



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

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)



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

Métodos de diferenças finitas.

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 o ideal poderoso para o desenvolvimento tardio de esquemas numéricos de tratamento 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

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

Forma Conservativa

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

Forma Não Conservativa

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

Por que estudar as equações de onda 1D simples?

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

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 x

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:

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

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

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

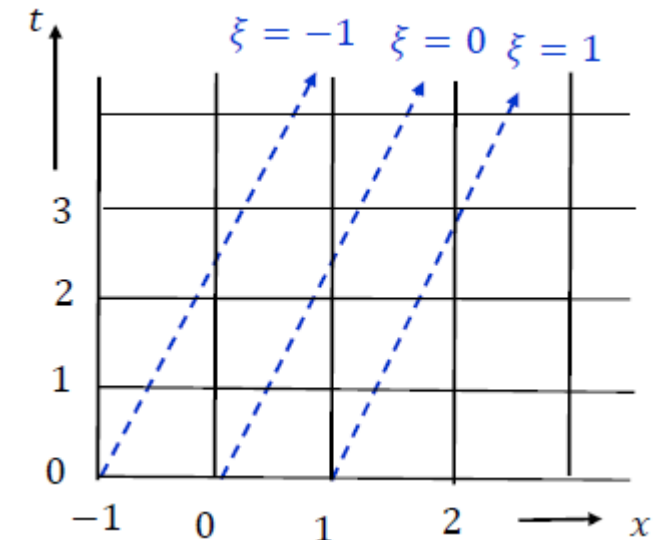
$$\begin{cases} x(\xi, \tau) = \xi + u\tau \\ t(\xi, \tau) = \tau \end{cases}$$

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

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

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

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



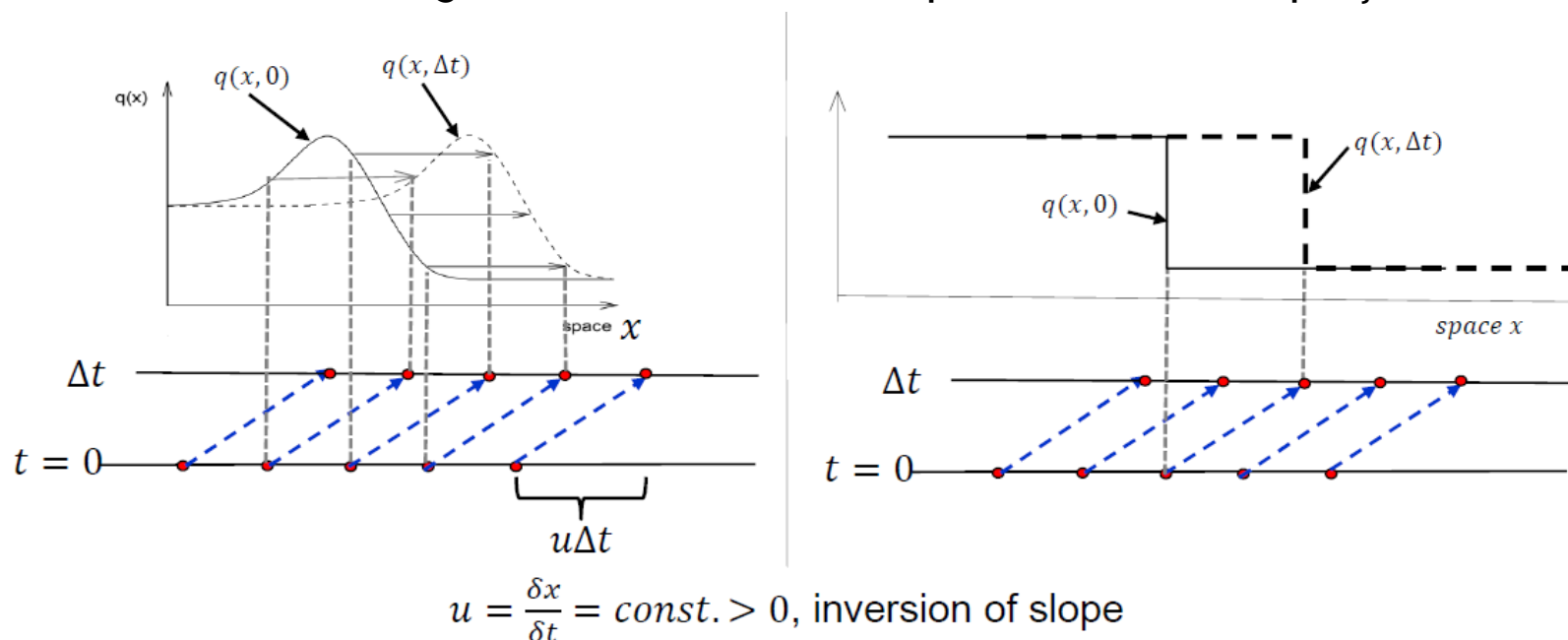
No gráfico (x, t) a linha com valor fixo de ξ é chamado de linha das características, $\xi_{\text{fix}} = x - ut$ portanto $\frac{dx}{dt} = u$. Em um gráfico (x, t) , u é a inclinação inversa da linha característica.

A equação de advecção linear 1D simples?

com u constante para todo x e t

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

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

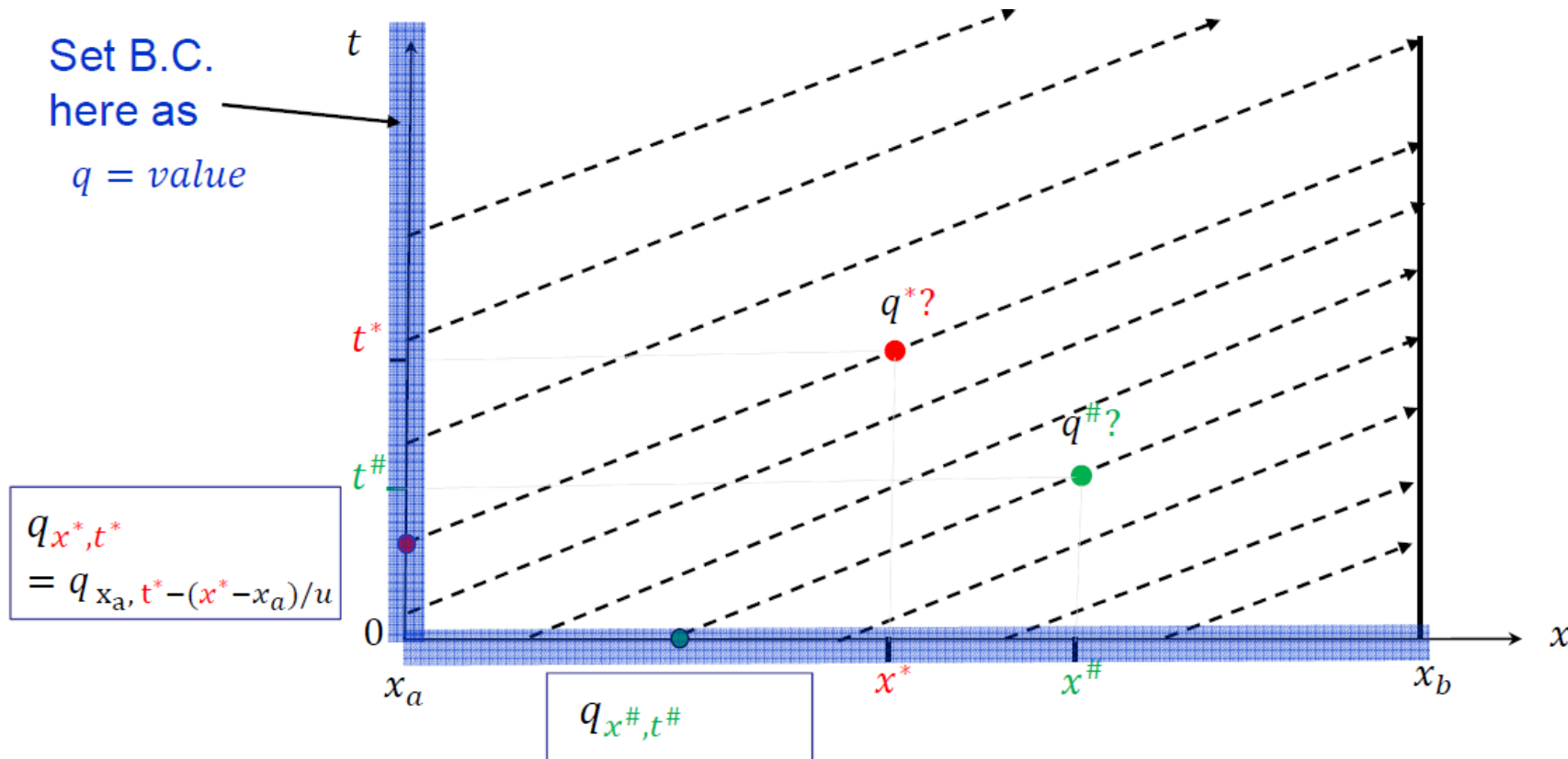


- 1) Não importa qual perfil inicial de $q(x, t = 0)$, ele pode até ser descontínuo.
- 2) A advecção simples apenas muda o perfil inicial $q(x, t = 0)$; se a partir de um $q(x, t = 0)$ inicialmente suave, a descontinuidade em $q(x, t = dt)$ nunca será criada para qualquer $t > 0$.

A equação de advecção linear 1D simples?

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

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



A equação de advecção linear 1D simples?

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

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

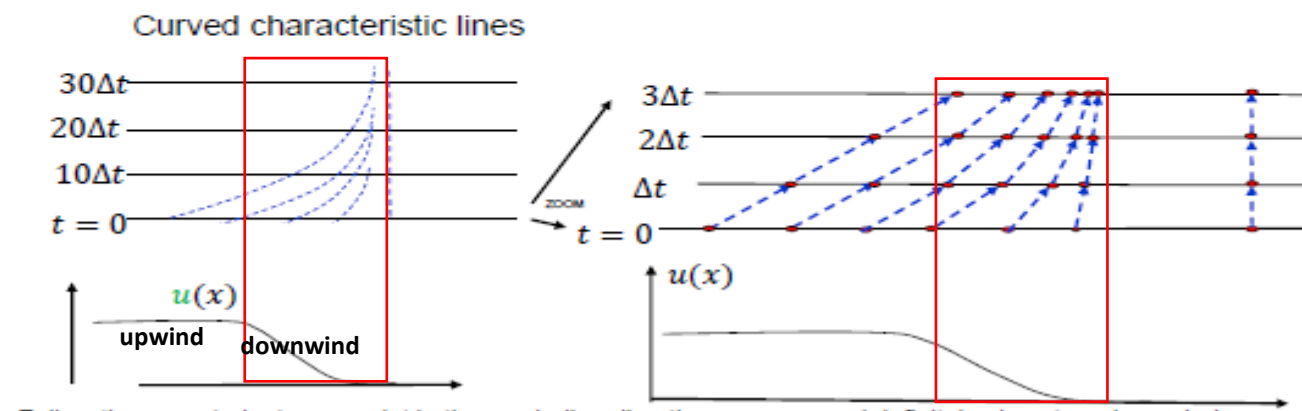
$$\frac{\partial}{\partial t} q(x, t) + u(x) \cdot \frac{\partial}{\partial x} q(x, t) = 0,$$

New coordinate $(x, t) \rightarrow (\xi, \tau)$

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

$$\frac{D}{Dt} q = \frac{\partial}{\partial \tau} q(\xi, \tau) \Big|_{\text{fixed } \xi} = \frac{\partial}{\partial t} q \cdot \frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} q \cdot \frac{\partial x}{\partial \tau} = 0$$

$$\rightarrow q = \text{const.} \Big|_{\text{fixed } \xi}$$



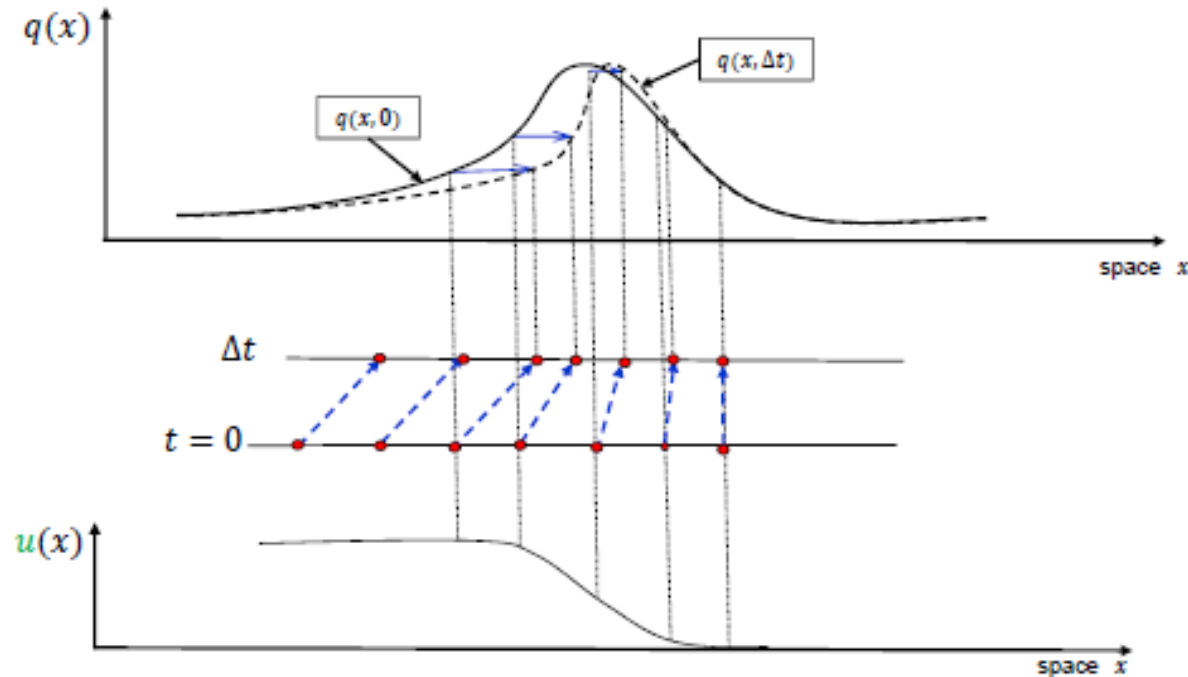
Seguindo a trajetória da onda, um ponto na direção ascendente do vento pode se aproximar infinitamente perto de um ponto da direção descendente vento, mas nunca pode alcançá-lo em um tempo finito. Portanto, a **descontinuidade** em $q(x, t = tn)$ não pode se formar em tempo finito, se partir de um perfil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

A equação de advecção linear 1D simples?

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

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

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



A equação de advecção linear 1D simples?

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

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

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

Pode-se reescrever:

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

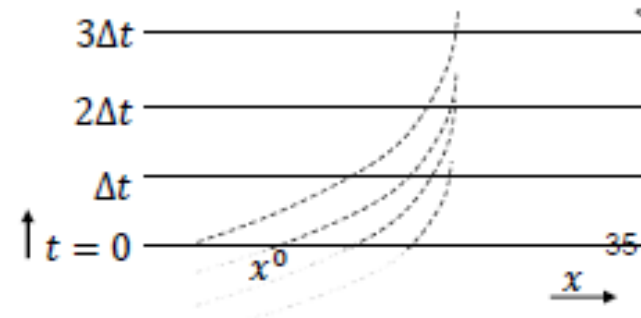
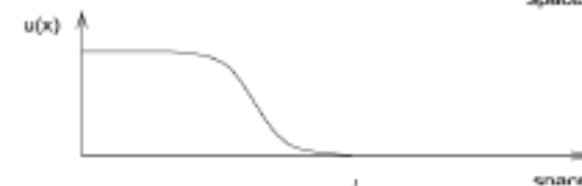
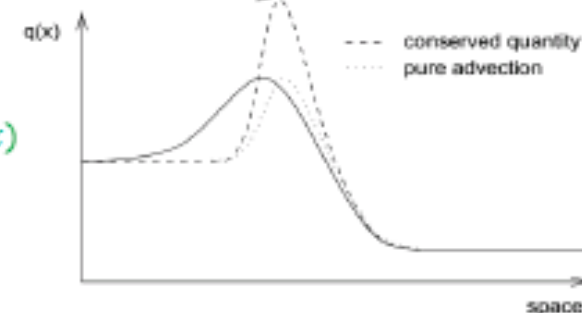
O valor de q pode não ser constante seguido a onda característica

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

Os índices 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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} q + \frac{\partial F}{\partial q} \Big|_{x=\text{const}} \frac{\partial}{\partial x} q = - \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{q=\text{const}}$$

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:

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

New example: Nonlinear inviscid Burgers' equation

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

Nonconservative form:

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

Linear Example 2 can not be expressed in conserved form

The Euler equation is in this form!

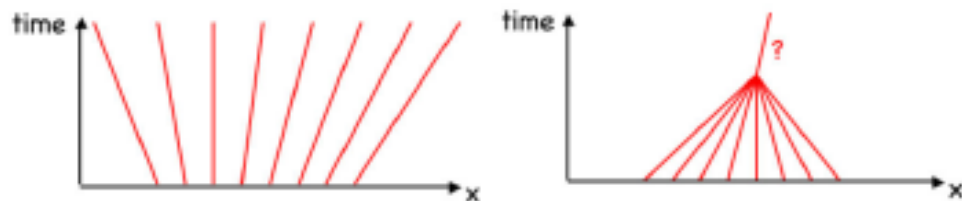
A equação de advecção não Linear 1D simples?

