UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Um método de interface imersa de alta ordem para a resolução de equações elípticas com coeficientes descontínuos

Marilaine Colnago

Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de
Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Marilaine Colnago

Um método de interface imersa de alta ordem para a resolução de equações elípticas com coeficientes descontínuos

Tese apresentada ao Instituto de Ciências
Matemáticas e de Computação – ICMC-USP,
como parte dos requisitos para obtenção do título
de Doutora em Ciências – Ciências de Computação e
Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e
Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Leandro Franco de Souza

USP – São Carlos

Janeiro de 2018

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados inseridos pelo(a) autor(a)

C717m Colnago, Marilaine
Um método de interface imersa de alta ordem para
a resolução de equações elípticas com coeficientes
descontínuos / Marilaine Colnago; orientador Leandro
Franco de Souza. -- São Carlos, 2018.
121 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2018.

1. Interface Imersa. 2. Equações Elípticas. 3.
Coeficientes Descontínuos. I. Franco de Souza,
Leandro , orient. II. Título.

Marilaine Colnago

**A high-order immersed interface method for solving elliptic
equations with discontinuous coefficients**

Doctoral dissertation submitted to the Institute of
Mathematics and Computer Sciences – ICMC-USP, in
partial fulfillment of the requirements for the degree of
the Doctorate Program in Computer Science and
Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Leandro Franco de Souza

USP – São Carlos

January 2018

*O caminho até aqui não foi fácil.
A (auto)cobrança e a pressão nos maltratam de tal forma
que pensamos não ser capazes de aguentar até o fim.
Dedico essa tese à todos que sofrem em silêncio
nessa batalha árdua da pós-graduação.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus pelo dom da vida e por, muitas vezes, ter me carregado no colo. Agradeço à Maria por sempre abrir meus caminhos, pela proteção de seu manto e pelas graças derramadas em minha vida.

Agradeço ao meu marido, Wallace, pelas inúmeras vezes que me enxergou melhor do que eu sou, pelo apoio, suporte, ajuda e por todo amor. Obrigada por não desistir de mim, não teria conseguido sem você.

Aos meus pais, não há palavra que melhor se adeque do que um grande e sincero obrigada. Tudo o que vocês fizeram para que eu pudesse ser uma pessoa melhor e ter as oportunidades que vocês não tiveram, foi tanto, que eu nunca saberei como retribuir.

Agradeço aos amigos que me apoiaram, me animaram e me deram suporte durante essa caminhada, em especial aos amigos que fiz no LMACC: Camila, Matheus, Sardar e Alfredo, à Tamiris, que esteve ao meu lado em todos os momentos, desde a graduação, e à amiga que fiz ao longo da carreira acadêmica, Marluce, por ter compartilhado comigo, mesmo longe, tantas angústias e também tantas alegrias.

Agradeço a todos os professores que tive no decorrer da vida por terem me ensinado a andar por caminhos até então desconhecidos. Em especial agradeço ao Messias Meneguette, por ter sido mais que um professor, um conselheiro e amigo e ao professor José Roberto Nogueira por ter me acompanhado desde a graduação, ter iniciado comigo essa caminhada e ainda fazer parte do meu círculo de amizades.

Agradeço ao professor Leandro Franco de Souza pela orientação e paciência durante o período do meu doutorado e também agradeço aos professores e funcionários do programa de pós-graduação em Ciências da Computação e Matemática Computacional do ICMC, em especial ao professor Adenilso, coordenador do programa, por acreditar e fazer a diferença na

vida de muitos alunos que por ele passam/passaram.

Aos membros da banca por terem contribuído significativamente com contribuições e correções da presente tese.

Agradeço à todas as pessoas que contribuíram para meu crescimento como pessoa. Sou o resultado da confiança e da força de cada um de vocês.

E finalmente, à CAPES pelo suporte financeiro.

“Don’t give up, keep swimming.”
(Graham Walters - Finding Nemo)

RESUMO

COLNAGO, M. **Um método de interface imersa de alta ordem para a resolução de equações elípticas com coeficientes descontínuos**. 2018. 121 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2018.

Problemas de interface do tipo elípticos são frequentemente encontrados em dinâmicas de fluidos, ciências dos materiais, mecânica e outros campos de estudo. Em particular, o clássico Método de Interface Imersa (IIM) figura como uma das abordagens numéricas mais robustas para resolver problemas dessa categoria, o qual tem sido empregado recorrentemente para simular o comportamento de fluxos sobre corpos imersos em malhas cartesianas. Embora esse método seja eficiente e robusto, técnicas construídas com base no IIM impõem como restrições matemáticas diversos tipos de condições de salto na interface a fim de serem passíveis de utilização na prática. Nesta tese, introduzimos um novo método de Interface Imersa para resolver problemas elípticos com coeficientes descontínuos em malhas cartesianas. Diferentemente da maioria das formulações existentes que dependem de vários tipos de condições de salto para produzirem uma solução para o problema elíptico, o esquema aqui proposto reduz significativamente o número de restrições ao solucionar a EDP estudada, isto é, apenas os saltos de ordem zero das incógnitas devem ser fornecidos. A técnica apresentada combina esquemas de Diferenças Finitas, abordagem do *Ponto Fantasma*, modelos de correções e regras de interpolação em uma metodologia única e concisa. Além disso, o método proposto é capaz de produzir soluções de alta ordem, incluindo cenários onde há poucos dados disponíveis onde o quesito *alta precisão* é indispensável. A robustez e a precisão do método proposto são verificadas através de uma variedade de experimentos numéricos envolvendo diversos problemas elípticos com interfaces arbitrárias. Finalmente, a partir dos testes numéricos conduzidos, é possível concluir que o método projetado produz aproximações de alta ordem a partir de um número muito condensado de restrições matemáticas.

Palavras-chave: Método de Interface Imersa, Equações Elípticas, Equação de Poisson.

ABSTRACT

COLNAGO, M. **A high-order immersed interface method for solving elliptic equations with discontinuous coefficients**. 2018. 121 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2018.

Elliptic interface problems are often encountered in fluid dynamics, material sciences, mechanics and other relevant fields of study. In particular, the well-known Immersed Interface Method (IIM) figures among the most effective approaches for solving non-trivial problems, where the method is traditionally used to simulate the flow behavior over complex bodies immersed in a cartesian mesh. Although their powerfulness and versatility, techniques that are built in light of the IIM impose as constraints different types of jump conditions at the interface in order to be properly managed and applicable for specific purposes. In this thesis, we introduce a novel Immersed Interface Method for solving Elliptic problems with discontinuous coefficients on cartesian grids. Different from most existing formulations that rely on various jump conditions types to get a valid solution, the present scheme reduces significantly the number of constraints when solving the PDE problem, i.e., only the ordinary jumps of the unknowns are required to be given, a priori. Our technique combines Finite Difference schemes, Ghost node strategy, correction models, and interpolation rules into a unified and concise methodology. Moreover, the method is capable of producing high-order solutions, succeeding in many practical scenarios with little available data wherein high precision is indispensable. We attest the robustness and the accuracy of the proposed method through a variety of numerical experiments involving several Elliptic problems with arbitrary interfaces. Finally, from the conducted numerical tests, we verify that the designed method produces high-order approximations from a very limited number of valid jump constraints.

Keywords: Immersed Interface Method, Elliptic Equation, Poisson Equation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Resfriamento do motor de um carro de Fórmula 1, usando um método de fronteira imersa (esquerda). Representação de um avião imerso em um grid computacional (direita). Fonte: (TECPLOT, 2015).	25
Figura 2 – Campo de pressão fora e dentro de um balão no instante $t = 98$ utilizando o Método de Interface Imersa. FONTE: (XU; WANG, 2005).	27
Figura 3 – Aplicação do Método de Fronteira Imersa na modelagem de fluxo sanguíneo no coração. FONTE: (GRIFFITH, 2012).	27
Figura 4 – (a) Malha computacional para a discretização de uma Equação Elíptica bidimensional. (b) Estêncil de 5 pontos utilizando o método de Diferenças Finitas centrado no ponto (i, j)	38
Figura 5 – Representação gráfica para problemas unidimensionais (esquerda) e bidimensionais (direita) envolvendo interfaces e/ou descontinuidades. $\Gamma = \{x_\alpha, x_\xi\}$ representa a interface para o caso 1D, enquanto que a curva em vermelho ilustra a interface para o caso 2D.	42
Figura 6 – Problema com condições de contorno e com descontinuidade em x_α	49
Figura 7 – (a) Problema com condições de contorno em x_0 e x_α . (b) Problema com condições de contorno em x_α e x_n	50
Figura 8 – Diagrama de um domínio retangular $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$ com uma interface Γ (uma elipse).	60
Figura 9 – Ilustrações em diferentes tempos ($t = 0, 0.1, 0.2$ e 0.3) de cinco bolhas inicialmente esféricas em um líquido inicialmente em repouso em uma coluna retangular. FONTE: (ANNALAND <i>et al.</i> , 2006).	60
Figura 10 – Pintura em spray virtual de uma porta de carro utilizando o software IPS Virtual Paint. (CAD geometry cortesia da Volvo Car Corporation). FONTE: (ANDERSSON, 2013).	61

Figura 11 – Simulação da evolução da citocinese. FONTE: (LI; YUN; KIM, 2012). . .	62
Figura 12 – Simulação dos movimentos de uma libélula. Fonte: (DONG <i>et al.</i> , 2010). . .	62
Figura 13 – Modelagem de um aneurisma na parede do vaso sanguíneo. Fonte: (SEO <i>et al.</i> , 2015).	63
Figura 14 – Simulação de motilidade espermática usando o método de Fronteira Imersa. Fonte: (BOLIS, 2013).	64
Figura 15 – Modelagem da onda de transmissão da cóclea, utilizando o Método de Fronteira Imersa. Fonte: (HOSSEINI, 2013)	65
Figura 16 – Diferentes fontes de distribuição da função delta. FONTE: (MITTAL; IACCARINO, 2005).	66
Figura 17 – Solução numérica obtida (esquerda) e erro (direita) em uma malha 80×80 com a geometria imersa na forma de uma estrela. FONTE:(XIA; ZHAN; WEIA, 2014).	71
Figura 18 – Diagrama para problemas descontínuos unidimensionais com interfaces em $x = x_\alpha$ e $x = x_\xi$	76
Figura 19 – Diagrama numérico representando os casos 2 e 3, respectivamente. (a) O estêncil é posicionado tal que a interface x_α está entre $x_i \in \Omega^-$ e $x_{i+1} \in \Omega^+$. Neste caso, um nó fictício foi introduzido como um ponto extra associado ao ponto regular x_{i+1} . (b) Já nesta configuração do estêncil, este foi movido de forma que $x_{i-1} \in \Omega^-$ e $x_i \in \Omega^+$	78
Figura 20 – Esquema de interpolação adotado (gráfico em vermelho) passando tanto em pontos regulares da malha, como ainda no vértice artificial $(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i)$. . .	84
Figura 21 – Diferentes funções de interpolação para avaliar o ponto x_α com base na manipulação de pontos fantasmas.	85
Figura 22 – Combinação de pontos fantasmas a fim de ajustar as equações de diferenças analisadas.	87
Figura 23 – Em 2D, os pontos irregulares são interpolados em x e em y de forma independente. A curva em amarelo ilustra a interface, enquanto que os pontos em vermelho representam os nós que necessitam de correção. . . .	90
Figura 24 – Interface do problema (Exemplo 1) e curvas de nível da solução encontrada. . .	95

Figura 25 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 1).	96
Figura 26 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 1).	96
Figura 27 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 1).	97
Figura 28 – Interface do problema (Exemplo 2) e curvas de nível da solução encontrada.	98
Figura 29 – Solução numérica obtida com o método proposto (Exemplo 2).	98
Figura 30 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 2).	99
Figura 31 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 2).	99
Figura 32 – Interface do problema (Exemplo 3) e curvas de nível da solução encontrada.	100
Figura 33 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 3).	101
Figura 34 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 3).	101
Figura 35 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 3).	102
Figura 36 – Interface do problema (Exemplo 4) e curvas de nível da solução encontrada.	103
Figura 37 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 4).	103
Figura 38 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 4).	104
Figura 39 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 4).	104
Figura 40 – Interface do problema (Exemplo 5) e curvas de nível da solução encontrada.	105
Figura 41 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 5).	106
Figura 42 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 5).	106
Figura 43 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 5).	107
Figura 44 – Interface do problema (Exemplo 6) e curvas de nível da solução encontrada.	108
Figura 45 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 6).	108
Figura 46 – Erro de aproximação na norma $\ E\ _\infty$ (Exemplo 6).	109
Figura 47 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 6).	109
Figura 48 – Ilustração do caso em que o ponto x_α está muito próximo de um ponto de fronteira $x_0 \in \partial\Omega$	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 1).	97
Tabela 2 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 2).	100
Tabela 3 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 3).	102
Tabela 4 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 4).	105
Tabela 5 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 5).	107
Tabela 6 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 6).	109

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω — Domínio computacional

$\partial\Omega$ — Fronteira do domínio

ρ — massa específica

μ — viscosidade

p — pressão

$\mathbf{u}$ — campo de velocidades

$\mathbf{g}$ — constante de gravidade

σ — coeficiente de tensão superficial

κ — curvatura

$\mathbf{n}$ — vetor normal à superfície

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Contribuições	29
1.1.1	<i>Contribuições Gerais</i>	29
1.1.2	<i>Contribuições Específicas</i>	30
1.2	Publicações	31
1.3	Organização da Tese	32
2	CONCEITOS E TEORIA PRELIMINAR	35
2.1	Equações Elípticas	35
2.1.1	<i>Método de Diferenças Finitas</i>	37
2.1.2	<i>Erro de Truncamento Local</i>	39
2.1.3	<i>Erro Global</i>	40
2.2	Equações Elípticas com Coeficientes Descontínuas	41
2.2.1	<i>Métodos de Correções para Diferenças Finitas</i>	43
2.3	Erro na Interpolação Polinomial	45
2.4	Unicidade de Solução para Equações Elípticas: Um Estudo de Caso	48
2.4.1	<i>Unicidade para Condições de Dirichlet</i>	51
2.4.2	<i>Unicidade para Condições de Neumann</i>	52
2.5	Aplicação de Equações Elípticas em Mecânica dos Fluidos	54
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	59
3.1	Métodos para Problemas de Interface: Motivação e Contextuali- zação	59
3.2	Métodos Numéricos para Resolução de Problemas de Interface: Estado-da-Arte	65

4	METODOLOGIA	75
4.1	Aproximação de Diferenças Finitas	75
4.1.1	<i>Caso 1: Aproximação via Diferenças Finitas Padrão</i>	77
4.1.2	<i>Caso 2: Aproximação Baseada em Pontos Fantasma</i>	77
4.1.3	<i>Caso 3: Aproximação de Diferenças Finitas com Salto Único</i>	78
4.1.3.1	<i>Método de DF baseado em salto único combinando interpolação e pontos fantasmas</i>	83
4.1.3.2	<i>Observações sobre o Esquema de Interpolação Adotado</i>	85
4.1.4	<i>Tratamento Numérico para uma Segunda Interface $x = x_\xi$</i>	86
4.1.5	<i>Adequação dos Pontos Fantasma</i>	86
4.2	Aproximação de Diferenças Finitas de Alta Ordem	87
4.3	Caso Bidimensional	89
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	93
5.1	Resultados Numéricos	93
5.2	Aspectos Gerais e Limitações	110
6	CONCLUSÃO	113
6.1	Trabalhos Futuros	115
	REFERÊNCIAS	117

INTRODUÇÃO

Problemas de simulação com interfaces aparecem em uma série de aplicações práticas. Podemos citar, como exemplo, casos em especial em que temos uma geometria complexa a ser representada numericamente e precisamos executar sua simulação em uma malha computacional (vide Figura 1).

Figura 1 – Resfriamento do motor de um carro de Fórmula 1, usando um método de fronteira imersa (esquerda). Representação de um avião imerso em um grid computacional (direita). Fonte: (TECPLOT, 2015).

Outra aplicação interessante envolvendo problemas de interface acontece quando tratamos de modelagens que simulam escoamentos de diferentes fluidos, como é o caso particular dos escoamentos bifásicos. De fato, existe um grande interesse por parte de segmentos

da indústria nesse tipo de aplicação, uma vez que está presente em um grande número de processos industriais, entre eles:

- Produção, transporte e refinamento de petróleo (CHEN; EWING; ESPEDAL, 1994; KIM *et al.*, 2014);
- Escoamentos em reatores químicos e nucleares (STRÖM *et al.*, 2015; JAKOBSEN, 2014);
- Escoamentos em equipamentos de refrigeração, como condensadores, evaporadores, entre outros (PALACZ *et al.*, 2017; WANG *et al.*, 2015; TIBIRICA *et al.*, 2013).

Quando usamos Equações Diferenciais para modelar problemas dessa natureza, os coeficientes da equação base são tipicamente descontínuos ao longo da interface, o que, na maioria dos casos, gera uma solução também descontínua. Podemos citar, como exemplo, o estudo da pressão fora e dentro de um balão, o qual é graficamente representado pela Figura 2. Outro tipo de aplicação recorrente são os casos em que o problema a ser investigado está definido em um domínio irregular. Para ambas as situações, soluções analíticas são raramente encontradas na prática sendo, desta forma, necessário o emprego de soluções de natureza numérica.

Algumas ferramentas e *softwares* tradicionais de simulação como, por exemplo, o *Open Foam*, *Fluent* (Ansys Workbench) ou *Comsol*, podem ser utilizados para representar artificialmente domínios dessa natureza. Entretanto, sob certas circunstâncias, tal uso de ferramentas envolve alta complexidade de manuseio por parte do usuário e performance limitada, já que os possíveis custos computacionais para o processo de geração de novas malhas a cada passo de tempo são elevados (LEGENDRE, 2016; LI, 2015). Portanto, é razoável e vantajoso usar um método com malha cartesiana neste contexto, principalmente por não haver custo adicional no processo de geração de novas malhas (THOMPSON, 1984).

O versátil Método de Fronteira Imersa (IBM), do inglês *Immersed Boundary Method*, originalmente desenvolvido por Peskin (1972) para estudar o fluxo sanguíneo em torno de válvulas do coração, tem sido aplicado com sucesso em muitos problemas envolvendo interface (vide Figura 3 para uma ilustração). Alguns autores tem sugerido melhorias no método e,

Figura 2 – Campo de pressão fora e dentro de um balão no instante $t = 98$ utilizando o Método de Interface Imersa. FONTE: (XU; WANG, 2005).

até hoje, o aplicam com o mesmo intuito de sua formulação original (WANG *et al.*, 2016), (BORAZJANI, 2013), (GRIFFITH, 2012)¹. O Método de Fronteira Imersa, embora bastante simples, é também muito poderoso para simular problemas de fronteira livre e de interfaces móveis (LI; ITO, 2006). No entanto, o IBM resulta em uma precisão de primeira ordem.

Figura 3 – Aplicação do Método de Fronteira Imersa na modelagem de fluxo sanguíneo no coração. FONTE: (GRIFFITH, 2012).

Buscando, então, o aprimoramento do clássico Método de Fronteira Imersa, LeVeque e Li (1997) desenvolveram o chamado Método de Interface Imersa (IIM), do inglês *Immersed Interface Method*, o qual melhora a precisão do IBM para tratar Equações Elípticas com coeficientes descontínuos, além de termos fonte singulares. Em sua formulação inicial, o IIM

¹ Para uma simulação iterativa da técnica (GRIFFITH, 2012), consulte o seguinte link no site pessoal do autor: <http://www.math.nyu.edu/phd_students/griffith/>

utiliza uma malha uniforme (ou até mesmo adaptativa) com coordenadas cartesianas, polares ou esféricas. O esquema de Diferenças Finitas usado é modificado próximo à região de interface, com o objetivo de se alcançar a mesma ordem de precisão do esquema numérico aplicado longe da região de descontinuidade. O método foi desenvolvido de forma a ser simples de ser implementado e, ao mesmo tempo, robusto para a resolução de problemas mais complexos, além de ainda obter um bom nível de precisão numérica (LI; ITO, 2006).

Ao longo dos últimos 20 anos, vários autores fizeram diversas alterações na formulação básica do Método de Interface Imersa, visando assim, aperfeiçoar sua robustez e precisão. Dentre essas modificações do método, uma delas resultou na técnica proposta por Linnick e Fasel (2004), cujos autores desenvolveram um esquema de interface imersa de alta ordem de precisão para simular escoamentos ao redor de um cilindro, usando para isso um esquema compacto de Diferenças Finitas. Nesse método, os termos de correções são acrescentados ao esquema clássico de Diferenças Finitas adotado para aproximar a equação de fluxo, mantendo-se a ordem numérica de precisão. Porém, este esquema de interface imersa, de ordem elevada, está restrito a uma certa classe de problemas específicos e necessita, assim como as principais variantes presentes na literatura (LI; LAI, 2001; LI; ITO, 2006; ZHONG, 2006; LEE; LEVEQUE, 2003; XU; WANG, 2005; ZHOU *et al.*, 2006; HUANG; LI, 1999; XU; WANG, 2005; ZHONG, 2007; ZHAO; HOU; LI, 2012), de condições bem-definidas de salto nos pontos onde situa-se a interface, isto é, o valor do salto da função procurada, além dos saltos de suas derivadas, devem ser conhecidos, a priori.

