$1,028 \times 10^{-3}$	—
	1024	$5,101 \times 10^{-4}$	2,312	$3,611 \times 10^{-4}$	2,317	$1,970 \times 10^{-4}$	2,383
	2048	$1,130 \times 10^{-4}$	2,174	$7,996 \times 10^{-5}$	2,175	$4,261 \times 10^{-5}$	2,209
	4096	$2,649 \times 10^{-5}$	2,093	$1,874 \times 10^{-5}$	2,093	$9,872 \times 10^{-6}$	2,110
HPUS	512	$2,284 \times 10^{-3}$	—	$1,621 \times 10^{-3}$	—	$9,265 \times 10^{-4}$	—
	1024	$4,798 \times 10^{-4}$	2,251	$3,396 \times 10^{-4}$	2,255	$1,853 \times 10^{-4}$	2,322
	2048	$1,093 \times 10^{-4}$	2,134	$7,733 \times 10^{-5}$	2,135	$4,121 \times 10^{-5}$	2,169
	4096	$2,603 \times 10^{-5}$	2,070	$1,842 \times 10^{-5}$	2,070	$9,701 \times 10^{-6}$	2,087
ADBQUICKEST	512	$3,927 \times 10^{-3}$	—	$2,787 \times 10^{-3}$	—	$1,592 \times 10^{-3}$	—
	1024	$1,267 \times 10^{-3}$	1,632	$8,967 \times 10^{-4}$	1,636	$4,892 \times 10^{-4}$	1,702
	2048	$4,438 \times 10^{-4}$	1,513	$3,139 \times 10^{-4}$	1,514	$1,672 \times 10^{-4}$	1,548
	4096	$1,726 \times 10^{-4}$	1,363	$1,220 \times 10^{-4}$	1,363	$6,427 \times 10^{-5}$	1,380
TOPUS	512	$2,696 \times 10^{-3}$	—	$1,914 \times 10^{-3}$	—	$1,093 \times 10^{-3}$	—
	1024	$5,349 \times 10^{-4}$	2,333	$3,786 \times 10^{-4}$	2,338	$2,066 \times 10^{-4}$	2,404
	2048	$1,164 \times 10^{-4}$	2,200	$8,234 \times 10^{-5}$	2,201	$4,388 \times 10^{-5}$	2,235
	4096	$2,693 \times 10^{-5}$	2,112	$1,905 \times 10^{-5}$	2,112	$1,004 \times 10^{-5}$	2,128
SMART	512	$1,270 \times 10^{-3}$	—	$9,021 \times 10^{-4}$	—	$5,156 \times 10^{-4}$	—
	1024	$3,579 \times 10^{-4}$	1,827	$2,534 \times 10^{-4}$	1,832	$1,383 \times 10^{-4}$	1,899
	2048	$9,441 \times 10^{-5}$	1,923	$6,679 \times 10^{-5}$	1,924	$3,559 \times 10^{-5}$	1,958
	4096	$2,419 \times 10^{-5}$	1,965	$1,711 \times 10^{-5}$	1,964	$9,015 \times 10^{-6}$	1,981
FOU	512	$1,043 \times 10^{-1}$	—	$7,241 \times 10^{-2}$	—	$4,038 \times 10^{-2}$	—
	1024	$5,046 \times 10^{-2}$	1,048	$3,530 \times 10^{-2}$	1,037	$1,902 \times 10^{-2}$	1,086
	2048	$2,482 \times 10^{-2}$	1,024	$1,745 \times 10^{-2}$	1,017	$9,243 \times 10^{-3}$	1,041
	4096	$1,231 \times 10^{-2}$	1,012	$8,677 \times 10^{-3}$	1,008	$4,555 \times 10^{-3}$	1,021

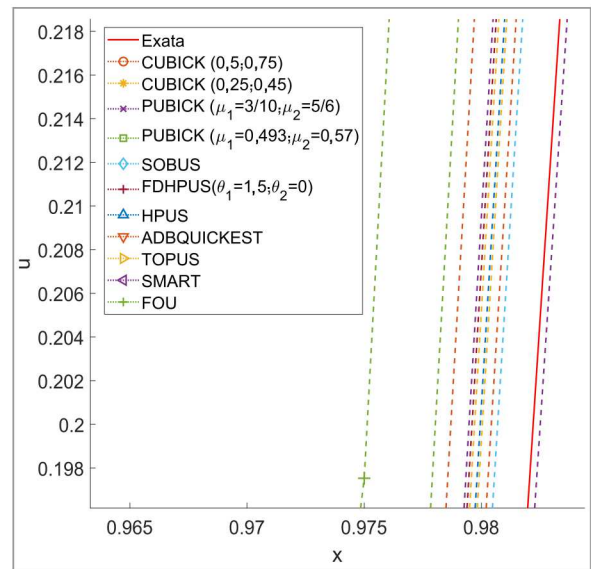
Tabela 5 – Equação da camada limite: estudo da convergência dos esquemas *upwind*.



(a)



(b)



(c)

Figura 31 – Comparação dos esquemas *upwind* em relação à solução exata da equação da camada limite: (a) solução completa, (b) ampliação na região entre 0,90 e 0,97, e (c) ampliação na região entre 0,965 e 0,985.

BICK, SOBUS e FDHPUS propostos e compará-los com outros esquemas já estabelecidos na literatura, como TOPUS, ADBQUICKEST, HPUS, SMART e FOU.

As simulações foram realizadas com $\delta t = 0,001\delta x$, $\nu = 0,1$ e tempo final $t_f = 0,8$ no domínio $\Omega = [0; 1]$. A solução exata (2.14) foi calculada usando integração numérica (ou seja, o método de quadratura adaptativa de Gauss-Kronrod [53]) e um total de $n = 100$

termos para garantir precisão numérica suficiente nos resultados.

Os resultados do estudo de convergência são apresentados na Tabela 6. Eles mostram que os esquemas CUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), PUBICK (em ambas as escolhas de parâmetros), SOBUS, FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$; $\theta_2 = 0$), HPUS, ADBQUICKEST, TOPUS e SMART alcançaram precisão de segunda ordem, enquanto o FOU alcançou precisão de primeira ordem, conforme esperado. Além disso, pode-se notar que, para este problema não linear e desafiador, os menores erros foram obtidos com o esquema PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$), seguido por ADBQUICKEST e pelo esquema PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$; $\mu_2 = \frac{5}{6}$).

A Figura 32 mostra o gráfico do erro E_1 em função do tempo, onde se observa que os erros dos esquemas são semelhantes entre si. No entanto, deve-se destacar que o esquema PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$) apresenta os menores erros ao longo do tempo.

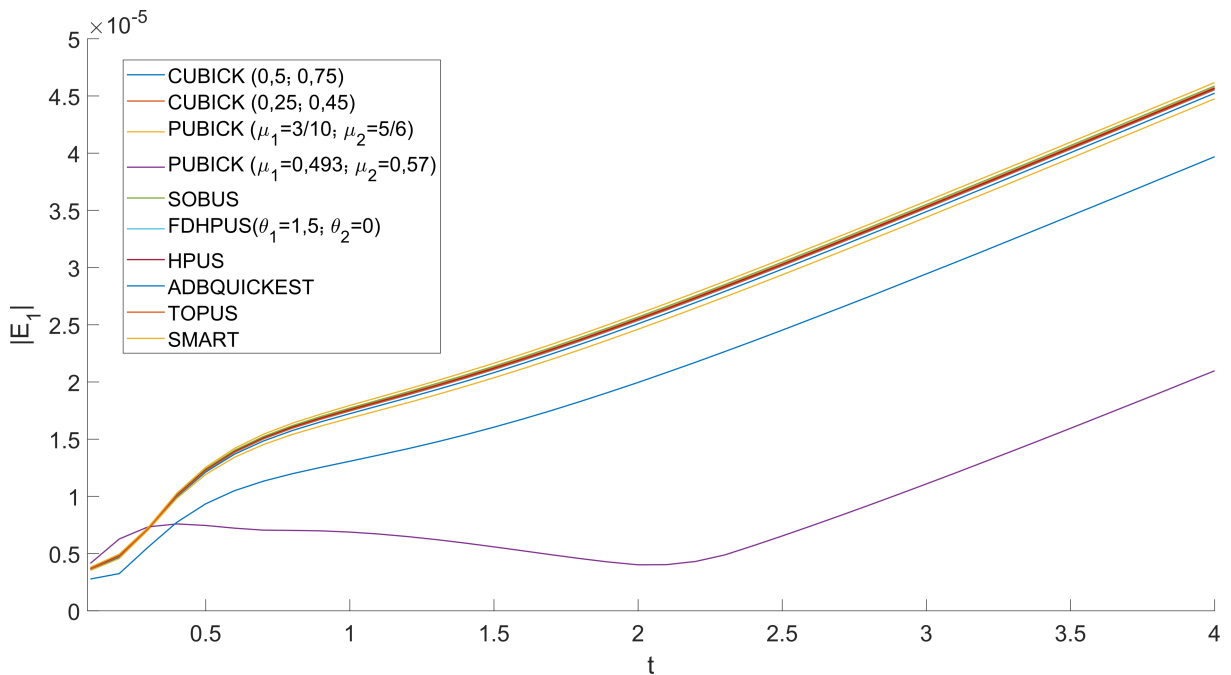


Figura 32 – Equação de Burgers viscosa: comparação dos erros obtidos empregando os esquemas *upwind* ao longo do tempo usando a malha $N = 256$ e tempo final $t_f = 4$.

Na Tabela 7 são apresentados os resultados do tempo computacional para os esquemas analisados. Para este teste foi utilizado o seguinte ambiente computacional: processador: Intel® Core™ i7-7700 CPU @ 3.60GHz \times 8, Memória RAM: 8.0 GiB. Pode-se observar que o esquema SOBUS obteve o menor tempo de execução, seguido pelos esquemas ADBQUICKEST, SMART, PUBICK, TOPUS, HPUS, FDHPUS e CUBICK (nessa ordem). Cabe mencionar que os esquemas SMART, SOBUS e HPUS não são TVD, ao contrário dos outros esquemas analisados. Assim, considerando apenas os esquemas que cumprem os critérios TVD e BAIR, o esquema PUBICK ficaria atrás do esquema

Esquema	N	erro $\ E\ _1$	ordem $\ E\ _1$	erro $\ E\ _2$	ordem $\ E\ _2$	erro $\ E\ _\infty$	ordem $\ E\ _\infty$
CUBICK (0,5; 0,75)	32	$8,801 \times 10^{-4}$	—	$1,018 \times 10^{-3}$	—	$1,466 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,550 \times 10^{-4}$	1,787	$2,931 \times 10^{-4}$	1,797	$4,009 \times 10^{-4}$	1,871
	128	$6,623 \times 10^{-5}$	1,945	$7,646 \times 10^{-5}$	1,939	$1,022 \times 10^{-4}$	1,972
	256	$1,575 \times 10^{-5}$	2,072	$1,858 \times 10^{-5}$	2,041	$2,492 \times 10^{-5}$	2,036
CUBICK (0,25; 0,45)	32	$1,037 \times 10^{-3}$	—	$1,175 \times 10^{-3}$	—	$1,588 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,763 \times 10^{-4}$	1,908	$3,141 \times 10^{-4}$	1,903	$4,145 \times 10^{-4}$	1,938
	128	$6,893 \times 10^{-5}$	2,003	$7,908 \times 10^{-5}$	1,990	$1,038 \times 10^{-4}$	1,997
	256	$1,609 \times 10^{-5}$	2,099	$1,890 \times 10^{-5}$	2,065	$2,511 \times 10^{-5}$	2,048
PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$) ($\mu_2 = \frac{5}{6}$)	32	$8,829 \times 10^{-4}$	—	$1,026 \times 10^{-3}$	—	$1,457 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,481 \times 10^{-4}$	1,831	$2,878 \times 10^{-4}$	1,833	$3,961 \times 10^{-4}$	1,879
	128	$6,444 \times 10^{-5}$	1,945	$7,503 \times 10^{-5}$	1,940	$1,013 \times 10^{-4}$	1,967
	256	$1,541 \times 10^{-5}$	2,064	$1,832 \times 10^{-5}$	2,034	$2,479 \times 10^{-5}$	2,031
PUBICK ($\mu_1 = 0,493$) ($\mu_2 = 0,57$)	32	$3,781 \times 10^{-4}$	—	$4,692 \times 10^{-4}$	—	$7,035 \times 10^{-4}$	—
	64	$9,849 \times 10^{-5}$	1,940	$1,269 \times 10^{-4}$	1,887	$2,018 \times 10^{-4}$	1,801
	128	$2,557 \times 10^{-5}$	1,945	$3,310 \times 10^{-5}$	1,938	$5,129 \times 10^{-5}$	1,976
	256	$7,026 \times 10^{-6}$	1,864	$8,636 \times 10^{-6}$	1,939	$1,287 \times 10^{-5}$	1,994
SOBUS	32	$1,085 \times 10^{-3}$	—	$1,222 \times 10^{-3}$	—	$1,617 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,823 \times 10^{-4}$	1,943	$3,200 \times 10^{-4}$	1,933	$4,179 \times 10^{-4}$	1,952
	128	$6,970 \times 10^{-5}$	2,018	$7,981 \times 10^{-5}$	2,003	$1,043 \times 10^{-4}$	2,002
	256	$1,618 \times 10^{-5}$	2,107	$1,899 \times 10^{-5}$	2,072	$2,516 \times 10^{-5}$	2,051
FDHPUS ($\theta_1 = 1,5$) ($\theta_2 = 0$)	32	$9,814 \times 10^{-4}$	—	$1,115 \times 10^{-3}$	—	$1,536 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,682 \times 10^{-4}$	1,872	$3,055 \times 10^{-4}$	1,867	$4,082 \times 10^{-4}$	1,912
	128	$6,786 \times 10^{-5}$	1,983	$7,796 \times 10^{-5}$	1,970	$1,030 \times 10^{-4}$	1,986
	256	$1,595 \times 10^{-5}$	2,089	$1,876 \times 10^{-5}$	2,055	$2,501 \times 10^{-5}$	2,042
HPUS	32	$1,018 \times 10^{-3}$	—	$1,115 \times 10^{-3}$	—	$1,570 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,733 \times 10^{-4}$	1,898	$3,110 \times 10^{-4}$	1,892	$4,123 \times 10^{-4}$	1,929
	128	$6,853 \times 10^{-5}$	1,996	$7,868 \times 10^{-5}$	1,983	$1,036 \times 10^{-4}$	1,993
	256	$1,604 \times 10^{-5}$	2,096	$1,885 \times 10^{-5}$	2,062	$2,508 \times 10^{-5}$	2,046
ADBQUICKEST	32	$9,700 \times 10^{-4}$	—	$1,137 \times 10^{-3}$	—	$1,548 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,401 \times 10^{-4}$	2,015	$2,823 \times 10^{-4}$	2,010	$3,828 \times 10^{-4}$	2,015
	128	$5,636 \times 10^{-5}$	2,091	$6,703 \times 10^{-5}$	2,074	$9,187 \times 10^{-5}$	2,059
	256	$1,198 \times 10^{-5}$	2,234	$1,475 \times 10^{-5}$	2,184	$2,083 \times 10^{-5}$	2,141
TOPUS	32	$9,936 \times 10^{-4}$	—	$1,115 \times 10^{-3}$	—	$1,518 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,697 \times 10^{-4}$	1,881	$3,051 \times 10^{-4}$	1,870	$4,053 \times 10^{-4}$	1,905
	128	$6,801 \times 10^{-5}$	1,988	$7,784 \times 10^{-5}$	1,971	$1,026 \times 10^{-4}$	1,982
	256	$1,596 \times 10^{-5}$	2,091	$1,874 \times 10^{-5}$	2,055	$2,496 \times 10^{-5}$	2,039
SMART	32	$1,177 \times 10^{-3}$	—	$1,330 \times 10^{-3}$	—	$1,703 \times 10^{-3}$	—
	64	$2,949 \times 10^{-4}$	1,996	$3,347 \times 10^{-4}$	1,990	$4,306 \times 10^{-4}$	1,983
	128	$7,136 \times 10^{-5}$	2,047	$8,171 \times 10^{-5}$	2,034	$1,058 \times 10^{-4}$	2,024
	256	$1,639 \times 10^{-5}$	2,122	$1,922 \times 10^{-5}$	2,088	$2,534 \times 10^{-5}$	2,062
FOU	32	$1,112 \times 10^{-2}$	—	$1,327 \times 10^{-2}$	—	$1,780 \times 10^{-2}$	—
	64	$5,947 \times 10^{-3}$	0,902	$7,155 \times 10^{-3}$	0,891	$9,583 \times 10^{-3}$	0,893
	128	$3,075 \times 10^{-3}$	0,952	$3,710 \times 10^{-3}$	0,948	$4,966 \times 10^{-3}$	0,948
	256	$1,563 \times 10^{-3}$	0,976	$1,889 \times 10^{-3}$	0,974	$2,528 \times 10^{-3}$	0,974

Tabela 6 – Equação de Burgers viscosa: estudo de convergência dos esquemas considerando a solução numérica.

