

Um Novo Método Euleriano-Lagrangeano para Aproximação de Leis de Conservação

S. MANCUSO¹, F. PEREIRA², G. de SOUZA³, LABTRAN, Departamento de Modelagem Computacional, IPRJ, UERJ, 28630-050 Nova Friburgo, RJ, Brasil.

Resumo. Apresenta-se aqui um novo método de alta resolução para leis de conservação escalares que utiliza de uma metodologia do tipo REA (“Reconstruction”, “Evolve”, “Average”). O método combina a estratégia de [5] para as etapas de “Reconstruction” e “Average” com um método lagrangeano localmente conservativo (veja [3, 1]) para a etapa de “Evolve”. Estabelece-se a relação entre o novo esquema e uma estratégia puramente euleriana. O novo esquema foi utilizado para aproximar numericamente leis de conservação escalares em uma dimensão espacial e produziu resultados bastante satisfatórios quando comparados com o esquema central de segunda ordem de [5]. O novo esquema foi aplicado na aproximação numérica das equações de Burgers e Buckley-Leverett, sendo esta última utilizada com o intuito de avaliar o desempenho do método em escoamentos bifásicos em meios porosos.

1. Introdução

Na modelagem de fenômenos físicos por leis de conservação hiperbólica, frequentemente aparecem não-linearidades que dificultam o desenvolvimento de métodos que façam o cálculo preciso da solução numérica. Estas soluções não devem apresentar oscilações espúrias ou difusão numérica acentuada. Neste sentido, apresenta-se aqui uma metodologia do tipo REA: “Reconstruction”, “Evolve” e “Average” que além das características desejáveis acima, não faz uso de soluções de problemas de Riemann e é baseada em uma estratégia euleriano-lagrangeana. A etapa de “Reconstruction” caracteriza-se por uma aproximação linear por partes. A metodologia foi aplicada em duas equações: a equação de Burgers, e a equação de Buckley-Leverett, esta última usada na modelagem de escoamentos bifásicos em reservatórios de petróleo.

2. O novo Método Euleriano-Lagrangeano

A seguir é apresentada a construção do novo esquema euleriano-lagrangeano, baseado no desenvolvimentos de [3, 4]. O método utiliza evoluções para malhas deslo-

¹smancuso@iprj.uerj.br

²pereira@iprj.uerj.br

³ev_grazione@iprj.uerj.br

cadadas. Considera-se uma lei de conservação hiperbólica em uma dimensão espacial, como a apresentada pela equação (2.1), onde f é a função de fluxo

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad (2.1)$$

ou na sua forma divergente, como a equação

$$\nabla_{t,x} \cdot \begin{pmatrix} u \\ f(u) \end{pmatrix} = 0 \quad x \in \mathbb{R}, \quad \text{com condição inicial} \quad u(x, 0) = u_0(x). \quad (2.2)$$

2.1. Etapas “Average” e “Reconstruction”

Uma discretização espacial em malha uniforme de comprimento Δx para cada célula é aplicada à equação (2.1). Na malha original (deslocada), x_j ($x_{j-1/2}$ ou $x_{j+1/2}$) representará o centro (vértice) da j -ésima célula (j é um inteiro) e $x_{j-1/2}$ e $x_{j+1/2}$, os seus vértices (centros). A Figura 1 ilustra a construção de malhas. Define-se U_j como a discretização constante por partes de u :

$$U_j(t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t) dx. \quad (2.3)$$

As variáveis discretizadas calculadas no tempo t^n são denotadas acrescentando-lhes o índice superior n , um inteiro positivo. O n -ésimo intervalo de tempo é denotado por Δt^n (o instante t^n é a soma dos intervalos anteriores). Considerando a formulação fraca de (2.1) (ver [2]) e a discretização (2.3) pode-se calcular o valor de U em uma determinada região através da equação (2.4) no instante $n + 1$,

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = - \frac{\Delta f_j^n}{\Delta x} \quad \Rightarrow \quad U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t \Delta f_j^n}{\Delta x}, \quad (2.4)$$

onde

$$\Delta f_j = f_{jr} - f_{jl} \quad \text{sendo} \quad \begin{cases} f_{jr} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt \\ f_{jl} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u(x_{j-1/2}, t)) dt \end{cases}. \quad (2.5)$$

