

Dinâmica 13/10/2023 a 13/10/2023 Métodos de diferenças finitas.

MET-576-4

Modelagem Numérica da Atmosfera

Dr. Paulo Yoshio Kubota

Os métodos numéricos, formulação e parametrizações utilizados nos modelos atmosféricos serão descritos em detalhe.

3 Meses 24 Aulas (2 horas cada)



Aula b

- Conteúdo
- Rever propriedades importantes de equações de onda 1D simples (advecção)
 - Ênfase na perspectiva física, não na derivação rigorosa.
- Solução analítica do problema de descontinuidade 1D
 - O problema de Riemann
- Fornece uma ferramenta para o desenvolvimento de esquemas numéricos para o tratamento de ondas de choques

- Livro de referência para todas as palestras na semana 1
- Mecânica de fluidos computacional e transferência de calor, por J.C. Tannehill, D. A. Anderson e R. H. Pletcher Capítulo 4.4: Introdução, 4.4.1-4.4.3 4.4.8-4.4.9 4.4.11-4.4.12.



Por que estudar as equações de onda 1D simples?

Vamos simplificar as equações de Navier-Stokes + Lei dos gases ideais $P = \rho RT$, vamos colocar os termos viscosos (na Euler Eq.) E reduzir 3D para 1D $(t, x, y, z) \Rightarrow (t, x)$

Equação de Euler 1D

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho (c_v T + \frac{u^2}{2}) \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u u + p \\ \rho u (c_v T + \frac{u^2}{2}) + p u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Forma Conservativa

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{U} + \frac{\partial}{\partial x}\vec{F}(\vec{U}) = 0$$
, where \vec{U} and \vec{F} are 3×1 vector

Forma Não Conservativa

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{U} + [A] \frac{\partial}{\partial x} \vec{U} = 0$$
, where $[A] \equiv \frac{\partial F}{\partial U}$ is 3x3 matrix

$$\vec{U} = u_i + v_j + w_k$$

$$\vec{F} = f(u_i) + f(v_j) + f(w_k)$$

$$\frac{\partial F(u_i)}{\partial u_i} + \frac{\partial F(v_j)}{\partial u_i} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial u_i} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial v_i} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial v_j} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial v_j} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial w_k} + \frac{\partial F(v_j)}{\partial w_k} + \frac{\partial F(w_k)}{\partial w_k}$$



Por que estudar as equações de onda 1D simples?

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial F(\vec{U})}{\partial x} = 0$$

$$\vec{U} = u_i + v_j + w_j$$
$$\vec{F} = f(u_i) + f(v_i) + f(w_i)$$

Reduz a complexidade em \vec{U} e \vec{F} (vetor de tamanho 3x1) para um escalar de **componente único** de q e f(q) respectivamente

Forma Conservativa

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f(q(x,t))}{\partial x} = 0$$

Nota 1

- (1) q(x,t) depende do espaço e do tempo
- (2) Suponha que f(q, x) não dependa de t

Forma Não Conservativa

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = 0$$



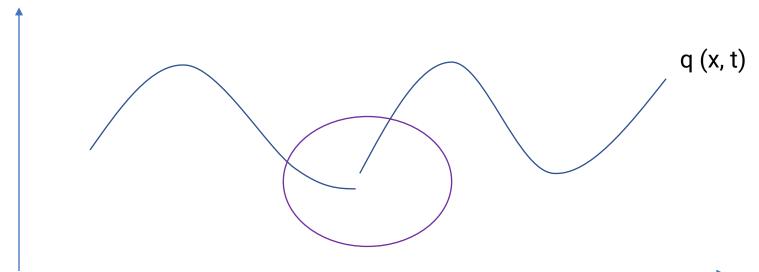
Por que estudar as equações de onda 1D simples?

Sobre a forma conservativa / não conservativa:

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = 0$$

para assegurar, q(x, t) deve permanecer suave em x.

Quando q (x, t) contém **descontinuidade** em x, **devemos usar a forma conservativa** que é derivada das leis de "conservação" físicas fundamentais.





A equação de advecção linear 1D simples?

com u constante para todo x e t

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

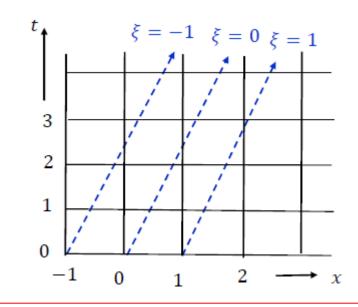
Introduza uma nova coordenada, $(x, t) \rightarrow (\xi, \tau)$

$$\begin{cases} x(\xi,\tau) = \xi + u\tau \\ t(\xi,\tau) = \tau \end{cases}$$

$$\left. \frac{\partial q(\xi, \tau)}{\partial t} \right|_{Eix \xi} = \frac{\partial q(x, t)}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tau} + \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} = 0$$

$$\rightarrow q(\xi, \tau) = const|_{Fix \xi}$$

O valor de q assegurado constante para diferentes τ (ou t) ao longo de toda a trajetória $x(\xi, \tau)$ em um ξ fixo



No gráfico (x,t) a linha com valor fixo de ξ é chamado de linha das características, $\xi_{fix} = x - ut$ portanto $\frac{dx}{dt} = u$. Em um gráfico (x, t), u é a inclinação inversa do linha característica (-).

A $\frac{Dq}{Dt} \equiv \frac{\partial q(\xi,\tau)}{\partial t}\Big|_{Fix\;\xi}$ é análoga ao conceito de derivada substancial ou derivada material frequentemente usada em mecânica dos fluidos

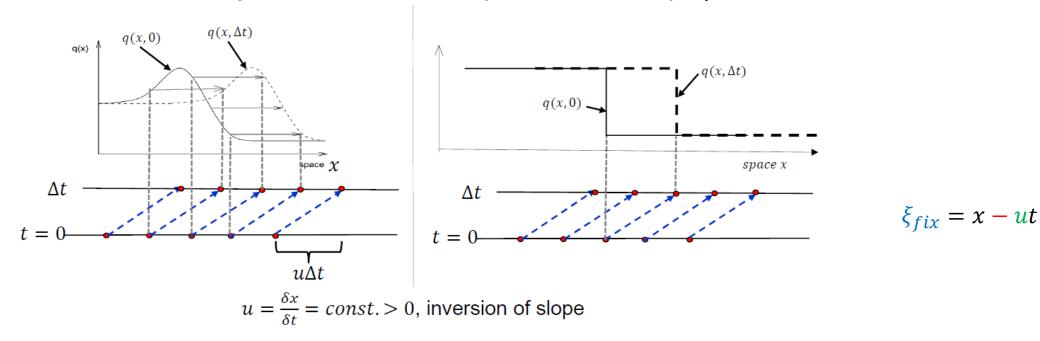


A equação de advecção linear 1D simples?

com u constante para todo x e t

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

A onda "característica" e o diagrama de onda usados para resolver a equação da onda.



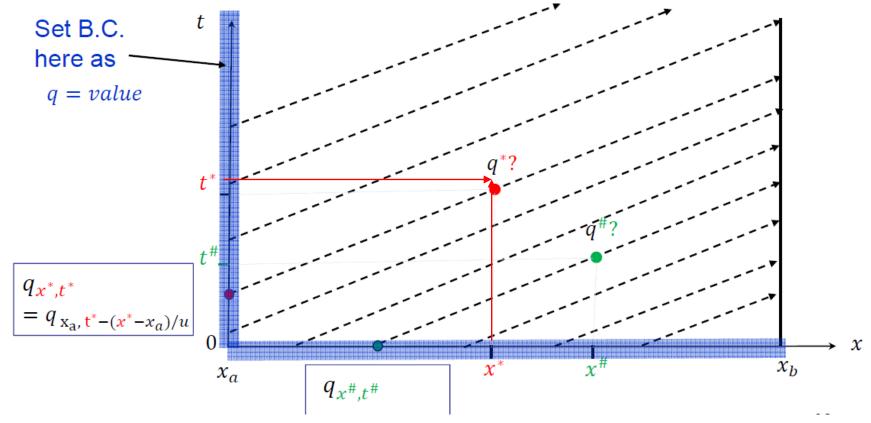
- 1) Não importa qual perfil inicial de q(x, t = 0), ele pode até ser descontínuo.
- 2) A advecção simples apenas muda o perfil inicial q(x, t = 0); se a partir de um q(x, t = 0) inicialmente suave (parabola), a descontinuidade em q(x, t = dt)nunca será criada para qualquer t> 0.



A equação de advecção linear 1D simples?

Método das características e condições de contorno. (B.C.)

$$\frac{\partial \mathbf{q}(x,t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{q}(x,t)}{\partial x} = 0 \quad resolva \ para \ x \in (x_a, x_b)$$





A equação de advecção linear 1D simples?

com uma velocidade u de advecção dependente do espaço u (x)

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + u.\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = 0 \quad resolva \, para \, x \, \in (x_a,x_b)$$

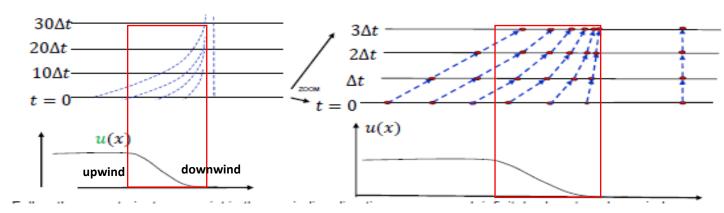
$$\frac{\partial}{\partial t} q(x,t) + u(x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} q(x,t) = 0,$$
New coordinate $(x,t) \to (\xi,\tau)$

$$\begin{cases} x(\xi,\tau) = \xi + \int_0^\tau u(x(\xi,\tau^*)) d\tau^* \\ t(\xi,\tau) = \tau \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q(x,t) = 0,$$

$$\frac{\partial}{$$

Curved characteristic lines



Seguindo a trajetória da onda, <u>um ponto com direção ascendente do vento pode se aproximar infinitamente perto de um ponto com direção descendente vento</u>, mas nunca pode alcançá-lo em um tempo finito. Portanto, a **descontinuidade** em q(x, t = tn) **não pode se formar em tempo finito**, se partir de um perfil inicialmente suave (parabola) de q(x, t = 0)

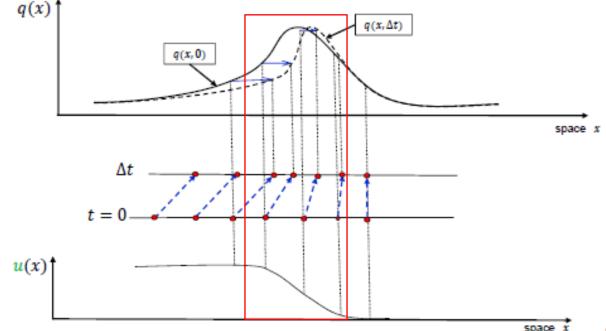


A equação de advecção linear 1D simples?

com uma velocidade u de advecção dependente do espaço u (x)

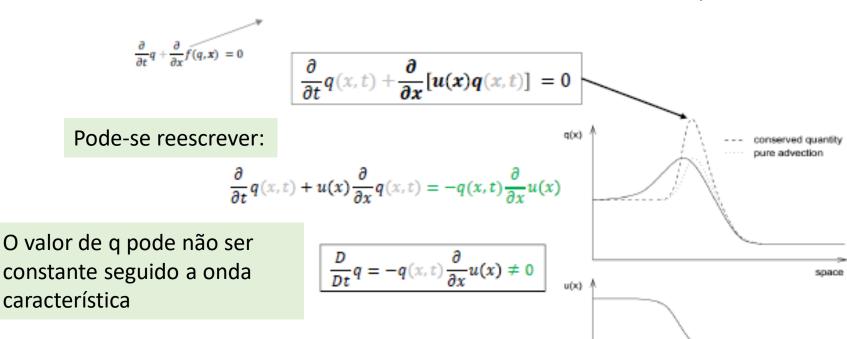
$$\frac{\partial \mathbf{q}(x,t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{q}(x,t)}{\partial x} = 0 \quad resolva \ para \ x \in (x_a, x_b)$$

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



A equação de advecção linear 1D simples?

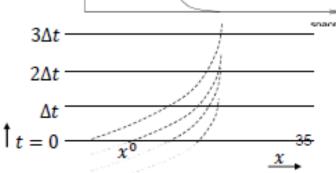
quantidade conservativa com uma velocidade u de advecção dependente do espaço u (x)



Os índice permite integrar q no limite $x_a < x < x_b$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_a}^{x_b} q dx + [u(x_b)q(x_b, t) - u(x_a)q(x_a, t)] = 0$$

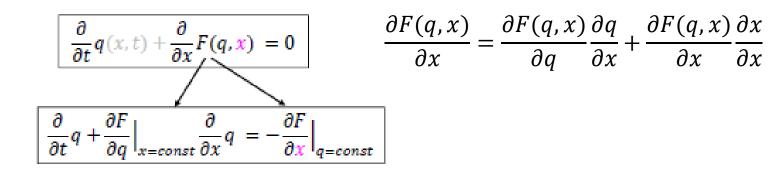
A integração acima pode mudar no tempo!





A equação de advecção linear 1D simples?