Esquema <i>upwind</i>	$N = 64$	$N = 128$	$N = 256$
CUBICK (0,5; 0,75)	1,57515	6,13670	24,61718
CUBICK (0,25; 0,45)	1,52993	5,99698	24,00503
PUBICK ($\mu_1 = \frac{3}{10}$; $\mu_2 = \frac{5}{6}$)	0,16829	0,67234	2,65885
PUBICK ($\mu_1 = 0,493$; $\mu_2 = 0,57$)	0,17869	0,70277	2,74708
SOBUS	0,10087	0,37132	1,45761
FDHPUS ($\theta_1 = 1, 5$; $\theta_2 = 0$)	1,32253	5,28692	21,72054
HPUS	0,95734	3,92078	15,67660
ADBQUICKEST	0,11948	0,46426	1,86641
TOPUS	0,95022	3,85262	15,44161
SMART	0,12432	0,47977	1,89832

Tabela 7 – Equação de Burgers viscosa: tempo computacional obtido ao empregar os esquemas *upwind* utilizando as malhas $N = 64, 128$ e 256 .

ADBQUICKEST na análise de desempenho computacional.

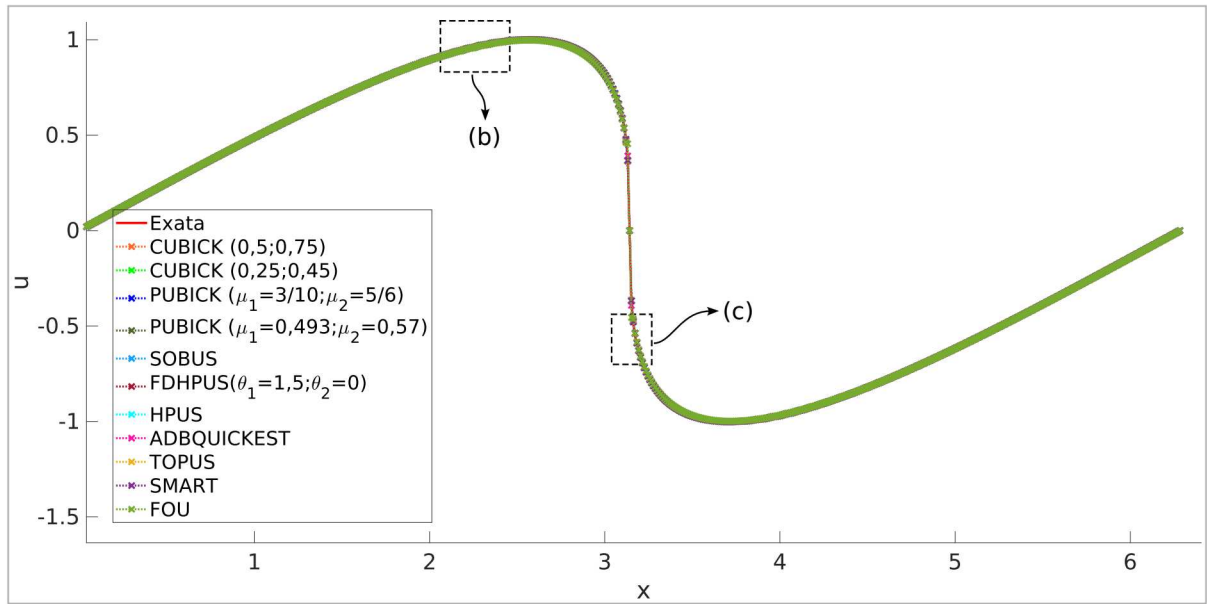
7.2.3 Equação de Burgers Inviscida

A equação de Burgers inviscida (2.18) também foi analisada. Para este problema, foram adotadas as seguintes condições: $N = 600$, domínio $\Omega = [0; 2\pi]$, $\delta x = 2\pi/N$, $\delta t = 0,2\delta x$ e tempo final $t_f = 1$. Considerou-se uma solução semi-analítica (ver mais detalhes em [28]) dada pela equação (2.21) (onde foi utilizado $n = 500$). Os esquemas propostos CUBICK, PUBICK, SOBUS e FDHPUS foram comparados com TOPUS, ADBQUICKEST, HPUS, SMART e FOU. Observa-se na Figura 33 que os esquemas CUBICK, PUBICK, SOBUS, FDHPUS, HPUS e TOPUS estão de acordo com a solução exata, exceto em pequenas regiões onde apresentam mínimas oscilações, como se pode ver na Figura 33. Também é possível observar que ADBQUICKEST e FOU não apresentaram oscilações.

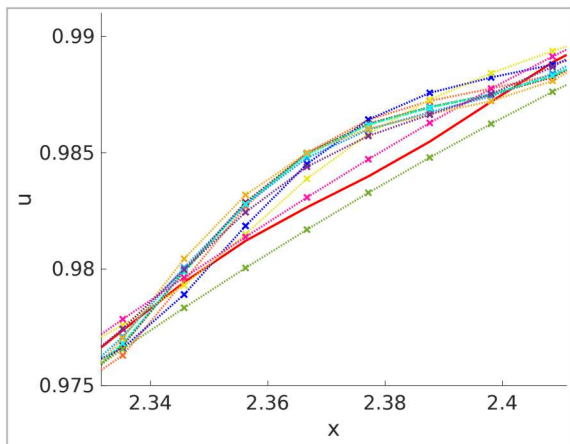
7.2.4 Equação de Buckley-Leverett

Nesta seção, apresentam-se os resultados numéricos da equação de Buckley-Leverett. As simulações foram realizadas com uma malha de $N = 50$, $\delta x = 1/N$, $\delta t = 0,5\delta x$, no domínio $\Omega = [0; 1]$ e tempo final $t_f = 0,5$. A solução analítica é dada pela equação (2.25) com a condição inicial dada por (2.24).

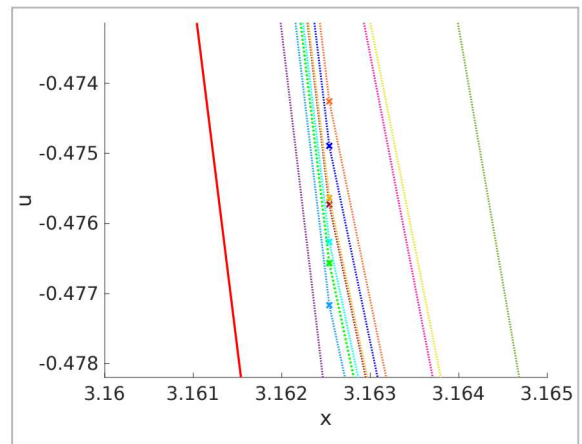
Na Figura 34, são apresentados todos os esquemas analisados. Observa-se que os esquemas SOBUS e SMART apresentaram um erro maior na aproximação à solução analítica, ao contrário dos demais esquemas, que apresentaram resultados similares.



(a)



(b)

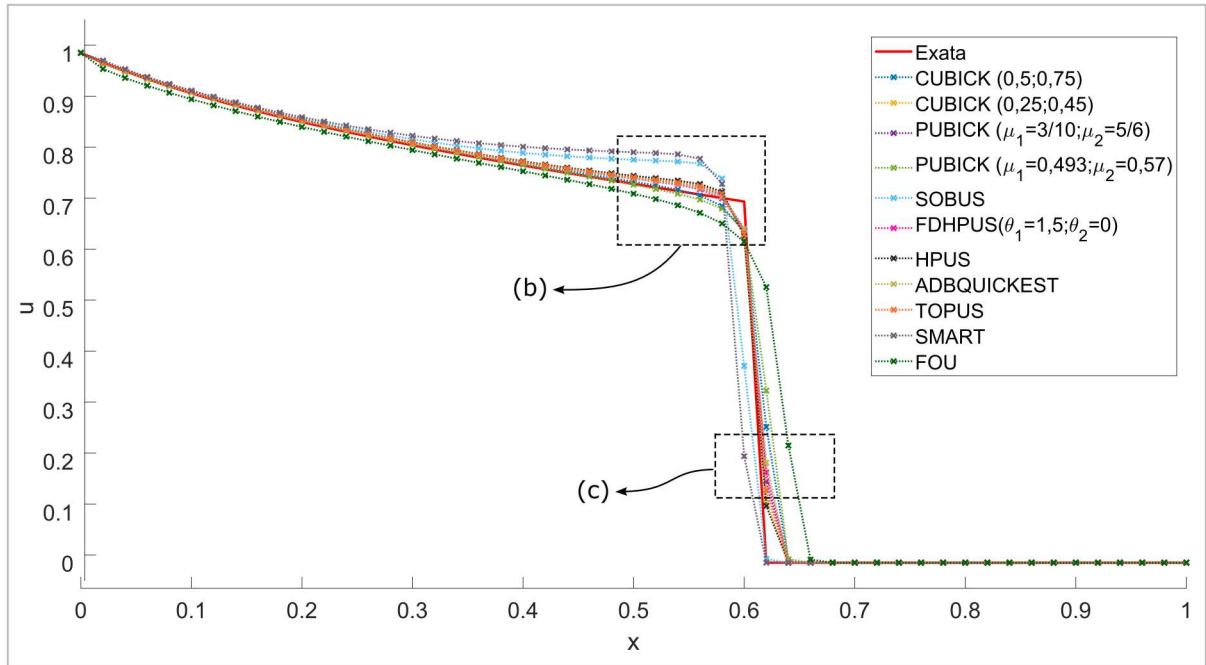


(c)

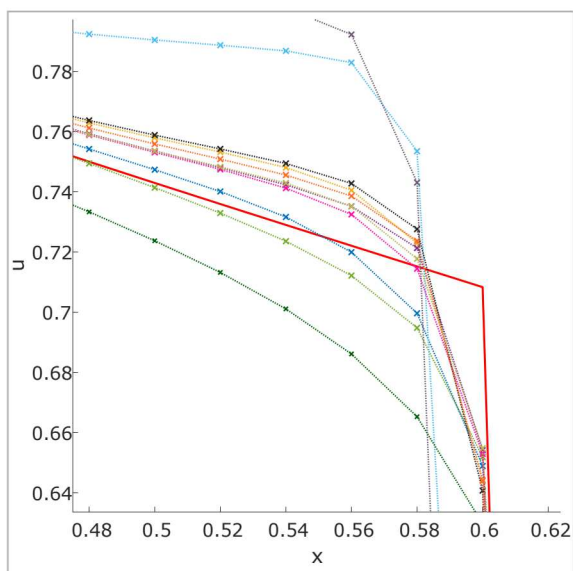
Figura 33 – Comparação entre as soluções exata e numéricas da equação de Burgers inviscida obtidas empregando os esquemas *upwind*.

7.3 Problemas 1D de Riemann para as Equações de Euler

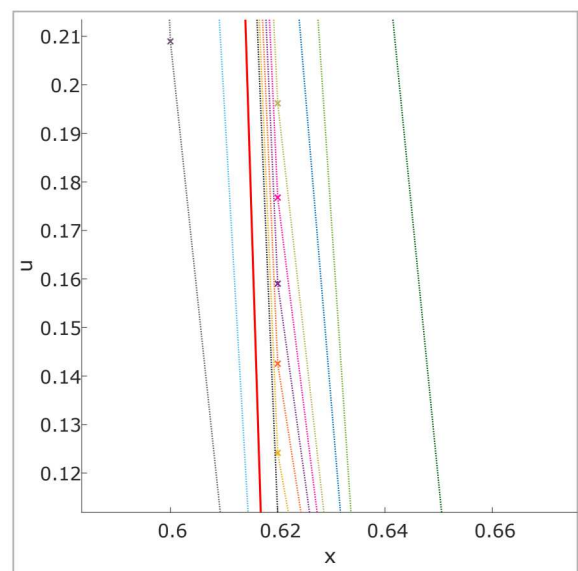
Este é um problema interessante e que também aparece com frequência na literatura para testar esquemas numéricos [5, 15]. O objetivo principal aqui é aplicar o limitador de fluxo do esquema *upwind* para obtenção da solução deste problema. Nas simulações, foram investigados os esquemas CUBICK com $(a; b) = (0,5; 0,75)$ e PUBICK com $(\mu_1; \mu_2) = (\frac{3}{10}; \frac{5}{6})$.



(a)



(b)



(c)

Figura 34 – Comparação entre as soluções exata e numéricas da equação de Buckley-Leverett obtidas empregando os esquemas *upwind*.

7.3.1 Tubo de Choque de Sod

Neste problema, proposto por Sod [54], é considerada a equação (2.26) para $x \in [0; 1]$, sujeita às condições iniciais dadas por:

$$[\rho; u; p]^T = \begin{cases} [1; 0; 1]^T, & x \in [0; 0,5[, \\ [0,125; 0; 0,1]^T, & x \in [0,5; 1]. \end{cases} \quad (7.4)$$

Nesse problema, foram considerados o tempo final de simulação (instante de ocorrência do choque) $t = 0,2$ e o espaçamento temporal $\delta t = 0,6\delta x$. Duas malhas com $N = 50$ ($\delta x = 0,02$) e $N = 200$ ($\delta x = 0,005$) células computacionais foram adotadas nas simulações.

As Figuras 35 e 36 mostram as soluções numéricas para as malhas $N = 50$ e $N = 200$, respectivamente, obtidas com os esquemas CUBICK, MINMOD, PUBICK, SMART, Superbee e TOPUS, bem como a solução de referência (FOU na malha de 2000 células - $\delta x = 0,0005$). Nota-se, por meio dessas figuras, que os esquemas CUBICK, PUBICK e TOPUS apresentaram uma melhor captura do choque quando comparados aos demais esquemas. Cabe mencionar também que a convergência das soluções numéricas para a solução de referência não foi tão adequada para os esquemas SMART e Superbee.