Eq. Inviscid de burger

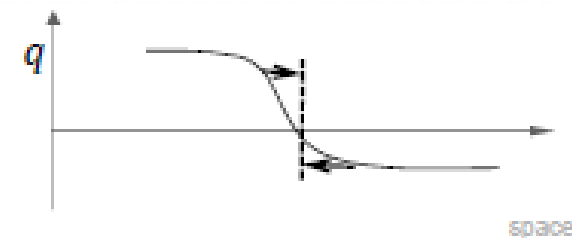
$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q^2}{2} \right) = 0 \Rightarrow \frac{Dq}{Dt} \equiv \frac{\partial q}{\partial t} + q \frac{\partial}{\partial x} (q) = 0 \quad \text{resolva para } x \in (x_a, x_b)$$

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.



Características da equação do burger. Esquerda: caso de características divergentes. À direita: caso de características convergentes com a formação de uma singularidade. Além do momento da criação da singularidade, a solução está toda definida, a menos que seja dada uma receita de como tratar a singularidade.

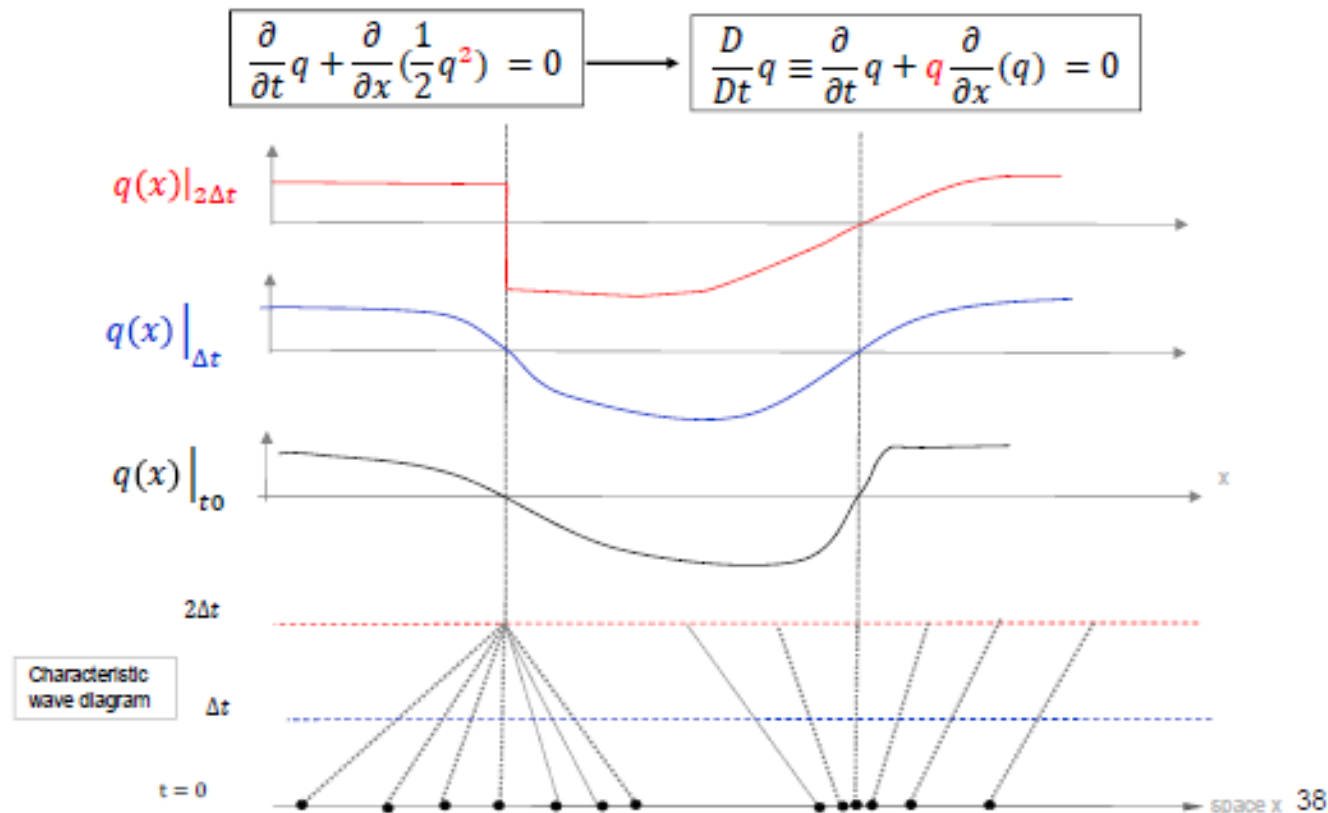


A não linearidade causa a formação de descontinuidade em $q(x, t)$, a partir de um perfil inicialmente suave de $d(x, 0)$ em tempo finito

A equação de advecção não Linear 1D simples?

Solução da equação do burger inviscid antes da formação da descontinuidade

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



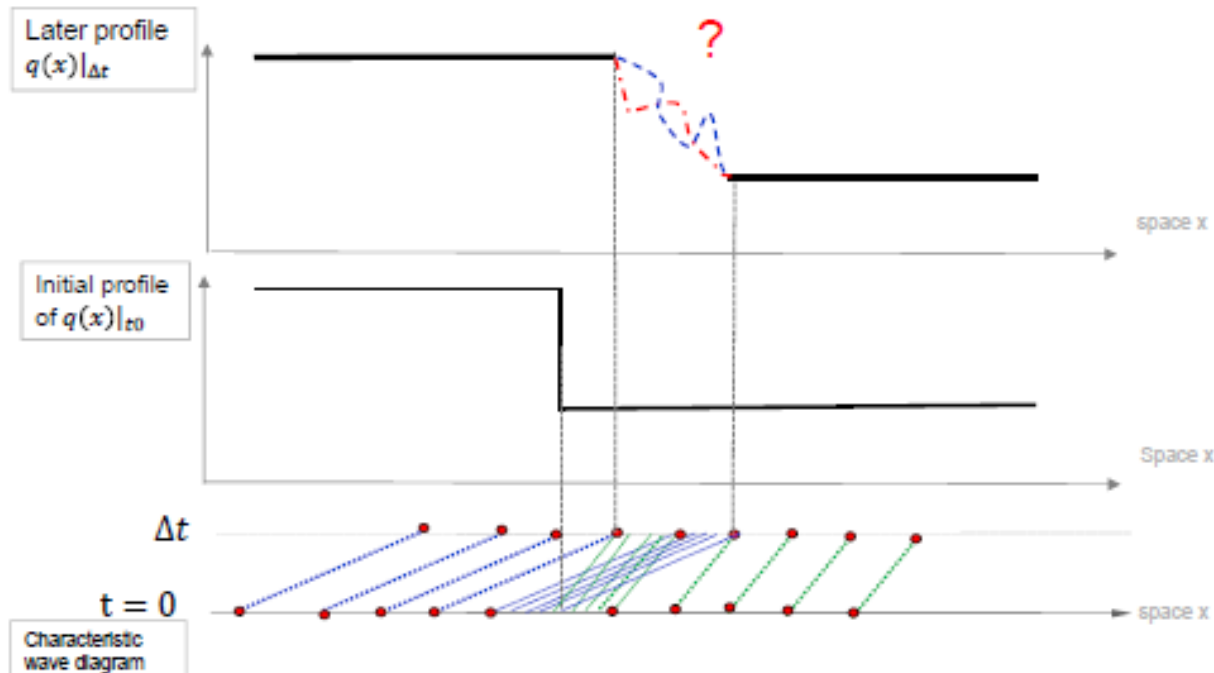
A equação de advecção não Linear 1D simples?

Vamos nos concentrar na evolução temporal de uma descontinuidade “única”.

de acordo com a equação do burger inviscid

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

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





Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

Métodos de diferenças finitas.

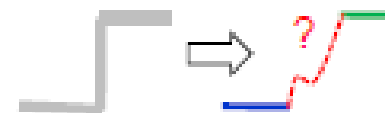
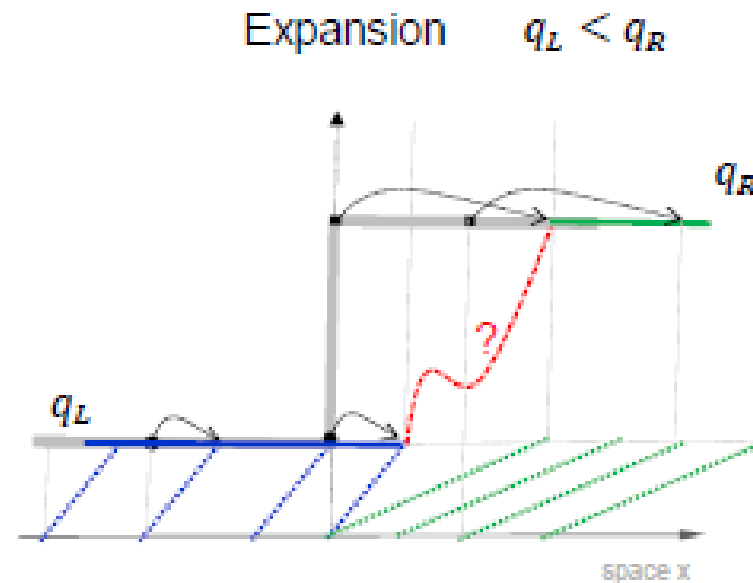
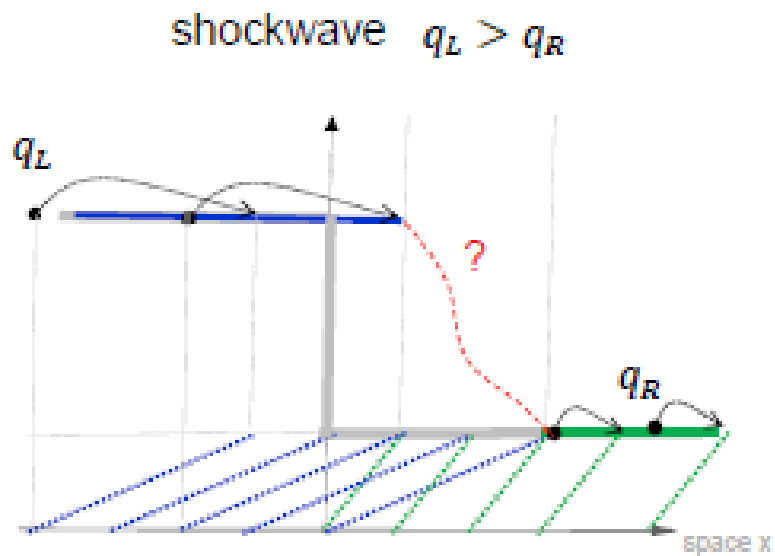
A equação de advecção não Linear 1D simples?

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

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



O problema de Riemann

Esta é a solução analítica para a equação inviscid-burger

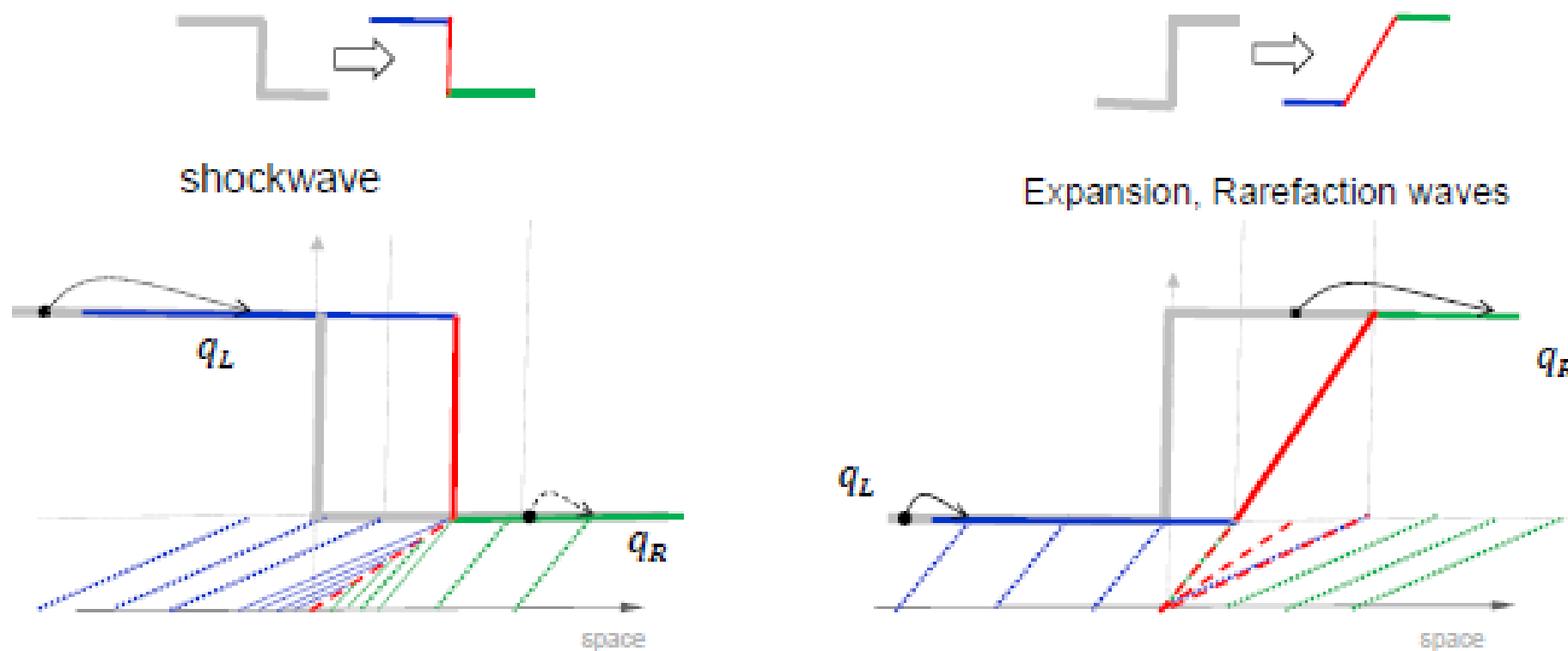
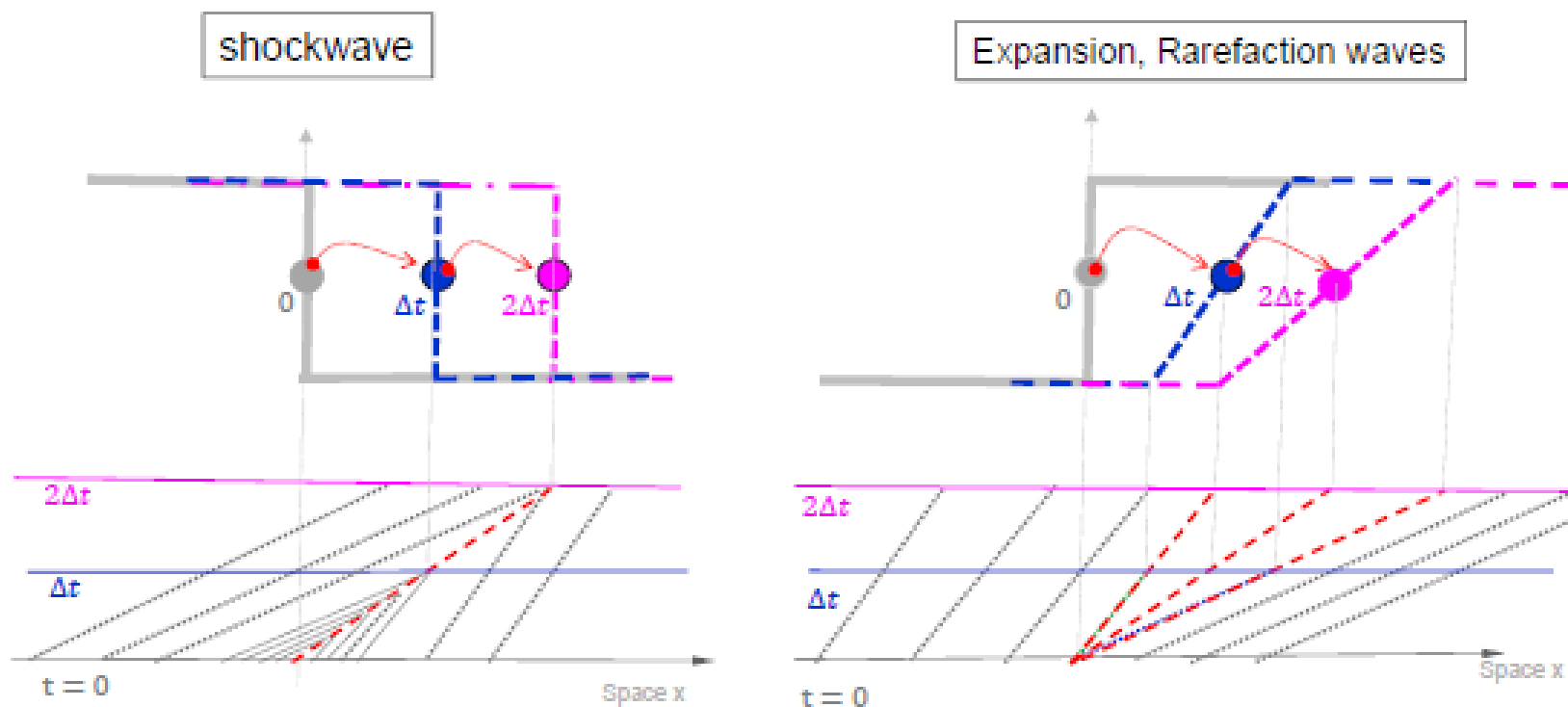


Diagrama de onda da solução do problema de Riemann para a equação de burger invíscido.
 Nota: a solução analítica diz que as linhas caracterizadoras são retas da origem !!!