Finalmente, há ainda outras técnicas de boa precisão destinadas à resolução numérica de problemas elípticos com interfaces. Por exemplo, em (FEDWIK *et al.*, 1999; MARQUES; NAVE; ROSALES, 2011; GIBOU; FEDKIW, 2005), os autores introduziram pontos criados artificialmente na malha base para ajustar as Equações de Diferenças nos nós que transcendem a interface analisada. Embora a estratégia adotada forneça os ajustes numéricos necessários para que se obtenha uma solução numérica do problema, esta ainda sofre com a obrigatoriedade de se conhecer os valores dos limites da função na interface (limites laterais da função, quando avaliados sob a perspectiva de um grid de pontos). Tal condição é bastante restritiva, visto que, na maioria das aplicações práticas de simulação, não é possível mensurar com exatidão tais dados de entrada para o uso da técnica computacional.

1.1 Contribuições

1.1.1 Contribuições Gerais

Como um dos objetivos mais gerais deste trabalho de doutorado, a pretensão foi investigar os diversos métodos numéricos presentes na literatura desenvolvidos para a resolução de problemas de interface. Desta forma, foi necessário um estudo mais detalhado das técnicas e metodologias já existentes no estado-da-arte de problemas com interfaces, propiciando, assim, embasamento teórico, aporte científico e questionamento crítico para o que é ora proposto na presente tese.

Além disso, a contribuição geral se dá no desenvolvimento de um novo método numérico, de alta ordem, para resolver problemas de interface, mais precisamente, envolvendo equações elípticas com coeficientes descontínuos. Esse método foi desenvolvido com base na flexibilidade e eficácia do Método da Interface Imersa, além de outras duas abordagens numéricas, a saber: o Método dos Pontos Fantasma, GFM, do inglês *Ghost Fluid Method*, originalmente criado por Fedwik *et al.* (1999), e as clássicas (e efetivas) técnicas de interpolação, que, em nossa metodologia, podem ser de natureza polinomial ou não. As vantagens de se usar o método ora proposto com relação aos demais encontrados na literatura recorrente são, em suma:

- O método em questão conserva a ordem de precisão do esquema de Diferenças Finitas adotado. Sendo assim, sua implementação gera um método de aproximação de alta ordem, conforme evidenciado pelos testes experimentais conduzidos na seção de experimentos desta tese.
- Conforme relatado anteriormente, na prática o maior problema em se resolver equações com coeficientes descontínuos ou com a presença de interfaces é encontrar um valor (ou, ao menos, uma boa aproximação) para os saltos da função e de suas derivadas antes da aplicação direta do método numérico escolhido, isto é, ter em mãos os valores dos saltos $[u]$, $[u_x]$, $[u_{xx}]$, e assim sucessivamente. O método aqui proposto necessita somente da informação inicial do salto da função incógnita, $[u]$, que, em muitos casos, pode ser estimado numericamente ou ainda adquirido experimentalmente. Assim, não é necessário

saber nenhum dos valores dos saltos das derivadas da função.

- O método aqui proposto não demanda o emprego de complexas teorias matemáticas, tampouco de fórmulas de discretização particularizadas para cada tipo domínio em específico a ser tratado, sendo, em essência, determinado apenas por técnicas bem comportadas como as Equações de Diferenças Finitas clássicas de três ou cinco pontos, Série de Taylor e esquemas de interpolação numérica.
- Outro criticismo quanto a várias das principais metodologias do estado-da-arte em problemas de interface é que estas fazem uso demasiado de heurísticas e readaptações para que se consiga o bom funcionamento das técnicas empregadas. De fato, além de difícil compreensão e de implementações com muitos detalhes técnicos, essas metodologias acabam sendo efetivas apenas para um número limitado de problemas, onde os cálculos dessas heurísticas podem ser plenamente realizados. Assim, diferentemente dessas metodologias, o método ora projetado não demanda operar com heurísticas complexas ou ainda leva à reformulações das equações para cada tipo de domínio a ser tratado, incluindo geometrias particularizadas.
- Finalmente, a técnica proposta é formulada a partir de malhamento em domínio cartesiano, sendo também customizável para grids irregulares. Isto significa que, frente à considerável quantidade de métodos da literatura que requerem o uso obrigatório de funções de transformação entre o domínio simulado de referência e o operacional para serem efetivas, a técnica aqui apresentada é totalmente passível de aplicação no próprio domínio cartesiano de simulação.

1.1.2 Contribuições Específicas

Em suma, a metodologia apresentada na presente tese foi desenvolvida da seguinte forma:

1. Primeiramente, é utilizada uma malha cartesiana para a discretização do problema a ser estudado.

2. Além disso, a aproximação numérica é feita através de método de Diferenças Finitas que, dentre suas vantagens, pode-se destacar a flexibilidade na escolha dos pontos da malha que se deseja usar na discretização e o fato de ser passível de geração de diferentes ordens de precisão com distintos arranjos de pontos.
3. Para tratar a descontinuidade presente no problema, tornou-se necessária a adição de:
 - a. nós artificiais, e
 - b. um termo de correção, que é calculado de maneira a manter a ordem do esquema de DF.
 - i. Para o cálculo desse termo, é necessário, num primeiro instante, encontrar ambos os valores da função nas fronteiras da descontinuidade. A fim de obter aproximações para esses valores, utilizamos o valor do salto da função $[u] = u_{x_\alpha}^+ - u_{x_\alpha}^-$, a criação de nós artificiais e uma interpolação polinomial nos pontos da interface.
4. Por fim, todas essas manipulações e aproximações resultam em um sistema linear a ser resolvido com o auxílio do Matlab ®. O método encontrado mantém a ordem do esquema de Diferenças Finitas adotado além de contar com valores de erro de aproximação muito baixos.

Portanto, através do método proposto, é possível a resolução de problemas de interface alcançando alta ordem de precisão, apenas inserindo correções no método de diferenças finitas padrão, onde a única condição de entrada requisitada pela técnica proposta é o salto da função na interface, o que não acontece nos outros métodos presentes na literatura.

1.2 Publicações

Publicações relacionadas à tese

- **Colnago, Marilaine;** Souza, Leandro Franco, High-order Immersed Interface Method to solve the pressure Poisson equation. In: Jornada de Escoamentos Multifásicos, 2015, Campinas. EBECM Proceedings.

- **Colnago, Marilaine;** Reis, Gabriela Aparecida dos; Tasso, Italo V. M.; Souza, Leandro Franco, Método de Interface Imersa de Alta Ordem para o Cálculo de Derivadas de Funções Descontínuas. In: XXXV CNMAC Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2015. v. 3.

Outras publicações

- Casaca, Wallace; **Colnago, Marilaine;** Nonato, Luis Gustavo, Interactive Image Colorization using Laplacian Coordinates. Lecture Notes in Computer Science. 2ed.: Springer International Publishing, 2015, v. , p. 675-686.

1.3 Organização da Tese

A presente tese segue organizada da seguinte maneira:

Capítulo 2 [Conceitos e Teoria Preliminar]: Neste capítulo são apresentados os conceitos básicos e definições utilizadas no decorrer da tese, como, por exemplo, as definições formais de Equações Elípticas e de problemas de interface. Além disso, são mostradas e discutidas certas situações em que essas equações podem ser resolvidas numericamente, além dos resultados matemáticos empregados na metodologia proposta.

Capítulo 3 [Revisão Bibliográfica]: Neste capítulo é feita uma revisão bibliográfica dos métodos numéricos existentes nas literatura recorrente para problemas de interface, mais especificamente o estado-da-arte na solução de equações elípticas descontínuas.

Capítulo 4 [Metodologia]: Neste capítulo, o método numérico desenvolvido para a resolução de problemas elípticos com interfaces é descrito e discutido, tanto para problemas unidimensionais, como ainda em duas dimensões.

Capítulo 5 [Resultados]: No capítulo de resultados, os experimentos numéricos conduzidos no desenvolver da presente pesquisa, bem como ainda comparações e discussões acerca dos mesmos são propriamente apresentados.

Capítulo 6 [Conclusão]: Finalmente, no capítulo de conclusão é apresentado as considerações finais e conclusões da pesquisa desenvolvida, além de apontar caminhos e perspectivas

para trabalhos futuros.

CONCEITOS E TEORIA PRELIMINAR

Neste capítulo são apresentados os conceitos preliminares, aspectos numéricos e as diretrizes teóricas que serão empregadas ao longo desta tese.

2.1 Equações Elípticas

Uma Equação Diferencial Parcial (EDP) no espaço bidimensional é dita do tipo elíptica se pode ser escrita através da seguinte forma:

$$a_1 u_{xx} + a_2 u_{xy} + a_3 u_{yy} + a_4 u_x + a_5 u_y + a_6 u = f, \quad (2.1)$$

onde os coeficientes a_1 , a_2 e a_3 , a princípio, são funções das variáveis independentes de x e y , e devem satisfazer à seguinte expressão:

$$\Delta = a_2^2 - 4a_1a_3 < 0. \quad (2.2)$$

Esta equação deve ser satisfeita para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ pertencentes a uma região fechada do plano Ω , juntamente com algumas condições adicionais de fronteira, isto é, em $\partial\Omega$.

Basicamente, existem três tipos de problemas que envolvem a Equação (2.1), os quais essencialmente variam de acordo com as condições de fronteira escolhida, isto é:

1. Problema de Dirichlet, onde é necessário que a solução de u na fronteira $\partial\Omega$ seja

conhecida:

$$u(x, y) = g(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega.$$

2. Problema de Neumann, quando $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}$ é conhecida sobre $\partial\Omega$, ou seja:

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = g(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega,$$

onde $\mathbf{n}$ é a normal externa à fronteira $\partial\Omega$.

3. Problema de Robbins ou misto, que surge quando conhecemos a relação

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \gamma,$$

onde $\alpha = \alpha(x, y) > 0$, $\beta = \beta(x, y) > 0$ e $\gamma = \gamma(x, y)$, $(x, y) \in \partial\Omega$.

Fisicamente, podemos definir equações de estado estacionário em alguma região do espaço associada a algum problema dependente do tempo, como Equações Elípticas. Por exemplo, a equação de difusão ou condução de calor em duas dimensões espaciais toma a forma:

$$u_t = (\beta u_x)_x + (\beta u_y)_y - f, \quad (2.3)$$

onde $\beta = \beta(x, y) > 0$ é o coeficiente de difusão ou condução de calor, e f é o termo fonte.

Se a Equação (2.3) está em seu estado estacionário, então podemos encontrar uma solução particular resolvendo a seguinte Equação Elíptica:

$$(\beta u_x)_x + (\beta u_y)_y = f. \quad (2.4)$$

Se tivermos o caso onde $\beta = 1$, teremos então a Equação de Poisson:

$$\Delta u = u_{xx} + u_{yy} = f. \quad (2.5)$$

Finalmente, no caso em que $f(x, y) = 0$, reduzimos a expressão matemática acima à Equação de Laplace:

$$\Delta u = u_{xx} + u_{yy} = 0. \quad (2.6)$$

Na sequência, vamos introduzir as equações básicas de diferenças finitas que podem ser empregadas para discretizar equações do tipo elípticas.

2.1.1 Método de Diferenças Finitas

O Método de Diferenças Finitas (MDF) é uma técnica numérica de resolução de Equações Diferenciais que se baseia na aproximação de derivadas por equações de Diferenças Finitas. As fórmulas das aproximações são obtidas da manipulação da série de Taylor das derivadas da função procurada (para saber mais, veja (CUMINATO; MENEGUETTE, 2013)). Para obtermos essas aproximações, é necessário ter pré-estabelecidos os pontos onde essas diferenças serão calculadas, ou seja, requer-se que definamos, primeiramente, uma malha de pontos no domínio de atuação do problema.

Por exemplo, considerando o problema de Poisson (2.5) definido em uma região quadrangular do plano, Ω , dada por $[0, 1] \times [0, 1]$. Além disso, vamos supor que as condições iniciais do nosso problema serão do tipo Dirichlet na fronteira $\partial\Omega$ desse quadrado. Assim, estamos então interessados em resolver:

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) &= f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \\ u(x, y) &= g(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (2.7)$$

em que $g(x, y)$ é uma função conhecida na fronteira desse domínio.

Vamos empregar uma malha cartesiana uniforme que consiste de pontos do tipo (x_i, y_j) , onde $x_i = i \cdot \Delta x$ e $y_j = j \cdot \Delta y$, com $i = 0, 1, 2, \dots, M$ e $j = 0, 1, 2, \dots, N$, onde Δx representa o espaçamento na direção x , e Δy o espaçamento na direção y . Denotamos por Ω_δ os pontos da malha que são interiores ao domínio Ω , isto é:

$$\Omega_\delta = \{(x_i, y_j), \ 0 < i < M, \ 0 < j < N\},$$

e por $\partial\Omega_\delta$ os pontos da malha que estão sobre a fronteira, isto é:

$$\partial\Omega_\delta = \{(x_i, y_j), \ (i = 0, M, \ 0 \leq j \leq N) \text{ e } (0 \leq i \leq M, \ j = 0, N)\}.$$

A malha gerada pode ser vista na Figura 4 (a).

Podemos, agora, aproximar as derivadas da Equação (2.7). Assim, já que essa equação é válida para todos os pontos do domínio Ω , em particular pode ser aplicada a um ponto genérico (x_i, y_j) de Ω_δ , e então podemos escrever:

$$u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j) = f(x_i, y_j). \quad (2.8)$$

Figura 4 – (a) Malha computacional para a discretização de uma Equação Elíptica bidimensional. (b) Estêncil de 5 pontos utilizando o método de Diferenças Finitas centrado no ponto (i, j) .

Se escrevermos $u_{i,j}$ para representar uma aproximação para $u(x_i, y_j)$, e usarmos um esquema centrado de Diferenças Finitas de segunda ordem (vide (LEVEQUE, 2007) para um passo-a-passo) para aproximar a segunda derivada, teremos:

$$\frac{1}{(\Delta x)^2}(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{1}{(\Delta y)^2}(u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) = f_{i,j}. \quad (2.9)$$

Para simplificarmos a notação, considerando o caso particular em que $\Delta x = \Delta y \equiv h > 0$, podemos reescrever a Equação (2.9) como:

$$\frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}) = f_{i,j}. \quad (2.10)$$

Esse esquema de Diferenças Finitas pode ser representado pelo *Estêncil clássico de 5 pontos*, o qual pode ser visto na Figura 4(b). Essa aproximação, quando aplicada a cada um dos pontos internos da malha, resulta em um sistema linear de $(M-1) \times (N-1)$ equações. Logo, a solução satisfaz um sistema de equações lineares com $(M-1) \times (N-1)$ incógnitas, a qual será a solução numérica para a Equação Diferencial (2.7) nos pontos internos da malha.

Ainda sobre o sistema linear acima, é válido também salientar que, como o estêncil gerado não pode ser integralmente aplicado quando próximo das regiões de fronteira da malha, isto é, em situações onde algum dos pontos $u_{i-1,j}$, $u_{i+1,j}$, $u_{i,j-1}$ ou $u_{i,j+1}$ interceptam pontos de $\partial\Omega_\delta$, emprega-se a condição inicial de fronteira dada, a qual traz $u(x, y) = g(x, y)$ em $\partial\Omega$. Portanto, removendo esses valores da matriz, isolando-os no vetor do lado direito do sistema linear, tal condição leva à não singularidade da matriz do sistema linear final.

2.1.2 Erro de Truncamento Local

O Erro de Truncamento Local (ETL) é definido em termos do método numérico de aproximação usado para discretizar a equação base do problema. Ele é obtido quando substituímos a solução exata $u(x_i, y_j)$ na fórmula de aproximação de Diferenças Finitas obtida. Assim, uma vez que, em geral, a solução aproximada computada não satisfaz exatamente a equação, denotamos essa discrepância na solução como o Erro de Truncamento Local, que é denotado por $\tau_{i,j}$, ou seja:

$$\tau_{i,j} = \frac{1}{h^2} (u(x_{i-1}, y_j) + u(x_{i+1}, y_j) - 4u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1}) + u(x_i, y_{j+1})) - f(x_i, y_j), \quad (2.11)$$

já que $u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j) = f(x_i, y_j)$.

Expandindo-se os termos $u(x_{i-1}, y_j)$, $u(x_{i+1}, y_j)$, $u(x_i, y_{j-1})$ e $u(x_i, y_{j+1})$ a partir da série de Taylor em torno do ponto (x_i, y_j) , tem-se:

$$\begin{aligned} u(x_{i-1}, y_j) &= u(x_i, y_j) - hu_x(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2!} u_{xx}(x_i, y_j) - \frac{h^3}{3!} u_{xxx}(x_i, y_j) \\ &+ \frac{h^4}{4!} u_{xxxx}(x_i, y_j) - \frac{h^5}{5!} u_{xxxxx}(x_i, y_j) + O(h^6), \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} u(x_{i+1}, y_j) &= u(x_i, y_j) + hu_x(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2!} u_{xx}(x_i, y_j) + \frac{h^3}{3!} u_{xxx}(x_i, y_j) \\ &+ \frac{h^4}{4!} u_{xxxx}(x_i, y_j) + \frac{h^5}{5!} u_{xxxxx}(x_i, y_j) + O(h^6), \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} u(x_i, y_{j-1}) &= u(x_i, y_j) - hu_y(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2!} u_{yy}(x_i, y_j) - \frac{h^3}{3!} u_{yyy}(x_i, y_j) \\ &+ \frac{h^4}{4!} u_{yyyy}(x_i, y_j) - \frac{h^5}{5!} u_{yyyyy}(x_i, y_j) + O(h^6), \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} u(x_i, y_{j+1}) &= u(x_i, y_j) + hu_y(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2!} u_{yy}(x_i, y_j) + \frac{h^3}{3!} u_{yyy}(x_i, y_j) \\ &+ \frac{h^4}{4!} u_{yyyy}(x_i, y_j) + \frac{h^5}{5!} u_{yyyyy}(x_i, y_j) + O(h^6). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Substituindo agora essas expressões na expressão (2.11), chegamos em:

$$\tau_{i,j} = \left[u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j) + \frac{h^2}{12} (u_{xxxx}(x_i, y_j) + u_{yyyy}(x_i, y_j)) + O(h^4) \right] - f(x_i, y_j). \quad (2.16)$$

E, usando o fato de que, da expressão original, temos que $u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j) = f(x_i, y_j)$, obtemos:

$$\tau_{i,j} = \left[\frac{h^2}{12} (u_{xxxx}(x_i, y_j) + u_{yyyy}(x_i, y_j)) + O(h^4) \right]. \quad (2.17)$$

Como $u_{xxxx}(x_i, y_j)$ e $u_{yyyy}(x_i, y_j)$ são valores desconhecidos, podemos dizer que ambas são funções independentes de h , e por isso podemos concluir que $\tau_{i,j} = O(h^2)$ quando $h \rightarrow 0$.

Definição 1 (Ordem de um Método Numérico). Se o erro de truncamento local é de ordem $O(h^p)$, com $p \geq 1$, então podemos dizer que esse método numérico tem ordem de consistência p , ou ainda, mencionar simplesmente que o método é de ordem p .

Lema 1. Se a solução $u(x, y)$ é diferenciável até ordem 4 com derivada limitada, então o erro de truncamento local definido por (2.11) satisfaz:

$$|\tau_{i,j}| \leq ch^2, \quad (2.18)$$

onde c é uma constante que independe de h .

A prova desse Lema pode ser vista em (CUMINATO; MENEGUETTE, 2013). O que esse lema nos mostra é que o erro decresce ao refinarmos a malha e, mais do que isso: nos diz a velocidade de convergência do erro que, neste caso, é quadrática.

2.1.3 Erro Global

Definição 2 (Erro Global). Sejam $u(x_i, y_j)$ e $u_{i,j}$ as soluções exata e aproximada, respectivamente, da Equação (2.7). Então $e_{i,j}$, definido por:

$$e_{i,j} = u(x_i, y_j) - u_{i,j} \quad (2.19)$$

é chamado de erro global.

O erro global está diretamente ligado à convergência de um método numérico. De fato, a convergência de um método garante que, quanto mais refinarmos a malha, mais próximo do resultado exato a aproximação numérica ficará. Por isso, essa é uma propriedade de bastante relevância no contexto de aproximações numéricas.

Outra propriedade relacionada ao erro global é a ordem de consistência, que é um indicativo da velocidade em que se dá a convergência. Ela indica, dessa forma, que um método com erro $O(h^2)$ converge mais rapidamente do que um método com erro $O(h)$. Isso significa, em teoria, que um método com ordem mais alta produz erros menores de aproximação quando comparado com um método de ordem mais baixa, considerando, para tal, o mesmo tamanho de passo h .

2.2 Equações Elípticas com Coeficientes Descontínuas

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) o domínio computacional para o qual a equação elíptica com descontinuidades será resolvida, e Γ a interface interna (composta por um conjunto de pontos irregulares) imersa no domínio Ω . Estamos interessados em resolver o seguinte problema de valor de fronteira (tipo Dirichlet) com coeficientes descontínuos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\beta(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})) &= f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \setminus \Gamma \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde $f(\mathbf{x})$ e $g(\mathbf{x})$ são funções de entrada, avaliadas em $\Omega \setminus \Gamma$, $\partial\Omega$ representa a fronteira de Ω , $u(\mathbf{x})$ é a solução procurada e $\nabla \cdot$ representa o operador de divergência. Assumimos que a função $u(\mathbf{x})$, o termo fonte $f(\mathbf{x})$, e os coeficientes $\beta(\mathbf{x})$ são suaves em $\Omega \setminus \Gamma$.