7.3.2 Tubo de Choque de Shu-Osher

Neste tubo de choque, proposto por Shu-Osher [55], é considerada a equação (2.26) para $x \in [-1, 3]$, suplementada pela condição inicial expressa por:

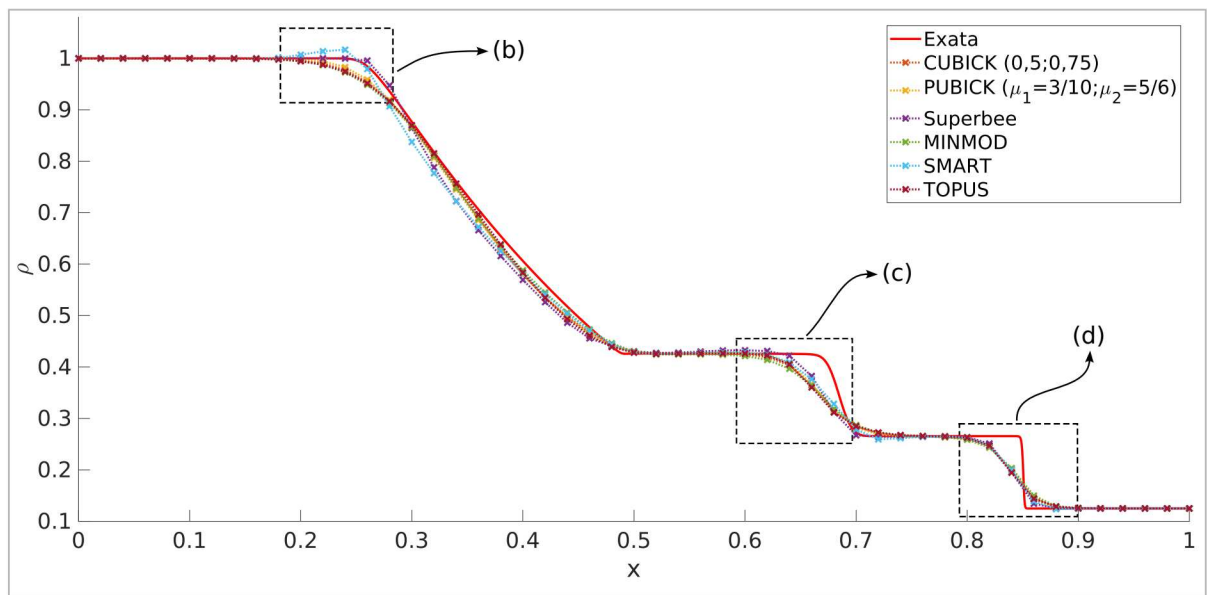
$$[\rho; u; p]^T = \begin{cases} [3,86; 2,63; 10,33]^T, & x \in [-1; -0,8[, \\ [1 + 0,2 \text{sen}(5x); 0; 1]^T, & x \in [-0,8; 3]. \end{cases} \quad (7.5)$$

Para a simulação deste problema, o tempo final de processamento foi $t_f = 1$, e o espaçamento temporal foi de $\delta t = 0,6\delta x$. Duas malhas com $N = 200$ ($\delta x = 0,02$) e $N = 300$ ($\delta x = 0,0133$) células computacionais foram adotadas. A solução de referência para esse problema foi obtida da mesma forma que no tubo de choque de Sod.

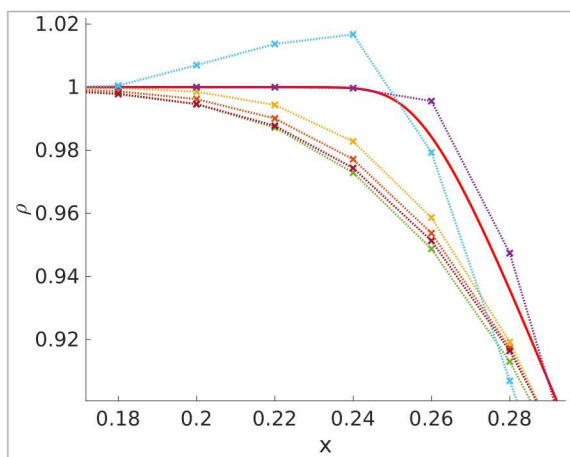
As Figuras 37 e 38 apresentam as soluções numéricas para as malhas $N = 200$ e $N = 300$, respectivamente, obtidas usando os limitadores de fluxo dos esquemas CUBICK, MINMOD, PUBICK, SMART, Superbee, TOPUS e FOU (solução de referência). Observa-se, por meio dessas figuras, que as simulações usando os esquemas CUBICK, PUBICK e TOPUS forneceram resultados em boa concordância com a solução de referência.

7.3.3 Tubo de Choque de Shu-Osher Modificado

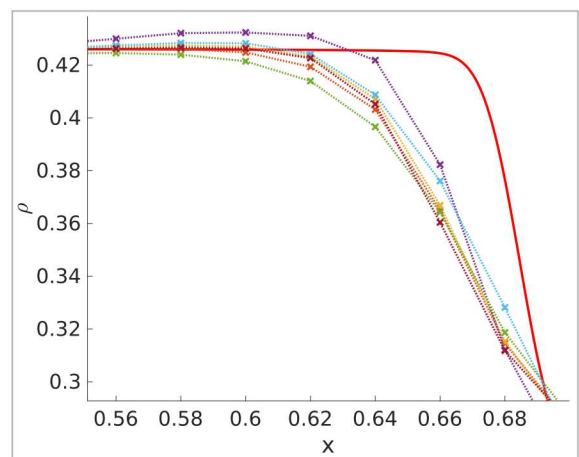
Este problema de Riemann, proposto por Titarev e Toro [56], é uma variação do tubo de choque de Shu-Osher [55]. Considera-se a equação (2.26) para $x \in [-5; 5]$, com



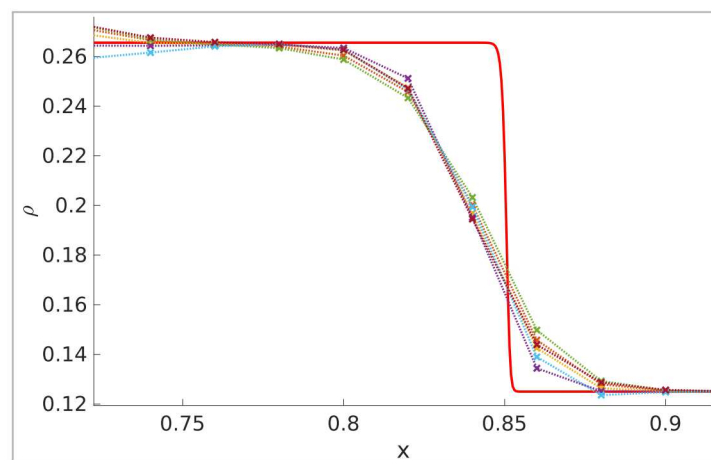
(a)



(b)

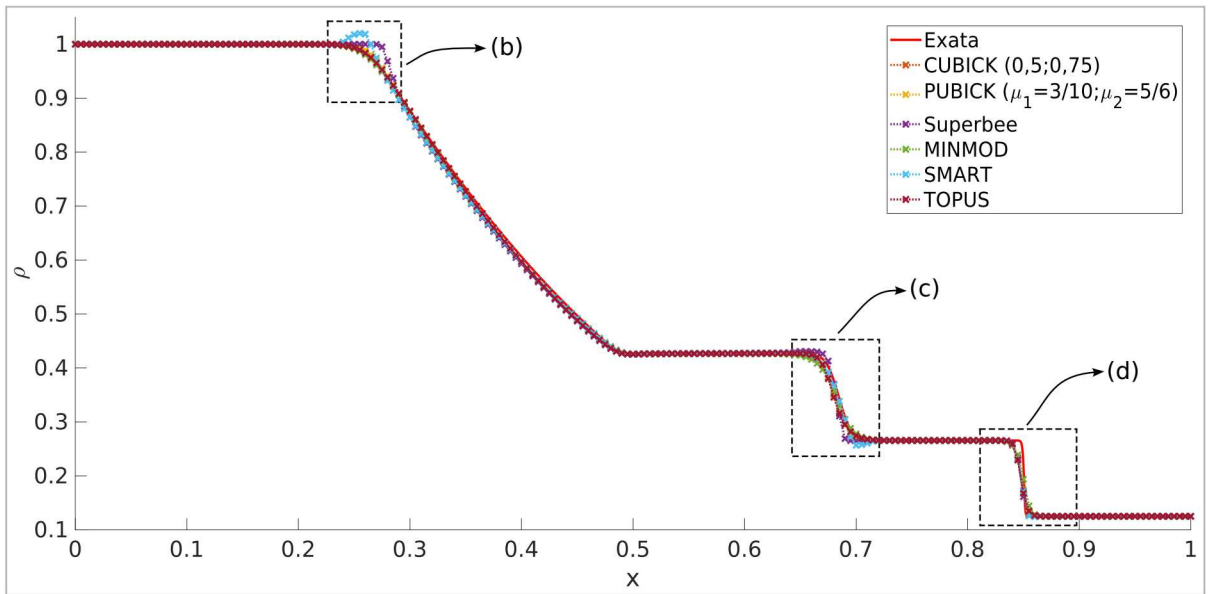


(c)

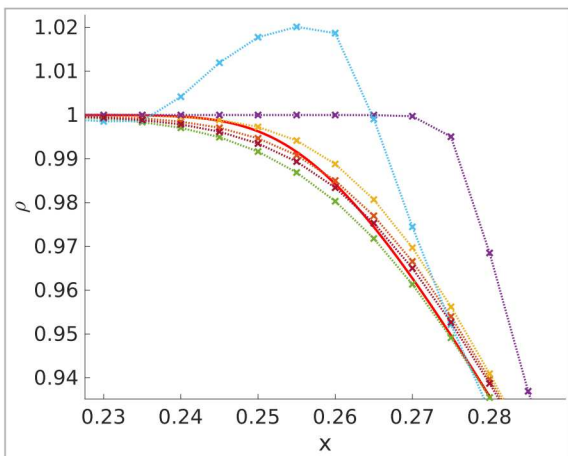


(d)

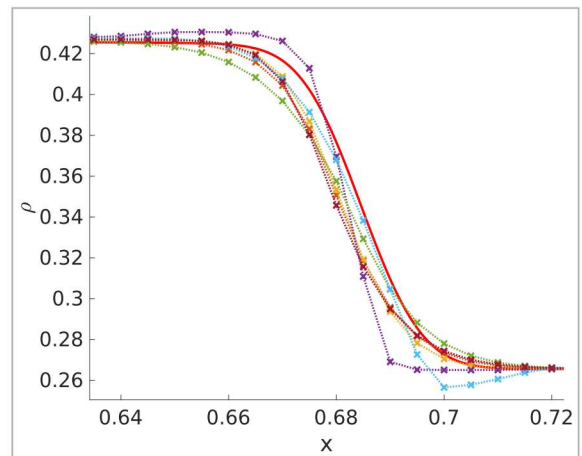
Figura 35 – Soluções numéricas do tubo de choque de Sod obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 50$.



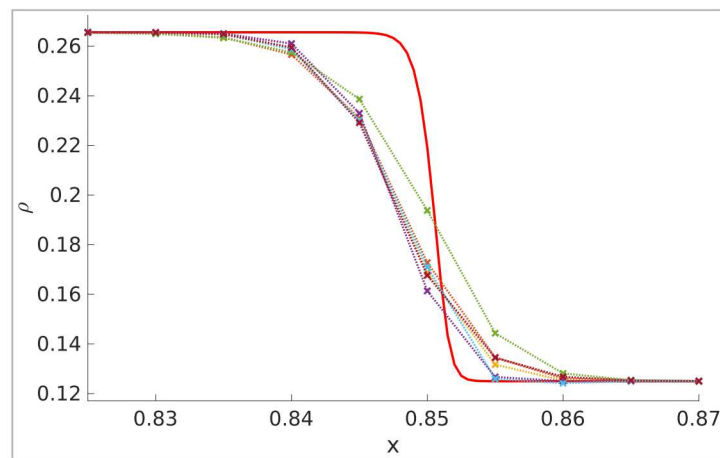
(a)



(b)

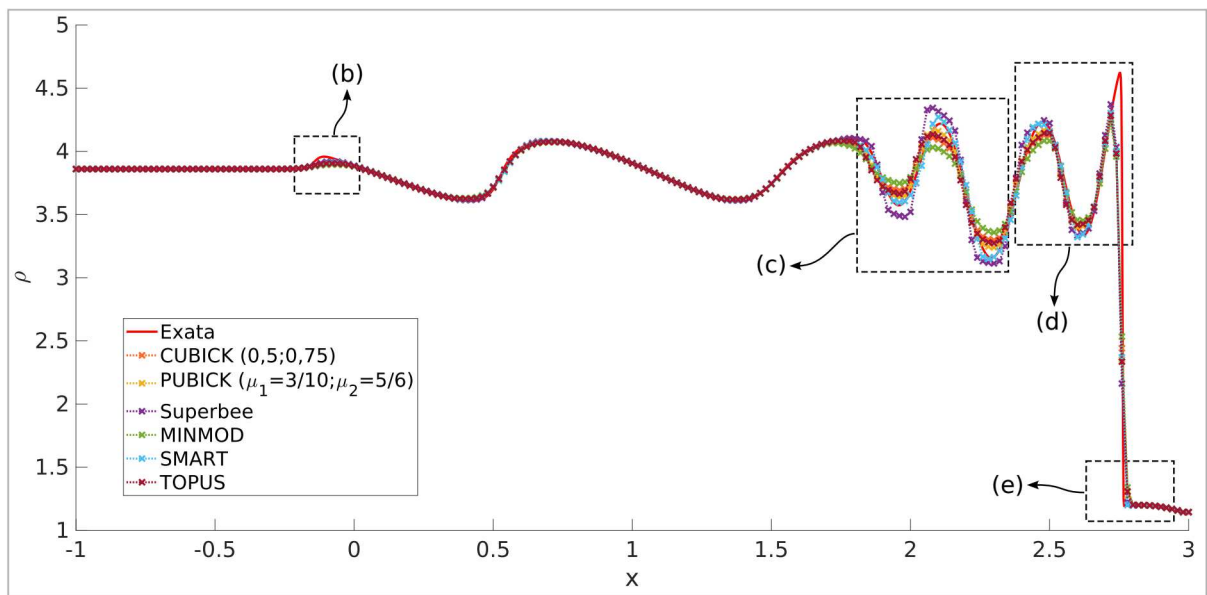


(c)

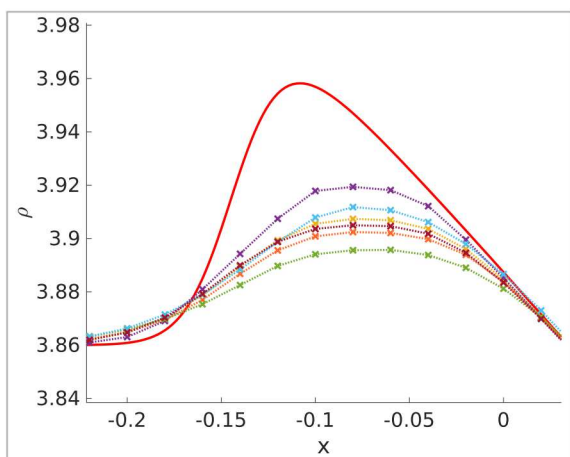


(d)

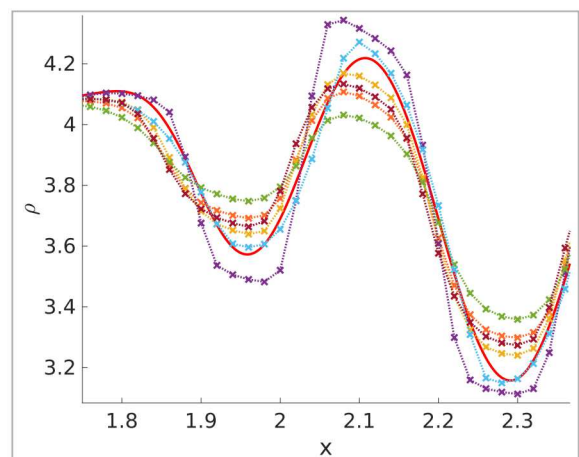
Figura 36 – Soluções numéricas do tubo de choque de Sod obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$.