O problema de Riemann

Solução do problema de Riemann para eq. inviscid burger.

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 burger invíscidos

Soluções exatas (analíticas):

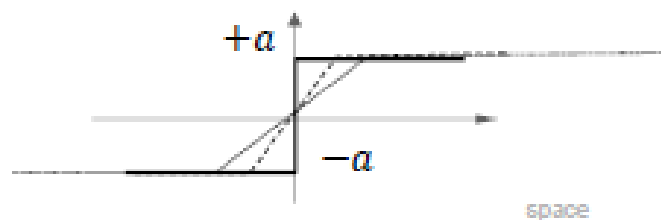
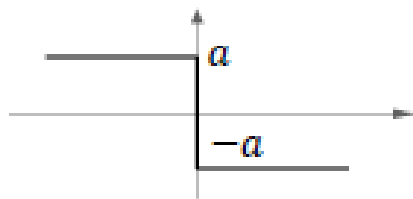
1) Galilean invariance ($q^* = q - c$; $x^* = x + ct$; $t^* = t$)

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

2) **Self-similarity:** (All characteristical lines at the discontinuity are straight)

Given initial condition: $q(x > 0^+, t = 0) = u_r$; $q(x < 0^+, t = 0) = u_l$

$$q(x, t) = \phi\left(\frac{x}{t}\right); \text{ for } t > 0$$



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

$$q(x, t) = \begin{cases} \frac{x}{t}, & -a < \frac{x}{t} < a \\ \mp a, & \text{outside above} \end{cases}$$

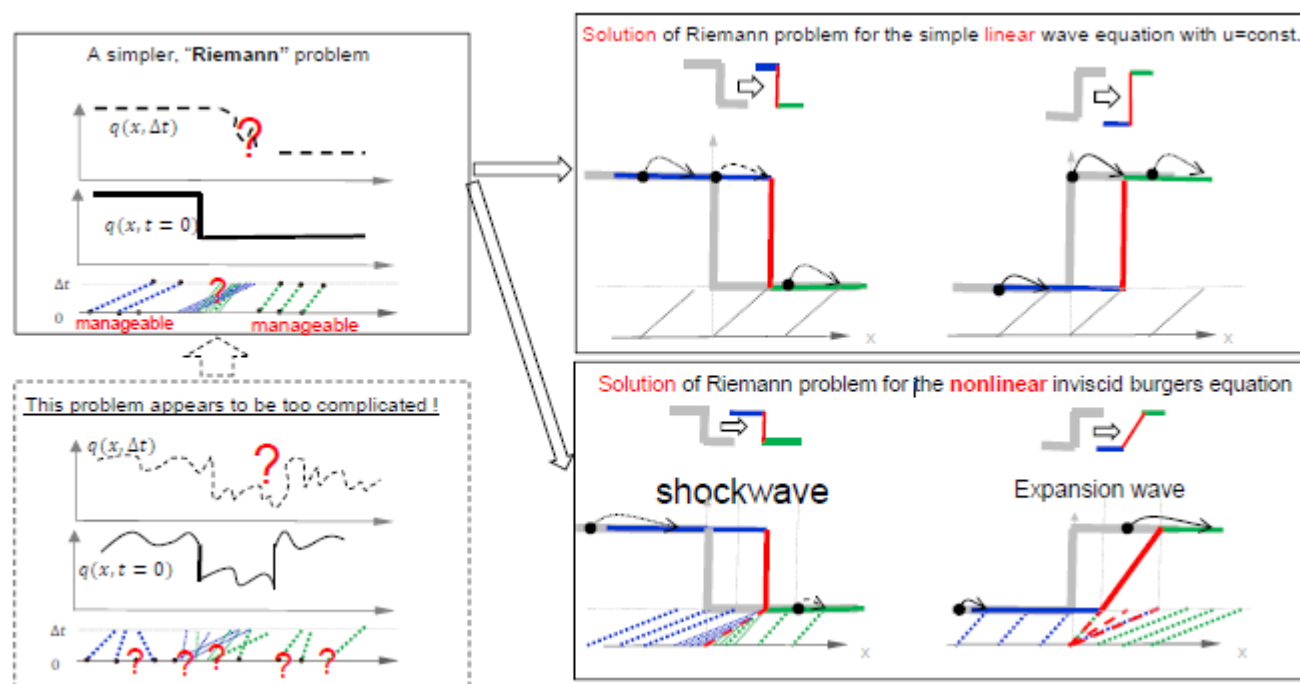
Resumo da aula 1.b

(1) Equações de onda 1D (forma conservativa vs. não conservativa; Linear vs. não linear)

(a) $\frac{\partial q(\xi, \tau)}{\partial \tau} = 0 \rightarrow q(\xi, \tau) = \text{const}|_{\text{Fix } \xi}$ 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 não linear de burger invíscidos

(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**



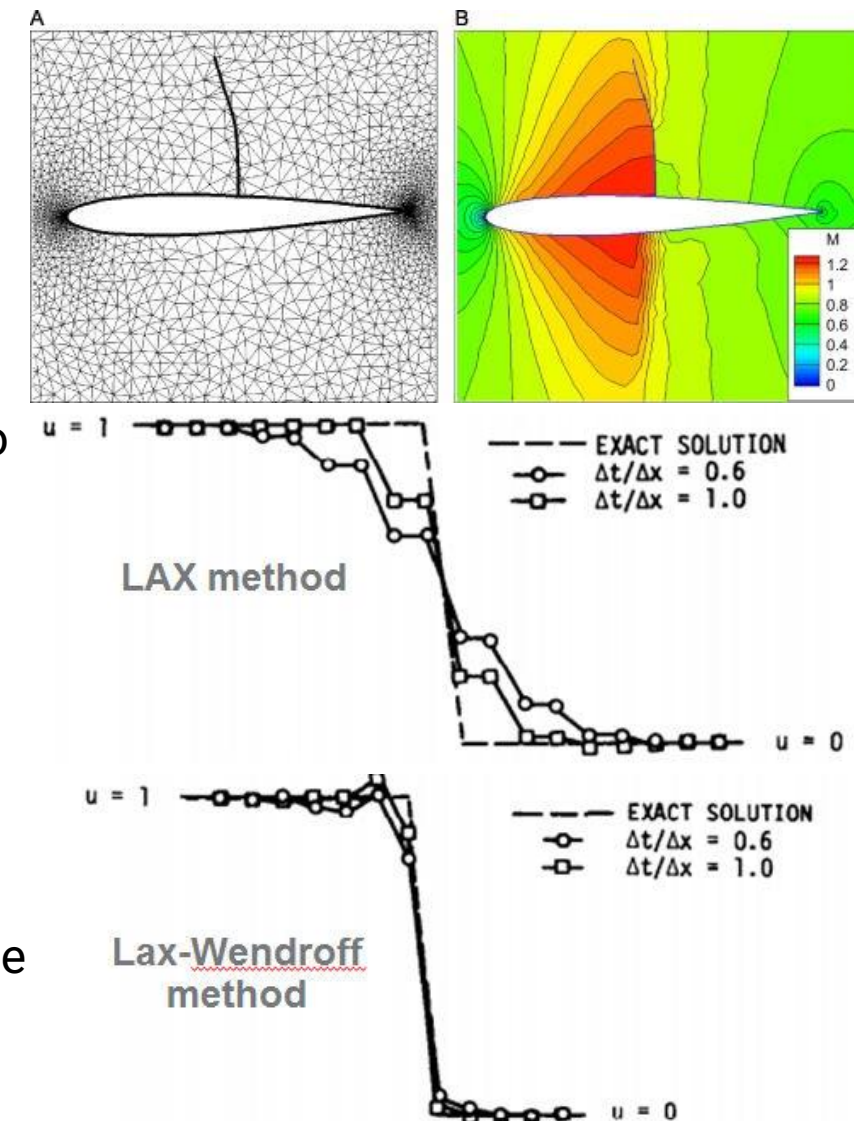
Métodos numéricos para equações hiperbólicas e conservativas

- **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!**

O problema de Riemann

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!





Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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

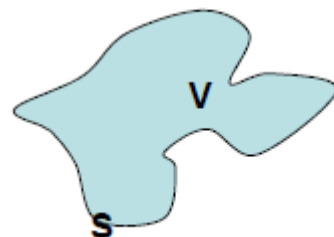
- Preocupações gerais ao lidar com problemas contendo choque
 - “Choque” está associado a uma descontinuidade (espacial / temporal) em certa quantidade $q(x, t)$. No entanto, em certas situações, podemos encontrar as derivadas de q , isto é q_x ou q_t cujos valores supostamente são singulares, o que invalidará a suposição de suavidade subjacente ao método de aproximação usado na abordagem de diferença finita (FD). Nós, portanto, nos 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”.

O problema de Riemann

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!

$$\frac{d}{dt} \left(\iiint_V q dV \right) = \iint_S F(q, x) ds$$



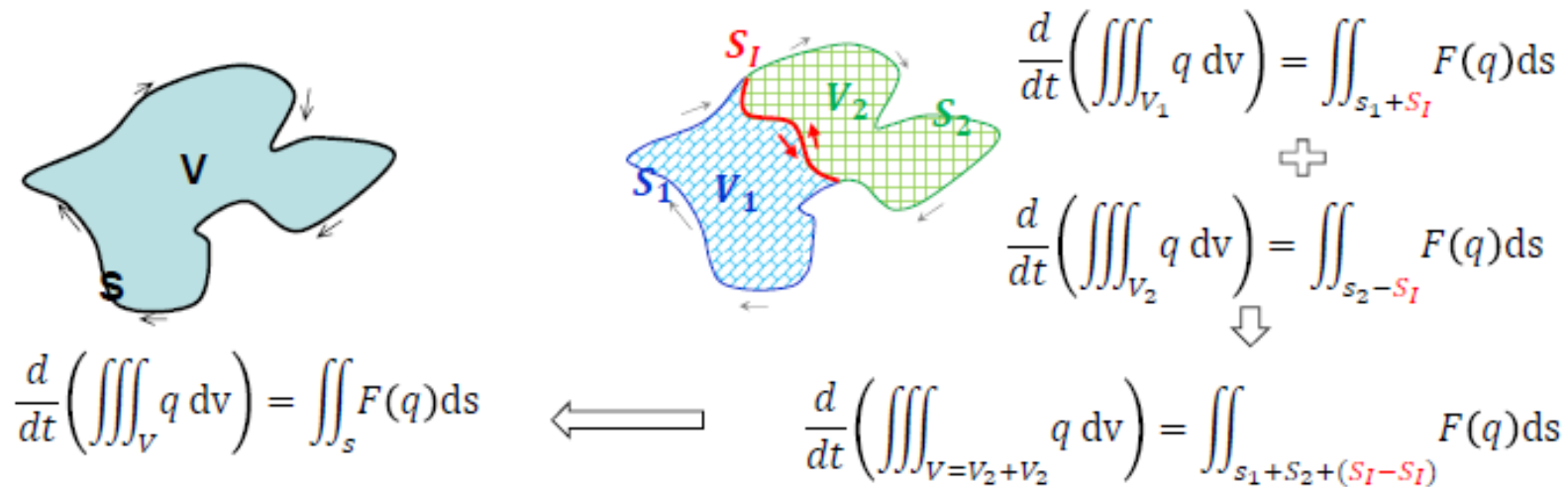
- Pegue um volume de controle V de forma arbitrária, cuja superfície externa é denotada como S .
 - Para simplificar, suponha que V seja um único conectado e não se deforma com o tempo, presuma que não há nenhuma fonte externa.
- A taxa de variação (temporal) de uma quantidade q integrada sobre V deve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

O problema de Riemann

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



$$\frac{d}{dt} \left(\iiint_V q \, dv \right) = \iint_S F(q) \, ds$$

$$\frac{d}{dt} \left(\iiint_{V_1} q \, dv \right) = \iint_{S_1 + S_I} F(q) \, ds$$

$$+ \frac{d}{dt} \left(\iiint_{V_2} q \, dv \right) = \iint_{S_2 - S_I} F(q) \, ds$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{d}{dt} \left(\iiint_{V=V_1+V_2} q \, dv \right) = \iint_{S_1+S_2+(S_I-S_I)} F(q) \, ds$$

- 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 $S_1 + S_I$ e $S_2 + S_I$, respectivamente.
- A interface de compartilhamento; S_I entre V_1 e V_2 é interna ao volume de controle combinado V , cuja superfície externa S não contém S_I .

Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

Recapitulação do método dos volumes finitos (preste atenção!)

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\frac{\partial}{\partial t} q + \frac{\partial}{\partial x} F \right) \cdot dx dt = 0$$

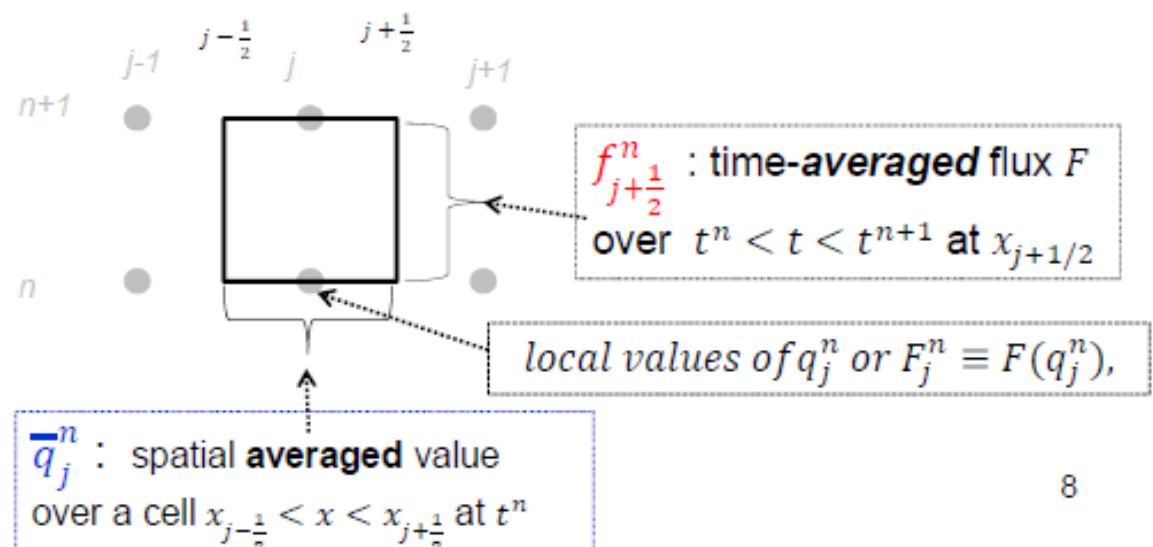
$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^n) dx = - \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} F(x_{j+\frac{1}{2}}, t) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(x_{j-\frac{1}{2}}, t) dt \right)$$

$\frac{1}{\Delta x}$
 $\frac{1}{\Delta x}$
 $\frac{1}{\Delta x}$

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

$\frac{1}{\Delta t}$
 $\frac{1}{\Delta t}$

Note: this formula is **exact**,
there is **no approximation** yet.

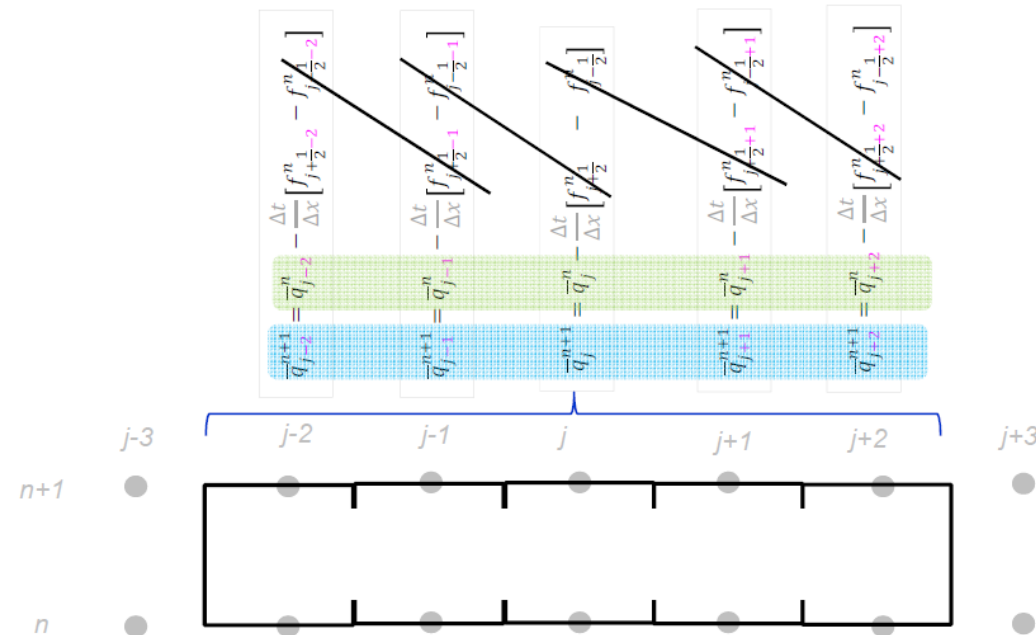


Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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:

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

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.