Por simplicidade de explicação técnica, vamos também assumir que Γ divide Ω em dois subconjuntos disjuntos, $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$, onde Ω^- denota a parte imersa do domínio, delineado por Γ , enquanto que Ω^+ representa a parte externa de Ω (vide Figura 5 para uma ilustração compreendendo os casos de uma e duas dimensões). Além disso, seguindo as ideias postas em (GIBOU; FEDKIW, 2005; MARQUES; NAVE; ROSALES, 2011; CAO *et al.*, 2016; MARQUES; NAVE; ROSALES, 2017), o coeficiente numérico $\beta(\mathbf{x})$ é tomado como uma função constante por partes, isto é,

$$\beta(\mathbf{x}) = \begin{cases} \beta^- & \mathbf{x} \in \Omega^-, \\ \beta^+ & \mathbf{x} \in \Omega^+ \end{cases} \quad (2.21)$$

onde as constantes β^- e β^+ são números reais, não simultaneamente nulos.

Figura 5 – Representação gráfica para problemas unidimensionais (esquerda) e bidimensionais (direita) envolvendo interfaces e/ou discontinuidades. $\Gamma = \{x_\alpha, x_\xi\}$ representa a interface para o caso 1D, enquanto que a curva em vermelho ilustra a interface para o caso 2D.

Conforme indicado pela Equação (2.20), a interface Γ introduz um nível substancial de dificuldade para que se gere numericamente uma aproximação válida para a EDP estudada. Isso significa que, se utilizarmos métodos padrões de Diferenças Finitas para discretizar a EDP (2.20), os saltos de discontinuidades de $u(\mathbf{x})$ ao longo da interface Γ exigiriam a dependência de um número considerável de restrições matemáticas a fim de resolver essa equação numericamente.

De fato, as condições de salto requerem ter inicialmente uma aproximação inicial das derivadas laterais de alta ordem de $u(\mathbf{x})$ nos pontos da interface Γ . Por exemplo, para ilustrar o caso mais simples ($d = 1$), é comum que diversos métodos numéricos façam uso dos seguintes saltos de alta ordem:

$$[u], \quad [\beta u_x], \quad \text{e} \quad [\beta u_{xx}], \quad (2.22)$$

onde $[\cdot]$ denota os saltos em pontos irregulares $x \in \Gamma$ (não necessariamente pertencentes a malha), isto é, $[u] = u^+(x) - u^-(x)$, com

$$u^+(x) = \lim_{w \rightarrow x, w \in \Omega^+} u(w) \quad \text{e} \quad u^-(x) = \lim_{w \rightarrow x, w \in \Omega^-} u(w).$$

Por conta dessas discontinuidades da função, ou seja, por existirem os saltos, equações do tipo (2.20) necessitam de um tratamento especial para serem resolvidas, com base no ajuste de equações de diferenças. A seguir, veremos alguns resultados que possibilitam a realização de tal tratamento numérico.

2.2.1 Métodos de Correções para Diferenças Finitas

É inviável usar um esquema padrão de Diferenças Finitas para resolver um problema do tipo elíptico o qual contenha descontinuidades. Sendo assim, nessa seção apresentaremos as ferramentas teóricas necessárias as quais elucidam como corrigir problemas dessa natureza. Adotaremos como referência o trabalho de Wiegmann e Bube ([WIEGMANN; BUBE, 2000](#)). Primeiramente, iniciaremos com o caso em que se tem $x_\alpha = 0$ como ponto de descontinuidade.

Lema 2. Considere $u^- \in C^{l+1}[-1, 0]$ e $u^+ \in C^{l+1}[0, 1]$. Seja $x_\alpha = 0$ o ponto de interface e

$$u(x) = \begin{cases} u^-(x), & x \leq 0, \\ u^+(x), & x > 0. \end{cases}$$

Então, para $h < 1$ e $h = h^+ + h^-$, temos que:

$$\left| u(h^+) - \sum_{k=0}^l \frac{h^k}{k!} u^{(k)}(-h^-) - \sum_{k=0}^l \frac{(h^+)^k}{k!} [u^{(k)}] \right| \leq \frac{K}{(l+1)!} h^{l+1},$$

onde:

$$K = \max \left(\max_{x \in [-1, 0]} |(u^-)^{l+1}(x)|, \max_{x \in [0, 1]} |(u^+)^{l+1}(x)| \right)$$

Observação 1. Do outro lado da interface, a fórmula de expansão é dada por:

$$u(h^-) = \sum_{k=0}^l \frac{(-h)^k}{k!} (u)^{(k)}(h^+) - \sum_{k=0}^l \frac{(-h^-)^k}{k!} [u^{(k)}] + O(h^{l+1}). \quad (2.23)$$

Após validar a situação em que $x_\alpha = 0$, vamos aplicar esse caso particular para uma interface em um lugar arbitrário entre dois pontos x_j e x_{j+1} , onde $x_{j+1} = x_j + h$.

Lema 3. Seja $x_j \leq x_\alpha < x_{j+1}$, $h^+ = x_{j+1} - x_\alpha$ e $h^- = x_\alpha - x_j$. Suponha $u \in C^4[x_j - h, x_\alpha) \cap C^4(x_\alpha, x_{j+1} + h]$, com derivadas que se estendem continuamente até a interface x_α . Então as

seguintes expressões preservam $O(h^2)$:

$$u_x(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1}))}{2h} - \frac{1}{2h} \sum_{m=0}^2 \frac{(h^+)^m}{m!} [u^{(m)}], \quad (2.24)$$

$$u_x(x_{j+1}) \approx \frac{u(x_{j+2}) - u(x_j)}{2h} - \frac{1}{2h} \sum_{m=0}^2 \frac{(-h^-)^m}{m!} [u^{(m)}], \quad (2.25)$$

$$u_{xx}(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))}{h^2} - \frac{1}{h^2} \sum_{m=0}^3 \frac{(h^+)^m}{m!} [u^{(m)}], \quad (2.26)$$

$$u_{xx}(x_{j+1}) \approx \frac{u(x_{j+2}) - 2u(x_{j+1}) + u(x_j)}{h^2} + \frac{1}{h^2} \sum_{m=0}^3 \frac{(-h^-)^m}{m!} [u^{(m)}]. \quad (2.27)$$

Prova: Para os casos das Equações (2.24) e (2.26), se mudarmos o sistema de coordenadas em $-x_\alpha$, chegaremos ao mesmo caso do Lema 2. Para obter as fórmulas acima, basta usar o Lema 2 para $u(x_{j+1}) = u(h^+)$, e as expansões de Taylor para $u(x_j) = u(-h^-)$ e $u(x_{j-1}) = u(-h^- - h)$.

Já para validar as Equações (2.25) e (2.27), essas podem ser obtidas usando a Expansão (2.23) para $u(x_j) = u(-h^-)$, e as expansões de Taylor para $u(x_{j+1}) = u(h^+)$ e $u(x_{j+2}) = u(h^+ + h)$. Para outros detalhes, veja (WIEGMANN; BUBE, 2000).

Vejamos agora como ficam as correções das equações de diferenças no caso em que temos múltiplas interfaces.

Lema 4. (a) Seja $x_{j-1} \leq x_{\alpha_1} < x_j \leq x_{\alpha_2} < x_{j+1}$, $h_1^+ = x_j - x_{\alpha_1}$, $h_1^- = x_{\alpha_1} - x_{j-1}$, $h_2^+ = x_{j+1} - x_{\alpha_2}$ e $h_2^- = x_{\alpha_2} - x_j$. Suponha $u \in C^4[x_{j-1}, x_{\alpha_1}] \cap C^4(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}) \cap C^4(x_{\alpha_2}, x_{j+1}]$, com derivadas que se estendem continuamente até os subintervalos das interfaces. Então as seguintes expressões preservarão $O(h^2)$:

$$u_x(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1}))}{2h} - \frac{1}{2h} \sum_{m=0}^2 \frac{(-h_1^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} + (h_2^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}, \quad (2.28)$$

$$u_{xx}(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))}{h^2} + \frac{1}{h^2} \sum_{m=0}^3 \frac{(-h_1^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} - (h_2^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}. \quad (2.29)$$

(b) Seja $x_j \leq x_{\alpha_1} < x_{\alpha_2} < x_{j+1}$, $h_1^+ = x_{j+1} - x_{\alpha_1}$, $h_1^- = x_{\alpha_1} - x_j$, $h_2^+ = x_{j+1} - x_{\alpha_2}$ e $h_2^- = x_{\alpha_2} - x_j$. Suponha $u \in C^4[x_j, x_{\alpha_1}] \cap C^4(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}) \cap C^4(x_{\alpha_2}, x_{j+1}]$, com derivadas que se estendem continuamente até os subintervalos das interfaces. Então as seguintes expressões preservarão $O(h^2)$:

$$u_x(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1}))}{2h} - \frac{1}{2h} \sum_{m=0}^2 \frac{(h_1^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} + (h_2^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}, \quad (2.30)$$

$$u_x(x_{j+1}) \approx \frac{u(x_{j+2}) - u(x_j)}{2h} - \frac{1}{2h} \sum_{m=0}^2 \frac{(-h_1^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} + (-h_2^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}, \quad (2.31)$$

$$u_{xx}(x_j) \approx \frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1}))}{h^2} - \frac{1}{h^2} \sum_{m=0}^3 \frac{(h_1^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} + (h_2^+)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}, \quad (2.32)$$

$$u_{xx}(x_{j+1}) \approx \frac{u(x_{j+2}) - 2u(x_{j+1}) + u(x_j)}{h^2} + \frac{1}{h^2} \sum_{m=0}^3 \frac{(-h_1^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_1}} + (-h_2^-)^m [u^{(m)}]_{x_{\alpha_2}}}{m!}. \quad (2.33)$$

A prova desse lema pode ser obtida aplicando o Lema 2.

Observação 2. Se $x_\alpha = x_j$ no Lema 3 ou $x_{\alpha_1} = x_{j-1}$ ou $x_{\alpha_2} = x_j$ no Lema 4, os valores de u e das derivadas em u nesses pontos são indicados pelos limites laterais pela esquerda.

2.3 Erro na Interpolação Polinomial

Esta seção é destinada à análise do erro no processo de interpolação polinomial de pontos unidimensionais distribuídos em uma malha cartesiana. Para tal, considere a seguinte definição:

Definição 3. (Interpolação Polinomial) Dados $n + 1$ pontos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, queremos aproximar $f(x) = y$ por um polinômio $p_n(x)$, de grau menor ou igual a n , tal que:

$$f(x_k) = p_n(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (2.34)$$

À esse processo de aproximação, damos o nome de Interpolação Polinomial.

Proposição 1. (Unicidade na Interpolação Polinomial) Para qualquer conjunto de pares $\{x_i, y_i\}$, $i = 0, \dots, n$, com nós distintos x_i , existe um único polinômio de grau menor ou igual a n , representado por p_n e chamado de polinômio interpolador dos valores y_i nos nós x_i , tal que:

$$p_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n. \quad (2.35)$$

Prova: Suponhamos que existam dois polinômios interpoladores, p_n e q_n , de grau $\leq n$, satisfazendo a Equação(2.35), isto é:

$$p_n(x_i) = q_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

Dessa forma, a diferença $p_n(x) - q_n(x)$, a qual chamaremos de $P_n(x)$, terá grau $\leq n$ e resultará em um polinômio que se anula em seus $n + 1$ pontos distintos, ou seja, tem $n + 1$ raízes.

Fazendo menção ao Teorema Fundamental da Álgebra, podemos afirmar que um polinômio $P_n(x)$, não nulo, de grau n tem no máximo n raízes. Consequentemente, como $P_n(x)$ tem $n + 1$ raízes e seu grau $\leq n$, o polinômio $P_n(x) = p_n(x) - q_n(x)$ terá que ser obrigatoriamente nulo, logo $p_n(x) = q_n(x)$.

Teorema 1. (Erro na Interpolação Polinomial) Considere $n + 1$ pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, tal que $n \geq 0$. Seja f uma função com derivadas contínuas até ordem $n + 1$ no intervalo $I = [x_0, x_n]$ e seja p_n o polinômio que interpola f nos pontos $x_0, \dots, x_n$. Então, para todo $x \in I$, $\exists \xi \in (x_0, x_n)$, tal que:

$$f(x) - p_n(x) = \prod_{k=0}^n (x - x_k) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \quad (2.36)$$

Aqui, a diferença $f(x) - p_n(x)$ é denotada pela função erro $E_n(x)$ obtida ao substituírmos f por seu polinômio interpolador p_n .

Prova: Temos que, para $x = x_k$, $k = 0, \dots, n$, a função $E_n(x)$ se anula. Seja então, um $x \in I$ fixado e diferente de x_k , $k = 0, \dots, n$. Considere nessas condições as seguintes funções:

$$K(x) = \frac{f(x) - p_n(x)}{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)} \quad (2.37)$$

$$F(t) = (f(t) - p_n(t))(t - x_0)(t - x_1) \cdots (t - x_n)K(x). \quad (2.38)$$

Temos que, nos $n + 1$ pontos dados quando $t = x_0, t = x_1, \dots, t = x_n$, e, por conta de (2.37), no ponto $t = x$, a função $F(t)$ se anula. Pelo Teorema de Rolle, existe um ponto $\xi = \xi(x)$ onde a função $F^{(n+1)}(t)$ se anula, tal que:

$$\min\{x_0, x_1, \dots, x_n\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \dots, x_n\}.$$

Calculando então $F^{(n+1)}(t)$, obtemos:

$$F^{(n+1)}(t) = f^{(n+1)}(t) - (n+1)!K(x). \quad (2.39)$$

E, substituindo t por ξ , segue que:

$$F^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - (n+1)!K(x) = 0. \quad (2.40)$$

Logo,

$$K(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \quad (2.41)$$

Substituindo o valor encontrado de $K(x)$ em (2.37), temos, finalmente:

$$E_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \quad (2.42)$$

onde $\min\{x_0, x_1, \dots, x_n\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$, o que demonstra o teorema.

Os resultados do Teorema acima não acontecem na prática, já que não é possível determinar o valor de ξ de modo que a igualdade seja validada. Para isso, usaremos o seguinte resultado.

Corolário 1. (Majorante do Erro da Interpolação Polinomial) Considere $n + 1$ pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, tal que $n \geq 0$. Seja f uma função com derivadas contínuas no intervalo $I = [x_0, x_n]$ até ordem $n + 1$, e seja p_n o polinômio que interpola f nos pontos $x_0, \dots, x_n$. Então o erro da interpolação polinomial satisfaz:

$$\max_{x \in I} |E_n(x)| \leq \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} \max_{x \in I} |f^{(n+1)}(x)|. \quad (2.43)$$

Observação 3. Se os pontos interpolados são igualmente espaçados, isto é, $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$, $n \geq 0$, com $h = x_{i+1} - x_i$, então a fórmula (2.43) se transforma em:

$$\max_{x \in I} |E_n(x)| \leq \frac{\max_{x \in I} |f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!} h^{n+1}. \quad (2.44)$$

Corolário 2. (Majorante do Erro da Interpolação Polinomial para Pontos Equidistantes) Considere $n + 1$ pontos igualmente espaçados tal como em (2.44). Seja f uma função com derivadas contínuas no intervalo $I = [x_0, x_n]$ até ordem $n + 1$, e seja p_n o polinômio que interpola f nos pontos $x_0, \dots, x_n$. Então o erro da interpolação polinomial satisfaz:

$$\max_{x \in I} |E_n(x)| \leq \frac{\max_{x \in I} |f^{(n+1)}(x)|}{4(n+1)} h^{n+1}. \quad (2.45)$$

Observação 4. Caso tenhamos convergência na solução, os resultados em (2.44) e (2.45) nos garantem que o erro obtido na aproximação de f por p_n é de ordem $n + 1$. Além disso, observe também que para até três pontos, isto é, $n \leq 2$, a fórmula (2.45) garante limitantes mais compactos que o majorante genérico (2.44) para o caso de pontos equidistantes.

2.4 Unicidade de Solução para Equações Elípticas: Um Estudo de Caso

Antes de nos preocuparmos com a solução de uma Equação Diferencial, tanto analítica como numérica, cabe primeiro saber sobre sua existência e unicidade. Primeiramente, existe uma solução? Se não, não faz sentido tentar encontrar uma. Se sim, a solução encontrada é unicamente determinada? Caso contrário, a Equação Diferencial provavelmente terá pouca relevância para aplicações físicas, pois não podemos usá-la como uma ferramenta preditiva. Uma vez que as equações diferenciais têm muitas soluções, a única maneira pela qual podemos deduzir a unicidade é impondo condições adequadas iniciais ou de fronteira.

Antes de enunciarmos o Teorema sobre existência e unicidade de soluções, vamos nos atentar para o caso unidimensional do nosso problema. Inicialmente, estamos interessados em resolver:

$$u_{xx}(x) = f(x) \quad (2.46)$$

$$u(x_0) = u_0$$

$$u(x_n) = u_n,$$

de tal forma que, dado x_α , $x_0 < x_\alpha < x_n$, onde x_α representa o ponto de salto de nossa função, temos que:

$$u(x) = u^-(x), \quad x_0 \leq x < x_\alpha$$

$$u(x) = u^+(x), \quad x_\alpha < x \leq x_n.$$

Esse problema é ilustrado na Figura 6. Observe que, se nos atentarmos somente à função $u^-(x)$, e se tivermos o valor de $u^-(x_0) = u(x_0)$, e o limite $u^-(x_\alpha)$, teremos o caso mostrado na Figura 7(a), e o seguinte problema a ser resolvido:

$$u_{xx}^-(x) = f^-(x) \quad (2.47)$$

$$u^-(x_0) = u_0^- \quad (2.48)$$

$$u^-(x_\alpha) = u_\alpha^-, \quad (2.49)$$

Figura 6 – Problema com condições de contorno e com descontinuidade em x_α .

Assim, o nosso problema inicial nos levaria, num primeiro instante, a um problema de valor de contorno para ser resolvido. De modo análogo, se fizermos o mesmo com a função $u^+(x)$, teremos um segundo problema de contorno tal como ilustrado na Figura 7(b):

$$u_{xx}^+(x) = f^+(x) \quad (2.50)$$

$$u^+(x_\alpha) = u_\alpha^+ \quad (2.51)$$

$$u^+(x_n) = u_n^+. \quad (2.52)$$

Podemos perceber, então, que resolver o problema (2.47), quando sabemos os valores de salto de $u^+(x_\alpha)$ e $u^-(x_\alpha)$, seria equivalente a resolver dois problemas de contorno de

Figura 7 – (a) Problema com condições de contorno em x_0 e x_α . (b) Problema com condições de contorno em x_α e x_n .

segunda ordem. Segundo (CUMINATO; MENEGUETTE, 2013), é necessário, no caso do uso de condições de contorno, fixar valores da solução em dois pontos distintos, para que a mesma se propague do valor inicial para o final e vice-versa. Entretanto, nem sempre obter os valores de salto é possível, o que torna a condição de existência e unicidade mais complicada de ser validada na prática. Por isso, é importante ressaltar que, para que o problema tenha solução única, condições de contorno são necessárias. Caso contrário, podemos ter uma família de funções convergindo para uma solução que pode não ser aquela buscada. Finalmente, para o caso contendo duas dimensões, pode-se proceder de forma análoga (a menos de ajustes topológicos e do uso de teoremas válidos para o plano).

Voltando ao problema de existência e unicidade, primeiramente, para o caso unidimensional, temos ainda os seguintes resultados:

Teorema 2. O problema de valor inicial

$$y'' + p(t)y' + q(t)y = f(t) \quad (2.53)$$

$$y(t_0) = t_0$$

$$y'(t_0) = y_0,$$

para $p(t)$, $q(t)$ e $f(t)$ funções contínuas em um intervalo aberto I contendo t_0 , admite solução única neste intervalo.

Teorema 3. Se o problema de valor de contorno:

$$\begin{aligned}y'' &= f(x, y, y') \\ y(a) &= \alpha \\ y(b) &= \beta,\end{aligned}$$

é tal que $-\infty < a < b < \infty$, com α e β constantes arbitrárias, a função f é Lipschitziana com relação à y e y' , f_y é contínua e satisfaz $f_y > 0$, e ainda $f_{y'}$ é limitada para $a \leq x \leq b$ e $-\infty < y < \infty$, então a EDO tem solução única.

As demonstrações de ambos os teoremas acima podem ser encontradas em [Boyce e DiPrima \(2015\)](#).

Mostraremos agora que os resultados enunciados acima podem ser também adaptados para problemas com mais de uma dimensão, tanto para condições de fronteira de Dirichlet, quanto de Neumann.

2.4.1 Unicidade para Condições de Dirichlet

Estamos interessados em mostrar que, se a solução da equação de Poisson existe, é única. Sendo assim, considere o volume fechado V e a superfície fechada S , fronteira de V , onde

$$\nabla^2 u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}). \quad (2.54)$$

Se $u_1(\mathbf{x})$ e $u_2(\mathbf{x})$ são duas soluções da equação de Poisson, ambas satisfazem as mesmas condições de fronteira de Dirichlet, e então $u_1(\mathbf{x}) = u_2(\mathbf{x})$ para todos os pontos $\mathbf{x} \in S$. Assim, segue que $\Phi(\mathbf{x}) \equiv u_1(\mathbf{x}) - u_2(\mathbf{x})$ satisfaz a equação de Laplace $\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}) = 0$, já que $\Phi(\mathbf{x}) = 0$, para todo $\mathbf{x} \in S$.

Desta forma, considere:

$$J \equiv \int_V (\nabla \Phi)^2 dV, \quad (2.55)$$

com $J > 0$, assumindo que $\Phi(\mathbf{x}) \neq c$ em V , para alguma constante c , já que se $\Phi(\mathbf{x}) = c$, então $\nabla \Phi = 0$ para todo $\mathbf{x} \in V$, o que nos levaria à $J = 0$.