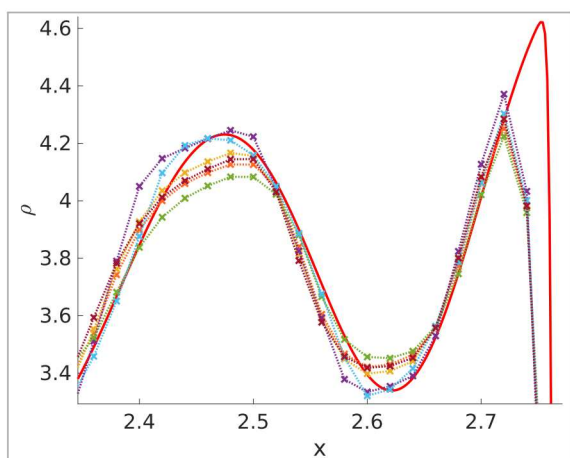
(a)



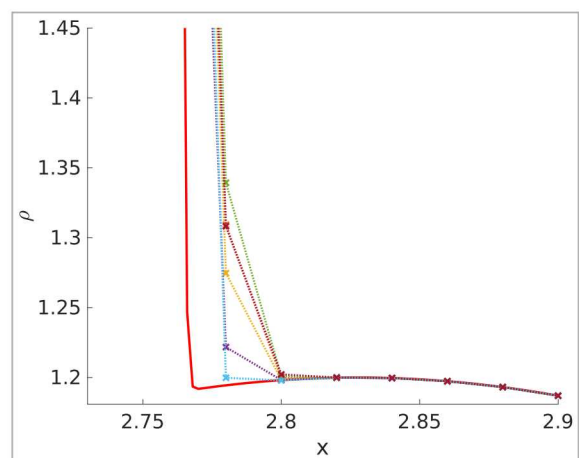
(b)



(c)

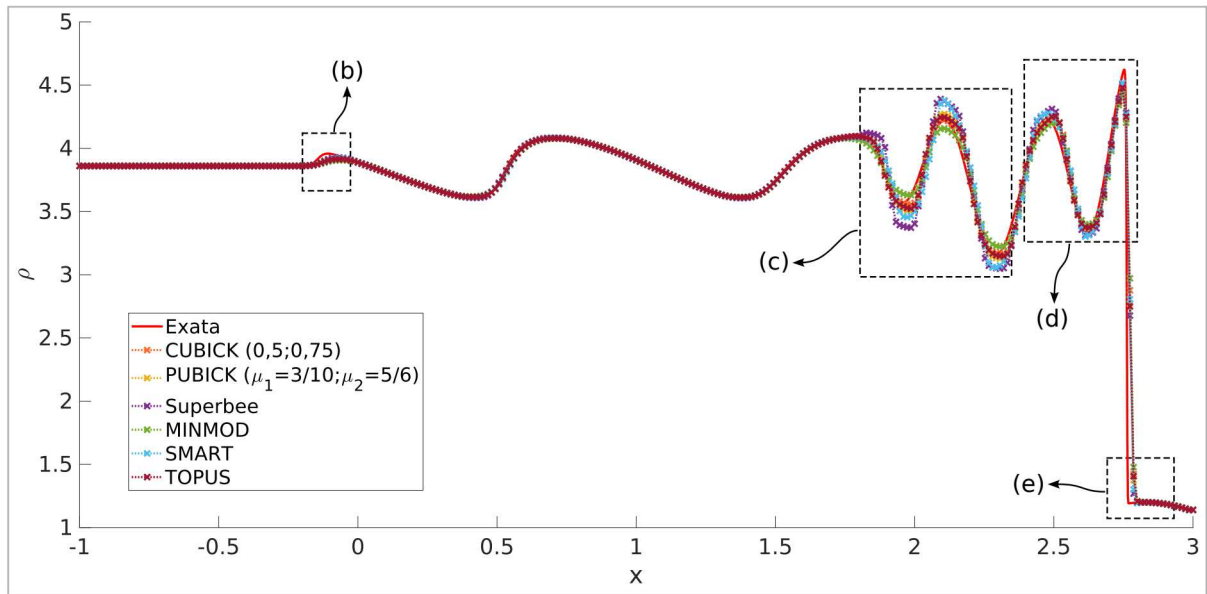


(d)

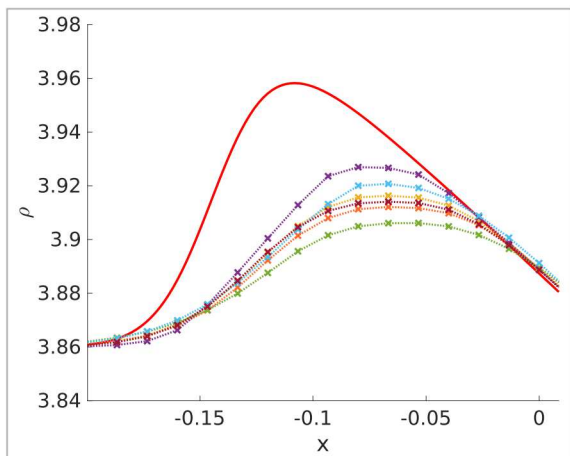


(e)

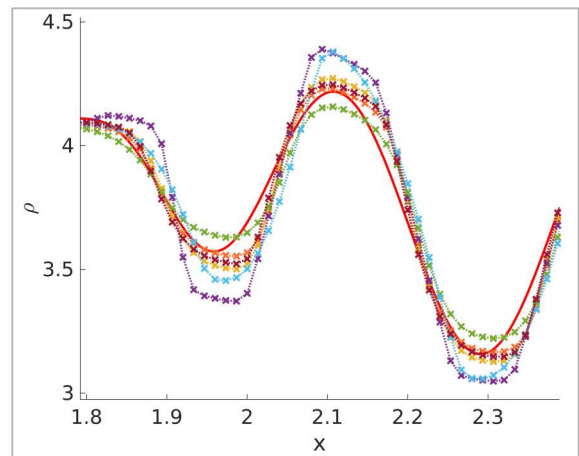
Figura 37 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$.



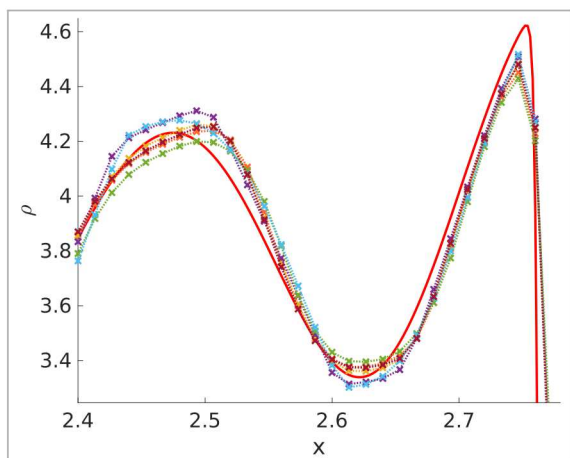
(a)



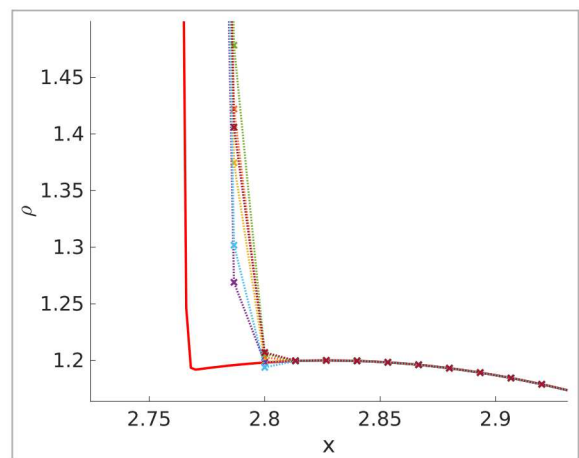
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 38 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 300$.

condições iniciais dadas por:

$$[\rho; u; p]^T = \begin{cases} [1,515695; 0,523346; 1,805]^T, & x \in [-5; 4,5[, \\ [1 + 0,1 \operatorname{sen}(20\pi x); 0; 1]^T, & x \in [4,5; 5]. \end{cases} \quad (7.6)$$

Para a simulação deste problema, foram empregados os seguintes dados: tempo final de processamento $t = 5$; espaçamento temporal $\delta t = 0,0024$; e malha computacional de $N = 2500$ células ($\delta x = 0,004$). A solução de referência foi obtida usando o esquema FOU em uma malha de 20000 células ($\delta x = 0,0005$). A Figura 39 apresenta as soluções numéricas obtidas usando diferentes limitadores de fluxo. Com base nessa figura, fica clara a superioridade dos esquemas CUBICK, PUBICK e TOPUS em relação aos outros métodos estudados neste problema.

7.3.4 Tubos de Choque de Toro

Neste tubo de choque, proposto por Toro [31], é considerada a equação (2.26) para $x \in [0; 1]$, sujeita a duas condições iniciais.

- **Caso 1:** Neste caso, a condição inicial é expressa por:

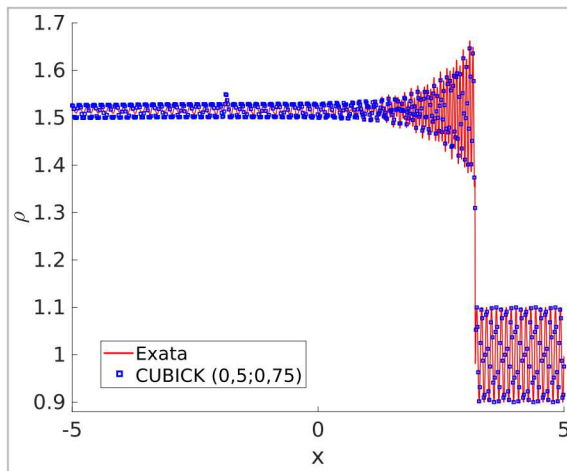
$$[\rho; u; p]^T = \begin{cases} [1; 0; 1000]^T, & x \in [0; 0,5[, \\ [1; 0; 0,01]^T, & x \in [0,5; 1]. \end{cases} \quad (7.7)$$

Para a simulação desse caso, foram utilizados o tempo final de processamento $t_f = 0,012$ (instante do choque), o espaçamento temporal $\delta t = 0,6\delta x$, e duas malhas de $N = 200$ ($\delta x = 0,05$) e $N = 400$ ($\delta x = 0,0025$) células. A solução de referência para este problema foi obtida com a simulação do esquema FOU em uma malha de 4000 células ($\delta x = 0,00025$).

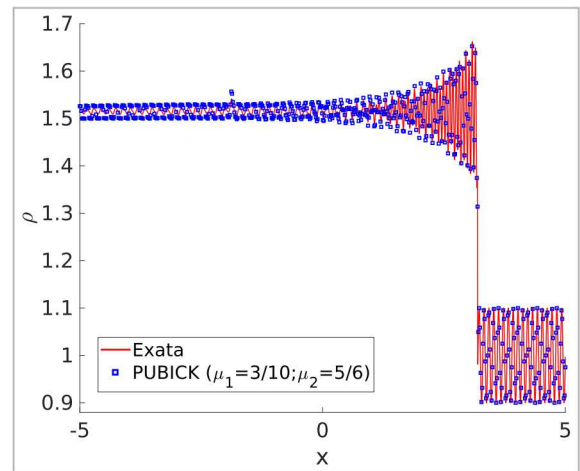
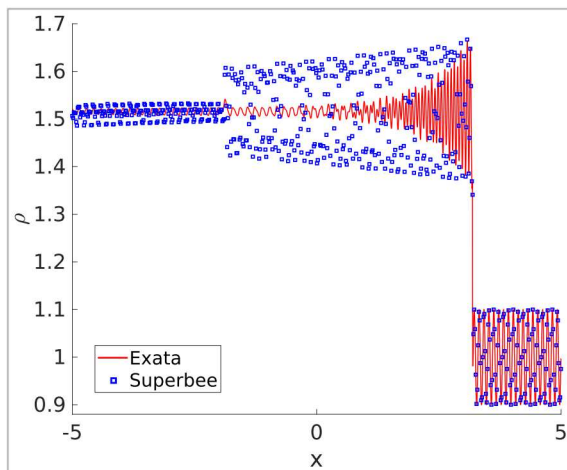
As Figuras 40 e 41 mostram as soluções de referência e as soluções numéricas para as malhas $N = 200$ e $N = 300$, respectivamente, obtidas nas simulações dos limitadores de fluxo dos esquemas CUBICK, MINMOD, PUBICK, SMART, Superbee e TOPUS. Nessas figuras, percebe-se que as soluções obtidas com os esquemas CUBICK, MINMOD, PUBICK, Superbee e TOPUS são livres de difusão numérica. Também nota-se que essas soluções são bastante consistentes com a de referência. As soluções numéricas obtidas usando o esquema SMART apresentaram oscilações numéricas.

- **Caso 2:** Neste caso, a condição inicial é dada por:

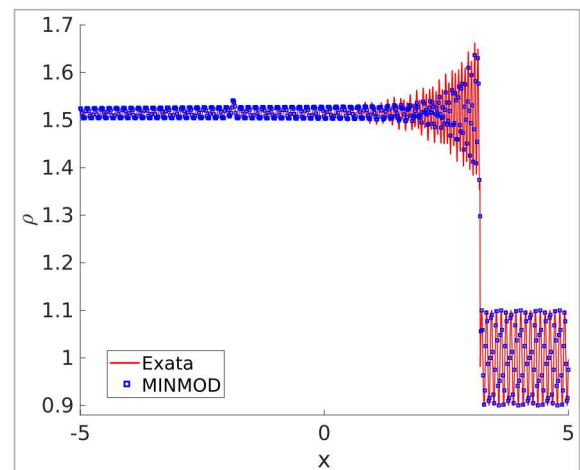
$$[\rho; u; p]^T = \begin{cases} [5,99924; 19,5975; 460,894]^T, & x \in [0; 0,4[, \\ [5,99242; -6,19633; 46,095]^T, & x \in [0,4; 1]. \end{cases} \quad (7.8)$$



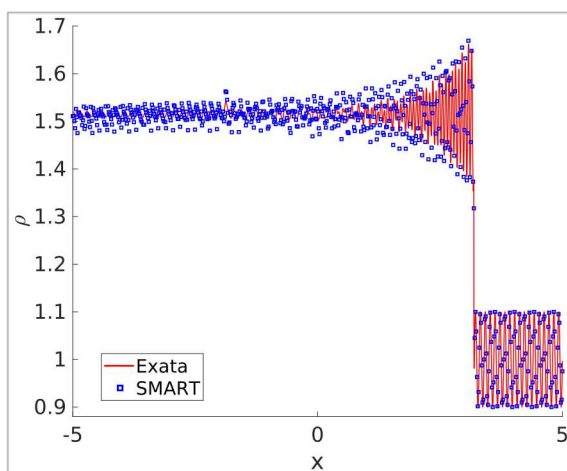
(a) CUBICK (0,5; 0,75)

(b) PUBICK ($\mu_1 = 3/10; \mu_2 = 5/6$)

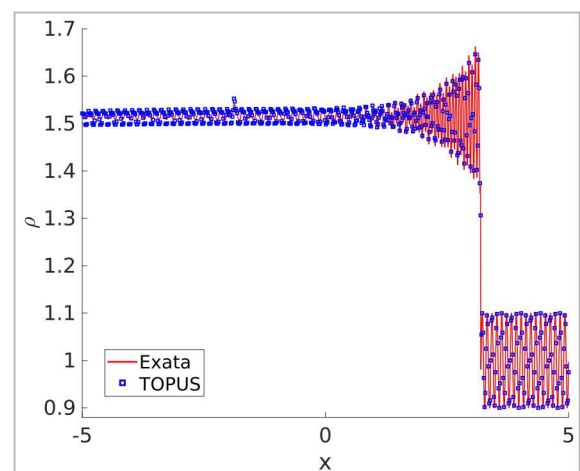
(c) Superbee



(d) MINMOD



(e) SMART



(f) TOPUS

Figura 39 – Soluções numéricas do tubo de choque de Shu-Osher modificado obtidas com diferentes limitadores de fluxo.