A idéia do método é aproximar f_{jr} e f_{jl} por \hat{f}_{jr} e \hat{f}_{jl} , onde $\hat{f}_{jr} \Delta t$ e $\hat{f}_{jl} \Delta t$ são os fluxos associados a cada fronteira, como mostrado na seção (2.2.). A equação abaixo apresenta o esquema usando malha deslocada:

$$U_{j+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2}(U_j^n + U_{j+1}^n) - \frac{\Delta t \Delta f_{j+1/2}^n}{\Delta x}, \quad (2.6)$$

Com alguns ajustes, pode-se aumentar a precisão do método. Primeiro, substitui-se a função constante por partes $U(x, t)$ por uma função linear por partes $L(x, t)$. Para tanto, obtém-se uma inclinação $U'_j(t)$, associada à célula de centro x_j . A derivada espacial numérica é obtida através de um tipo de MinMod (Módulo mínimo; ver [2]), apresentado pela equação:

$$\frac{\Delta U_j(t)}{\Delta x} = \alpha \operatorname{modmin} \{a, b, c\} a/|a|, \quad (2.7)$$

esquema até terminar simulação. A metodologia que utiliza discretização constante por partes foi denominada de FLCELM (“Forward Locally Conservative Eulerian Lagrangian Method”), enquanto o método que usa a reconstrução linear foi chamado de FLCELM-R (FLCELM with “Reconstruction”).

2.2. Cálculo dos fluxos nas fronteiras

Os valores de u no futuro necessários para o cálculo de $\Delta f \Delta t$ são obtidos através de uma evolução lagrangeana. Usando a estratégia de construção dos tubos no espaço-tempo do método *LCELM* ([1]), considera-se a região do espaço-tempo $\mathcal{V} = \mathbb{R} \times [t^n, t^{n+1}]$. Seja \mathcal{K} um intervalo real $[a, b]$. Define-se um subconjunto $\mathcal{D} = \mathcal{D}^n(\mathcal{K})$ de \mathcal{V} como segue: para $x = a, b$ constrói-se a solução $y(x, t)$ do seguinte problema de valor inicial, dado por

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = \frac{f(u)}{u}, & t^n \leq t < t^{n+1} \\ y(x, t^n) = x. \end{cases} \quad (2.12)$$

Então, tem-se a equação

$$\hat{x}^{n+1}(x) = y(x, t^{n+1}). \quad (2.13)$$

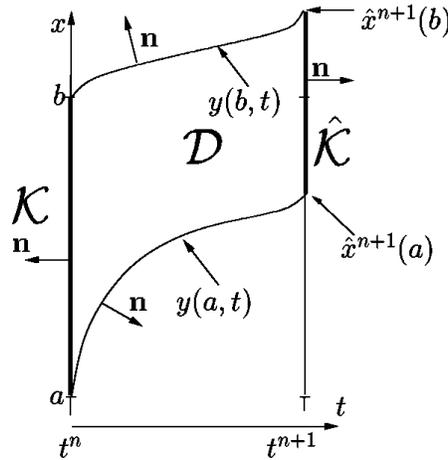


Figura 2: Tubos integrais no espaço-tempo.

Denota-se $\mathcal{K}^{n+1} = [\hat{x}^{n+1}(a), \hat{x}^{n+1}(b)]$ por $\hat{\mathcal{K}}$. Seja \mathcal{D} o tubo (denominado tubo integral) determinado por \mathcal{K} , $\hat{\mathcal{K}}$, e as curvas integrais (soluções da equação (2.12)). A Figura 2 apresenta os conjuntos \mathcal{K} , $\hat{\mathcal{K}}$ e o domínio \mathcal{D} . Pode ser observado que, para t^n suficientemente pequeno, a função que associa a cada ponto do domínio espacial x em t^n o ponto $\hat{x}^{n+1}(x)$ é bijetiva e, desta forma, esta construção pode ser levada

a cabo. Denomina-se por $\mathbf{n}(x, t)$ o vetor unitário normal à fronteira de \mathcal{D} ($\partial\mathcal{D}$); ele é ortogonal ao vetor $(u, f(u))^t$ nas curvas laterais de \mathcal{D} (ver equação (2.12)). Portanto, integrando a equação (2.2) sobre \mathcal{D} e usando o teorema da divergência obtém-se a equação