Usando a Identidade de Vetores (obtida pela Regra do Produto), temos:

$$\nabla \cdot (\Phi \nabla \Phi) = (\nabla \Phi)^2 + \Phi (\nabla^2 \Phi), \quad (2.56)$$

e segue que, quando Φ satisfaz a equação de Laplace, $\nabla^2 \Phi = 0$, temos que:

$$(\nabla \Phi)^2 = \nabla \cdot (\Phi \nabla \Phi). \quad (2.57)$$

Usando a Equação (2.55), obtemos:

$$J = \int_V \nabla \cdot (\Phi \nabla \Phi) = \oint_S \Phi \hat{n} \cdot \nabla \Phi dS. \quad (2.58)$$

Pelo Teorema da Divergência, sendo V o volume no espaço, com as arestas formando uma superfície S , podemos converter o volume integral sobre V em uma superfície integral sobre a superfície fechada S . Ou seja, podemos escrever

$$J = \oint_S \Phi \frac{\partial \Phi}{\partial n} dS. \quad (2.59)$$

Aplicando esse resultado em $\Phi(\mathbf{x}) \equiv u_1(\mathbf{x}) - u_2(\mathbf{x})$, notamos que $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ para todos $\mathbf{x} \in S$. Portanto, segue, desta forma, que $J = 0$. Mas $J = 0$ é possível somente se $\Phi(\mathbf{x})$ for uma constante em V . Isso significa que, no limite onde $\mathbf{x}$ se aproxima da superfície S , $\Phi(\mathbf{x})$ é uma constante. Consequentemente, essa constante deve ser zero, pois $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ para todo $\mathbf{x} \in S$. Assim, provamos que $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ dentro de V , o que é equivalente à afirmação de que $u_1(\mathbf{x}) = u_2(\mathbf{x})$ para todos os pontos $\mathbf{x} \in V$.

Portanto, fica demonstrado que se $u_1(\mathbf{x})$ e $u_2(\mathbf{x})$ são duas soluções que satisfazem as mesmas condições de fronteira de Dirichlet, então $u_1(\mathbf{x}) = u_2(\mathbf{x})$ para todos os pontos $\mathbf{x} \in V$. Em outras palavras, assumindo que a solução para a Equação (2.54) existe, e é única, sujeita às condições de fronteira de Dirichlet.

2.4.2 Unicidade para Condições de Neumann

No caso do problema com condições de Neumann, vamos considerar como equação-protótipo a seguinte Equação Diferencial Parcial em duas dimensões, isto é, quando $u(\mathbf{x}) = u(x, y)$:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f \quad (2.60)$$

com $u = a(s)$ em Γ_1 e $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = b(s)$ em Γ_2 , e com as duas fronteiras Γ_1 e Γ_2 em torno do domínio R , isto é, $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \partial R$. Aqui, $\mathbf{n}$ denota o vetor normal à curva Γ_2 .

Assuma duas soluções u_1 e u_2 que satisfaçam as seguintes condições:

$$\nabla^2 u_1 = f \text{ em } R \quad (2.61)$$

$$\nabla^2 u_2 = f \text{ em } R \quad (2.62)$$

$$u_1 = a \text{ em } \Gamma_1 \quad (2.63)$$

$$u_2 = a \text{ em } \Gamma_1 \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{n}} = b \text{ em } \Gamma_2 \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}} = b \text{ em } \Gamma_2. \quad (2.66)$$

Seja $u_3 = u_2 - u_1$, ou seja, a diferença entre as duas soluções. Quando subtraímos as Equações (2.61) e (2.62), depois as Equações (2.63) e (2.64) e, por fim, (2.65) e (2.66), obtemos as seguintes Equações Identidade:

$$\nabla^2 u_3 = 0 \text{ em } R \quad (2.67)$$

$$u_3 = 0 \text{ em } \Gamma_1 \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ em } \Gamma_2. \quad (2.69)$$

Pela Regra da Cadeia, temos que:

$$\nabla \cdot (u_3 \nabla u_3) = u_3 \nabla^2 u_3 + \nabla u_3 \nabla u_3, \quad (2.70)$$

e então,

$$\int \int \int \nabla \cdot (u_3 \nabla u_3) dv = \int \int \int u_3 \nabla^2 u_3 dv + \int \int \int \nabla u_3 \nabla u_3 dv. \quad (2.71)$$

Mais uma vez, usando o Teorema da Divergência, chegamos em:

$$\oint u_3 \frac{\partial u_3}{\partial n} ds = \int \int \int u_3 \nabla^2 u_3 dv + \int \int \int \nabla u_3 \nabla u_3 dv. \quad (2.72)$$

Como, pela Equação (2.69), $\frac{\partial u_3}{\partial \mathbf{n}} = 0$, o lado esquerdo da Equação (2.72) fica igual a zero. Da mesma forma, pela Equação (2.67), $\nabla^2 u_3 = 0$, e então o primeiro termo do lado direito da Equação (2.72) também se torna nulo. Assim, ficamos com:

$$\int \int \int \nabla u_3 \nabla u_3 dv = 0. \quad (2.73)$$

Como o produto $\nabla u_3 \nabla u_3$ é não negativo, podemos concluir que ∇u_3 deve ser igual a zero, e então u_3 é constante em toda a região R . Finalmente, como $u_3 = 0$ em Γ_1 (Equação (2.68)), $u_3 = 0$ em R e isso nos garante que $u_1 = u_2$, o que nos mostra que a solução é única para o problema de Poisson.

Na seção a seguir vamos explorar onde as Equações Elípticas são aplicadas dentro do contexto da Mecânica dos Fluidos.

2.5 Aplicação de Equações Elípticas em Mecânica dos Fluidos

As equações para modelar escoamentos são determinadas a partir dos princípios físicos da conservação de massa, conservação de quantidade de movimento e conservação de energia. Nesse contexto, as equações básicas usadas na simulação de escoamentos bifásicos são as Equações de Navier-Stokes incompressíveis, acopladas com a Equação de Conservação de Massa com termo gravitacional e condições de salto na interface, que na forma vetorial podem ser escritas através do seguinte sistema de equações (PIVELLO, 2012):

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.75)$$

onde ρ e μ são a massa específica e a viscosidade dinâmica, respectivamente, p é o termo de pressão, $\mathbf{u}$ é o vetor velocidade, $\mathbf{f}$ é o vetor campo de força externa que atua sobre o escoamento e $\mathbf{g}$ é a aceleração gravitacional.

Como trata-se de um conjunto de equações para modelar um escoamento bifásico incompressível, temos que considerar ρ constante para cada uma das fases, porém diferentes entre si, já que assume valores diferentes para cada fluido. Isto significa que o problema terá saltos de descontinuidades ao longo de uma ou mais interfaces. Assim, considerando esse empecilho, define-se a Equação (2.75) sob a hipótese de que a massa específica permanece constante sobre uma determinada linha de corrente e só varia de uma linha para outra.

Os subíndices $+$ e $-$ são usados para indicar as duas fases utilizadas, isto é, são as regiões de salto das funções (ver Figura 5). Explicitando a densidade e a viscosidade em ambas as fases, temos como simbologia ρ^+ , ρ^- , μ^+ , μ^- tal como já introduzido anteriormente essa notação. Então, é conveniente introduzir condições de saltos ao longo da interface Ω tais como:

$$[\rho]_{\Omega} = \rho^+ - \rho^- \quad (2.76)$$

$$[\mu]_{\Omega} = \mu^+ - \mu^-. \quad (2.77)$$

Na ausência de transferência de massa entre as duas fases, o campo de velocidade é contínuo ao longo da interface, isto é, $[u]_{\Omega} = 0$. Em contraste, a existência da força de tensão superficial induz à uma descontinuidade na tensão normal na interface fluido-fluido. Isso significa que haverá um salto na pressão, o qual pode ser expresso por:

$$[p]_{\Omega} = \sigma \kappa + 2[\mu]_{\Omega} \mathbf{n}^T \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \quad (2.78)$$

onde σ é o coeficiente de tensão superficial, κ é a curvatura da interface e $\mathbf{n}$ a normal à interface (DESJARDINS; MOUREAU, 2009).

Segundo Desjardins e Moureau (2009), independentemente da metodologia empregada para a resolução de tais equações, simulações de escoamento de duas fases incompressíveis são mais difíceis de manipular quando a razão entre os valores de densidade de cada fase aumenta. Tal afirmação, segundo os autores, é explicada, em parte, ao olhar para a equação de Poisson de pressão muitas vezes usada para impor a natureza senoidal do campo de velocidade. Esta equação é, de fato, mal condicionada devido à descontinuidade dos coeficientes do lado esquerdo da equação, a qual pode ser escrita como:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.79)$$

Logo, a Equação (2.79) tem coeficientes descontínuos, porém, com ρ constante por partes. Para ilustrar essa situação, vamos considerar o caso 1D em que existe um (único) ponto de interface x_α no intervalo $\Omega = [0, 1]$, com $0 < x_\alpha < 1$, tal que ρ e, possivelmente, $f(x) = \nabla \cdot \mathbf{u} = u_x$ são descontínuas em x_α , mas contínuas em $[0, x_\alpha)$ e $(x_\alpha, 1]$. Assim, a Equação (2.79) pode ser escrita por:

$$\frac{d}{dx} \left(\beta(x) \frac{d}{dx} p(x) \right) = f(x), \quad (2.80)$$

$$p(0) = p_0 \quad (2.81)$$

$$p(1) = p_1. \quad (2.82)$$

com $\beta = \frac{1}{\rho}$, onde $\rho = \rho^- \chi_{[0, x_\alpha)} + \rho^+ \chi_{(x_\alpha, 1]}$. Ao abrirmos a Equação (2.80), chegamos à seguinte expressão:

$$\beta_x p_x + \beta p_{xx} = f(x), \quad (2.83)$$

com a fórmula (2.78) do salto da pressão sendo dada por:

$$[p] = \sigma \kappa + 2[\mu]f.$$

Conforme (WIEGMANN; BUBE, 2000), é necessário introduzir os saltos de alta ordem da pressão a fim de se obter uma solução para o problema (2.83), mais especificamente:

$$[p_x] = \left(\frac{\beta^-}{\beta^+} - 1 \right) p_x^-, \quad (2.84)$$

$$[p_{xx}] = \left[\frac{f}{\beta} \right], \quad (2.85)$$

$$[p_{xxx}] = \left[\frac{f_x}{\beta} \right]. \quad (2.86)$$

Os saltos da segunda e terceira derivadas são conhecidos, já que β e f são dados. Já o salto da primeira derivada depende da solução da equação, e essa é a maior dificuldade desse tipo de problema. De fato, encontrar esse salto normalmente faz parte do processo da obtenção da solução numérica, o qual nem sempre pode ser reproduzido na prática. No caso em que temos todos os saltos conhecidos, o problema fica passível de ser solucionado numericamente.

Em contraste com as restrições de salto exigidas por (WIEGMANN; BUBE, 2000) e demais trabalhos da literatura, a metodologia ora apresentada nesta tese não requer lidar

com saltos complexos tais como a da primeira derivada (2.84), tampouco com qualquer outro salto de alta ordem como aqueles explicitados em (2.85)-(2.86). Assim, é razoável esperar que a metodologia proposta possa produzir soluções condizentes com aquelas obtidas por (WIEGMANN; BUBE, 2000) para o problema acima.

Embora o foco desta pesquisa seja apresentar um novo método numérico para modelar equações elípticas em domínios arbitrários com interface, é importante salientar que uma das pretensões futuras da pesquisa corrente é aplicar tal metodologia em contextos diversos os quais envolvem simulações multifásicas modeladas via Navier-Stokes. De fato, alguns autores tem despendidos esforços para resolver esse tipo de problema a partir de poucas informações iniciais disponíveis, sendo este ainda um problema em aberto com um número limitado de soluções particulares.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo apresentamos uma revisão da literatura envolvendo diversos métodos numéricos que são utilizados para resolver problemas de interface com descontinuidades, dando um maior enfoque às técnicas computacionais de mesma categoria da metodologia proposta neste trabalho.

3.1 Métodos para Problemas de Interface: Motivação e Contextualização

Ultimamente tem existido um grande interesse no desenvolvimento de métodos numéricos para problemas de interface, que são problemas onde o domínio de resolução do problema é subdividido em partes para atuar com as descontinuidades (para uma ilustração, vide Figura 8). Por exemplo, a simulação de bolhas de gás em um líquido (ver Figura 9) se enquadra nesse tipo de problema, ou ainda, podemos citar a geração de sprays para combustão, pintura, revestimento, irrigação e umidificação (vide Figura 10), onde o jato de líquido é injetado em uma corrente de ar (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011).

Comparados com métodos para fluidos de uma fase só, os algoritmos para simulação de escoamento de fluidos multifásicos acrescentam certas dificuldades no estudo do problema. Primeiro, a forma da interface pode ser complexa e sofrer transformações ao longo do curso

Figura 8 – Diagrama de um domínio retangular $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$ com uma interface Γ (uma elipse).

Figura 9 – Ilustrações em diferentes tempos ($t = 0, 0.1, 0.2$ e 0.3) de cinco bolhas inicialmente esféricas em um líquido inicialmente em repouso em uma coluna retangular. FONTE: (ANNALAND *et al.*, 2006).

da simulação. Depois, nem sempre é praticável empregar uma malha irregular para se ajustar à interface que se move ao longo do tempo. Outro ponto importante a ser tratado é que os fluxos variáveis e suas derivadas podem ser descontínuos através da interface, daí, condições específicas de salto na interface dependem das propriedades físicas do problema, da instabilidade da interface, e das características geométricas da interface. Desta forma, tratamentos diferenciados são necessários para calcular adequadamente as equações em pontos tidos como irregulares (adjacentes à malha).

Figura 10 – Pintura em spray virtual de uma porta de carro utilizando o software IPS Virtual Paint. (CAD geometry cortesia da Volvo Car Corporation). FONTE: ([ANDERSSON, 2013](#)).

Problemas de interface onde temos, na maioria das vezes, uma solução que é descontínua, não se limitam a apenas modelar escoamentos de fluidos para problemas de engenharia. Há diversas aplicações que podem ser citadas a fim de ilustrar a importância em se resolver esse tipo de problema. De fato, veremos algumas delas a seguir.

- **Aplicações em contextos da biologia:**

- Os métodos numéricos para problemas com interface/descontinuidades podem ser utilizados para rastrear a morfologia da membrana celular durante a citocinese. A citocinese, para uma célula animal, é o processo pelo qual uma célula divide seu citoplasma para produzir duas células filhas, após a formação completa de dois novos núcleos ([SILVA, 2016](#)). Em ([LI; YUN; KIM, 2012](#)), os autores propõem um modelo matemático para minimizar a citocinese, e simulam sua evolução, utilizando um Método de Fronteira Imersa (ver Figura [11](#)).

Figura 11 – Simulação da evolução da citocinese. FONTE: (LI; YUN; KIM, 2012).

Figura 12 – Simulação dos movimentos de uma libélula. Fonte: (DONG *et al.*, 2010).

- Outra aplicação para esse tipo de modelagem seria a simulação de desempenho aerodinâmico associado às asas de libélulas. Segundo Dong *et al.* (2010), as libélulas são candidatas potenciais para o desenvolvimento de veículos micro-aéreos de inspiração biológica (MAVs) que podem combinar o desempenho flutuante e manobra dos insetos alados. A partir dos dados coletados, tem-se a análise dos ângulos de Euler do movimento do corpo e da cinemática da asa, em adição à outras simulações de natureza numérica (vide Figura 12).

- **Aplicações em áreas da medicina:**

- Métodos destinados ao tratamento de interfaces, mais especificamente o Método

Figura 13 – Modelagem de um aneurisma na parede do vaso sanguíneo. Fonte: (SEO *et al.*, 2015).

de Fronteira Imersa, tem sido utilizados no auxílio em procedimentos médicos relacionados ao fluxo sanguíneo ou problemas de coração. Sabemos que fazer experiências com um coração humano real não é viável, porém, fazer os mesmos experimentos a partir de modelos matemáticos precisos, pode conduzir à uma melhor compreensão dos processos reais envolvidos (PESKIN, 1982). Neste caso, a geometria do coração pode ser modelada pelas equações regidas pela Lei de Hooke, enquanto as equações de Navier-Stokes modelam a corrente sanguínea dentro e em volta do coração. Como o formato do coração está em constante mudança, o problema tem uma interface que se move ao longo do tempo, dificultando assim, sua resolução. Como ilustração de problemas ou patologias ligadas ao fluxo sanguíneo, podemos citar o modelo de um aneurisma ¹, que pode ser visto na Figura 13, modelado por um método para resolver problemas com interfaces ou geometrias complexas (SEO *et al.*, 2015).

- Outro exemplo que pode ser citado na área médica é o ilustrado na Figura 14, que representa a simulação numérica da motilidade espermática, que se refere a

¹ Aneurisma é uma protuberância patológica localizada na parede do vaso sanguíneo, em especial de uma artéria.

capacidade de locomoção dos espermatozóides, em outras palavras, espermatozóides que não se movem, não possuem motilidade e dificultam, assim, a capacidade reprodutiva do homem. Nesse caso, também é utilizado um Método de Fronteira Imersa.

Figura 14 – Simulação de motilidade espermática usando o método de Fronteira Imersa. Fonte: (BOLIS, 2013).

- A modelagem de diversas partes internas do corpo humano também pode ser obtida através desse tipo de método, como por exemplo, a cóclea, que é a parte auditiva do ouvido interno e é composta por células que vibram de acordo com o som. É na cóclea que a energia mecânica do som é transmitida ao cérebro, e a modelagem da onda dessa transmissão, pode ser vista na Figura 15.

Em todos esses problemas, há a presença de descontinuidades nas interfaces, que podem ser causadas tanto pela manifestação da tensão superficial, como pela diferença entre propriedades como viscosidade e massa específica, no caso dos escoamentos multifásicos. Existem vários métodos para tratar essas descontinuidades. Veremos alguns deles a seguir.

Figura 15 – Modelagem da onda de transmissão da cóclea, utilizando o Método de Fronteira Imersa. Fonte: (HOSSEINI, 2013)

3.2 Métodos Numéricos para Resolução de Problemas de Interface: Estado-da-Arte

Um dos mais populares métodos no tratamento de interface com descontinuidades é o Método de Fronteira Imersa, IBM (do inglês, *Immersed Boundary Method*), originalmente desenvolvido por Peskin (1972) para simular o fluxo de sangue no coração.

A ideia básica do Método de Fronteira Imersa é modelar a interface através da adição de um termo fonte. No caso das equações de Navier-Stokes, esse termo fonte é uma função delta (vide Figura 16) que pode ser substituída por alguma aproximação discreta d_h a qual depende do passo escolhido. Um exemplo desse tipo de aproximação, é a função discreta utilizada por Peskin (1972):

$$d_h(x) = \begin{cases} \frac{1}{4h}(1 + \cos(\frac{\pi x}{2h})), & \text{se } |x| < 2h \\ 0, & \text{se } |x| \geq 2h. \end{cases}$$

As equações resultantes são, então, discretizadas por um método padrão de Diferenças Finitas numa malha cartesiana. Desde sua criação, o Método de Fronteira Imersa tem sido usado amplamente para solucionar problemas em diversas áreas.

Figura 16 – Diferentes fontes de distribuição da função delta. FONTE: (MITTAL; IACCARINO, 2005).

No entanto, há algumas desvantagens no uso do IBM. Primeiro, de acordo com Zhong (2007), esse método não consegue alta ordem de precisão para o cálculo do escoamento de duas fases com soluções descontínuas ao longo de uma interface, a menos que a função delta utilizada no método seja escolhida cuidadosamente como uma função suave e fixa, que independe da malha, obtendo-se, assim, segunda ordem de precisão. Depois, observou-se que a fronteira imersa fechada tende a perder lentamente seu volume envolvido, como se o fluido interno à fronteira estivesse vazando de dentro para fora.

Nos últimos anos, diversas pesquisas foram conduzidas com o intuito de melhorar o método clássico de Fronteira Imersa. Por exemplo, analisando o problema de vazamento no método original, Peskin e Printz (1993) descobriram que a perda de volume, quando há uma fronteira imersa, é causada pela violação da condição de divergência livre das partículas Lagrangianas, e publicaram uma análise mais detalhada desse erro. A partir disso, várias análises e melhorias do método foram desenvolvidas, incluindo o estudo de análise de estabilidade e uma versão adaptativa, conforme foi apresentado por Xu e Wang (2005). Apesar das melhorias, o método ainda carece de alguns cuidados como, por exemplo, o emprego de muitas condições iniciais de contorno na interface para serem efetivos.

Uma alternativa para o Método de Fronteira Imersa é incorporar um termo de correção para os saltos no esquema de Diferenças Finitas padrão. É o que acontece no Método de

Interface Imersa, introduzido por [LeVeque e Li \(1997\)](#) para resolver equações elípticas da forma:

$$(\beta u_x)_x + \kappa u = f, \quad (3.1)$$

onde, a título de ilustração, foi considerado o caso 1D em que β é uma função descontínua em $x = x_\alpha$, e f e κ são funções suaves. Além disso, as condições iniciais de salto $\widehat{C} = [u]$ e $C = [\beta u_x]$ são mandatórias para o funcionamento adequado da técnica. Logo, ao incorporar essas condições à Equação (3.1), obtemos:

$$(\beta u_x)_x + \kappa u = f + C\delta(x - x_\alpha) + \frac{1}{2}(\beta^- + \beta^+)\widehat{C}\delta'(x - x_\alpha). \quad (3.2)$$

Dessa forma, a ideia do IIM é representar uma singularidade de modo que as variáveis de campo e/ou suas derivadas serão descontínuas na interface imersa. Assim, para tratar essa descontinuidade na interface, os coeficientes para o cálculo das derivadas são modificados para a obtenção da solução numérica. Finalmente, os termos de correção $\widehat{C} = [u]$ e $C = [\beta u_x]$ são adicionados do lado direito da equação base a fim de se obter uma resolução numérica praticável para o problema.

