



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA E
COMPUTACIONAL

VÍVIA DE SOUZA MARINS

**Métodos Numéricos de Alta Ordem Aplicados ao Fenômeno de
Sedimentação em Batelada**

SEROPÉDICA – RJ
2026





Vívia de Souza Marins

Métodos Numéricos de Alta Ordem Aplicados ao Fenômeno de Sedimentação em Batelada

Dissertação apresentada ao PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional, Área de concentração: métodos numéricos.

Orientador: Prof. Dr. Renan de Souza Texeira.

Coorientador: Prof. Dr.

Wilian Jeronimo dos Santos.

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Biblioteca Central/Central de Processamento Técnico

Ficha catalográfica elaborada
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M337m Marins, Vivia de Souza, 2001-
 Métodos Numéricos de Alta Ordem Aplicados ao
Fenômeno de Sedimentação em Batelada / Vivia de Souza
Marins. - Rio de Janeiro, 2026.
 83 f.

 Orientador: Renan de Souza Teixeira.
 Coorientador: Wilian Jerônimo dos Santos.
 Dissertação (Mestrado). -- Universidade Federal
Rural do Rio de Janeiro, Programa de Pós Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional, 2026.

 1. Sedimentação em batelada. 2. Métodos numéricos.
3. Leis de conservação. 4. Análise de erro. I.
Teixeira, Renan de Souza, 1983-, orient. II. Santos,
Wilian Jerônimo dos, 1984-, coorient. III Universidade
Federal Rural do Rio de Janeiro. Programa de Pós
Graduação em Modelagem Matemática e Computacional. IV.
Título.

É permitida a cópia parcial ou total desta TFC/Dissertação/Tese, desde que seja citada a fonte.

**O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de
Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.**



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL



Seropédica-RJ, 25 de março de 2026.

Vivia de Souza Marins

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção de grau de **Mestra**, no Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional PPGMMC, área de Concentração em Modelagem Matemática e Computacional.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 25/03/2026

Renan de Souza Teixeira (Presidente-membro interno titular-UFRRJ)

Carlos Andres Reyna Vera Tudela (membro interno titular-UFRRJ)

Duílio Tadeu da Conceição Junior (membro titular externo ao Programa-UFRRJ)

Romulo Bessi Freitas (membro titular externo à Instituição-CEFET/RJ)



ATA N° ata/2026 - ICE (12.28.01.23)
(N° do Documento: 1065)

(N° do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 01/04/2026 12:19)

CARLOS ANDRES REYNA VERA TUDELA
COORDENADOR CURS/POS-GRADUACAO - TITULAR
PPGMMC (12.28.01.00.00.00.61)
Matrícula: ###336#3

(Assinado digitalmente em 01/04/2026 16:27)

DUILIO TADEU DA CONCEICAO JUNIOR
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DeptM (12.28.01.00.00.00.63)
Matrícula: ###453#7

(Assinado digitalmente em 02/04/2026 08:28)

RENAN DE SOUZA TEIXEIRA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DeptM (12.28.01.00.00.00.63)
Matrícula: ###756#9

(Assinado digitalmente em 01/04/2026 13:34)

RÔMULO BESSI FREITAS
ASSINANTE EXTERNO
CPF: ###.###.857-##

Visualize o documento original em <https://sipac.ufrrj.br/documentos/> informando seu número: **1065**, ano: **2026**,
tipo: **ATA**, data de emissão: **01/04/2026** e o código de verificação: **6268965ec5**

AGRADECIMENTOS

Agradeço à meus pais, que sempre incentivaram e estão loucos me perguntando quando que vem o doutorado.

Agradeço ao meu orientador, que foi muito paciente, que sempre escrevia algo no quadro em todos os momentos que perguntava algo (até mesmo coisas que eu achava que sabia... e na verdade estava sabendo errado). Certamente ele me ensinou muita coisa e que espero conseguir transparecer pelo menos 10% nessa dissertação. Vamo que vamo!

Agradeço meu queridíssimo, Miguel Ângelo, minha companhia nesses dois anos de mestrado, o quanto que me ouviu reclamar, descabelar e me ajudou a me manter sã (até certo limite, claro). Espero que seu mestrado seja uma brisa, sei que você tem grande potencial. Espero nunca te perder, esse ser repleto de bondade e companheirismo, como essa essência linda e refrescante. Não poderia deixar de agradecer ao Marcus, pelas sábias palavras - e às vezes pesadas, perguntando sobre como vai o mestrado/dissertação - e a Ju e Sarah, pela alegria e ótimos status.

Meus amigos que tanto falaram de mestrado, Roseli e Wilian, e que sempre me lembram do doutorado... eu juro que estou tentando, mas agradeço a vocês pelo apoio e por essa visão positiva que vocês tem sobre mim (é sempre mais fácil surpreender quando a barra é mais embaixo).

A alguns outros amigos que animaram meus dias; Felipe, Jéssica, Edivaldo, Renan e Oberdan. Conversar e sair com vocês certamente foi um jeito de escapar do peso da responsabilidade, de forma responsável. Mais um agradecimento a Jéssica por ter organizado o maior evento da matemática em 2025 (café da tarde). E um agradecimento especial à Geovanna pelas muitas fofquinhas a noite, conversar com você e te ver quase enlouquecer por causa de análise era uma novela.

Um grande amigo que conheci no final da graduação (ou começo de mestrado?) e meu veterano: Canha. Meu grande suporte emocional que estava sempre por perto, meu companheiro de karaokê, a pessoa que sempre tinha as piores escolhas na ponta da língua. Espero poder te levar comigo daqui em diante e que, mesmo distante, estaremos sempre em contato. Bora terminar essa etapa da vida pra ir pro mestrado, mesmo que seja em SP.

Por fim, um cara que mesmo de longe sempre me apoiou. Acredito que você se tornará um grande farmacêutico, Marcelo. Obrigada!

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

*"A liberdade é liberdade de dizer que
dois e dois são quatro. Quando se
concorda nisto o resto vem por
si."George Orwell - 1984.*

RESUMO

DE SOUZA MARINS, Vívía. **Métodos Numéricos de Alta Ordem Aplicados ao Fenômeno de Sedimentação em Batelada**. 2026. 66f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional). Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2026.

Fenômenos de transporte, em geral, desempenham um papel relevante em inúmeros problemas científicos e industriais. A história humana tem diversos exemplos que evidenciam este fato, assim como os estudos de Arquimedes, Leonardo da Vinci, entre outros. Nos casos em que o fenômeno envolve fluidos nos estados líquidos ou gasosos podemos distinguir suas características com: se há advecção ou difusão, propriedades do fluido, velocidade do deslocamento, entre outros; tornando seus estudos singulares. Diante das especificidades comportamentais do fenômeno devido a característica do fluido, um único esquema de solução numérica não é suficiente para predição adequada de todos os casos. No presente trabalho apresentamos a aplicação de diferentes métodos numéricos na lei de conservação hiperbólica com diferentes fluxos, em particular o fluxo descrito para o fenômeno da sedimentação em fluidos não-newtonianos. Dado a dificuldade e custo computacional ao resolver uma equação diferencial parcial (EDP), foi utilizado o método de linhas discretizando espacialmente com upwind, Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, *Total Variation Diminishing* (TVD) e *Weighted Essentially Non Oscillatory* (WENO) e para a integração temporal Euler explícito, *Strong Stability Preserving* Runge-Kutta (SSP-RK) e Dormand-Prince (DOPRI), sendo este último um caso especial para comparação. Cada método foi submetido a fluxos como Burgers e Buckley-Leverett com intuito de obter ordem de convergência e análise de estabilidade em locais suaves e com descontinuidade. Poucos estudos abordam a análise numérica ao aplicar diferentes métodos em um fluido não-newtoniano. Ao longo dos testes foi observado que apesar do TVD se comportar melhor em descontinuidades consecutivas, o WENO alcança valores próximos ao analítico em regiões contínuas e de rarefação. Quanto a discretização temporal, apesar do DOPRI ser mais custoso com tempo computacional elevado em comparação ao SSP-RK, sua estabilidade é relativamente maior dado que obtemos números de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) mais elevados na simulação.

Palavras-chave: Sedimentação em batelada; métodos numéricos; leis de conservação; análise de erro.

ABSTRACT

DE SOUZA MARINS, Vivia. **High Order Numerical Methods Applied in Batch Settling..** 2026. 66p. Dissertação (Master's Degree in Mathematical and Computational Modeling). Institute of Exact Sciences, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2026.

Transport phenomena, in general, play a significant role in numerous scientific and industrial problems. Human history has several examples that demonstrate this fact, such as the studies of Archimedes, Leonardo da Vinci and others. In cases where the phenomenon involves fluids in liquid or gaseous states, we can distinguish its characteristics by whether there is advection or diffusion, fluid properties, displacement velocity and more; making their study unique. Given the specific behavioral characteristics of the phenomenon due to the fluid properties, a single numerical solution scheme is not sufficient to provide adequate predictions in all cases.. In the following work we present the application of different numerical methods used to solve the hyperbolic conservation law with different fluxes, in particular the flux described for the sedimentation phenomenon in non-newtonian fluids. Given the difficulty and computational cost involved in solving a partial differential equation (PDE), it was implemented the method of lines spatially discretized with upwind, Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, Total Variation Diminishing (TVD) and Weighted Essentially Non Oscillatory (WENO) and for temporal integration explicit Euler, Strong Stability Preserving Runge-Kutta (SSP-RK) and Dormand-Prince (DOPRI), the latter being a special case for comparison. Each method was subjected to Burgers and Buckley-Leverett fluxes to obtain convergence order and stability analysis in smooth and discontinuous locations. Few studies address numerical analysis when applying different methods to a non-newtonian fluid. Throughout the tests it was observed that although TVD performs better in consecutive discontinuities, WENO achieves values close to the analytical in continuous and rarefaction regions. Regarding temporal discretization although DOPRI is more expensive and takes more computational time compared to SSP-RK, its stability is relatively higher given that we obtain higher Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) numbers in the simulation.

Keywords: Batch sedimentation; numerical methods; conservation laws; error analysis.

Lista de Figuras

1.1	O processo de retirada da lama de perfuração e a injeção do cimento.	2
1.2	Óleo derramado da plataforma Deepwater Horizon.	2
4.1	Exemplificação das Zonas de Sedimentação.	12
4.2	Representação do processo de perfuração do poço de petróleo.	14
4.3	Representação das Condições Iniciais.	18
4.4	Problema de Riemann com $u_l = 1$ e $u_r = 0$ com $t_f = 0.4$	18
4.5	Problema de Riemann com $u_l = 0$ e $u_r = 1$ com $t_f = 0.5$	19
4.6	Condição inicial da função suave.	20
4.7	Resultados em diferentes tempos usando o fluxo de Burgers no Upwind.	20
4.8	Curva Característica da condição inicial (4.13).	21
4.9	Curvas característica da condição inicial (4.20).	24
4.10	Curvas característica da Equação (4.21).	25
4.11	Curvas característica da Equação (4.13).	26
4.12	Representação dos pontos utilizados pelo método de Lax-Friedrichs no <i>stencil</i>	29
4.13	Representação dos pontos utilizados pelo método de Lax-Wendroff no <i>stencil</i>	30
5.1	Condição inicial contínua com $t_f = 0.4$	40
5.2	Ampliação da descontinuidade quando $t_f = 4$ segundos.	40
5.3	Condição inicial contínua com $t_f = 1$	41
5.4	Ampliação da descontinuidade quando $t_f = 1$ segundo.	41
5.5	Condição inicial de Riemann com $t_f = 0.4$	42
5.6	Ampliação da região de choque.	42
5.7	Condição inicial de Buckley-Leverett.	43
5.8	CFL 0.8 e Euler explícito no tempo.	44
5.9	CFL 0.8 e SSP-RK3 no tempo.	45
5.10	CFL 0.8 e DOPRI no tempo.	45
5.11	CFL 0.6 e Euler explícito no tempo.	46
5.12	CFL 0.6 e SSP-RK3 no tempo.	46
5.13	CFL 0.6 e DOPRI no tempo.	47
5.14	CFL 0.4 e Euler explícito no tempo.	48
5.15	CFL 0.4 e SSP-RK no tempo.	48
5.16	Ampliação na região de descontinuidade da Figura 5.15.	49
5.17	Ordem dos métodos de baixa e alta ordem.	50
5.18	Ordem dos limitadores TVD.	51
5.19	Ordem WENO com $k=3$	51
5.20	Ordem dos métodos temporais.	52

5.21	Gráfico de comparação entre os dados de Rocha (2020) e os métodos numéricos que serão utilizados.	53
5.22	Perfil axial da concentração de sólidos em diferentes meses.	54
5.23	Comparação dos esquemas espaciais no perfil axial de sólidos nos períodos de 3 meses e 30 meses.	55
5.24	Gráfico de concentração de sólidos dado diferentes métodos temporais após 4 meses de simulação.	56
5.25	Comparação do refinamento de malha no gráfico de concentração de sólidos.	56
5.26	Altura do teste para diferentes concentrações de sólidos.	57
5.27	Altura do teste com concentração de sólidos maior que 18%.	58
5.28	Comparação de métodos espaciais na zona de compressão.	58
5.29	Comparação dos esquemas temporais na zona de compressão.	59
5.30	Comparação dos esquemas espaciais na zona de clarificado.	60
5.31	Teste de mudança de CFL.	61

Lista de Tabelas

4.1	Tabela das constantes c_{ej}	33
4.2	Tabela dos pesos d_e	34
5.1	Tabela de tempo computacional (em segundos).....	61

Lista de Abreviações e Siglas

CFL	Courant Friedrichs Lewy
CI	Condição Inicial
DOPRI	Dormand-Prince
ENO	Essentially Non-Oscillatory
EDP	Equação Diferencial Parcial
EE	Euler Explicito
HO	<i>High-Order</i>
HRS	<i>High-Resolution Schemes</i>
LO	<i>Low-Order</i>
LF	Lax-Friedrichs
LW	Lax-Wendroff
MVF	Método de Volumes Finitos
SSP-RK	Strong Stability Preserving Runge-Kutta
TVD	Total Variation Diminishing
WENO	Weighted Essentially Non-Oscillatory

Lista de Símbolos

c	CFL do método SSP-RK
d_e	Pesos do WENO
d_p	Diâmetro médio das partículas
$f(u)$	Fluxo da EDP
F	Fluxo físico
$\mathcal{F}$	Fluxo numérico
g	Força da gravidade
K	Permeabilidade da matriz porosa
k	Ordem do método WENO
L_0	Altura inicial da suspensão
M	Coefficiente de consistência do fluido (Modelo Power-Law)
m	Força resistiva
n	Índice de comportamento do fluido (Modelo Power-Law)
P_s	Pressão dos sólidos
q	Velocidade superficial da mistura
s	Velocidade de propagação da onda
t	Variável temporal
t_f	Tempo final
T_s	Tensor tensão total
u_0	Condição inicial
u_l	Informação a esquerda da descontinuidade
u_r	Informação a direita da descontinuidade
v_s	Velocidade da fase sólida
v_l	Velocidade do líquido
x	Posição espacial
x_d	Ponto de descontinuidade

x_s	Curva de choque
z	Posição axial
L^∞	Espaço L-infinito

Letras Gregas

α_{ij}	Constante do método SSP-RK
α_e	Coefficiente do WENO
β_{ij}	Constante do método SSP-RK
β_e	Coefficiente do WENO
Δx	Espaçamento da malha espacial
Δt	Espaçamento da malha temporal
ϵ_s	Concentração de sólidos
ϵ_{s0}	Concentração inicial de sólidos
ϵ_{sm}	Concentração máxima de sólidos
λ^*	Taxa de cisalhamento característica
λ_{ij}	Constante do método SSP-RK
ω_e	Coefficiente do WENO
Φ	Função teste
$\theta(\phi)$	Função esfericidade
ρ_s	Densidade dos sólidos
ρ_f	Densidade da fase líquida
ρ_{susp}	Densidade da suspensão
τ	Tensão cisalhante

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
3	OBJETIVOS	8
4	METODOLOGIA.....	10
4.1	Leis de Conservação Hiperbólica	10
4.2	O Fenômeno da Sedimentação	11
4.3	A Modelagem Matemática do Fenômeno	14
4.4	Fluxo não-linear simples	17
4.4.1	Problema de Riemann	17
4.4.2	Equação de Burgers	19
4.4.3	Soluções Fracas e Condição de Entropia	21
4.4.4	Curvas Características - A Condição de Rankine-Hugoniot	23
4.5	Métodos Numéricos	25
4.5.1	Discretização Espacial.....	26
4.5.2	Malha Espacial	28
4.5.2.1	<i>Upwind</i>	28
4.5.2.2	Lax-Friedrichs	29
4.5.2.3	Lax-Wendroff	29
4.5.2.4	<i>Total Variation Diminished</i> (TVD)	30
4.5.3	Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO)	32
4.5.4	Malha Temporal	36
4.5.4.1	Euler	36
4.5.4.2	<i>Strong Stability Preserving</i> (SSP) Runge-Kutta de 3ª ordem	36
5	RESULTADOS	38
5.1	Verificação dos métodos	38
5.1.1	Fluxo de Burgers	38
5.1.2	Buckley-Leverett	43
5.1.3	Análise de erro	50
5.1.4	Fluxo da Sedimentação	53
6	CONCLUSÃO	62

7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	64
----------	--	-----------

Atualmente muitas empresas e indústrias utilizam-se de fluidos para criação ou obtenção de uma substância ou um produto final, como a utilização de jatos de água para o auxílio de cortes em materiais abrasivos, que tem como intuito resfriar e lubrificar a área de corte (ALBERDI et al., 2011), ou para o tratamento de águas residuais (ZABAVA et al., 2016), para separar substâncias indesejadas de forma barata e eficiente, e até mesmo para a separação de partículas provenientes de diferentes produtos na área de engenharia de alimentos (SAESEAW; SHIOWATANA; SIRIPINYANOND, 2005).

Adicionado a estas e outras diversas motivações da utilização de fluidos como um facilitador temos a perfuração de poços de petróleo (ROCHA, 2018). Este é um assunto importante para o século atual, visto que a busca por petróleo ainda é essencial dado sua vasta utilização como matéria prima de produtos cotidianos e, principalmente, como grande fonte de energia, sendo responsável por 30% da produção mundial de energia *.

Todos os exemplos supracitados utilizam-se da ideia de fluxo, caracterizados pela sua aplicação, na qual as características de cada fluido - como este se comporta e a questão física que envolve os procedimentos - são critérios essenciais. No exemplo do corte mencionado acima, há uma força e orientação do fluxo específico para que não haja grandes gastos do fluido. Na perfuração de petróleo, dado as questões reológicas do fluido e o repouso do meio, não será tratada similarmente. Dado o objetivo maior da pesquisa, que é o estudo da sedimentação, focaremos nas etapas da perfuração de poços.

A extração de petróleo é um processo longo e que acontece por etapas. Ao localizar um reservatório é iniciado as perfurações de forma cautelosa, alterando entre a utilização da broca combinado com a injeção dos fluidos de perfuração, que auxiliam durante a abertura do poço, e, após uma certa profundidade, a perfuração para, e a lama de perfuração é retirada e então é injetado o cimento para estabilizar as paredes do poço (Figura 1.1). Esses fluidos de perfuração tem o papel de resfriar e lubrificar a broca, manter pressão hidrostática nas paredes da região perfurada e outras funcionalidades. Um dos estudos importantes nesta área de perfuração é a ocorrência da sedimentação. Este fenômeno se dá pela ação da gravidade e a diferença de

*<https://www.iea.org/world/energy-mix>

densidade entre as partículas sólidas e o líquido.

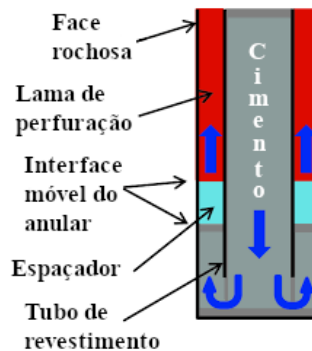


Figura 1.1: O processo de retirada da lama de perfuração e a injeção do cimento. Fonte: Lavrov (2016).

A falta de preparo, o descuido e o não cumprimento das etapas e checagens adequadas do processo de perfuração e cimentação pode resultar em eventos catastróficos, causando danos ao meio ambiente. O acontecimento mais frequente de danos ambientais relacionados a extração de petróleo é o vazamento de óleo no mar. Uma ocorrência que foi amplamente reportada foi a explosão da plataforma de Deepwater Horizon, em 2010, que resultou no vazamento de milhões de litros de petróleo no Golfo do México (Figura 1.2). A falha na verificação da cimentação incorreta do poço foi o principal motivador do acidente.



Figura 1.2: Óleo derramado da plataforma Deepwater Horizon. Fonte: O Globo. Disponível em: <https://acervo.oglobo.globo.com/em-destaque/plataforma-explode-no-golfo-do-mexico-causa-maior-desastre-ambiental-dos-eua-20445451>

Uma maneira de se evitar a ocorrência de explosões ou outros efeitos indesejados da sedimentação na abertura de poços é simular computacionalmente o fenômeno específico. Para o estudo de fluxos em regiões sem perda de informação (como um tubo) a utilização de Leis de conservação hiperbólicas é um importante critério físico para descrever a conservação de, por exemplo, massa ou energia. Esta informação é uma base para a introdução do Método de Volumes Finitos (MVF), onde o fluxo em um volume de controle depende do fluxo de entrada e de saída do volume.

Para alcançarmos representações numéricas para estas situações é necessário a utilização de métodos numéricos com discretização no tempo e espaço para que possamos simular a propagação da onda após um tempo determinado e obtermos a(s) curva(s) que descrevem o modelo. Apesar disso, o fenômeno principal estudado conta com algumas dificuldades computacionais, dado a existência de descontinuidades e variações repentinas das zonas de concentração de sólidos, podendo gerar erros fisicamente inconsistentes.

Para contornar esse erros em regiões de salto, nesta dissertação foram investigado métodos de alta ordem *Total Variation Diminishing* (TVD), *Weighted Essentially non-Oscillatory* (WENO) e *Strong Stability Preserving* (SSP) no fenômeno da sedimentação em batelada, ou seja, uma simulação sem perda ou ganho após a mistura inicial dada, ainda não tão explorado no âmbito da perfuração de poços de petróleo. Para tanto, serão feitos testes com fluxos mais simples com intuito de analisar se são métodos que se adequarão ao modelo da sedimentação e se os resultados são satisfatórios quando comparados. Para facilitar o estudo da equação diferencial parcial (EDP) para leis de conservação hiperbólica, pretendemos utilizar o método das linhas para resolver as equações. Este método consiste, inicialmente, na discretização somente da malha espacial e, logo após, na malha temporal, resolvendo assim sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDOs) ao invés da EDP. Exploramos os métodos Upwind, Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff, TVD e WENO na malha espacial e Euler, SSP-RK3 e Dormand-Prince (DOPRI) na malha temporal.

Este trabalho se inicia com as Revisões Bibliográficas (Capítulo 2), no qual mencionaremos artigos que tratam sobre o uso de métodos numéricos. No Capítulo 3 os objetivos gerais e específicos que regem esta dissertação. Seguimos para a Metodologia 4, no qual serão abordados os métodos numéricos utilizados na malha espacial e temporal, o comportamento em descontinuidades e outros assuntos fundamentais para o desenvolvimento necessário, como o que são as leis de conservação, ideias introdutórias de volumes finitos e a discretização, o fenômeno da sedimentação e, por fim, a modelagem matemática do fenômeno. O Capítulo 5 discorre sobre os resultados dessas simulações numéricas, bem como análises e comparações entre os diferentes métodos utilizados. E, ao final, temos o Capítulo 6, que trata das conclusões gerais que emergiram durante este trabalho.

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo agrupamos alguns trabalhos que possuem como tema principal a utilização de métodos numéricos para o fenômeno da sedimentação e artigos lidos sobre os métodos de alta resolução utilizados no trabalho. Pretendemos resumi-los, mencionando os métodos aplicados e os resultados obtidos e anunciados pelos autores. Iniciaremos com artigos que aplicam os esquemas em algum fluxo de sedimentação, independente de propriedades do fluido, sólido ou a configuração do meio e, após, serão os artigos sobre os esquemas TVD, ENO/WENO e SSP-RK.

Primeiramente temos o artigo de Kynch ([KYNCH, 1952](#)), um dos primeiros trabalhos a se falar sobre sedimentação, considerado uma referência no estudo, assume que a velocidade de queda dos sólidos depende da concentração de sólidos naquele volume. Durante o texto, o autor faz um estudo do problema de Riemann, trazendo curvas características da concentração e velocidade da sedimentação, por exemplo, e apresenta curvas de velocidade das interfaces do fenômeno, resultados que ainda são consideradas na literatura. Com a descrição da teoria da suspensão ideal foi possível alcançar outros casos.

Em [Bürger et al. \(2011\)](#) os autores mostram os resultados numéricos utilizando duas diferentes modelagens da sedimentação polidispersa. Para a simulação numérica foram escolhidas duas variáveis do método espacial *Weighted Essentially non-Oscillatory* (WENO) e o método de *Strong-Stability Preserving* (SSP) de terceira ordem, também conhecido como SSP Runge-Kutta (SSP-RK) para a malha temporal. Os resultados numéricos mostram que o método "SPEC-INT", apesar de levar mais tempo para a simulação, alcança valores melhores que o método "COMP-GLF".

O artigo de [Berres, Bürger e Tory \(2005\)](#) apresenta diferentes modelos de sedimentação polidispersa e, utilizando o método numérico de Kurganov-Tadmor, gera seus resultados. Apesar do foco do artigo não ser o método numérico utilizado, mas sim as diferentes modelagens, os autores concluem que este método - assim como outros - não possui uma teoria de convergência rigorosa, apesar dos resultados serem condizentes e não haver críticas sobre o método escolhido.