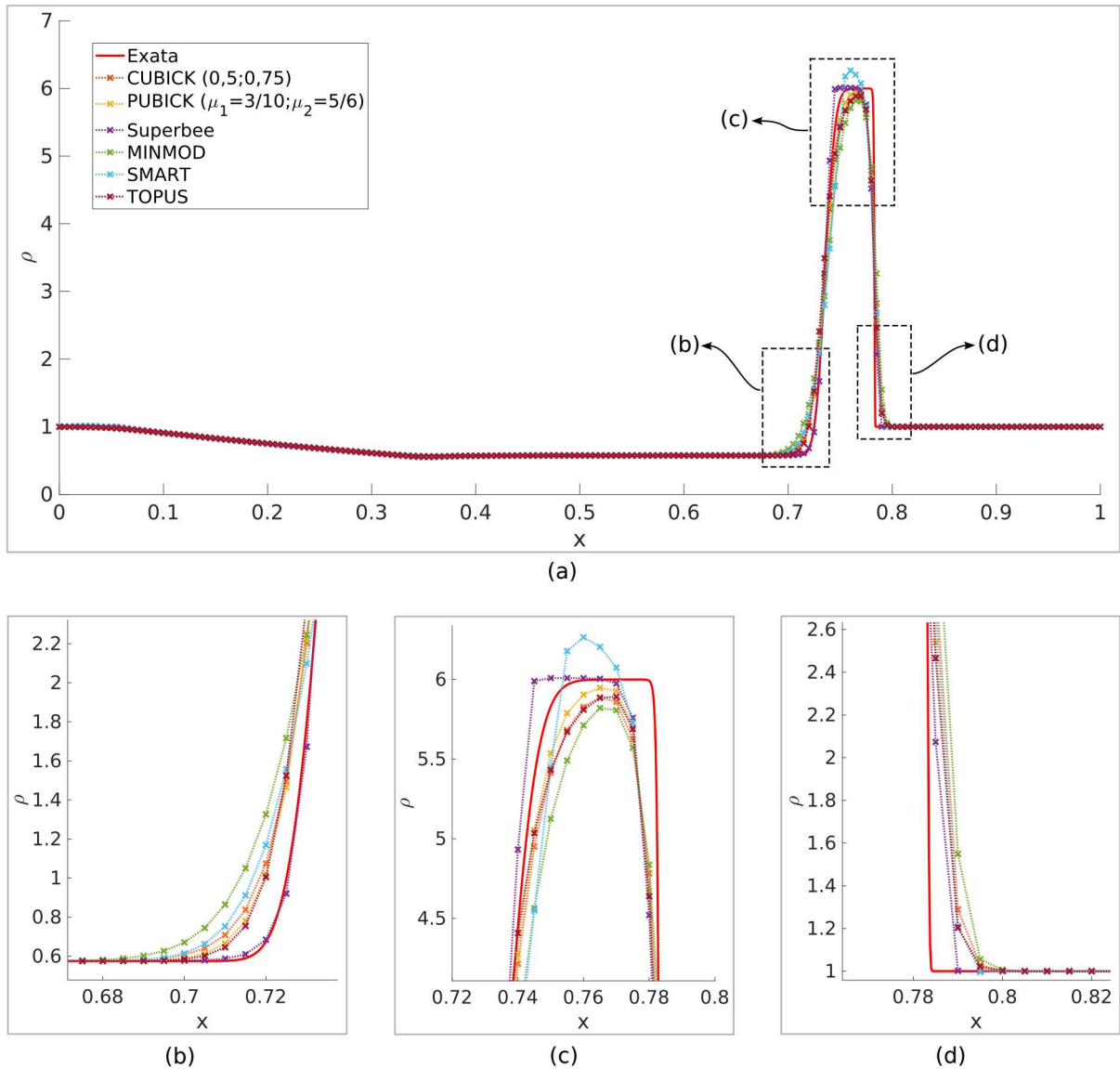


Figura 40 – Caso 1: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$.

Para a simulação desse caso, foi utilizado o tempo final de processamento $t = 0,035$. O espaçamento temporal, as malhas empregadas e a solução de referência foram iguais aos do Caso 1.

As Figuras 42 e 43 apresentam as soluções de referência e as soluções numéricas para as malhas $N = 200$ e $N = 400$, respectivamente, obtidas nas simulações usando os limitadores de fluxo dos esquemas CUBICK, MINMOD, PUBICK, SMART, Superbee e TOPUS. Assim como nos resultados apresentados nas Figuras 40 e 41, o emprego do esquema SMART resultou em soluções numéricas com oscilações, enquanto os demais esquemas forneceram soluções em concordância com a de referência.

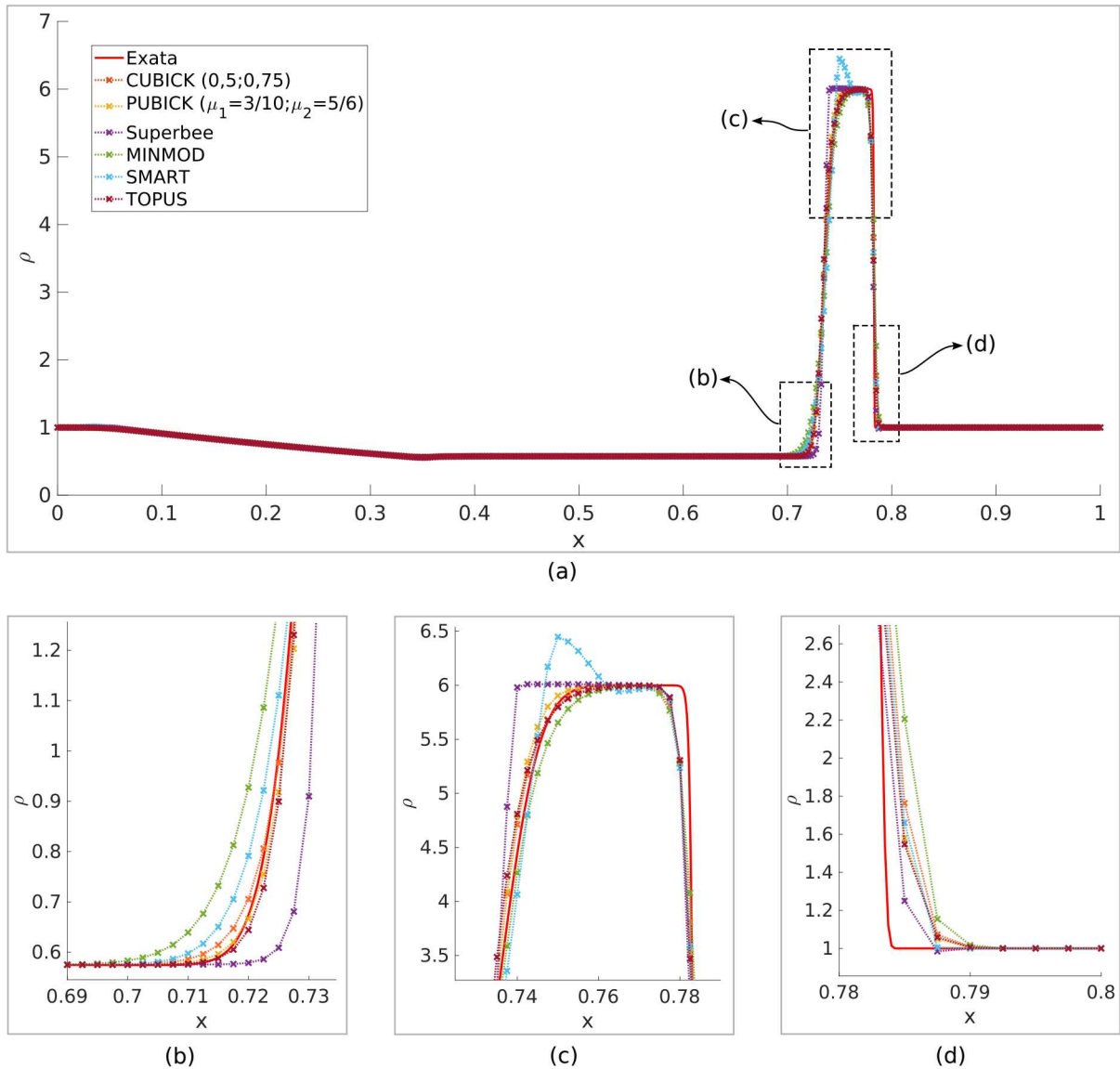


Figura 41 – Caso 1: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 400$.

7.4 Escoamento 2D na Cavidade Quadrada

O problema da cavidade quadrada consiste no confinamento de um fluido em uma caixa, cuja parede superior se move com velocidade constante ao longo do eixo, gerando um movimento circular do fluido dentro da caixa [2, 43, 57]. Este escoamento incompressível é governado pelas equações de Navier-Stokes [58] expressa em (2.30) com número de Froude dado por $Fr = 0$.

Esse problema foi simulado numericamente para testar e avaliar os limitadores de fluxo do esquema TOPUS, dado pela equação (3.14), e do esquema CUBICK, descrito pela equação (4.68). Ambos limitadores de fluxo, foram incorporados no software de código aberto chamado `OpenFOAM`[50]. Os dados numéricos de Erturk *et al.* [2] foram usados como soluções de referência para o problema em consideração. Em experimentos futuros,

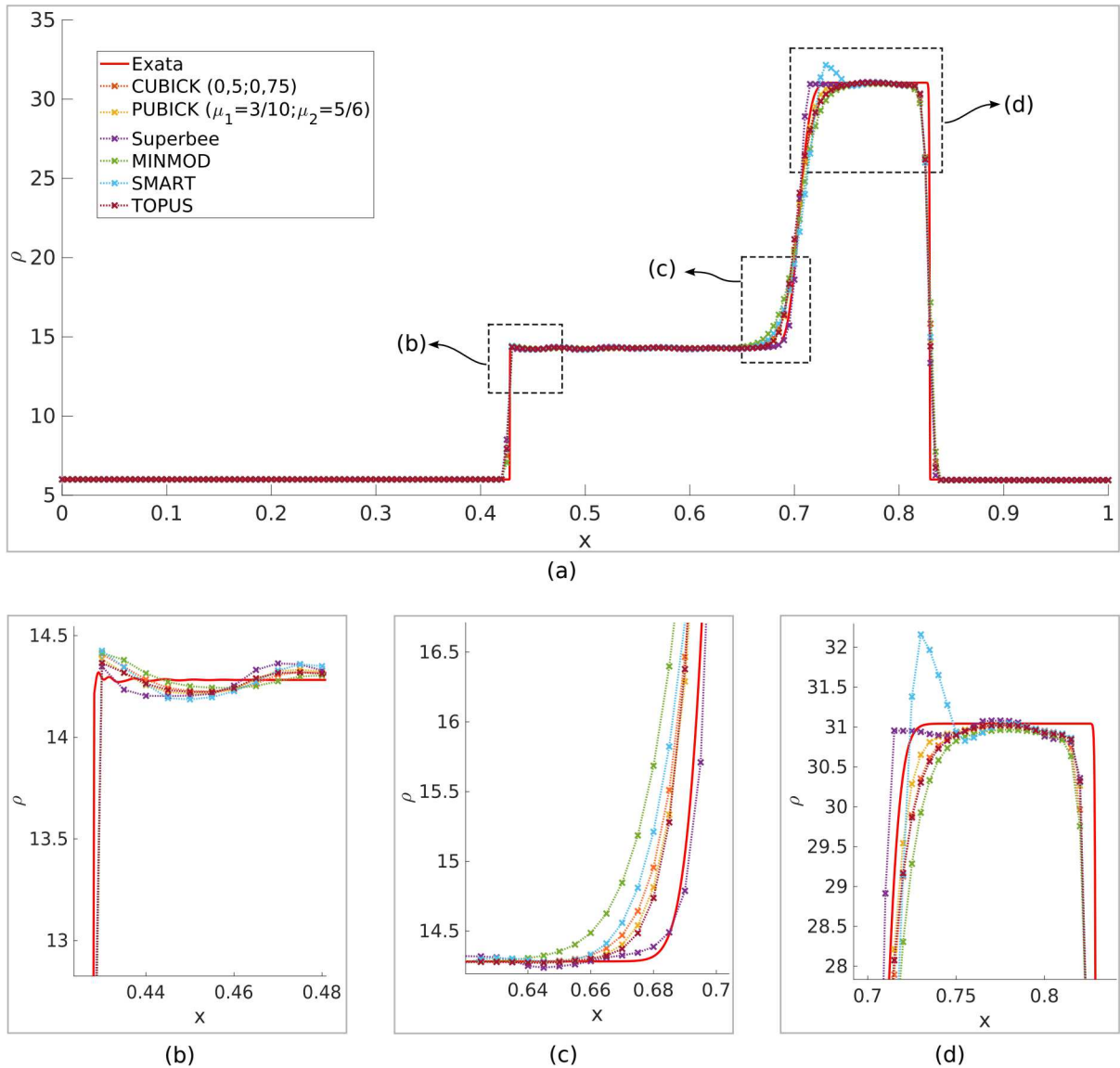


Figura 42 – Caso 2: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 200$.

pretende-se também analisar outros limitadores de fluxo propostos neste trabalho, tais como: PUBICK e FDHPUS.

A geometria deste problema consiste em um domínio 2D, conforme representado na Figura 44, caracterizado pelo tamanho de $d = 1$ m e pela velocidade no topo dada por $U_x = 1$ m/s.

As simulações computacionais são realizadas usando o OpenFOAM[50]. Os perfis das componentes de velocidade $U = (U_x, U_y)$ ao longo do centro do canal são obtidos através de simulações utilizando esses limitadores de fluxo sob diferentes condições de malha e números de Reynolds (Re). Um critério de parada baseado no valor do resíduo da equação governante é usado nas simulações para determinar a convergência. Em particular, uma tolerância de 1×10^{-5} foi usada para o caso de $Re = 1000$, enquanto o valor 1×10^{-4}

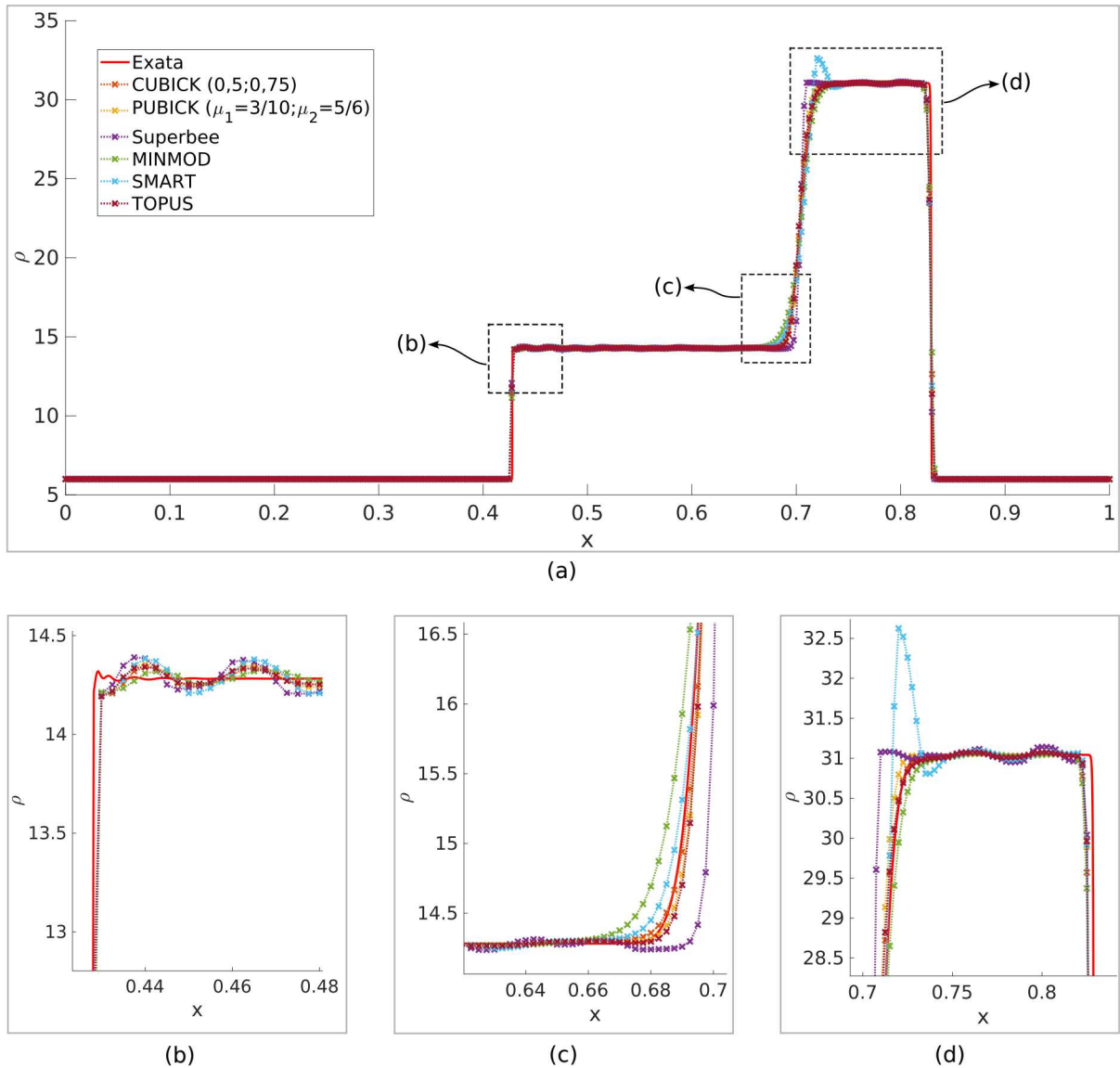


Figura 43 – Caso 2: Soluções numéricas do tubo de choque de Toro obtidas com diferentes limitadores de fluxo para a malha $N = 400$.

foi usado para $Re = 10000$. Resultados numéricos com os esquemas apresentados neste trabalho são comparados com soluções de referência [2].