É comum que, no IIM, os erros locais de truncamento sejam maiores em pontos que estão próximos à interface, comparados aos pontos da malha que estão distantes da interface. De fato, isso é esperado, já que os ajustes às equações regulares de Diferenças Finitas são definidos em pontos próximos à interface simulada.

De acordo com [Li e Ito \(2006\)](#), o IIM é um método de interfaces bem definido, no qual as descontinuidades ou as condições de salto são fornecidas, de alguma forma, com base na solução analítica do problema. Assim, é crucial para o Método de Interface Imersa ter um conhecimento *a priori* das condições de salto, obtidas a partir de informações dos conceitos físicos do problema ou de suas equações diferenciais governantes. Além disso, nos pontos próximos ou sobre a interface, é necessário destinar uma atenção especial para a modelagem numérica do problema. Por outro lado, para modelar pontos longe da interface, emprega-se o Método de Diferenças Finitas usual. Segundo os autores, a utilização de uma estrutura de dados simples para armazenar uma malha fixa e uniforme torna fácil o uso do método para a solução de problemas com interfaces mais complexas, com custo computacional razoável e boa precisão.

De um modo geral, o IIM tem se manifestado de forma mais recorrente em problemas envolvendo equações elípticas (ZHAO; HOU; LI, 2012; ZHOU *et al.*, 2006; ZHONG, 2006; LI; ITO, 2006; WIEGMANN; BUBE, 2000). Porém, desde de que o método clássico foi originado, alguns autores já o estenderam para a resolução de outros tipos de problemas, como por exemplo, para resolução de equação de Stokes (LEVEQUE; LI, 1997), equações parabólicas não-lineares (WIEGMANN; BUBE, 1998), equações de Navier-Stokes incompressíveis (XU; WANG, 2005; LI; LAI, 2001; LEE; LEVEQUE, 2003; LINNICK; FASEL, 2004; TAN *et al.*, 2009), entre outros.

No trabalho apresentado por Zhao, Hou e Li (2012), os autores usam uma malha cartesiana uniforme e utilizam um polinômio de segunda ordem para aproximar a solução de uma equação elíptica com presença de descontinuidade, obtendo assim, um método de segunda ordem para problemas com interface. A ideia desse método e todo o seu desenvolvimento é muito similar à metodologia apresentada por LeVeque e Li (1997). Neste caso, os saltos $\hat{C} = [u]$ e $C = [\beta u_x]$ também são necessários e devem ser acomodados ao lado direito da Equação Elíptica (3.1) na forma de condições iniciais do problema, entretanto, os limites laterais dos saltos são aproximados em termos de polinômios da forma:

$$p(\xi) = \begin{cases} p^-(\xi) = \frac{1}{2}a_-\xi^2 + b_-\xi + c_-, & \text{se } \xi \leq \eta \\ p^+(\xi) = \frac{1}{2}a_+\xi^2 + b_+\xi + c_+, & \text{se } \xi > \eta. \end{cases}$$

onde ξ e η são resultados de uma transformação linear feita a fim de facilitar os cálculos e $p(\xi)$ deve satisfazer todas as condições de salto impostas ao problema.

Já no trabalho que foi apresentado por Zhong (2007), um novo Método de Interface Imersa de alta ordem para escoamentos multifásicos utilizando as equações de Navier-Stokes seria apresentado, mas os autores se limitaram também à equações elípticas, mais especificamente à equação de Poisson com descontinuidade, e os trabalhos posteriores do mesmo autor foram direcionados para outras aplicações (GREENE *et al.*, 2016; DUAN; WANG; ZHONG, 2013). A vantagem desse método em relação ao Método de Interface Imersa original é que, com as mesmas informações iniciais do salto da função e de sua derivada primeira, ou seja, conhecendo $[u]$ e $[u_x]$, os autores obtiveram um método de quarta ordem de precisão. A desvantagem é que, comparado com o método IIM original, esse método leva à um estêncil da

malha mais amplo, o que faz com que o problema leve muito mais tempo para ser resolvido computacionalmente.

Outra modificação no Método de Interface Imersa que resulta em alta ordem, é o apresentado por [Linnick e Fasel \(2004\)](#). Segundo [Zhong \(2007\)](#), ao invés de usar soluções analíticas para as condições de salto, os autores as obtêm numericamente. Nesse trabalho, a ideia principal do IIM é que o esquema de Diferenças Finitas em uma interface imersa seja corrigido para manter a precisão formal do esquema numérico associado. Assim, os autores utilizam Diferenças Finitas compactas na discretização da equação, mostrando obter quarta ordem de precisão no Método de Interface Imersa para simular escoamentos passando por cilindros. Se tivermos, por exemplo, uma função $u(x)$ dada por:

$$u(x) = \begin{cases} u^-(x) & \text{se } x \in \Omega^- \\ u^+(x) & \text{se } x \in \Omega^+. \end{cases}$$

onde Ω^- representa a região do cilindro imerso, e Ω^+ a região externa ao cilindro, é sabido para esse tipo de aplicação que u^- será uma função nula. Neste caso, só restaria saber o valor de u^+ , a fim de estimar o valor do salto da função. Os autores não utilizam o método para resolver equações com ambas as funções não nulas, mas, a partir de ajustes e da introdução de alguns limites laterais, é possível de se obter uma solução para este caso também.

Além de modificações no Método de Interface Imersa original, novos métodos baseados no IIM também foram desenvolvidos, como, por exemplo, o caso do método apresentado por [Wiegmann e Bube \(2000\)](#). Os autores desenvolveram o Método de Interface Imersa com Salto Explícito, EJIIM (do inglês, *Explicit Jump Immersed Interface Method*). Esse método, segundo [Li e Ito \(2006\)](#), funciona focando nos saltos da solução e de suas derivadas, ao contrário do que acontece no IIM original, onde coeficientes são “procurados” para cada novo esquema de Diferenças Finitas. Isto explica o nome “salto explícito” (do inglês *explicit jump*). Se nós conhecemos as condições de salto em $[u], [u_x], [u_y], [u_{xx}], [u_{yy}]$, e assim por diante, então nós podemos usar um método padrão de Diferenças Finitas em todos os pontos regulares e acrescentar um salto nos pontos irregulares. A vantagem do EJIIM é que ele expressa todos os

saltos em termos de constantes e limita os valores em um lado particular (direito ou esquerdo do salto), por exemplo, u^- , u_x^- , etc. Os autores resolvem equações elípticas em duas dimensões com três tipos de condições de salto, e mostram que, para os casos exemplificados, o método obtém segunda ordem de precisão.

Outra modificação do IIM pode ser vista em (ZHOU *et al.*, 2006), onde os autores introduzem o MIB (do inglês *Matched Interface and Boundary*). O método MIB, assim como o IIM, modifica o esquema de Diferenças Finitas para os pontos próximos à interface adicionando condições físicas de salto, mas, por outro lado, essas condições não são associadas à discretização da EDP estudada. Assim, na verdade, os autores empregam as condições de salto para determinar pontos fictícios (não regulares) a serem contabilizados nas equações de diferenças. Dada uma equação do tipo (3.1), com β constante por partes e sabendo as condições de salto $[u]$ e $[\beta u_x]$, os autores obtém alta ordem de precisão. Em (XIA; ZHAN; WEIA, 2014), os autores apresentaram uma modificação para o MIB, o método MIB Galerkin, uma combinação do MIB com a formulação Galerkin, utilizando elementos em uma malha triangular e elementos finitos. Nesse trabalho, os autores apresentam uma crítica sobre o método MIB original mostrando as principais diferenças e semelhanças entre o MIB e a nova abordagem, os quais podemos citar:

- O método MIB original requer muitos esquemas especiais para lidar com singularidades geométricas; o método MIB Galerkin é bastante simples quando lida com vários tipos de geometrias (ver Figura 17).
- O MIB emprega malhas cartesianas simples, em contraste, a abordagem MIB Galerkin utiliza os elementos triangulares, que são gerados pela introdução de linhas diagonais na grade cartesiana original.
- No método MIB, a aplicação das condições de salto são feitas separadamente da discretização da Equação Diferencial governante. Isso faz com que a técnica desenvolvida sirva para a resolução de um bom número de casos. De fato, este recurso é mantido na formulação MIB Galerkin.

Assim como nos métodos apresentados anteriormente, o MIB Galerkin necessita ter a

Figura 17 – Solução numérica obtida (esquerda) e erro (direita) em uma malha 80×80 com a geometria imersa na forma de uma estrela. FONTE:(XIA; ZHAN; WEIA, 2014).

mão as condições de salto da função e de sua derivada primeira para que se obtenha segunda ordem de precisão a partir do uso do referido método.

Outro método popular para a resolução de problemas de interface é o GFM, do inglês *Ghost Fluid Method*, apresentado por Fedwik *et al.* (1999), originalmente criado para resolver escoamentos compressíveis de duas fases. A ideia central do GFM é introduzir domínios artificiais e pontos fantasmas perto da interface de dois subdomínios diferentes. O GFM foi utilizado com sucesso por Liu, Fedkiw e Kang (2000) para obter uma aproximação com primeira ordem de precisão quando aplicado a problemas de interface, em particular para aproximar equações elípticas (3.1) definidas em geometrias irregulares, nas quais a solução pode ser descontínua. Como condições iniciais, mais uma vez são necessários os saltos da função $[u]$ (solução) e de sua primeira derivada $[\beta u_x]$.

Em (GIBOU *et al.*, 2002), os autores resolvem equações elípticas da forma (3.1), com $\kappa = 0$, definindo pontos fantasmas em torno da interface, a fim de acrescentá-los às fórmulas de Diferenças Finitas. Em todos os exemplos apresentados, o domínio externo à interface é nulo, ou seja, os autores interpolam os limites unilaterais de um dos lados da interface, por exemplo $u^-(x)$, enquanto $u^+(x)$ é definido como zero no subdomínio não imerso e, assim, segunda ordem é alcançada. Os mesmos autores em (GIBOU; FEDKIW, 2005), descrevem uma discretização para a equação de Laplace e para a equação do calor, com condições de fronteira de Dirichlet em domínios irregulares, usando pontos fantasmas que são obtidos através de

extrapolações e ajustes de mínimos quadrados. Condições de salto para a função e para sua primeira derivada são requeridas e pode-se obter, no caso da equação de Laplace, primeira ordem, usando extrapolação constante, segunda ordem, quando usada a extrapolação linear, e terceira ou quarta ordem, se usarmos extrapolação quadrática ou cúbica, respectivamente. Em (GIBOU; MIN; FEDKIW, 2013) há uma revisão de alguns dos métodos numéricos para resolver as equações de Poisson em domínios irregulares (ver Figura 8) usando o GFM para impor as condições de contorno de Dirichlet no limite do domínio.

Uma modificação do GFM é apresentada por Marques, Nave e Rosales (2011). Neste trabalho, os autores apresentam um método para resolver a equação de Poisson satisfazendo:

$$\nabla^2 \mathbf{x} = f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega \quad (3.3)$$

$$u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (3.4)$$

$$[u]_{\Gamma} = a(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma \quad (3.5)$$

$$[u_{\mathbf{n}}]_{\Gamma} = b(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (3.6)$$

Observe que, além do salto de ordem zero da função, deve-se também conhecer os saltos da derivada da função com relação à normal à interface analisada Γ . Os autores afirmam que obter alta ordem de precisão com a abordagem “padrão” do GFM é muito difícil, então os mesmos generalizaram os termos de correção do método para uma função de correção definida ao redor da interface. Nessa abordagem, o esquema é baseado em: (i) discretização padrão do estêncil de 9 pontos da equação de Poisson, obtendo assim, quarta ordem de precisão, (ii) representação da função de correção em termos de bicúbicos, e (iii) uma solução da função de correção da Equação Diferencial Parcial é encontrada usando minimização de mínimos quadrados. Em seu trabalho, os autores apresentam algumas aplicações a fim de ilustrar os resultados produzidos com o método proposto.

Posteriormente, os mesmos autores apresentaram em (MARQUES; NAVE; ROSALES, 2017), um algoritmo para resolver o mesmo tipo de problema de interface com um método baseado em uma combinação do Método de Função de Correção, CFM (do inglês *Correction Function Method*) e dos Métodos Integrados de Limite, BIM (do inglês, *Boundary Integral Methods*). As condições de interface e contorno são tratadas usando equações integrais de limites e o BIM associado. Como o BIM é um método custoso quando há necessidade da solução

em todos os pontos da malha, os autores utilizam o CFM para contornar esse problema. O CFM é usado para resolvê-los com Diferenças Finitas e uma solução de Fourier. No trabalho supracitado, são apresentados exemplos em duas dimensões que produzem soluções convergindo para terceira ou quarta ordem, dependendo do grau de descontinuidade do problema.

No próximo capítulo é apresentado todo o detalhamento da metodologia proposta nesta pesquisa de doutorado, a qual apresenta como principal inovação um método numérico com dependência de apenas o salto de ordem zero da função para que se obtenha uma solução numérica para problemas elípticos com interface. Além disso, é possível também controlar a ordem de precisão do método, resultando, inclusive, em aproximações de alta ordem quando necessário.

METODOLOGIA

Este capítulo é destinado à apresentação da técnica numérica proposta neste trabalho para a resolução de equações elípticas em domínios com interfaces. A seguir detalhamos cada uma das abordagens propostas, além de todo o ferramental numérico empregado para a construção do método proposto.

4.1 Aproximação de Diferenças Finitas

Começamos a nossa discussão considerando, em primeiro lugar, a formulação unidimensional do problema, onde o domínio computacional de entrada $\Omega = [a, b]$ é dividido em uma malha uniforme de $(n + 1)$ pontos x_i com passo h :

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad h = (b - a)/n. \quad (4.1)$$

Observe que, no caso unidimensional, um número finito de pontos de descontinuidade estabelece as interfaces dentro de Ω . Para simplificar, consideremos dois pontos de descontinuidades $x = x_\alpha$ e $x = x_\xi$ para definir as interfaces do nosso problema, que são assumidas como pontos arbitrários irregulares (não necessariamente pontos da malha), isto é: $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$ e $x_j < x_\xi < x_{j+1}$. Isso dá origem ao subdomínio imerso $\Omega^+ = (x_\alpha, x_\xi)$, e também sua contraparte mais externa $\Omega^- = [a, x_\alpha] \cup [x_\xi, b]$ (veja Figura 18).

Figura 18 – Diagrama para problemas descontínuos unidimensionais com interfaces em $x = x_\alpha$ e $x = x_\xi$.

Queremos aproximar a solução $u = u(x)$ do seguinte problema elíptico de interface com saltos (descontinuidades):

$$u_{xx} = (\beta(x))^{-1} f(x), \quad x \in \Omega \setminus \Gamma, \quad (4.2)$$

$$u(a) = u_a,$$

$$u(b) = u_b.$$

onde $\Gamma = \{x_\alpha, x_\xi\}$, e $f = f(x)$ é uma função definida em $\Omega \setminus \Gamma$. Aqui, assume-se que u e o termo fonte f são duas funções suaves em $\Omega \setminus \Gamma$. Além disso, em conformidade com (WIEGMANN; BUBE, 2000; GIBOU; FEDKIW, 2005; ZHOU *et al.*, 2006; MARQUES; NAVE; ROSALES, 2011; CAO *et al.*, 2016; MARQUES; NAVE; ROSALES, 2017), $\beta = \beta(x)$ é uma função constante por partes, isto é:

$$\beta = \begin{cases} \beta^-, & x \in \Omega^- \\ \beta^+, & x \in \Omega^+ \end{cases}, \quad (4.3)$$

onde as constantes reais β^- e β^+ são não nulas, para que faça sentido o problema estudado.

Como condição de salto para o problema de interface (4.2), tomamos como restrição inicial apenas os saltos de ordem zero de u :

$$[u]_{x_\alpha} = u_{x_\alpha}^+ - u_{x_\alpha}^- \quad (4.4)$$

$$[u]_{x_\xi} = u_{x_\xi}^+ - u_{x_\xi}^-, \quad (4.5)$$

onde a notação $u_{x_\alpha}^+$ se refere ao limite lateral pela direita, e $u_{x_\alpha}^-$ o limite pela esquerda, isto é,

$$u_{x_\alpha}^+ = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^+} u(x)$$

$$u_{x_\alpha}^- = \lim_{x \rightarrow x_\alpha^-} u(x).$$

Deste modo, vamos empregar um esquema de Diferenças Finitas a fim de discretizar a Equação (4.2) (a priori, usaremos um esquema de segunda ordem). Entretanto, em razão da descontinuidade de u nos pontos de interface, temos, na verdade, três possibilidades distintas ao aproximar a Equação (4.2) de modo a ajustar à equação base as fórmulas de Diferenças Finitas, em particular para os pontos regulares próximos à interface x_α e x_ξ . Na sequência, discutiremos cada uma dessas três situações.

4.1.1 Caso 1: Aproximação via Diferenças Finitas Padrão

Se qualquer uma das interfaces não interceptar qualquer par de pontos regulares emoldurados pelo estêncil, por exemplo, se x_α não estiver nos intervalos $[x_{i-1}, x_i]$ e $[x_i, x_{i+1}]$, simplesmente aplicamos um esquema de Diferenças Finitas padrão para discretizar a Equação (4.2). Por exemplo, o uso do esquema explícito de segunda ordem de Diferenças Finitas clássico com $L_{i-1} = L_{i+1} = 1/h^2$ e $L_i = -2/h^2$ nos dá a seguinte aproximação:

$$L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1}u_{i+1} = \beta_i^{-1} f_i. \quad (4.6)$$

Note que, neste caso, a ordem de precisão com relação à expressão acima pode ser aumentada à medida que novos pontos da malha são incorporados à equação de diferenças, permitindo, assim, aproximações mais precisas.

4.1.2 Caso 2: Aproximação Baseada em Pontos Fantasmas

Se $x_i \in \Omega^-$ e $x_{i+1} \in \Omega^+$ com $x_i < x_\alpha < x_{i+1}$, (tal como ilustrado na Figura 19(a)), temos então que reescrever a equação de Diferenças Finitas de tal forma que o salto da função em $x = x_\alpha$ (Eq. (4.4)) seja devidamente acomodado nas fórmulas de aproximação. Com este intuito e com o objetivo de obter um método de DF de segunda ordem, precisamos garantir que todos os pontos do estêncil preservem um comportamento similar, de forma que a solução

u^- deverá ser totalmente preservada em Ω^- e, ao mesmo tempo, propagada também para Ω^+ . Assim, se o ponto da malha x_{i+1} não faz parte de Ω^- , criamos então um nó fantasma $\tilde{x}_{i+1}$ como um ponto adicional (e estritamente vinculado) a x_{i+1} o qual complementar os nós regulares x_{i-1} e x_i no estêncil mais à esquerda avaliado em Ω^- . Como resultado, temos o seguinte esquema de Diferenças Finitas para discretizar a Equação de Poisson (4.2):

$$L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1} \tilde{u}_{i+1} = \beta_i^{-1} f_i. \quad (4.7)$$

Figura 19 – Diagrama numérico representando os casos 2 e 3, respectivamente. (a) O estêncil é posicionado tal que a interface x_α está entre $x_i \in \Omega^-$ e $x_{i+1} \in \Omega^+$. Neste caso, um nó fictício foi introduzido como um ponto extra associado ao ponto regular x_{i+1} . (b) Já nesta configuração do estêncil, este foi movido de forma que $x_{i-1} \in \Omega^-$ e $x_i \in \Omega^+$.

Note que na fórmula (4.7) tem-se que u_{i+1}^- foi introduzido na equação de diferenças como um ponto fantasma. Então, ao se fazer isso, espera-se que $\tilde{u}_{i+1}$ mantenha o mesmo “padrão de aproximação” de u^- , estendendo-se assim do subdomínio Ω^- para Ω^+ . Além disso, esta inclusão evita o uso de condições de salto adicionais para lidar com interfaces como aquelas apresentadas em (2.22), em particular derivadas de alta ordem como a derivada primeira, condição essa exigida praticamente por quase todas as técnicas existentes na literatura.

4.1.3 Caso 3: Aproximação de Diferenças Finitas com Salto Único

Este caso compreende a interface que separa o domínio Ω em $x_{i-1} \in \Omega^-$ e $x_i \in \Omega^+$, isto é, $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$ (veja Figura 19(b) para uma ilustração gráfica). Isto significa que o

estêncil está centrado em $x = x_i$ e todos os pontos próximos à ele devem ser avaliados como parte (ou extensão) da região mais interna Ω^+ . Note que, os pontos da malha x_i e x_{i+1} são naturalmente impostos como nós regulares para o esquema de Diferenças Finitas de três pontos anteriormente adotado, enquanto que x_{i-1} deve ser ajustado (corrigido) de forma a levar em consideração a correção de u em $x = x_\alpha$ na expressão de Diferenças Finitas resultante.

Devido à descontinuidade de u em $x = x_\alpha$, ao realizarmos uma expansão em séries de Taylor com o intuito de aproximar $u(x_{i-1})$, tal operação torna-se totalmente inviável a menos que um termo de correção C_{x_α} seja incluído:

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) - u'(x_i)h + u''(x_i)\frac{h^2}{2!} - \dots + C_{x_\alpha}, \quad (4.8)$$

onde

$$C_{x_\alpha} = -[u]_{x_\alpha} + [u']_{x_\alpha}h^- - [u'']_{x_\alpha}\frac{(h^-)^2}{2!} + \dots - [u^{(n)}]_{x_\alpha}\frac{(-h^-)^n}{n!}, \quad (4.9)$$

com $h = x_i - x_{i-1}$ representando o espaçamento da malha, $h^- = x_\alpha - x_{i-1}$ e

$$[u^{(j)}]_{x_\alpha} = u_+^{(j)}|_{x_\alpha} - u_-^{(j)}|_{x_\alpha}$$

sendo a condição de salto da j -ésima derivada de u em $x = x_\alpha$, $j = 0, 1, 2, \dots, n$. Para a demonstração do resultado da fórmula corrigida (4.8) acima, revise a Seção 2.2.1.