Em contrapartida, o artigo de [Bürger et al. \(2010\)](#) explora a utilização de esquemas

TVD espaciais para o modelo clarificante-espessante. Na publicação os autores utilizam o TVD simples com minmod e o fluxo-TVD para evitar os resultados incoerentes (*overshoots*) que podem ocorrer com o TVD, ambos métodos de segunda ordem, e um esquema de primeira ordem. Ambos os esquemas TVD aplicados tiveram precisão semelhante e obtiveram resultados melhores do que o método de primeira ordem, apesar do TVD simples sofrer com problema de *overshoot* em algumas regiões.

A publicação de [Bürger, Diehl e Mejías \(2016\)](#) tem como objetivo estudar a eficiência dos diferentes métodos temporais aplicados à dois diferentes modelos de sedimentação, o de Kynch e o de Diehl, calculando o erro e o tempo computacional. Os métodos temporais escolhidos foram Euler explícito, um método semi-implícito, um linearmente implícito e a função `ode15s` do *Matlab*, que é um método *multi-step* implícito. Nas conclusões temos os pontos contra e a favor de cada esquema temporal: o Euler explícito mais simples de implementar, porém não eficiente; o semi-implícito mais eficiente, porém de implementação mais complexa; o linearmente implícito é simples e sobre eficiência ficou atrás somente do semi-implícito; e o `ode15s` que já está "feito", porém não é indicado para problemas com descontinuidade e foi o pior em questão de eficiência.

Utilizando-se da modelagem cinemática da sedimentação polidispersa, [Bürger, Diehl e Mejías \(2018\)](#) explora o uso do método numérico de segunda ordem preditor-corretor de Nessler-Tadmor. Os autores exploram diferentes situações, como no qual os dois grupos de partículas possuem densidade maior que o líquido e em outro momento um dos grupos de sólidos tem a densidade menor que o fluido. Para comparar seus resultados eles plotaram curvas de choque juntamente com resultados experimentais de outras literaturas. No final do artigo eles comentam sobre as dificuldades de aplicar métodos explícitos em questões físicas após o aparecimento de curvas equivocadas no gráfico de concentração de sólidos.

O último artigo sobre a utilização de métodos numéricos para a resolução da equação hiperbólica, utilizando dois fluxos de sedimentação em batelada, foi o trabalho de [Lobato et al. \(2025\)](#). Na publicação os autores apresentam três métodos espaciais: THINC, WENO e HRCS e focam no tempo de processamento para cada método. Apesar de não falarem qual o esquema utilizado na malha temporal, os autores mostram os gráficos do perfil de concentração ao longo da altura do teste. Para um dos fluxos as curvas do WENO aparentavam mais dissipativas perto das descontinuidades do que os outros dois métodos, enquanto com outro fluxo as curvas se sobrepunham. O autor conclui que todos os métodos capturam bem o fenômeno, sendo o HRCS mais eficiente computacionalmente, mas sem resultados qualitativos exatos.

Em diante será resgatado produções sobre os métodos numéricos utilizados. Traremos alguns artigos importantes sobre sua criação e utilização.

Ao falar sobre os esquemas de alta resolução, [Kadalbajoo e Kumar \(2006\)](#) propõe um novo esquema TVD e compara-o com métodos como Lax-Wendroff, QUICK, e Sweby com diferentes limitadores. Utilizando a equação da propagação de temperatura e um problema com condição inicial descontínua os autores chegaram a resultados mais ou igualmente precisos do

que os outros esquemas de alta ordem.

Os métodos com propriedade de variação total reduzida (TVD) foram introduzidas no início dos anos 80, com os artigos de [Harten \(1983\)](#) e [Sweby \(1984\)](#), além de muitos outros que contribuíram com novos limitadores para o método. No primeiro trabalho mencionado o autor utiliza métodos de primeira ordem, segunda ordem e os mencionados até então como variação total não-crescente, aplicando-os em condições com descontinuidades, concluindo que os resultados do TVD foram satisfatórios. Já no artigo de [Sweby \(1984\)](#) vemos a comparação de diferentes limitadores TVD quanto a seus comportamentos em regiões de contato e choque, chegando a bons resultados com os limitadores de Van Leer e Roe.

Ainda sobre métodos TVD o trabalho de [Yu e Liu \(2001\)](#) junta dois métodos predictor-corretor, com a adição do método Splitting de Lax-Friedrichs para alcançar um método computacionalmente mais rápido do que o usual TVD, além de ser menos dissipativo do que o método ENO, utilizado para comparação.

Por fim, temos o artigo de [Titarev e Toro \(2005\)](#), que utiliza o método WENO e é adicionado métodos TVD de segunda ordem para a construção da discretização espacial e SSP-RK no tempo. Ao longo do artigo os autores trazem as construções dos métodos utilizados, inclusive os métodos de primeira ordem fundidos com WENO e os WENO-TVD, dado seus limitadores. Os autores expõem seus resultados numéricos apresentando um problema de advecção linear com descontinuidades e um de interação choque-turbulência. Os métodos WENO-TVD apresentam melhor precisão do que os métodos de primeira ordem.

Os artigos de Shu ([SHU; OSHER, 1988](#); [SHU, 2006](#)) falam sobre os métodos essencialmente não-oscilatório (ENO) e essencialmente não-oscilatório ponderado (WENO). O artigo de 1988 fala sobre as diferenças de métodos TVD e TVB (variação total limitada) e o método ENO, mostrando resultados do ENO mudando as condições iniciais e o refinamento da malha. Em regiões próximas de choque os resultados são dissipativos, mas não tanto quanto em regiões de contato, como concluído pelo autor. O artigo mais atual conta com uma descrição mais minuciosa da construção do ENO e WENO, além de um resultado mostrando o comportamento do WENO de 3ª e 5ª ordem em descontinuidades, que segue com pequenos erros dissipativos em saltos. Em adição, neste último artigo há também uma pequena sessão sobre o TVD Runge-Kutta (ou SSP-RK).

Alguns dos artigos mencionados anteriormente utilizam o TVD, ou mais atualmente reconhecido, como preservação forte de estabilidade(SSP)-Runge-Kutta na malha temporal, um deles foi o de [Shu e Osher \(1988\)](#). Porém, dois outros artigos tiveram o método temporal como principal assunto. O primeiro ([GOTTLIEB; SHU, 1998](#)) ainda considera o método como TVD temporal e mostra a construção e as condições (como o CFL) para os casos linear e não-linear. O artigo de [Gottlieb, Shu e Tadmor \(2001\)](#) trata o método como SSP e acomoda mais detalhes e outras construções do método, como a forma implícita e o que eles chamam de híbrido. Em ambos os artigos os autores mostram exemplos simples, focando mais na matemática e condições de convergência do método.

Apesar de trabalhos como o de [Lobato et al. \(2025\)](#), que fala sobre a utilização de métodos numéricos aplicados ao processo de sedimentação, e outros que estudam o fenômeno em fluidos não-newtonianos ([SARABIAN et al., 2020](#); [KAWASE; ULBRECHT, 1981](#)), não há muita exploração sobre a utilização de métodos numéricos para a sedimentação em fluidos não-newtonianos. Para tanto, o trabalho que será desenvolvido aqui tem como finalidade mostrar o comportamento de diferentes métodos numéricos espaciais e temporais aplicados à lei de conservação hiperbólica e, em particular, para o fluxo de sedimentação em fluido não-newtoniano pseudoplástico.

Objetivos

O presente estudo pretende investigar a precisão, a estabilidade e a eficiência de métodos numéricos de alta resolução do tipo TVD e SSP aplicados ao fenômeno da sedimentação de partículas sólidas em poços de petróleo. A modelagem matemática desse processo apresenta desafios significativos, uma vez que envolve o transporte de partículas em meio fluido sob a influência da gravidade, com características dinâmicas que podem incluir descontinuidades, formação de frente de choque e variações espaciais e temporais da concentração de sólidos. A correta descrição desse fenômeno exige a utilização de esquemas numéricos capazes de capturar tais particularidades sem introduzir oscilações espúrias ou erros significativos na solução computacional.

Dada a importância da sedimentação na engenharia de petróleo, este estudo buscará avaliar o desempenho dos métodos numéricos selecionados a partir de uma abordagem em duas etapas. Inicialmente, serão realizadas análises comparativas em fluxos simplificados, nos quais métodos de diferentes ordens de precisão serão aplicados para avaliar sua acurácia e comportamento numérico. Essa análise pretende incluir o estudo do erro de convergência da malha, permitindo a identificação dos esquemas mais promissores para a aplicação ao problema complexo da sedimentação. Em um segundo momento, o modelo da sedimentação será implementado nos métodos mais eficazes para comparação de resultados obtidos.

Além da análise numérica, este estudo tem como objetivo secundário investigar os impactos socioambientais da sedimentação no contexto da perfuração de poços de petróleo. A deposição descontrolada de partículas pode comprometer a estabilidade estrutural dos poços, além de contribuir para a contaminação do solo e dos recursos hídricos. Nesse sentido, a pesquisa busca não apenas aprimorar a modelagem computacional do fenômeno, mas também fornecer subsídios para uma compreensão mais ampla dos riscos ambientais e operacionais associados à sedimentação. Acredita-se que uma descrição mais precisa do processo possa auxiliar no desenvolvimento de estratégias mais eficazes para o monitoramento e mitigação desses impactos, contribuindo para uma abordagem mais sustentável na exploração de recursos petrolíferos.

Com isso, espera-se que os resultados obtidos neste trabalho possam não somente aprimorar o entendimento teórico e computacional dos métodos numéricos aplicados à sedimenta-

ção, mas também fornecer diretrizes práticas para sua aplicação em cenários reais, contribuindo para o avanço da modelagem matemática e do processo de extração de petróleo.

4.1 Leis de Conservação Hiperbólica

As leis de conservação ocorrem quando não há perda da propriedade física em um experimento ao longo do tempo como, por exemplo, a quantidade de água em um ambiente fechado, se espera que com o passar dos dias este valor (a massa) seja igual ao primeiro observado.

Equações hiperbólicas são introduzidas quando estudamos um tipo de transporte de informação (som ou matéria, por exemplo) em ondas. Este efeito ocorre em diversas áreas, cada uma com sua modificação e singularidades, como velocidade da onda, a ocorrência de choques (se há obstáculos), qual informação e em que meio esta se encontra. Quando descrevemos esses fenômenos utilizando a matemática todas essas informações físicas são essenciais para alcançarmos resultados similares aos experimentos e para encontrar qual método numérico mantém a estabilidade necessária para o problema.

Como estas equações expressam ideia de transporte, temos duas importantes mudanças que serão estudadas em qualquer sistema hiperbólico: o tempo (t) e a localização (x). Isto significa que teremos duas ou mais variáveis (dependendo de quantas dimensões o problema é analisado). Logo, quando falamos sobre o estudo de sistemas hiperbólicos de leis de conservação, pensamos no transporte de matéria ou informação sem a perda das propriedades que esta possui.

A forma integral básica das leis de conservação pode ser escrita como uma região $R = [x_1, x_2]$ que recebe uma quantidade u em x_1 e sai por x_2 , sem perda ou ganho externos, logo a quantidade de informação dentro da área limitada por x_1 e x_2 depende do fluxo nessa região, ou seja, a quantidade que entra e sai da região R em um instante t .

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} u(x, t) \, dx = F(x_1) - F(x_2) \quad (4.1)$$

sendo $F(x_1)$ e $F(x_2)$ o fluxo que entra e sai da região R , respectivamente.

Fazendo a derivada da equação (4.1) podemos chegar em duas equações conhecidas: as equações advectiva e da continuidade. Ambas podem ser representadas pela Equação (4.2)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + q \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0 \quad (4.2)$$

ou, com uma escrita mais enxuta, $u_t + qu_x = 0$. No qual q é a velocidade de propagação do fenômeno. A diferença entre as equações é a natureza de q ; se for constante, ou seja, não está em função das outras variáveis, será a equação de advecção, caso contrário, teremos a equação da continuidade.

Como o segundo termo contém a informação de deslocamento na equação hiperbólica, dado ao fato de descrever o sentido e a velocidade que está sendo transportada, podemos escrever também como um fluxo:

$$u_t(x, t) + f_x(u(x, t)) = 0. \quad (4.3)$$

Na forma diferencial da equação de conservação (4.3) temos $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ e $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$. Matematicamente, uma equação é considerada hiperbólica quando o Jacobiano f' tem autovalores reais e m autovetores linearmente independentes. No caso da equação (4.2) ela é considerada hiperbólica quando v tem as mesmas propriedades descritas para o Jacobiano f' .

Ainda analisando a equação (4.2), temos que esta é uma descrição da lei de conservação linear, isto porque q não está em função de u , ou seja, q será um valor real (um escalar) que descreve a velocidade em que a informação está sendo transportada e esta velocidade não possui influência de qualquer propriedade da onda (como a densidade).

4.2 O Fenômeno da Sedimentação

A sedimentação é um processo físico que ocorre quando há partículas sólidas em um ambiente líquido e, dado a ação da gravidade e a diferença de densidade entre os dois elementos, as partículas sólidas se movimentarão em direção ao fundo do recipiente até que no tempo t_{max} teremos o acúmulo dessas partículas no fundo e, no resto do recipiente, teremos apenas a parte líquida da mistura.

O trabalho desenvolvido em Kynch (1952) descreveu uma teoria da sedimentação que tinha as seguintes hipóteses:

1. A concentração de sólidos é uniforme ao longo de um plano horizontal, de modo que na sedimentação, os gradientes estão presentes na direção do campo gravitacional;
2. A concentração de sólidos aumenta no sentido da base da coluna;

3. A velocidade das partículas tende a zero à medida em que a concentração de sólidos se aproxima da concentração máxima;
4. A velocidade de sedimentação é função apenas da concentração local de sólidos;
5. Os efeitos de parede podem ser negligenciados;
6. As partículas são esféricas e do mesmo tamanho.

Ao longo dos anos, apesar de novos estudos mencionarem o trabalho de Kynch, houve algumas mudanças nas hipóteses, como a sedimentação polidispersa, no qual há partículas de tamanhos variados, e a velocidade pode não depender somente da concentração de sólidos, podendo ser afetada pela ação partícula-partícula, por exemplo.

O processo até alcançar a concentração máxima depende de inúmeras variáveis, como as características das partículas sólidas, como o líquido em que elas se encontram se comporta, qual é a profundidade do recipiente, entre outros. Estas características foram primeiro estudadas e apresentadas por [Coe e Clevenger \(1916\)](#), que descreveram também os diferentes momentos de sedimentação (Figura 4.1).

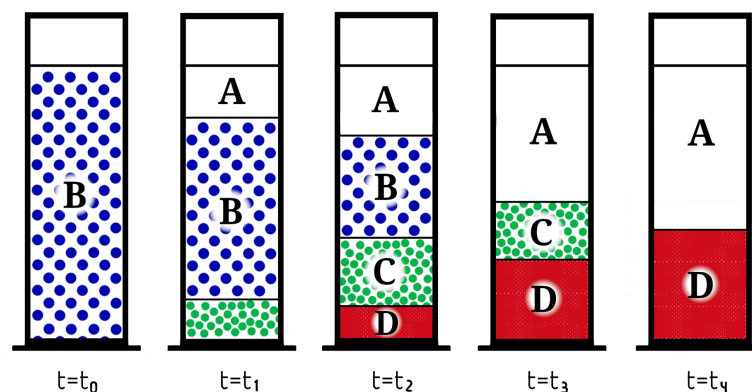


Figura 4.1: Exemplificação das Zonas de Sedimentação. Fonte: Adaptado de ([COE; CLEVINGER, 1916](#)).

Cada região *A*, *B*, *C* e *D* foram denominadas, respectivamente, como zona clarificada, zona de concentração constante, zona de concentrações variáveis e zona de compressão, onde *A* é a região em que a concentração de partículas sólidas é nula, *B* e *C* são regiões onde há a presença das partículas sólidas e do meio líquido e a região *D* onde a concentração de partículas sólidas é máxima, ou seja, há presença mínima de fluido.

Neste mesmo trabalho, [Coe e Clevenger \(1916\)](#) propuseram uma fórmula para a velocidade superficial dos sólidos dada a velocidade inicial de sedimentação, a concentração inicial dos sólidos e a concentração do líquido.

O fenômeno da sedimentação ocorre em diferentes locais e momentos e estudá-lo tem diversos motivos, como o estudo da formação de rochas sedimentares, sendo possível descobrir

as mudanças que ocorreram no planeta há milhares de anos, o funcionamento e manutenção de represas e, neste trabalho em específico, o estudo da sedimentação em perfurações de poços de petróleo.

Para o processo de perfuração é utilizado uma mistura de líquido e partículas sólidas, mais conhecido como lamas de perfuração. Essas lamas auxiliam no bom funcionamento do maquinário, lubrificando e resfriando a broca, auxiliando com a suspensão dos fragmentos provenientes da perfuração, fazendo com que estes sejam transportados até a superfície, e mantendo o poço aberto e estável durante a perfuração [Rocha \(2018\)](#).

Neste problema específico o meio líquido é um fluido não-newtoniano pseudoplástico, ou seja, sua viscosidade aparente sofre alterações de acordo com a quantidade de cisalhamento no meio. Estas misturas podem ter constituições diferentes (no trabalho de [Ribeiro et al. \(2017\)](#) é feito um estudo experimental com a barita), porém a sedimentação das partículas e o que isso causa para a estabilidade dos poços durante e após as perfurações são preocupações em comum e, para tanto, os estudos sobre o tempo para se chegar na concentração total dos sólidos no fundo tem um interesse financeiro e ambiental. Para entender um pouco sobre estas questões, vamos elucidar como funciona, superficialmente, a perfuração dos poços.

Ao começar a perfuração, uma broca de diâmetro grande é utilizada e, juntamente, é injetado o fluido de perfuração dado seus diversos benefícios para o processo. Após uma certa altura alcançada é então colocado um tubo de revestimento e entre a parede do poço e este tubo é feito a cimentação do poço. Após isto o processo é continuado, utilizando uma broca menor, chegando a uma profundidade maior e, após certa altura, novamente, é feito o processo de cimentação da segunda seção e, assim, sucessivamente até alcançar o reservatório.

Durante o processo de cimentação, o fluido de perfuração, munido de partículas sólidas de sua própria fabricação e, também, pequenas partículas proveniente da perfuração, podem se alojar entre a parede cimentada e do poço ou entre o cimento e o revestimento. Com o aumento da temperatura na região dado a movimentação de fluidos e a profundidade, as partículas presente no fluido tentarão se expandir, causando um aumento na pressão da região e, dado o confinamento, se não houver uma forma de alívio essa alta pressão causa a ruptura das estruturas, resultando no *blow-up*. Para evitar este aumento de pressão é feito uma sapata aberta (ver [Figura 4.2](#)) para que, caso haja um aumento de pressão, o fluido seja escoado pela sapata aberta para as formações rochosas.

A questão da sedimentação torna-se alvo de estudo por conta desta sapata aberta. Se o fluido, em paradas operacionais, ficar em repouso estas partículas sólidas se sedimentarão para o fundo, podendo obstruir parcialmente ou totalmente a sapata, tornando o processo perigoso novamente, dado a falta de região de alívio necessária para a segurança de trabalhadores e cuidado ambiental.

Informações físicas mais detalhadas sobre os fluidos de perfuração serão abordadas a seguir, onde será apresentado a modelagem da sedimentação desenvolvida por [Rocha \(2018\)](#), dado que essas características são necessárias para entender a motivação do modelo descrito no

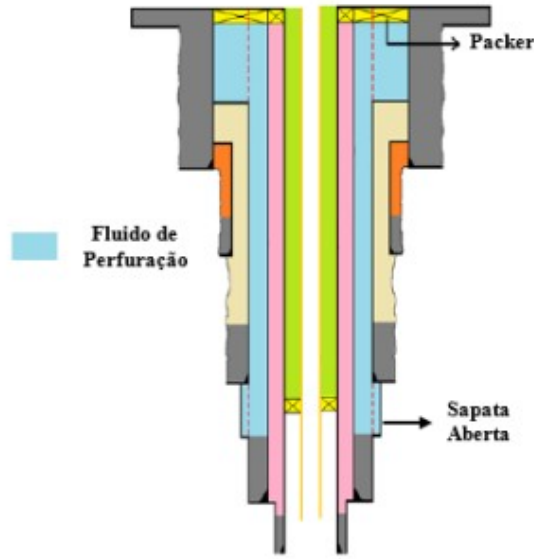


Figura 4.2: Representação do processo de perfuração do poço de petróleo. Fonte: Adaptado de (RI-BEIRO et al., 2017).

trabalho.

4.3 A Modelagem Matemática do Fenômeno

Como a sedimentação, normalmente, ocorre quando há uma partícula sólida em um meio líquido e segue uma única direção, usamos as equações de continuidade e de quantidade de movimento do sólido, descritas como:

$$\frac{\partial \epsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (\epsilon_s v_s)}{\partial z} = 0 \quad (4.4)$$

$$\rho_s \epsilon_s \left(\frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) = \frac{\partial T_s}{\partial z} + m + \epsilon_s (\rho_s - \rho_l) g \quad (4.5)$$

onde ρ é a densidade, ϵ é concentração, v_s é a velocidade de deslocamento, T_s é o tensor tensão, m é a força resistiva. Os subíndices s e l indicam se são propriedades da partícula sólida ou do líquido. A posição axial é descrita por z , o tempo t e g é a gravidade.

Como o fluido que estudamos é uma lama para perfuração de poços de petróleo, considerado um fluido não-newtoniano e pseudoplástico, ou seja, quanto mais deformação aplicada, a sua viscosidade aparente diminui, podemos modelar a equação de quantidade de movimento.

O tensor tensão ficará em função das componentes normais à superfície. Nesse caso o tensor presente no nosso fluido é a pressão do sólido, como a pressão está em função da concentração de sólido presente na região, teremos:

$$\frac{\partial T_s}{\partial z} = - \frac{\partial P_s}{\partial \epsilon_s} \frac{\partial \epsilon_s}{\partial z} \quad (4.6)$$

Como a sedimentação em poços de petróleo ocorre de forma lenta, dado a propriedade do fluido e estudos experimentais, a aceleração local e a aceleração convectiva são praticamente nulas, logo:

$$\left(\frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial z} \right) \approx 0 \quad (4.7)$$

A força resistiva - interação das partículas sólidas e líquidas -, é um valor que depende da taxa de cisalhamento, da velocidade superficial, da densidade e da permeabilidade. Como estamos pensando em escoamento em uma tubulação cilíndricas, os números de Reynolds e de Deborah, que servem para determinar o tipo de escoamento e a fluidez (ou não) de uma mistura, respectivamente, devem ser utilizadas. Porém, como neste estudo a mistura é não-newtoniana pseudoplástica, a velocidade de sedimentação e a taxa de cisalhamento são suficientemente baixas para ambos valores serem negligenciados, resultando na seguinte força resistiva.

$$m = \frac{1}{K} \frac{\tau(\lambda^*)}{\lambda^*} q$$

onde $\frac{\tau(\lambda^*)}{\lambda^*}$ é a viscosidade aparente do líquido dado o cisalhamento λ^* , K é a porosidade do meio e q é a velocidade superficial da mistura, descrita como $q = (1 - \epsilon_s)(v_l - v_s)$. Em [Rocha \(2018\)](#) há detalhamentos maiores para as descrições físicas gerais utilizadas aqui, como o número de Reynolds, que não foi apresentado por não ser o foco do trabalho.

Neste estudo, o cisalhamento ocorre por dependência da própria mistura, já que este contém partículas sólidas dentro do fluido. Logo a viscosidade do líquido ficará em função da viscosidade da suspensão que dependerá, por conseguinte, de ambos os elementos. A viscosidade aparente do líquido será dada por:

$$\left(\frac{\tau(\lambda^*)}{\lambda^*} \right)_l = \left(\frac{\tau(\lambda^*)}{\lambda^*} \right)_{susp} \left(1 - \frac{\rho_s \epsilon_{s0}}{\rho_{susp}} \right)$$

A taxa de cisalhamento depende da estrutura e da velocidade das partículas, isso porque a taxa de cisalhamento é o fator de alteração ou deterioração de um corpo quando se há uma ou mais forças agindo nele. A velocidade foi descrita acima e as características dos sólidos presentes são dadas pelo diâmetro médio d_p e a função esfericidade $\theta(\phi)$.

$$\lambda^* = \frac{v_s}{(1 - \epsilon_s)} \frac{\theta(\phi)}{d_p}$$

Por fim, temos o modelo de *power-law*, que é o modelo recomendável para descrever a viscosidade de um fluido não-newtoniano. Substituindo o valor da taxa de deformação λ^* no modelo de *power-law*, chegamos no valor para a força resistiva da interação sólido-líquido:

$$\left(\frac{\tau(\lambda^*)}{\lambda^*}\right)_{susp} = M(\lambda^*)^{n-1} = M\left(\frac{v_s}{(1-\epsilon_s)} \frac{\theta(\phi)}{d_p}\right)^{n-1} \quad (4.8)$$

O valor de M e n são descritos no modelo de *power-law* como a viscosidade aparente e o índice de comportamento do fluido, respectivamente, onde $n < 1$ para o caso do fluido pseudoplástico.