A Tabela 8 fornece o erro entre a solução numérica e os dados de referência [2] para cada componente de velocidade, considerando diferentes tamanhos de malha e números de Reynolds. Pode-se observar que os resultados obtidos nas simulações utilizando o limitador CUBICK apresentam maior precisão do que o limitador TOPUS quando comparados com a solução de referência de [2], mesmo para malhas mais grosseiras (com poucos nós computacionais).

A Figura 45 apresenta os perfis de velocidade obtidos para diferentes números de Reynolds (Re) usando uma malha com 128×128 células. Os perfis de velocidade resultantes nas simulações de cada esquema são praticamente os mesmos para $Re = 1000$. No entanto,

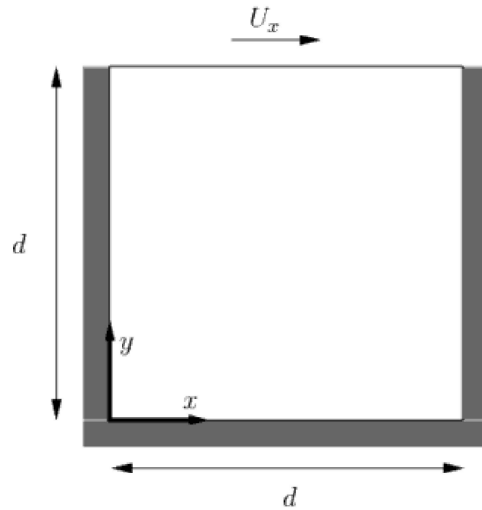


Figura 44 – Representação do problema da cavidade com dimensão $d = 1$ m e componente x da velocidade $U_x = 1$ m/s.

Componente da velocidade	Malha	$Re = 1000$		$Re = 10000$	
		TOPUS	CUBICK	TOPUS	CUBICK
U_x	32×32	0,19362	0,18709	0,44249	0,42827
	64×64	0,07730	0,07484	0,27495	0,27099
	128×128	0,03402	0,01412	0,12754	0,12644
U_y	32×32	0,17337	0,13792	0,43308	0,40241
	64×64	0,04644	0,03552	0,25600	0,24510
	128×128	0,01447	0,01412	0,09015	0,08523

Tabela 8 – Erro $\|E\|_2$ entre as soluções numéricas e os dados de referência [2] para cada componente de velocidade: U_x em $x = 0,5$ ao longo do eixo y e U_y em $y = 0,5$ ao longo do eixo x .

para $Re = 10000$, o resultado obtido usando o limitador CUBICK é ligeiramente mais próximo da solução de referência do que o limitador TOPUS.

Por fim, a Figura 46 mostra as distribuições de velocidade do fluido no instante de convergência da simulação com uma malha de 128×128 células, para o caso $Re = 10000$. Como esperado, um conjunto de vórtices secundários nos cantos do domínio pode ser observado.

7.4.1 Desempenho Computacional

O desempenho computacional do esquema CUBICK proposto foi avaliado para o problema da cavidade quadrada, uma vez que este é mais exigente computacionalmente e, portanto, reflete melhor o desempenho dos esquemas. Além disso, a implementação numérica utilizou a bem estabelecida plataforma **OpenFOAM** para CFD. Para avaliar os tempos de execução, as simulações foram encerradas quando o resíduo atingiu a tolerância especificada, conforme descrito anteriormente. A Tabela 9 informa o tempo total de

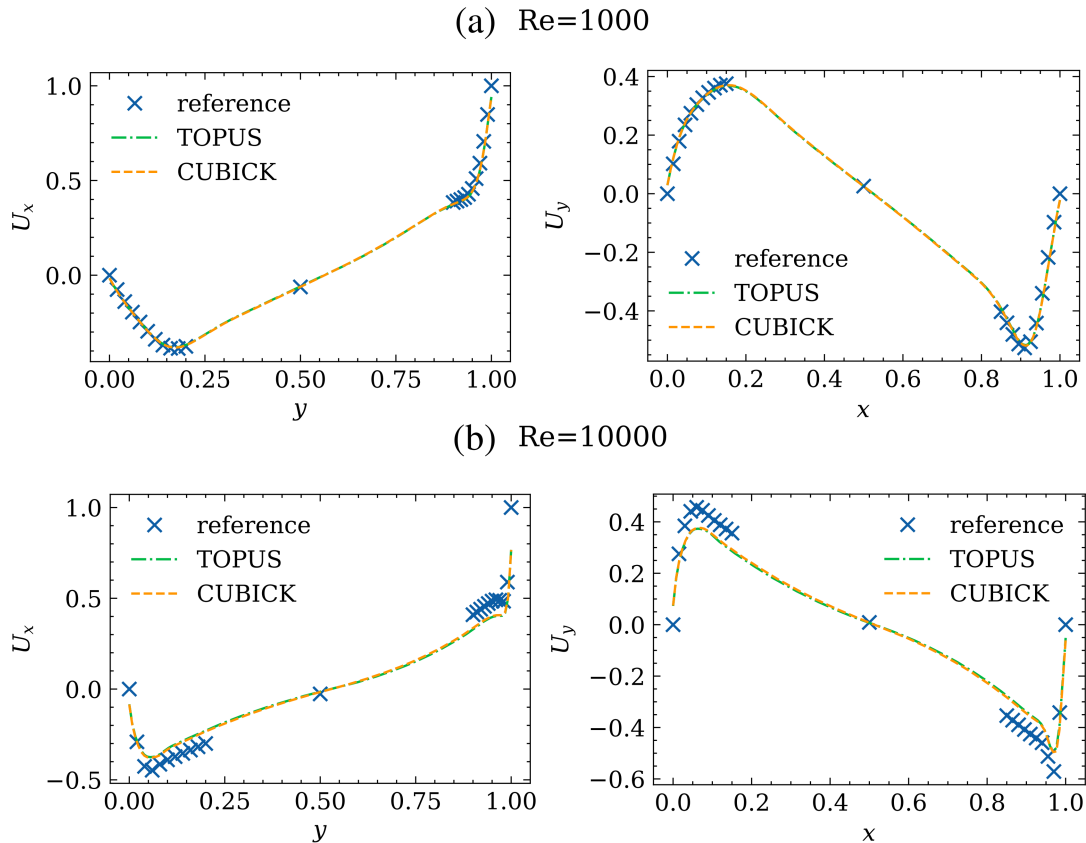


Figura 45 – Comparação entre as soluções numéricas obtidas usando os limitadores TOPUS e CUBICK e as soluções de referência [2] em (a) $Re = 1000$ e (b) $Re = 10000$ para as componentes de velocidade U_x em $x = 0,5$ e U_y em $y = 0,5$, respectivamente.

execução em segundos para TOPUS e CUBICK nos casos de $Re = 1000$ e $Re = 10000$. A partir dos resultados, pode-se observar que o esquema CUBICK foi cerca de 7% e 20% mais lento que o esquema TOPUS para os casos de $Re = 1000$ e $Re = 10000$, respectivamente.

Re	Resolução da Malha	TOPUS	CUBICK
1000	32×32	7,57	9,35
1000	64×64	68,75	90,92
1000	128×128	732,06	785,50
10000	32×32	8,39	9,73
10000	64×64	79,69	97,37
10000	128×128	1023,8	1229,06

Tabela 9 – Tempos totais de execução (em segundos) para a solução numérica do problema da cavidade usando os esquemas TOPUS e CUBICK.

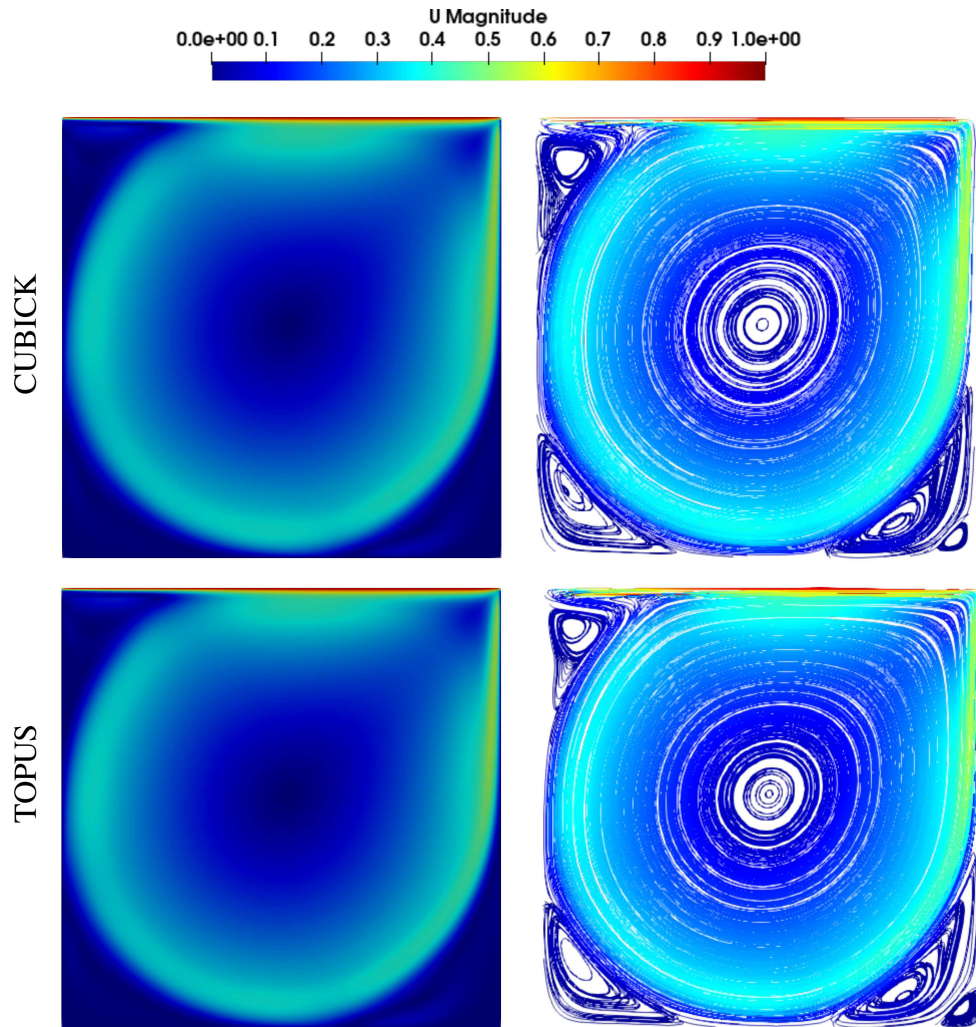


Figura 46 – Gráfico de contorno da magnitude da velocidade (à esquerda) e linhas de corrente (à direita) do campo de velocidade para o caso com $Re = 10000$ utilizando os esquemas CUBICK e TOPUS.

7.5 Discussão

Na Tabela 10, apresenta-se uma comparação entre os esquemas *upwind* desenvolvidos para diferentes problemas 1D. Nessa tabela, “X” indica o esquema que teve o desempenho mais adequado no experimento numérico realizado.

Para a equação de advecção linear com condição inicial descontínua, observa-se que os esquemas TVD são os mais apropriados. No entanto, ao utilizar uma condição inicial suave, o esquema SOBUS, que atende apenas à condição CBC, seria a alternativa mais simples e adequada.

Quanto à equação de convecção-difusão, os esquemas da família PUBICK mostraram um desempenho mais satisfatório em problemas envolvendo essa equação.

Para as equações de Euler, os elementos das famílias CUBICK e PUBICK testados apresentaram desempenhos praticamente similares. Contudo, um esquema PUBICK

mostrou-se uma alternativa satisfatória para o problema do tubo de choque de Shu-Osher modificado.

Por fim, salienta-se que a taxa de convergência obtida ao empregar os esquemas *upwind* aqui propostos foi de segunda ordem. Esta ordem não foi maior do que dois devido à discretização temporal ter sido tratada com um esquema de primeira ordem (método de Euler explícito) e a derivada segunda no espaço foi discretada via esquema numérico de segunda ordem.

Problemas 1D		CUBICK (0,25; 0,45)	CUBICK (0,5; 0,75)	FDHPUS (1,75;0)	PUBICK (3/10; 5/6)	PUBICK (0,493; 0,57)	SOBUS
Advecção Linear (2.1)	Condição suave (7.1)						X
	Condição descontínua (7.2)	X	X	X	X	X	
	Condição descontínua (7.3) – TV				X		
Convecção- Difusão (2.4)	Camada Limite (2.7)						X
	Burgers Viscosa (2.11)					X	
	Burgers Inviscida (2.18)	X	X	X	X	X	X
	Buckley-Leverett (2.23)		X	X	X	X	
Equações de Euler (2.26)	Sod (7.4)		X		X		
	Shu-Osher (7.5)		X		X		
	Shu-Osher Modificado (7.6)				X		
	Toro - caso 1 (7.7)		X		X		
	Toro - caso 2 (7.8)		X		X		

Tabela 10 – Comparação dos esquemas numéricos para diferentes problemas 1D.

8 Conclusões

Esta tese apresentou novos esquemas *upwind* para a aproximação do termo convectivo das equações que surgem no contexto da dinâmica dos fluidos computacional. Em particular, foram apresentados o esquema SOBUS e as famílias de esquemas PUBICK, CUBICK e FDHPUS e EDHPUS (ver apêndice), para a solução numérica de leis de conservação dependentes do tempo.

O esquema SOBUS é baseado em curvas quadráticas de Bézier utilizando três pontos de controle. O esquema atende ao critério BAIR, mas não atende ao critério TVD. O tempo computacional do esquema é baixo em comparação com os demais esquemas analisados.

A família de esquemas CUBICK, desenvolvida com a ideia de trabalhar com curvas cúbicas de Bézier, utiliza quatro pontos de controle. O esquema atende aos critérios estudados: BAIR e TVD. O esquema mostrou um bom desempenho nos testes numéricos propostos. Vale ressaltar que o esquema CUBICK tem um alto custo computacional em comparação com os outros esquemas analisados, devido à estrutura do esquema que depende de diversos cálculos matemáticos para expressar o parâmetro t .