Resumo: A forma geral de Fluxo para as equações de conservação



Linear Example 1

 $F(q,x) \stackrel{\text{def}}{=} u \cdot q^1$

Nonconservative form:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

Linear Example 3

$$F(q,x) \stackrel{\text{def}}{=} u(x) \cdot q^1$$

Nonconservative form:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u(x)\frac{\partial q}{\partial x} = -q\frac{\partial u}{\partial x} \neq 0$$

Linear Example 2 can not be expressed in conserved form

New example: Nonlinear Inviscid burge's equation

$$F(q,*) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}q^2$$

Nonconservative form:

$$\frac{\partial}{\partial t}q + q\frac{\partial}{\partial x}q = 0$$

The Euler equation is in this form!



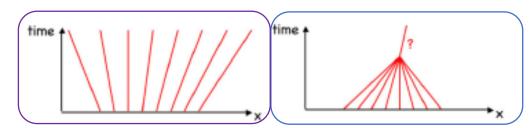
A equação de advecção não Linear 1D simples?

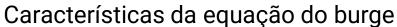
Eq. Inviscido de burge

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2} \right) = 0 \implies \frac{D\mathbf{q}}{Dt} \equiv \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{q}) = 0 \quad resolva \ para \ x \in (x_a, x_b)$$

A velocidade da onda característica u = q(x, t)agora também depende do tempo t

- (1) q(x,t) ao longo de qualquer linha característica deve ser constante.
- (2) Uma vez que a velocidade da onda u = q(x, t) dita a inclinação da onda característica, todas as linhas características devem ser retas.

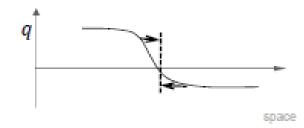




Esquerda: caso de características divergentes.

À direita: caso de características convergentes com a formação de uma singularidade.

Após o momento da criação da singularidade?, a solução está toda definida, a menos que seja dada uma receita de como tratar a singularidade.



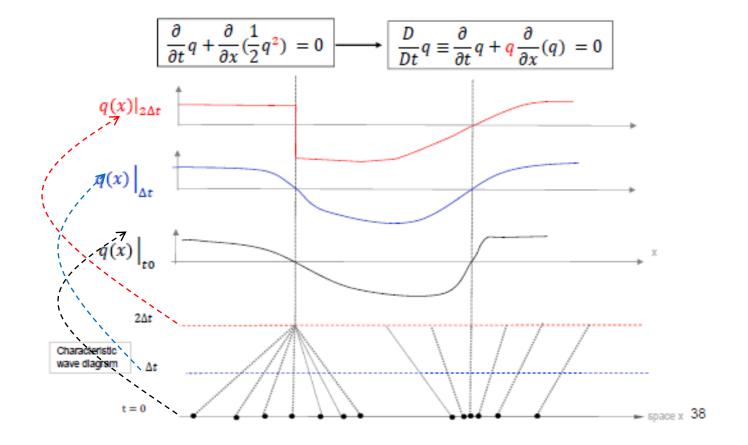
A não linearidade causa a formação de descontinuidade em q(x,t), a partir de um perfil inicialmente suave de d (x, 0) em tempo finito



A equação de advecção não Linear 1D simples?

Solução da equação do burge inviscido antes da formação da descontinuidade

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2} \right) = 0 \implies \frac{D\mathbf{q}}{Dt} \equiv \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{q}) = 0 \quad resolva \ para \ x \in (x_a, x_b)$$





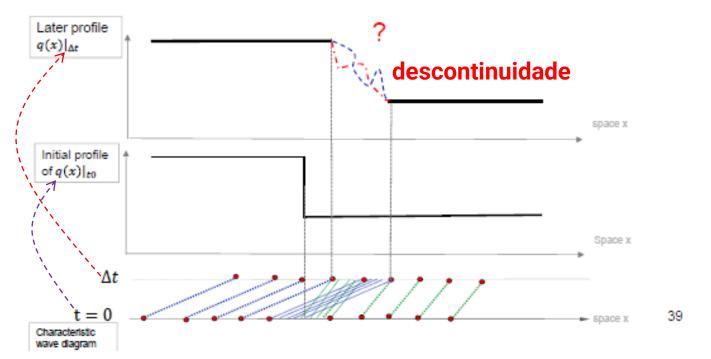
A equação de advecção não Linear 1D simples?

Vamos nos concentrar na evolução temporal de uma descontinuidade "única".

de acordo com a equação do burge inviscido

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mathbf{q}^2}{2} \right) = 0 \implies \frac{D\mathbf{q}}{Dt} \equiv \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{q}) = 0 \quad resolva \ para \ x \in (x_a, x_b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}q + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{1}{2}q^2) = 0 \longrightarrow \frac{D}{Dt}q \equiv \frac{\partial}{\partial t}q + \frac{\partial}{\partial x}(q) = 0$$





A equação de advecção não Linear 1D simples?

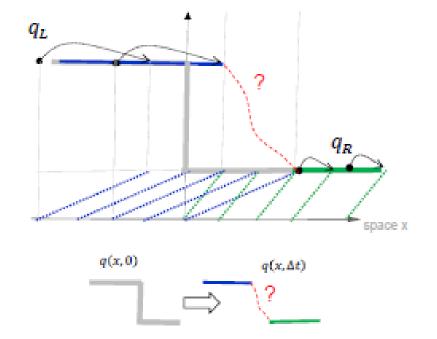
O problema de Riemann

O problema de Riemann: "Problema de valor inicial composto de uma equação de conservação junto com dados constantes separados por uma única descontinuidade"

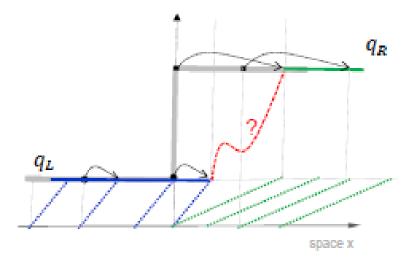
O problema de Riemann

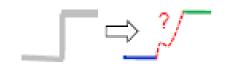
$$q(x,t=0) = \begin{cases} q_L & para & x \le 0 \\ q_R & para & x > 0 \end{cases}$$

shockwave $q_L > q_R$



Expansion $q_L < q_R$







O problema de Riemann

Esta é a solução analítica para a equação burge inviscido

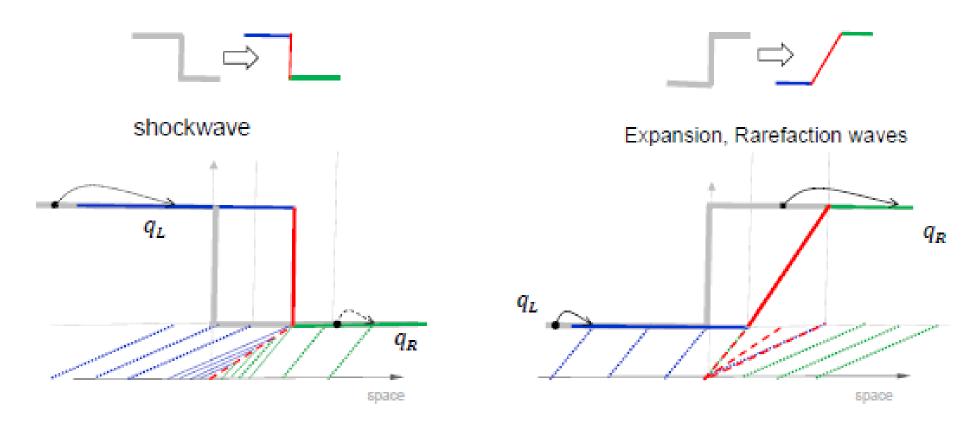
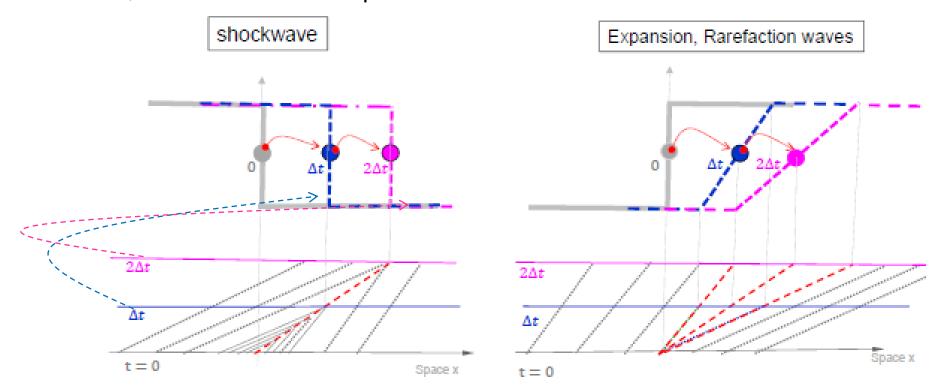


Diagrama de onda da solução do problema de Riemann para a equação de burge invíscido. Nota: a solução analítica diz que as linhas caracteristicas são retas da origem !!!

O problema de Riemann

Solução do problema de Riemann para eq. Burge inviscido. Qual é a velocidade do ponto de valor "médio"?



1: A velocidade do ponto médio em ambos os casos é a mesma: $c = \frac{q_L + q_R}{2}$ (com $c = \frac{dx_{mid}}{dt}$ e q $(x_{mid}, t) = \frac{q_L + q_R}{2}$:

2: Para o caso da onda de choque, **a continuidade apenas faz uma translação simples no tempo**, isso parece ser **semelhante a um problema de advecção linear** com uma velocidade de **convecção constante** definida como c.

O problema de Riemann

Como resolver o problema de Riemann? para equação de burge invíscidos Soluções exatas (analíticas):

- 1) Galilean invariance $(q^* = q c; x^* = x + ct; t^* = t)$ $\frac{\partial}{\partial t^*} q^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^*} q^{*2} = 0 \quad \langle \Box \quad \frac{\partial}{\partial t} q + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} q^2 = 0$
- 2) **Self-similarity**: (All characteristical lines at the discontinuity are straight) Given initial condition: $q(x>0^+,t=0)=u_r$; $q(x<0^+,t=0)=u_l$ $q(x,t)=\phi\left(\frac{x}{t}\right); for \ t>0$



$$q(x,t) = \begin{cases} -a, & x > 0^+ \\ a, & x < 0^- \end{cases} \qquad q(x,t) = \begin{cases} \frac{x}{t}, -a < \frac{x}{t} < a \\ \overline{+}a, outside \ above \end{cases}$$

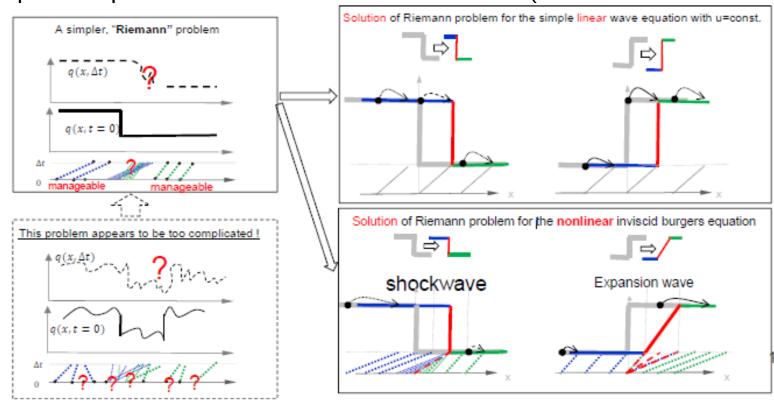


Resumo da aula 1.b

- (1) Equações de onda 1D (forma conservativa vs. não conservativa; Linear vs. não linear)
- (a) $\frac{\partial q(\xi,\tau)}{\partial \tau} = 0 \rightarrow q(\xi,\tau) = const|_{Fix\,\xi}$ O valor não muda seguindo a trajetória de um ponto da onda. Aproximação de um diagrama de onda
 - (b) A descontinuidade pode se formar em tempo finito com a equação de burger invíscidos não linear

(2) O problema do valor inicial para um problema envolvendo descontinuidade (como a descontinuidade evolui

com o tempo?)







Aula 2.a

- Recapitulação do método de volumes finitos
- Esquemas numéricos para equações hiperbólicas conservativas
- Métodos clássicos e modernos de captura de choque
 - Esquemas clássicos de captura de choque
 - Esquemas modernos de captura de choque



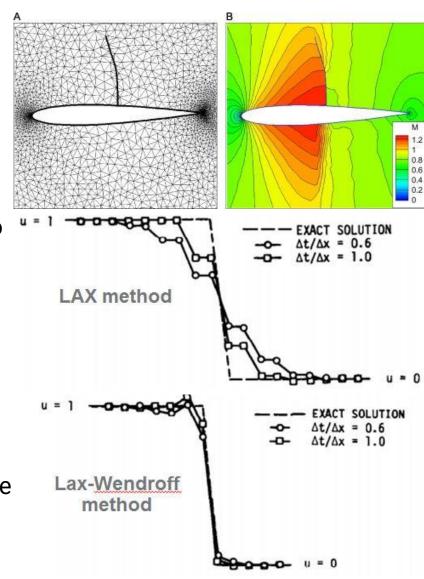
Métodos numéricos para equações hiperbólicas e conservativas

- Para desenvolver um esquema numérico
 - Estrutura de diferenças finitas
 - Série Taylor, fácil de avaliar a precisão
 - Funciona para uma função suave.
 - não é bom para choque, grande descontinuidade
- Estrutura de volume finito
 - As leis de conservação também são satisfeitas na representação discreta, o que é essencial para lidar corretamente com a descontinuidade do salto, como a onda de choque!