Portanto, fazendo as substituições encontradas na equação da interação sólido-líquido chegaremos a seguinte relação:

$$m = \frac{1}{K} \left[M \left(\frac{v_s}{(1-\epsilon_s)} \frac{\theta(\phi)}{d_p} \right)^{n-1} \left(1 - \frac{\rho_s \epsilon_{s0}}{\rho_{susp}} \right) \right] (1-\epsilon_s)(v_l - v_s) \quad (4.9)$$

Substituindo as Equações (4.6), (4.7) e (4.9) na equação de quantidade de movimento (4.5) teremos:

$$0 = -\frac{\partial P_s}{\partial \epsilon_s} \frac{\partial \epsilon_s}{\partial z} + \frac{1}{K} \left[M \left(\frac{v_s}{(1-\epsilon_s)} \frac{\theta(\phi)}{d_p} \right)^{n-1} \left(1 - \frac{\rho_s \epsilon_{s0}}{\rho_{susp}} \right) \right] (1-\epsilon_s)(v_l - v_s) + \epsilon_s(\rho_s - \rho_l)g$$

Como queremos determinar o tempo de sedimentação das partículas sólidas no fluido, faremos uma mudança para que $(v_l - v_s)$ fique isolado na igualdade, chegando assim na expressão:

$$v_l - v_s = -\frac{K}{M(1-\epsilon_s)^{1-n}} \left(\frac{d_p}{\theta(\phi)} \right)^{n-1} \left(\frac{\rho_{susp}}{\rho_{susp} - \rho_s \epsilon_{s0}} \right) \frac{1}{(1-\epsilon_s)} \left[\epsilon_s(\rho_s - \rho_l)g - \frac{\partial P_s}{\partial \epsilon_s} \frac{\partial \epsilon_s}{\partial z} \right] \quad (4.10)$$

Para descobrir a velocidade de ascensão da fase líquida de forma simples será feito a soma da equação da continuidade da fase líquida e sólida.

$$\frac{\partial[\epsilon_s + (1-\epsilon_s)]}{\partial t} + \frac{\partial[\epsilon_s v_s + (1-\epsilon_s)v_l]}{\partial z} = 0$$

Integrando acima chegamos em:

$$\epsilon_s v_s + (1-\epsilon_s)v_l = q(t)$$

onde $q(t)$ é a velocidade da mistura em função do tempo. Temos que quando $z = 0$ (fundo do recipiente) a velocidade do líquido e do sólido será 0, logo nossa condição inicial é dada por $q(t) = \epsilon_s v_s|_{z=0,t} + (1-\epsilon_s)v_l|_{z=0,t} = 0$. Deste modo, temos que a restrição cinemática será:

$$v_l = -\frac{\epsilon_s}{(1-\epsilon_s)} v_s \quad (4.11)$$

Fazendo a substituição da Equação (4.11) em (4.10) teremos a modelagem que descreve a sedimentação de partículas sólidas em um fluido não-newtoniano pseudoplástico em um tubo:

$$v_s = \left\{ \frac{K}{M(1-\epsilon_s)^{1-n}} \left[\frac{d_p}{\theta(\phi)} \right]^{n-1} \left(\frac{\rho_{susp}}{\rho_{susp} - \rho_s \epsilon_{s0}} \right) \left[\epsilon_s (\rho_s - \rho_f) g - \frac{dP_s}{d\epsilon_s} \frac{\partial \epsilon_s}{\partial z} \right] \right\}^{\frac{1}{n}}$$

Portanto, o problema aqui estudado é governado pela lei de conservação hiperbólica e o seguinte fluxo desenvolvido:

$$\frac{\partial \epsilon_s}{\partial t} + \frac{\partial (\epsilon_s v_s)}{\partial z} = 0,$$

$$v_s = \left\{ \frac{K}{M(1-\epsilon_s)^{1-n}} \left[\frac{d_p}{\theta(\phi)} \right]^{n-1} \left(\frac{\rho_{susp}}{\rho_{susp} - \rho_s \epsilon_{s0}} \right) \left[\epsilon_s (\rho_s - \rho_f) g - \frac{dP_s}{d\epsilon_s} \frac{\partial \epsilon_s}{\partial z} \right] \right\}^{\frac{1}{n}},$$

Com esta equação estudaremos a sedimentação em batelada. O termo batelada categoriza que, após a suspensão estar no recipiente, não há entrada ou saída de qualquer quantidade do sistema e não há interferência externa. Resolver esta equação com diferentes métodos numéricos, que serão apresentados em diante, é o principal objetivo deste trabalho. Daremos continuidade ao trabalho apresentando fluxos menos lineares.

4.4 Fluxo não-linear simples

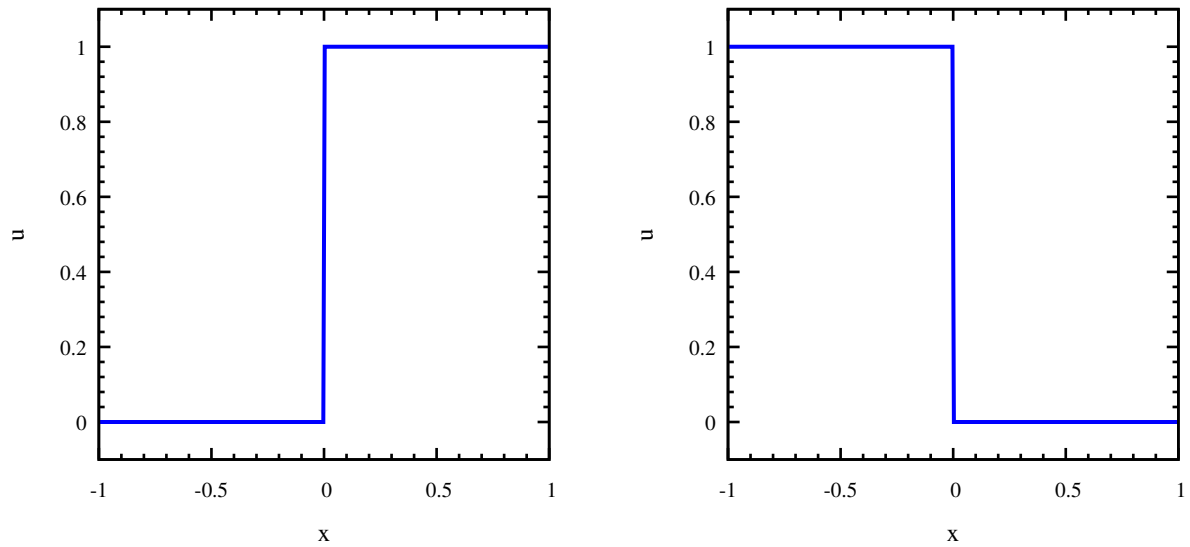
4.4.1 Problema de Riemann

Quando há uma condição inicial com duas regiões constantes; uma à esquerda e outra à direita do ponto de descontinuidade, a conhecemos como Problema de Riemann. Sua condição inicial é separada em dois intervalos, no qual u admitirá um valor constante distinto para cada região, sendo u_l o valor à esquerda da descontinuidade e u_r o valor a direita. Uma representação geral seria a Equação (4.12).

$$u_0 := u(x, 0) = \begin{cases} u_l, & \text{se } x < 0 \\ u_r, & \text{se } x > 0 \end{cases}. \quad (4.12)$$

Os valores que são frequentemente utilizados na literatura para um exemplo do Problema de Riemann são 1 e 0. As Equações (4.13) e (4.14) são dois casos amplamente explorados e suas representações gráficas são as Figuras 4.3a e 4.3b, respectivamente.

$$u_0 = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0 \\ 1, & \text{se } x > 0 \end{cases}, \quad (4.13) \quad u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x > 0 \end{cases}. \quad (4.14)$$



(a) Curva com $u_l = 0$ e $u_r = 1$.

(b) Curva com $u_l = 1$ e $u_r = 0$.

Figura 4.3: Representação das Condições Iniciais. Fonte: Elaborado pela autora.

O problema de Riemann é amplamente mencionado quando estuda-se equações diferenciais parciais hiperbólicas e, para casos não lineares, há a ocorrência da descontinuidade, resultando em dois fenômenos: a frente de choque e o leque rarefação, que são conhecimentos importantes para o estudo de mecânica dos fluidos. A ocorrência dessas ondas depende do fluxo não linear e da condição inicial do problema estudado que, com o passar do tempo, se desenvolve. A Figura 4.4 mostra um problema de Riemann onde há o aparecimento de uma frente de choque enquanto a Figura 4.5 representa a ocorrência do leque de rarefação.

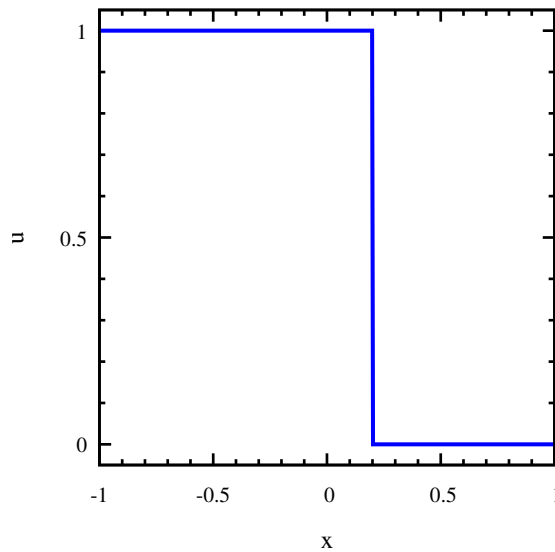


Figura 4.4: Problema de Riemann com $u_l = 1$ e $u_r = 0$ com $t_f = 0.4$. Fonte: Elaborado pela autora.

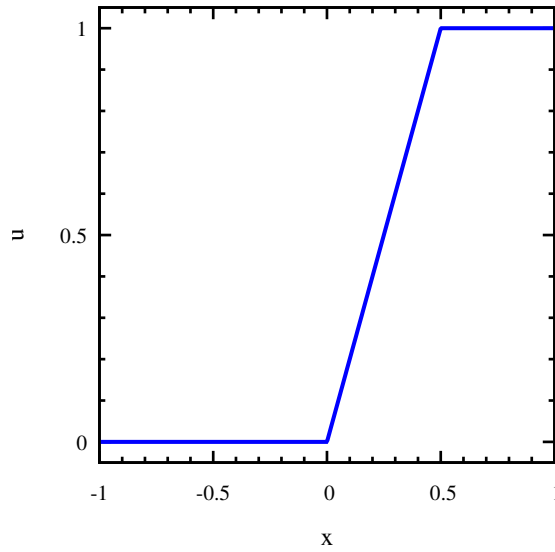


Figura 4.5: Problema de Riemann com $u_l = 0$ e $u_r = 1$ com $t_f = 0.5$. Fonte: Elaborado pela autora.

No subcapítulo 4.4.3, Soluções Fracas e Condição de Entropia, será explicitado como se caracterizam cada uma dessas ondas e os conhecimentos que as perpassam, reavaliando ambos os exemplos.

4.4.2 Equação de Burgers

Um exemplo inicial de uma lei de conservação não linear é a equação invíscida de Burgers, que é caracterizada semelhantemente à equação (4.2).

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + u \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0. \quad (4.15)$$

Neste caso temos que o termo convectivo está transportando nossa informação na velocidade de u . Isso significa que a velocidade é influenciada diretamente no valor de u no x estudado. Se integrarmos o segundo termo da equação (4.15) em relação a u teremos o seguinte:

$$u_t + \left(\frac{u^2}{2} \right)_x = 0. \quad (4.16)$$

A Equação (4.15) é conhecida como não-conservativa enquanto a Equação (4.16) é a formulação conservativa de Burgers. Esta última representação é indicada ao utilizar o método de Volumes Finitos, que manterá em cada volume de controle a quantidade de massa, por exemplo. Dado o fluxo $\frac{u^2}{2}$, temos que o jacobiano será u .

Vejamos a utilização do Fluxo de Burgers para a condição inicial da função suave $\sin(\pi(x + 1))$ utilizando o método numérico Upwind. O gráfico que corresponde a essa condição inicial (CI) (Figura 4.6) será um período de uma onda. Como a amplitude corresponde ao valor de u , temos que em uma região a velocidade é positiva e em outra negativa, portanto seus

fluxos estarão em direções contrárias, causando uma área de choque entre essas informações, vide Figura 4.7, situação semelhante à vista em um dos casos do problema de Riemann.

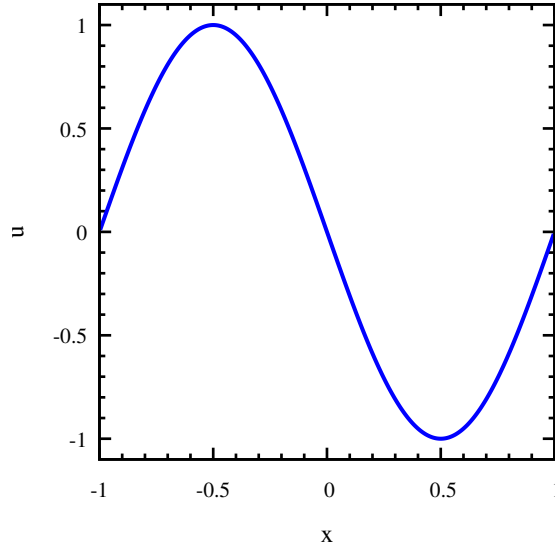


Figura 4.6: Condição inicial da função suave. Fonte: Elaborado pela autora.

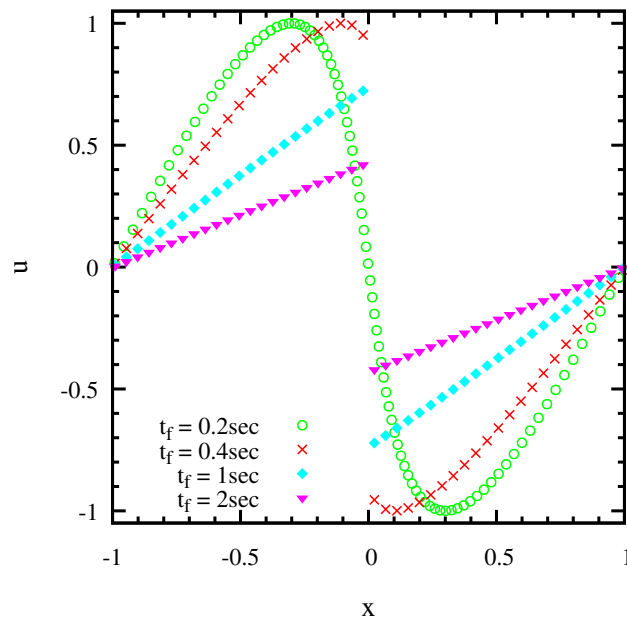


Figura 4.7: Resultados em diferentes tempos usando o fluxo de Burgers no Upwind. Fonte: Elaborado pela autora.

Pode-se ver a formação do salto de forma clara a partir do tempo final t_f igual a 0.4 segundos causada pelo choque entre as ondas. No Capítulo 5 veremos de forma mais detalhada a aplicação do fluxo de Burgers para as condições iniciais do seno e de Riemann.

Ao utilizar um fluxo na equação hiperbólica, ao invés de problemas lineares onde a velocidade é um valor constante, podemos ver a ocorrência de choques e rarefação. Quando

essas discontinuidades são formadas há certas medidas que deverão ser tomadas pois, como sabe-se, não há derivada em um ponto de salto. Para contornar este obstáculo foram criadas maneiras para encontrar uma outra formulação que se encaixe no problema a ser resolvido; a solução fraca, a condição de entropia e a condição de Rankine-Hugoniot.

4.4.3 Soluções Fracas e Condição de Entropia

As condições iniciais mencionadas anteriormente (4.14 e 4.13), utilizando-se da equação de Burgers, sofrem com a criação de uma curva de choque (Figura 4.9) ou área de rarefação (vide Figura 4.8). Essas ondas são formadas pela diferença de velocidade das características de u_l e u_r .

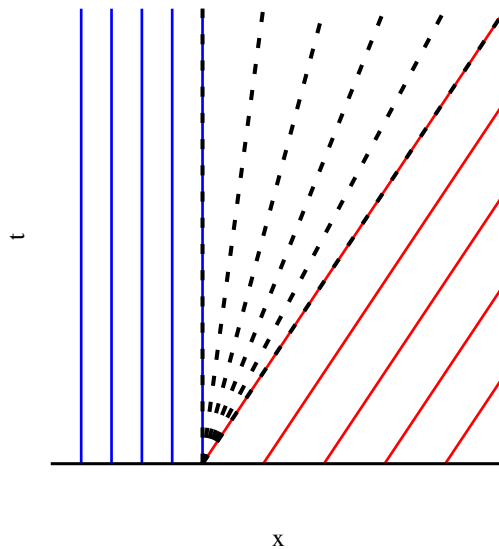


Figura 4.8: Curva Característica da condição inicial (4.13). Fonte: Elaborado pela autora.

As retas à esquerda, que são paralelas ao eixo t , representam os valores onde $u = 0$, ou seja, onde a velocidade é nula e as retas na extrema direita, terminado pela linha vermelha, descrevem o momento em que $u = 1$. Elas seguem a nossa condição inicial como descrita em (4.13), para valores menores que zero u é 0 e para valores acima será 1. As retas entre esses dois momentos (pontilhada) é o leque de rarefação e mostram como a nossa condição se comporta nessa região.

Para encontrar as curvas à esquerda e à direita da discontinuidade é preciso encontrar o valor do ângulo θ que cada curva característica terá com relação a x . Para encontrar este valor θ fazemos

$$\tan(\theta) = \frac{1}{u},$$

sendo u o valor da propriedade na região. Vamos utilizar o exemplo da Figura 4.8. No lado direito da discontinuidade o valor de u é 1, portanto:

$$\tan(\theta) = \frac{1}{1} = 1 \implies \tan(45^\circ) = 1.$$

Logo, as curvas em vermelho tem um ângulo de 45° com o eixo das abscissas.

Quando temos uma descontinuidade não solucionamos mais a equação de conservação da forma clássica, mas sim utilizando uma solução fraca. Antes de adentrarmos sobre o que é uma solução fraca e como encontrá-la, precisamos primeiro de outras informações essenciais. Seja a função teste $\Phi \in C_0^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$, sendo C_0^1 um espaço de funções continuamente deriváveis com suporte compacto, ou seja, Φ é identicamente zero fora de um conjunto limitado (LEVEQUE, 1992).

Definição 1. A função $u(x, t)$ será solução fraca da lei de conservação se (4.17) for mantida para todo $\Phi \in C_0^1$.

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty u \Phi_t + f(u) \Phi_x \, dx dt = - \int_{-\infty}^\infty u(x, 0) \Phi(x, 0) \, dx \quad (4.17)$$

A falta de derivada para os valores de u e $f(u)$, geradas por descontinuidades dado a não-linearidade do problema, faz-se necessário a utilização da função teste - que é considerada uma função suave - para que esta seja derivada no lugar de u e $f(u)$. Para chegarmos na igualdade mostrada em (4.17) iniciamos com a integração em relação a x e t do produto entre Φ e a Equação (4.3). Suponha que $u(x, t)$ é suficientemente contínua e suas derivadas são bem comportadas, para obter a solução fraca fazemos

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi u_t + \Phi f(u)_x \, dx dt &= 0 \implies \\ \implies \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \Phi u_t \, dt dx + \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi f(u)_x \, dx dt &= 0 \end{aligned}$$

Fazendo a integração por partes destes dois termos, teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\Phi u \Big|_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} \Phi_t u \, dt \right] dx + \int_0^{+\infty} \left[\Phi f(u) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_x f(u) \, dx \right] dt = 0$$

Como a função teste Φ tem suporte compacto, temos que $\lim_{x \rightarrow \infty} \Phi = 0$ e $\lim_{t \rightarrow \infty} \Phi = 0$, portanto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[0 - \Phi(x, 0) u(x, 0) - \int_0^{+\infty} \Phi_t u \, dt \right] dx + \int_0^{+\infty} \left[0 - 0 - \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_x f(u) \, dx \right] dt = 0$$

Reorganizando a igualdade acima chegamos na Equação (4.17).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \Phi_t u \, dt dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \Phi_x f(u) \, dx dt = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(x, 0) u(x, 0) dx$$

Porém, esta solução fraca não é única (um exemplo seriam as soluções (4.21) e (4.22)) e para que possamos contornar esta falta de unicidade e encontrar a melhor representação para o problema em que será utilizada, deve-se adicionar uma condição de entropia.

A condição de entropia garante que uma frente de choque deve ocorrer de fora para dentro, isso significa que, conforme o passar do tempo, teremos que as curvas características irão se cruzar. Quando ocorre o contrário, começam em contato e com o tempo se separam, ela se tornará instável (LEVEQUE, 1992). Logo, uma descontinuidade se propagando a uma velocidade s (4.18) satisfaz a condição de entropia se $f'(u_L) > s > f'(u_R)$. Caso esta condição de entropia não seja satisfeita, teremos que a descontinuidade é um leque de rarefação. Esta condição, portanto, é utilizada para descobrir qual é a solução fraca que descreverá a condição inicial sem perder ou fugir das suas propriedades físicas.

Na próxima subseção será apresentado um caso onde é possível encontrar duas soluções fracas de forma simples e matematicamente coerentes, porém apenas uma delas representa o problema corretamente.

4.4.4 Curvas Características - A Condição de Rankine-Hugoniot

Acima falamos da solução fraca e de um dos fenômenos que ocorre quando há a descontinuidade, que é descrito pela condição de entropia. A condição de Rankine-Hugoniot utiliza-se da solução fraca para encontrar a curva de choque ou rarefação condizente com a condição inicial dada. A velocidade é descrita da seguinte forma:

$$s(u_L - u_R) = f(u_L) - f(u_R) \implies s = \frac{f(u_L) - f(u_R)}{(u_L - u_R)} \quad (4.18)$$

No qual s é a velocidade de propagação da onda, u_L é o valor à esquerda do choque, u_R o valor à direita e $f(u_L)$ e $f(u_R)$ os valores do fluxo. Seja a seguinte condição inicial:

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } x < 0 \\ 0, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

Para a condição (4.19) é esperado uma curva de choque, pois o valor a esquerda da descontinuidade u_l é maior que o valor a direita u_r . Na Figura 4.9 temos a representação das curvas características da solução fraca para a Equação (4.19). Para encontrar a curva onde ocorre o choque utilizaremos a Equação (4.18).

Substituindo os valores em (4.18) e utilizando o fluxo de Burgers, ou seja $f(u) = \frac{u^2}{2}$,

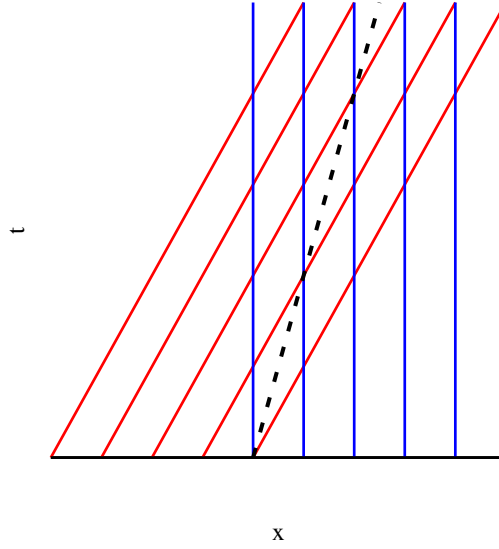


Figura 4.9: Curvas característica da condição inicial (4.20). Fonte: Elaborado pela autora.

chegamos a

$$s(1 - 0) = \frac{\frac{1}{2} - \frac{0}{2}}{1} \implies s = \frac{1}{2}$$

Portanto a velocidade do choque é $s = 1/2$. A curva de choque é encontrada ao fazer

$$x_s(t) = x_d + st$$

sendo x_d o ponto de descontinuidade. Para a condição inicial (4.19) teremos

$$x_s(t) = \frac{t}{2}$$

Resultando na seguinte solução fraca

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } x < \frac{t}{2} \\ 0, & \text{se } x > \frac{t}{2} \end{cases} . \quad (4.20)$$

Para a condição inicial (4.13) é esperado uma leque de rarefação, dado que $u_L = 0 < 1 = u_R$ e $f'(u_l) < f'(u_r)$. A velocidade de choque e a curva de choque para esta condição é a mesma que a condição anterior, ou seja, temos que

$$u_0 = \begin{cases} 0, & \text{se } x < \frac{t}{2} \\ 1, & \text{se } x > \frac{t}{2} \end{cases} . \quad (4.21)$$

A solução (4.21) é matematicamente correta, porém não satisfaz a condição de entropia. Nessa solução fraca vemos que as curvas se formam no choque e se propagam com o tempo (Figura 4.10). A condição diz que se há um choque então $f'(u_L) > s > f'(u_R)$, porém, para este

caso, $f'(u_L) = 0$, $s = 1/2$ e $f'(u_R) = 1$ o que claramente não satisfaz a desigualdade. Além de não cumprir a entropia, a solução fraca (4.21) é fisicamente incoerente.

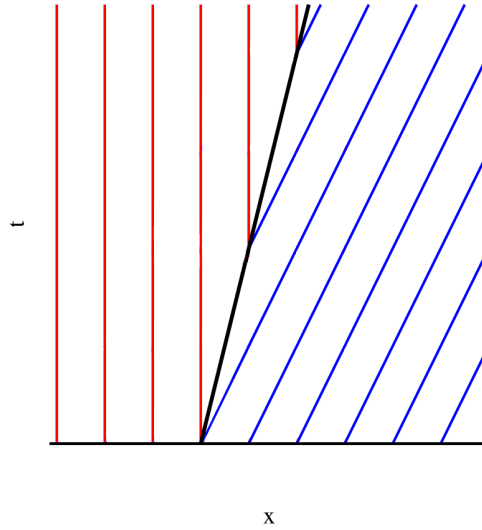


Figura 4.10: Curvas característica da Equação (4.21). Fonte: Elaborado pela autora.