A família de esquemas PUBICK foi desenvolvida com a ideia de usar curvas quadráticas de Bézier. No entanto, ao contrário do esquema SOBUS, este esquema é TVD. O esquema utiliza três pontos de controle em cada sub-região de $[0; 1]$: $[0; 0,5]$ e $[0,5; 1]$. O limitador de fluxo PUBICK está dentro da região TVD de segunda ordem. O esquema apresentou menores erros no problema de Burgers. Além disso, o esquema apresenta um menor tempo computacional em comparação com os demais esquemas analisados que atendem aos critérios BAIR e TVD, sendo superado apenas pelo esquema ADBQUICKEST.

A família de esquemas FDHPUS, baseada na interpolação de Hermite, é uma generalização do esquema HPUS que utiliza dois parâmetros, θ_1 e θ_2 . Os esquemas FDHPUS atendem aos critérios BAIR e TVD, ao contrário do esquema HPUS, que não é TVD. Este esquema generaliza vários esquemas polinomiais conhecidos na literatura: SMARTER, TOPUS, FDPUS-C1 e HPUS.

A família de esquemas EDHPUS foi desenvolvida com a ideia de generalizar esquemas polinomiais de grau menor que oito, tais como SMARTER, TOPUS, FDPUS-C1, SDPUS-C1 e HPUS. Esquemas baseados na interpolação de Hermite de grau maior que oito podem ser criados substituindo $n > 8$ na equação (5.1) (ver apêndice).

Os esquemas foram investigados em vários problemas 1D, a saber: advecção escalar, camada limite, equação de Burgers e Buckley-Leverett. A partir dos resultados numéricos desses problemas, é possível concluir que os esquemas SOBUS, PUBICK, CUBICK e

FDHPUS são estratégias promissoras para lidar com problemas desafiadores que demandam um tratamento numérico adequado para o termo convectivo de EDPs, especialmente o esquema PUBICK, que produziu soluções satisfatórias em comparação com as soluções analíticas e de referência, além de apresentar um tempo computacional baixo, atendendo aos critérios BAIR e TVD.

8.1 Contribuições

Esta tese deu origem aos seguintes produtos:

- Oviedo, P.C.R., Magalhães, M.T., Rocha, B.M., Queiroz, R.A.B. (2024). *A bounded scheme based on Bézier curves for convection-dominated transport problems*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 437, 115502.
doi: [10.1016/j.cam.2023.115502](https://doi.org/10.1016/j.cam.2023.115502)
- Oviedo, P.C.R.; Rocha, B.M.; Queiroz, R.A.B. . *Application of upwind polynomial schemes in solving the viscous Burgers equation*. In: Congresso Brasileiro de Fluidodinâmica Computacional (III CBCFD), 2022, Campinas - SP.
<https://proceedings.science/cbcfd-2022/trabalhos/aplicacao-de-esquemas-polinomiais-upwind-na-solucao-da-equacao-de-burgers-viscos>.
- Rojas Oviedo, P. C., Martins Rocha, B., Alves Bonfim de Queiroz, R. (2023). Um esquema *upwind* por partes baseado em curvas quadráticas de Bézier para discretização de termos convectivos. VETOR - Revista De Ciências Exatas E Engenharias, 33(2), 17–23.
doi: [10.14295/vetor.v33i2.16433](https://doi.org/10.14295/vetor.v33i2.16433)
- Oviedo, P.C.R.; Rocha, B.M.; Queiroz, R.A.B. . Construção de um esquema *upwind* de alta resolução baseado em curvas quadráticas de Bézier. In: Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC 2024), 2024, Porto de Galinhas - PE.
- Aplicativo GeoGebra para visualização dos esquemas propostos e clássicos. Disponível publicamente através dos seguintes links: <https://www.geogebra.org/m/b8kqnact>, <https://www.geogebra.org/m/cvneqftp> (Limitador de fluxo).

8.2 Limitações

Esta tese possui algumas limitações que merecem ser mencionadas e exploradas em trabalhos futuros. Em particular, pretende-se investigar um valor ótimo para os parâmetros μ_1 e μ_2 no esquema PUBICK que melhore as aproximações numéricas, uma vez que as

simulações numéricas neste trabalho foram analisadas apenas para os parâmetros $\mu_1 = \frac{3}{10}$, $\mu_2 = \frac{5}{6}$ e $\mu_1 = 0,493$, $\mu_2 = 0,57$.

Os esquemas CUBICK são definidos a partir de parâmetros (a, b) , cuja escolha impacta a precisão da solução numérica. Pretende-se investigar um procedimento para obter parâmetros ótimos ou, ao menos, aqueles mais indicados para a maioria dos casos. Além disso, pretende-se investigar um possível domínio no esquema CUBICK para o qual (a, b) e (c, d) estejam definidos.

É possível criar esquemas que utilizem curvas de Bézier com mais de quatro pontos de controle, mas isso resultaria em uma estrutura maior e seu custo computacional seria alto.

Apesar do esquema CUBICK ter sido explorado em um problema 2D usando a plataforma `OpenFOAM`, ainda é preciso uma investigação mais exaustiva dos esquemas propostos em diferentes de CFD e geometrias.

A APÊNDICE A - Esquema EDHPUS

Conforme visto na Seção 5.1, o esquema FDHPUS está relacionado a alguns esquemas polinomiais como SMARTER, TOPUS, FDPUS-C1 e HPUS. A relação pode ser estendida a outros esquemas polinomiais de grau maior, aumentando o valor de n para 8 na equação (5.1). Assim, é apresentada a formulação geral de um esquema polinomial *upwind* de grau 8 baseado na interpolação de Hermite, denominado EDHPUS (*Eighth-Degree Hermite Polynomial Upwind Scheme*).

O esquema EDHPUS é construído considerando $n = 8$ na equação (5.1), e $\hat{\phi}_U^{(k)} \in \{0; 0,5; 1\}$ onde $k = 0, \dots, 8$. Assim como na construção do esquema FDHPUS, os coeficientes $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$ são encontrados usando diferenças divididas de ordem 8, levando em consideração as condições de Leonard [3]. Os dados são apresentados na Tabela 11, com $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5 sendo parâmetros livres.

Ponto $(\hat{\phi}_U, \hat{\phi}_f)$ em NVD	$\hat{\phi}_U$	$\hat{\phi}_f$	$\hat{\phi}'_f(\hat{\phi}_U)$	$\hat{\phi}''_f(\hat{\phi}_U)$
$O(0; 0)$	0	0	θ_1	θ_3
$Q(0,5; 0,75)$	0,5	0,75	0,75	θ_4
$P(1; 1)$	1	1	θ_2	θ_5

Tabela 11 – Condições para construir o esquema EDHPUS no NVD [3], onde $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5 são parâmetros livres.

Da Tabela 11, usando diferenças divididas, obtemos os valores dos coeficientes $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$, os quais são mostrados na Tabela 12.

Substituindo os valores obtidos na Tabela 12 na equação (5.1) para $n = 8$, obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}_f(\hat{\phi}_U) &= h[\hat{\phi}_U^{(0)}] + \sum_{k=1}^8 h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}](\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(0)})(\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(1)}) \dots (\hat{\phi}_U - \hat{\phi}_U^{(k-1)}) \\
&= (72\theta_1 - 72\theta_2 + 4\theta_3 - 32\theta_4 + 4\theta_5 - 192)\hat{\phi}_U^8 \\
&\quad + (-316\theta_1 + 260\theta_2 - 18\theta_3 + 128\theta_4 - 14\theta_5 + 840)\hat{\phi}_U^7 \\
&\quad + (558\theta_1 - 362\theta_2 + 33\theta_3 - 200\theta_4 + 19\theta_5 - 1468)\hat{\phi}_U^6 \\
&\quad + (-501\theta_1 + 243\theta_2 - 31,5\theta_3 + 152\theta_4 - 12,5\theta_5 + 1290)\hat{\phi}_U^5 \\
&\quad + (234\theta_1 - 79\theta_2 + 16,5\theta_3 - 56\theta_4 + 4\theta_5 - 579)\hat{\phi}_U^4 \\
&\quad + (-48\theta_1 + 10\theta_2 - 4,5\theta_3 + 8\theta_4 - 0,5\theta_5 + 110)\hat{\phi}_U^3 \\
&\quad + (0,5\theta_3)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U.
\end{aligned} \tag{A.1}$$

Define-se então o esquema EDHPUS em variáveis normalizadas, o qual, fora da

$\hat{\phi}_U^{(0)} = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}] = 0$				
$\hat{\phi}_U^{(1)} = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}] = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \hat{\phi}_U^{(1)}] = \theta_1$			
$\hat{\phi}_U^{(2)} = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}] = 0$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}] = \theta_1$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}] = \frac{\theta_3}{2}$		
$\hat{\phi}_U^{(3)} = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}] = 1,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}] = 3 - 2\theta_1$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(3)}] = 6 - 4\theta_1 - \theta_3$	
$\hat{\phi}_U^{(4)} = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}] = -1,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(4)}] = -9 + 4\theta_1$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(4)}] = 16\theta_1 + 2\theta_3 - 30$
$\hat{\phi}_U^{(5)} = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(5)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 0,75$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \hat{\phi}_U^{(4)}, \hat{\phi}_U^{(5)}] = \frac{\theta_4}{2}$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = \theta_4 + 3$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 2\theta_4 - 8\theta_1 + 24$
$\hat{\phi}_U^{(6)} = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(6)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(5)}, \hat{\phi}_U^{(6)}] = 0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}, \hat{\phi}_U^{(5)}, \hat{\phi}_U^{(6)}] = -0,5$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(6)}] = -1 - \theta_4$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(6)}] = -2\theta_4 - 4$
$\hat{\phi}_U^{(7)} = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(7)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(6)}, \hat{\phi}_U^{(7)}] = \theta_2$	$h[\hat{\phi}_U^{(5)}, \hat{\phi}_U^{(6)}, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 2\theta_2 - 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 4\theta_2 - 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 8\theta_2 + 2\theta_4$
$\hat{\phi}_U^{(8)} = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(8)}] = 1$	$h[\hat{\phi}_U^{(7)}, \hat{\phi}_U^{(8)}] = \theta_2$	$h[\hat{\phi}_U^{(6)}, \hat{\phi}_U^{(7)}, \hat{\phi}_U^{(8)}] = \frac{\theta_5}{2}$	$h[\hat{\phi}_U^{(5)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = \theta_5 - 4\theta_2 + 2$	$h[\hat{\phi}_U^{(4)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = 2\theta_5 - 16\theta_2 + 6$

$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(5)}] = 4\theta_4 - 48\theta_1 - 4\theta_3 + 108$			
$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(6)}] = 8\theta_1 - 4\theta_4 - 28$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(6)}] = -8\theta_4 + 56\theta_1 + 4\theta_3 - 136$		
$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 8\theta_2 + 4\theta_4 + 4$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 8\theta_2 + 8\theta_4 - 8\theta_1 + 32$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(7)}] = 8\theta_2 + 16\theta_4 - 64\theta_1 - 4\theta_3 + 168$	
$h[\hat{\phi}_U^{(3)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = 4\theta_5 - 48\theta_2 - 4\theta_4 + 12$	$h[\hat{\phi}_U^{(2)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = 4\theta_5 - 56\theta_2 - 8\theta_4 + 8$	$h[\hat{\phi}_U^{(1)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = 4\theta_5 - 64\theta_2 - 16\theta_4 + 8\theta_1 - 24$	$h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(8)}] = 4\theta_5 - 72\theta_2 - 32\theta_4 + 72\theta_1 + 4\theta_3 - 192$

Tabela 12 – Cálculo de $h[\hat{\phi}_U^{(0)}, \dots, \hat{\phi}_U^{(k)}]$ usando diferenças divididas com dados da Tabela 11.

região NVD, coincide com o esquema FOU, da seguinte forma:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} (72\theta_1 - 72\theta_2 + 4\theta_3 - 32\theta_4 + 4\theta_5 - 192)\hat{\phi}_U^8 \\ +(-316\theta_1 + 260\theta_2 - 18\theta_3 + 128\theta_4 - 14\theta_5 + 840)\hat{\phi}_U^7 \\ +(558\theta_1 - 362\theta_2 + 33\theta_3 - 200\theta_4 + 19\theta_5 - 1468)\hat{\phi}_U^6 \\ +(-501\theta_1 + 243\theta_2 - 31,5\theta_3 + 152\theta_4 - 12,5\theta_5 + 1290)\hat{\phi}_U^5 \\ +(234\theta_1 - 79\theta_2 + 16,5\theta_3 - 56\theta_4 + 4\theta_5 - 579)\hat{\phi}_U^4 \\ +(-48\theta_1 + 10\theta_2 - 4,5\theta_3 + 8\theta_4 - 0,5\theta_5 + 110)\hat{\phi}_U^3 \\ +(0,5\theta_3)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Aplicando a definição de NV (ver equação (3.1)) na equação (A.2), o esquema EDHPUS em variáveis não normalizadas é escrito da seguinte forma

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_R + (\phi_D - \phi_R) \left[(72\theta_1 - 72\theta_2 + 4\theta_3 - 32\theta_4 + 4\theta_5 - 192)\hat{\phi}_U^8 \right. \\ \quad +(-316\theta_1 + 260\theta_2 - 18\theta_3 + 128\theta_4 - 14\theta_5 + 840)\hat{\phi}_U^7 \\ \quad +(558\theta_1 - 362\theta_2 + 33\theta_3 - 200\theta_4 + 19\theta_5 - 1468)\hat{\phi}_U^6 \\ \quad +(-501\theta_1 + 243\theta_2 - 31,5\theta_3 + 152\theta_4 - 12,5\theta_5 + 1290)\hat{\phi}_U^5 \\ \quad +(234\theta_1 - 79\theta_2 + 16,5\theta_3 - 56\theta_4 + 4\theta_5 - 579)\hat{\phi}_U^4 \\ \quad +(-48\theta_1 + 10\theta_2 - 4,5\theta_3 + 8\theta_4 - 0,5\theta_5 + 110)\hat{\phi}_U^3 \\ \quad \left. +(0,5\theta_3)\hat{\phi}_U^2 + \theta_1\hat{\phi}_U \right], & \hat{\phi}_U \in [0; 1], \\ \phi_U, & \hat{\phi}_U \notin [0; 1]. \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

O limitador de fluxo correspondente ao esquema EDHPUS é obtido através das equações (3.8), (3.10) e (A.2), então temos:

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{1}{(1+r)^\gamma} \left\{ 2(1 - \theta_2)r^7 + (-14\theta_2 + \theta_5 + 14)r^6 \right. \\ \quad +(-20\theta_1 + 54\theta_2 - \theta_3 + 16\theta_4 - 3\theta_5 + 78)r^5 \\ \quad +(58\theta_1 - 58\theta_2 + 3\theta_3 - 32\theta_4 + 3\theta_5 - 128)r^4 \\ \quad +(-54\theta_1 + 20\theta_2 - 3\theta_3 + 16\theta_4 - \theta_5 + 178)r^3 \\ \quad \left. +(14\theta_1 + \theta_3 - 14)r^2 + 2(\theta_1 - 1)r \right\}, & r \geq 0, \\ 0, & r < 0. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Com o esquema EDHPUS, encontram-se relações com mais esquemas polinomiais *upwind* conhecidos da literatura, que neste caso dependerão dos valores $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5 . As relações destes esquemas com o EDHPUS e os valores de θ são mostrados na Tabela 13. Note que: $\alpha \in [-2; 2]$ é o parâmetro livre no esquema TOPUS, $\gamma \in [4; 12]$ é o parâmetro livre do esquema SDPUS-C1 e $\lambda \in [16; 95]$ o parâmetro livre do esquema EPUS.