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}} \nabla_{t,x} \cdot \begin{pmatrix} u \\ f(u) \end{pmatrix} dx dt &= \oint_{\partial\mathcal{D}} \begin{pmatrix} u \\ f(u) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} dL \\ &= \int_{\hat{\mathcal{K}}} u(x, t^{n+1}) dx - \int_{\mathcal{K}} u(x, t^n) dx = 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Localmente, tem-se

$$\int_{\mathcal{K}} u(x, t^n) dx = \int_{\hat{\mathcal{K}}} u(x, t^{n+1}) dx. \quad (2.15)$$

Considera-se, para a evolução temporal, U^n em um instante t^n em malha uniforme. Então, são resolvidos os problemas de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = \frac{f(U_j^n)}{U_j^n} & t^n \leq t < t^{n+1} \text{ e } j \in \mathbb{Z}, \\ y(x_j^n, t^n) = x_j^n \end{cases} \quad (2.16)$$

obtendo os pontos $\hat{x}^{n+1}(x_j^n)$, $j \in \mathbb{Z}$; estes pontos determinam os vértices de uma malha não uniforme no instante t^{n+1} . Assim, constrói-se a malha não uniforme com vértices $\bar{x}_{j-1/2}^{n+1} = \hat{x}^{n+1}(x_j^n)$ e $\bar{x}_{j+1/2}^{n+1} = \hat{x}^{n+1}(x_{j+1}^n)$, $j \in \mathbb{Z}$, como é ilustrado pela Figura 3. Considera-se a média

$$\hat{U}_j^{n+1} = \frac{1}{h_j^{n+1}} \int_{\hat{\mathcal{K}}} u(x, t^{n+1}) dx. \quad (2.17)$$

De acordo com a equação (2.15), o valor de \hat{U}_j^{n+1} em cada intervalo $[\bar{x}_{j-1/2}^{n+1}, \bar{x}_{j+1/2}^{n+1})$, $j \in \mathbb{Z}$, da nova malha é dado por

$$\hat{U}_j^{n+1} = \frac{1}{h_j^{n+1}} \left(\int_{x_j^n}^{x_{j+1/2}^{n+1}} U(x, t^n) dx + \int_{x_{j+1/2}^n}^{x_{j+1}^n} U(x, t^n) dx \right). \quad (2.18)$$

No caso da reconstrução linear por partes

$$\hat{U}_j^{n+1} = \frac{1}{h_j^{n+1}} \left(\int_{x_j^n}^{x_{j+1/2}^{n+1}} L_j(x, t^n) dx + \int_{x_{j+1/2}^n}^{x_{j+1}^n} L_j(x, t^n) dx \right). \quad (2.19)$$

Com uso da reconstrução, os tubos integrais precisam de uma melhor aproximação para os pontos $\hat{x}^{n+1}(x_j^n)$. Neste caso, os tubos são construídos por M passos: no primeiro o tubo é construído da forma convencional com um avanço de tempo $\Delta t/M$ usando U_j indo de x_j até $x_{j,1}$. Para calcular $x_{j,i+1}$ calcula-se $U_{j,i}$ em $(x_{j,i}, t^n + i\Delta t/M)$ por expansão em série de Taylor no tempo, sobre $L_j(x_{j,i}, t^n)$,

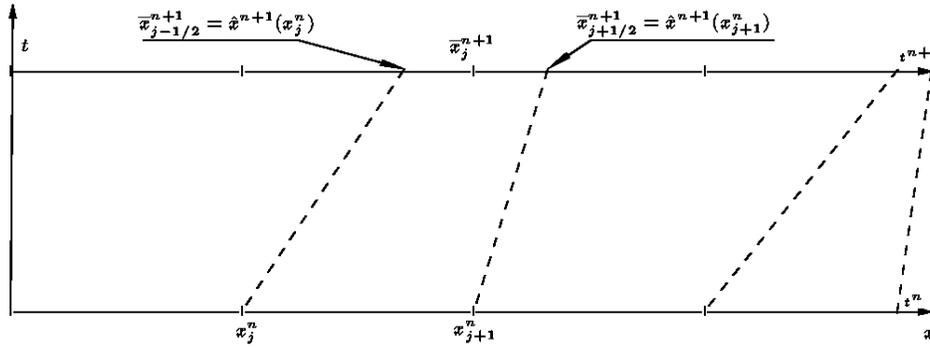


Figura 3: Linhas tracejadas correspondem às tangentes à curva integral no tempo t^n .