Portanto, a Figura 4.8 corresponde à solução fraca correta. A solução fraca que satisfaz a condição de entropia é

$$u_0 = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ x/t, & \text{se } 0 \leq x \leq t \\ 1, & \text{se } x > t \end{cases} . \quad (4.22)$$

Para condições iniciais em que os valores de $u_L < u_R$ a leque de rarefação é dada (ver página 30 e 31 de [LeVeque \(1992\)](#))

$$u(x, t) = \begin{cases} u_L, & \text{se } x < f'(u_L)t \\ x/t, & \text{se } f'(u_L)t \leq x \leq f'(u_R)t \\ u_R, & \text{se } x > f'(u_R)t \end{cases} .$$

4.5 Métodos Numéricos

Quando abordamos métodos numéricos estamos pensando em uma ferramenta que melhor descreve a situação física em questão de valores (gráficos) dado o lugar no espaço e o tempo que estamos observando. Cada método possui sua singularidade e eles podem ser separados com respeito à precisão na descrição do nosso fenômeno.

Existem os métodos *Low-Order* (LO) que possuem difusividade numérica elevada (falta de precisão), os métodos *High-Order* (HO), que não sofrem com tanta difusividade quanto o método antecessor, porém se a função utilizada não for suave em todos os pontos (ter alguma

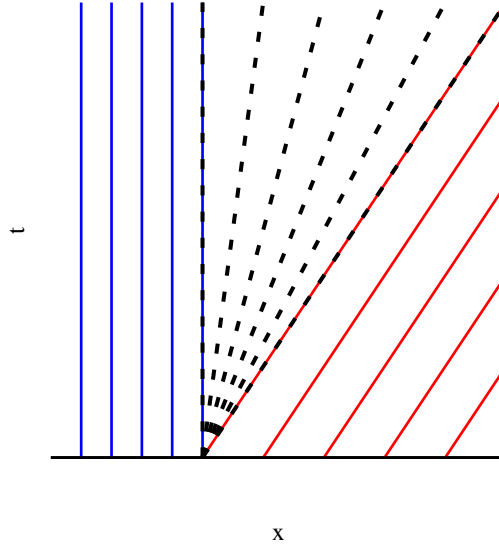


Figura 4.11: Curvas característica da Equação (4.13). Fonte: Elaborado pela autora.

queda ou elevação brusca em um x qualquer) poderá ocorrer oscilações em pontos vizinhos. E, por fim, *High-Resolution Schemes* (HRS), que mantém a estabilidade em torno de locais onde a função não é suave e mantém uma precisão interessante comparada aos métodos de 1ª e 2ª ordem.

Para a resolução das EDPs nós realizamos a discretização por método de linhas, no qual utilizamos o método de volumes finitos (MVF) no termo espacial resultando em um sistema de EDOs no tempo, que serão discretizados com diferentes métodos numéricos temporais.

Apresentaremos inicialmente o método de volumes finitos e, em seguida, os métodos numéricos espaciais e temporais utilizados.

O problema que iremos estudar são as leis de conservação. De forma geral ela é descrita pela seguinte EDP e com condição inicial

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

de fluxo $f(u)_x$ não linear. E suas condições de contorno são

$$u(0, t) = h_E, \quad \text{com } 0 < t \leq t_f$$

$$u(L, t) = h_D, \quad \text{com } 0 < t \leq t_f$$

4.5.1 Discretização Espacial

O Método de Volumes Finitos (MVF), como descrito em [LeVeque \(2002\)](#), é baseado na forma integral da equação hiperbólica. Ao invés de fazer os cálculos em nódulos (pontos) para

o método de diferenças finitas (MDF) é feito a divisão do domínio em volumes de controle, separados pelas faces, e em cada uma destas regiões é calculado a quantidade da informação u utilizando a ideia de cálculo de volume, por este motivo seu nome característico.

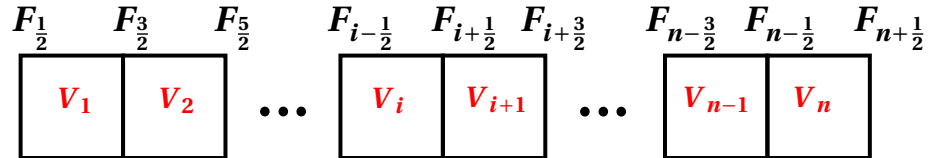
Conforme calculamos os volumes de controle contamos com a conservação da informação - não há perda ou ganho de u ao longo da malha - e a cada passo de tempo vemos a atualização dos valores em cada volume dado o fluxo. Se utilizado o método numérico correto espera-se que não haja erros ou oscilações nos pontos de descontinuidade (se houver) da equação de conservação. Para este método não é necessário uma malha uniforme.

No método de volumes finitos nós fazemos a avaliação dos fluxos nas faces à esquerda e à direita do volume e então, com estes valores, podemos calcular o valor dentro do volume.

Seja uma função $u(x, t)$ sendo $x \in (-\infty, \infty)$ e $t > 0$ com Δx_i sendo a distância entre dois pontos da malha, Δt o passo temporal e $x_{i+\frac{1}{2}}$ o ponto médio de um volume, portanto

$$\begin{aligned} x_i &= i \cdot \Delta x & i &= \dots, -1, 0, 1, \dots, \\ x_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{x_{i+1} - x_i}{2} & i &= \dots, -1, 0, 1, \dots, \\ t_n &= n \cdot \Delta t & n &= 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Como estamos trabalhando com volumes para cálculo finito, há uma convenção para o nome de cada elemento. As faces $F_{i-\frac{1}{2}} = x_{i-\frac{1}{2}}$ e os volumes de controle $V_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, com $i \in [1, n]$.



Logo, o valor da propriedade na célula i no tempo n é definido de forma integral como

$$U_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x, t_n) dx$$

Porém, como queremos encontrar a quantidade de propriedade para tempos futuros é necessário calcular a informação em um tempo superior (U^{n+1}). Para tal, utilizando a Equação (4.1), fazendo algumas manipulações e tendo o conhecimento supracitado chegamos em

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^n) \quad (4.23)$$

no qual $\mathcal{F}$ é o fluxo numérico espacial escolhido. Em continuação, explicitaremos brevemente alguns métodos numéricos.

Alguns dos métodos espaciais que serão apresentados - TVD e WENO - fazem reconstruções das malhas e então utilizam-se de métodos monotônicos, ou seja, métodos que não

criam novas oscilações, para criar o fluxo nas faces. Os outros métodos calculam os fluxos $\mathcal{F}$ diretamente.

4.5.2 Malha Espacial

4.5.2.1 Upwind

Um dos métodos baixa ordem conhecido é o método *Upwind* de primeira ordem. Este método consiste na importância do sentido do fluxo (a velocidade da onda). O transporte *Upwind* utiliza valores anteriores a posição atual e o transporte *Downwind* utiliza valores posteriores. Por exemplo, seja $a > 0$ a velocidade de propagação, o *Upwind* (4.24) ocorre da esquerda para a direita enquanto o *Downwind* (4.25) da direita para a esquerda.

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad (4.24)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_i^n) \quad (4.25)$$

Acima temos que Δt é o passo de tempo, Δx que é a distância de cada ponto da malha e os subíndices n e i indicam o local no *estêncil* de cada informação, no qual n é o tempo atual, $n + 1$ tempo futuro, i posição atual e $i - 1$ e $i + 1$ posição anterior e posterior no espaço. Logo, no caso do *Upwind* de primeira ordem temos três pontos no *estêncil*.

Sua formulação conservativa para fluxos não-lineares é descrita como:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F(U_i^n, U_{i+1}^n) - F(U_{i-1}^n, U_i^n))$$

Quando pensamos na abordagem em Volumes Finitos temos o Volume de Controle V_i e as faces desse volume $F_{i-\frac{1}{2}}$ e $F_{i+\frac{1}{2}}$. A partir daqui podemos utilizar novamente a ideia principal do Upwind, que é a ideia de direção do fluxo, se $U_i^n > 0$ para todos os valores de i , então é um fluxo positivo, indicando que $F(U_i^n, U_{i+1}^n) = F(U_{i-1}^n, U_i^n)$, pois pegamos o valor anterior. Se escolhermos o valor U_{i+1}^n teremos uma instabilidade nos resultados dado a orientação do fluxo.

Antes de continuarmos com os métodos numéricos, seria interessante comentar sobre o número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Este valor é importante quando temos um fenômeno físico que se propaga a uma velocidade, garantindo a chance de que o método numérico aplicado utilize esta velocidade física (LEVEQUE, 1992). O valor de CFL pode ser descrito como

$$\text{CFL} = \max_i \left(\frac{|f'(u_i)| \Delta t}{\Delta x} \right) \quad (4.26)$$

sendo $f'(u)$ o jacobiano do fluxo. Além disso há também a condição de CFL, que serve para restringir os valores que o número de Courant pode assumir sem causar instabilidade no

resultado. Este valor pode variar para cada método numérico utilizado.

4.5.2.2 Lax-Friedrichs

O método numérico de Lax-Friedrichs é um método numérico de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo ($O(\Delta x^2, \Delta t)$). Para alcançar a forma conservativa do método é preciso que esta tenha o formato da equação base (4.23), como mostrado em LeVeque (2002). Dado o fluxo de Lax-Friedrichs

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (F(U_{i-1}^n) + F(U_i^n)) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (U_i^n - U_{i-1}^n), \quad (4.27)$$

sendo F o fluxo físico da equação diferencial utilizada. A forma conservativa do método para fluxo não linear é

$$U_i^{n+1} = \frac{1}{2} (U_{i-1}^n + U_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F(U_{i+1}^n) - F(U_{i-1}^n)). \quad (4.28)$$

O método de Lax-Friedrichs é mais difusivo quando comparado com o *Upwind* (TORO, 2013) por ser de segunda ordem. Como visto em (4.28) o método de Lax-Friedrichs utiliza-se de três pontos no *estêncil*, U_{i-1}^n , U_{i+1}^n e U_i^{n+1} .

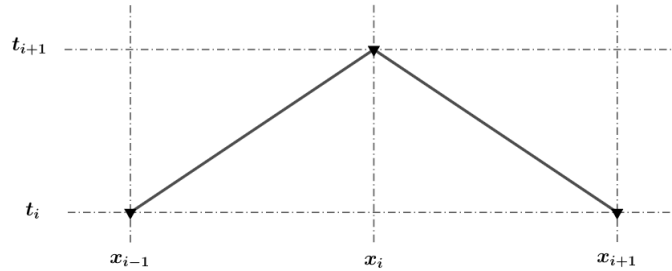


Figura 4.12: Representação dos pontos utilizados pelo método de Lax-Friedrichs no *stencil*. Fonte: Elaborado pela autora.

4.5.2.3 Lax-Wendroff

O método de Lax-Wendroff é um método de segunda ordem no espaço e no tempo ($O(\Delta x^2, \Delta t^2)$) e é considerado não monótono, ou seja, há a possibilidade de ocorrência de oscilações espúrias em locais de salto. O fluxo de Lax-Wendroff é descrito como

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (F_i + F_{i+1}) - \frac{a^2 \Delta t}{2\Delta x} (U_{i+1} - U_i)$$

No qual a é a velocidade da onda, no caso não-linear a é o jacobiano do fluxo. Sua forma conservativa para casos não lineares é

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F(U_{i+1}^n) - F(U_{i-1}^n)) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} \left[(A_{j+1/2} (F(U_{i+1}^n) - F(U_i^n))) - A_{j-1/2} (F(U_i^n) - F(U_{i-1}^n)) \right] \quad (4.29)$$

onde $A_{j\pm 1/2}$ é o valor do jacobiano em $\frac{1}{2}(U_j^n + U_{j\pm 1}^n)$

O método de Lax-Wendroff utiliza-se de quatro pontos no estêncil, um ponto a mais que o método anterior, sendo representado graficamente como visto na Figura 4.13

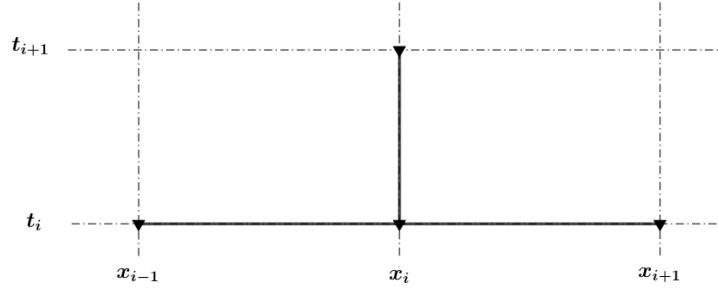


Figura 4.13: Representação dos pontos utilizados pelo método de Lax-Wendroff no *stencil*. Fonte: Elaborado pela autora.

4.5.2.4 Total Variation Diminished (TVD)

Ao utilizarmos um método qualquer, não temos garantia de convergência a não ser que este tenha algum tipo de estabilidade (LEVEQUE, 1992). O método de estabilidade *Total Variation* (TV) é utilizado para sabermos o quão descontínua a função é, medindo a variação a cada passo dado. O TV, quando utilizado em problemas contínuos em função do tempo e do espaço, é descrito por

$$TV(u) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sup \frac{1}{\epsilon} \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} |u(x+\epsilon, t) - u(x, t)| dx dt + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sup \frac{1}{\epsilon} \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} |u(x, t+\epsilon) - u(x, t)| dx dt \quad (4.30)$$

no qual u é a informação estudada, como, no nosso caso, a concentração de sólidos. Para dados discretizados o TV torna-se

$$TV(U^n) = \sum_{n=0}^{T/\Delta t} \sum_{i=0}^{Nv} \left[\Delta t |U_{i+1}^n - U_i^n| + \Delta x |U_i^{n+1} - U_i^n| \right] \quad (4.31)$$

o subscrito n representa o passo temporal e i a posição espacial.

Como dito, o TV é uma forma de estudar a função, descobrindo se há saltos ao longo do intervalo, porém é necessário uma forma de controlá-los. Seguindo este raciocínio, há a propriedade nomeada *Total Variation Diminishing* (TVD), que utiliza a propriedade TV,

condicionando-a de forma que a variação total não aumente com o passar do tempo, ou seja

$$TV(U^{n+1}) \leq TV(U^n) \quad (4.32)$$

Essa propriedade está presente em alguns métodos numéricos, fazendo com que estes sejam categorizados como métodos TVD. De acordo com [LeVeque \(1992\)](#) todo método TVD preserva monotonicidade, evitando a criação de oscilações e dados incoerentes com as informações físicas da condição estudada.

Um dos métodos numéricos para calcular o fluxo de uma equação de conservação hiperbólica considerado TVD foi publicado por [Sweby \(1984\)](#). Este será o método TVD utilizado no nosso trabalho. Para desenvolvê-lo é necessário um método de baixa ordem, como o *Upwind* (h^{LO}) e a modelagem matemática ($f(u_k)$) para alcançarmos os E-esquemas descritos como

$$\begin{aligned} (\Delta f_{k+1/2})^+ &= -(h_{k+1/2}^{LO} - f(u_{k+1})) \\ (\Delta f_{k+1/2})^- &= h_{k+1/2}^{LO} - f(u_k) \end{aligned} \quad (4.33)$$

e o CFL

$$\lambda_{k+1/2}^+ = \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{(\Delta f_{k+1/2})^+}{\Delta u_{k+1/2}} \quad \lambda_{k+1/2}^- = \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{(\Delta f_{k+1/2})^-}{\Delta u_{k+1/2}} \quad (4.34)$$

Utilizando (4.34) teremos o seguinte

$$\alpha_{k+1/2}^+ = \frac{1}{2} (1 - \lambda_{k+1/2}^+) \quad \alpha_{k+1/2}^- = \frac{1}{2} (1 + \lambda_{k+1/2}^-) \quad (4.35)$$

Portanto, usando (4.33), (4.35) e o *Upwind* chegamos à seguinte formulação do método TVD utilizada

$$\mathcal{F}_{k+\frac{1}{2}} = h^{LO} + \phi(r_k^+) \left(\Delta f_{k+\frac{1}{2}} \right)^+ \alpha_{k+\frac{1}{2}}^+ - \phi(r_{k+1}^-) \left(\Delta f_{k+\frac{1}{2}} \right)^- \alpha_{k+\frac{1}{2}}^- \quad (4.36)$$

Sendo ϕ o limitador a ser escolhido. Inicialmente, utilizaremos os limitadores Sweby e Superbee ([SWEBY, 1984](#)):

$$\text{Sweby: } \phi(r_k) = \max(0, \min(r_k \beta, 1), \min(r_k, \beta)), \text{ com } 1 \leq \beta \leq 2$$

$$\text{Superbee: } \phi(r_k) = \max(0, \min(2r_k, 1), \min(r_k, 2))$$

\label{eq:CCFL} No qual r_k é a razão descrita por

$$r_k^+ = \frac{\alpha_{k-1/2}^+(\Delta f_{k-1/2})^+}{\alpha_{k+1/2}^+(\Delta f_{k+1/2})^+} \quad r_k^- = \frac{\alpha_{k+1/2}^-(\Delta f_{k+1/2})^-}{\alpha_{k-1/2}^-(\Delta f_{k-1/2})^-} \quad (4.37)$$

Tendo o conhecimento de métodos que contém propriedade TVD, que contam com a estabilidade e falta de oscilação por erro numérico em locais de salto, assim como métodos de baixa ordem, e maior precisão em regiões contínuas, assim como métodos de alta ordem, obtemos resultados melhores para problemas físicos com descontinuidade, como o estudado neste trabalho. Apesar disso, o TVD alcança até ordem 2 em regiões contínuas, o que pode não ser muito interessante em problemas de grande escala e muitas descontinuidades.

4.5.3 Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO)

O método essencialmente não-oscilatório (ENO) é um método que, diferente de todos os outros aqui mostrados, cria subestêncil para o cálculo da propriedade u . A ordem do método depende de quantos pontos k os subestêncil terão. Após a identificação dos subestêncil é analisado a suavidade de cada uma, evitando assim zonas de descontinuidade e, por fim, criando um polinômio interpolador.

A partir do ENO desenvolveu-se o esquema Essencialmente Não-Oscilatório Ponderado (WENO). O WENO faz uma média ponderada de todos os subestêncil identificadas, dando menor peso a aquelas que tem maior variação, enquanto o ENO escolhe apenas o estêncil de menor variação, ou seja, o que não contém descontinuidade (SHU, 2006). Dado a esse fator, a construção do WENO utiliza-se do ENO adicionado a uma combinação convexa de todos os polinômios interpoladores possíveis para aquele subestêncil.

Seja a média da célula I_i de uma função $u(x)$ escrita como

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(\zeta) d\zeta, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.38)$$

precisamos de uma função polinomial $p_i(x)$ que interpole o valor para cada intervalo de forma que seja possível encontrar aproximações para os valores nas faces $u_{i-\frac{1}{2}}^+$ e $u_{i+\frac{1}{2}}^-$ (4.40).

$$p_i(x) = u(x) + O(\Delta x^k), \quad z \in I_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.39)$$

$$u_{i-\frac{1}{2}}^+ = p\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) \quad u_{i+\frac{1}{2}}^- = p\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right), \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.40)$$

Dado a célula central I_i , o estêncil a ser escolhido terá e células a esquerda e d células a direita, de forma que $e + d + 1 = k$

$$u_{i-\frac{1}{2}}^+ = \sum_{j=0}^{k-1} \tilde{c}_{ej} \bar{u}_{i-e+j} \quad u_{i+\frac{1}{2}}^- = \sum_{j=0}^{k-1} c_{ej} \bar{u}_{i-e+j} \quad (4.41)$$

sendo

$$\tilde{c}_{ej} = c_{e-1,j} \quad (4.42)$$

Essas constantes podem ser calculadas

$$c_{ej} = \sum_{m=j+1}^k \frac{\sum_{l=0}^k \prod_{q=0, q \neq l}^k (e-q+1)}{\prod_{l=0, l \neq m}^k (m-l)}$$

Tabela 4.1: Tabela das constantes c_{ej}

k	e	j=0	j=1	j = 2
1	-1	1		
	0	1		
2	-1	3/2	-1/2	
	0	1/2	1/2	
	1	-1/2	3/2	
3	-1	11/6	-7/6	1/3
	0	1/3	5/6	-1/6
	1	-1/6	5/6	1/3
	2	1/3	-7/6	11/6

Fonte: Adaptado de [Shu \(2006\)](#).

Com os valores médios (4.5.3) e as constantes c_{ej} teremos k subestêncils

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{(e)} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{ej} \bar{u}_{i-e+j}, \quad e = 0, \dots, k-1 \quad (4.43)$$

Seja, por exemplo, o método de ordem $k = 3$, teremos

$$S = \{u_{i-2}, u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+2}\}$$

Os subestêncils candidatos serão

$$S^{(2)} = \{u_{i-2}, u_{i-1}, u_i\}$$

$$S^{(1)} = \{u_{i-1}, u_i, u_{i+1}\}$$

$$S^{(0)} = \{u_i, u_{i+1}, u_{i+2}\}$$

Dado o valor das constantes em 4.1, teremos que

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{(2)} = \frac{1}{3}u_{i-2} + \frac{5}{6}u_{i-1} + \frac{-1}{6}u_i$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{(1)} = \frac{-1}{6}u_{i-1} + \frac{5}{6}u_i + \frac{1}{6}u_{i+1}$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{(0)} = \frac{1}{3}u_i + \frac{-7}{6}u_{i+1} + \frac{11}{6}u_{i+2}$$

A partir daqui os métodos ENO e WENO se diferem. Para o ENO é necessário utilizar o polinômio de Lagrange ou de Newton para encontrar o melhor subestêncil $u_{i+\frac{1}{2}}^{(e)}$ e este será o polinômio interpolador. Para o WENO criaremos subestêncils de forma que se houver uma descontinuidade em um dos subestêncils, o peso atribuído a ele será quase nulo. Após, é feito uma combinação convexa desses subestêncils. Iniciamos com os pesos. Se a função $u(x)$ for constante por todo o domínio, os pesos para $k = 1, 2$ e 3 serão

Tabela 4.2: Tabela dos pesos d_e

k	d_0	d_1	d_2
1	1		
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	
3	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{1}{10}$

Fonte: Adaptado de [Shu \(2006\)](#).

e a reconstrução WENO será

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{e=0}^{k-1} d_e u_{i+\frac{1}{2}}^{(e)} \quad u_{i-\frac{1}{2}} = \sum_{e=0}^{k-1} \tilde{d}_e u_{i-\frac{1}{2}}^{(e)}$$

com $\tilde{d}_e = d_{k-1-e}$. Caso a função tenha descontinuidade, as constantes $\omega_e \geq 0$ são obtidas da seguinte forma

$$\omega_e = \frac{\alpha_e}{\sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s} \quad \tilde{\omega}_e = \frac{\tilde{\alpha}_e}{\sum_{s=0}^{k-1} \tilde{\alpha}_s}, \quad e = 0, \dots, k-1 \quad (4.44)$$

dado que em região de suavidade é esperado que

$$\omega_e = d_e + O(h^{k-1})$$

sendo

$$\alpha_e = \frac{d_e}{(\epsilon + \beta_e)^2} \quad \tilde{\alpha}_e = \frac{\tilde{d}_e}{(\epsilon + \beta_e)^2}, \quad e = 0, \dots, k-1$$

com $\epsilon > 0$ e $\epsilon = 10^{-6}$ para evitar que o denominador seja nulo. Os valores β_e são chamados de "indicadores de suavidade" (SHU, 2006), ou seja

- se a função no subestêncil for suave

$$\beta_e = O(\Delta x^2) \rightarrow \omega_e = O(1)$$

- se a função tiver descontinuidade no subestêncil

$$\beta_e = O(1) \rightarrow \omega_e = O(\Delta x^4)$$

Para a construção do WENO de 3ª ordem, os valores de β_e são

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_i - 2\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{u}_i - 4\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2 \\ \beta_1 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_{i-1} - 2\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\bar{u}_{i-1} - \bar{u}_{i+1})^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_{i-2} - 2\bar{u}_{i-1} + \bar{u}_i)^2 + \frac{1}{4}(\bar{u}_{i-2} - 4\bar{u}_{i-1} + 3\bar{u}_i)^2 \end{aligned} \quad (4.45)$$

A reconstrução à esquerda e a direita das faces é dado da seguinte maneira

$$u_{i+\frac{1}{2}}^- = \sum_{e=0}^{k-1} \omega_e u_{i+\frac{1}{2}}^{(e)} \quad u_{i-\frac{1}{2}}^+ = \sum_{e=0}^{k-1} \tilde{\omega}_e u_{i-\frac{1}{2}}^{(e)}$$

Por fim, para encontrar o valor do fluxo na face $F_{i+\frac{1}{2}}$

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = h(u_{i+\frac{1}{2}}^-, u_{i+\frac{1}{2}}^+)$$

sendo h uma função de fluxo numérico monotônico. De acordo com Shu (2006) h deve:

- ser Lipschitz contínua em ambos os argumentos;
- não-decrescente em a e não-crescente em b ;
- consistente com o fluxo físico do problema.

Para este trabalho foi escolhido a função flux splitting de Lax-Friedrichs:

$$\mathcal{F}^\pm(u) = \frac{1}{2}(f(u) \pm \alpha u) \quad (4.46)$$

com $\alpha = \max_u |f'(u)|$, dado que

$$h(a, b) = f^+(a) + f^-(b)$$

De todos os métodos descritos para a malha espacial, o WENO garante maior ordem em regiões suaves e há o controle de oscilações perto de descontinuidades, evitando valores não-físicos. Seguiremos para os métodos da malha temporal.