Esquemas polinomiais	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5
SMARTER [17]	2,5	0,5	-5	-2	1
TOPUS [5]	$\frac{-\alpha+10}{4}$	$\frac{\alpha+2}{4}$	$\frac{5}{2}\alpha - 5$	$-\frac{1}{2}\alpha - 2$	$\frac{5}{2}\alpha + 1$
FDPUS-C1 [18]	1	1	12	-4	4
SDPUS-C1 [19]	1	1	2γ	$-7 + \frac{\gamma}{2}$	$-8 + 2\gamma$
EPUS [20]	1	1	0	$\frac{1}{8}\lambda - 9$	0
HPUS [16]	2	0	2	-2	-6
FDHPUS			$-12\theta_1 - 2\theta_2 + 26$	$\theta_1 - \theta_2 - 4$	$2\theta_1 + 12\theta_2 - 10$

Tabela 13 – Esquemas polinomiais *upwind* que podem ser derivados do esquema EDHPUS (equação (A.2)) escolhendo os parâmetros $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ e θ_5 .

A Figura 47 mostra os esquemas polinomiais SDPUS-C1 ($\gamma = 12$), EPUS ($\lambda = 16$), HPUS, TOPUS ($\alpha = 2$), FDPUS-C1, SMARTER, FDHPUS ($\theta_1 = 1,5; \theta_2 = 0$) e EDHPUS ($\theta_1 = 1,75; \theta_2 = 0,25; \theta_3 = 3; \theta_4 = -1; \theta_5 = 8$) em variáveis normalizadas.

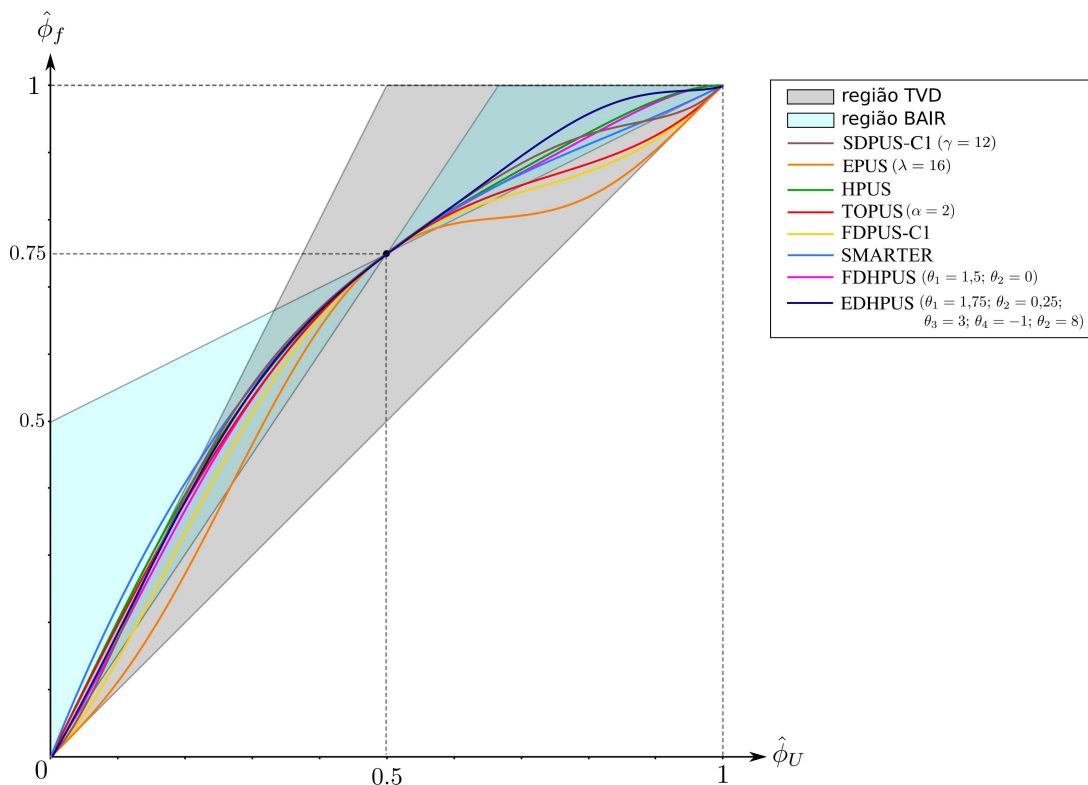


Figura 47 – Esquemas polinomiais *upwind* que podem ser derivados do esquema EDHPUS.

A Figura 48 mostra o limitador de fluxo para os esquemas polinomiais SDPUS-C1 ($\gamma = 12$), EPUS ($\lambda = 16$), HPUS, TOPUS ($\alpha = 2$), FDPUS-C1, SMARTER, FDHPUS ($\theta_1 = 1,5; \theta_2 = 0$) e EDHPUS ($\theta_1 = 1,75; \theta_2 = 0,25; \theta_3 = 3; \theta_4 = -1; \theta_5 = 8$).

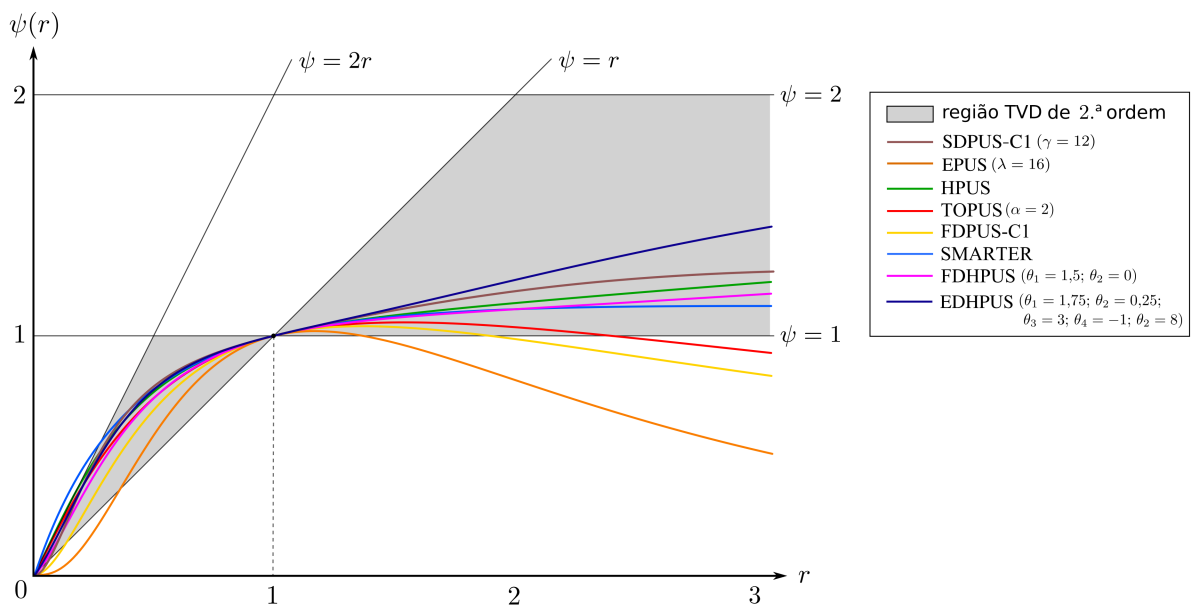


Figura 48 – Limitador de fluxo de esquemas polinomiais *upwind* derivados do esquema EDHPUS.

REFERÊNCIAS

- 1 SWEBY, P. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 21, n. 5, p. 995–1011, 1984.
- 2 ERTURK, E.; CORKE, T.; GÖKÇÖL, C. Numerical solutions of 2-d steady incompressible driven cavity flow at high reynolds numbers. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 48, n. 7, p. 747–774, 2005.
- 3 LEONARD, B. Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 8, n. 10, p. 1291–1318, 1988.
- 4 ZHANG, D. et al. A review on TVD schemes and a refined flux-limiter for steady-state calculations. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 302, p. 114–154, 2015.
- 5 FERREIRA, V. et al. A bounded upwinding scheme for computing convection-dominated transport problems. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 57, p. 208–224, 2012.
- 6 CANDEZANO, M. et al. Numerical simulation of upwinding schemes applied to complex fluid dynamics equations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 41, n. 429, p. 1–15, 2019.
- 7 CAI, X. et al. Unsteady aerodynamics simulation of a full-scale horizontal axis wind turbine using cfd methodology. *Energy Conversion and Management*, Elsevier, v. 112, p. 146–156, 2016.
- 8 SUN, Z.; XU, L. Computational fluid dynamics in coronary artery disease. *Computerized medical imaging and graphics*, Elsevier, v. 38, n. 8, p. 651–663, 2014.
- 9 WATERSON, N.; DECONINCK, H. Design principles for bounded higher-order convection schemes - a unified approach. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 224, p. 182–207, May 2007.
- 10 ALVES, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, E. A convergent and universally bounded interpolation for the treatment of advection. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 41, p. 47–75, 2003.
- 11 HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, v. 49, p. 357–393, 1983.
- 12 GASKELL, P.; LAU, A. Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 8, n. 6, p. 617–641, 1988.
- 13 SONG, B. et al. On a higher-order bounded discretization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 32, p. 881–897, 2000.
- 14 VARONOS, A.; BERGELES, G. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 26, p. 1–16, 1998.

- 15 QUEIROZ, R. *Desenvolvimento e teste de esquemas “upwind” de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres*. 2009. Dissertação de mestrado - ICMC/USP.
- 16 GAO, W.; LI, H.; LIU, Y. A high resolution NV/TVD hermite polynomial upwind scheme for convection-dominated problems. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Wiley Online Library, v. 36, n. 9, p. 1107–1122, 2013.
- 17 SHIN, J.; CHOI, Y. Study on the improvement of the convective differencing scheme for the high-accuracy and stable resolution of the numerical solution. *Transactions of the Korean Society of Mechanical Engineers*, v. 16, n. 6, 1992.
- 18 LIMA, G. A. B. d. *Desenvolvimento de estratégias de captura de descontinuidades para leis de conservação e problemas relacionados em dinâmica de fluidos*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2010.
- 19 LIMA, G. A.; CORRÊA, L.; FERREIRA, V. G. Two upwinding schemes for nonlinear problems in fluid dynamics. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2011. v. 285, n. 1, p. 012034.
- 20 CORREA, L. et al. A C2-continuous high-resolution upwind convection scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 72, n. 12, p. 1263–1285, 2013.
- 21 PING-LI, H.; WEN-QUAN, T.; MAO-ZHENG, Y. Refinement of the convective boundedness criterion of Gaskell and Lau. *Engineering Computations*, MCB UP Limited, v. 20, n. 8, p. 1023–1043, 2003.
- 22 WEI, J.-J. et al. A new high-order-accurate and bounded scheme for incompressible flow. *Numerical Heat Transfer: Part B*, Taylor & Francis, v. 43, n. 1, p. 19–41, 2003.
- 23 MORTON, K.; MAYERS, D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. 2nd. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- 24 KARPMAN, V. *Non-linear Waves in Dispersive Media*. New York: Pergamon, 1975.
- 25 WHITHAM, G. *Linear and Nonlinear Waves*. New York: John Wiley & Sons, 1974.
- 26 CORRE, C.; LERAT, A. High-order residual-based compact schemes for advection-diffusion problems. *Computers & Fluids*, v. 37, p. 505–519, 2008.
- 27 KUTLUAY, S.; ESEN, A.; DAG, I. Numerical solutions of the Burgers’ equation by the least-squares quadratic B-spline finite element method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 167, n. 1, p. 21–33, 2004.
- 28 PLATZMAN, G. W. An exact integral of complete spectral equations for unsteady one-dimensional flow. *Tellus*, Taylor & Francis, v. 16, n. 4, p. 422–431, 1964.
- 29 AHMED, R. Numerical schemes applied to the burgers and Buckley-Leverett equations. *University of Reading*, 2004.
- 30 LIE, H. S.; MUSHOM, L.; STAPNES, M. S. *Buckley-Leverett Equation*. 2018. TMA4212.

- 31 TORO, E. *Riemann Solvers and Numerical methods for fluid Dynamics*. A practical introduction. [S.l.]: Springer, 1991.
- 32 COURANT, R.; ISAACSON, E.; REES, M. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, Wiley Online Library, v. 5, n. 3, p. 243–255, 1952.
- 33 SHYY, W.; THAKUR, S.; WRIGHT, J. Second-order upwind and central difference schemes for recirculating flow computation. *AIAA Journal*, v. 30, p. 923–932, 1992.
- 34 PEYRET, R.; TAYLOR, T. D. *Computational methods for fluid flow*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- 35 YU, B. et al. Discussion on numerical stability and boundedness of convective discretized scheme. *Numerical Heat Transfer: Part B*, Taylor & Francis, v. 40, n. 4, p. 343–365, 2001.
- 36 GAO, W. et al. An oscillation-free high order TVD/CBC-based upwind scheme for convection discretization. *Numerical Algorithms*, v. 59, n. 1, p. 29–50, 2012.
- 37 FERREIRA, V. G. et al. Assessment of a high-order finite difference upwind scheme for the simulation of convection–diffusion problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Wiley Online Library, v. 60, n. 1, p. 1–26, 2009.
- 38 ROE, P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 18, n. 1, p. 337–365, 1986.
- 39 ROE, P. L. Some contributions to the modelling of discontinuous flows. *Large-scale computations in fluid mechanics*, p. 163–193, 1985.
- 40 MENEZES, L. A. P. de. *Estudo de esquemas de alta resolução em algoritmos simultaneos e sequenciais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico., 1996.
- 41 BOEHM, W.; MÜLLER, A. On de Casteljau’s algorithm. *Computer Aided Geometric Design*, Elsevier, v. 16, n. 7, p. 587–605, 1999.
- 42 GRAU, L. T.; FRANCÉS, J. F. V. *Geometría moderna para Ingeniería*. [S.l.]: Editorial Club Universitario, 2012.
- 43 OVIEDO, P. C. R. et al. A bounded scheme based on bézier curves for convection-dominated transport problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, v. 437, p. 115502, 2024.
- 44 OVIEDO, P. C. R.; ROCHA, B. M.; QUEIROZ, R. A. B. de. Um esquema upwind por partes baseado em curvas quadráticas de Bézier para discretização de termos convectivos. *VETOR-Revista de Ciências Exatas e Engenharias*, v. 33, n. 2, p. 17–23, 2023.
- 45 FARIN, G. E. *Curves and surfaces for CAGD: a practical guide*. [S.l.]: Morgan Kaufmann, 2002.
- 46 PRAUTZSCH, H.; BOEHM, W.; PALUSZNY, M. *Bézier and B-spline techniques*. [S.l.]: Springer, 2002.

- 47 JR., J. E. D.; SCHNABEL, R. B. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. [S.l.]: SIAM, 1996.
- 48 DAWIDOWICZ, A. How to solve third degree equations without moving to complex numbers. *Annales Universitatis Paedagogicae Cracoviensis / Studia ad Didacticam Mathematicae Pertinentia*, v. 12, p. 123–131, 2020.
- 49 BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. *Numerical Analysis*. 10th revised ed.: Cengage Learning, 2015.
- 50 OPENFOAM. *The OpenFOAM Foundation*. 2022. Available at: <https://openfoam.org/>.
- 51 BALSARA, D. S.; SHU, C.-W. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 160, n. 2, p. 405–452, 2000.
- 52 WEI, G.; GU, Y. Conjugated filter approach for solving Burger's equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 149, p. 439–456, 2002.
- 53 PIESSENS, R. et al. *Quadpack: A Subroutine Package for Automatic Integration*. [S.l.]: Springer–Verlag, 1983.
- 54 SOD, G. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, v. 27, 1978.
- 55 SHU, C.-W.; OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 83, 1989.
- 56 TITAREV, V.; TORO, E. Weno schemes based on upwind and centred tvd fluxes. *Computers and Fluids*, v. 34, p. 705–720, 2005.
- 57 GHIA, U.; GHIA, K.; SHIN, C. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, v. 48, n. 3, p. 387–411, 1982.
- 58 DOERING, C. R.; GIBBON, J. D. *Applied analysis of the Navier-Stokes equations*. [S.l.]: Cambridge university press, 1995.