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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

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

FD approximations at point (t^n, x_j)



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

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

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, $q_j^n = \left(\bar{q}_j^n \equiv \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^n) dx \right)$

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

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

Esquema upwind de 1ª ordem obtido anteriormente

$$\begin{aligned} q_j^{n+1} &= q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_j^n - F_{j-1}^n) \quad \text{for } u = \frac{\partial F}{\partial q} > 0 \\ q_j^{n+1} &= q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1}^n - F_j^n) \quad \text{for } u = \frac{\partial F}{\partial q} < 0 \end{aligned}$$

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: $f_{j+\frac{1}{2}-1}^n \approx \begin{cases} F_{j-1}^n, & u > 0 \\ F_{j+1-1}^n, & u < 0 \end{cases}$)

O problema de Riemann

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

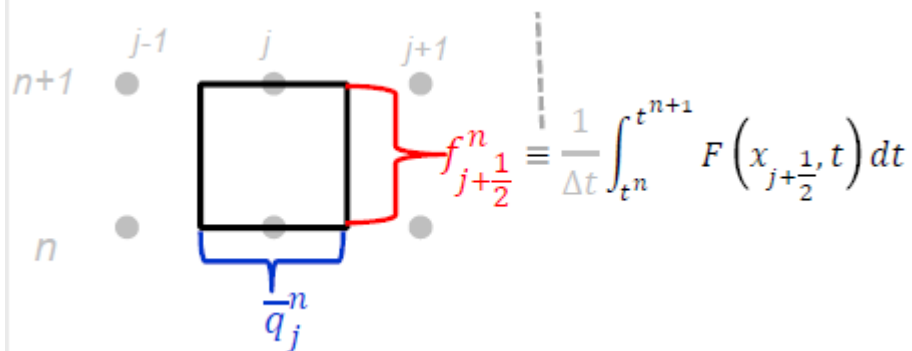
(ii) Aproximado $f_{j+\frac{1}{2}}^n \approx \begin{cases} F_j^n, & u > 0 \\ F_{j+1}^n, & u < 0 \end{cases}$ (desloca o Índice de para verificar: $f_{j+\frac{1}{2}-1}^n \approx \begin{cases} F_{j-1}^n, & u > 0 \\ F_{j+1-1}^n, & u < 0 \end{cases}$

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

Duas fontes de erros de aproximação são devidos a

(1) Falta de integração de tempo para $t^n \rightarrow t^{n+1}$

Lembre que:



(2) O fluxo exato $F(x_{j+\frac{1}{2}}, t)$ localizado na superfície da célula $x_{j+\frac{1}{2}}$ também foi estimado

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

Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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

$$\frac{\partial}{\partial t} q + \frac{\partial}{\partial x} F(q) = 0 \quad \text{with } F = \frac{1}{2} q^2, \quad \frac{\partial F}{\partial q} = q$$

A similar FD scheme

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_j^n - F_{j-1}^n) \quad \text{for } q_j^n > 0$$

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{j+1}^n - F_j^n) \quad \text{for } q_j^n < 0$$

q now depends on j

Is it possible to reformulated into ???

working

NOT working!

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

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



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



Métodos de captura de choque

- Métodos “clássicos” de captura de choque

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

Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

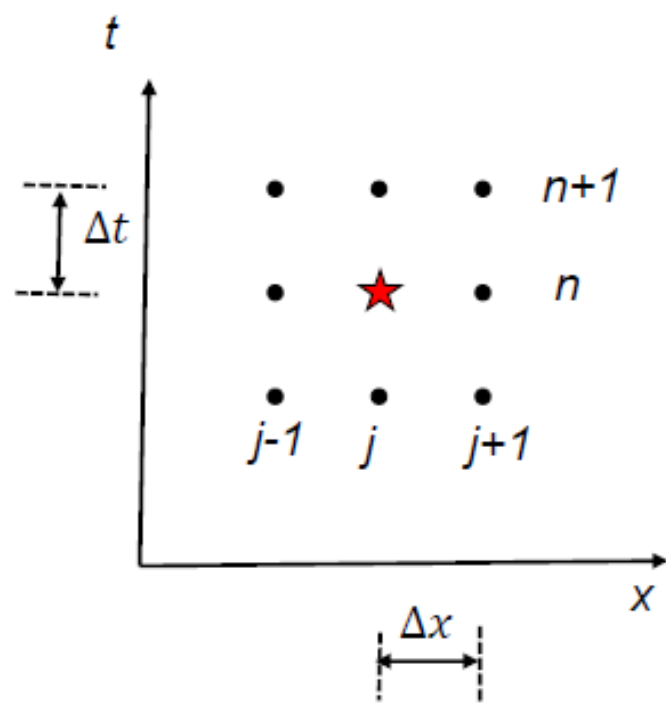
O problema de Riemann

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

A equação conservativa

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

Taylor expansion at (x_j, t^n) ★



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

Polynomial Interpolation

Eq.

$$q_j^{n+1} = \left(\frac{q_{j+1}^n + q_{j-1}^n}{2} + O(\Delta^3) \right) + \Delta t \left(- \frac{\partial F}{\partial x} \right)_{x_j, t^n}$$

FD

$$q_j^{n+1} = \frac{q_{j+1}^n + q_{j-1}^n}{2} - \Delta t \left(\frac{F_{j+1}^n - F_{j-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta^3) \right)$$

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

$$- \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{\frac{1}{2} (q_{j+1}^n)^2 - \frac{1}{2} (q_{j-1}^n)^2}{2}$$

Stability of the LAX scheme

$$CFL = \frac{\Delta t q^{max}}{\Delta x} < 1$$

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



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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

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

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

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

Aqui está o resultado do polinómio de interpolação:

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

Termo de dissipação

$n+1$

n

$j-1$

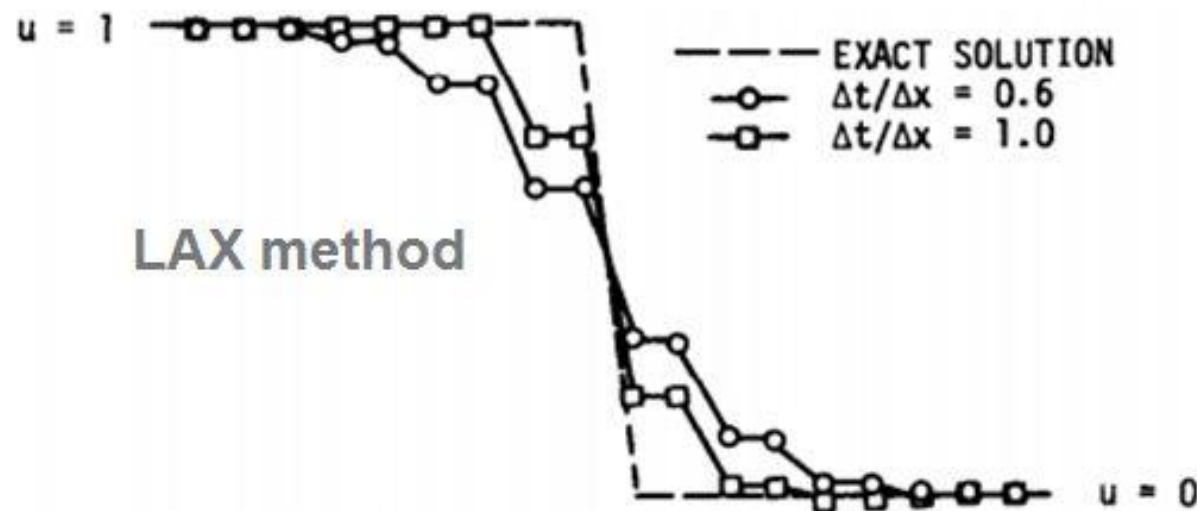
j

$j+1$

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

O problema de Riemann

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



- 1) Este método é dissipativo, porém preserva a monotonicidade.
- 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) ,

O problema de Riemann

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: $q(x_j, t^n + \Delta t) = q(x_j, t^n) + \Delta t \left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_{x_j, t^n} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} \right)_{x_j, t^n} + O(\Delta t^3)$

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

Sem interpolação
Diferente do
esquema de LAX
de 1 ordem

Eq. + FD
O mesmo do
esquema de LAX
de 1 ordem

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

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

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

O problema de Riemann

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)



O problema de Riemann

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

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

Aqui está o resultado do polinómio de interpolação:

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

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



O problema de Riemann

Reformulação de volumes finitos do método Lax-Wendroff

polinómio de interpolação:
Lax-Wendroff

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

polinómio de interpolação:
LAX

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

Diferença/
Correção

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

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

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



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

Métodos de captura de choque MacCormack 1969

O problema de Riemann

Métodos de captura de choque MacCormack 1969

tipo de variante do método Lax-Wendroff

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

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

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) $q_j^{n+1,*}$ refere-se a um estado intermediário de valor armazenado computacionalmente, não é o resultado final para q_j^{n+1}
- 2) Mudança de direção da diferença no preditor e no corretor.
- 3) O método MacCormack 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 MacCormack pode ser implementado mais facilmente.



O problema de Riemann

Ideal: híbrido o método Lax Wendroff e Lax

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

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

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

Ambas

precisão (LW, na região lisa)

e

preservação monótona (LAX, próximo a descontinuidade).



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

**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)



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

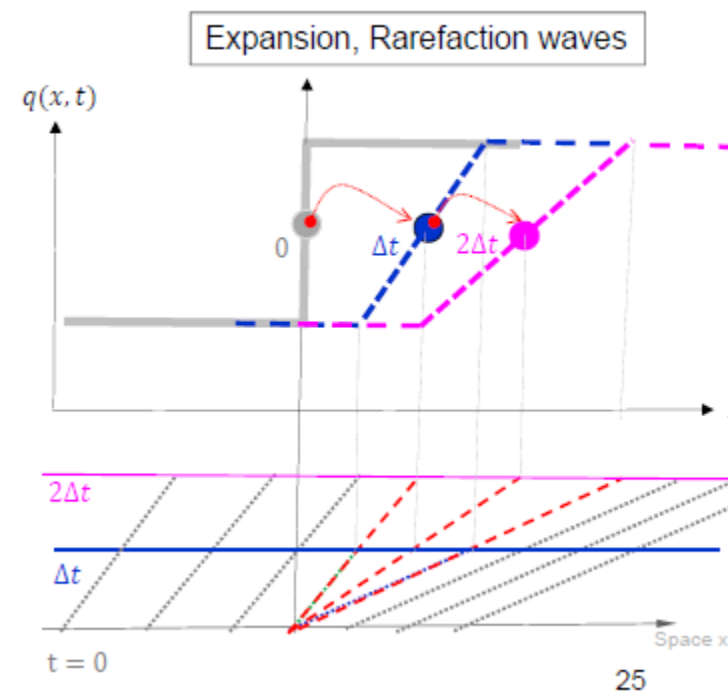
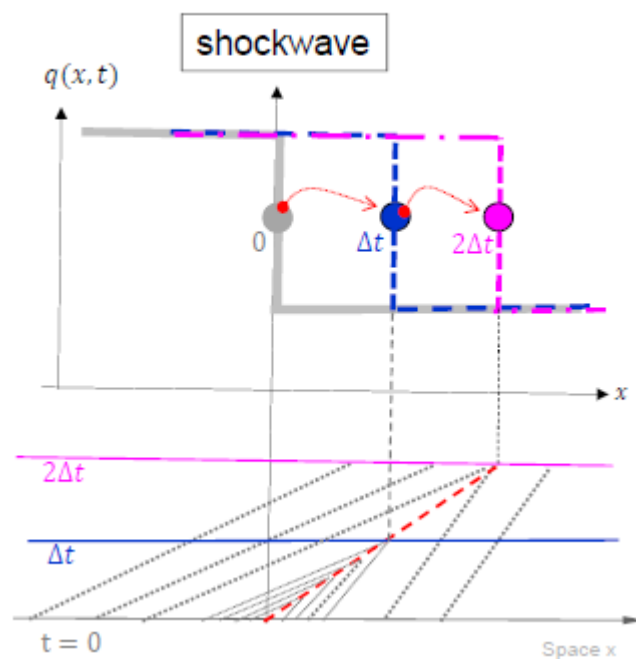
O problema de Riemann

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 não ser ideal para uma descontinuidade forte.

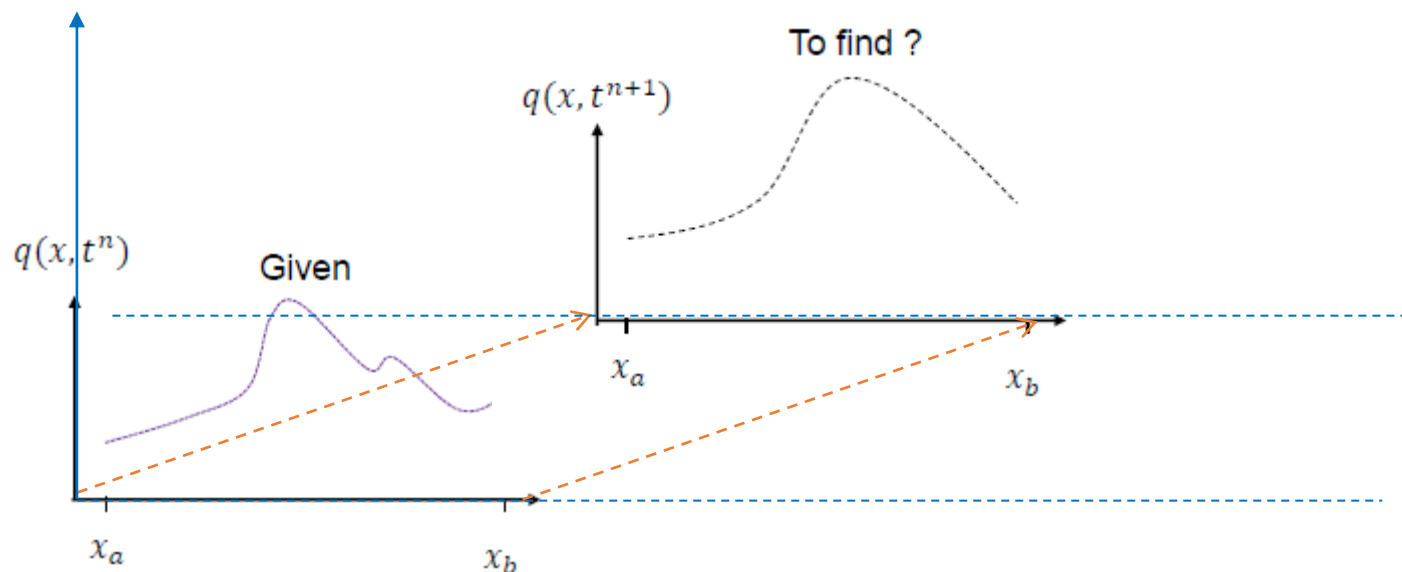
Ideal: Avaliação dos termos de fluxo em cada interface de célula pela **solução de um problema de Riemann** ("Problema de valor inicial composto de uma equação de conservação junto com dados constantes por partes com uma única descontinuidade")

Esquema de Godunov (1959)

Descrição do Problema: Resolva uma equação de onda não linear, digamos a equação de burger invíscido de

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

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.

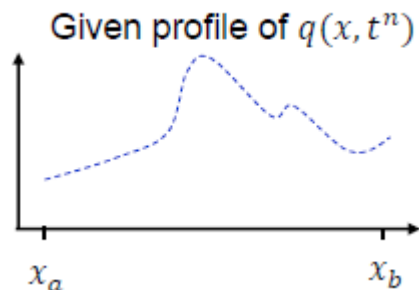


Esquema de Godunov (1959)

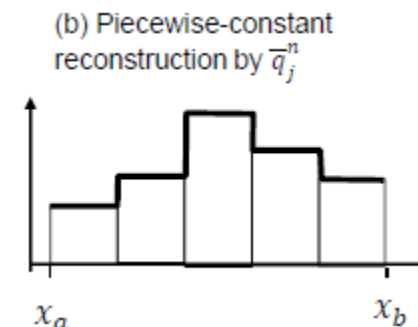
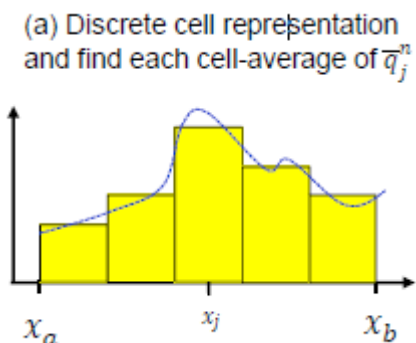
Etapa 1: reconstrução da constante perfurante de $q(x, t^n)$

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.

- Representar o perfil espacial $q(x, t^n)$ em células de grade discretas centradas em x_j com $j \in (1, 2, \dots, N)$ e calcular com precisão os valores médios das células de $\bar{q}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^n) dx$
- 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!



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

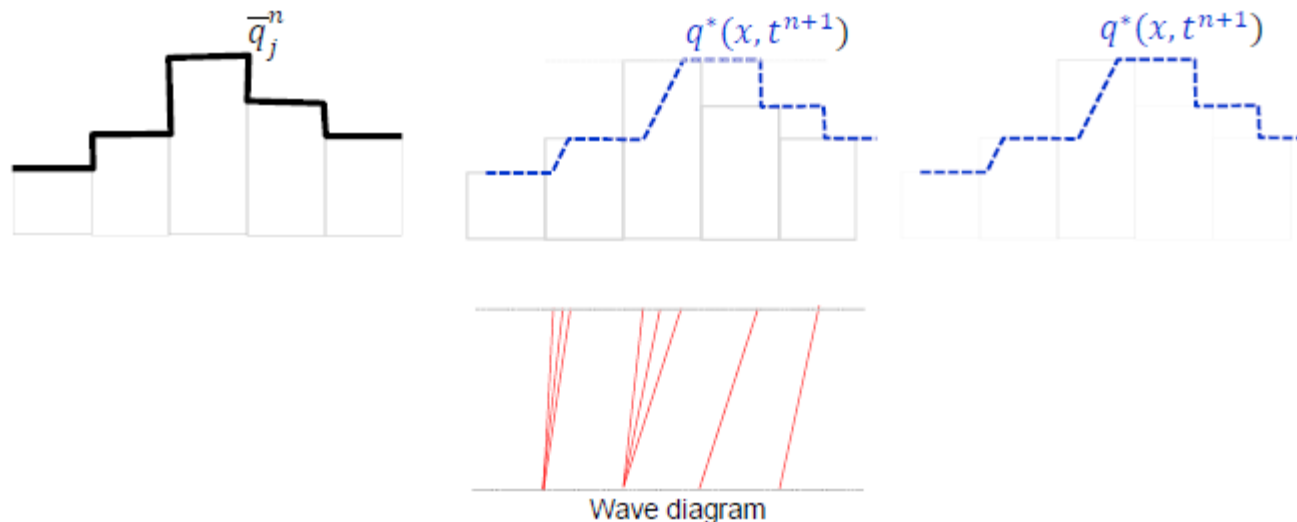


Esquema de Godunov (1959)

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.