4.5.4 Malha Temporal

4.5.4.1 Euler

O método de Euler Explícito (EE) (4.47) é um método simples, com $O(\Delta t)$

$$u^{n+1} = u^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}(u_{i+\frac{1}{2}}) - \mathcal{F}(u_{i-\frac{1}{2}})). \quad (4.47)$$

sendo $\mathcal{F}$ o fluxo numérico escolhido.

Este método é condicionalmente estável e suas restrições de CFL podem causar instabilidade em problemas mais robustos (BUTCHER, 2008), com descontinuidades e, principalmente, se ocorrerem oscilações no método espacial.

4.5.4.2 Strong Stability Preserving (SSP) Runge-Kutta de 3ª ordem

Enquanto o método *TVD* é utilizado para a malha espacial, há os métodos de *Strong-Stability-Preserving* (SSP) - que são considerados *TVD* temporal - e têm como finalidade aumentar a precisão dos resultados na malha temporal. Este método utiliza o Euler de primeira ordem - com uma restrição de CFL similar a do Euler - e adiciona combinações convexas do método de Euler como passos (GOTTLIEB; SHU; TADMOR, 2001), garantido que não ocorram oscilações. Ou seja, ele certifica-se que não ocorrerá um aumento não físico nos resultados obtidos ao longo da integração no tempo, que é a definição da propriedade *TVD* (4.32).

Se o método de Euler for fortemente estável, ou seja

$$\|u^n + \Delta t L(u)\| \leq \|u^n\| \quad (4.48)$$

então o método SSP-RK garantirá estabilidade dado o passo de tempo $\Delta t \leq c \Delta t_{EE}$.

A construção dos passos do método para casos lineares segue

$$\begin{aligned} u^{(0)} &= u^n \\ u^{(i)} &= \sum_{k=0}^{i-1} \left(\alpha_{i,k} u^{(k)} + \Delta t \beta_{i,k} L(u^{(k)}) \right), \quad \alpha_{i,k} \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \\ u^{n+1} &= u^{(m)} \end{aligned}$$

sabendo que $\sum_i \alpha_i = 1$.

Lema 4.5.1. *Se o Euler explícito for fortemente estável (4.48), então o método de Runge-Kutta com $\beta_{i,k} \geq 0$ é SSP, $\|u^{n+1}\| \leq \|u^n\|$, dado que a restrição seja cumprida:*

$$\Delta t \leq c \Delta t_{EE}, \quad c = \min_{i,k} \frac{\alpha_{i,k}}{\beta_{i,k}}$$

Se o método for não linear, o Runge-Kutta de 3ª ordem será

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t \mathbb{F}(u^n) \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4} u^n + \frac{1}{4} u^{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t \mathbb{F}(u^{(1)}) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3} u^n + \frac{2}{3} u^{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t \mathbb{F}(u^{(2)}) \end{aligned} \tag{4.49}$$

As condições do Lema 4.5.1 ainda são satisfeitas.

5.1 Verificação dos métodos

No presente capítulo analisaremos os resultados dos diferentes métodos numéricos anteriormente exposto aplicados ao fluxo de Burgers com as condições iniciais continua (5.1) e com uma descontinuidade (5.2), e o fluxo de Buckley-Leverett com a condição inicial (5.3). Pretendemos, com isso, verificar a precisão dos métodos utilizados. Após as simulações com os fluxos há um subcapítulo para a análise de ordem dos esquemas utilizados e, por fim, um subcapítulo para o fenômeno da sedimentação.

Os códigos principais foram feitos na linguagem Fortran 90 e os gráficos foram obtidos usando GNUPLOT.

Apesar de sabermos que cada método espacial e temporal tem sua condição de estabilidade específica, alguns tendo um valor mais restrito do que outros, o propósito deste trabalho é analisar todos os métodos dado o mesmo valor de volume e CFL. Essa motivação se dá ao fato das aplicações para os quais este estudo é pretendido, as restrições de estabilidade não é o foco, mas sim a velocidade e precisão dos resultados obtidos dado o valor de volumes e passo de tempo.

Sobre o passo de tempo (Δt) utilizado nas simulações, ele foi definido da seguinte forma:

$$\Delta t = \text{CFL} * \frac{\Delta x}{\max_i |f'(u_i)|}$$

e foi utilizado para todos os gráficos de análise, não foram utilizados apenas nos gráficos de erro de truncamento, no qual os valores dos passos escolhidos foram singularmente estudados para cada método espacial e temporal.

5.1.1 Fluxo de Burgers

A utilização do fluxo de Burgers tem como principal finalidade neste trabalho a validação de ordem dos métodos numéricos utilizados. Por ser um fluxo convexo ($f''(u) = 1 > 0$)

não teremos a ocorrência de duas descontinuidade seguidas, o que o torna um fluxo mais interessante e fácil para se estudar a ordem de truncamento. Esta preocupação vem do fato de que alguns métodos sofrem com perda de ordem em regiões de salto para manter a estabilidade.

Para este fluxo utilizaremos duas condições iniciais seguidas por suas respectivas condições de contorno de fluxo prescrito

$$u_0 = \sin(\pi(x + 1)), \quad (5.1)$$

$$f(u(x_L, t)) = 0 \quad \text{com} \quad 0 \leq t \leq t_f$$

$$f(u(x_R, t)) = 0 \quad \text{com} \quad 0 \leq t \leq t_f$$

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x > 0 \end{cases}, \quad (5.2)$$

$$f(u(x_L, t)) = 1 \quad \text{com} \quad 0 \leq t \leq t_f$$

$$f(u(x_R, t)) = 0 \quad \text{com} \quad 0 \leq t \leq t_f$$

Ao longo dos resultados será apresentado dois gráficos para cada condição e tempo final escolhido; um será o gráfico completo e outro um zoom na região de descontinuidade para melhor visualização da precisão de cada método. Ao final do capítulo serão expostos tabelas de erro e as curvas de ordem para cada um dos métodos, tanto na malha espacial quanto temporal.

Iniciaremos com a condição inicial (CI) (5.1). Para todas as simulações o valor de CFL escolhido foi 0.9, Nv de 320 e o método utilizado para a malha temporal, quando necessário, foi Euler explícito. Esta condição inicial, quando $t = 0$ ou próximo de 0, não possui salto, porém, após alguns segundos, a descontinuidade ocorre em $x = 0$. Para a condição (5.1) foram feitos dois gráficos, $t_f = 0.4$ e $t_f = 0.8$.

Apesar da descontinuidade, os métodos espaciais de menor ordem, especificamente Lax-Wendroff e Lax-Friedrichs, não oscilam dado o valor do CFL ser próximo a 1. Ao escolher um valor pequeno para o número de Courant, influenciando no Δt , ambos os métodos terão oscilações enquanto o TVD, por exemplo, se manterá estável. No exemplo utilizando o fluxo de Buckley-Leverett veremos melhor a influência do CFL em cada um dos métodos.

O TVD com limitador Superbee se apresenta mais distante do valor analítico do que os outros métodos. Dado que TVD é um método conhecido por ser de 2ª ordem em locais contínuos e regredir pra ordem 1 perto de descontinuidades, esta pode ser a principal motivação da diferença.

Na Figura 5.3 o tempo final foi de 8 segundos, causando um choque mais íngreme. Não há ocorrência de oscilação perto da descontinuidade e a discretização com TVD ainda mantém maior distância perto do choque.

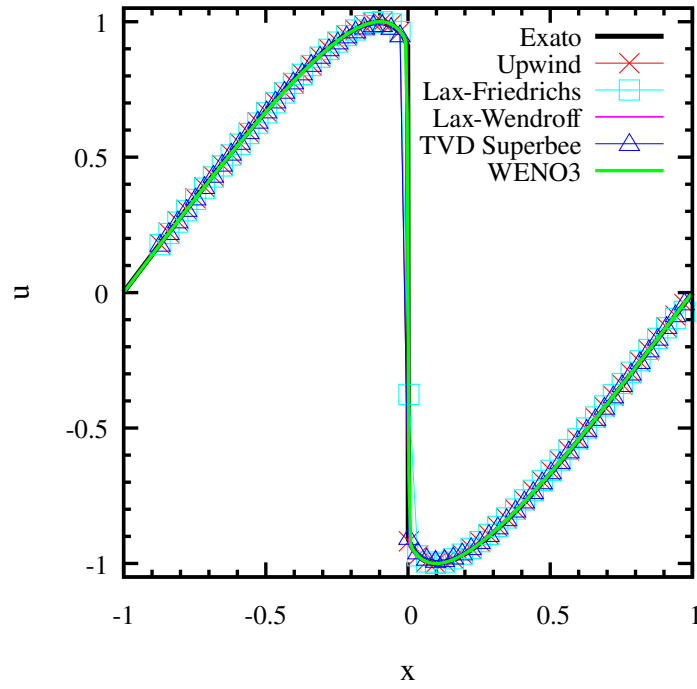


Figura 5.1: Condição inicial contínua com $t_f = 0.4$. Fonte: Elaborado pela autora.

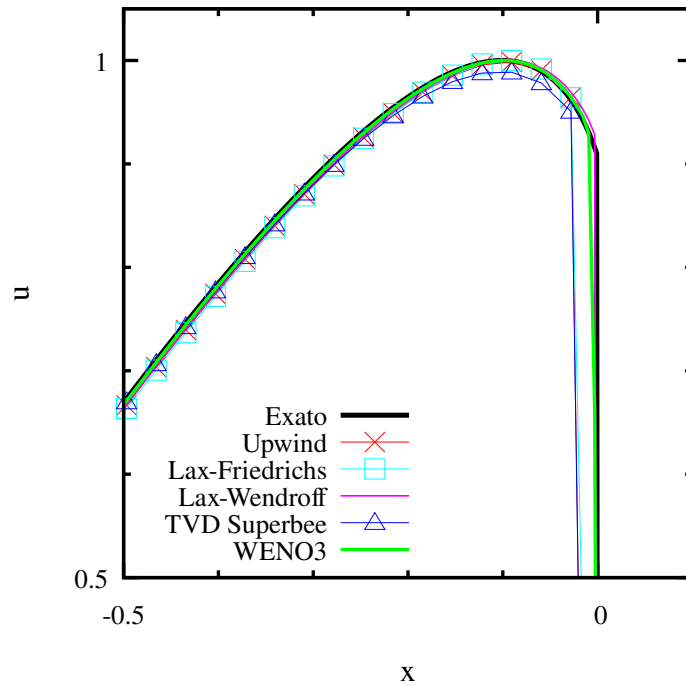


Figura 5.2: Ampliação da descontinuidade de 5.7. Fonte: Elaborado pela autora.

Seguimos para a condição inicial (5.2). Nesta há um choque para qualquer tempo $t \geq 0$. Nas Figuras 5.5 e 5.6 podemos ver uma pequena dispersão do método de Lax-Wendroff.

Os métodos de Lax Friedrichs e Lax Wendroff - segunda ordem no espaço - sofrem com uma instabilidade perto da descontinuidade por terem um coeficiente de dispersão maior

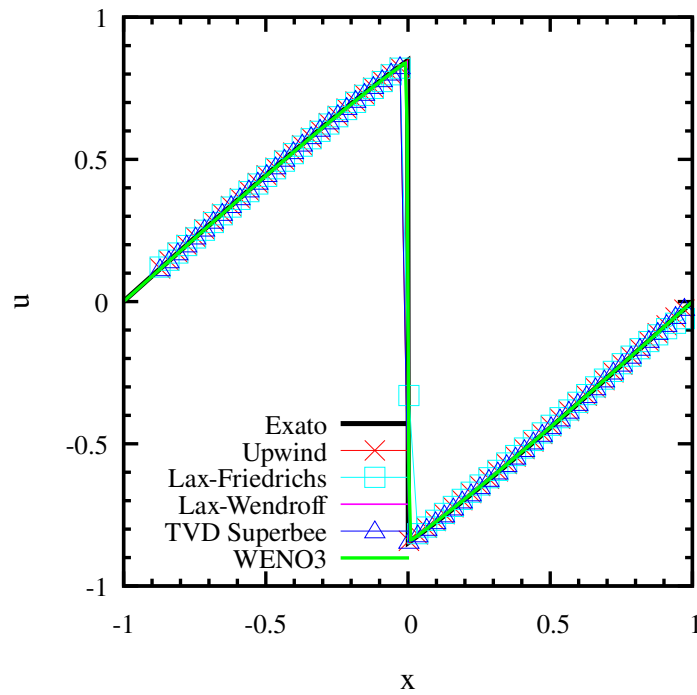


Figura 5.3: Condição inicial contínua com $t_f = 0.8$. Fonte: Elaborado pela autora.

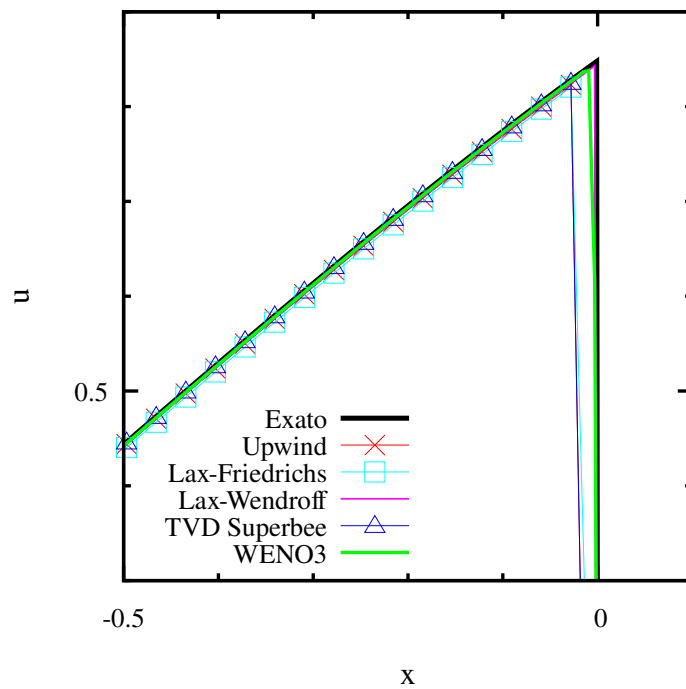


Figura 5.4: Ampliação da descontinuidade de 5.3. Fonte: Elaborado pela autora.

do que o método de Upwind, de primeira ordem, por exemplo, o que causa as oscilações em locais de choque. Apesar do valor de LF se apresenta um pouco abaixo dos outros antes da descontinuidade e o TVD um pouco mais a frente depois da descontinuidade, os resultados se mantiveram estáveis.

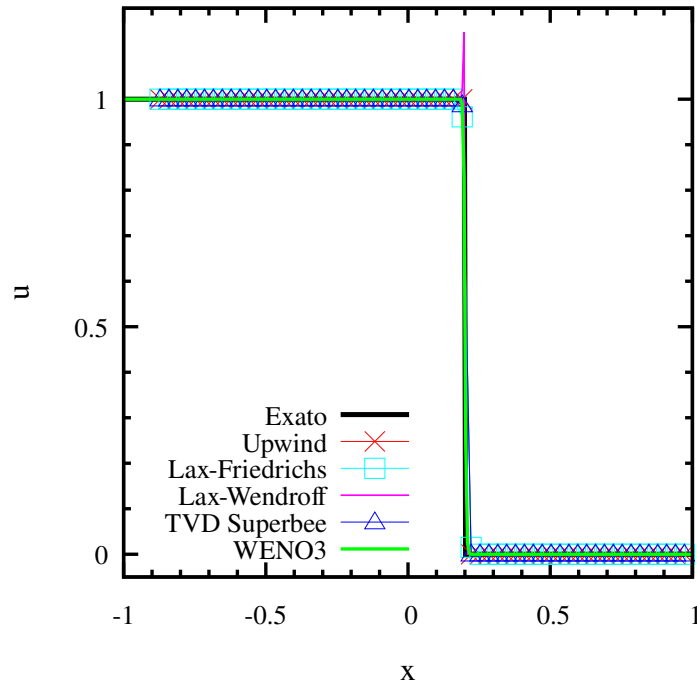


Figura 5.5: Condição inicial de Riemann com $t_f = 0.4$. Fonte: Elaborado pela autora.

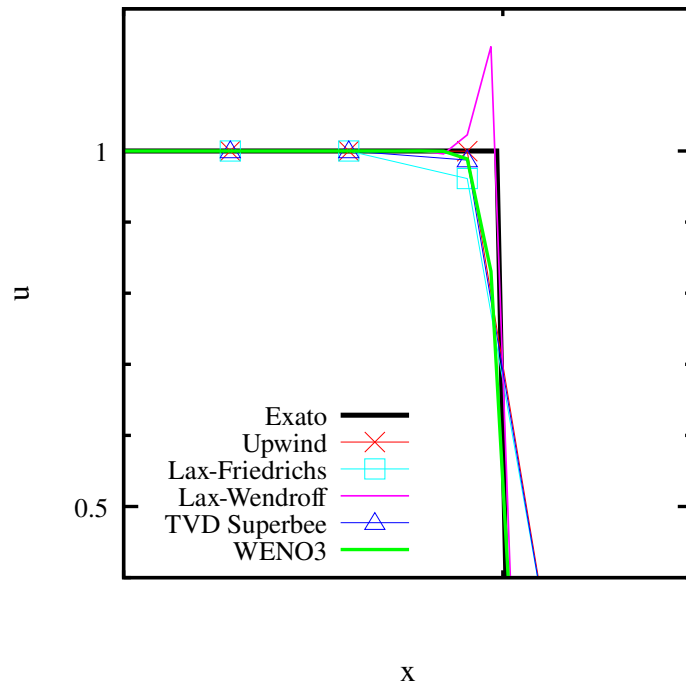


Figura 5.6: Ampliação da região de choque 5.5. Fonte: Elaborado pela autora.

Para o fluxo de Burgers os métodos espaciais Upwind e WENO foram os que obtiveram resultados mais precisos, seguidos por LF e TVD e, por último, LW, sofrendo com erro dispersivo. Em continuação, como dito anteriormente, trabalharemos com um fluxo mais complexo, o de Buckley-Leverett.

5.1.2 Buckley-Leverett

O fluxo de Buckley-Leverett representa o processo de injeção de um fluido para a extração de outro em um meio poroso, como o processo de extração de petróleo inserindo água. Este fluxo tem como papel principal neste trabalho apresentar o comportamento dos métodos quando há a ocorrência de choque e rarefação. Ao introduzir um fluxo físico não-convexo pretendemos analisar e decidir quais métodos são ou não apropriados para serem utilizados no problema principal, que é o fluxo da sedimentação.

O fluxo é descrito como

$$F(u) = \frac{8u(-1+u)}{(1+u(-2+5u))^2}. \quad (5.3)$$

onde u , no caso físico, representa a saturação do meio poroso pela fase molhante.

A condição inicial utilizada para este exemplo foi a seguinte:

$$u_0 = \begin{cases} 1, & \text{se } -0.5 \leq x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x < -0.5 \text{ e } x > 0 \end{cases}. \quad (5.4)$$

E as condições de contorno de fluxo prescrito

$$f(u(x_L, t)) = 0 \quad \text{com } 0 \leq t \leq t_f$$

$$f(u(x_R, t)) = 0 \quad \text{com } 0 \leq t \leq t_f$$

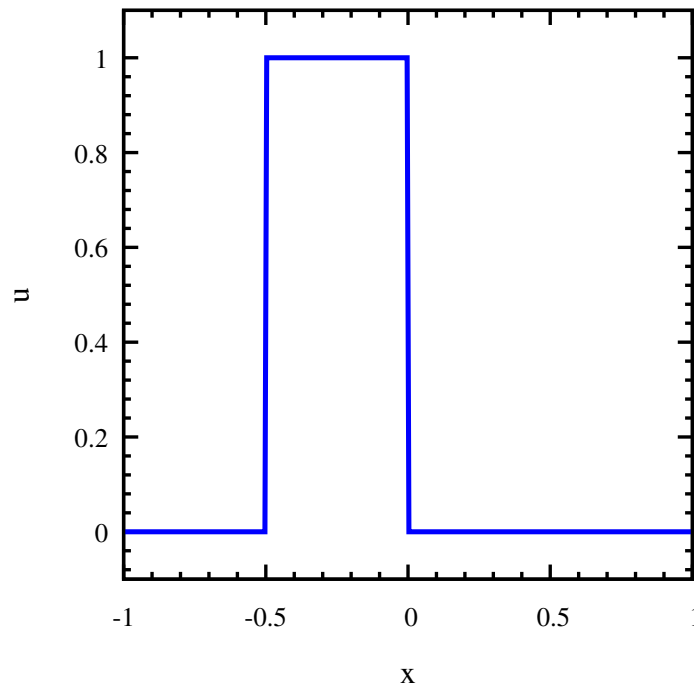


Figura 5.7: Condição inicial de Buckley-Leverett. Fonte: Elaborado pela autora.

Para este fluxo foi utilizado três valores diferentes de CFL: 0.8, 0.6 e 0.4, e para cada um deles foi feito teste com Euler explícito, SSP Runge-Kutta 3ª ordem e o método de Dormand-Prince (DOPRI) no tempo. O WENO manteve-se o SSP-RK3 na malha temporal para todos os gráficos, alterando somente o CFL. Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff, por sofrerem com oscilações, serão mostrados apenas para o CFL de 0.6 (Figura 5.11) pois, independente do valor do número de Courant, as oscilações não amenizaram significativamente. Para todas as simulações o tempo final $t_f = 4$ segundos.

A motivação da aparência repentina do DOPRI na malha temporal na seção de resultados é proveniente da utilização deste mesmo método nos códigos do Laboratório de Escoamento de Fluidos (LEF) da UFRRJ em parceria com a PETROBRAS. Logo, por questão de comparação, aplicaremos os métodos que são atualmente utilizados nos projetos com a PETROBRAS para o estudo da sedimentação em poços de petróleo. Na seção do fluxo de sedimentação esta comparação será melhor abordada.

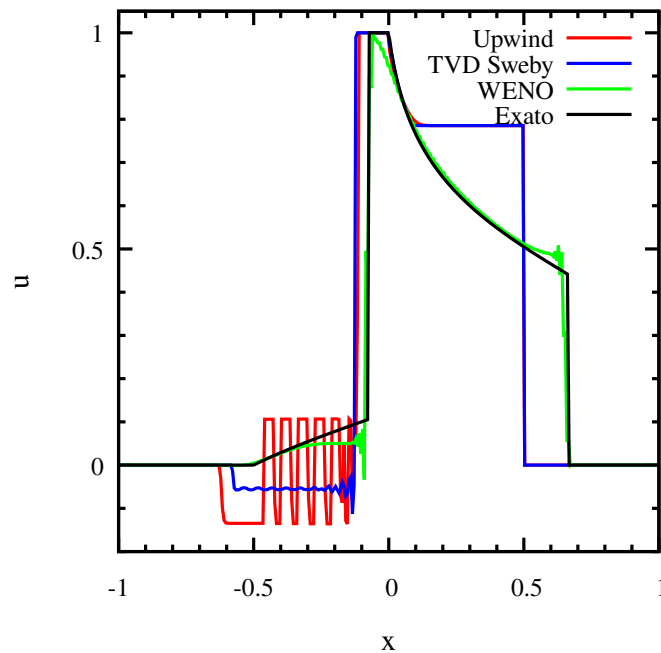


Figura 5.8: CFL 0.8 e Euler explícito no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

Na Figura 5.8 foi utilizado o método temporal de primeira ordem Euler explícito com um CFL de 0.8. Apesar da utilização de métodos de alta resolução no espaço há a ocorrência de oscilações, principalmente nas zonas de rarefação. Como Euler é um método simples, ele não restringe as variações indesejadas, ainda mais com um passo de tempo grande, dado o valor do CFL.

Ao utilizar o método SSP-RK no tempo (Figura 5.9) temos que a oscilação ocorre na mudança da rarefação para o choque no intervalo $0.6 < x < 0.7$, tanto para o TVD quanto o upwind enquanto o WENO sofre com uma oscilação mais controlada na mesma região e no intervalo $-0.2 < x < 0$, onde também ocorre uma transição rarefação-choque.