O par de Equações (4.8)-(4.9) nos permite incluir formalmente o ponto regular $x_{i-1} \in \Omega^-$ como um nó intrínseco (e corrigido) dentro do estêncil posicionado mais à Ω^+ . Assim, tomando-se $n = 3$ para assegurar aproximações de segunda ordem e expandindo $u(x_{i+1})$ em termos de x_i temos, juntamente com a fórmula de correção (4.8), as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} u(x_{i-1}) &= u(x_i) - u'(x_i)h + u''(x_i)\frac{h^2}{2!} - u'''(x_i)\frac{h^3}{3!} + C_{x_\alpha}, \\ u(x_{i+1}) &= u(x_i) + u'(x_i)h + u''(x_i)\frac{h^2}{2!} + u'''(x_i)\frac{h^3}{3!}. \end{aligned}$$

Somando-se as duas equações, chegamos em:

$$u(x_{i-1}) + u(x_{i+1}) - 2u(x_i) = h^2 u''(x_i) + C_{x_\alpha}.$$

Utilizando a Equação (4.2) e reorganizando essas expansões de forma conveniente, podemos encontrar o seguinte esquema de Diferenças Finitas adaptado de segunda ordem:

$$\frac{u(x_{i-1}) - 2u(x_i) + u(x_{i+1}))}{h^2} = \beta(x_i)^{-1} f(x_i) + \frac{C_{x_\alpha}}{h^2}.$$

De forma genérica, podemos reescrever a equação acima como:

$$L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1}u_{i+1} = \beta_i^{-1} f_i + L_{i-1}C_{x_\alpha}. \quad (4.10)$$

onde os coeficientes L_{i-1} , L_i e L_{i+1} são determinados de acordo com o esquema de Diferenças Finitas escolhido para a aproximação. No caso aqui ilustrado, como foi tomado o esquema de DF padrão explícito de segunda ordem, temos os seguintes coeficientes calculados por:

$$L_{i-1} = L_{i+1} = 1/h^2 \text{ e } L_i = -2/h^2.$$

Uma vez que pretendemos garantir uma aproximação de ao menos segunda ordem para todas as aproximações de DF empregadas pela nossa abordagem, conforme mencionado anteriormente, estabelecemos $n = 3$ na expansão de Taylor (4.8), o que de fato levou à seguinte expressão para encontrarmos C_{x_α} :

$$C_{x_\alpha} = -[u]_{x_\alpha} + [u']_{x_\alpha} h^- - [u'']_{x_\alpha} \frac{(h^-)^2}{2!} + [u''']_{x_\alpha} \frac{(h^-)^3}{3!}. \quad (4.11)$$

Note que, para aplicarmos a fórmula de Diferenças Finitas (4.10) de forma concisa, precisamos saber, primeiramente, quem são as entradas para as correções de salto da Equação (4.11), mais precisamente:

$$[u^{(j)}]_{x_\alpha} = u_+^{(j)}|_{x_\alpha} - u_-^{(j)}|_{x_\alpha}, \quad j = 0, 1, 2, 3. \quad (4.12)$$

No entanto, em vez de habilitarmos nossa abordagem numérica para gerenciar tal número excessivo de condições de salto, seguindo (LINNICK; FASEL, 2004), escrevemos cada um dos limites unilaterais $u_+^{(j)}|_{x_\alpha}$ and $u_-^{(j)}|_{x_\alpha}$ em termos de seus vizinhos sucessivos mais próximos em Ω^+ e Ω^- , isto é:

$$u_+^{(j)}|_{x_\alpha} = c_+^{(j)} u_{x_\alpha}^+ + c_{i+1}^{(j)} u_{i+1} + c_{i+2}^{(j)} u_{i+2} + c_{i+3}^{(j)} u_{i+3} \quad (4.13)$$

$$u_-^{(j)}|_{x_\alpha} = c_-^{(j)} u_{x_\alpha}^- + c_{i-2}^{(j)} u_{i-2} + c_{i-3}^{(j)} u_{i-3} + c_{i-4}^{(j)} u_{i-4}, \quad (4.14)$$

onde modificamos a notação para os saltos das derivadas de ordem zero, $u_+^{(0)}|_{x_\alpha} = u_{x_\alpha}^+$ e $u_-^{(0)}|_{x_\alpha} = u_{x_\alpha}^-$, para evitarmos confusão com o índice subscrito j . Observe que desconsideramos,

na Equação (4.13), os pontos x_i e x_{i-1} mais próximos da interface $x = x_\alpha$, como sugerido em (LINNICK; FASEL, 2004), em um esforço para evitar instabilidades numéricas causadas pelas aproximações numéricas introduzidas para corrigir o esquema de DF para este caso.

As Equações (4.13) e (4.14) indicam que todas as derivadas unilaterais podem ser escritas em termos das incógnitas u'_i s, exceto os limites de ordem zero $u_{x_\alpha}^+$ e $u_{x_\alpha}^-$, que devem ser providenciados de alguma forma. Além disso, das Equações (4.13) e (4.14), podemos obter novas aproximações de DF para aproximar $u_+^{(j)}|_{x_\alpha}$ quando se expande, através da série de Taylor, cada um dos elementos u_i ao se fixar um índice j . Por exemplo, para a Equação (4.13) essa aproximação pode ser conduzida como:

$$c_+^{(j)} u_{x_\alpha}^+ = c_+^{(j)} u_{x_\alpha}^+, \quad (4.15)$$

$$c_{i+1}^{(j)} u_{i+1} = c_{i+1}^{(j)} u_{x_\alpha}^+ + c_{i+1}^{(j)} h_{i+1} u_{x_\alpha}' + c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^2}{2!} u_{x_\alpha}'' + c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^3}{3!} u_{x_\alpha}''', \quad (4.16)$$

$$c_{i+2}^{(j)} u_{i+2} = c_{i+2}^{(j)} u_{x_\alpha}^+ + c_{i+2}^{(j)} h_{i+2} u_{x_\alpha}' + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^2}{2!} u_{x_\alpha}'' + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^3}{3!} u_{x_\alpha}''', \quad (4.17)$$

$$c_{i+3}^{(j)} u_{i+3} = c_{i+3}^{(j)} u_{x_\alpha}^+ + c_{i+3}^{(j)} h_{i+3} u_{x_\alpha}' + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^2}{2!} u_{x_\alpha}'' + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^3}{3!} u_{x_\alpha}'''. \quad (4.18)$$

Somando-se essas expressões, chegamos a:

$$\begin{aligned} c_+^{(j)} u_{x_\alpha}^+ + c_{i+1}^{(j)} u_{i+1} + c_{i+2}^{(j)} u_{i+2} + c_{i+3}^{(j)} u_{i+3} &= u_{x_\alpha}^+ \left(c_+^{(j)} + c_{i+1}^{(j)} + c_{i+2}^{(j)} + c_{i+3}^{(j)} \right) + \\ &+ u_{x_\alpha}' \left(c_{i+1}^{(j)} h_{i+1} + c_{i+2}^{(j)} h_{i+2} + c_{i+3}^{(j)} h_{i+3} \right) + u_{x_\alpha}'' \left(c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^2}{2!} + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^2}{2!} + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^2}{2!} \right) + \\ &+ u_{x_\alpha}''' \left(c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^3}{3!} + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^3}{3!} + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^3}{3!} \right). \end{aligned}$$

Dessa forma, se queremos por exemplo, encontrar os valores dos elementos $c_i^{(j)}$ s, quando $j = 0$, temos que resolver o seguinte sistema linear formado pelas equações a seguir:

$$\begin{aligned} c_+^{(j)} + c_{i+1}^{(j)} + c_{i+2}^{(j)} + c_{i+3}^{(j)} &= 1 \\ c_{i+1}^{(j)} h_{i+1} + c_{i+2}^{(j)} h_{i+2} + c_{i+3}^{(j)} h_{i+3} &= 0 \\ c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^2}{2!} + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^2}{2!} + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^2}{2!} &= 0 \\ c_{i+1}^{(j)} \frac{(h_{i+1})^3}{3!} + c_{i+2}^{(j)} \frac{(h_{i+2})^3}{3!} + c_{i+3}^{(j)} \frac{(h_{i+3})^3}{3!} &= 0. \end{aligned}$$

De forma análoga, podemos escrever esse sistema na forma matricial para $j = 1, 2$ e 3 , e assim, podemos obter o seguinte sistema de equações válido para qualquer índice j :

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & h_{i+1} & h_{i+2} & h_{i+3} \\ 0 & h_{i+1}^2 & h_{i+2}^2 & h_{i+3}^2 \\ 0 & h_{i+1}^3 & h_{i+2}^3 & h_{i+3}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{+}^{(j)} \\ c_{i+1}^{(j)} \\ c_{i+2}^{(j)} \\ c_{i+3}^{(j)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0! \delta_{j0} \\ 1! \delta_{j1} \\ 2! \delta_{j2} \\ 3! \delta_{j3} \end{bmatrix}, \quad (4.19)$$

onde $h_i = x_i - x_\alpha$ e δ_{jp} é a função delta de Kronecker:

$$\delta_{jp} = \begin{cases} 1, & \text{if } j = p, \\ 0, & \text{if } j \neq p. \end{cases} \quad (4.20)$$

Ainda em relação às Equações (4.13) e (4.14), observe que podemos fornecer mais/me-nos pontos regulares a fim de escrever as combinações lineares para suas derivadas laterais. De fato, a quantidade de pontos usados nas expansões lineares e o número de termos da série de Taylor para expandir as incógnitas, bem como ainda o termo de correção C_{x_α} determinará a ordem de precisão do esquema de DF modificado (4.10). Como mostrado nas Equações (4.13) e (4.14), onde quatro pontos foram ocasionalmente usados para construir as combinações lineares, a ordem $O(h^2)$ será, de fato, preservada no caso de substituição direta dessas aproximações em nosso esquema central de DF de segunda ordem (4.10).

Finalmente, substituindo as Equações (4.13) e (4.14) na Eq. (4.11) e isolando todos os termos desconhecidos de u para o lado esquerdo na Equação (4.10), obtemos o seguinte esquema de DF de segunda ordem:

$$\sum_{s \in \Lambda} K_{i+s} u_{i+s} = \beta_i^{-1} f_i + K_{x_\alpha}^- u_{x_\alpha}^- + K_{x_\alpha}^+ u_{x_\alpha}^+ \quad (4.21)$$

com o índice sobrescrito s variando no conjunto $\Lambda = \{-4, -3, \dots, 2, 3\}$, e com coeficientes K_{i+s} compatíveis com todas as substituições promovidas.

Claramente, para tornarmos a Equação (4.21) utilizável, é preciso fornecer simultaneamente ambos os limites unilaterais $u_{x_\alpha}^-$ and $u_{x_\alpha}^+$, os quais devem ser dados, a priori. Neste sentido, discutiremos em seguida como aproximar valores para $u_{x_\alpha}^-$ e $u_{x_\alpha}^+$ de forma a produzir uma esquema de DF que dependa apenas do salto de ordem zero da função, $[u]_{x_\alpha}$.

4.1.3.1 Método de DF baseado em salto único combinando interpolação e pontos fantasmas

Nota-se que há um ganho substancial na utilização das Equações (4.13) e (4.14) no lugar do saltos (4.12) a fim de originar o esquema de Diferenças Finitas (4.21), já que podemos eliminar um número elevado de restrições de salto. No entanto, essa vantagem também leva à um problema: a dependência direta de ambos os limites laterais $u_{x_\alpha}^+$ e $u_{x_\alpha}^-$, os quais não são restrições do tipo salto, sendo, na verdade, condições bem mais restritivas de uso. Uma vez que, ter ambos os limites nem sempre é uma opção na prática, esse requisito pode dificultar a aplicação direta da Equação (4.21) para aproximar o problema elíptico em questão.

Com o objetivo de não impor nenhum dos limites laterais e ainda assim garantir segunda ordem de precisão para a fórmula de Diferenças Finitas (4.21), exigimos como dado de entrada apenas o salto de ordem zero da função, ou seja, $[u]_{x_\alpha}$. Sendo mais explícito: a modificação a ser realizada na Equação (4.10) terá como base regras de interpolação e os pontos artificiais (fantasmas) criados no caso anterior (Subseção 4.1.2). Para este finalidade, a partir da condição de salto especificada $[u]_{x_\alpha}$, primeiramente reescrevemos $u_{x_\alpha}^+$ em termos de $u_{x_\alpha}^-$, isto é:

$$u_{x_\alpha}^+ = u_{x_\alpha}^- + [u]_{x_\alpha}. \quad (4.22)$$

Obviamente, se pretendemos encontrar numericamente uma aproximação para $u_{x_\alpha}^+$, precisamos de uma boa estimativa para o valor de $u_{x_\alpha}^-$. Assim, retornando à Subseção 4.1.2, em que o par de pontos fantasmas $(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i)$ foi criado para compor o esquema de Diferenças Finitas (4.7) (observe que agora estamos considerando o caso $x_{i-1} < x_\alpha < x_i$), utilizamos esse par de valores para interpolar o limite lateral $u_{x_\alpha}^-$ por uma função polinomial $P_k(x)$ de grau $\leq k$, em outras palavras:

$$P_k(x) = u^-(x_{i-k}, \dots, x_{i-2}, x_{i-1}, \tilde{x}_i, x), \quad (4.23)$$

com $P_k(x)$ representando o polinômio interpolador que passa pelos pontos da malha $(x_{i-k}, u_{i-k}), \dots, (x_{i-2}, u_{i-2}), (x_{i-1}, u_{i-1})$, além do ponto fantasma $(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i)$ (para um esboço ilustrativo, veja Figura 20). Assim, o valor de $u_{x_\alpha}^-$ pode ser devidamente aproximado calculando-se $P_k(x)$ no ponto de interface $x = x_\alpha$, isto é:

$$u_{x_\alpha}^- \approx P_k(x_\alpha) = F(u_{i-k}, \dots, u_{i-2}, u_{i-1}, \tilde{u}_i), \quad (4.24)$$

onde F é escrito como uma combinação linear de valores desconhecidos da função u no pontos interpolados, conforme especificado pela Equação (4.23).

Figura 20 – Esquema de interpolação adotado (gráfico em vermelho) passando tanto em pontos regulares da malha, como ainda no vértice artificial $(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i)$.

A partir da Equação (4.24), temos que F dependerá somente das entradas de u calculadas nos pontos da malha, além do ponto artificial $\tilde{u}_i$. Isso significa que podemos acomodar a soma da interpolação no lado esquerdo LHS (do inglês, *Left Hand Side*) no esquema adaptado de Diferenças Finitas (4.21), eliminando, dessa forma, a dependência do limite lateral à esquerda $u_{x_\alpha}^-$. Finalmente, a fim de obtermos o valor para o segundo limite $u_{x_\alpha}^+$, procedemos de forma trivial com uma substituição direta da Equação (4.24) na Identidade (4.22).

Em suma: o uso da Equação (4.21), juntamente com as Equações (4.22) e (4.24) dá origem ao seguinte esquema de Diferenças Finitas, o qual depende exclusivamente do salto de ordem zero da função:

$$\sum_{s \in \Lambda} H_{i+s} u_{i+s} + \tilde{H}_i \tilde{u}_i = \beta_i^{-1} f_i + K_{x_\alpha}^+ [u]_{x_\alpha}, \quad (4.25)$$

com coeficientes adequados H_{i+s} e $\tilde{H}_i$. Portanto, em nossa abordagem, é necessário fornecer somente o salto de ordem zero da função, $[u]_{x_\alpha}$, como dado de entrada de forma a validar o uso da fórmula de DF (4.25). Finalmente, para garantir segunda ordem ao esquema acima, estabelecemos $k = 2$ na Equação (4.24).

4.1.3.2 Observações sobre o Esquema de Interpolação Adotado

Apesar do ganho considerável em retirar os limites laterais da Equação (4.21), alterando-os por uma condição menos restritiva tal como evidenciado pela Equação (4.25), há dois aspectos que devem ser observados ao aplicar o esquema de Diferenças Finitas adaptado (4.25). A inclusão do ponto fantasma $(\tilde{x}_i, \tilde{u}_i)$ foi de suma importância para garantir que o valor interpolado $P_k(x_\alpha)$ irá produzir uma boa aproximação para $u_{x_\alpha}^-$. De fato, uma vez que $x_\alpha \in [x_{i-k}, \tilde{x}_i]$, espera-se que o comportamento de $P_k(x)$ seja semelhante ao originado pela solução exata $u = u^-$ na região mais externa Ω^- . Na verdade, $P_k(x)$ pode ser visto como uma continuação suave de u^- sendo propagada de Ω^- para Ω^+ .

Outro aspecto é que, de uma forma geral, a aproximação $u_{x_\alpha}^- \approx P_k(x_\alpha)$ se revela melhor à medida que n aumenta, resultando numa ordem de aproximação $n + 1$ (vide Seção 2.3 e a Figura 21). Essa suposição nos permite manter a ordem numérica do esquema de Diferenças Finitas obtido. Por exemplo, para manter $O(h^2)$ na fórmula de DF (4.25), o grau de $P_k(x)$ deve ser escolhido pelo menos como $k \geq 2$.

Figura 21 – Diferentes funções de interpolação para avaliar o ponto x_α com base na manipulação de pontos fantasmas.

4.1.4 Tratamento Numérico para uma Segunda Interface $x = x_\xi$

Procedemos de forma análoga aos casos anteriores para obtermos as fórmulas de Diferenças Finitas para os pontos da malha próximos à interface secundária $x = x_\xi$. Por exemplo, o Caso 3 (veja a Seção 4.1.3) contempla, com alguns ajustes menores, o caso quando x_{i-1} e $x_i \in \Omega^+$, enquanto $x_{i+1} \in \Omega^-$, em que o ponto mais à direita x_{i+1} deverá ser corrigido na fórmula de Diferenças Finitas final (4.25). Ainda em relação à interface $x = x_\xi$, se o estêncil estiver localizado em $x = x_i \in \Omega^+$ com $x_{i-1} \in \Omega^-$, introduzimos novamente um ponto fantasma representativo $\tilde{x}_{i-1}$ no lugar de x_{i-1} como no Caso 2 (ver Seção 4.1.2) para validar o uso da abordagem padrão de DF (4.7).

4.1.5 Adequação dos Pontos Fantasmas

Conforme observado nas Seções 4.1.2 e 4.1.4, dois pontos fantasmas $\tilde{x}_{i+1}$ ($x_i < x_\alpha < x_{i+1}$) e $\tilde{x}_{i-1}$ ($x_{i-1} < x_\xi < x_i$) foram introduzidos como pontos válidos dentro da nossa malha cartesiana. Eles permitem a aplicação direta da fórmula padrão de Diferenças Finitas (4.7) sem a necessidade de qualquer estratégia adicional de correção, evitando assim o uso de esquemas numéricos sofisticados e outras restrições adicionais de salto para que se obtenha uma aproximação válida e concisa.

Apesar das vantagens que os pontos fantasmas geralmente promovem em termos da resolução de equações elípticas com saltos, a inserção desses novos pontos também leva à adição de novas equações como parte de nosso sistema linear constituído pelas aproximações de diferenças consideradas. Assim, para lidar com esse problema, criamos um conjunto suplementar de pontos fantasmas $\tilde{\Omega}^+ = \{\tilde{x}_l : x_l \in \Omega^+\}$ o qual contempla todos os pontos regulares x_l no subdomínio Ω^+ . Em seguida, aplicamos a fórmula padrão de DF (4.6) para cada uma dessas variáveis fictícias, ou seja, quando l varia nos índices de Ω^+ (para uma ilustração, veja Figura 22). Note que, para os pontos artificiais que sucedem imediatamente (ou precedem) uma interface, o esquema DF também envolverá um ponto regular de Ω^- . Por exemplo, a readequação do nó fantasma centrado em $x = \tilde{x}_i$ (supondo i localizado após a interface $x = x_\alpha$) resulta na seguinte equação:

$$L_{i-1}u_{i-1} + \tilde{L}_i\tilde{u}_i + \tilde{L}_{i+1}\tilde{u}_{i+1} = \beta_i^{-1}f_i. \quad (4.26)$$

Figura 22 – Combinação de pontos fantasmas a fim de ajustar as equações de diferenças analisadas.

Outro aspecto importante sobre os pontos fantasmas que são adjacentes a uma determinada interface é que, uma vez que eles integram uma soma de DF como nas Equações (4.7) e (4.26), espera-se que suas soluções sejam computadas como extensões das incógnitas definidas nos pontos regulares do subdomínio mais externo Ω^- . Mais precisamente, a solução original calculada em Ω^- deverá ser propagada para os pontos fantasmas em Ω^+ . Esse esquema numérico garante a boa funcionalidade da aproximação polinomial (4.24), que envolve alguns pontos fantasmas de Ω^+ a fim de interpolar adequadamente um dos dois limites laterais da função na interface avaliada.

4.2 Aproximação de Diferenças Finitas de Alta Ordem

Nesta Seção estendemos as ideias-chave discutidas na Seção 4.1 visando adaptar nossa abordagem para lidar com aproximações de alta ordem. Desta forma, considere a mesma topologia utilizada para discretizar o domínio do problema elíptico tal como é posto em (4.1), o qual também considera que o subdomínio interno Ω^+ é delimitado por duas interfaces, $x = x_\alpha$ e $x = x_\xi$.