Métodos de adaptação de choque vs. métodos de captura de choque

- Métodos de adaptação de choque
- usa um tratamento especial para prescrever relações de choque explícitas (Rankine-Hugoniot). No choque e a localização do choque é ajustada um amortecimento para amarrar os dois lados lisos separados pelo choque.
- Métodos de captura de choque
- Os métodos podem ser moldados em forma conservativa, sem tratamento especial para a descontinuidade do choque.
- Precisão
 - Esquema de ordem baixa (1ª)
 - (solução monotônica, baixa precisão, geralmente muito dissipativa)
 - Esquemas de ordem superior
 - Propriedades desejadas para um esquema numérico
 »Preservação da monotonicidade, diminuição da variação total (TVD)
 - Problemas não físicos causados por métodos numéricos
- »Foi provado que o esquema" linear "com precisão superior a 1ª ordem se tornará não monotônico
- »A consequência de oscilações não físicas levará a -> pressão negativa, densidade->divergência!





Sobre o método de volume finito para tratar o problema de choque Alguns fatos simples a serem enfatizados

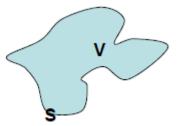
- Preocupações gerais ao lidar com problemas contendo choque
- "Choque" está associado a uma descontinuidade (espacial / temporal) em certa quantidade q (x, t). No entanto, em certas situações, podemos encontrar as derivadas de q, isto é q_x ou q_t cujos valores supostamente são singulares, o que invalidará a suposição de suavidade subjacente ao método de aproximação usado na abordagem de diferença finita (FD). Nós, portanto, voltamos para o método dos volumes finitos.
- Antes de mergulhar em esquemas numéricos específicos projetados especificamente para lidar com choques, devemos estar cientes de que as leis físicas formalmente estabelecidas (ou seja, conservação de massa, quantidade de movimento e energia) são capazes de tratar um problema de contenção de choque.
- Existem diferentes formas de equações governantes para a descrição matemática das leis físicas acima, ou seja, uma forma "diferencial" vs. uma forma "integral".
 - Um problema de choque pode ser descrito pela equação de conservação na forma "integral".



Sobre o método de volume finito para tratar o problema de choque Alguns fatos simples a serem enfatizados

As equações de conservação na forma "integral" podem lidar com o salto de descontinuidade, porque, ao contrário do valor bruto de, a quantidade integrada de $\iiint_V q dV$ é mais provável de ser diferenciável no tempo!

$$\frac{d}{dt}\left(\iiint_{V} q \, dv\right) = \iint_{S} F(q, x) ds$$



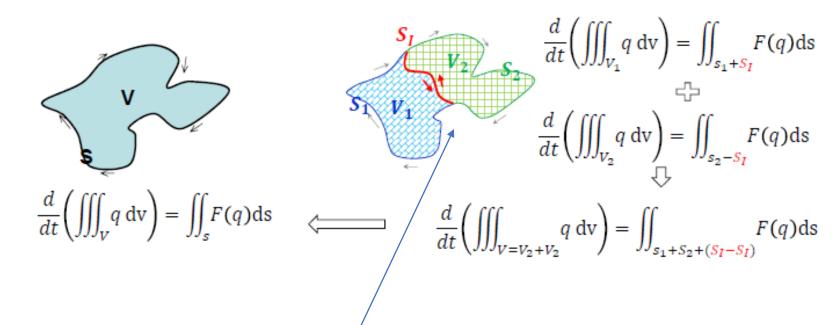
- Pegue um volume de controle V de forma arbitrária, cuja superfície externa é denotada como S.
- Para simplificar, suponha que V seja um único conectado e não se deforma com o tempo, presuma que não há nenhuma fonte externa.
- A taxa de variação (temporal) de uma quantidade q integrada sobre V deve ser igual aos fluxos (F) somados em uma superfície S. (Existem diferentes tipos de fluxos, por exemplo, fluxo de convecção ou fluxo de difusão)



Sobre o método de volume finito para tratar o problema de choque

Uma propriedade peculiar preservada pelo método de volume finito (embora não seja necessariamente preservada por outros métodos, por exemplo, método FD)

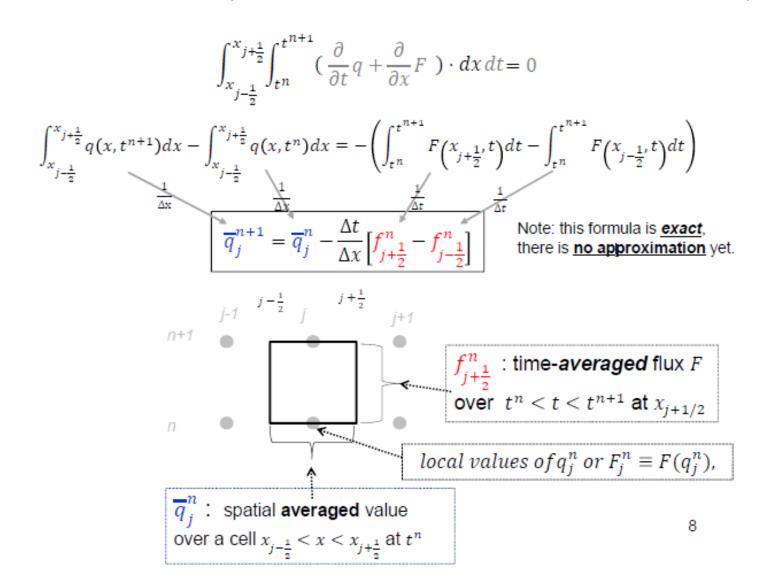
- cancelamento exato de fluxos através da interface compartilhada entre dois volumes de controle contíguos



- Uma lei de "conservação" se aplica ao volume de controle V de **forma arbitrária**, uma consequência peculiar de tal propriedade é que se **decompormos o volume e a superfície como** $V = V_1 + V_2$ e $S = S_1 + S_2$ respectivamente, a mesma regra será válida também para V_1 e V_2 cujas superfícies externas são $S_1 + S_1$ e $S_2 + S_1$, respectivamente.
- A interface de compartilhamento; S_l entre V_1 e V_2 é interna ao volume de controle combinado V, cuja superfície externa S não contém S_l .



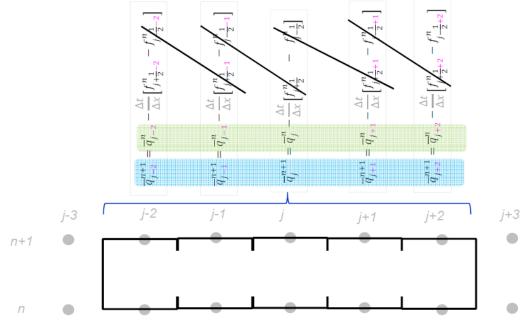
Recapitulação do método dos volumes finitos (preste atenção!)





Recapitulação do método dos volumes finitos (preste atenção!)

Cancelamento de fluxos através das interfaces vizinhas compartilhadas entre células contíguas



Vamos somar as 5 relações discretizadas acima obtidas para 5 células contíguas:

$$\left(\overline{q}_{j+2}^{n+1} + \overline{q}_{j+1}^{n+1} + \overline{q}_{j+1}^{n+1} + \overline{q}_{j+2}^{n+1} + \overline{q}_{j+1}^{n+1} + \overline{q}_{j+1}^{n+1} + \overline{q}_{j+1}^{n} + \overline{q}_{j}^{n} + \overline{q}_{j+1}^{n} + \overline{q}_{j}^{n} + \overline{q}_{j+1}^{n} \right) - \frac{\triangle t}{\triangle \varkappa} \left[f_{j+\frac{1}{2}+2}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}+2}^{n} + f_{j+\frac{1}{2}}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}+1}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}+1}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}+2}^{n} - f_{$$

Da mesma forma que a aplicação das regras de conservação física, obtemos uma discretização consistente em uma única célula como a união de 5 células contíguas. Isso não é necessariamente satisfeito por um método FD arbitrário.



Recapitulação do método dos volumes finitos (preste atenção!)

Agora estudamos a derivação FD para o esquema upwind de 1ª ordem mais simples, a fim de

 demonstrar como um esquema numérico derivado de uma estrutura de diferenças finitas pode, às vezes, ser convertido em uma formulação de volume finito equivalente (FV)

• e também, para destacar o fato de que tais reformulações de FV nem sempre são possíveis.



Derivação de diferenças finitas de um esquema upwind básico de 1ª ordem

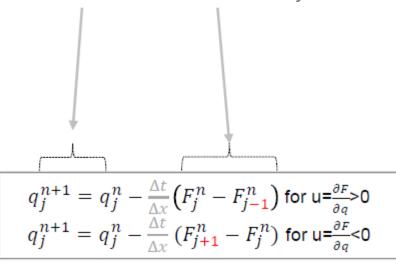
para equação de advecção linear simples

$$\frac{\partial}{\partial t}q(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}F(q_{\tau}x)=0 \ , \ \text{with} \ F(q)=u\cdot q \ \text{and} \ \frac{\partial F}{\partial q}=\text{u=const}.$$



, • * •

FD approximations at point (t^n, x_j)



Precisão de 1ª ordem, dissipativo, para estabilidade numérica $CFL = \frac{u\delta t}{\delta x} < 1$

Nota: neste slide, o símbolo q_j^n representa o valor local no ponto (x_j, t^n) . No entanto, no próximo slide, iremos reinterpretá-lo como a média da célula, ou seja, $q_j^n = \left(\overline{q}_j^n \equiv \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x_j, t^n) \, dx \right)$



Reformulação de volumes finitos do esquema upwind básico de 1ª ordem para equação de advecção linear simples

$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(q,x) = 0 \quad com F(q) = u.q \quad com \frac{\partial F}{\partial q} = u = cte$$

Esquema upwind de 1ª ordem obtido anteriormente

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_j^n - F_{j-1}^n \right) \text{ for } u = \frac{\partial F}{\partial q} > 0$$

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{j+1}^n - F_j^n \right) \text{ for } u = \frac{\partial F}{\partial q} < 0$$

a ser reformulado em

O esquema FD acima pode ser reformulado para a forma FV conservativa, desde que

(i) reinterpretar q_j^n como \bar{q}_j^n (o termo de fluxo $F_j^n = F(q_j^n)$ também deve ser interpretado como $F(\bar{q}_j^n)$

(ii) Aproximado
$$f_{j+\frac{1}{2}}^n \approx \begin{cases} F_j^n, & u > 0 \\ F_{j+1}^n, & u < 0 \end{cases}$$
 (desloca o Índice de para verificar: $f_{j+\frac{1}{2}-1}^n \approx \begin{cases} F_{j-1}^n, & u > 0 \\ F_{j+1-1}^n, & u < 0 \end{cases}$



Reformulação de volumes finitos do esquema upwind básico de 1ª ordem

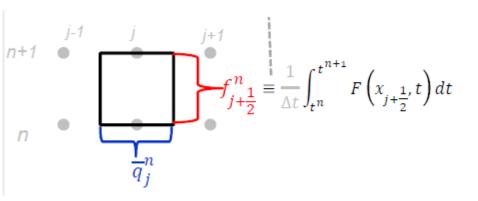
para equação de advecção linear simples

(ii) Aproximado
$$f_{j+\frac{1}{2}}^{n} pprox \begin{cases} F_{j}^{n}, \\ F_{j+1}^{n}, \end{cases}$$

(ii) Aproximado
$$f_{j+\frac{1}{2}}^n pprox \begin{cases} F_j^n, & u>0 \\ F_{j+1}^n, & u<0 \end{cases}$$
 (desloca o Índice de para verificar: $f_{j+\frac{1}{2}-1}^n pprox \begin{cases} F_{j-1}^n, & u>0 \\ F_{j+1-1}^n, & u<0 \end{cases}$

$$\bar{q}_{j}^{n+1} = \bar{q}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right]$$

Lembre que:



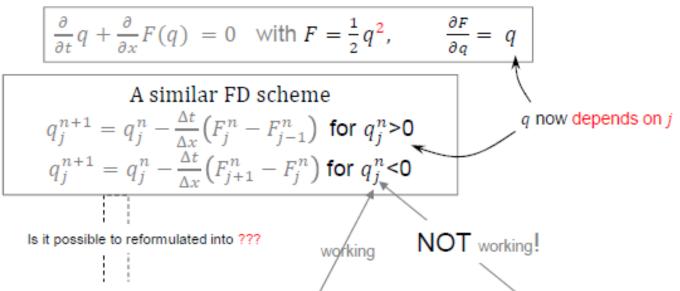
Duas fontes de erros de aproximação são devidos a

- (1) Falta de integração de tempo para $t^n \rightarrow t^{n+1}$
- (2) O fluxo exato $F(x_{j+\frac{1}{2}}, t)$ localizado na superfície da celula $x_{j+\frac{1}{2}}$ também foi estimado

$$F(x_{j+\frac{1}{2}},t) = u.q_{j+\frac{1}{2}} \approx F_j \approx u.\overline{q}_j^n$$



Reformulação de volumes finitos do esquema upwind básico de 1ª ordem agora vamos tentar a equação não linear do burger



Now the above FD scheme cannot be exactly rewritten into the general conservative

$$\text{form, because If we set } f_{j+\frac{1}{2}}^n \approx \begin{cases} F_j^n, \ q_j^{n} > 0 \\ F_{j+1}^n, q_j^n < 0 \end{cases}, \text{ then } f_{j+\frac{1}{2}-1}^n \approx \begin{cases} F_{j-1}^n, q_{j-1}^n > 0 \\ F_{j+1-1}^n, q_{j-1}^n < 0 \end{cases}$$

$$\overline{q}_{j}^{n+1} = \overline{q}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right]$$