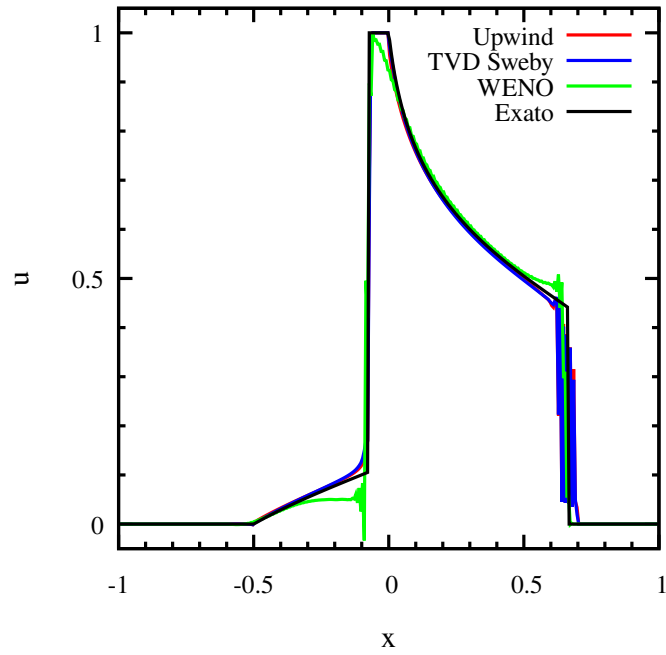


Figura 5.9: CFL 0.8 e SSP-RK3 no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

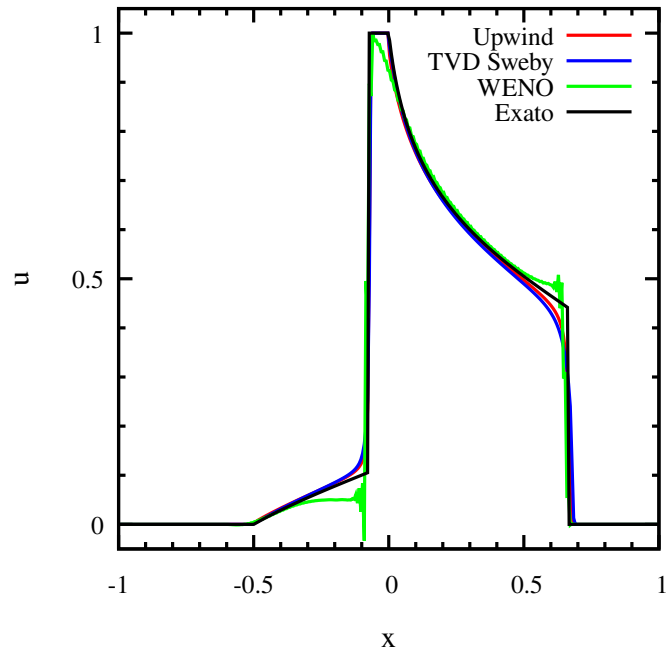


Figura 5.10: CFL 0.8 e DOPRI no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

A última discretização temporal com CFL de 0.8 é o DOPRI (Figura 5.10). O método TVD ainda sofre com oscilação entre 0.6 e 0.7, porém mais reduzida enquanto o upwind. Como o método WENO foi mantido o RK-SSP na malha temporal, não tivemos mudança quanto ao método espacial.

Na Figura 5.11 temos o gráfico utilizando Euler explícito com valor de CFL de 0.6. Em comparação ao gráfico da figura 5.8 a variação dos métodos TVD e upwind antes do salto

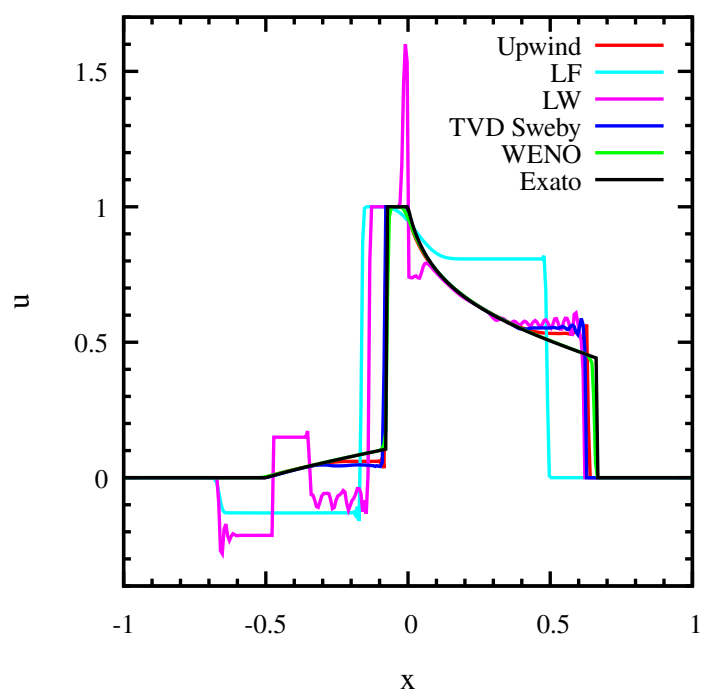


Figura 5.11: CFL 0.6 e Euler explícito no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

em $x = -0.1$ manteve-se abaixo de 0.1 e estável e na região de rarefação após $x = 0$ ambos os métodos mantiveram resultados bons até $x = 0.3$.

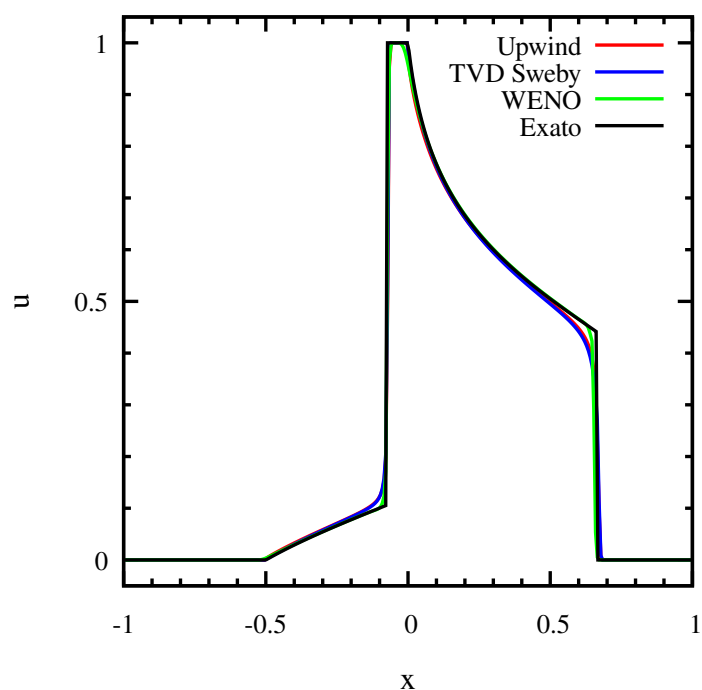


Figura 5.12: CFL 0.6 e SSP-RK3 no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

Fazendo a discretização temporal usando o SSP-RK com CFL de 0.6 nem um dos resultados obtidos sofreram com oscilações, como é possível observar na Figura 5.12. O WENO foi

mais preciso na região de rarefação e foi menos dispersivo antes do salto para $u = 1$ e antes de voltar para $u = 0$. Apesar disso, o método TVD foi mais preciso no intervalo em que $u = 1$.

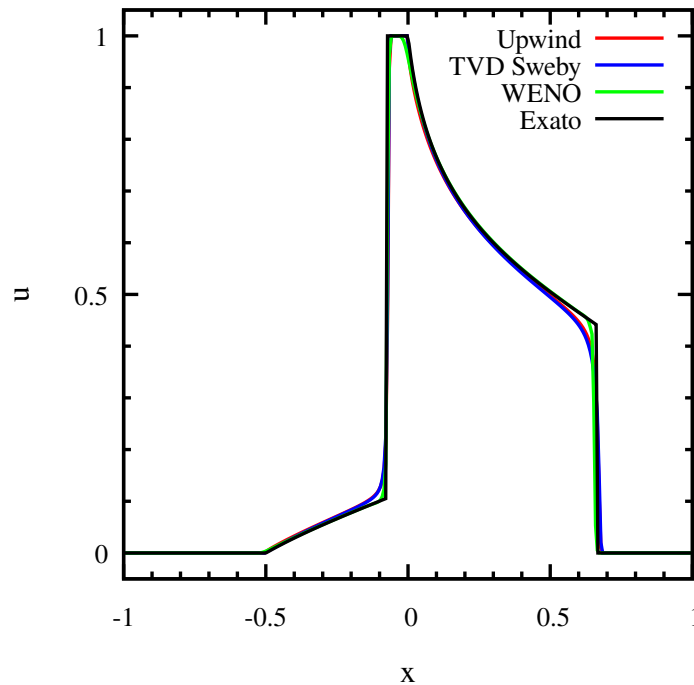


Figura 5.13: CFL 0.6 e DOPRI no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

Na Figura 5.13 aplicamos o DOPRI com CFL de 0.6 e não há diferenças aparentes quando comparado com o gráfico utilizando o SSP-RK com mesmo valor do número de Courant.

Para o CFL de 0.4 será mostrado apenas os gráficos utilizando Euler e SSP-RK no tempo para verificarmos se há a ocorrência de oscilações pois, como visto para o CFL anterior, os resultados obtidos com o SSP-RK e DOPRI são semelhantes.

Os gráficos da Figura 5.15 e Figura 5.14 apresentam suas diferenças mais significativas na região onde há a perda dissipativa de informação. Enquanto que com o Euler na malha temporal a queda de u ocorre antes do analítico em $x > 0.6$, com o SSP-RK a curva fica mais aparente na mudança do valor de u .

De acordo com os resultados encontrados por (JIANG; SHU, 1996) ao utilizar o método WENO com fluxo de Buckley-Leverett, perto de descontinuidade é esperado que o método tenha uma redução de ordem, chegando a se equiparar com o método ENO. Por essa razão, é possível ver na Figura 5.14 que o método não captura completamente a precisão na região choque.

Ainda na Figura 5.14 temos que o método TVD mantém uma boa precisão na região de $-0.1 < x < 0$, onde ocorre o salto (Figura 5.16a), enquanto o WENO mantém melhor precisão nas zonas de rarefação (Figura 5.16a). O Upwind, como um método de primeira ordem, sofreu com perdas dissipativas perto das descontinuidades e os métodos de Lax-Friedrichs e Lax-

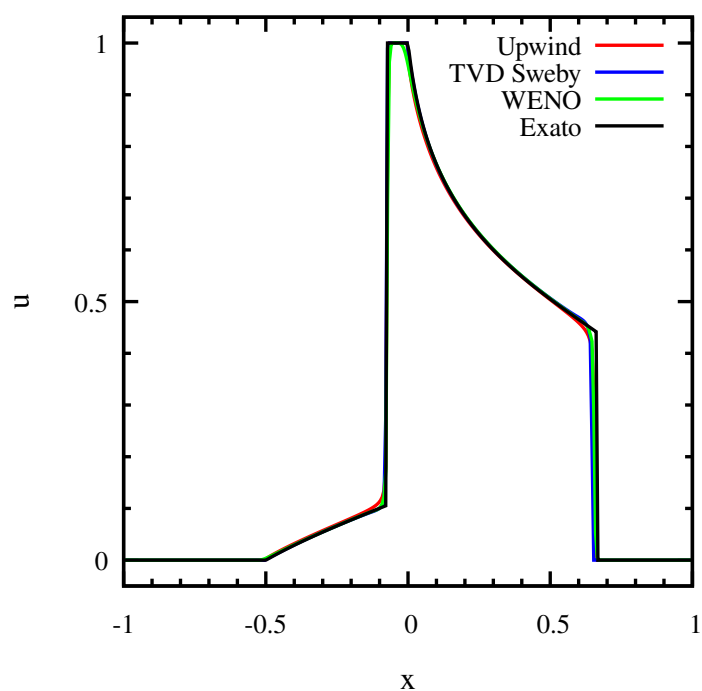


Figura 5.14: CFL 0.4 e Euler explícito no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

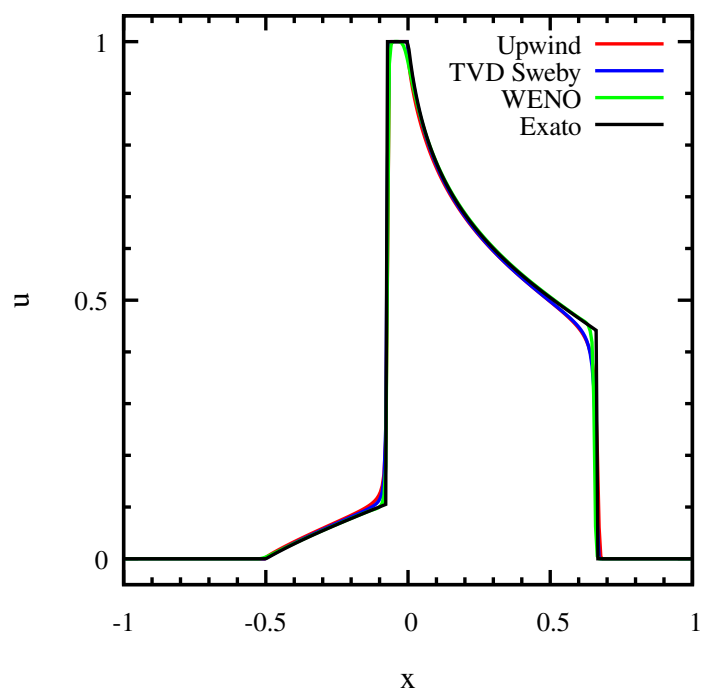
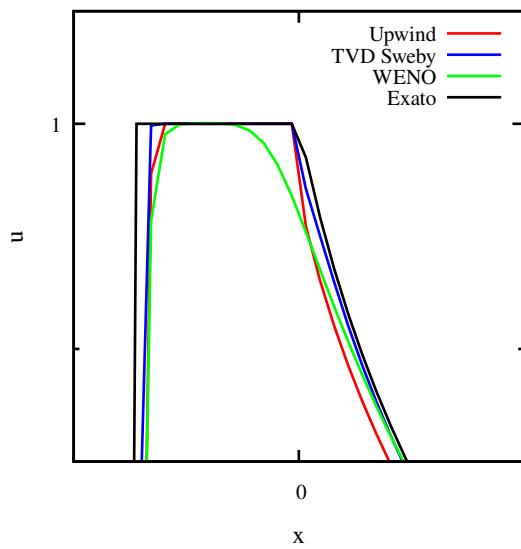


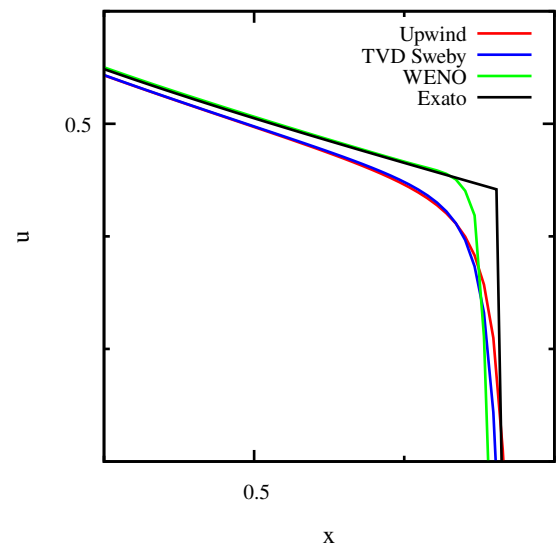
Figura 5.15: CFL 0.4 e SSP-RK no tempo. Fonte: Elaborado pela autora.

Wendroff, por sofrerem com alto erro dispersivo, apesar da mudança do valor de CFL, ainda haviam oscilações nas mesmas regiões.

Dado que o WENO é um método construído de forma a diminuir a influência de grandes variações nos *substencils* calculados (enquanto o ENO os descarta) e o TVD é uma propriedade



(a) Ampliação na região com $u=1$.



(b) Ampliação na região de rarefação.

Figura 5.16: Ampliação na região de descontinuidade da Figura 5.15. Fonte: Elaborado pela autora.

que garante o controle dessas variações, é esperado que o TVD capture melhor a região de salto enquanto o WENO se mostre mais preciso em outras regiões.

5.1.3 Análise de erro

Para confirmarmos que os métodos estão de acordo com a literatura quanto ao quesito de ordem, foram feitos estudos de erro numérico com o refinamento da malha com valores de 80 volumes, 160 volumes, 320 volumes, 640 volumes e 1280 volumes para os métodos Upwind, Lax-Friedrich, Lax-Wendroff e TVD, enquanto que para o WENO foram construídas malhas com 20 volumes, 40 volumes, 80 volumes, 160 volumes e 320 volumes para ter embasamento dado resultados de outros trabalhos (BAEZA et al., 2020).

Iniciamos as análises na malha espacial, fixando valores pequenos para o CFL e o t_f de forma que o termo temporal não contamine os dados, e dobramos os volumes a cada malha utilizada. Para este estudo foi escolhido o fluxo de Burgers com condição inicial seno (5.1) para contornarmos o problema de queda de ordem em descontinuidade. Além disso foi aplicado o Runge-Kutta SSP de 3ª ordem na malha temporal para todos os dados.

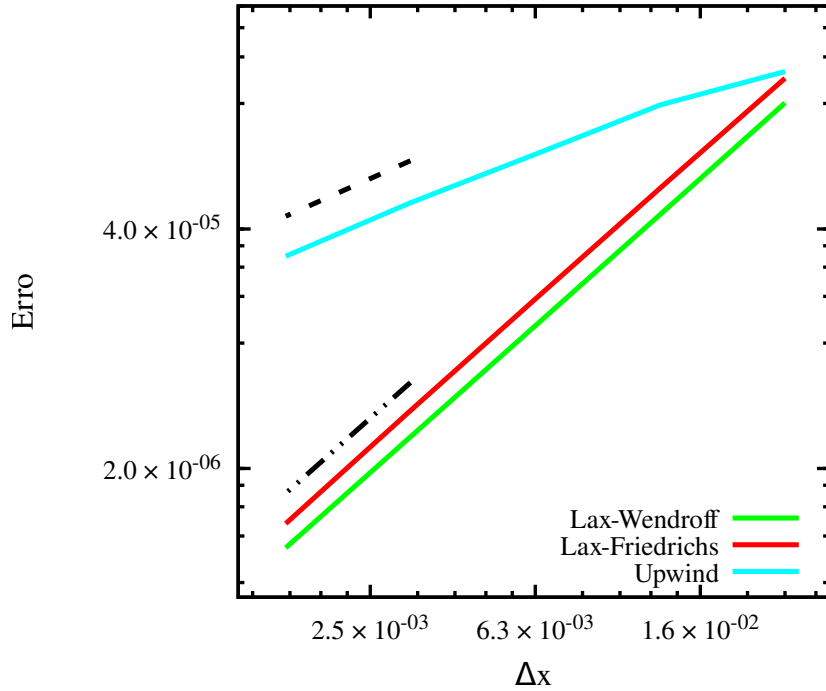


Figura 5.17: Ordem dos métodos de baixa e alta ordem. A linha tracejada representa a reta suporte de ordem 1 e a linha pontilhada de ordem 2. Fonte: Elaborado pela autora.

As curvas nas Figuras 5.17, 5.18 e 5.19 foram obtidas calculando o erro L^2 (Equação (5.5)) malha a malha de cada método. Nestes gráficos temos que a inclinação da reta representa a ordem do método analisado.

$$L^2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{Nv} (u(i)_- - u(i)_+)^2} \quad (5.5)$$

sendo Nv a quantidade de pontos da malha, u_- e u_+ a malha menos e mais refinada, respectivamente.

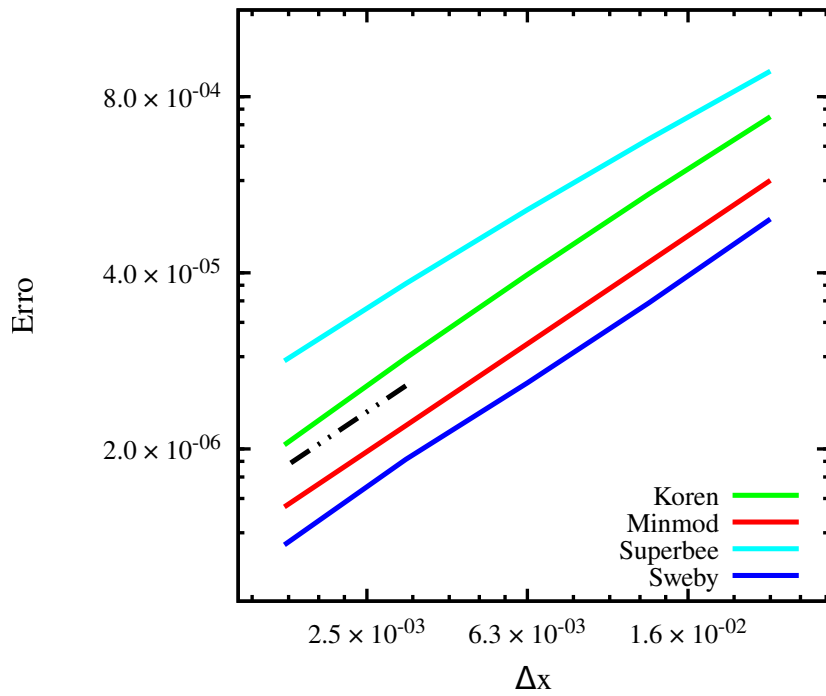


Figura 5.18: Ordem dos limitadores TVD. A linha pontilhada representa a reta suporte de ordem 2. Fonte: Elaborado pela autora.

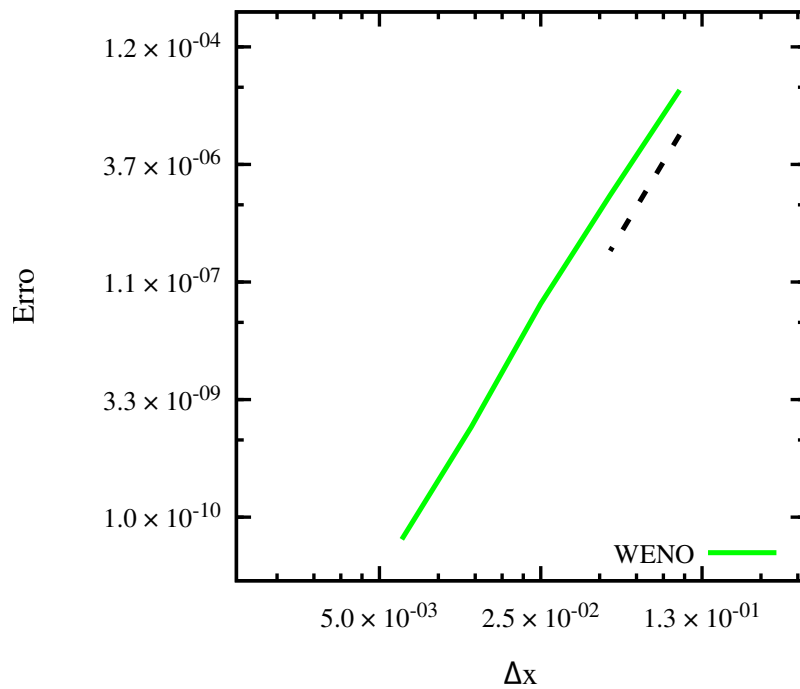


Figura 5.19: Ordem WENO com $k=3$. A linha pontilhada representa a reta suporte de ordem 5. Fonte: Elaborado pela autora.

De acordo com as curvas, o método de Upwind segue a ordem 1 esperada, Lax-Friedrich, Lax-Wendroff e TVD (independente do limitador utilizado), demonstram comportamento de segunda ordem e o método WENO de quinta ordem. Na Figura 5.18, apesar dos valores serem

de pequena magnitude, temos que alguns limitadores são mais precisos na região escolhida do que outros, sendo o sweby o melhor candidato.

Já para o estudo de ordem das discretizações temporais, temos quatro métodos: Explicit Euler (EE), Lax-Friedrich (LF), Lax-Wendroff (LW) e Strong Stability Preserving Runge Kutta (SSP-RK) de 3ª ordem.

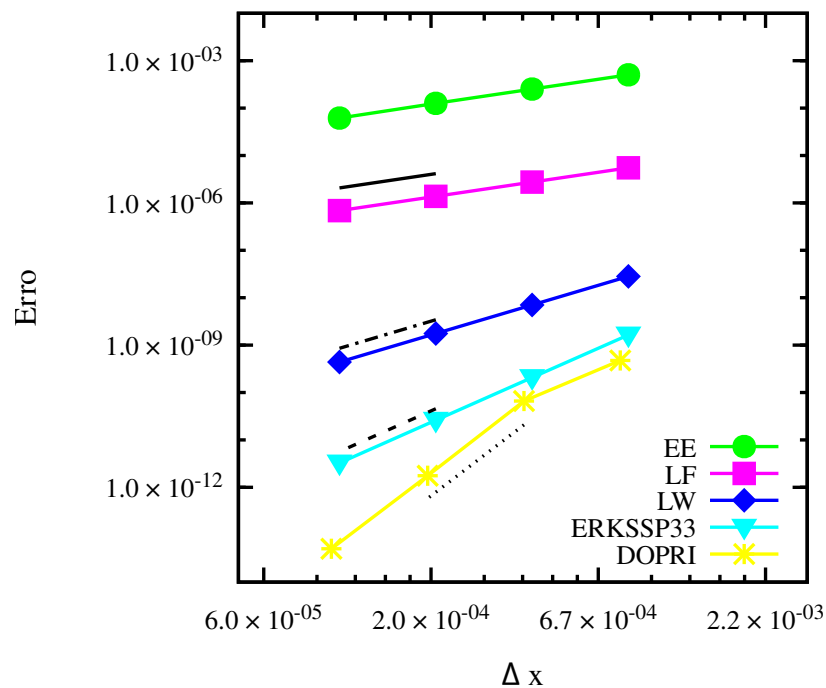


Figura 5.20: Ordem dos métodos temporais. As linhas pretas representam as retas suporte: a contínua de ordem 1, a traço-ponto de ordem 2, a tracejada de ordem 3 e a pontilhada de ordem 5. Fonte: Elaborado pela autora.

De forma semelhante a como foi feito com a malha espacial, foi escolhido um valor alto de volumes para que a discretização espacial não contamine o resultado e então foram feitas mudanças no valor do passo de tempo dado, dividindo por dois, até alcançar quantidade suficiente de malhas temporais distintas para o cálculo do erro L^2 .

Os métodos Euler explícito e Lax-Friedrichs apresentaram resultados de primeira ordem, Lax-Wendroff segunda ordem, SSP-RK de terceira ordem e DOPRI de quinta ordem. Na Figura 5.20 também é possível observar que a diferença do valor dos erros obtidos com Euler e DOPRI foi de 10^9 .