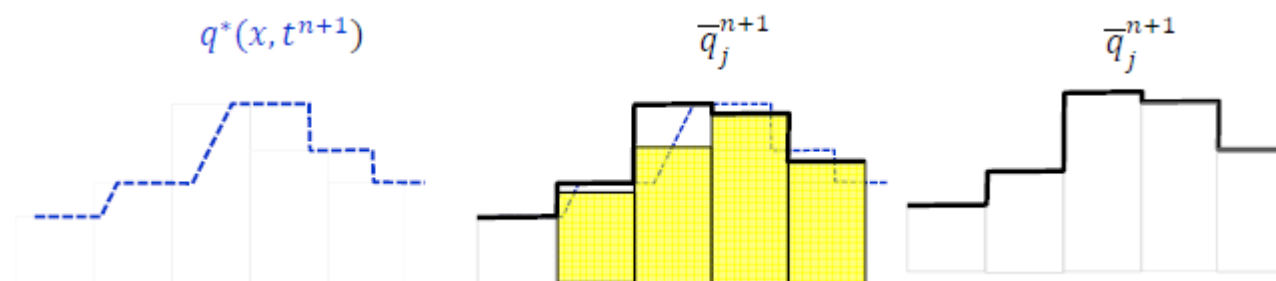
Calculo exato do problema de Riemann



Esquema de Godunov (1959)

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

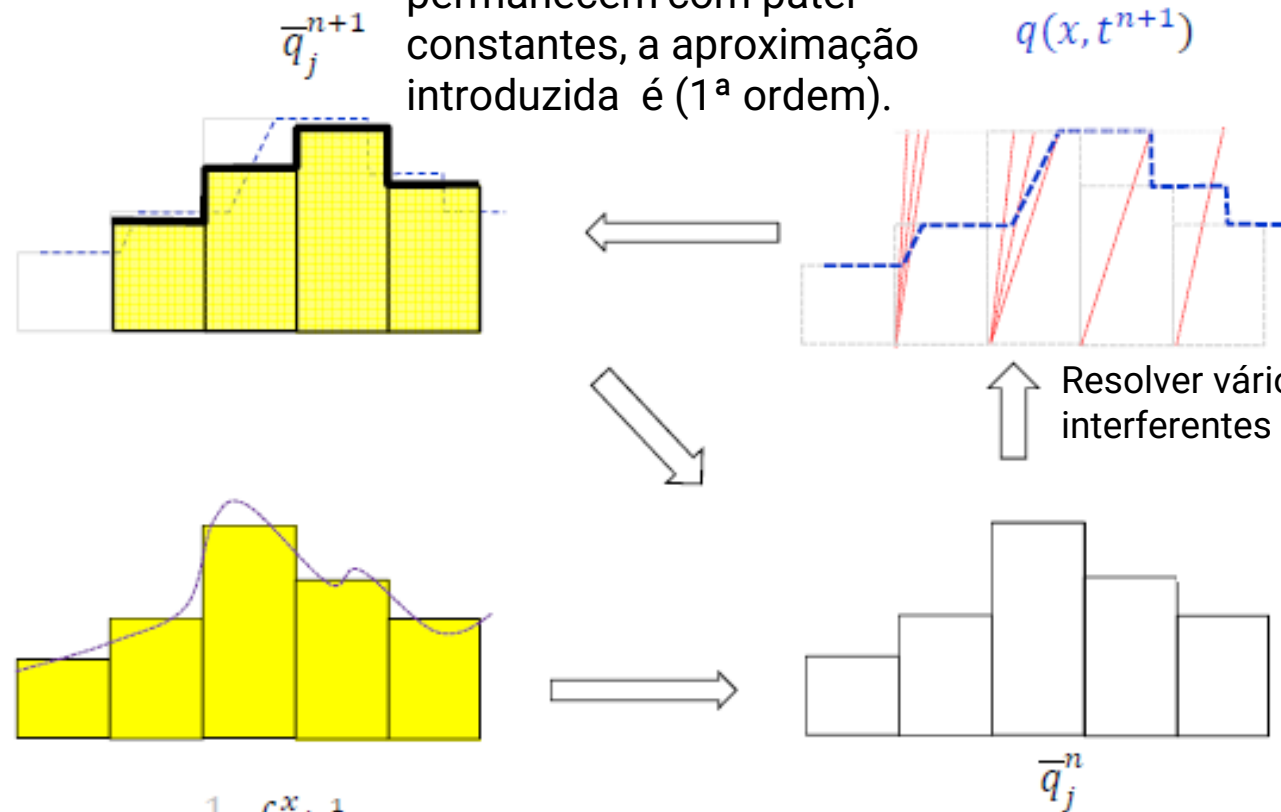
O valor da média da célula do perfil $\bar{q}^*(x_j, t^{n+1})$ é calculado como $\bar{q}_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q^*(x, t^n) dx$, cuja a nova reconstrução por partes é usada para repetir o avanço no tempo.



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

Esquema de Godunov (1959)

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



Resolver vários problemas de Riemann não
 interferentes (exatos) em cada interface de célula

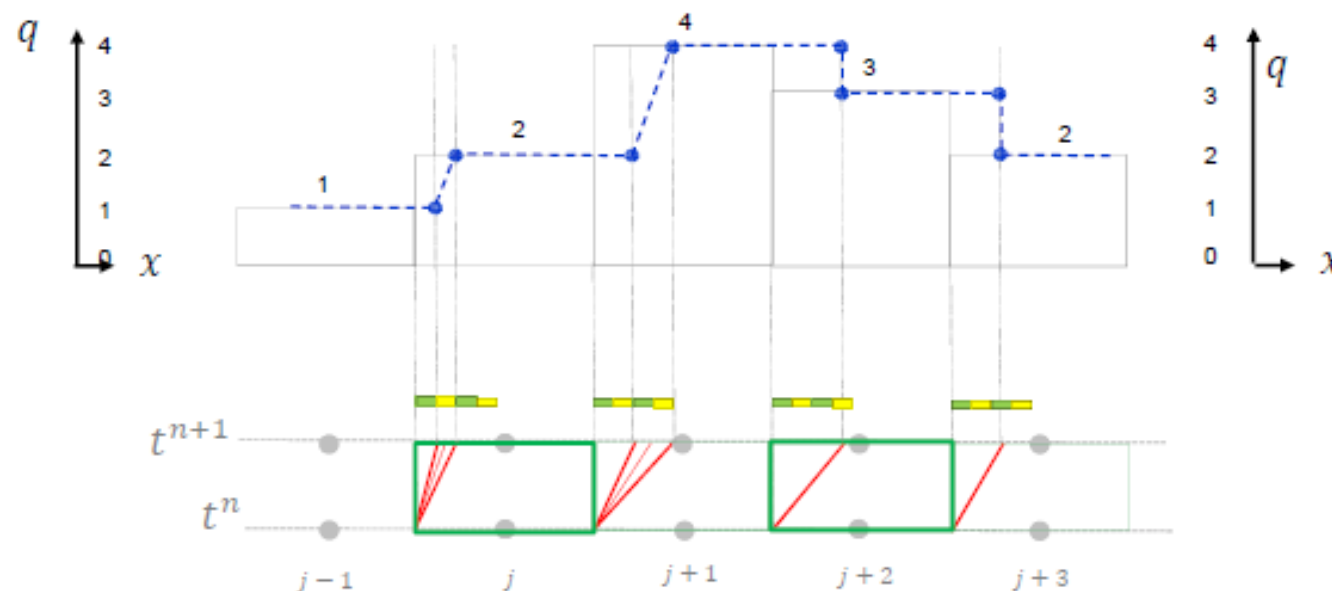
$$\bar{q}_j^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q(x, t^0) dx$$

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^*

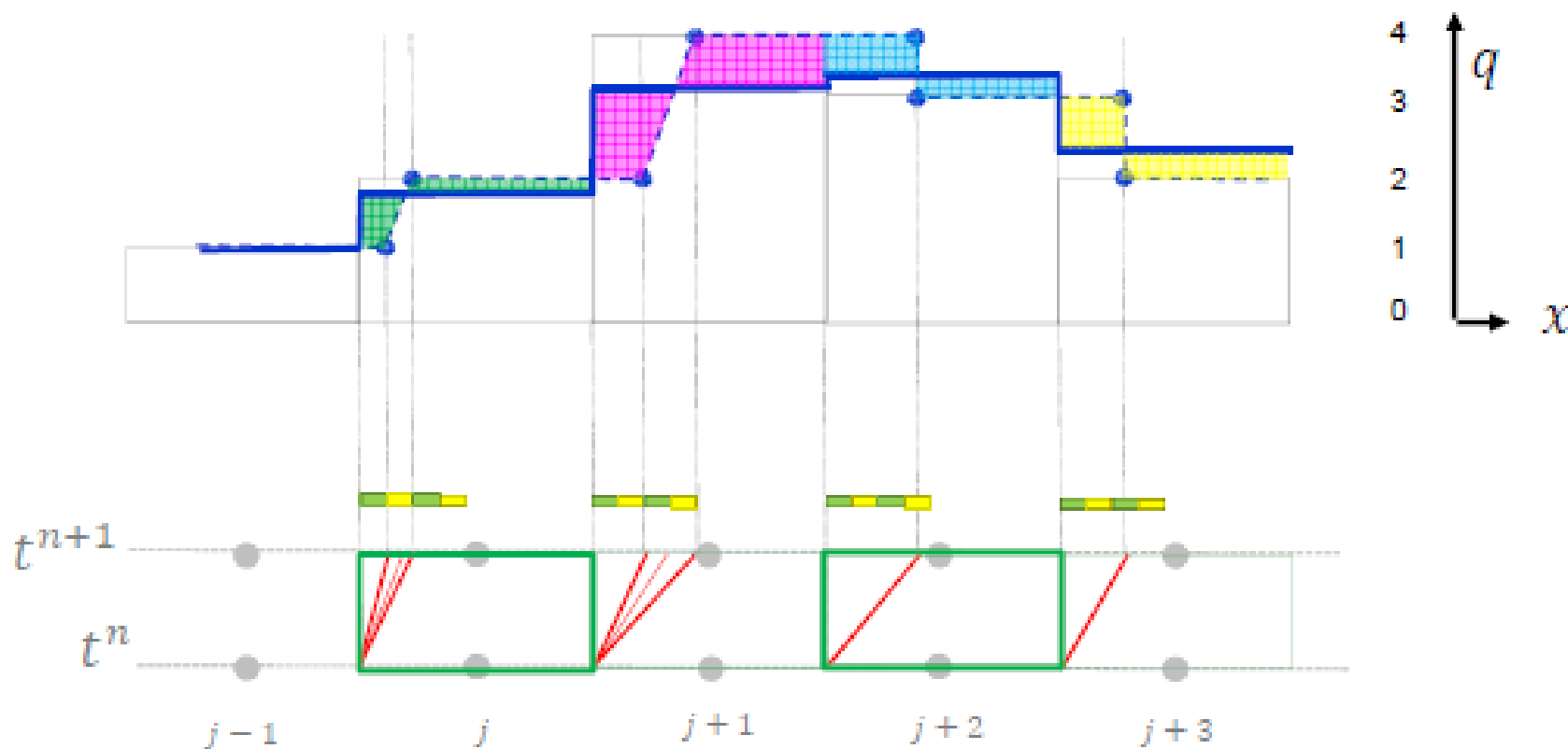
Demonstração 1: Suponha que todas as ondas normais, ou seja, **a velocidade da onda** ($\frac{\partial F}{\partial q} = q$) em todas as células são positivas.



Esquema de Godunov (1959)

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

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

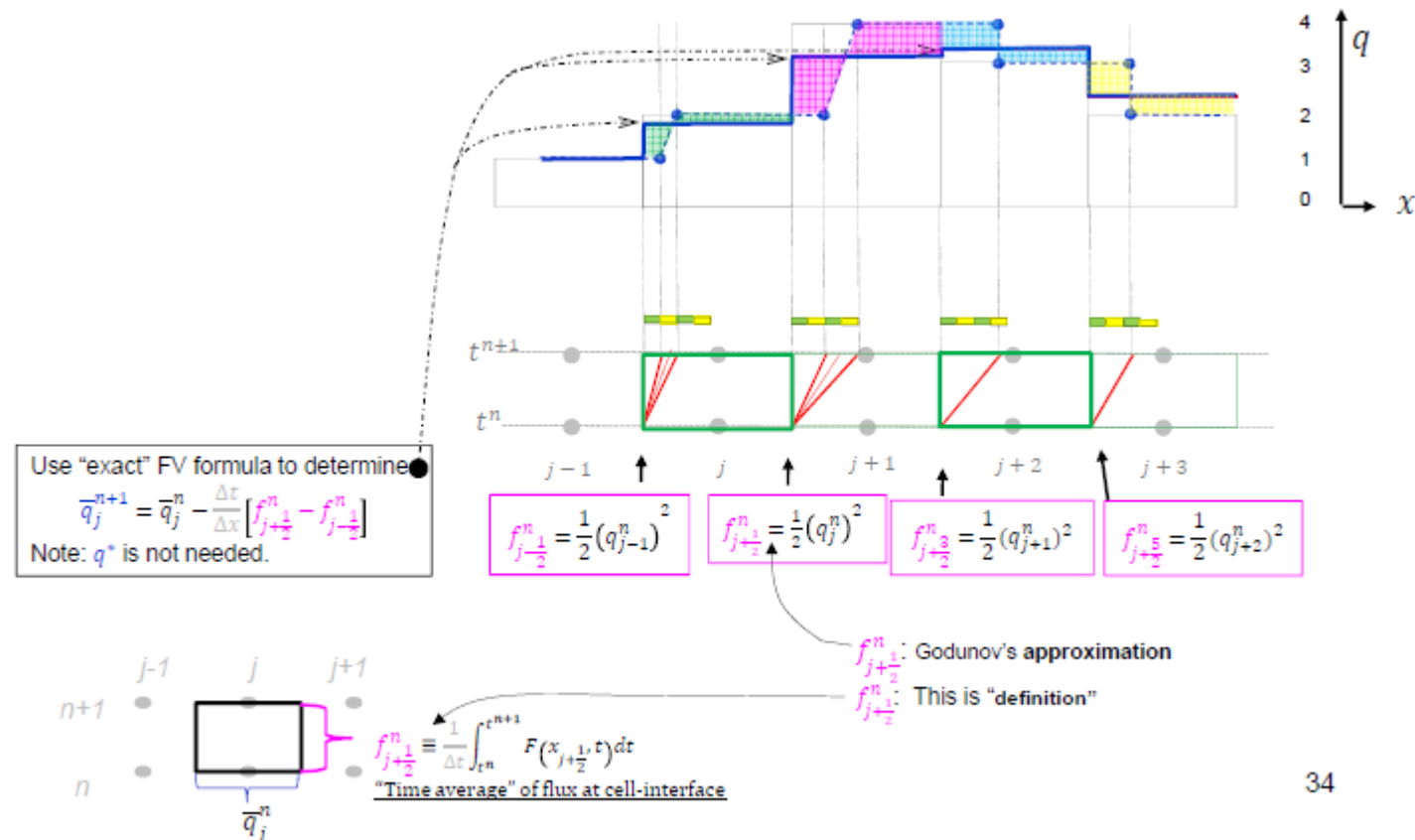


Esquema de Godunov (1959)

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^*)