Métodos de captura de choque

Métodos "clássicos" de captura de choque

- Esquema de Baixa ordem (2nd ordem)
- Lax (1954),

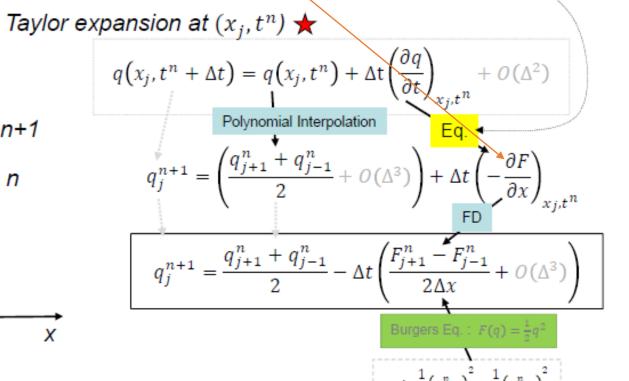


Derivação de diferenças finitas do método Lax (1ª ordem)

$$\frac{\partial}{\partial t}q = -\frac{\partial}{\partial x}F(q)$$

A equação conservativa

$$\frac{\partial}{\partial t}q + \frac{\partial}{\partial x}F(q) = 0$$



Stability of the LAX scheme $CFL = \frac{\Delta tq^{max}}{\Delta r} < 1$

Observação: neste slide, o símbolo q_j^n representa o valor local de q no ponto (x_j, t^n)



Reformulação de volumes finitos do método Lax (1ª ordem)

$$\frac{\partial}{\partial t}q = -\frac{\partial}{\partial x}F(q)$$

Fonte: Forma de diferenças finitas $q_j^{n+1} = \frac{q_{j+1}^n + q_j^n}{2} - \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^n - F_{j-1}^n}{2\Delta r} \right)$

$$F(x_j + \Delta x, t^n) = F(x_j, t^n) + \Delta x \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right) + O(\Delta^2)$$

Reinterprete o símbolo q_{i}^{n} como média da célula, ou seja, q_i^n interpretado como: \overline{q}_i^n $F_{j+1}^n \equiv F(q_j^n)$ interpretado como: $\overline{F}(\overline{q}_j^n)$ $\overline{F}(\overline{q}_{i}^{n}) = \frac{1}{2}\overline{q}^{2}$

Alvo: forma de volume finito
$$\bar{q}_j^{n+1} = \bar{q}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(f_{j+\frac{1}{2}}^n - f_{j-\frac{1}{2}}^n \right)$$

$$F\left(t, x + \frac{\Delta x}{2}\right) = \frac{F\left(t, x + \frac{\Delta x}{2}\right) + F\left(t, x - \frac{\Delta x}{2}\right)}{2} + \Delta x \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)$$

de interpolação:

Aqui está o resultado do **polinómio**
$$|f_{j+\frac{1}{2}}^n|_{LAX} = \frac{1}{2} (F_j^n + F_{j+1}^n) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} (q_{j+1}^n - q_j^n)$$
 Termo de dissipação de interpolação:

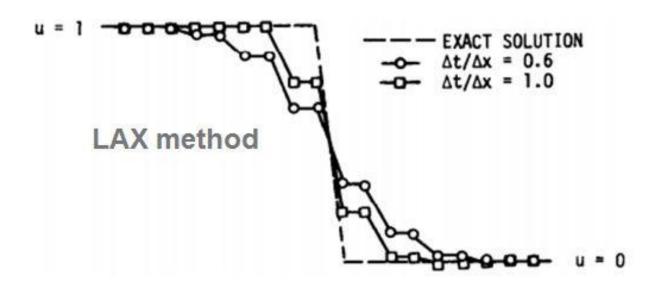
$$n+1$$
 $n+1$ $n+1$ $n+1$ $n+1$

$$\left| f_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LAY} = f_{(j-1)+\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2} \left(F_{j-1}^{n} + F_{(j-1)+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(q_{(j-1)+1}^{n} - q_{(j-1)}^{n} \right)$$

$$\left| \frac{f_{i-1}}{j-\frac{1}{2}} \right|_{LAX} = f_{(j-1)+\frac{1}{2}}^{n} = \frac{1}{2} \left(F_{j-1}^{n} + F_{(j-1)+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{q_{(j-1)+1}^{n} - q_{(j-1)+1}^{n}}{q_{(j-1)+1}^{n}} \right)$$



Reformulação de volumes finitos do método Lax (1ª ordem)



- Este método é dissipativo, porém preserva a monotonicidade.
- 2) 2) Ao contrário do esquema upwind, este esquema não precisa determinar explicitamente a "direção upwind", é fácil de implementar.



Métodos de captura de choque

• Métodos "clássicos" de captura de choque

- Esquema de alta ordem (2nd ordem)
- Lax-Wendroff (1960)



Derivação de diferenças finitas do método de Lax-Wendroff (2ª ordem)

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}F(q) = 0$$

Iniciamos com expansão em série de Taylor: $q(x_j, t^n + \Delta t) = q(x_j, t^n) + \Delta t \left(\frac{\partial q}{\partial t}\right)_{x_j, t^n} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 q}{\partial t^q}\right)_{x_j, t^n} + O(\Delta t^3)$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(q) = 0$$

Sem interpolação Diferente do esquema de LAX de 1 ordem Eq. + FD
O mesmo do
esquema dé LAX
de 1 ordém

$$\frac{\partial^2 q}{\partial t^q} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial F(q)}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F(q)}{\partial t} \right)$$

$$\frac{\partial^2 q}{\partial t^q} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} \right) \stackrel{tem-se}{\longleftrightarrow} J \equiv \frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial x} \left(J \frac{\partial q}{\partial t} \right)$$

$$q(x_{j}, t^{n} + \Delta t) = q(x_{j}, t^{n}) + \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^{n} - F_{j-1}^{n}}{2\Delta x} + O(\Delta t^{3})\right)_{x_{j}, t^{n}} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \left(\frac{1}{\Delta x} \left(J_{j+\frac{1}{2}}^{n} \frac{F_{j+1}^{n} - F_{j}^{n}}{\Delta x} - J_{j-\frac{1}{2}}^{n} \frac{F_{j}^{n} - F_{j-1}^{n}}{\Delta x}\right)\right)_{x_{j}, t^{n}} + O(\Delta t^{3})$$

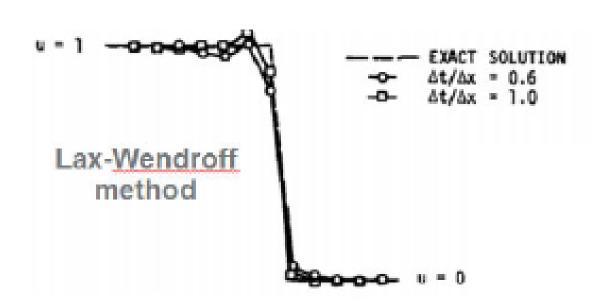


Derivação de diferenças finitas do método de Lax-Wendroff (2ª ordem)

$$q(x_{j}, t^{n} + \Delta t) = q(x_{j}, t^{n}) + \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^{n} - F_{j-1}^{n}}{2\Delta x} + O(\Delta t^{3})\right)_{x_{j}, t^{n}} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \left(\frac{1}{\Delta x} \left(J_{j+\frac{1}{2}}^{n} \frac{F_{j+1}^{n} - F_{j}^{n}}{\Delta x} - J_{j-\frac{1}{2}}^{n} \frac{F_{j}^{n} - F_{j-1}^{n}}{\Delta x}\right)\right)_{x_{j}, t^{n}} + O(\Delta t^{3})$$

$$Eq. Burger: F(q) = \frac{1}{2}q^2$$

$$J_{j+\frac{1}{2}}^{n} = J\left(\frac{q_{j+1}^{n} + q_{j}^{n}}{2}\right)$$



Mais preciso $O(\Delta t^3)$ No entanto, não preserva a monotonicidade (overshoot / undershoot numérico)



Reformulação de volumes finitos do método Lax-Wendroff

Fonte: F.D.
$$q(x_j, t^n + \Delta t) = q(x_j, t^n) + \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^n - F_{j-1}^n}{2\Delta x}\right)_{x_j, t^n} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{1}{\Delta x} \left(J_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{F_{j+1}^n - F_j^n}{\Delta x} - J_{j-\frac{1}{2}}^n \frac{F_j^n - F_{j-1}^n}{\Delta x}\right)\right)_{x_j, t^n}$$

Alvo: F.V.
$$\bar{q}_{j}^{n+1} = \bar{q}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(f_{j+\frac{1}{2}}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right)$$

$$\frac{\partial^2 q}{\partial t^q} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} \right) \stackrel{tem-se}{\longleftrightarrow} J \equiv \frac{\partial F}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial x} \left(J \frac{\partial q}{\partial t} \right)$$

Aqui está o resultado do polinómio de interpolação:

$$\left| f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LW} = \frac{1}{2} \left(F_{j}^{n} + F_{j+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \right)^{2} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)$$

$$J_{j+\frac{1}{2}}^{n} = J\left(\frac{q_{j+1}^{n} + q_{j}^{n}}{2}\right)$$

$$\lambda_{j+\frac{1}{2}}$$
: auto valor de $J_{j+\frac{1}{2}}$; (eq. burger $F(q) = \frac{1}{2}q^2 \longrightarrow J \equiv \frac{\partial F(q)}{\partial q} = q$



Reformulação de volumes finitos do método Lax-Wendroff

polinómio de interpolação: Lax-Wendroff

$$\left. \frac{f_{j+\frac{1}{2}}^{n}}{|_{LW}} \right|_{LW} = \frac{1}{2} \left(F_{j}^{n} + F_{j+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \right)^{2} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)$$

$$\left. \frac{f_{j+\frac{1}{2}}^{n}}{f_{j+\frac{1}{2}}^{n}} \right|_{LAX} = \frac{1}{2} \left(F_{j}^{n} + F_{j+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)$$

$$\left| f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LW} - \left| f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LAX} = \frac{1}{2} \left(F_{j}^{n} + F_{j+1}^{n} \right) - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \right)^{2} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right) - \frac{1}{2} \left(F_{j}^{n} + F_{j+1}^{n} \right) + \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)$$

$$\left. \frac{f_{j+\frac{1}{2}}^{n}}{f_{j+\frac{1}{2}}^{n}} \right|_{LW} - f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LAX} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \right)^{2} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right) + \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)$$

$$\left. f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LW} - f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LAX} = \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\left(q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n} \right)}{2} \left(1 - \left(\lambda_{j+\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^{2} \right)$$



Métodos de captura de choque MacCormark 1969



Métodos de captura de choque MacCormark 1969

tipo de variante do método Lax-Wendroff

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(q) = 0$$

$$q_j^{n+1,*} = q_j^n - \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^n - F_j^n}{\Delta x} \right)$$

Corretor:
$$q_j^{n+1} = \frac{q_j^n + q_j^{n+1,*}}{2} - \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{F_j^{n+1,*} - F_{j-1}^{n+1,*}}{\Delta x} \right)$$

Notas:

- 1) $q_i^{n+1,*}$ refere-se a um estado intermediário de valor armazenado computacionalmente, não é o resultado final para
- 2) Mudança de direção da diferença no preditor e no corretor.
- 3) O método MacCormark é equivalente ao método Lax-Wendroff para problemas lineares (ou seja, F(q) é uma função linear)
- 4) Compare com o método Lax-Wendroff, o método MacCormark pode ser implementado mais facilmente.



Ideal: híbrido o método Lax Wendroff e Lax

Forma de volume finito geral
$$\bar{q}_j^{n+1} = \bar{q}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^n - f_{j-\frac{1}{2}}^n \right]$$

$$\left| f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{Harten-zwas} = f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \left|_{LAX} + \psi \left(f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LW} - f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{LAX} \right)$$

<u>Ideal:</u> Use uma função não linear como limitador $\psi \geq 0$ para controlar a correção a ser alcançada

Ambas

precisão (LW, na região lisa)

е

preservação monótona (LAX, próximo a descontinuidade).



Esquema moderno de captura de choque



Métodos modernos de captura de choque

O método básico (1ª ordem)

- Esquema de Godunov (solucionador Riemann exato)
 - Esquema Roe (solucionador de Riemann aproximado)



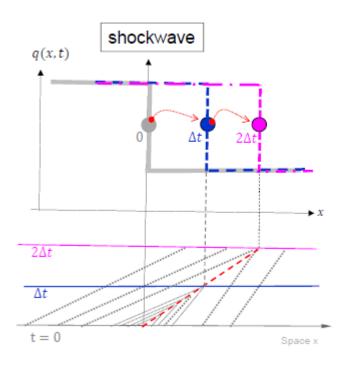
Recapitulação

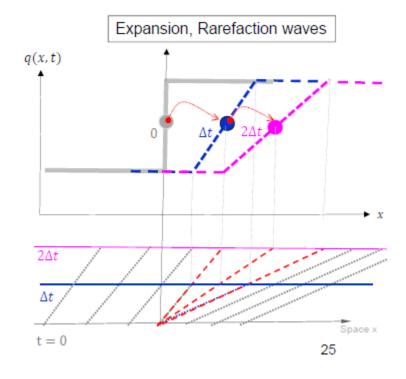
Resolva o problema exato de Riemann para a equação de burger invíscidos:



Forma conservativa: $\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} q^2\right) = 0$

Forma não conservativa: $\frac{\partial q}{\partial t} + q \cdot \frac{\partial}{\partial x}(q) = 0$







Esquema de Godunov (1959)

Motivação:

O esquema numérico derivado com base na expansão da série de Taylor pode <u>não ser ideal para</u> uma descontinuidade forte.