Temos, então, que o nosso método espacial de maior ordem é o WENO e o temporal é o DOPRI. Apesar de alcançar maior ordem, o Dormand Prince não tem a propriedade SSP (ou TVD), diferentemente do Runge-Kutta, o que pode influenciar na escolha do melhor método temporal.

5.1.4 Fluxo da Sedimentação

Nesta seção apresentaremos uma discussão sobre os diferentes esquemas numéricos temporais e espaciais aplicados ao fenômeno de sedimentação em fluidos não-newtonianos. Para avaliação numérica serão usados três refinamentos de malha uniforme com 400, 800 e 1600 volume e dois valores de CFL, um marginalmente estável e outro estável. As simulações foram empregadas para 5 anos de tempo físico para cada configuração numérica proposta totalizando mais de 70 casos.

Iniciamos com um gráfico entre a comparação do método numérico utilizado no artigo de Rocha et al. (2020), onde o autor faz testes e desenvolve a modelagem matemática e, em adição, compara os resultados numéricos com os valores obtidos em teste, com os métodos numéricos que aqui foram apresentados. Na Figura 5.21 foram escolhidos três alturas diferentes na região de concentração e para cada uma das alturas foram utilizados os valores encontrados por Rocha, utilizando ERKSSP e TVD, ERKSSP e WENO na malha espacial e DOPRI com WENO. A curva pontilhada está na altura 1.3cm, a tracejada em 3.2cm e a preenchida 5.2cm acima do fundo.

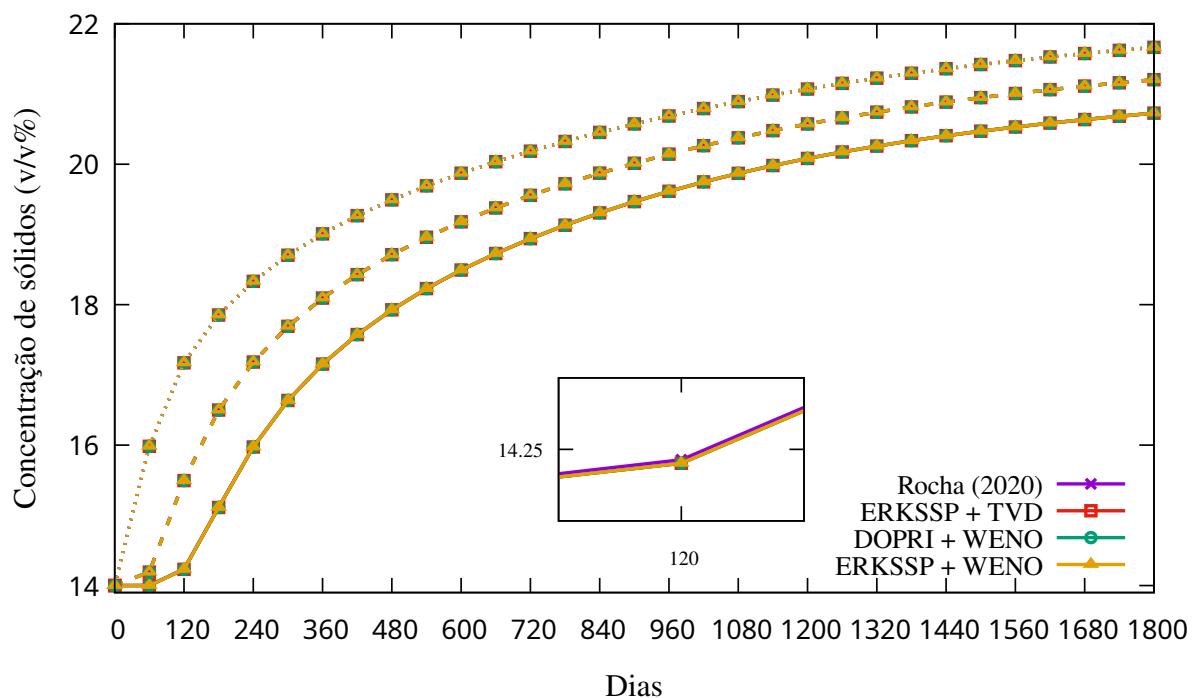


Figura 5.21: Gráfico de comparação entre os dados de Rocha (2020) e os métodos numéricos que serão utilizados. A curva pontilhada está na altura 1.3cm, a tracejada em 3.2cm e a preenchida 5.2cm acima do fundo. Fonte: Elaborado pela autora.

Como é possível observar não há grande diferença entre os dados numéricos apresentados em Rocha et al. (2020), um trabalho que envolveu comparação com resultados experimentais, com os métodos numéricos que aqui serão utilizados, indicando que os resultados obtidos com os métodos apresentados são coerentes com os dados experimentais.

Na Figura 5.22 temos o perfil axial (altura) de concentração de sólidos em diferentes meses. As diferentes cores estão relacionadas com os diferentes tempos de aquisição. A cor azul descreve o perfil em 3 meses, a cor vermelha foi obtida em 10 meses, a verde em 20 meses e a amarela em 40 meses. Esses resultados foram obtidos com o esquema DOPRI para a derivada temporal, o método upwind no termo espacial com 1600 volumes e o CFL de 1×10^{-3} . Todos os métodos geraram resultados com o mesmo comportamento.

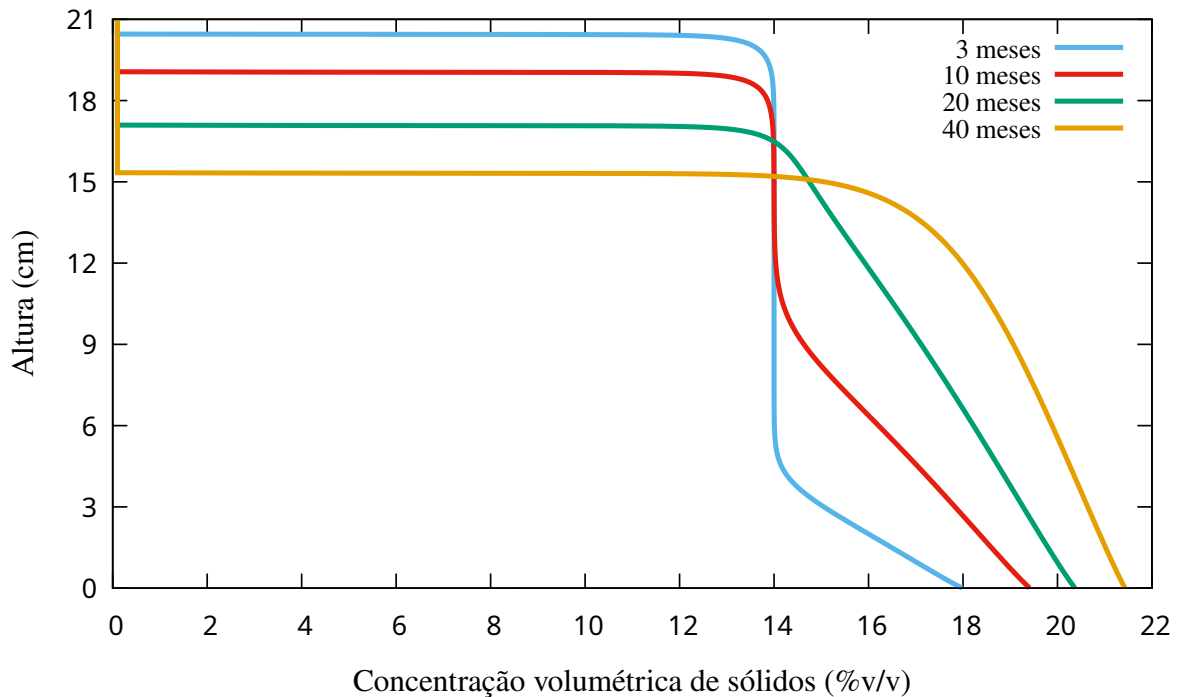


Figura 5.22: Perfil axial da concentração de sólidos em diferentes meses. Fonte: Elaborado pela autora.

Além disso, torna-se evidente observar na Figura 5.22 a evolução das zonas de clarificado, de concentração constante, de concentração variável e concomitando na zona de compressão com o passar do tempo. Temos o crescimento da zona de clarificado a cada curva. Após 20 meses temos a inexistência da zona de concentração constante (14% de sólidos) e o aumento de sólidos na região variável.

Continuando com o gráfico de perfil axial da concentração, na Figura 5.23 foi utilizado as três diferentes discretizações espaciais com 1600 volumes apresentadas em dois meses diferentes, ao 3º mês e 30º mês. As curvas em vermelho representam o esquema upwind, as azuis o TVD com limitador sweby e o roxo a reconstrução WENO. Para este gráfico foi utilizado o DOPRI na discretização temporal com CFL de 5×10^3 .

Para melhor visualização da diferença entre os resultados da Figura 5.23 foi dado um zoom em ambas as curvas na zona de concentração variável. O zoom à esquerda mostra a concentração volumétrica no 3º mês de teste e é inquirir a diferença entre upwind e os outros dois enquanto que no zoom a direita, representando o teste no 30º mês, temos resultados mais próximos.

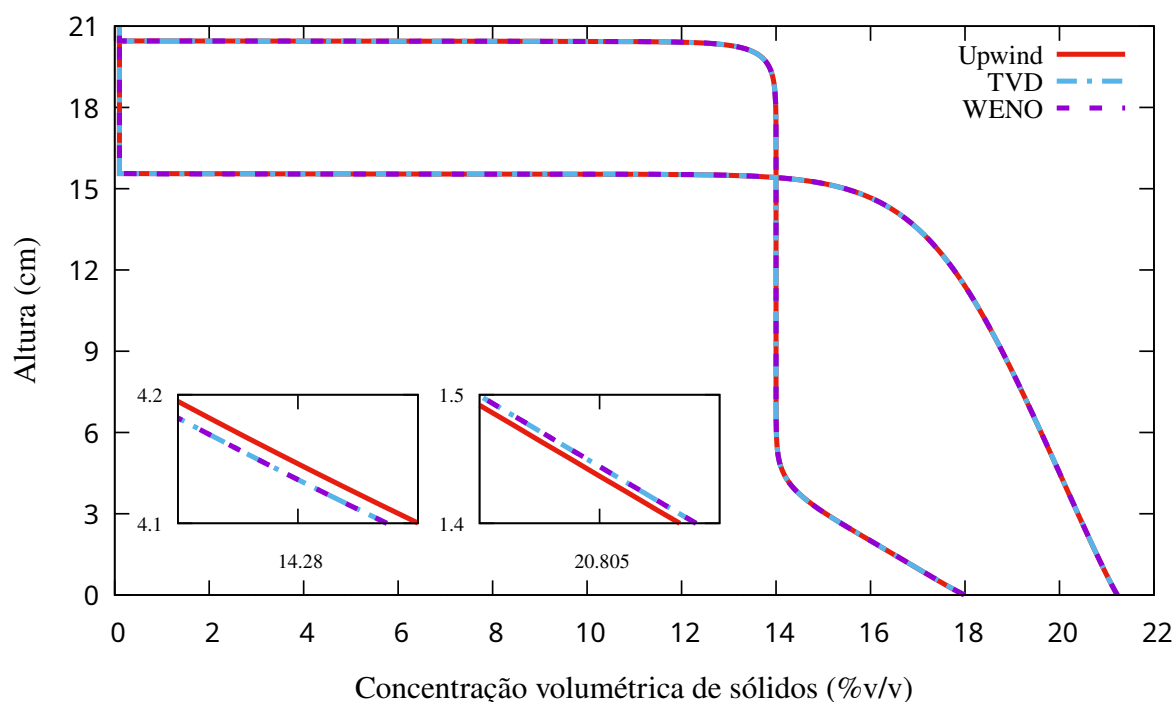


Figura 5.23: Comparação dos esquemas espaciais no perfil axial de sólidos nos períodos de 3 meses e 30 meses. Fonte: Elaborado pela autora.

A Figura 5.24 tem estrutura semelhante a anterior, porém temos o perfil de concentração obtido com diferentes esquemas numéricos. Foi escolhido a concentração após 4 meses utilizado o TVD sweby no espaço e 400 volumes para todas as curvas. Podemos ver que a curva com Euler explícito não fica tão sobreposta às outras duas, apesar do SSP-RK e DOPRI também apresentarem uma pequena diferença entre si. Representando um acúmulo maior de sólidos na região de concentrado.

Em continuação temos a Figura 5.25, que conta com seis curvas, categorizadas por tipo de linha: a contínua com 400 volumes, a pontilhada com 800 volumes e a tracejada com 1600 volumes, e por cores para três tempos diferentes: a roxa em 1 ano, a vermelha em 2 anos e a verde em 4 anos. Todas as curvas nessa figura foram utilizados WENO + DOPRI. Neste gráfico vemos a influência do refinamento de malha nos resultados. A malha menos refinada - linha contínua - obtém um resultado subestimado em comparação ao resultado da malha mais refinada.

Nos próximos dois gráficos temos a maior altura alcançada dado um valor específico de concentração volumétrica de sólidos. Na Figura 5.26 foi escolhido três valores diferentes de concentração, 16%, 18% e 20%, e plotado ao longo de 5 anos a altura do sedimento com essas respectivas concentrações. Como a concentração inicial é de 14%, logo nos primeiros dias temos a criação de uma zona de sedimentação com 16% de sólidos, enquanto a zona com 20% só é gerada após mais de um ano. Após alcançar uma altura máxima a região com 16% de sólidos diminui (aproximadamente após o dia 960), indicando que não é a zona de compressão. A curva de 18% estabiliza em 12cm de altura perto de completar 5 anos e a região com 20%

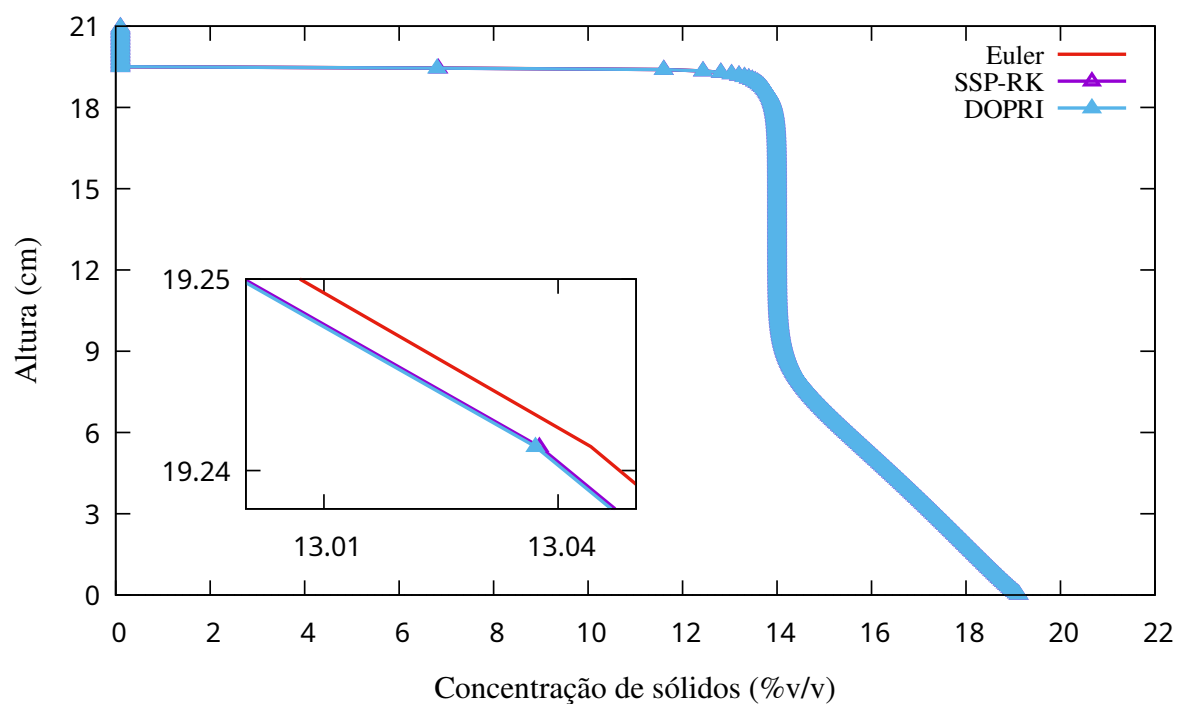


Figura 5.24: Gráfico de concentração de sólidos dado diferentes métodos temporais após 4 meses de simulação. Fonte: Elaborado pela autora.

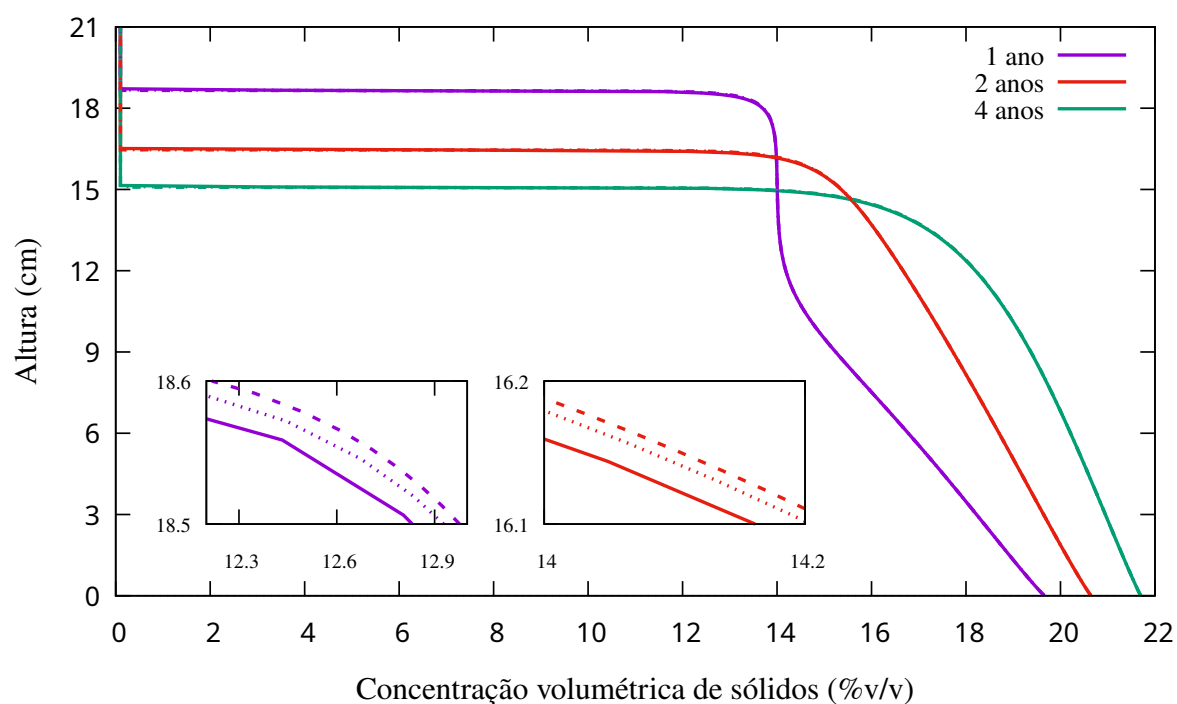


Figura 5.25: Comparação do refinamento de malha no gráfico de concentração de sólidos (de cima para baixo temos a malha de 1600, de 800 e 400 volumes). Fonte: Elaborado pela autora.

continua com um crescimento de inclinação suave.

Apesar da aparente estabilização de uma certa altura e o ainda crescimento de outra, temos que em um tempo indeterminado de sedimentação a única concentração volumétrica

que sobrar  ser  a de concentra  o m xima (zona de compress  o), que n o   nem uma das apresentadas no curvas. Portanto, para um tempo final maior, ter amos que todas as curvas chegariam a altura 0 e apenas a curva com concentra  o m xima de s lidos restaria. Para este gr fico foi utilizado o WENO + SSP-RK com 800 volumes.

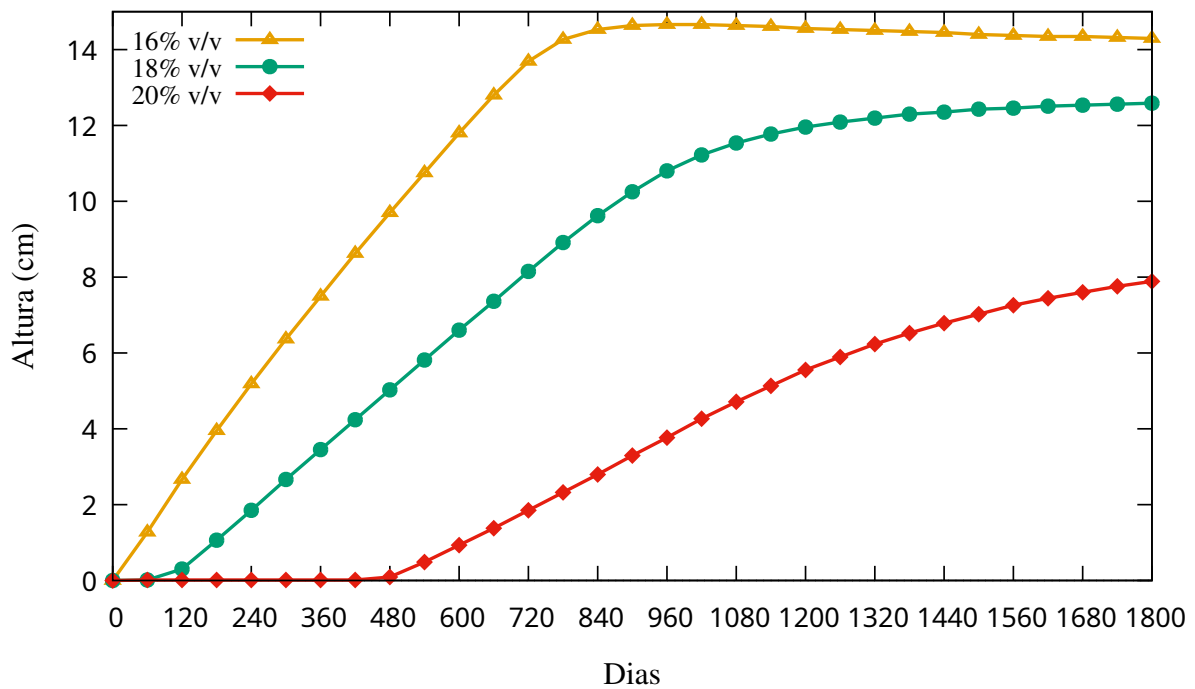


Figura 5.26: Altura do teste para diferentes concentra  es de s lidos. Fonte: Elaborado pela autora.

Na Figura 5.27 escolhemos a concentra  o de 18% para compararmos os resultados entre os tr s m todos espaciais. Para estas curvas foi utilizado o SSP-RK na malha temporal e 400 volumes. Em algumas regi  es do gr fico os resultados do WENO alcan ou um valor diferente dos outros dois m todos, que obtiveram resultados semelhantes.

Continuando a compara  o entre os m todos num ricos aqui apresentados, continuaremos a an lise utilizando as curvas nas zonas de compress  o. Na Figura 5.28 temos tr s curvas com diferentes cores e para cada cor temos tr s tipos de linhas diferentes. As cores representam os m todos num ricos espaciais, sendo o vermelho upwind, o roxo TVD com limitador sweby e azul o esquema WENO. O tipo de reta representa a altura na regi  o de compress  o escolhida, no qual a linha tracejada representa 3.12cm acima do fundo, a linha pontilhada 6.27cm acima e a linha continua 9.94cm acima. Para este gr fico foi usado 800 volumes e o DOPRI na malha temporal.

Entre o gr fico da concentra  o de s lidos (Figura 5.27) e da zona de compress  o (Figura 5.28) vemos que a diferen a entre o resultado utilizando o esquema espacial WENO e os outros dois m todos   mais percept vel na Figura 5.27 e que em ambos os m todos upwind e sweby se mant m praticamente id nticos.

Na figura 5.29 fazemos a compara  o entre os m todos temporais na zona de compres-

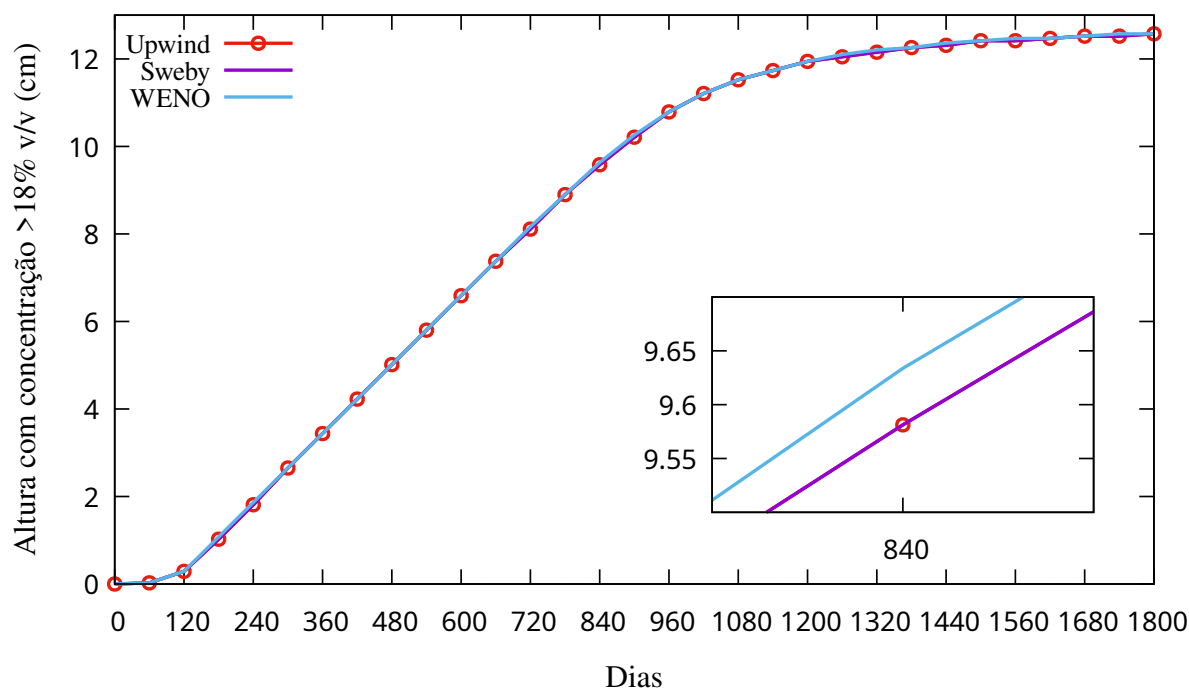


Figura 5.27: Altura do teste com concentração de sólidos maior que 18%. Fonte: Elaborado pela autora.