Para estender o Caso 1 (Seção 4.1.1), simplesmente aplicamos um esquema explícito de DF que é assegurado ser de alta ordem. Por exemplo, o seguinte método de DF regular de

cinco pontos se encaixa nesta finalidade:

$$L_{i-2}u_{i-2} + L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1}u_{i+1} + L_{i+2}u_{i+2} = \beta_i^{-1} f_i. \quad (4.27)$$

com coeficientes $L_{i-2} = L_{i+2} = -1/12h^2$, $L_{i-1} = L_{i+1} = 4/3h^2$, e $L_i = -15/6h^2$.

No que diz respeito ao Caso 2 (Seção 4.1.2), dividimos nossa análise em duas situações possíveis: (i) quando o estêncil admite apenas um ponto regular localizado no lado oposto da interface $x = x_\alpha$, como por exemplo: $x_\alpha < x_{i+2}$, e (ii) quando o estêncil contém dois pontos regulares x_{i+1} e x_{i+2} , $x_{i+2} \in \Omega^+$, satisfazendo $x_\alpha < x_{i+1} < x_{i+2}$. Então, em ambos os cenários, procuramos atribuir pontos fantasmas aos pontos regulares rotulados como “opostos”, trocando-os por suas versões “fictícias” introduzidas dentro do subdomínio $\tilde{\Omega}^+$ e aplicando a Equação (4.27), semelhante ao caso de segunda ordem representado pela Equação (4.7). A metodologia para a interface $x = x_\xi$ é análoga.

Após o estudo de caso anterior, no Caso 3 (Seção 4.1.3), chegamos em duas possibilidades ao se fixar o estêncil adotado: (i) quando há apenas um ponto regular x_{i-2} à esquerda, $x_{i-2} \in \Omega^-$, ou seja, $x_{i-2} < x_\alpha < x_{i-1}$, e (ii) quando ambos os pontos regulares x_{i-1} e x_{i-2} estão posicionados no lado esquerdo, isto é, $x_{i-2} < x_{i-1} < x_\alpha$. Para satisfazer (i), procedemos da mesma forma que no caso anterior da Seção 4.1.3, expandindo o ponto mais à esquerda do estêncil, $x_{i-2} \in \Omega^-$, via série de Taylor, e ajustando $n = 5$ na Equação (4.8). Essa aproximação resulta em uma precisão de ordem $O(h^4)$, além da seguinte expressão para se determinar C_{x_α} :

$$C_{x_\alpha} = -[u]_{x_\alpha} + [u']_{x_\alpha} h^- - [u'']_{x_\alpha} \frac{(h^-)^2}{2!} + \dots + [u^{(5)}]_{x_\alpha} \frac{(h^-)^5}{5!}, \quad (4.28)$$

onde $h^- = x_\alpha - x_{i-2}$ e h é o passo regular da malha. Uma vez que o termo de correção C_{x_α} incorpora em sua fórmula os saltos das derivadas de u , dois pontos regulares adicionais devem ser adicionados às expansões lineares dadas pelas Equações (4.13) e (4.14) em um esforço para se manter $O(h^4)$. Finalmente, conforme discutido na Seção 4.1.3, obtemos o seguinte esquema de Diferenças Finitas de cinco pontos para o caso do item (i):

$$L_{i-2}u_{i-2} + L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1}u_{i+1} + L_{i+2}u_{i+2} = \beta_i^{-1} f_i + L_{i-2}C_{x_\alpha}. \quad (4.29)$$

Agora, mudando o foco para o caso (ii), mais uma vez setamos $n = 5$ na Equação (4.8) mas agora considerando separadamente cada um dos pontos x_{i-2} e x_{i-1} , localizados no lado

esquerdo da interface $x = x_\alpha$. Isso nos leva a lidar simultaneamente com dois termos de correção, C_{x_α} e $\widehat{C}_{x_\alpha}$, originados das expansões de x_{i-2} e x_{i-1} , respectivamente. Assim, como no caso anterior, colocamos todas as fórmulas (4.8)-(4.28) e as expansões usuais de u_i , u_{i+1} e u_{i+2} juntas de uma forma conveniente, o que traz à tona a seguinte equação de DF de alta ordem:

$$L_{i-2}u_{i-2} + L_{i-1}u_{i-1} + L_i u_i + L_{i+1}u_{i+1} + L_{i+2}u_{i+2} = \beta_i^{-1} f_i + (L_{i-2}C_{x_\alpha} + L_{i-1}\widehat{C}_{x_\alpha}). \quad (4.30)$$

Em consonância com a fórmula válida de Diferenças Finitas (4.25), é necessário pelo menos $k \geq 3$ como grau de $P_k(x_\alpha)$ na Equação (4.24), tornando a Equação Discreta do tipo (4.25) exclusivamente dependente da condição de salto $[u]_{x_\alpha}$ e, portanto, passível de utilização. Consequentemente, as aproximações polinomiais computadas para simplificar os termos de correção na Equação (4.30), contribuirão para que o esquema de DF acima tenha um erro de truncamento local compatível com $O(h^4)$.

4.3 Caso Bidimensional

Nesta seção vamos considerar o caso unidimensional já discutido, de modo que ele possa ser readequado para o caso mais geral envolvendo duas dimensões. Para este propósito, vamos assumir que o nosso domínio computacional é descrito por uma região retangular do tipo $\Omega = [a, b] \times [c, d] \subset \mathbb{R}^2$, com pontos discretos igualmente espaçados por $h = (b - a)/N = (d - c)/M$, onde N e M representam o número de pontos da malha nos eixos x e y , respectivamente. Assim, os componentes espaciais x_i e y_j para um ponto arbitrário i inserido dentro da malha de simulação são definidos da seguinte forma:

$$x_i = a + ih, \quad y_j = c + jh, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad \text{e} \quad j = 0, 1, 2, \dots, M. \quad (4.31)$$

Por simplicidade de explanação técnica, assumimos novamente que o conjunto o qual representa a interface do problema, Γ , subdivide o domínio Ω em dois subdomínios disjuntos, Ω^- (subdomínio externo) e Ω^+ (subdomínio interno), tal que $\Omega = \Omega^- \cup \Omega^+$. Além disso, a região imersa Ω^+ é delimitada pela interface Γ tal que $\Gamma = \overline{\Omega^+}$ (vide Figura 5 para um esboço gráfico). Ainda, u poderá ser descontínua em Γ , ou mesmo não ser definida na região da interface.

A Equação de Poisson para o caso bidimensional a qual aborda o problema da interface imersa pode ser formalmente definida como:

$$\begin{aligned} u_{xx}(x,y) + u_{yy}(x,y) &= \beta(x,y)^{-1} f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega \setminus \Gamma \\ u(x,y)|_{\partial\Omega^-} &= g(x,y), \end{aligned} \quad (4.32)$$

onde $g(x,y)$ é uma função conhecida que determina o valor de u na fronteira mais externa $\partial\Omega^-$. Tal como no problema generalizado, definido anteriormente pela Equação (2.20), $\beta(x,y)$ é uma função constante não nula por partes dividida em termos das subregiões Ω^- e Ω^+ .

A prerrogativa aqui é discretizar a Equação de Poisson (4.32) aplicando, num primeiro momento, as equações de diferenças para a direção x e, depois, considerando a direção y . Como as derivadas podem ser calculadas de forma independente para cada eixo cartesiano, as Equações (4.6), (4.7) e (4.25) são, portanto, aplicadas uma seguida da outra para discretizar cada uma das derivadas parciais contidas na Equação principal (4.32).

Para melhor ilustrar esse processo, a Figura 23 representa um cenário típico em que são necessárias duas correções para reproduzir o Caso 3 da abordagem proposta: (i) uma correção na direção x , e (ii) uma correção para lidar com os pontos na direção y e, portanto, novamente, contemplando o Caso 3. Procedendo de modo a produzir um esquema numérico semelhante à

Figura 23 – Em 2D, os pontos irregulares são interpolados em x e em y de forma independente. A curva em amarelo ilustra a interface, enquanto que os pontos em vermelho representam os nós que necessitam de correção.

Equação (4.25), obtemos a seguinte fórmula de Diferenças Finitas a qual faz uso apenas dos saltos de ordem zero da função:

$$\sum_{i,j} H_{i,j} u_{i,j} + 2\tilde{H}_{i,j} \tilde{u}_{i,j} = \beta_{i,j}^{-1} f_{i,j} + K_{x_\alpha, y_\alpha}^+ [u]_{x_\alpha, y_\alpha} + K_{x_\xi, y_\xi}^+ [u]_{x_\xi, y_\xi}, \quad (4.33)$$

onde $H_{i,j}$ e $\tilde{H}_{i,j}$ são os coeficientes resultantes da simplificação numérica, e os índices subscritos i e j variam na direção x e y , respectivamente. Note que, neste caso, optamos por escrever os pontos irregulares da interface como sendo (x_α, y_α) e (x_ξ, y_ξ) , com $x_{i-1,j} < x_\alpha < x_{i,j}$ e $y_{i,j} < y_\xi < y_{i,j+1}$.

Observe que a interface Γ não cruza necessariamente um ponto regular da malha e, portanto, não são necessárias restrições quanto à regularidade dos pontos da interface. Além disso, de forma similar ao problema 1D, o único requisito em termos de restrições complementares que devem ser prescritas para as aproximações 2D aqui propostas é o salto de u , mais precisamente a intensidade do salto de ordem zero da função quando o estêncil intercepta algum ponto da interface.

Finalmente, deve-se proceder de forma similar ao caso de alta ordem já mostrado anteriormente (em 1D) para originar, com sucesso, aproximações de DF de alta ordem também para o caso bidimensional.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentadas as análises experimentais conduzidas por meio da modelagem numérica, proposta para validar experimentalmente sua alta precisão numérica e seu uso irrestrito em cenários onde há apenas as informações de salto da função disponíveis para utilização. Comparações com técnicas do estado-da-arte para resolução numérica de equações elípticas com interfaces também são listadas a seguir. Finalmente, no término deste capítulo são discutidos alguns aspectos importantes da técnica proposta, bem como ainda algumas de suas limitações técnicas.

5.1 Resultados Numéricos

Esta seção apresenta alguns experimentos numéricos para a resolução de problemas elípticos com uma ou mais interfaces em duas dimensões, a fim de verificar a eficácia do método proposto a partir de seis estudos de caso. Para esses experimentos, estamos interessados em mensurar a ordem de precisão das soluções numéricas obtidas, além do erro de aproximação. É importante enfatizar que, em todos os exemplos, utilizamos um método de diferenças finitas de alta ordem, mais precisamente, com quarta ordem de precisão. Os resultados numéricos são comparados com as soluções analíticas da equação em termos de aproximação numérica e ordem de precisão.

O número de pontos $N = M$ da malha computacional, em cada direção, variam dependendo do caso, se há apenas uma interface e a mesma é definida por meio de geometrias mais simplificadas como círculos ou elipses, ou se há mais de uma interface ou onde a interface é definida por uma geometria mais complexa.

O valor do erro numérico tabulado nas Tabelas 1, 2, 3, 4, 5 e 6 é dado por:

$$E_h = \|U - \bar{U}\|_\infty \quad (5.1)$$

onde $U = (u_{i,j})$ representa o vetor contendo os valores da solução aproximada com passo h , e $\bar{U} = (u(x_i, y_j))$ o vetor dado pelos valores exatos calculados nos nós da malha. Além disso:

$$E_h = \max_{1 \leq i, j \leq m} |E_{i,j}| = \max_{1 \leq i, j \leq m} |u(x_i, y_j) - u_{i,j}|.$$

A partir dos valores do erro e do espaçamento h , é possível encontrar também a ordem do método, a qual foi calculada segundo Berthelsen (2004):

$$p = \frac{\log\left(\frac{E_{h_1}}{E_{h_2}}\right)}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}. \quad (5.2)$$

Os resultados apresentados no Exemplo 2 são comparados com outros métodos numéricos presentes na literatura, que resolvem o mesmo tipo de problema, a saber: o Método de Interface Imersa original apresentado por LeVeque e Li (1997), o método MIB (Matched Interface and Boundary), apresentado por Zhou *et al.* (2006), e o método GFM (Ghost Fluid Method), apresentado por Liu, Fedkiw e Kang (2000). Os erros e a ordem de precisão obtidos através desses métodos, podem ser vistos na Tabela 2.

Finalmente, é válido também mencionar que os exemplos aqui apresentados foram retirados de (XU; WANG, 2005), (GUITTET *et al.*, 2015) e (LEVEQUE; LI, 1997).

Exemplo 1. Começaremos com um exemplo onde a interface Γ é definida por um círculo $x^2 + y^2 = r^2$, com $r = 0.5$ e o domínio computacional igual a $[-1, 1] \times [-1, 1]$. A Equação Diferencial em cada região (interna e externa) da interface é representada neste exemplo por:

$$\nabla \cdot (\beta(x, y) \nabla u(x, y)) = f(x, y), \quad (5.3)$$

onde $\beta \equiv 1$. Foram tomadas condições de fronteira do tipo Dirichlet que são determinadas pela solução exata da equação:

$$u(x,y) = \begin{cases} e^{-x^2-y^2}, & \text{se } r < 0.5 \\ x^4 + y^4, & \text{se } r > 0.5 \end{cases}. \quad (5.4)$$

O salto da função é definido por $[u] = e^{-x^2-y^2} - x^4 - y^4$.

A Figura 24 representa a interface do problema, enquanto que as Figuras 25 e 26 mostram a solução numérica obtida através da aproximação originada com nosso método e o erro obtido nessa aproximação, respectivamente. Ambas as Figuras mostram que a presença de descontinuidade não afetou diretamente o erro, que, apesar de ser maior nos pontos mais próximos à interface, ainda são compostos por valores de baixa intensidade. De fato, podemos observar que mesmo próximo à interface, o erro produzido foi consideravelmente pequeno.

A Figura 27 ilustra o erro obtido de acordo com a norma do máximo (5.1). O erro foi plotado em escala logarítmica em função de h , juntamente com a função h^4 onde é possível observar que quarta ordem foi alcançada. Já pela Tabela 1, é possível também verificar que uma precisão de quarta ordem foi alcançada, como esperado.

Figura 24 – Interface do problema (Exemplo 1) e curvas de nível da solução encontrada.

Figura 25 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 1).

Figura 26 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_{\infty}$ (Exemplo 1).

Figura 27 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 1).

Tabela 1 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 1).

n	$\ E_n\ _\infty$	Ordem
40	5.15768e-06	-
80	3.31258e-07	4.0
160	2.16427e-08	4.0
320	1.24874e-09	4.1

Exemplo 2. Considere, nesse exemplo, a equação de Laplace em duas dimensões definida em $[-1, 1] \times [-1, 1]$. A interface, neste caso, é dada pelo círculo $x^2 + y^2 = 0.25$, e são usadas condições de fronteira de Dirichlet. Como solução exata do problema, tem-se:

$$u(x, y) = \begin{cases} e^x \cos(y), & \text{no interior da interface,} \\ 0, & \text{no exterior da interface} \end{cases}$$

O salto da função u é dado por $[u] = e^x \cos(y)$.

A Figura 28 mostra a interface do problema apresentado. A solução numérica obtida em uma malha 40×40 é apresentada na Figura 29, enquanto que o erro obtido na aproximação numérica pode ser visualizado na Figura 30.

A Figura 31 mostra, mais uma vez, o erro plotado em escala logarítmica em função de h , juntamente com o gráfico da função h^4 , mostrando que o método obteve quarta ordem de

precisão.

Figura 28 – Interface do problema (Exemplo 2) e curvas de nível da solução encontrada.

A Tabela 2 mostra os resultados numéricos obtidos pelo método proposto juntamente

Figura 29 – Solução numérica obtida com o método proposto (Exemplo 2).

Figura 30 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_\infty$ (Exemplo 2).

Figura 31 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 2).

com o IIM (*Immersed Interface Method*), o método MIB (*Matched Interface and Boundary*), e o GFM (*Ghost Fluid Method*). Podemos verificar que o método GFM apresentou aproximadamente ordem 1 e os demais métodos ordem 2. Em contrapartida, o método proposto atinge ordem 4, melhorando significativamente o erro na aproximação numérica.

Exemplo 3. Neste exemplo é solucionado a Equação $\nabla^2 u = f(x, y)$ no domínio definido

Tabela 2 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 2).

n	Presente Trabalho		IIM		MIB		GFM		
	Erro	Ordem	Erro	Ordem	Erro	Ordem	n	Erro	Ordem
20	1.729e-07	-	4.397e-04	-	1.015e-04	-	10	0.0054	-
40	1.971e-08	3.3	1.079e-04	2.0	2.511e-05	2.0	20	0.0022	1.30
80	8.740e-10	4.5	2.778e-05	2.0	6.369e-06	2.0	40	0.0009	1.29
160	3.260e-11	4.7	7.499e-06	1.9	1.608e-06	2.0	80	0.0003	1.59

por $[-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5]$, onde a interface é dada por uma elipse gerada pela equação $\frac{x^2}{0.5^2} + y^2 = 1$. A condição de fronteira é do tipo Dirichlet, a qual é dada em termos da solução exata a seguir:

$$u(x,y) = \begin{cases} e^{-x^2-y^2}, & \text{no interior da interface,} \\ \cos(-x^2-y^2), & \text{no exterior da interface.} \end{cases}$$

Podemos visualizar a interface do problema através da Figura 32. Considerando as Figuras 33 e 34, essas apresentam a solução obtida numericamente por nosso método e o erro de aproximação, respectivamente.

A Tabela 3 explicita a redução do erro cometido na aproximação conforme aumentamos

Figura 32 – Interface do problema (Exemplo 3) e curvas de nível da solução encontrada.

Figura 33 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 3).

Figura 34 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_\infty$ (Exemplo 3).

o número de pontos na malha, e que, além disso, obtem-se quarta ordem de precisão.

Na Figura 35, o erro em escala logarítmica é plotado, em adição à função de comparação

Tabela 3 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 3).

n	$\ E_n\ _\infty$	Ordem
40	8.12134e-06	-
80	3.53601e-07	4.6
160	2.18765e-08	4.0
320	1.36535e-09	4.0

Figura 35 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 3).

h^4 , evidenciando, mais uma vez, que o método numérico proposto obteve quarta ordem para a sucessão de aproximações considerada.

Exemplo 4. Considere a Equação (5.3), com $\beta = 1$, e definida em $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, mas contendo duas interfaces a serem avaliadas: a primeira delas definida por uma circunferência centrada em $(-0.4, -0.4)$, e a segunda por outra região circular, mas centrada em $(0.4, 0.4)$, ambas contendo raio 0.2. Condições de Dirichlet são definidas pela solução exata da equação:

$$u(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{no interior das interfaces,} \\ 5e^{-x^2 - \frac{y^2}{2}}, & \text{no exterior das interfaces.} \end{cases}$$

A Figura 36 apresenta a interface do problema, que é dada por dois círculos conforme já mencionado. Já a Figura 37 mostra a solução numérica obtida utilizando a abordagem proposta, enquanto a Figura 38 renderiza o erro obtido através dessa aproximação.

Figura 36 – Interface do problema (Exemplo 4) e curvas de nível da solução encontrada.

Figura 37 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 4).

A Figura 39 mostra o erro plotado em escala logarítmica, em adição à função comparativa h^4 , e a Tabela 4 relaciona os erros cometidos na aproximação para diferentes espaçamentos, o que evidencia que foi atingida uma alta ordem de aproximação. Outro aspecto interessante é

Figura 38 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_\infty$ (Exemplo 4).

que o erro decai drasticamente quando considera-se as primeiras escalas do gráfico/tabela.

Exemplo 5. Consideramos, neste exemplo, um caso com geometria mais complexa. Seja a Equação (5.3) em duas dimensões, definida em $[-1, 1] \times [-1, 1]$, e com interface definida pela seguinte equação: $\Gamma(x, y) = -\sqrt{x^2 + y^2} + r_0 + r_1 \cos(4\theta)$, com $r_0 = 0.5$, $r_1 = 0.15$ e θ

Figura 39 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 4).

Tabela 4 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 4).

n	$\ E_n\ _\infty$	Ordem
80	6.61505e-08	-
160	2.36278e-09	4.8
240	3.39660e-10	4.8
320	8.39124e-11	4.8

representando o ângulo entre $(1,0)$ e (x,y) . Aqui, $\beta^+ = 3$ e $\beta^- = 0$. As condições de fronteira são do tipo Dirichlet, e são calculadas através da solução exata do problema, definida por:

$$u(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{no exterior da interface,} \\ 1 + \sin(x^2 + y^2) \cos(x+y), & \text{no interior da interface.} \end{cases}$$

A Figura 40 mostra a representação da interface, em formato de “flor”, a qual foi utilizada para implementar o referido exemplo numérico.

As Figuras 41, 42 e 43 ilustram, respectivamente, o gráfico da solução numérica obtida, o erro de aproximação, e o erro plotado em escala logarítmica. Podemos observar que o erro diminui conforme o número de pontos n aumenta e que, juntamente com os dados mostrados

Figura 40 – Interface do problema (Exemplo 5) e curvas de nível da solução encontrada.

na Tabela 5, quarta ordem é alcançada, tal como esperado.

Figura 41 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 5).

Figura 42 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_\infty$ (Exemplo 5).

Exemplo 6. Em nosso último experimento, vamos tomar a Equação (5.3) em duas dimensões, definida em $[-1, 1] \times [-1, 1]$, e com uma interface definida por $x^2 + y^2 = (0.5)^2$. Nesse caso,

Figura 43 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 5).