<u>Objetivo:</u> Avaliação dos termos de fluxo <u>em cada interface de célula pela solução de um problema de Riemann ("Problema de valor inicial composto de uma equação de conservação composto de dois conjuntos de dados constantes dispostos em duas partes com uma única descontinuidade")</u>

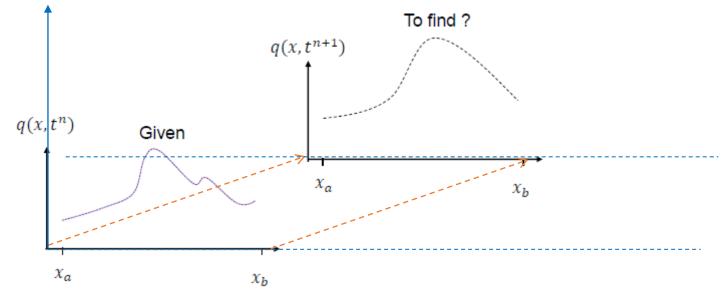


Esquema de Godunov (1959)

<u>Descrição do Problema:</u> Resolva uma equação de onda não linear, digamos a equação de burge invíscido de

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} q^2 = 0 \quad , para \ (x_a < x < x_b)$$

com um determinado perfil de $q(x,t^n)$ no tempo t^n , e para avançar a solução $q(x,t^{n+1})$ para um passo de tempo.



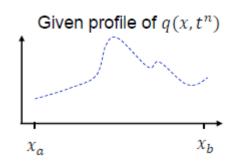


Esquema de Godunov (1959)

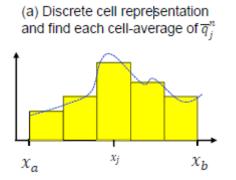
Etapa 1: reconstrução de $q(x, t^n)$

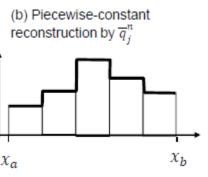
Piercewise function: Uma função definida por partes (também chamada de função por partes, uma função híbrida ou definição por casos) é uma função definida por múltiplas subfunções, onde cada subfunção se aplica a um intervalo diferente no domínio.

- (a) Representar o perfil espacial $q(x, t^n)$ em células de grade discretas centradas em x_j com $j \in (1, 2, ..., N)$ e calcular com precisão os valores médios das células de $\bar{q}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^n) \, dx$
- (b) O perfil original $q(x, t^n)$ é substituído por uma reconstrução com parte constante usando \bar{q}_j^n para todas as células j. Comparado ao perfil original, este perfil reconstruído não é suave em cada limite de célula, mas preserva as médias das células!



$$\bar{q}_{j}^{0} \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x,t^{0}) dx$$





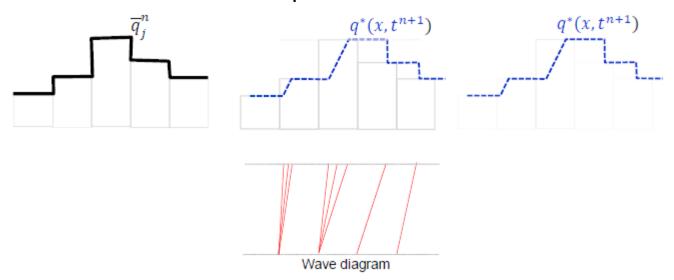


Esquema de Godunov (1959)

Etapa 2: Com base na reconstrução por partes constante de \bar{q}_j^n , resolvemos um problema de Riemann exato (ou seja, nenhuma aproximação nesta etapa) em cada interface de célula $x_{j+\frac{1}{2}}$ de diferente j, a solução é avançada Δt para obter $\bar{q}^*(x_j, t^n)$.

(a) O intervalo de tempo Δt deve ser limitado para evitar interferência entre a solução do problema de Riemann em qualquer uma das interfaces de duas células vizinhas.

Calculo exato do problema de Riemann

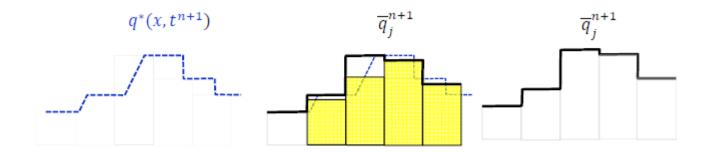




Esquema de Godunov (1959)

Etapa 3: (igual à etapa 1, mas repetida aqui para obter instruções mais claras):

O valor da média da célula do perfil $\bar{q}^*(x_j, t^{n+1})$ é calculado como $\bar{q}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q^*(x, t^n) dx$, cuja a nova reconstrução por partes é usada para repetir o avanço no tempo.



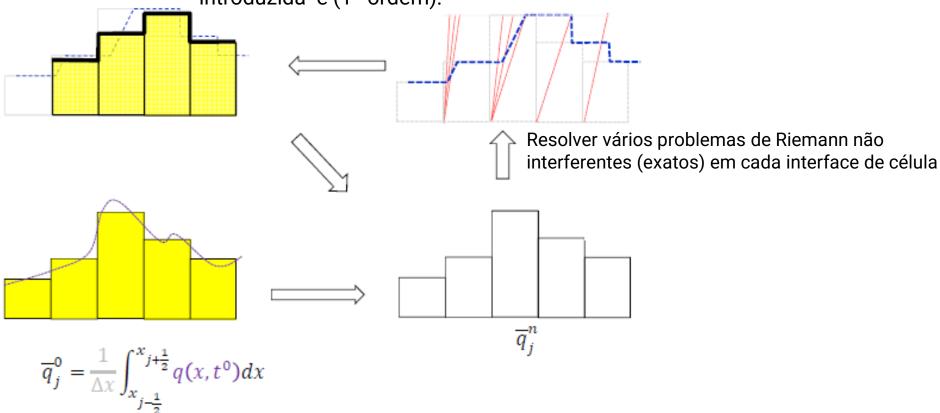
$$\bar{q}_{j}^{n+1} \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^{n}) dx$$



Esquema de Godunov (1959)

Um resumo do procedimento Novas soluções permanecem com partes constantes, a aproximação introduzida é (1ª ordem).

 $q(x,t^{n+1})$





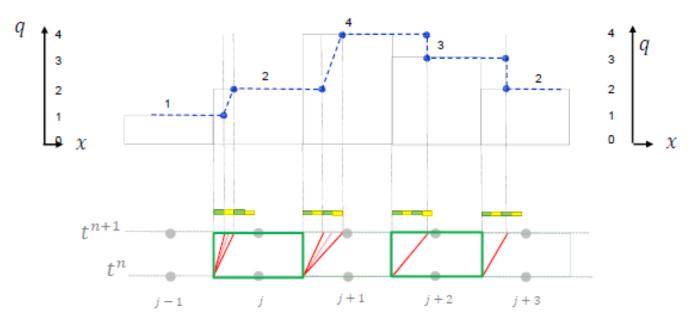
Esquema de Godunov (1959)

Esquema de Godunov: Demonstração 1 (todas as ondas normais)

(A): Resolvendo vários problemas contíguos de Riemann para a equação de burger $\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial q^2}{\partial x} = 0$ para obter q^*

Demonstração 1: Suponha que todas as ondas normais, ou seja, **a velocidade da onda** $(\frac{\partial F}{\partial q} = q)$ em todas as

células são positivas.

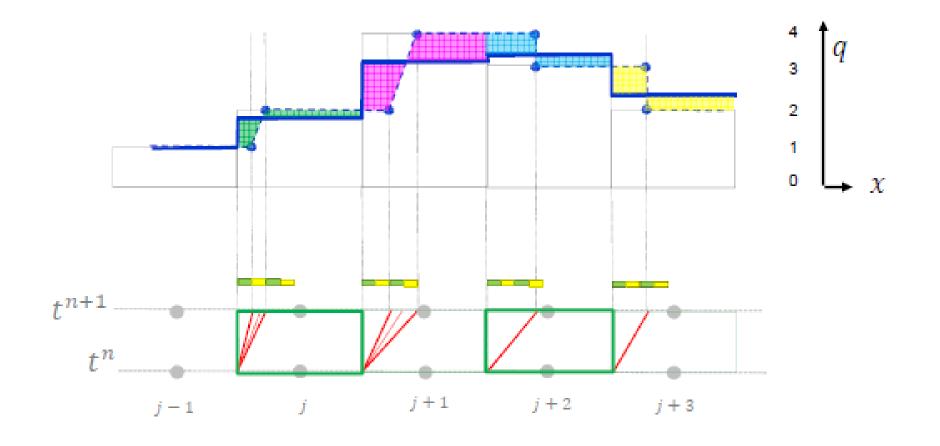




Esquema de Godunov (1959)

Esquema de Godunov: Demonstração 1 (todas as ondas normais)

(B1): reconstrução da constante piersewise de \bar{q}_i^{n+1} calculada com base em q^* , preservando a média da célula





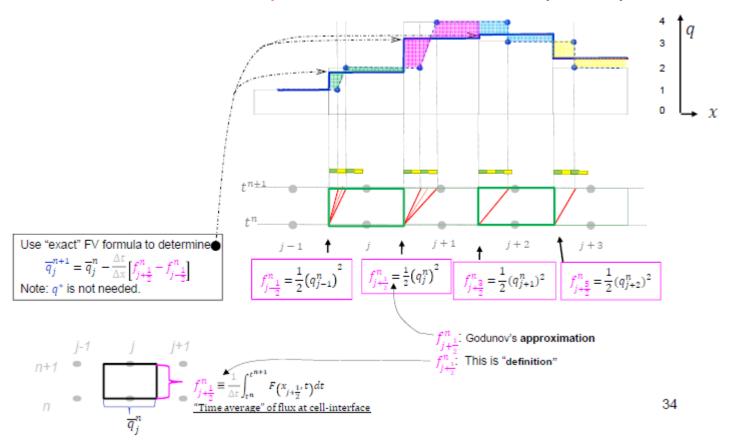
Esquema de Godunov (1959)

Esquema de Godunov: Demonstração 1 (todas as ondas normais)

(B.ii): Uma segunda maneira mais conveniente de calcular \bar{q}_j^{n+1} (em vez disso, contando com a reconstrução de preservação de área de q^*)

- Avaliação do termo "O exato fluxo médio no tempo na interface da célula" para o problema de Riemann contíguo e

múltiplo

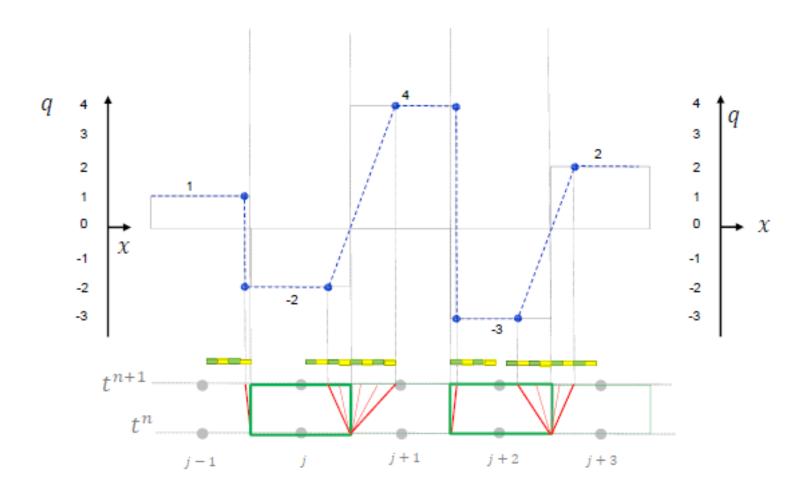




Esquema de Godunov (1959)

Esquema de Godunov: Demonstração 2 (ondas para a esquerda / direita)

- (A): Resolvendo vários problemas contíguos de Riemann para a equação de burge para obter q^*

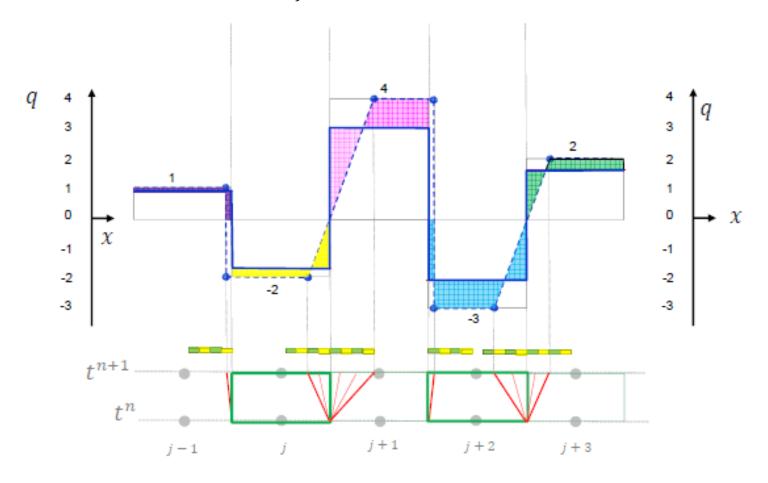




Esquema de Godunov (1959)