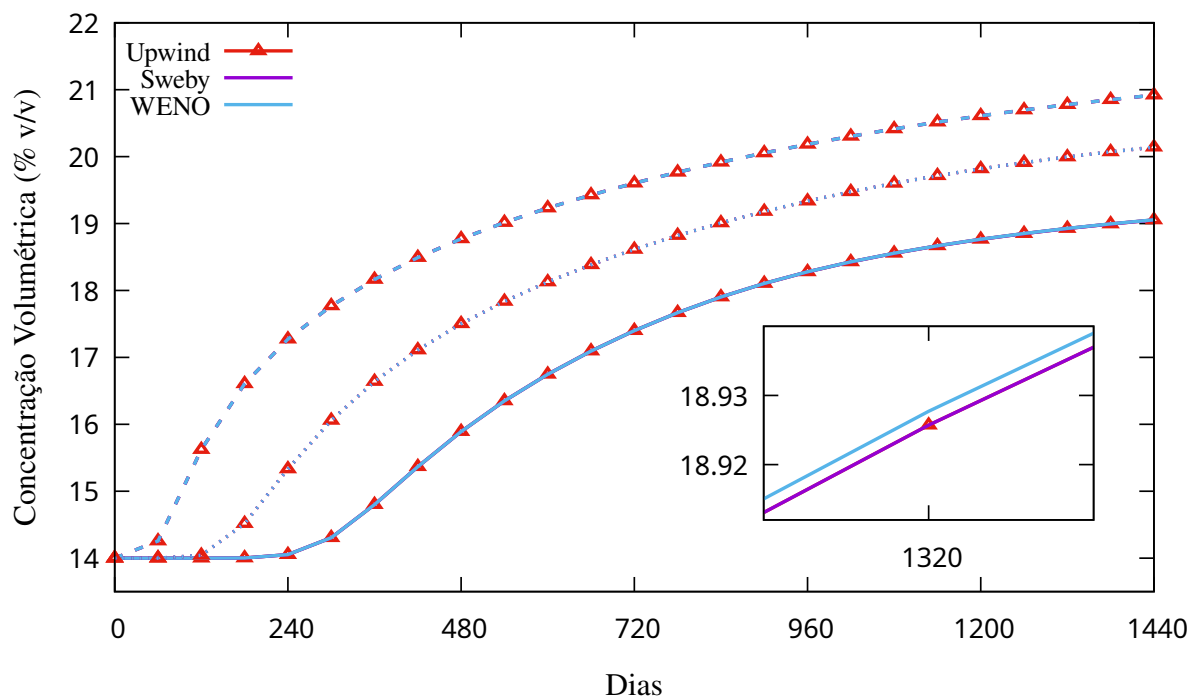


Figura 5.28: Comparação de métodos espaciais na zona de compressão (de cima para baixo temos 3.12cm, 6.27cm e 9.94cm acima do fundo). Fonte: Elaborado pela autora.

são, sendo a linha contínua o método de Euler explícito, a tracejada utilizando o SSP-RK e o DOPRI representado pela reta com marcadores triangulares. Todos foram obtidos usando o TVD com limitador Sweby na malha espacial e 800 volumes. O zoom dado na região da curva

de 0.002 no eixo da concentração de sólidos indicia que a diferença entre os métodos temporais para o estudo da curva de compressão não causa grande influência, apesar de ser possível identificar a curva de Euler e de SSP-RK separadamente, mostrando que não são resultados idênticos. Apesar de ser a metade do volume, na Figura 5.24 temos uma discrepância mais distinta.

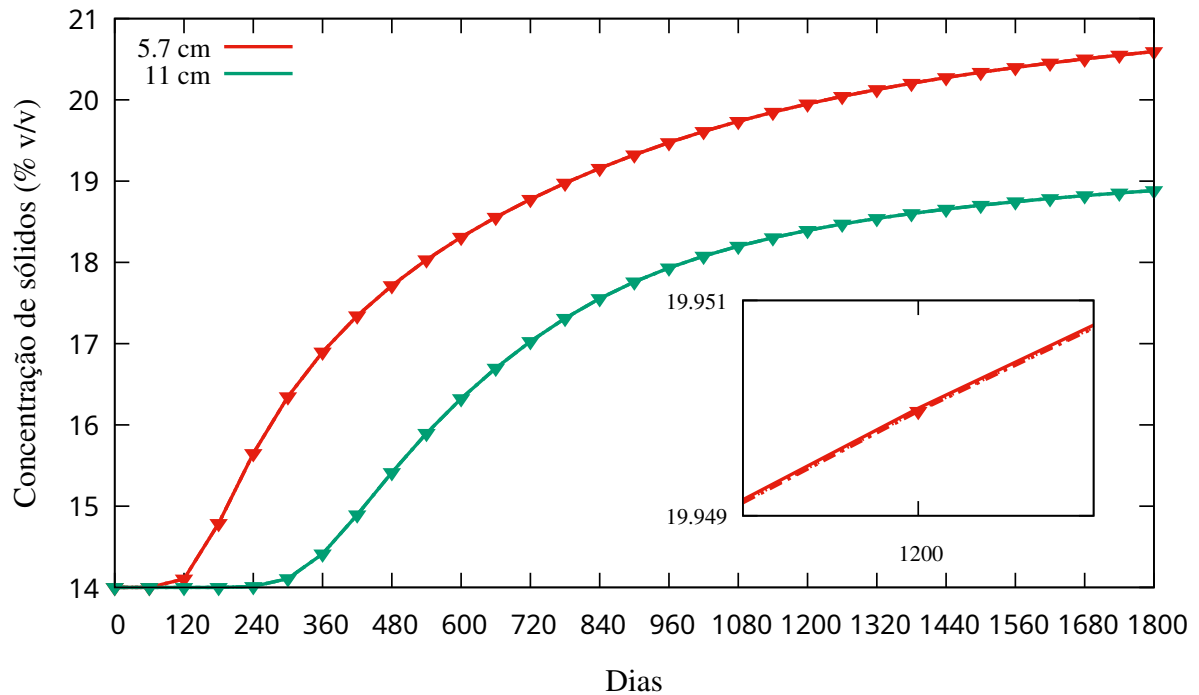


Figura 5.29: Comparação dos esquemas temporais na zona de compressão, sendo a linha contínua o método de Euler explícito, a tracejada utilizando o SSP-RK e o DOPRI reta com marcadores triangulares. Fonte: Elaborado pela autora.

Diferentemente da Figura 5.24 os resultados no gráfico da Figura 5.29 estão mais próximos, em particular o Euler explícito. Isso é dado pois o gráfico da zona de compressão foi feito de forma a escolher os valores de uma mesma posição para todos os dias, mais especificamente na parte final do teste, onde o valor não aumenta tanto dado o valor máximo da concentração de sólido.

Ao fazer o mesmo estudo dos esquemas espaciais na zona de clarificado (Figura 5.30), mais especificamente nas alturas de 19.6 cm (linha contínua), 17.7 cm (linha traço-ponto) e 15.4 cm (linha tracejada), vemos que o upwind se comporta de forma mais dissipativa em comparação aos outros dois métodos perto das regiões onde ocorre a queda do volume de sólidos. Apesar disso, assim como foi observado na Figura 5.28, os métodos upwind e TVD-sweby se mantêm próximos em comparação ao WENO quando longe das regiões de descontinuidade.

Por fim foi feito um teste aumentando o valor do CFL com o objetivo de identificar o valor teto de estudo para este fluxo. Com o CFL de 1×10^{-2} só foi possível rodar o problema para 5 anos com $N_v = 400$, com mais volumes o valor ultrapassa o limite de 50% de concentração de sólidos após 8 meses para $N_v = 800$ e 1 mês para $N_v = 1600$ com Euler explícito. Utilizando o SSP-RK no tempo com 800 volumes o problema rodou sem extrapolar até o 18º mês e com

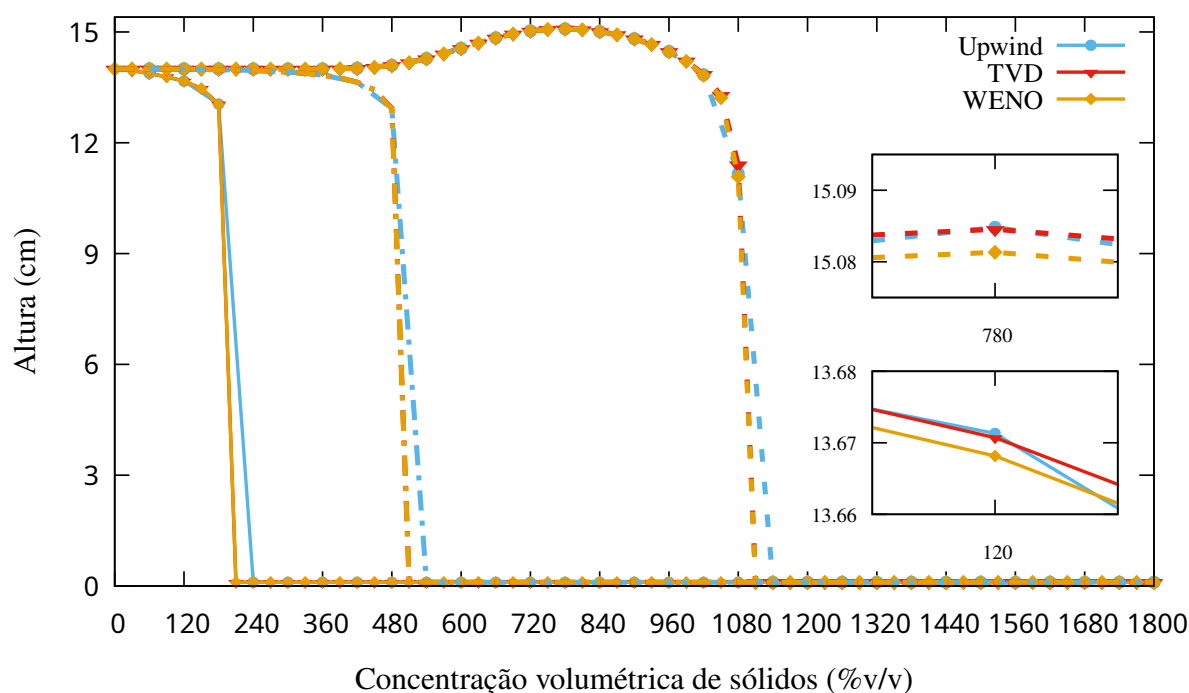


Figura 5.30: Comparação dos esquemas espaciais na zona de clarificado (da esquerda para a direita dado o assentamento de sólidos temos as alturas de 19.6 cm, 17.7 cm e 15.4 cm). Fonte: Elaborado pela autora.

$N_v = 1600$ foi possível chegar a 3 meses de simulação. O DOPRI rodou os 5 anos estipulados com 1600 volumes.

O gráfico na Figura 5.31 mostra três curvas em três tempos diferentes, em todas as curvas foi utilizado o WENO como esquema espacial e em cada uma foi aplicado um dos métodos temporais. A linha contínua representa os resultados obtidos com CFL de 1×10^{-2} e as tracejadas com CFL 1×10^{-3} .

Apesar da impossibilidade de obtenção de resultados coerentes para malhas mais refinadas com o CFL de 1×10^{-2} , os valores encontrados com ambos os CFL são semelhantes.

Na tabela 5.1 colocamos o tempo computacional para cada simulação feita com os diferentes métodos e volumes utilizados. O CFL escolhido foi de 1×10^{-3} para quase todas as simulações, menos o DOPRI com 1600 volumes, que foi utilizado o CFL 5×10^{-3} com t_f de 5 anos. Sobre o desempenho computacional, os resultados foram gerados em um notebook AMD Ryzen 5 3500U com 12G de RAM e 2.1 GHz. Todos os códigos foram rodados em FORTRAN 90.

O esquema upwind, como esperado, foi o método espacial mais eficiente, seguido pelo WENO e, por último, o TVD-sweby. Entre os métodos temporais o aumento do tempo computacional conforme partimos do esquema mais simples ao mais complexo foi de quase dez vezes mais.

[‡]Para este foi utilizado o CFL de 5×10^{-3}

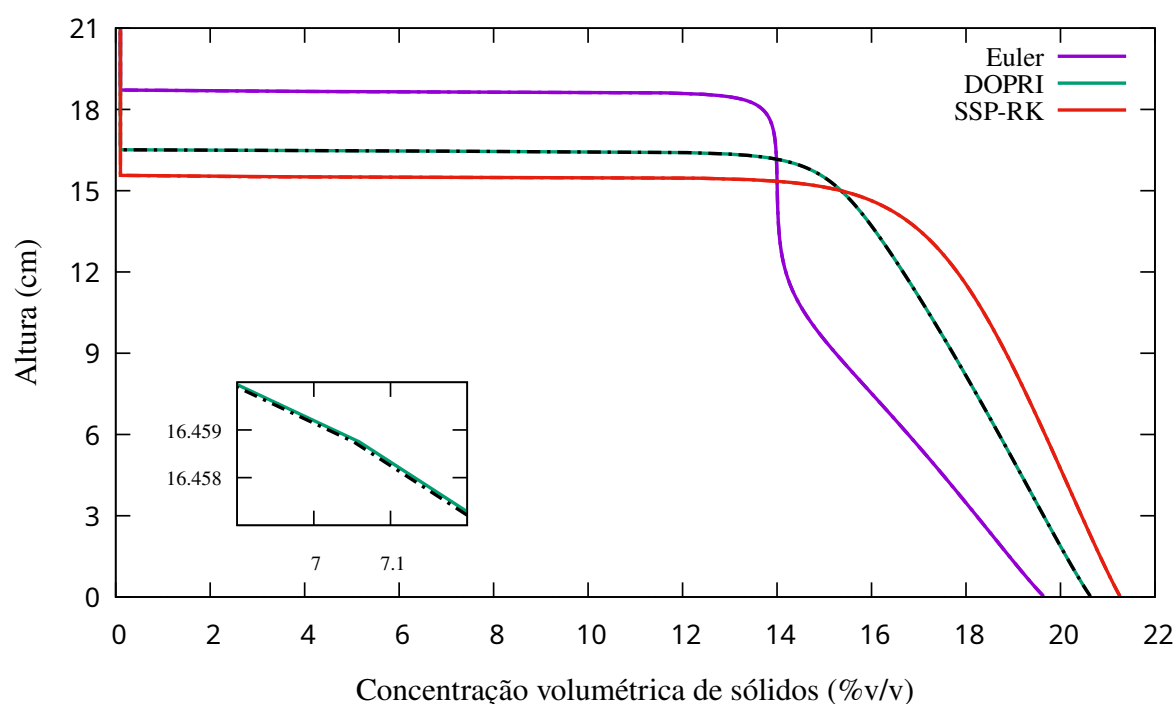


Figura 5.31: Teste de mudança de CFL, onde a linha contínua tem CFL de 1×10^{-2} e a tracejada com CFL 1×10^{-3} . Fonte: Elaborado pela autora.

Tabela 5.1: Tabela de tempo computacional (em segundos).

Volumes	Método Espacial	Método Temporal		
		Euler	SSP-RK	DOPRI
Nv = 400	Upwind	1.25×10	1.30×10^2	1.14×10^3
	TVD	2.34×10	2.72×10^2	2.71×10^3
	WENO	1.56×10	2.14×10^2	1.71×10^3
Nv = 800	Upwind	1.56×10^2	5.09×10^2	3.87×10^3
	TVD	3.5×10^2	1.19×10^3	1.05×10^4
	WENO	2.36×10^2	7.96×10^2	6.03×10^3
Nv = 1600	Upwind	6.20×10^2	2.15×10^3	$4.19 \times 10^{3\ddagger}$
	TVD	1.73×10^3	4.7×10^3	$1.00 \times 10^{4\ddagger}$
	WENO	1.61×10^3	3.47×10^3	$7.02 \times 10^{3\ddagger}$

Fonte: Criado pela autora.

No capítulo seguinte traremos conclusões sobre o trabalho descrito até o presente capítulo, sintetizando as informações essenciais vistas nas literaturas, a metodologia utilizada e o que os resultados explicitados aqui indiciam, além de ideias para trabalhos futuros.

Conclusão

No presente trabalho passamos por algumas etapas até chegar à aplicação de métodos numéricos. Primeiramente verificamos que, utilizando um fluxo mais simples, os métodos espaciais e temporais seguem a ordem vista na literatura, garantindo que as discretizações utilizados foram corretamente implementadas. Na sequência foi aplicado a equação de Buckley-Leverett para identificar o comportamento dos diferentes métodos frente às descontinuidades apresentadas no capítulo da metodologia, resultando na desqualificação dos métodos de Lax-Friedrichs e Lax-Wendroff.

O método de primeira ordem, apesar de se manter estável em locais de salto sofrem com erro dissipativo resultando em perda de informação, como por exemplo no gráfico da zona de clarificado. Em contra partida, os métodos de segunda ordem que não possuem propriedades TVD, como o Lax-Wendroff, sofrerão com erro dispersivo em descontinuidades, gerando oscilações exacerbadas, como visto no fluxo de Buckley-Leverett.

Em seguida temos os métodos com propriedades TVD e os métodos WENO. A propriedade TVD garante que a cada novo passo no tempo a variação total do resultado não crescerá enquanto o WENO cria *substencils* de forma que a influência das descontinuidades nos pontos adjacentes seja quase nula, implicando em mais precisão nas regiões contínuas. Dado essa diferença, vimos, especialmente nos resultados utilizando Buckley-Leverett, que o WENO se comporta melhor na rarefação e quando há variações seguidas repentinas o TVD se mostra mais adepto.

Dado que o método WENO utilizado é de quinta ordem em regiões suaves e terceira ordem perto de descontinuidade, o TVD de segunda ordem e primeira ordem respectivamente, e o upwind de primeira ordem independente da região, os resultados obtidos com o WENO tem maior ordem de precisão.

Quando aplicamos esses diferentes esquemas à equação da sedimentação temos que, apesar dos valores de volume e CFL serem bons no sentido numérico, ou seja, um valor de CFL pequeno e estável e uma malha com muitos volumes, bem refinada, houveram algumas discrepâncias entre os resultados obtidos. Vimos, por exemplo, que o DOPRI e o SSP-RK, no CFL de 0.6 não possuem diferença e, o SSP-RK por ser um método que garante a propriedade

TVD, diferentemente do DOPRI, e tem um tempo computacional menor, pode ser uma escolha mais apropriada dependendo do estudo e aplicação.

Apesar disso, os métodos temporais apresentam influência principal pela escolha do valor de CFL. Como o DOPRI é um método Runge-Kutta adaptativo de quinta e quarta ordem, a escolha de CFL não é tão restrita quanto o SSP-RK e o Euler - visto que o SSP-RK é uma combinação convexas do Euler -, resultando na possibilidade de valores mais altos de CFL para a geração dos dados.

Se a escolha dos valores de CFL e volumes não for tão favorável para a estabilidade, pensando em um teste com distâncias de maior escala (onde uma simulação com muitos volumes e um CFL muito pequeno levaria dias para ser finalizado), os métodos teriam uma maior influência nos resultados. Dado esta observação, para trabalhos futuros fazer simulações com dados de tamanho de poço, a equação da sedimentação para polidisperso e a extensão para o problema em 2D seriam estudos interessantes.

Referências bibliográficas

ALBERDI, R. et al. Strategies for optimal use of fluids in grinding. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**, v. 51, n. 6, p. 491–499, 2011. ISSN 0890-6955. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0890695511000381>.

BAEZA, A. et al. An efficient third-order weno scheme with unconditionally optimal accuracy. **SIAM Journal on Scientific Computing**, Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM), v. 42, n. 2, p. A1028–A1051, jan. 2020. ISSN 1095-7197. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1137/19M1260396>.

BERRES, S. et al. Applications of polydisperse sedimentation models. **Chemical engineering journal**, Elsevier, v. 111, n. 2-3, p. 105–117, 2005.

BÜRGER, R. et al. On time discretizations for the simulation of the batch settling–compression process in one dimension. **Water Science and Technology**, IWA Publishing, v. 73, n. 5, p. 1010–1017, 2016.

BÜRGER, R. et al. A difference scheme for a degenerating convection-diffusion-reaction system modelling continuous sedimentation. **ESAIM: M2AN**, v. 52, n. 2, p. 365–392, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1051/m2an/2017038>.

_____. On the implementation of weno schemes for a class of polydisperse sedimentation models. **Journal of Computational Physics**, v. 230, n. 6, p. 2322–2344, 2011. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110006832>.

BÜRGER, R. et al. Second-order schemes for conservation laws with discontinuous flux modelling clarifier–thickener units. **Numerische Mathematik**, Springer, v. 116, n. 4, p. 579–617, 2010.

BUTCHER, J. C. **Numerical methods for ordinary differential equations**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008.

COE, H. et al. Methods for determining the capacities of slime-settling tanks. **Trans. AIME**, v. 55, p. 356–384, 08 1916.

GOTTlieb, S. et al. Total variation diminishing runge-kutta schemes. **Mathematics of computation**, v. 67, n. 221, p. 73–85, 1998.

_____. Strong stability-preserving high-order time discretization methods. **SIAM review**, SIAM, v. 43, n. 1, p. 89–112, 2001.

HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. **Journal of Computational Physics**, v. 49, n. 3, p. 357–393, 1983. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999183901365>.

JIANG, G.-S. et al. Efficient implementation of weighted eno schemes. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 126, n. 1, p. 202–228, 1996.

KADALBAJOO, M. et al. A high resolution total variation diminishing scheme for hyperbolic conservation law and related problems. **Applied Mathematics and Computation**, v. 175, n. 2, p. 1556–1573, 2006. ISSN 0096-3003. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300305007149>.

KAWASE, Y. et al. Sedimentation of particles in non-newtonian fluids. **Chemical Engineering Communications**, Taylor & Francis, v. 13, n. 1-3, p. 55–64, 1981.

KYNCH, G. J. A theory of sedimentation. **Transactions of the Faraday society**, Royal Society of Chemistry, v. 48, p. 166–176, 1952.

LAVROV, A. Effect of eccentric annulus, washouts and breakouts on well cementing quality: Laminar regime. **Energy Procedia**, Elsevier, v. 86, p. 391–400, 2016.

LEVEQUE, R. J. **Numerical methods for conservation laws**. [S.l.]: Springer, 1992. v. 214.

_____. **Finite volume methods for hyperbolic problems**. [S.l.]: Cambridge university press, 2002. v. 31.

LOBATO, F. S. et al. Application of advanced numerical methods to solve the batch sedimentation problem: Tangent of hyperbola interface capturing, weighted essentially non-oscillatory and high-resolution central scheme. **Scientia Plena**, v. 21, n. 3, 2025.

RIBEIRO, J. et al. A simplified model applied to the barite sag and fluid flow in drilling muds: Simulation and experimental results. **Oil & Gas Science and Technology**, v. 72, p. 23, 07 2017.

ROCHA, R. R. **Estudo Teórico-Experimental da Sedimentação em Batelada: Monitoramento e Modelagem de Perfis de Concentração de Sólidos e Análise de Equações Constitutivas**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2018.

ROCHA, R. R. et al. Settling of weighting agents in non-newtonian fluids to off-shore drilling wells: Modeling, parameter estimation and analysis of constitutive equations. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, Elsevier, v. 184, p. 106535, 2020.

SAESEAW, S. et al. Sedimentation field-flow fractionation: Size characterization of food materials. **Food Research International**, v. 38, n. 7, p. 777–786, 2005. ISSN 0963-9969. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0963996905000669>.

SARABIAN, M. et al. Numerical simulations of a sphere settling in simple shear flows of yield stress fluids. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 896, p. A17, 2020.

SHU, C.-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. In: **Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations: Lectures given at the 2nd Session of the Centro Internazionale Matematico Estivo (CIME) held in Cetraro, Italy, June 23–28, 1997**. [S.l.]: Springer, 2006. p. 325–432.

SHU, C.-W. et al. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 77, n. 2, p. 439–471, 1988.

SWEBY, P. K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. **SIAM journal on numerical analysis**, SIAM, v. 21, n. 5, p. 995–1011, 1984.

TITAREV, V. et al. Weno schemes based on upwind and centred tvd fluxes. **Computers & Fluids**, v. 34, n. 6, p. 705–720, 2005. ISSN 0045-7930. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793004000908>.

TORO, E. F. **Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.

YU, H. et al. A second-order accurate, component-wise tvd scheme for nonlinear, hyperbolic conservation laws. **Journal of Computational Physics**, v. 173, n. 1, p. 1–16, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101968342>.

ZABAVA, B.-S. et al. Experimental study of the sedimentation of solid particles in wastewater. In: . [S.l.: s.n.], 2016.