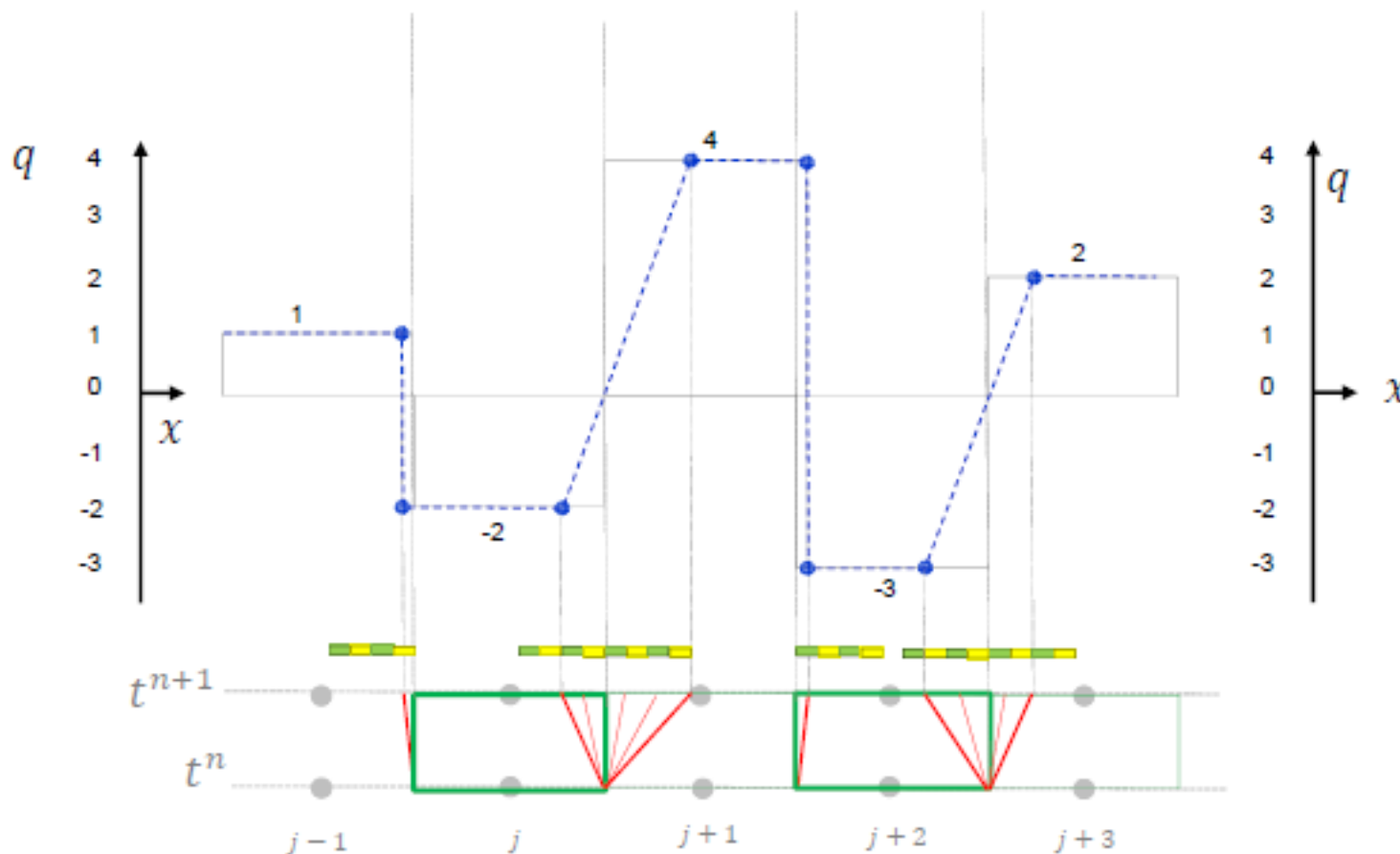
- Avaliação do termo "O exato fluxo médio no tempo na interface da célula" para o problema de Riemann contíguo e múltiplo



Esquema de Godunov (1959)

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

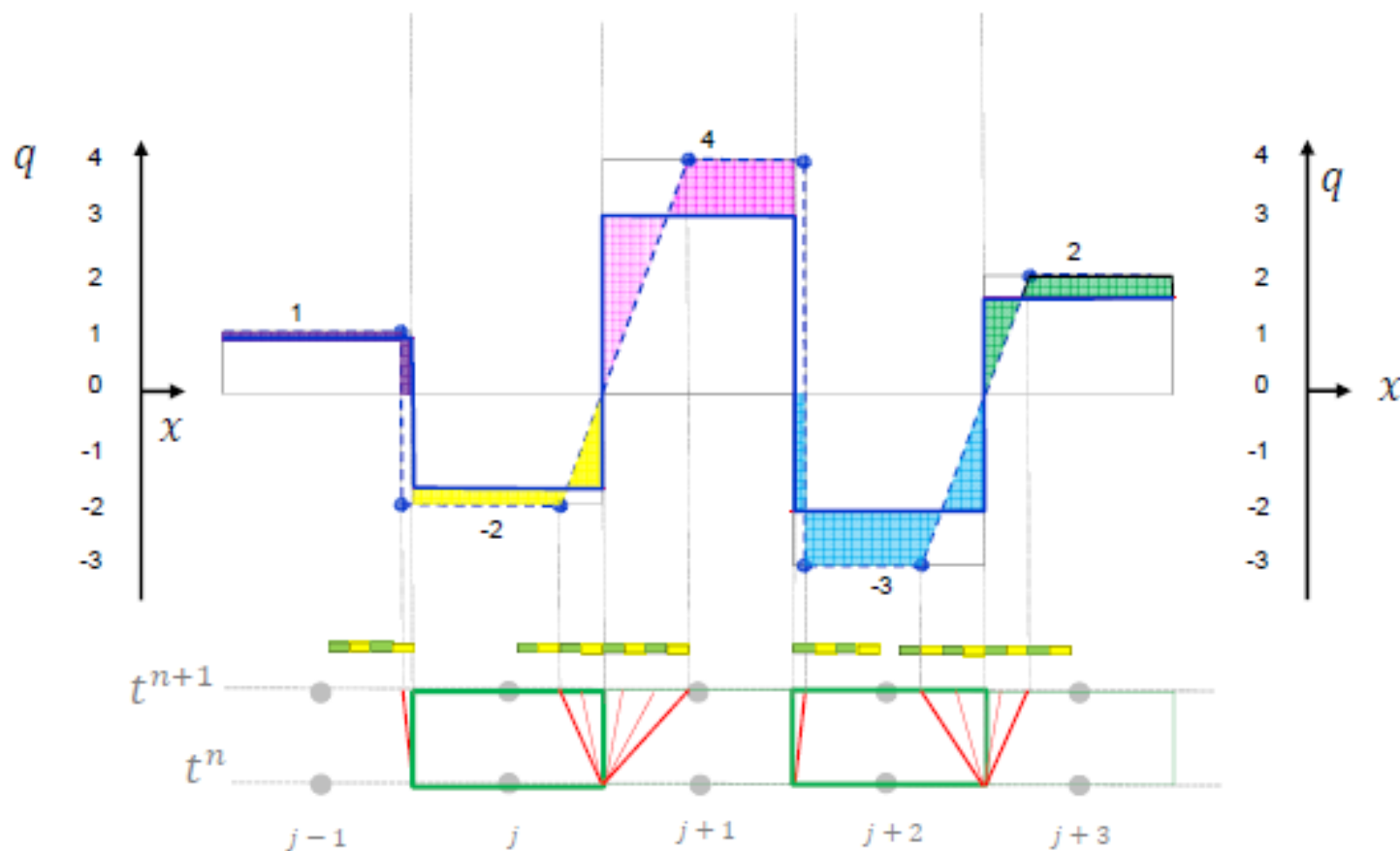
- (A): Resolvendo vários problemas contíguos de Riemann para a equação de burger para obter q^*



Esquema de Godunov (1959)

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

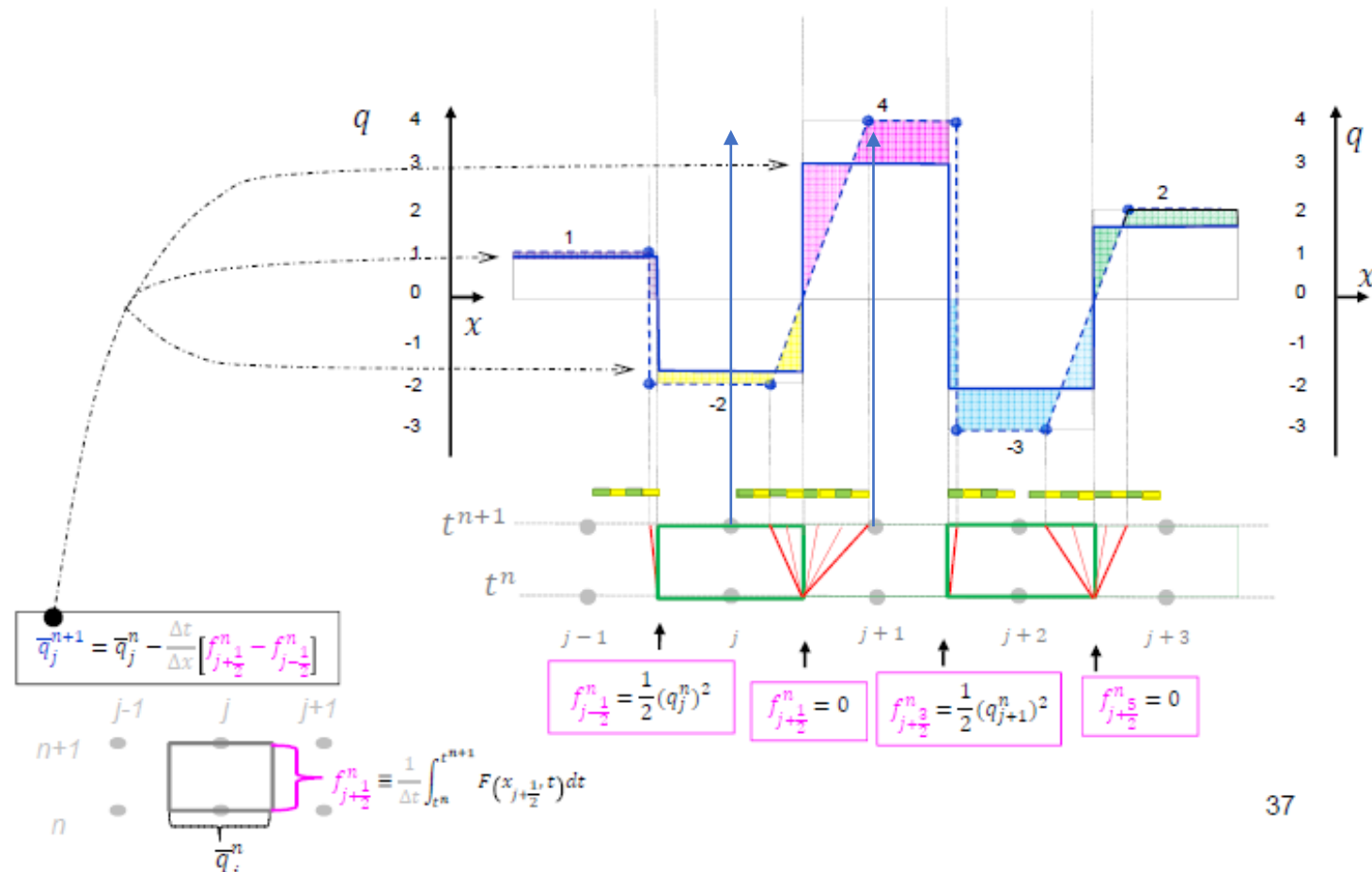
- (B.i): reconstrução da constante Piecewise de \bar{q}_j^{n+1} a partir de q^* , preservando a mesma média na célula



Esquema de Godunov (1959)

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

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



Esquema de Godunov (1959)

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

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

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

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

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

Case 2: Expansion waves
 $q_j < q_{j+1}$

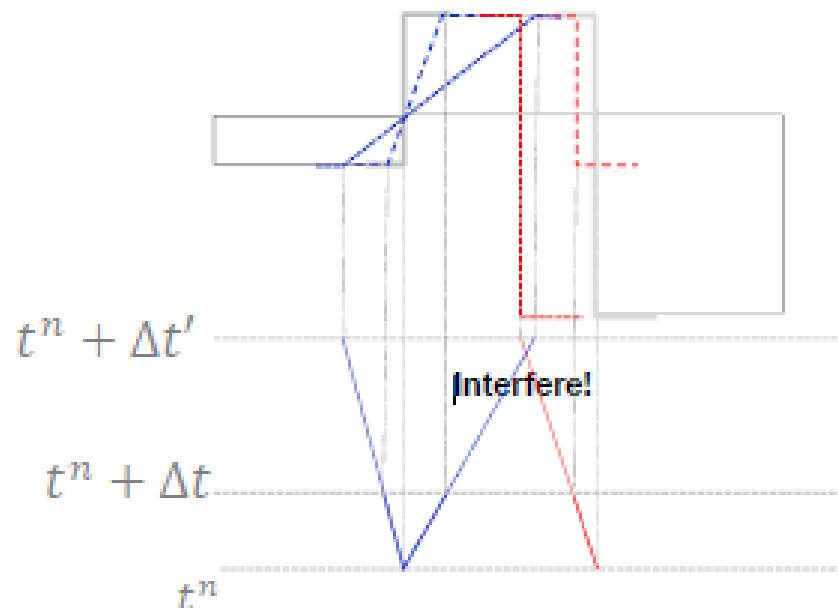
$$q = \begin{cases} q_j, & x'/t < q_j \\ \frac{x'}{t}, & q_j < x'/t < q_{j+1} \\ q_{j+1}, & \frac{x'}{t} > q_{j+1} \end{cases} \quad f_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} 0, & q_j < 0 < q_{j+1} \\ \frac{1}{2} q_j^2, & c_{j+\frac{1}{2}} > 0 \text{ \& } q_{j+1} > q_j > 0 \\ \frac{1}{2} q_{j+1}^2, & c_{j+\frac{1}{2}}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

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 de uma célula de distância.



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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.

Ideal: Resolva um problema de Riemann (linearmente) aproximado.

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

+

exato

- 1) Para qualquer q_j^n e q_{j+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 $q = q_j^n = q_{j+1}^n$, $\bar{A}(q_j^n, q_{j+1}^n) = \bar{A}(q_j^n, q_j^n) = \frac{\partial F}{\partial q}$
(isso dá o valor exato na região suave)

Esquema de Roe (1980)

aplicado à equação de burger 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 ,

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

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

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

Eq burger

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

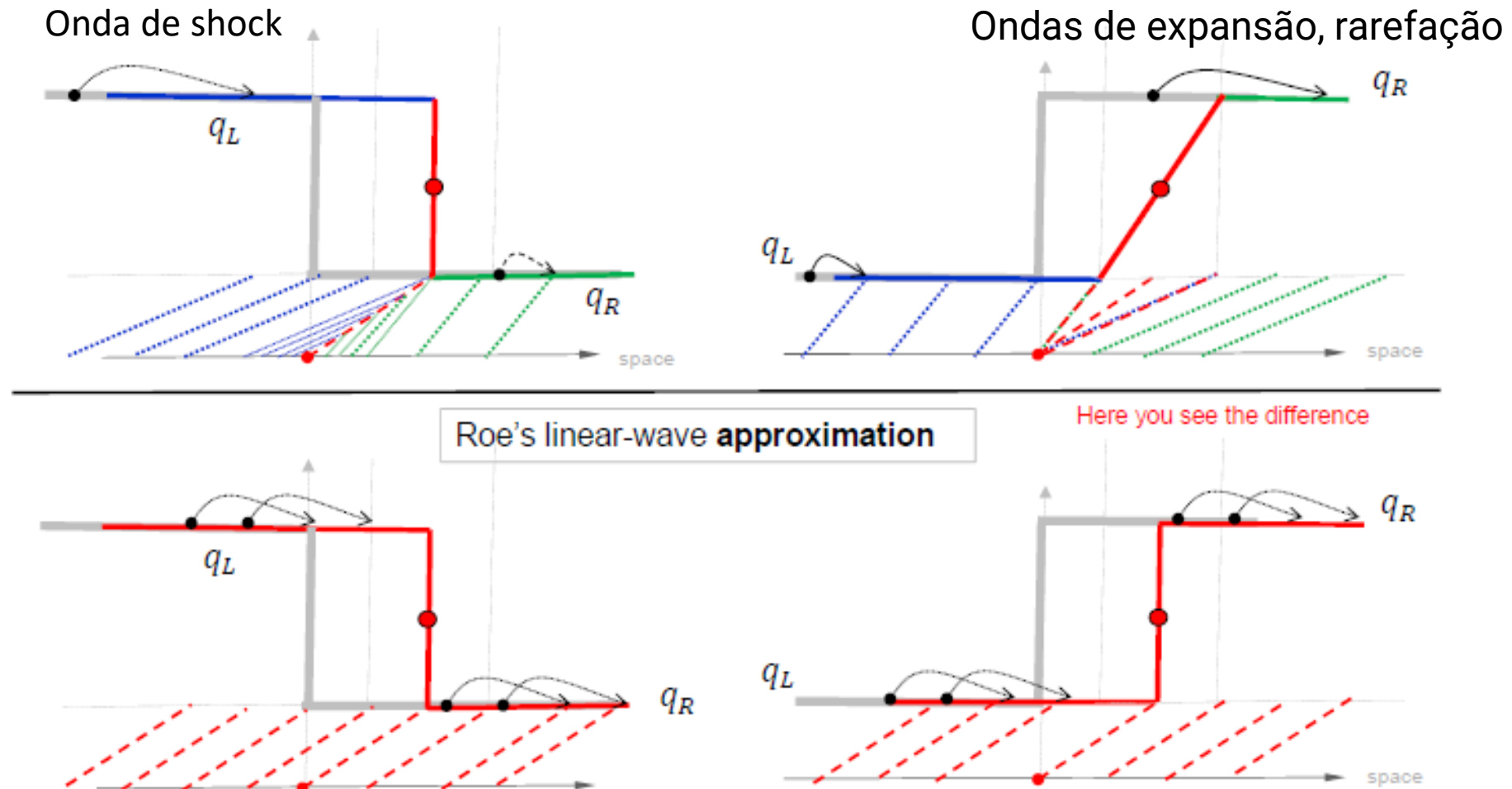
Nota: para as equações de burger invíscido 1D, a aproximação de Roe calcula o problema de Riemann localmente.