Esquema de Godunov: Demonstração 2 (ondas para a esquerda / direita)

- (B.i): reconstrução da constante Piersewise de \bar{q}_{j}^{n+1} a partir de q^{*} , preservando a mesma média na célula

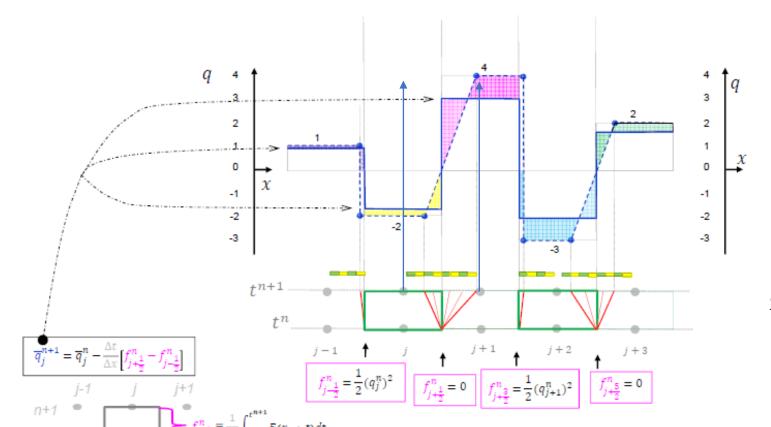




Esquema de Godunov (1959)

(B.ii): Uma segunda maneira mais conveniente de obter \bar{q}_i^{n+1}

- Avaliação do termo " exato fluxo médio no tempo " para vários problemas contíguos de Riemann



$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial q^2}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F(q)}{\partial x} = 0$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial q}{\partial t} dt = -\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial F(q)}{\partial x} dt$$

$$q(t^{n+1}) - q(t^n) = -\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial F(q)}{\partial x} dt$$

$$\frac{q(t^{n+1}) - q(t^n)}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial F(q)}{\partial x} dt$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{t^n} = \frac{q\left(t^{n+1}, x_{j+\frac{1}{2}}\right) - q(t^n, x_{j+\frac{1}{2}})}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial F(q(t, x_{j+\frac{1}{2}}))}{\partial x} dt$$



Esquema de Godunov (1959)

O esquema Godunov totalmente expandido para todas as condições (para codificação de computador) $\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial q^2}{\partial t} = 0$ usando o calculo do problema de Riemann exato para a equação de burge Inviscido

$$\overline{q}_{j}^{n+1} = \overline{q}_{j} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2}} \right]$$

$$\frac{x}{t} \cong v$$

Case 1: shockwave
$$q_j > q_{j+1}$$

$$q = \begin{cases} q_j, & x'/t < c_{j+\frac{1}{2}} \\ q_{j+1}, & x'/t > c_{j+\frac{1}{2}} \end{cases}$$

$$q = \begin{cases} q_j \,, & x'/t < c_{j+\frac{1}{2}} \\ q_{j+1} \,, & x'/t > c_{j+\frac{1}{2}} \end{cases} \qquad f_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \frac{1}{2}q_j^2 \,, & c_{j+\frac{1}{2}} > 0 \\ \frac{1}{2}q_{j+1}^2 \,, & c_{j+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \qquad \boxed{c_{j+\frac{1}{2}} = \frac{q_j + q_{j+1}}{2}}$$

$$c_{j+\frac{1}{2}} = \frac{q_j + q_{j+1}}{2}$$

$$f_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} 0, & q_{j} < 0 < q_{j+1} \\ \frac{1}{2}q_{j}^{2}, & c_{j+\frac{1}{2}} > 0 \& q_{j+1} > q_{j} > 0 \\ \frac{1}{2}q_{j+1}^{2}, & c_{j+\frac{1}{2}} < 0 \& q_{j} < q_{j+1} < 0 \end{cases}$$

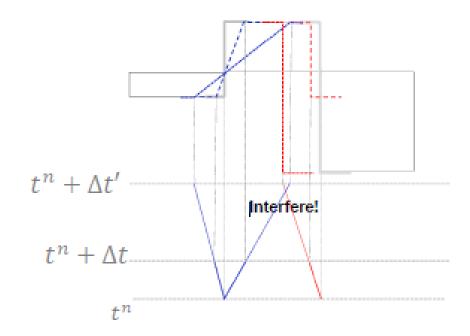
Esquema de Godunov (1959)

A interferência do problema de Riemann. O vizinho limita o tamanho do intervalo de tempo

Pequeno passo de tempo Δt , sem interface

Um passo de tempo muito grande $\Delta t'$ leva a interferir com o problema de Riemann da célula vizinha

No caso geral, $CFL = \frac{\Delta t}{\Delta x} \left| \frac{\partial F}{\partial q} \right|_{max} < \frac{1}{2}$, ou seja, a onda pode se mover, no máximo, metade da distância de uma célula.





Esquema de Roe (1980)



Esquema de Roe (1980)

Resolve um problema de Riemann aproximado

Motivação: Para equações mais complicadas (como a equação de Euler), o calculo de Riemann exato no método de Godunov requer iterações computacionalmente ineficientes para lidar com a não linearidade.

Objetivo: Resolver um problema de Riemann (linearmente) aproximado.

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F(q)}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \qquad \xrightarrow{aproxima} \qquad \frac{\partial q}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

$$\xrightarrow{aproxima}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

exato

- 1) Para qualquer q_i^n e q_{i+1}^n , $F_{j+1} F_j = \bar{A}(q_{j+1}^n q_j^n)$ (isso garante as relações de salto correto em uma continuidade de saltos)
- 2) Quando $q = q_j^n = q_{j+1}^n$, $\bar{A}(q_j^n, q_{j+1}^n) = \bar{A}(q_j^n, q_j^n) = \frac{\partial F}{\partial q_j^n}$ (isso dá o valor exato na região suave)



Esquema de Roe (1980)

aplicado à equação de burge invíscidos com $F(q) = q^2$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

1) Para qualquer q_j^n e q_{j+1}^n ,

$$F_{j+1} - F_j = \overline{A}(q_{j+1}^n - q_j^n)$$

2) Quando $q = q_{j}^{n} = q_{j+1}^{n}$,

$$\bar{A}(q_j^n, q_{j+1}^n) = \bar{A}(q_j^n, q_j^n) = \frac{\partial F}{\partial q}$$

$$(a+b)(a-b) = a^2 - 2ab + 2ab - b^2 = a^2 - b^2$$

Eq burger

$$\bar{A} = \frac{F_{j+1} - F_j}{q_{j+1} - q_j} \xrightarrow{F(q) = \frac{q^2}{2}} \xrightarrow{f(q) = \frac{q^2}{2}} \frac{1}{2} \frac{q_{j+1}^2 - q_j^2}{q_{j+1} - q_j} = \frac{1}{2} \frac{(q_{j+1} + q_j)(q_{j+1} - q_j)}{q_{j+1} - q_j} = \frac{q_j + q_{j+1}}{2}$$

$$\bar{A}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{q_j + q_{j+1}}{2}$$

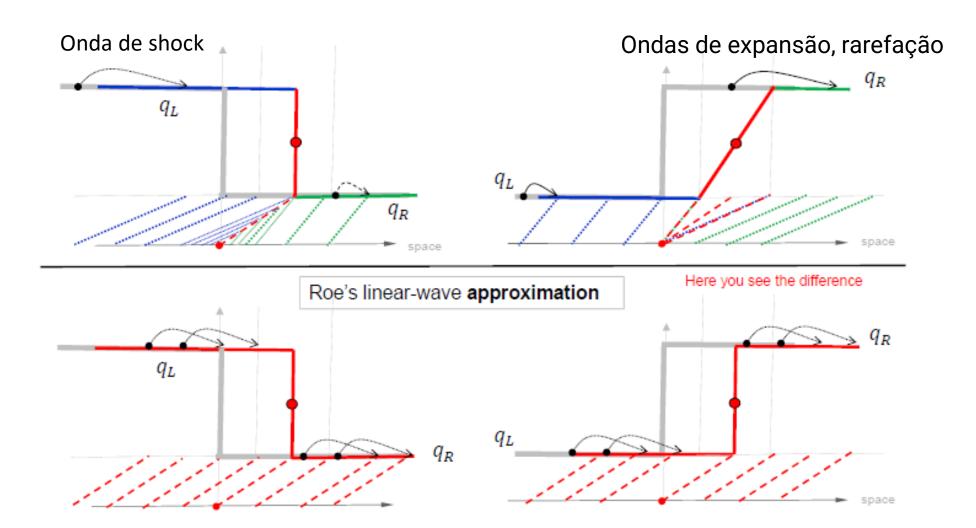
Nota: para as equações de burge inviscido 1D, a aproximação de Roe calcula o problema de Riemann localmente. Torna-se equivalente a uma equação de advecção linear com velocidade de advecção de $c_{j+\frac{1}{2}}=\frac{q_j+q_{j+1}}{2}$

Um lembrete, para a equação de burge invíscidos 1D, esta é a velocidade de movimento do ponto médio de um choque (ou de expansão) de acordo com a solução exata de Riemann.



Esquema de Roe (1980)

Roe é ideal para usar a onda linear para aproximar a calculo do problema de Riemann exato





Esquema de Roe (1980)

Demonstração 1 (todas as ondas direitas)

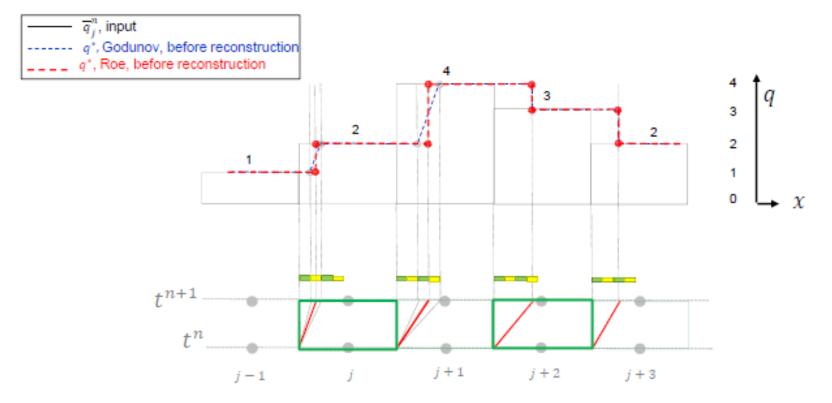
A) Resolvendo múltiplos problemas contíguos de Riemann usando a aproximação linear de Roe para obter q^*

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F(q)}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \qquad \xrightarrow{aproxima} \qquad \frac{\partial q}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

$$\stackrel{aproxima}{=\!=\!=\!=}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \bar{A}\frac{\partial q}{\partial x} = 0$$

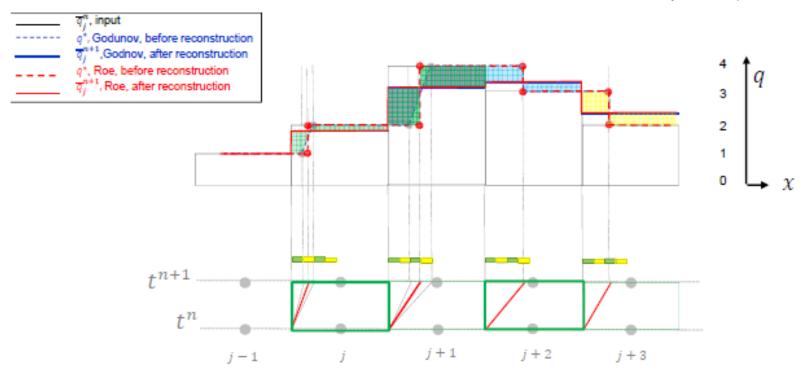
Considere todas as ondas normais, ou seja, a velocidade da onda em todas as células $\frac{\partial F}{\partial a} = q > 0$





(B): construção da piersewise-constates de \bar{q}_{i}^{n+1} de q^{*}

Demonstração 1 (todas as ondas direitas)

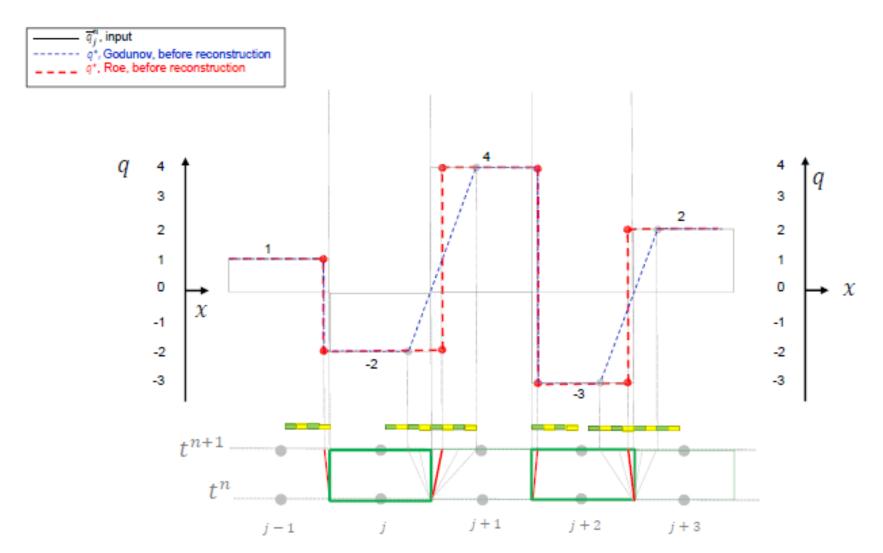


- 1) Para esta particular demonstração 1 com todas as ondas positivas indo para direitas, o perfil reconstruído de \bar{q}_j^{n+1} será idêntico ao resultado usando para calcular o problema de Riemman exato, mesmo para a região com ondas de expansão (tente você mesmo).
- 2) O fato acima é apoiado considerando o fluxo de Roe na interface da célula $(\bar{q}_j^{n+1} = \bar{q}_j^n \frac{\Delta t}{\Delta x} [f_{j+\frac{1}{2}}^n f_{j-\frac{1}{2}}^n]$ na verdade, para esta demonstração $f_{j+\frac{1}{2}}^n|_{Roe} = f_{j+\frac{1}{2}}^n|_{exato}$