obtendo-se $x_{j,i+1} = x_{j,i} + \frac{f(U_{j,i})}{U_{i,j}} \frac{\Delta t}{M}$. Isto é feito enquanto $i < M$ (até completar o Δt total permitido). Assim

$$\hat{f}_{jl} = \frac{1}{\Delta t} \int_{x_j^n}^{\hat{x}^{n+1}(x_j^n)} \hat{U}_j(x, t^{n+1}) dx \text{ e } \hat{f}_{jr} = \frac{1}{\Delta t} \int_{x_{j+1}^n}^{\hat{x}^{n+1}(x_{j+1}^n)} \hat{U}_{j+1}(x, t^{n+1}) dx. \quad (2.20)$$

2.3. Restrição no passo de tempo

Para a evolução temporal, toma-se um incremento Δt que não permita que a solução dos problemas de Riemann oriundos dos vértices das células atinjam os centros das mesmas. O Δt assume dois valores durante a simulação, um para a malha original e outro para a deslocada (faz-se uso do menor tamanho de célula da malha, h_{min}). Utiliza-se a condição:

$$\max \left\{ f'_{sup} - \left(\frac{f(U)}{U} \right)_{sup}, \left(\frac{f(U)}{U} \right)_{inf} - f'_{inf} \right\} \frac{\Delta t^n}{h_{min}} \leq \frac{1}{2}, \quad (2.21)$$

onde \max é a função máximo e

$$f'_{sup} = \sup \{ f'(U) | U \in \mathbb{D}_{f'} \} \text{ e } f'_{inf} = \inf \{ f'(U) | U \in \mathbb{D}_{f'} \}, \quad (2.22)$$

$$\left(\frac{f(U)}{U} \right)_{sup} = \sup \left\{ \left(\frac{f(U)}{U} \right) | U \in \mathbb{D}_f \right\} \text{ e } \left(\frac{f(U)}{U} \right)_{inf} = \inf \left\{ \left(\frac{f(U)}{U} \right) | U \in \mathbb{D}_f \right\}. \quad (2.23)$$

3. Simulações Numéricas

Em todas simulações numéricas realizadas utilizou-se uma condição de injeção lateral na fronteira esquerda da malha computacional correspondente ao fluxo relacionado a condição inicial à esquerda do problema de Riemann (detalhes em [3]). A

função f para a Eq. de Burgers é dada por

$$f(u) = \left(\frac{u^2}{2}\right), \quad \text{com condição inicial: } \begin{cases} u(x, 0) = 1, & \text{se } x \leq 0 \\ u(x, 0) = 0, & \text{se } x > 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

que foi utilizada na equação (2.1). Para a Eq. de Burgers o comprimento da região física foi de 12800 cm e o tempo de simulação de 15000 s. As Figuras 4 e 5 apresentam um estudo de refinamento de malha e a comparação da solução numérica em 256 células com a solução analítica para o FLCELM, respectivamente.

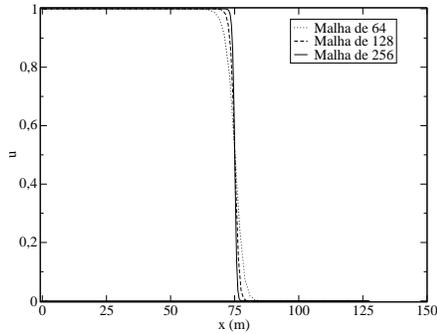


Figura 4: Eq. de Burgers: refino de malha (FLCELM).

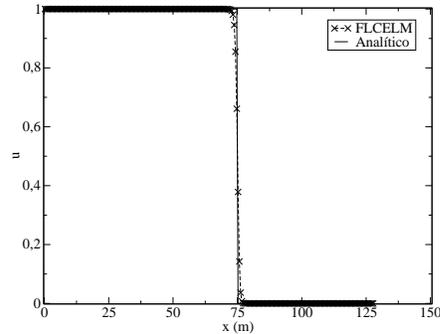


Figura 5: Eq. de Burgers: FLCELM e solução analítica.

As Figuras 6 e 7 apresentam um estudo de refinamento de malha e a comparação da solução numérica em 256 células com a solução analítica para o FLCELM-R, respectivamente, utilizando $M = 10$ e $\alpha = 1, 0$.