Tabela 5 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 5).

n	$\ E_n\ _\infty$	Ordem
80	6.61505e-08	-
160	2.36276e-09	4.8
240	4.47566e-10	4.2
320	1.00679e-10	5.0

$\beta^- = 3$ e $\beta^+ = 2$. As condições de fronteira, de Dirichlet, são obtidas através da solução exata:

$$u(x, y) = \begin{cases} x^3 + y^3, & \text{no exterior da interface,} \\ e^{x+y}, & \text{no interior da interface.} \end{cases}$$

A Figura 44 mostra a interface do problema, além de algumas curvas de nível para a solução obtida. Já nas Figuras 45 e 46, vemos a solução numérica originada através da nossa aproximação, e o erro causado pela aproximação, nessa ordem.

Os erros computados, bem como a relação da ordens de aproximação obtidas são sumarizados pelos gráfico da Figura 47 e na Tabela 6. Neste caso, é possível concluir que a técnica numérica proposta alcança alta ordem, a exemplo dos demais experimentos.

Figura 44 – Interface do problema (Exemplo 6) e curvas de nível da solução encontrada.

Figura 45 – Solução numérica obtida pelo método proposto (Exemplo 6).

Figura 46 – Erro de aproximação na norma $\|E\|_\infty$ (Exemplo 6).

Figura 47 – Erros em escala logarítmica (Exemplo 6).

Tabela 6 – Erro e ordem de convergência (Exemplo 6).

n	$\ E_n\ _\infty$	Ordem
40	6.54425e-08	-
80	2.29942e-09	4.9
160	8.37880e-11	4.8
320	2.96333e-12	4.8

5.2 Aspectos Gerais e Limitações

Conforme verificado, o Método de Interface Imersa desenvolvido pode ser aplicado para diversos problemas de interface, onde é possível variar diferentes tipos de interface, bem como ainda uma grande gama de funções matemáticas, avaliadas sob diferentes circunstâncias. Mostramos também que, somente com informações do salto da função, foi possível obter um método robusto com alta ordem de precisão e erros significativamente reduzidos. Além disso, foi constatado que método funciona satisfatoriamente para diversas situações. Por exemplo, no Experimento 4, há um caso em há mais de uma interface envolvida, e no Experimento 5, mostramos um problema com uma geometria complexa de se modelar e, em ambos os casos, o método proposto se mostrou robusto e conciso, além de atingir alta ordem de precisão.

Embora a técnica proposta produza resultados satisfatórios, de alta ordem, e a partir de um cenário com poucas informações disponíveis, como é o caso do não uso de nenhuma condição de salto que envolva as derivadas da função, há algumas limitações em contrapartida às diversas vantagens apresentadas pelo método proposto, tais como:

- Ao introduzirmos pontos fantasmas para eliminar as restrições de salto do problema, esses deverão ser também adicionados como nós-incógnitas no sistema de equações de Diferenças Finitas resultante, o que de fato aumenta o número de variáveis do sistema e, por conseguinte, o esforço computacional a ser despendido para a resolução do problema.
- Outro aspecto a ser observado é que o método requer o refinamento da malha em problemas onde a interface está localizada muito próxima à fronteira $\partial\Omega$. Por exemplo, para aplicarmos um esquema de DF de 3 pontos no caso unidimensional, com x_α entre x_1 e x_2 (vide Figura 48), um refinamento na malha entre o ponto da fronteira x_0 e o ponto do esquema de diferenças finitas x_1 deverá ser implementado para a obtenção dos demais pontos para a correção do salto (4.14).

Figura 48 – Ilustração do caso em que o ponto x_α está muito próximo de um ponto de fronteira $x_0 \in \partial\Omega$.

CONCLUSÃO

O objetivo central deste trabalho foi o de estudar técnicas de resolução de problemas elípticos com interfaces e/ou com presença de descontinuidades, a fim de, com os conhecimentos adquiridos, desenvolver um novo método numérico, de alta ordem, para a resolução de problemas dessa categoria. Assim, em consonância com o objetivo especificado, grandes avanços foram alcançados, sendo grande parte justificado pelos resultados numéricos bem acurados e concisos tal como evidenciado no decorrer desta pesquisa.

A metodologia apresentada no Capítulo 4 mostrou-se bastante eficiente e estável para a resolução de equações elípticas descontínuas. Para tal, foi necessário aprimorar métodos já existentes, além de criar novas metodologias a fim de superar alguns dos principais desafios que surgem ao se resolver problemas dessa categoria, dentre eles: (i) obter um método numérico que não imponha como condição mandatória ter a mão os valores dos saltos das derivadas, em adição ao salto natural da função, o qual muitas vezes é fornecido pelo problema, (ii) manter a ordem de precisão do esquema numérico adotado e, (iii) garantir que o método não seja apenas válido para um número reduzido de situações particulares. Para que o método apresentado satisfizesse essas condições, foi necessário concatenar ideias e concepções distintas sobre o entendimento do problema, sobre as metodologias já existentes, e sobre novas abordagens numéricas a fim de contornar cada um dos desafios teóricos e numéricos encontrados.

A sequência de passos considerada enfoca no seguinte: primeiramente, usamos uma malha cartesiana para discretizar o nosso problema, o que simplifica a implementação do esquema numérico e o torna mais fácil de resolver, sem necessidade de mudança de sistemas de coordenadas, tampouco de modificações na malha base no intuito de adequá-la à cada geometria particular do problema estudado. Já para a aproximação da Equação Diferencial, foi adotado um esquema de Diferenças Finitas que, além de ser flexível na escolha dos pontos da malha que queremos usar, ainda é passível de geração de diferentes ordens de precisão com distintos arranjos de pontos. Por exemplo, para assegurar alta ordem no caso 2D, utilizamos um esquema de quarta ordem com cinco pontos em cada direção, sendo então um esquema de nove pontos bidimensional. Para tratar a descontinuidade do problema, a estratégia adotada foi adicionar ao esquema de Diferenças Finitas escolhido pontos artificiais e um termo de correção C_α . No caso do termo de correção, este foi calculado de maneira a manter a ordem do esquema de DF empregado, como mostrado na seção 2. Para o cálculo desse termo, é necessário, num primeiro instante, ter ambos os valores $u^+(x_\alpha)$ e $u^-(x_\alpha)$. A fim de obter aproximações para esses valores, utilizamos o fato de ter como condição o salto $[u] = u^+(x_\alpha) - u^-(x_\alpha)$, em adição à criação de pontos fantasmas e de uma interpolação polinomial nos pontos da interface.

Mostramos no presente trabalho que, diferente da maioria dos métodos numéricos existentes na literatura, a técnica proposta necessita somente do salto de ordem zero da função, $[u]$, que, como já mencionado anteriormente, é uma condição dada ou estimada numericamente, para alcançar resultados satisfatórios, erros de aproximação baixos, e ainda assegurar que a ordem do método de Diferenças Finitas usado seja mantida. Além disso, o método não demanda o uso de complexas teorias matemáticas, é de fácil implementação e pode ser estendido para outros tipos de problemas ou equações, além dos de interface.

Diferentes experimentos foram realizados a fim de verificar a ordem de precisão do método numérico proposto, além de seus valores de erros de aproximação sob diferentes geometrias, adversidades, e quantidade de nós na malha base. Nesses experimentos, foi possível constatar que o método desenvolvido se mostrou bastante eficiente para todos os casos explorados, preservando a ordem do esquema de Diferenças Finitas empregado e, ao mesmo tempo, provendo soluções numéricas bastante próximas da solução original.

Finalmente, é importante também salientar que foram realizados testes preliminares em outros contextos de aplicação, em que o método se mostrou promissor para a resolução de outros tipos de problemas, como é o caso do cálculo da pressão na equação de Navier-Stokes para a solução de escoamentos com mais de uma fase. Levando-se em consideração tal teste conduzido, apresentamos a seguir os trabalhos futuros.

6.1 Trabalhos Futuros

Como pretensão futura e temáticas de pesquisa a serem abordadas num futuro próximo, destaca-se as seguintes direções de pesquisa:

- Primeiramente, pretende-se realizar a extensão do método numérico para atuar em problemas de três dimensões. Embora a ideia é empregar os esquemas numéricos de DF em cada um dos três eixos canônicos e, em seguida, combiná-los, é necessário ainda diversos ajustes de ordem técnica e de implementação no código-protótipo do modelo.
- Posteriormente, utilizaremos os resultados alcançados no presente trabalho com o intuito de desenvolver e implementar um código-fonte para atuar em escoamentos bifásicos governados pela equação de Navier-Stokes. Conforme mencionado anteriormente, já foram realizadas algumas tentativas nessa direção, sendo agora necessário canalizar maiores esforços para combinar a metodologia numérica proposta com a coerência temporal exigida pela equação de Navier-Stokes.

REFERÊNCIAS

ANDERSSON, B. **Modeling and simulation of rotary bell spray atomizers in automotive paint shops**. [S.l.]: Chalmers University of Technology, 2013. Citado nas páginas 15 e 61.

ANNALAND, M. S.; DIJKHUIZEN, W.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Numerical Simulation of Behavior of Gas Bubbles Using a 3-D Front-Tracking Method. **AIChE Journal**, v. 52, n. 1, p. 99–110, 2006. Citado nas páginas 15 e 60.

BERTHELSEN, P. A. A decomposed immersed interface method for variable coefficient elliptic equations with non-smooth and discontinuous solutions. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 197, n. 1, p. 364–386, 2004. Citado na página 94.

BOLIS, R. **Sperm motility**. 2013. Disponível em: <<http://people.math.sfu.ca/~stockie/teaching/apma990/projects.html>>. Citado nas páginas 16 e 64.

BORAZJANI, I. Fluid–structure interaction, immersed boundary-finite element method simulations of bio-prosthetic heart valves. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 257, p. 103–116, 2013. Citado na página 27.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. [S.l.]: LTC Editora, 2015. Citado na página 51.

CAOA, Y.; CHUA, Y.; ZHANGB, X.; ZHANGC, X. Immersed finite element methods for unbounded interface problems with periodic structures. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 307, p. 72–81, 2016. Citado nas páginas 41 e 76.

CHEN, Z.; EWING, R. E.; ESPEDAL, M. Multiphase flow simulation with various boundary conditions. **CComputational Methods in Water Resources**, p. 925–932, 1994. Citado na página 26.

CUMINATO, J. A.; MENEGUETTE, M. **Discretização de equações diferenciais parciais: técnicas de diferenças finitas**. [S.l.]: Sociedade Brasileira de Matemática, 2013. Citado nas páginas 37, 40 e 50.

DESJARDINS, O.; MOUREAU, V. Methods for multiphase flows with high density ratio. **Chemical Engineering Science**, v. 64, p. 2941–2950, 2009. Citado na página 55.

DONG, H.; KOEHLER, C.; LIANG Z. AND. WAN, H.; GASTON, Z. An integrated analysis of a dragonfly in free flight. **40th AIAA fluid dynamics conference and exhibit**, v. 211, 2010. Citado nas páginas 16 e 62.

DUAN, L.; WANG, X.; ZHONG, X. Stabilization of a Mach 5.92 boundary layer by two-dimensional finite-height roughness. **AIAA journal**, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2013. Citado na página 68.

- FEDWIK, R.; ASLAM, T.; MERRIMAN, B.; OSHER, S. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). **Journal of Computational Physics**, v. 152, p. 457–492, 1999. Citado nas páginas 28, 29 e 71.
- GIBOU, F.; FEDKIW, R. A fourth order accurate discretization for the laplace and heat equations on arbitrary domains, with applications to the stefan problem. **Journal of Computational Physics**, v. 202, p. 577–601, 2005. Citado nas páginas 28, 41, 71 e 76.
- GIBOU, F.; FEDKIW, R.; CHENG, L.-T.; KANG, M. A second-order-accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains. **SIAM J. Numer. Anal.**, v. 176, p. 205–227, 2002. Citado na página 71.
- GIBOU, F.; MIN, C.; FEDKIW, R. High resolution sharp computational methods for elliptic and parabolic problems in complex geometries. **Journal of Scientific Computing**, Springer, v. 54, n. 2-3, p. 369–413, 2013. Citado na página 72.
- GREENE, P. T.; ELDREDGE, J. D.; ZHONG, X.; KIM, J. A high-order multi-zone cut-stencil method for numerical simulations of high-speed flows over complex geometries. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 316, p. 652–681, 2016. Citado na página 68.
- GRIFFITH, B. E. Immersed boundary model of aortic heart valve dynamics with physiological driving and loading conditions. **Int J Numer Meth Biomed Eng**, v. 28, n. 3, p. 317–345, 2012. Citado nas páginas 15 e 27.
- GUITTET, A.; LEPIILLIEZ, M.; TANGUY, S.; GIBOU, F. Solving elliptic problems with discontinuities on irregular domains—the Voronoi Interface Method. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 298, p. 747–765, 2015. Citado na página 94.
- HOSSEINI, B. **Simulating skeletal pumping by the immersed boundary method**. 2013. Disponível em: <<http://people.math.sfu.ca/~stockie/teaching/apma990/hosseini.html>>. Citado nas páginas 16 e 65.
- HUANG, H.; LI, Z. Convergence analysis of the immersed interface method. **IMA J. Numer. Anal.**, v. 19, p. 583–608, 1999. Citado na página 28.
- JAKOBSEN, H. A. **Chemical reactor modeling: multiphase reactive flows**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2014. Citado na página 26.
- KIM, H.; PARK, C.; MIN, B.; CHUNG, S.; KANG, J. Multiphase Flow Simulation for In Situ Combustion to Investigate Field-scale Hydraulic Heterogeneity and Air Injection Rate Affecting Oil Production. **Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects**, v. 36, n. 21, p. 2328–2337, 2014. Citado na página 26.
- LEE, L.; LEVEQUE, R. An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations. **Journal of Computational Physics**, v. 25, p. 832–856, 2003. Citado nas páginas 28 e 68.
- LEGENDRE, D. **CFD software overview comparison, limitations and user interfaces**. 2016. Disponível em: <http://users.abo.fi/rzevenho/DL%20iCFD_course_2016.pdf>. Citado na página 26.

LEVEQUE, R.; LI, Z. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. **SIAM J. Numerical Analysis**, v. 31, n. 4, p. 1019–1044, 1997. Citado nas páginas 27, 67, 68 e 94.

LEVEQUE, R. J. **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations, Steady State and Time Dependent Problems**. [S.l.]: SIAM, 2007. Citado na página 38.

LEVEQUE, R. J.; LI, Z. Immersed interface methods for Stokes flow with elastic boundaries or surface tension. **SIAM Journal on Scientific Computing**, SIAM, v. 18, n. 3, p. 709–735, 1997. Citado na página 68.

LI, N. **Comparison between three different CFD software and numerical simulation of ambulance hall**. Dissertação (Mestrado) — KTH School of Industrial Engineering and Management, Division of Energy Technology, SE-100 44 Stockholm, 3 2015. Citado na página 26.

LI, Y.; YUN, A.; KIM, J. An immersed boundary method for simulating a single axisymmetric cell growth and division. **Journal of Mathematical Biology**, Springer, v. 65, n. 4, p. 653–675, 2012. Citado nas páginas 16, 61 e 62.

LI, Z.; ITO, K. **The Immersed Interface Method: Numerical Solutions of PDEs Involving Interface and Irregular Domains**. [S.l.]: Society of Industrial and Applied Mathematics, 2006. Citado nas páginas 27, 28, 67, 68 e 69.

LI, Z.; LAI, M. The Immersed Interface Method for the Navier–Stokes Equations with Singular Forces. **Journal of Computational Physics**, p. 822–842, 2001. Citado nas páginas 28 e 68.

LINNICK, M. N.; FASEL, H. F. A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains. **Journal of Computational Physics**, v. 204, p. 157–192, 2004. Citado nas páginas 28, 68, 69, 80 e 81.

LIU, X.; FEDKIW, R.; KANG, M. A boundary condition capturing method for poisson’s equation on irregular domains. **Journal of Computational Physics**, v. 160, p. 151–178, 2000. Citado nas páginas 71 e 94.

MARQUES, A. N.; NAVE, J. C.; ROSALES, R. R. A Correction Function Method for Poisson problems with interface jump conditions. **Journal of Computational Physics**, v. 230, p. 7567–7597, 2011. Citado nas páginas 28, 41, 72 e 76.

_____. High order solution of poisson problems with piecewise constant coefficients and interface jumps. **Journal of Computational Physics**, v. 335, p. 497–515, 2017. Citado nas páginas 41, 72 e 76.

MITTAL, R.; IACCARINO, G. Immersed Boundary Methods. **Annu. Rev. Fluid Mech.**, v. 37, p. 239–261, 2005. Citado nas páginas 16 e 66.

PALACZ, M.; HAIDA, M.; SMOLKA, J.; NOWAK, A. J.; BANASIAK, K.; HAFNER, A. HEM and HRM accuracy comparison for the simulation of CO₂ expansion in two-phase ejectors for supermarket refrigeration systems. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 115, p. 160–169, 2017. Citado na página 26.

PESKIN, C. S. Heart Valves: A Numerical Method. **Journal of Computational Physics**, v. 10, p. 252–271, 1972. Citado nas páginas 26 e 65.

_____. The fluid dynamics of heart valves: experimental, theoretical, and computational methods. **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 14, n. 1, p. 235–259, 1982. Citado na página 63.

PESKIN, C. S.; PRINTZ, B. F. Improved volume conservation in the computation of flows with immersed elastic boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 105, p. 33–46, 1993. Citado na página 66.

PIVELLO, M. R. **A Fully Adaptative Front-Tracking Method for the Simulation of 3D two-phase Flows**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia - Faculdade de Engenharia Mecânica, 2012. Citado na página 54.

SEO, J.; MITTAL, R.; CAPLAN, J.; TAMARGO, R. **Modeling Enabled Database for Aneurysm Hemodynamics and Risk: A Semi-automated Method for Computational Modeling of Intracranial Aneurysm Hemodynamics**. 2015. Disponível em: <<https://goo.gl/oC7mcS>>. Citado nas páginas 16 e 63.

SILVA, F. G. F. L. **Definição dos mecanismos de polaridade celular durante a citocinese**. Tese (Doutorado) — Universidade do Algarve, 2016. Citado na página 61.

STRÖM, H.; SASIC, S.; JARETEG, K.; DEMAZIÈRE, C. Behaviour and Stability of the Two-Fluid Model for Fine-Scale Simulations of Bubbly Flow in Nuclear Reactors. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 13, n. 4, p. 449–459, 2015. Citado na página 26.

TAN, Z.; LE, D. V.; LIM, K. M.; KHOO, B. C. An immersed interface method for the incompressible Navier-Stokes equations with discontinuous viscosity across the interface. **SIAM J. SCI. COMPUT.**, v. 31, n. 3, p. 1798–1819, 2009. Citado na página 68.

TECPLOT. **CFD Simulation Analysis Times Reduced Using Tecplot Chorus and Immersed Boundary Method**. 2015. Disponível em: <<http://people.math.sfu.ca/~stockie/teaching/apma990/hosseini.html>>. Citado nas páginas 15 e 25.

THOMPSON, J. F. Grid generation techniques in computational fluid dynamics. **AIAA Journal**, v. 22, n. 11, p. 1505–1523, 1984. Citado na página 26.

TIBIRICA, C. B.; SZCZUKIEWICZ, S.; RIBATSKI, G.; THOME, J. Critical heat flux of r134a and r245fa inside small-diameter tubes. **International Journal of Refrigeration**, v. 34, p. 492–499, 2013. Citado na página 26.

TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. **Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado na página 59.

Research on the application of gas hydrate in cool storage air conditioning., v. 121. [S.l.]: Elsevier, 2015. 1118–1125 p. Citado na página 26.

WANG, Z. C.; YUAN, Q.; SHEN, B. S.; TANG, D.; ZHANG, X. Mathematic Abstraction for Fluid-structure Interaction Analysis of Bioprosthetic Heart Valves with Immersed Boundary Method. **International Conference on Mechanical, Control, Electric, Mechatronics, Information and Computer (MCEMIC 2016)**, p. 248–253, 2016. Citado na página 27.

WIEGMANN, A.; BUBE, K. P. The immersed interface method for nonlinear differential equations with discontinuous coefficients and singular sources. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, SIAM, v. 35, n. 1, p. 177–200, 1998. Citado na página 68.

_____. The explicit-jump immersed interface method: finite difference methods for PDEs with piecewise smooth solutions. **SIAM J. Numerical Analysis**, v. 37, n. 3, p. 827–862, 2000. Citado nas páginas 43, 44, 56, 57, 68, 69 e 76.

XIA, K.; ZHAN, M.; WEIA, G. W. Mib galerkin method for elliptic interface problems. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 272, p. 195–220, 2014. Citado nas páginas 16, 70 e 71.

XU, S.; WANG, Z. J. An immersed interface method for simulating the interaction of a fluid with moving boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 216, p. 454–493, 2005. Citado nas páginas 15, 27, 28, 66, 68 e 94.

ZHAO, J.; HOU, Y.; LI, Y. Immersed interface method for elliptic equations based on a piecewise second order polynomial. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 63, p. 957–965, 2012. Citado nas páginas 28 e 68.

ZHONG, X. A New High-Order Immersed Interface Method for Multi- Phase Flow Simulation. **Aerospace Sciences Meeting and Exhibit Conference**, 2006. Citado nas páginas 28 e 68.

_____. A New High-Order Immersed Interface Method for Solving Elliptic Equations with Imbedded Interface of Discontinuity. **Journal of Computational Physics**, v. 225, p. 1066–1099, 2007. Citado nas páginas 28, 66, 68 e 69.

ZHOU, Y. C.; ZHAO, S.; FEIG, M.; WEI, G. W. High order matched interface and boundary method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. **Journal of Computational Physics**, v. 213, p. 1–30, 2006. Citado nas páginas 28, 68, 70, 76 e 94.