Esquema de Roe: Demonstração 2 (ondas para a esquerda / direita)

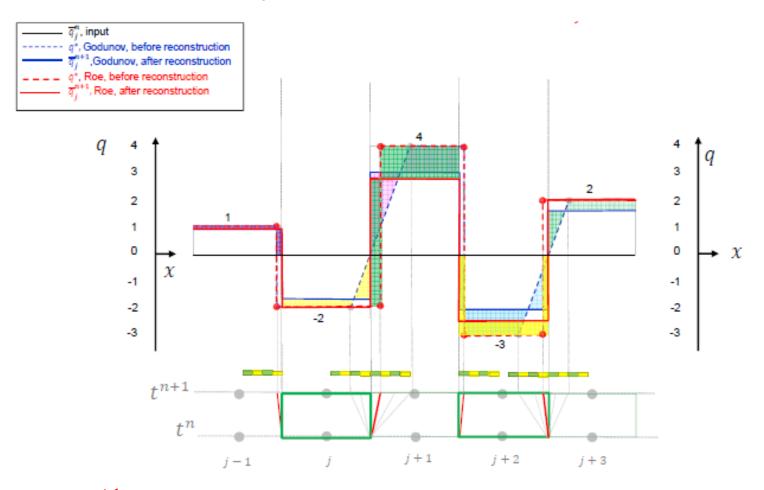
(A) Resolvendo vários problemas contíguos de Riemann usando a aproximação linear de Roe para obter q^*





Esquema de Roe: Demonstração 2 (ondas para a esquerda / direita)

(B): construção da piersewise-constates de \bar{q}_i^{n+1} de q^*

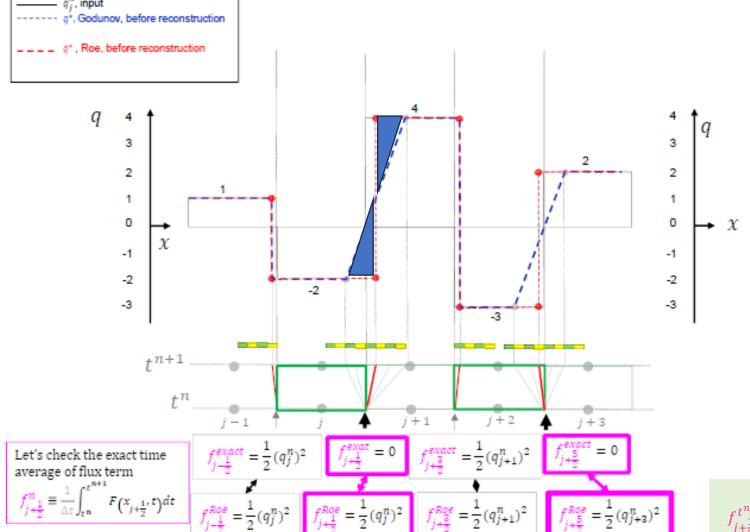


Para esta demonstração 2, \bar{q}_j^{n+1} obtido com o calculo do problema de Riemann aproximado de Roe é diferente do resultado obtido pelo calculo Riemman exato!



Além do método de reconstrução com preservação de área, a diferença entre o esquema Roe e o esquema Godunov (usando o calculo de Riemann exato) pode ser vista durante a avaliação do fluxo realizada com o método





$$f_{j+\frac{1}{2}}^{t^{n}} = \frac{q\left(t^{n+1}, x_{j+\frac{1}{2}}\right) - q(t^{n}, x_{j+\frac{1}{2}})}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t_{n}}^{t^{n+1}} \frac{\partial F(q(t, x_{j+\frac{1}{2}}))}{\partial x} dt$$



The fully-expanded Roe scheme in flux form (for you to make a computer code) for Inviscid burgers equation $\frac{\partial}{\partial t}q + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}q^2 = 0$

$$\overline{q}_{j}^{n+1} = \overline{q}_{j} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2}} \right]$$

Unwinding direction from the sign of Roe's approximated wave speed:

If
$$\overline{A}_{j+\frac{1}{2}} < 0$$
, $f_{j+1/2} - F_j = \overline{A}_{j+\frac{1}{2}}^{<0} (q_{j+1} - q_j)$

$$\text{If } \overline{A}_{j+\frac{1}{2}} > 0, \quad F_{j+1} - f_{j+1/2} = \overline{A}_{j+\frac{1}{2}}^{>0} (q_{j+1} - q_j)$$

Roe conditions 1: $F_{j+1} - F_j = \overline{A}(q_{j+1} - q_j)$

Combine above two cases:

$$f_{j+1/2} = \frac{F_j + F_{j+1}}{2} + \frac{1}{2} (\overline{A}_{j+\frac{1}{2}}^{<0} - \overline{A}_{j+\frac{1}{2}}^{>0}) (q_{j+1} - q_j)$$

$$f_{j+\frac{1}{2}|_{Roe}} = \frac{F_{j}+F_{j+1}}{2} - \frac{1}{2} |\overline{A}_{j+\frac{1}{2}}| (q_{j+1} - q_{j})$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}|_{Roe} \xrightarrow{burgers\ eq.} \xrightarrow{q_j^2 + q_{j+1}^2} - \frac{1}{4} |q_{j+1} + q_j| (q_{j+1} - q_j)$$

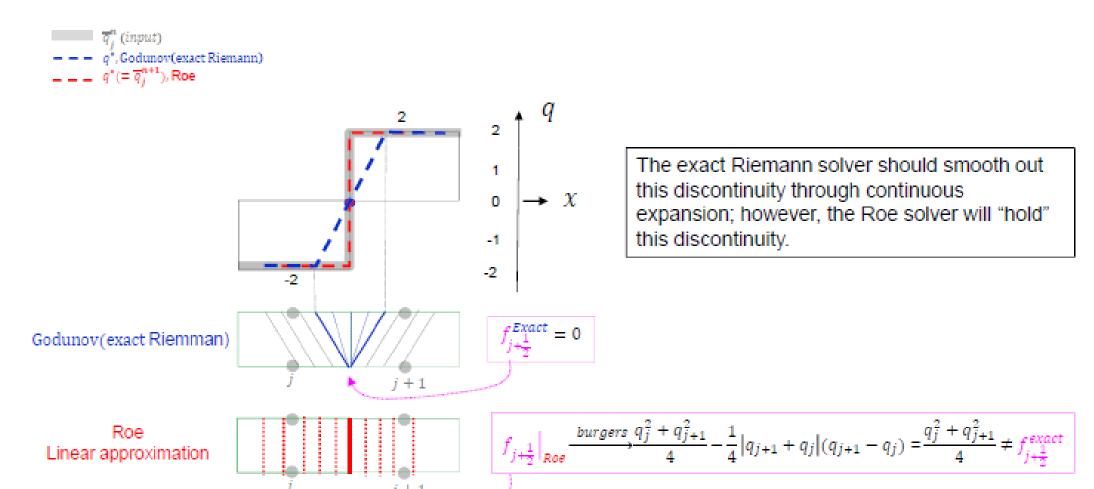
Roe scheme is not a "linear scheme" which can be expressed by $q_j^{n+1} = \sum_k a_k q_{j+k}^n$ with a_k being constants, instead Roe scheme is a "linearly" approximated Riemann solver.

Roe scheme: stability limit: CFL<1, perform well in most of case.



An undesired issue with Roe scheme

Roe scheme can not distinguish between the compression shock(for which it performed well) and the **unphysical** "expansion shock", violating the entropy condition.





Entropy fix to Roe scheme

Demonstrated for burgers equation: $\overline{A}_{j+\frac{1}{2}} = \overline{u}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{j+1} + u_j}{2}$

Harten-Hymann(1983) modification,

$$\epsilon = \max(0, \frac{u_{j+1} - u_j}{2})$$

$$\overline{u}_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \overline{u}_{j+\frac{1}{2}}, & u_{j+\frac{1}{2}} \ge \epsilon \\ \epsilon, & \overline{u}_{j+\frac{1}{2}} < \epsilon \end{cases}$$

Note: $\epsilon=0$ denotes the compression case, uses the unaltered $\overline{u}_{j+\frac{1}{2}}$.



Shock-capturing methods

- Métodos de alta resolução
- Esquemas Upstream-Centrados Monótonos para a Lei de Conservação (MUSCL)
- Esquemas de diminuição da variação total (TVD)
- Limitadores não lineares



Esquema de alta Ordem

 Esquemas Upstream-Centrados Monótonos para a Lei de Conservação (MUSCL)

Motivação:

No método de Godunov anterior, a variável de estado era assumida como constante na célula de volume de controle, o que limita a precisão do esquema em ordem baixa (1ª).

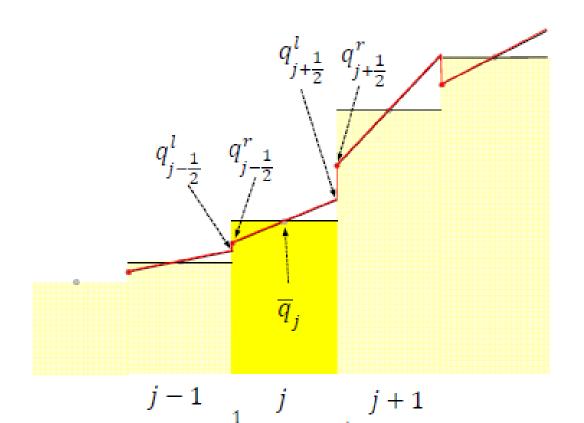
objetivo:

A variável de estado em cada célula pode variar, tal variação será reconstruída a partir do valor médio da célula obtido após a aplicação do calculo de Riemann exato. Podemos usar extrapolação de ordem superior para os fluxos ou variável de estado no limite da célula



Esquema de alta Ordem

Reconstrução de 2ª ordem da variável de estado Permitir variação linear em cada célula, mantendo o valor médio da célula



$$q_{j+\frac{1}{2}}^{l} = \bar{q}_{j} + \frac{1}{2} (\bar{q}_{j} - \bar{q}_{j-1})$$

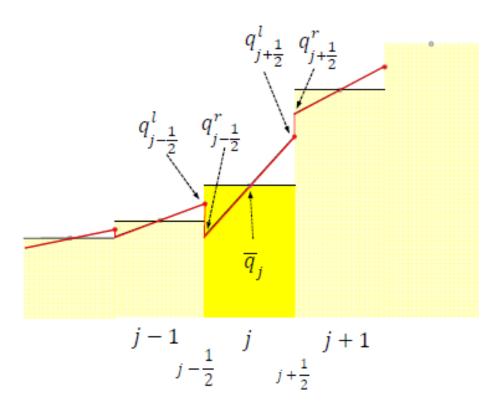
$$q_{j-\frac{1}{2}}^{r} = \bar{q}_{j} - \frac{1}{2} (\bar{q}_{j} - \bar{q}_{j-1})$$

upwind



Esquema de alta Ordem

Reconstrução de 2ª ordem da variável de estado Permitir variação linear em cada célula, mantendo o valor médio da célula



$$q_{j+\frac{1}{2}}^{l} = \bar{q}_{j} + \frac{1}{2} (\bar{q}_{j+1} - \bar{q}_{j})$$

$$q_{j-\frac{1}{2}}^{r} = \bar{q}_{j} - \frac{1}{2} (\bar{q}_{j+1} - \bar{q}_{j})$$

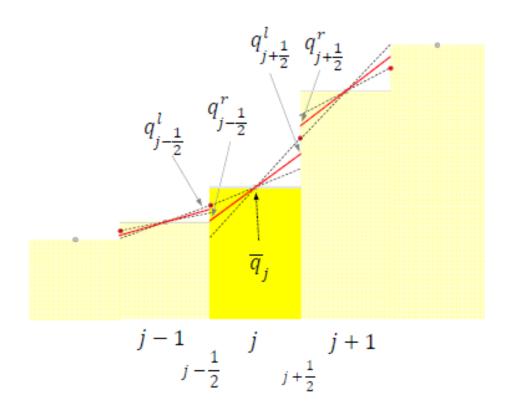
Centrado (problema linear, Lax-Wendroff)

Nota: a monotonicidade do valor de perfil médio da célula obtido com piercewise-constante $\bar{q}_{j-1} < \bar{q}_j < \bar{q}_{j+1}$ é violado na reconstrução do perfil desde que $a_{j-\frac{1}{2}}^l > a_{j-\frac{1}{2}}^r$



Esquema de alta Ordem

Reconstrução de 2ª ordem da variável de estado Permitir variação linear em cada célula, mantendo o valor médio da célula



$$q_{j+\frac{1}{2}}^{l} = \bar{q}_{j} + \frac{1}{2} \frac{(\bar{q}_{j} - \bar{q}_{j-1}) + (\bar{q}_{j+1} - \bar{q}_{j})}{2}$$

$$q_{j-\frac{1}{2}}^{r} = \bar{q}_{j} - \frac{1}{2} \frac{(\bar{q}_{j} - \bar{q}_{j-1}) + (\bar{q}_{j+1} - \bar{q}_{j})}{4}$$

Fromm (1968)

Nota: a monotonicidade do valor de perfil médio da célula obtido com piercewise-constante $\bar{q}_{j-1} < \bar{q}_j < \bar{q}_{j+1}$ é violado na reconstrução do perfil desde que $a_{j-\frac{1}{2}}^l > a_{j-\frac{1}{2}}^r$



Esquema de alta Ordem

Forma geral de extrapolação de 2ª ordem

Uma forma geral que resume as três reconstruções anteriores de 2ª ordem do perfil linear de Pierce-wise.

$$q_{j+\frac{1}{2}}^{l} = \bar{q}_{j} + \frac{1-\kappa}{4} \delta q_{j-\frac{1}{2}} + \frac{1+\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{1}{2}}$$

$$q_{j+\frac{1}{2}}^{r} = \bar{q}_{j+1} - \frac{1-\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{1}{2}} + \frac{1+\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{3}{2}}$$

Diferenças

$$\delta q_{j+\frac{1}{2}} = \bar{q}_j - \bar{q}_{j-1}$$

$$\kappa = -1 \Rightarrow upwind$$

 $\kappa = 0 \Rightarrow centrado (linear problem, Lax - Wendroff)$
 $\kappa = 1 \Rightarrow Fromm$



Esquema de alta Ordem

A caminho do esquema de ordem superior Então, use o valor esquerdo/direito da variável de estado reconstruída para calcular os fluxos .