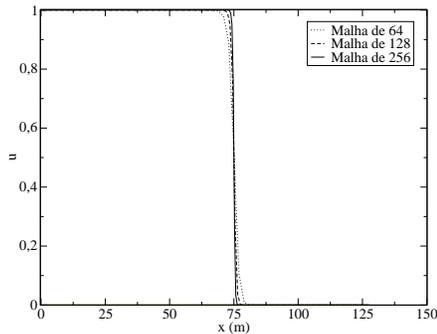


Figura 6: Eq. de Burgers: refino de malha (FLCELM-R).

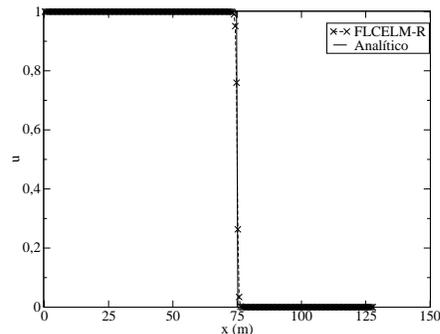


Figura 7: Eq. de Burgers: FLCELM-R e solução analítica.

Claramente a estratégia FLCELM-R produz resultados superiores, sendo menos difusiva quando comparada a FLCELM. Nas comparações com a solução analítica

nota-se que as simulações conseguiram representar o salto com velocidade de propagação correta e pôde-se observar que em uma malha de 128 células atingi-se um bom nível de convergência numérica.

Para a Eq. de Buckley-Leverett, a função de fluxo f é

$$f(s) = \lambda_w(s)v \quad \text{com} \quad \begin{cases} \lambda_w(s) = \frac{k_{rw}(s)}{\mu_w \lambda(s)} \\ \lambda(s) = \frac{k_{ro}(s)}{\mu_o} + \frac{k_{rw}(s)}{\mu_w} \\ k_{ro}(s) = (1 - (1 - s_{ro})^{-1} s)^2 \\ k_{rw}(s) = (1 - s_{rw})^{-2} (s - s_{rw})^2 \end{cases},$$

onde w=água e o=óleo. Para a fase α ($\alpha = w, o$) tem-se: $\lambda_\alpha(s)$, mobilidade; $k_{r_\alpha}(s)$, permeabilidade; s_{r_α} , saturação residual e μ_α , a viscosidade. Os demais termos são: $\lambda(s)$, mobilidade total do sistema e v , a velocidade do fluido (velocidade de Darcy). Os seguintes valores numéricos foram utilizados nas simulações: $v = 8,11235e^{-5}$; $s_{ro} = 0,15$; $s_{rw} = 0,20$; $\mu_o = 10,0$; $\mu_w = 0,5$. O escalar s representa a saturação de água (massa por unidade espacial) em uma determinada região em um certo instante do escoamento. Para a Eq. de Buckley-Leverett, o comprimento da região física foi de 12800 cm, o tempo de simulação 300 dias e a condição de contorno em $x = 0$ é $f(s) = \lambda_w(0,85)v$. A condição inicial é uma saturação de 0,85 para $x \leq 0$ e uma saturação de 0,21 para $x > 0$. As grandezas físicas estão expressas em CGS. As Figuras 8 e 9 apresentam refinamento de malha e a comparação da solução numérica em 128 células com a solução pelo método NT [5] para o FLCELM-R, respectivamente. O número M de passos utilizados para a construção dos tubos integrais foi igual a 10 e o coeficiente α foi de 1,0 no teste de convergência e 1,5 na comparação com NT.

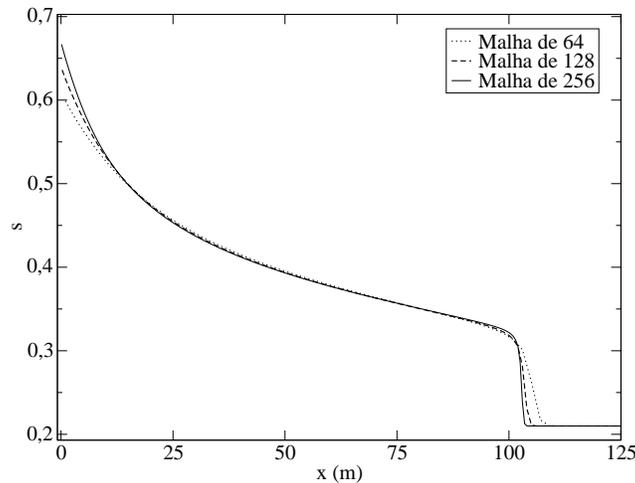


Figura 8: Eq. de Buckley-Leverett: refinamento de malha (FLCELM-R).