O método anterior de 1ª ordem (Roe, ou Godunov, ...) pode ser definido:

$$\bar{q}_{j}^{n+1?} = \bar{q}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^{n} - f_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right]$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{n(1^{ST})} = f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \Big|_{Roe ou Godnov} \left(\bar{q}_{j}^{n}, \bar{q}_{j+1}^{n} \right)$$

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{n}\Big|_{Roe\ ou\ Godnov}\left(\bar{q}_{j}^{n}, \bar{q}_{j+1}^{n}\right) = \frac{F(\bar{q}_{j+1}^{n}) + F(\bar{q}_{j}^{n})}{2} - \frac{1}{2}\left|\bar{A}_{j+\frac{1}{2}}(\bar{q}_{j+1}^{n}, \bar{q}_{j}^{n})\right|\left(\bar{q}_{j+1}^{n} - \bar{q}_{j}^{n}\right)$$

O método anterior de 2ª ordem

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{n(2^{sr})} = f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \Big|_{Roe\ ou\ Godnov} \left(q_{j+\frac{1}{2}}^{l}, q_{j+\frac{1}{2}}^{r}\right)$$



Esquema de alta Ordem

A caminho do esquema de ordem superior

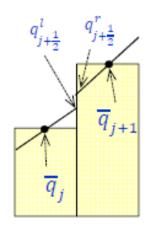
Então, use o valor esquerdo/direito da variável de estado reconstruída para calcular os fluxos .

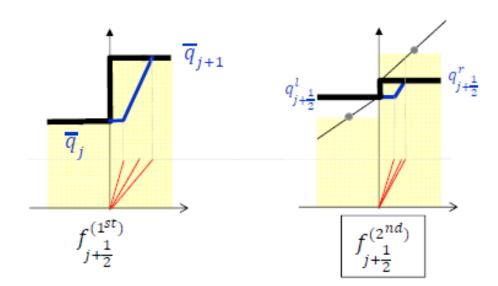
O método anterior de 1ª ordem (Roe, ou Godunov, ...) pode ser definido:

$$\left. f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \right|_{Roe\ ou\ Godnov} \left(\bar{q}_{j}^{n}, \bar{q}_{j+1}^{n} \right) = \frac{F(\bar{q}_{j+1}^{n}) + F(\bar{q}_{j}^{n})}{2} - \frac{1}{2} \left| \bar{A}_{j+\frac{1}{2}}(\bar{q}_{j+1}^{n}, \bar{q}_{j}^{n}) \right| \left(\bar{q}_{j+1}^{n} - \bar{q}_{j}^{n} \right)$$

O método anterior de 2ª ordem

$$f_{j+\frac{1}{2}}^{n(2^{sr})} = f_{j+\frac{1}{2}}^{n} \Big|_{Roe\ ou\ Godnov} \left(q_{j+\frac{1}{2}}^{l}, q_{j+\frac{1}{2}}^{r}\right)$$







Esquema de alta Ordem

Para alcançar a 2ª ordem completa no espaço e no tempo (em vez de ser apenas uma reconstrução de 2ª ordem no espaço x).

Predictor + corrector, semelhante ao Lax-Wendroff de duas etapas

$$\bar{q}_{j}^{n+\frac{1}{2}} = \bar{q}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^{n,1^{st}} (\bar{q}_{j}^{n}, \bar{q}_{j+1}^{n}) - f_{j-\frac{1}{2}}^{n,1^{st}} (\bar{q}_{j}^{n}, \bar{q}_{j+1}^{n}) \right]$$

Média na célula

Valor reconstruído na interface da célula

$$\text{corrector} \quad \bar{q}_{j}^{\,n+1} = \bar{q}_{j}^{\,n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[f_{j+\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},2^{st}} \left(\bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},\ l}, \bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},\ r} \right) - f_{j-\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},2^{st}} \left(\bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},\ l}, \bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{\,n+\frac{1}{2},\ r} \right) \right]$$

$$\bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{n,l} = \bar{q}_{j}^{n,l} + \frac{1-\kappa}{4} \delta q_{j-\frac{1}{2}} + \frac{1+\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{1}{2}}$$

$$\bar{q}_{j+\frac{1}{2}}^{n,r} = \bar{q}_{j+1}^{n,} - \frac{1+\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{1}{2}} + \frac{1-\kappa}{4} \delta q_{j+\frac{3}{2}}$$

κ <1 para "centrada"

κ <2 para "upwind"

Mas ainda há deslocamento numéricos (oscilações, overshoot / undershoots), o esquema não é monotonico

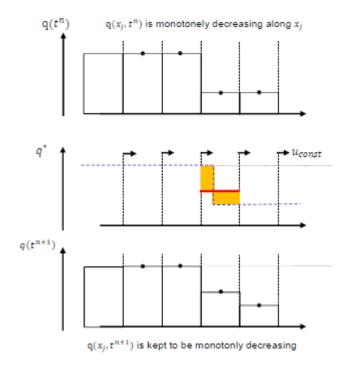


Esquema de alta Ordem

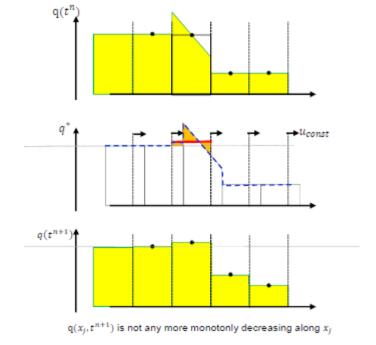
Ilustração para a perda da monotonicidade pela reconstrução de 2ª ordem durante uma única etapa de avanço do tempo para uma equação de advecção linear.

Reconstrução com Piecewise-constante (1st ordem no espaço): preserva a monotonicidade!

Reconstrução com Piecewise-linear (2st ordem no espaço): overshot" numérico



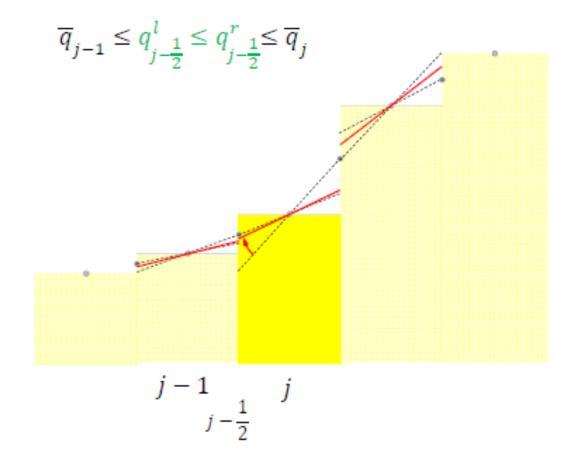
$$\frac{\partial q(x,t)}{\partial x} + u_{cte} \frac{\partial q(x,t)}{\partial x} = 0$$





Esquema de alta Ordem

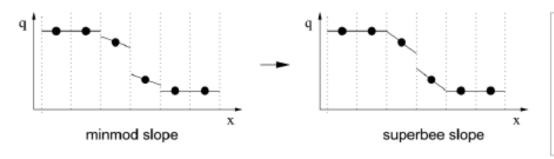
Queremos remover o excesso indesejado do esquema MUSCL. Um ideal: limitar a inclinação da variável reconstruída





Esquema de alta Ordem

Dois diferentes limitadores de inclinação σ



applied to 2nd order "center" reconstruction

$$u_{j+\frac{1}{2}}^{l} = \overline{u}_{j} + \frac{1}{2}(\overline{u}_{j+1} - \overline{u}_{j})$$

$$u_{j-\frac{1}{2}}^{r} = \overline{u}_{j} - \frac{1}{2}(\overline{u}_{j+1} - \overline{u}_{j})$$

minmod: seleciona o menor número de um conjunto quando todos têm o mesmo sinal, mas é zero se eles têm sinais diferentes

$$\sigma \Big|_{minmod} = \min mod(\frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta x}, \frac{q_{i+1} - q_i}{\Delta x})$$

$$minmod(a,b) = \begin{cases} a, if |a| < |b| \text{ and } ab > 0\\ b, if |a| > |b| \text{ and } ab > 0\\ 0, & \text{if } ab \le 0 \end{cases}$$

$$\sigma \Big|_{superbee} = \max mod(\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)})$$

$$\sigma^{(1)} = \min mod(2 \frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta x}, \frac{q_{i+1} - q_i}{\Delta x})$$

$$\sigma^{(2)} = \min mod(\frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta x}, 2\frac{q_{i+1} - q_i}{\Delta x})$$

Usando o limitador, um esquema numérico torna-se geralmente não linear!



Esquema de alta Ordem

Algumas questões teóricas

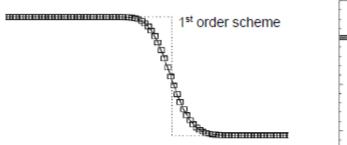
- Oscilações numéricas "perturbadas" com os esquemas de alta ordem
- Conceito de esquema de preservação da monotonicidade
- Conceito de esquema TVD

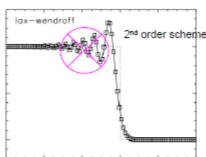


Esquema de alta Ordem

Por que esquemas de ordem superior (≥ 2) não preservam a monotonicidade? No slide anterior, já demonstramos por que a reconstrução linear pioneira de 2ª ordem não preserva a monotonicidade

Um perfil originalmente monótono de q perderá sua monotonicidade durante o avanço do tempo usando o esquema de ordem superior





$$\text{Lax } \text{ (1st order)} \quad q_j^{n+1} = \frac{q_{j+1}^n + q_{j-1}^n}{2} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\frac{1}{2} \left(q_{j+1}^n\right)^2 - \frac{1}{2} \left(q_{j-1}^n\right)^2}{2}$$

$$\text{L-W}_{(2^{\text{nd} \, \text{order}})} \ \ q_j^{n+1} = q_j^n - \Delta t \frac{{q_{j+1}^n}^2 - {q_{j-1}^n}^2}{4\Delta x} + \frac{\Delta t^2}{4\Delta x} (q_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{{q_{j+1}^n}^2 - {q_{j}^n}^2}{\Delta x} - q_{j-\frac{1}{2}}^n \frac{{q_j^n}^2 - {q_{j-1}^n}^2}{\Delta x})$$

Vamos escrever uma expressão geral (linearizar) do esquema

$$q_j^{n+1} = \sum_{k} a_k q_{j+k}^n$$



Exercício 3

Use o programa Advec_new.f90 disponibilizado no git https://github.com/pkubota/pgmet-2021/blob/master/MumericalMethod/Lecture_008/advect_new.f90

```
Modifique os parâmetros
! initial condition type = 1 = "sine", 2 = "tophat", 3 = "packet", 4= "gaussian"
    INTEGER, PARAMETER :: inittype = 2
! slope type (1=godunov, 2=plm, 3=ppm)
    INTEGER, PARAMETER :: islopetype = 2
! Limiter 1= "plm+MC"; 2= "plm+SBee"
    INTEGER, PARAMETER :: plmlimiter = 2
```

Faça os gráficos e Discuta os resultados:

```
Lembre-se que plmlimiter

Só se usa para islopetype=2

IF (islopetype == 1) THEN
    slope = "godunov"

ELSE IF (islopetype == 2) THEN
    IF (plmlimiter == 1) THEN
        slope = "plm+MC"

ELSE IF (plmlimiter == 2) THEN
        slope = "plm+SBee"

ENDIF

ELSE IF (islopetype == 3) THEN
        slope = "ppm"

ENDIF
```