Pode-se observar que também para a Eq. de Buckley-Leverett ocorreu convergência sob refinamento da malha computacional. A comparação com o método NT mostra que o choque apresenta velocidade de propagação correta e que o método

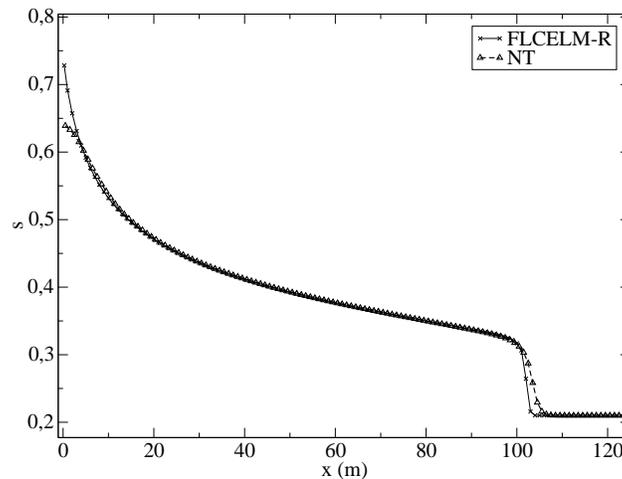


Figura 9: Eq. de Buckley-Leverett: FLCELM-R e NT.

FLCELM-R foi um pouco menos difusivo. Além disso, o comportamento na injeção usando o FLCELM-R está mais próximo da situação física a ser modelada.

4. Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um novo método para a solução numérica de leis de conservação escalares. Duas versões foram testadas: a primeira baseada em uma discretização espacial constante por partes e outra que utiliza uma reconstrução linear descontínua dos valores do escalar u . O uso da reconstrução melhorou a precisão do método, diminuindo a difusão numérica. As descontinuidades foram resolvidas de forma precisa e nos experimentos realizados o método convergiu para a solução fisicamente correta. As perspectivas para trabalhos futuros são o desenho de um esquema numérico para a resolução de problemas bi e tridimensionais.

Agradecimentos

F. Pereira recebeu apoio financeiro dos projetos: CNPq-Edital 05/2004, CT-Petro/Edital 01/2003, CT-Petro/Edital 016/2005, Edital Institutos do Milênio 01/2005 e Edital 20/2004-Acordo de Cooperação Internacional CNPq/NSF; G. de Souza agradece ao CNPq (Bolsa de Iniciação Científica) e S. Mancuso agradece a CAPES (Bolsa de Doutorado).

Abstract. Here is shown a new high resolution method for scalar conservation laws using a REA methodology (Reconstruction, Evolve, Average). It combines the strategy of [5] in the Reconstruction e Average stages with a locally conservative lagrangian scheme (see [3, 1]) in the Evolve stage. We establish the relation between the new scheme and an eulerian strategy. The new scheme was utilized to solve

scalar conservation laws in one space dimension and produced quite satisfactory results when compared with the method of [5]. We applied the new method in the numerical approximation of the Burgers and Buckley-Leverett equations. The last one was used to evaluate the performance of this method in the simulation two-phase flows in porous media. The extension of the method in two dimensions problems will be discussed.

Referências

- [1] J. Douglas Jr., F. Pereira, L.M. Yeh, A locally conservative Eulerian-Lagrangian numerical method and its application to nonlinear transport in porous media, *Computational Geosciences*, **4** (2000), 1-40.
- [2] R.J. Le Veque, ‘Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems’, Cambridge Texts in applied Mathematics, Cambridge University Press, UK 2002.
- [3] S. Mancuso, “Aproximação numérica de leis de conservação por esquemas euleriano-lagrangeanos localmente conservativos.” Dissertação de Mestrado, Instituto Politécnico do Rio de Janeiro - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2004.
- [4] S. Mancuso, F. Pereira, Esquemas euleriano-lagrangeanos localmente conservativos para leis de conservação hiperbólicas, in “CD-Rom - Iberian Latin American Congress on Computational Methods of Engineering”, 2004.
- [5] N. Nessyahu, E. Tadmor, “Non-oscillatory central differencing scheme for hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, **87** (1990), 408-463.