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 burger 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

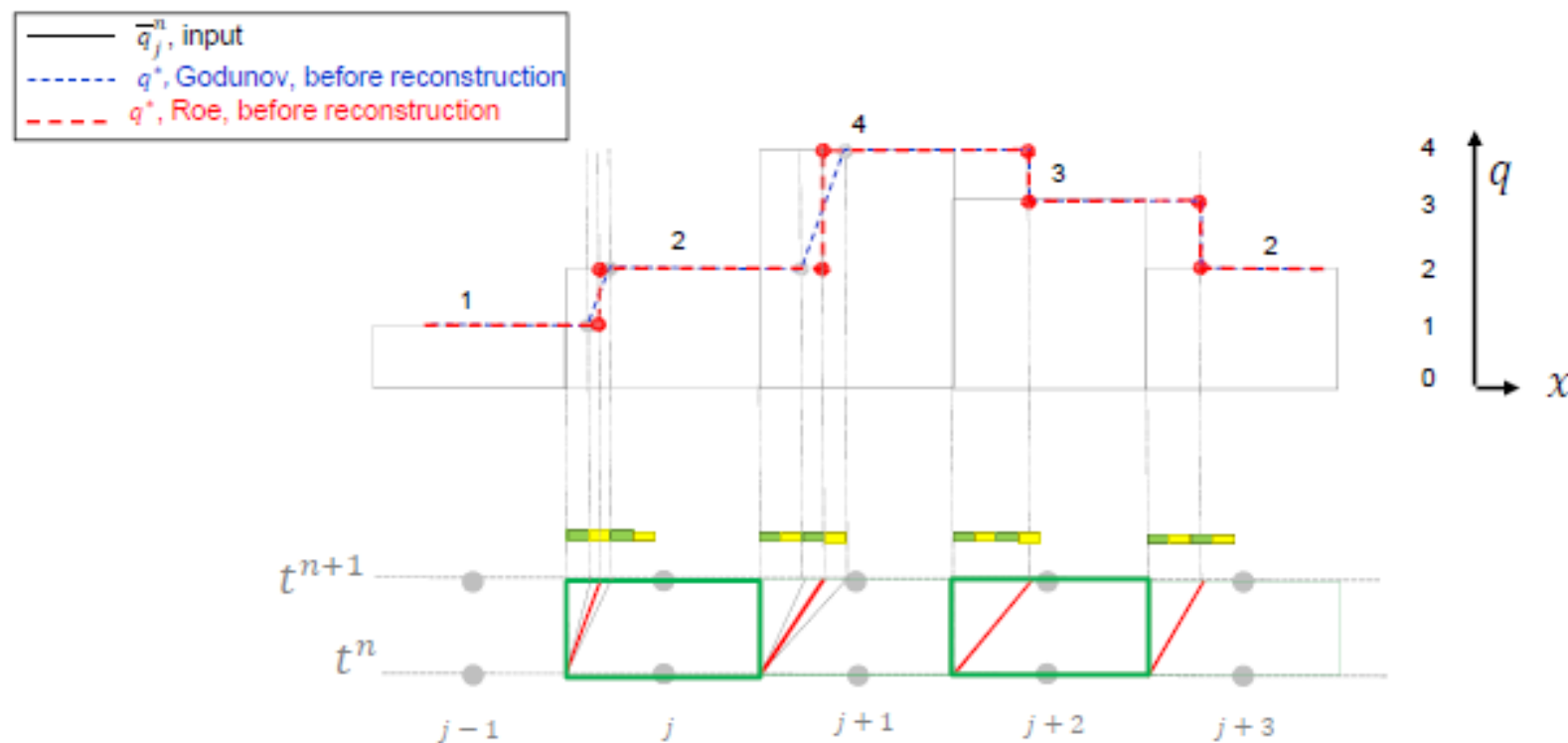


Esquema de Roe (1980)

Demonstração 1 (todas as ondas direitas)

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

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

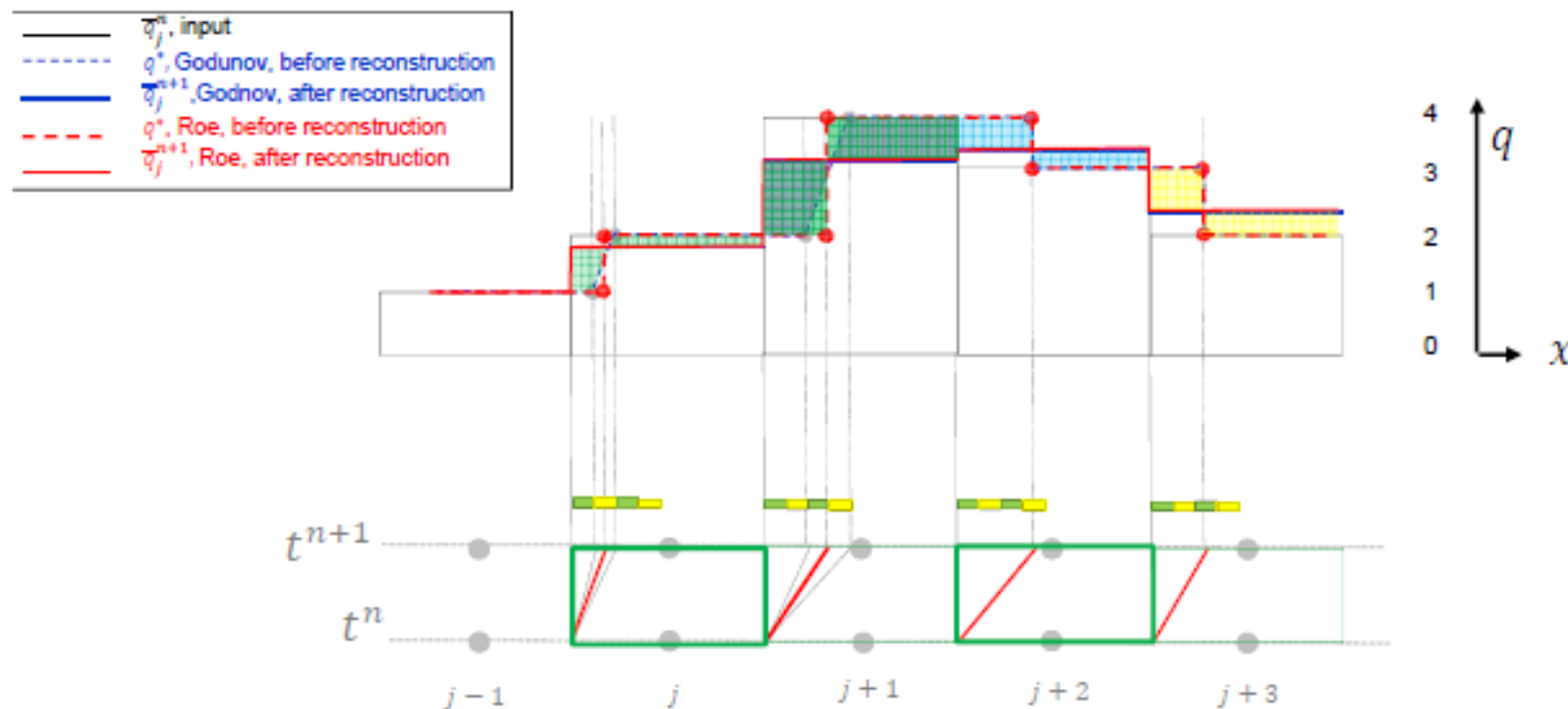


Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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

Demonstração 1 (todas as ondas direitas)



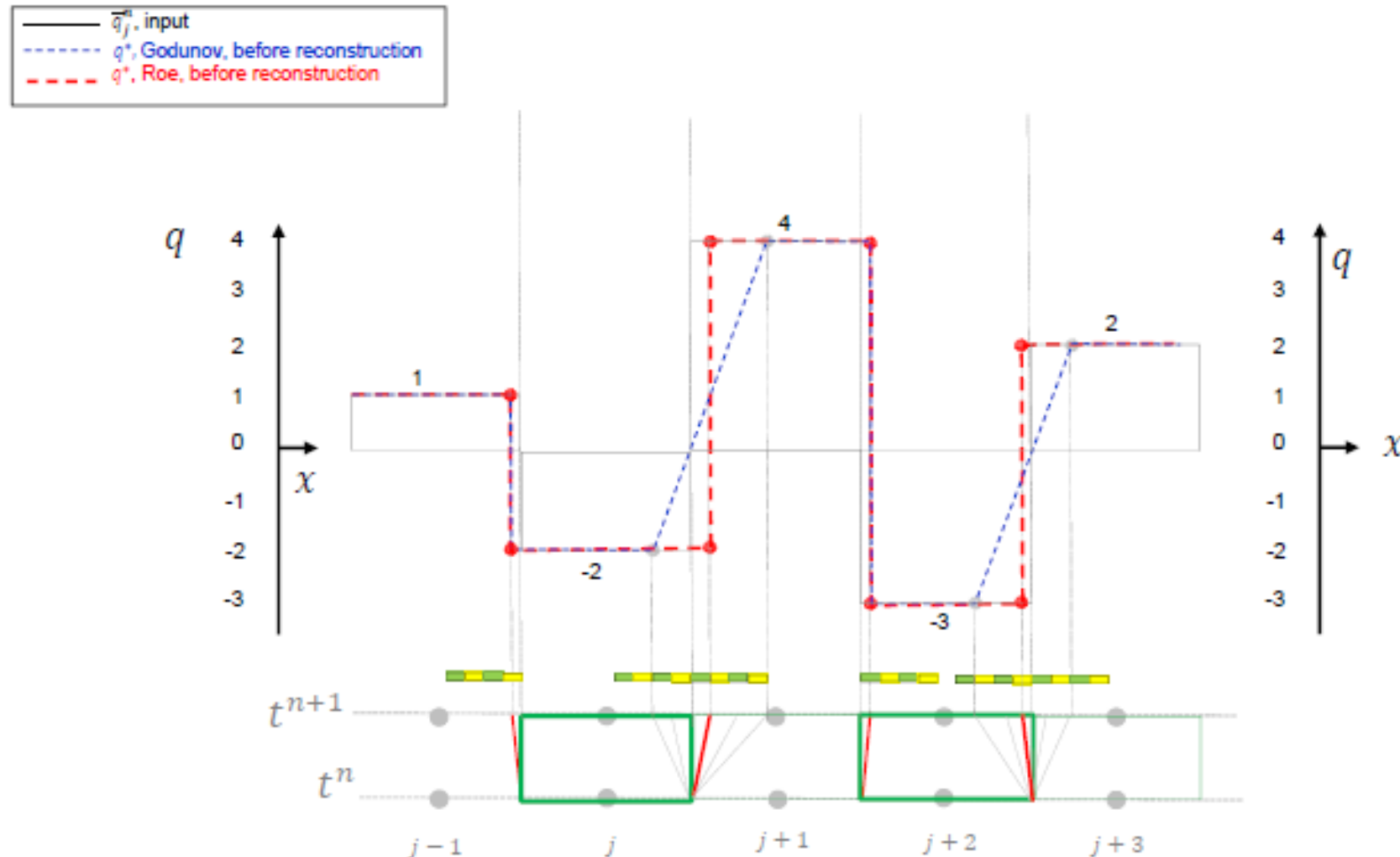
1) Para esta particular demonstração 1 com todas as ondas positivas indo para direitas, o perfil reconstruído de \bar{q}_j^{n+1} será idêntico ao resultado usando para calcular o problema de Riemman exato, mesmo para a região com ondas de expansão (tente você mesmo).

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 $f_{j+\frac{1}{2}}^n|_{Roe} = f_{j+\frac{1}{2}}^n|_{exato}$

O problema de Riemann

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

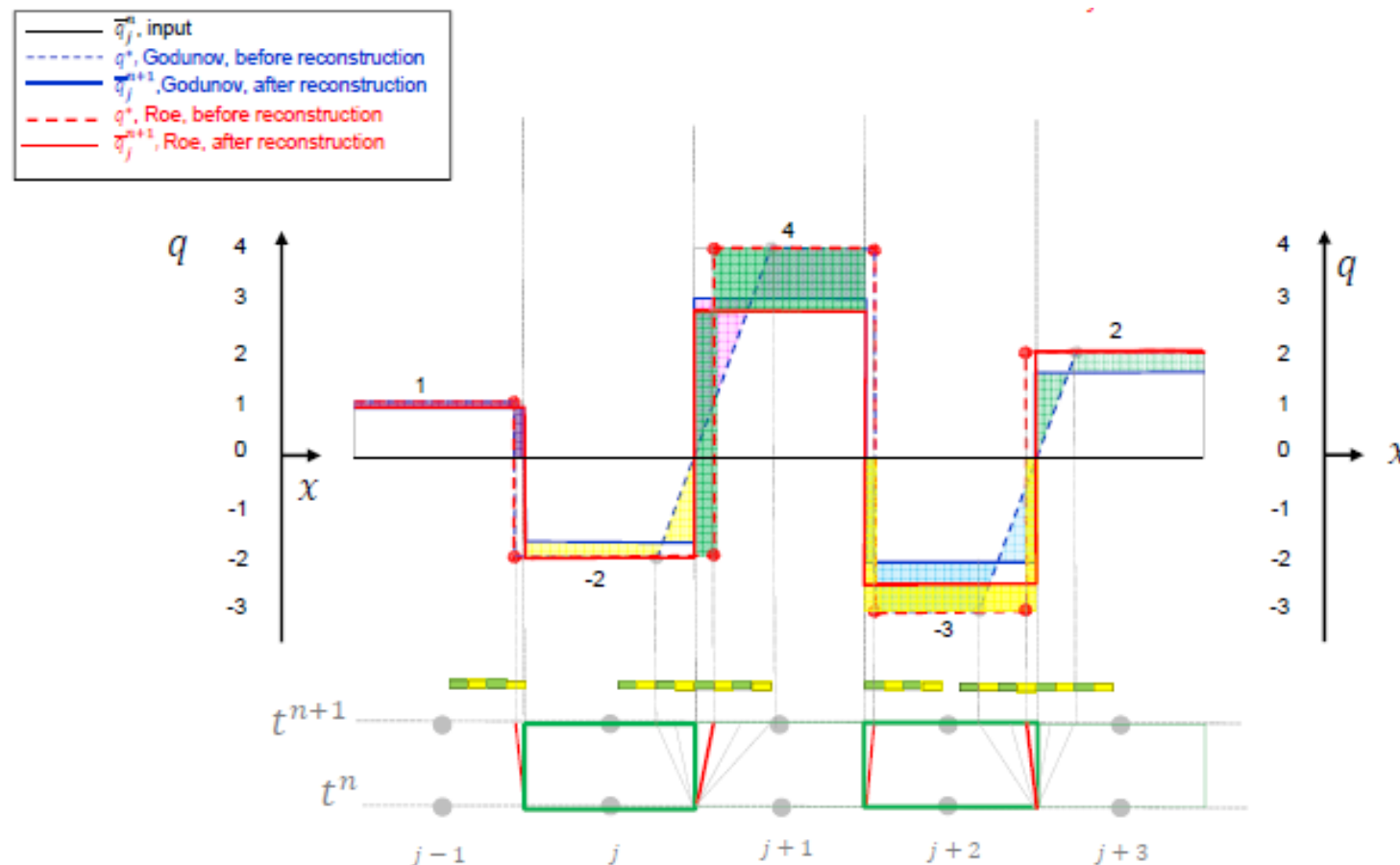
(A) Resolvendo vários problemas contíguos de Riemann usando a aproximação linear de Roe para obter q^*



O problema de Riemann

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

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

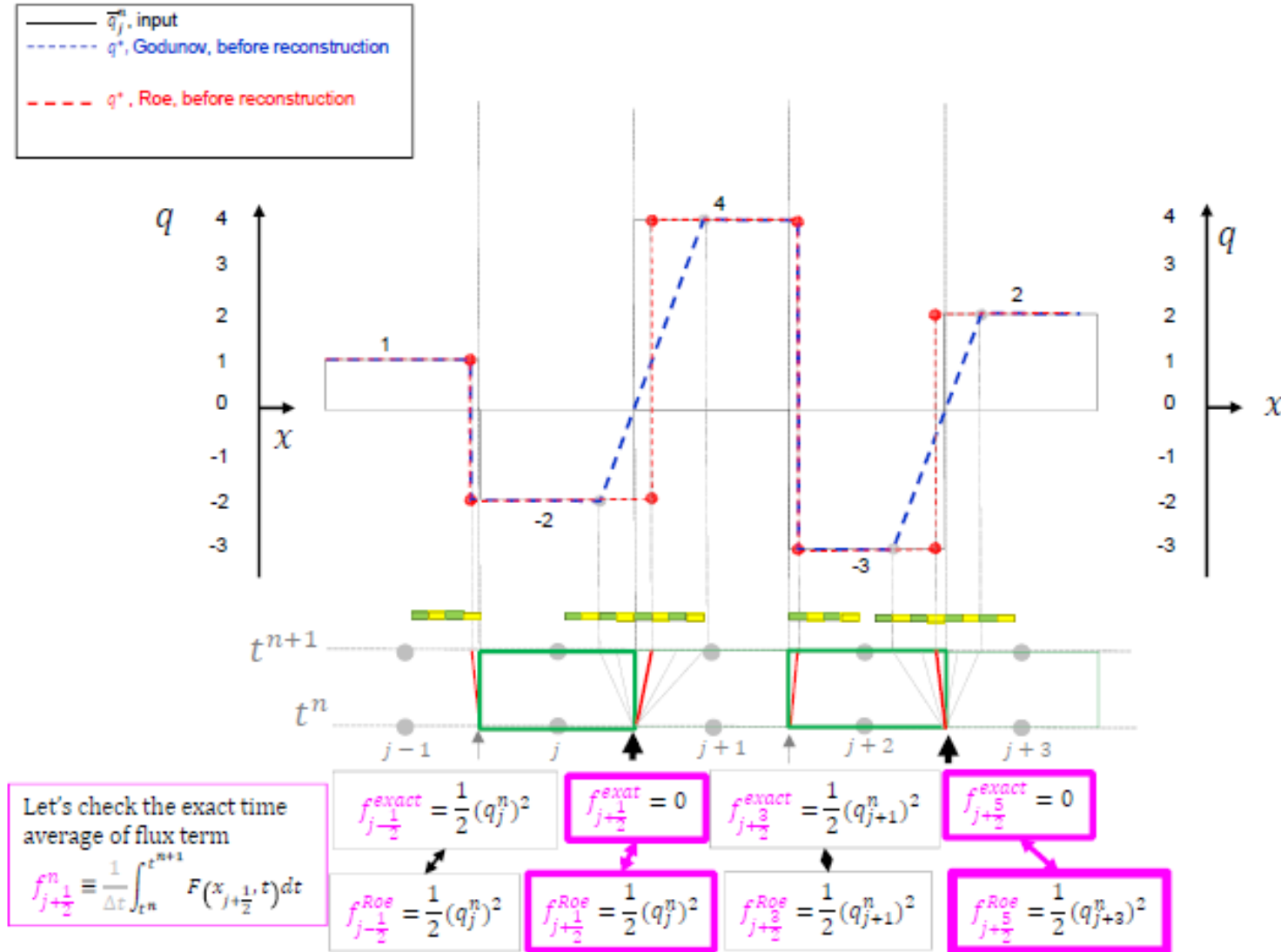


Para esta demonstração 2, \bar{q}_j^{n+1} obtido com o calculo do problema de Riemann aproximado de Roe é diferente do resultado obtido pelo calculo Riemman exato!

Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

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 FV.



O problema de Riemann

The fully-expanded Roe scheme in flux form (for you to make a computer code)

for Inviscid burgers equation $\frac{\partial}{\partial t} q + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} q^2 = 0$

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

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

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

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

Roe conditions 1:

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

Combine above two cases:

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

$$f_{j+\frac{1}{2}}|_{Roe} = \frac{F_j + F_{j+1}}{2} - \frac{1}{2} \left| \bar{A}_{j+\frac{1}{2}} \right| (q_{j+1} - q_j)$$

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.

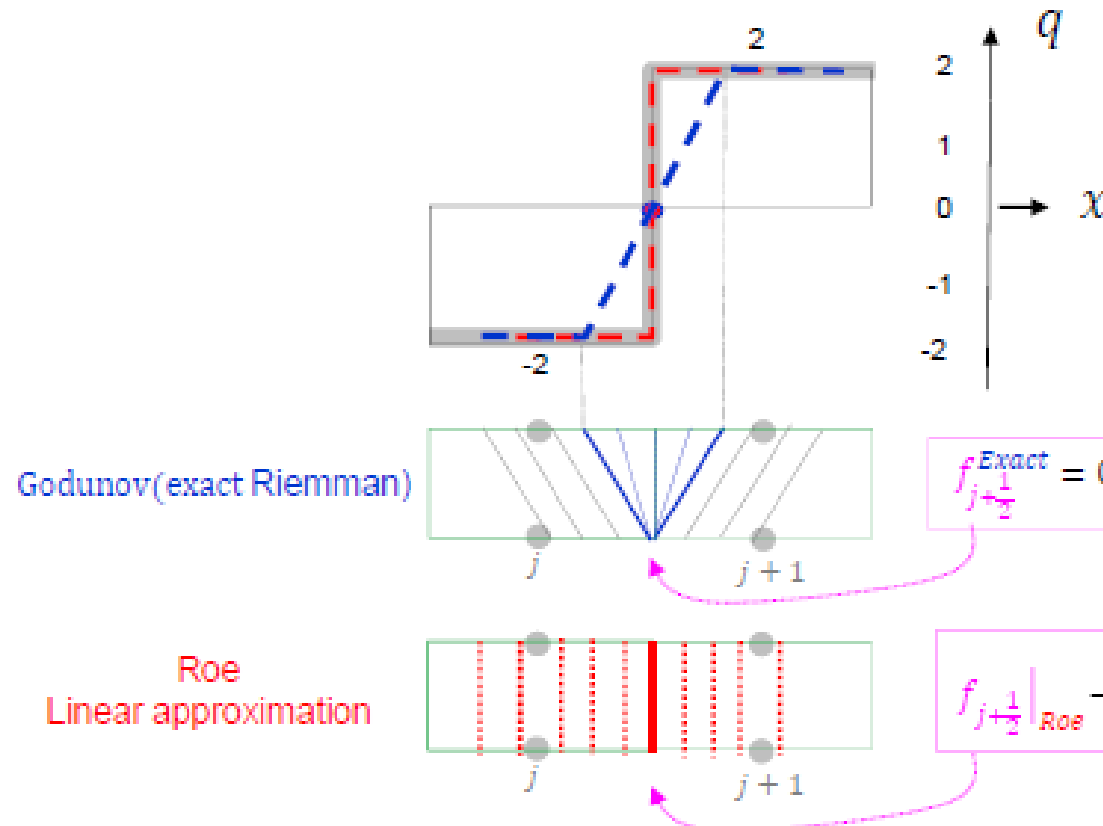
Roe scheme: stability limit: $CFL < 1$, perform well in most of case.

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

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.

- \bar{q}_j^n (input)
- - - q^* , Godunov(exact Riemann)
- - - $q^* (= \bar{q}_j^{n+1})$, Roe



The exact Riemann solver should smooth out this discontinuity through continuous expansion; however, the Roe solver will "hold" this discontinuity.

Entropy fix to Roe scheme

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

Harten-Hymann(1983) modification,

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

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

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



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

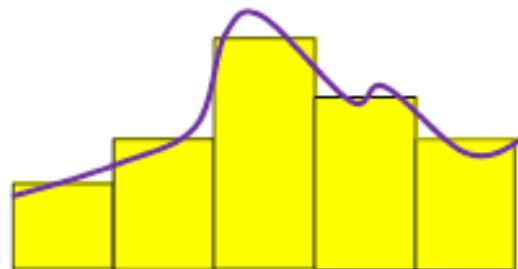
- Esquemas Upstream-Centrados Monótonos para a Lei de Conservação (MUSCL)

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).

Ideal:

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

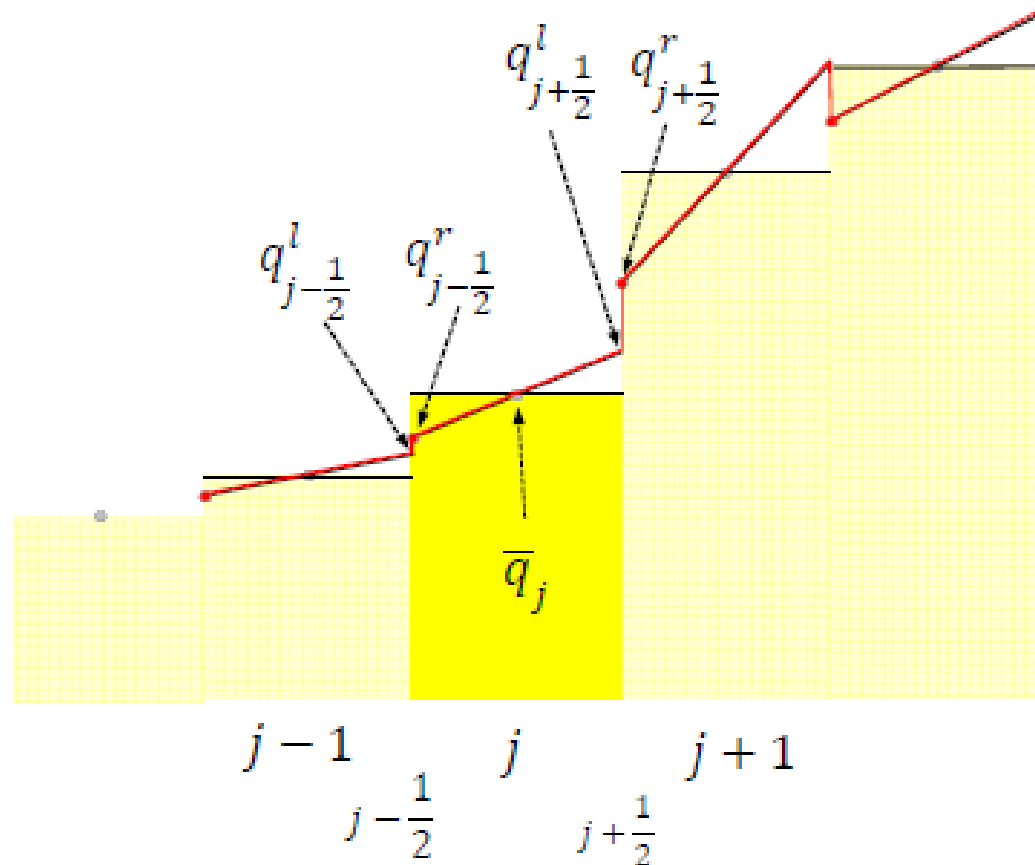


O problema de Riemann

Esquema de alta Ordem

Reconstrução de 2ª ordem da variável de estado

Permitir variação linear em cada célula, mantendo o valor médio da célula



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

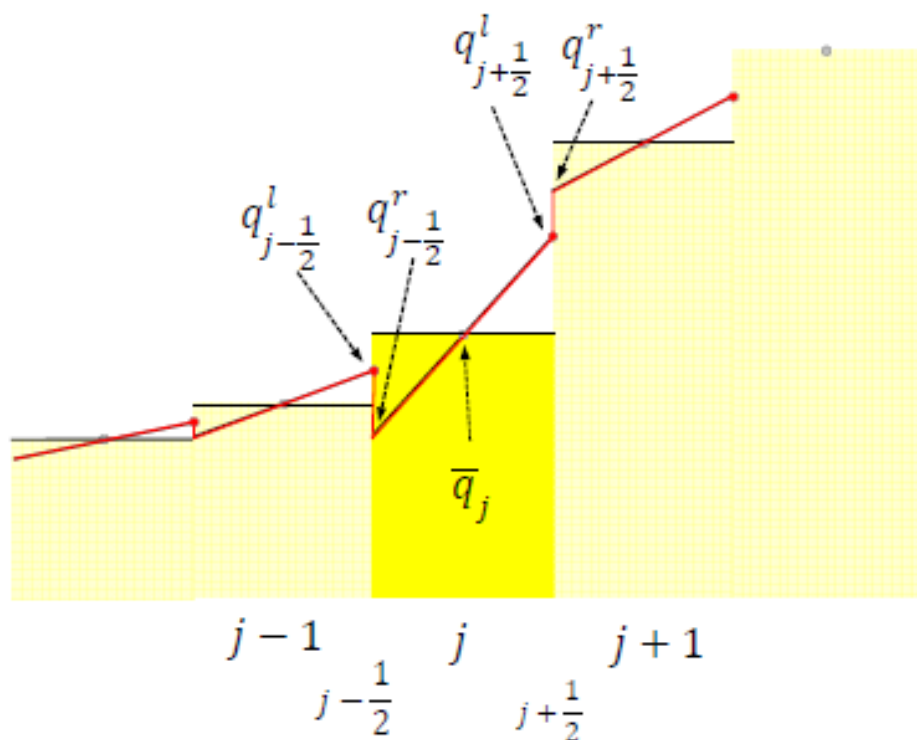
$$q_{j-1/2}^r = \bar{q}_j - \frac{1}{2}(\bar{q}_j - \bar{q}_{j-1})$$

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



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

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

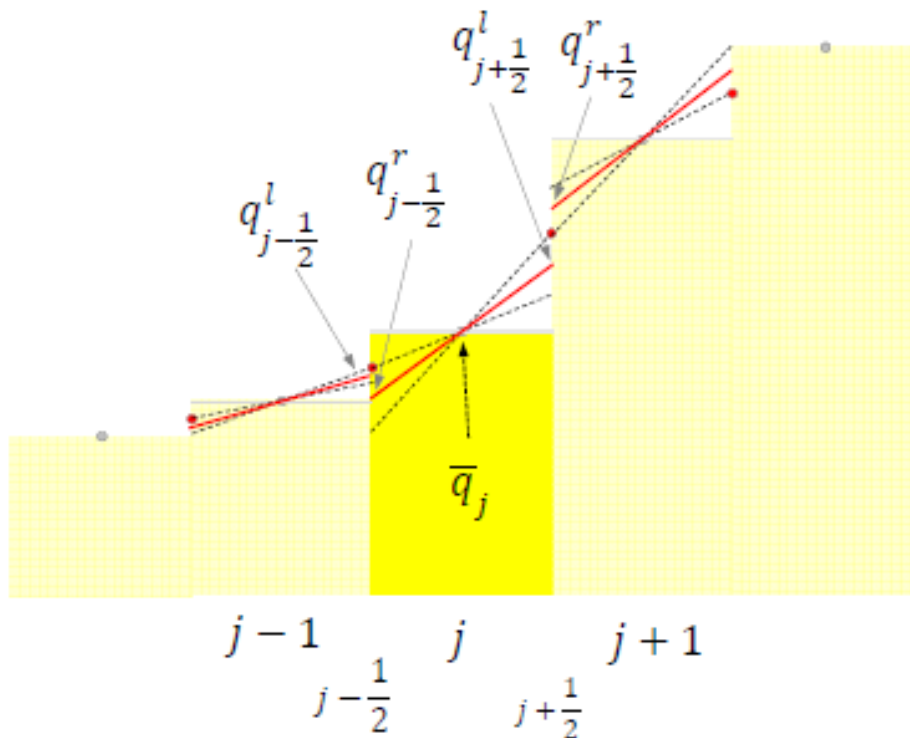
Centrado
(problema linear, Lax-Wendroff)

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

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

$\kappa = -1 \Rightarrow \text{upwind}$

$\kappa = 0 \Rightarrow \text{centrado (linear problem, Lax - Wendroff)}$

$\kappa = 1 \Rightarrow \text{Fromm}$

O problema de Riemann

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 .

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

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

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

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

O método anterior de 2ª ordem

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

O problema de Riemann

Esquema de alta Ordem

A caminho do esquema de ordem superior

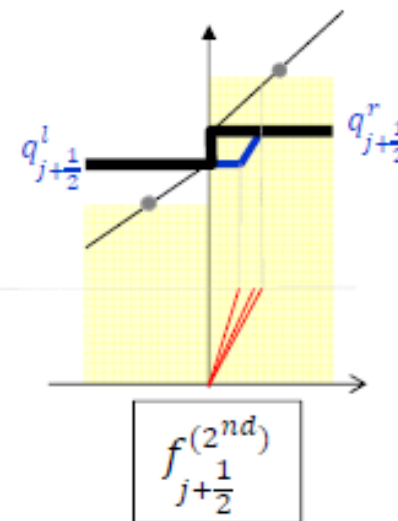
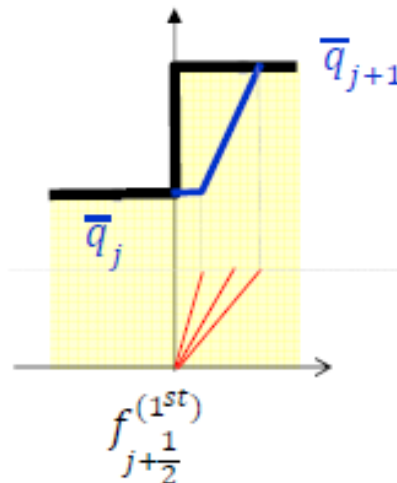
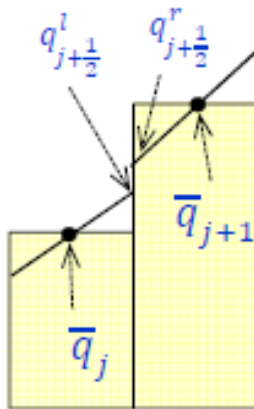
Então, use o valor esquerdo/direito da variável de estado reconstruída para calcular os fluxos .

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

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

O método anterior de 2ª ordem

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



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

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

Média na célula

Valor reconstruído na interface da célula

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

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

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

CFL < 1 para “centrada”

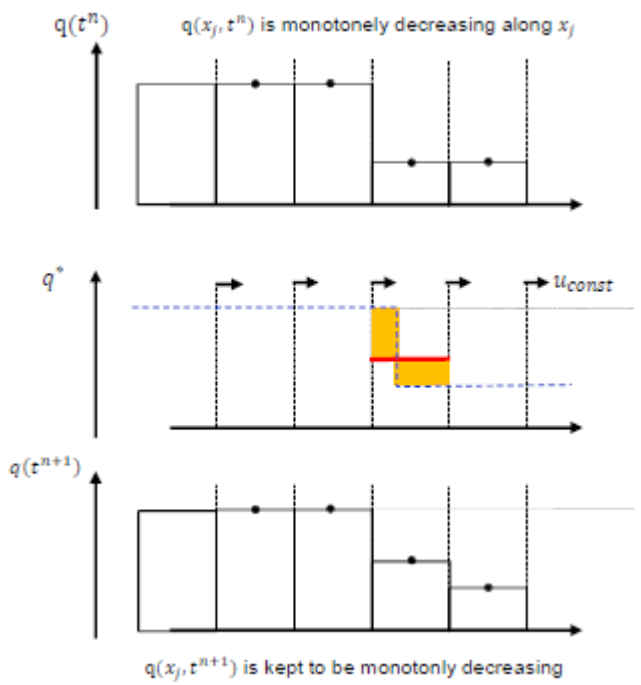
CFL < 2 para “upwind”

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

Esquema de alta Ordem

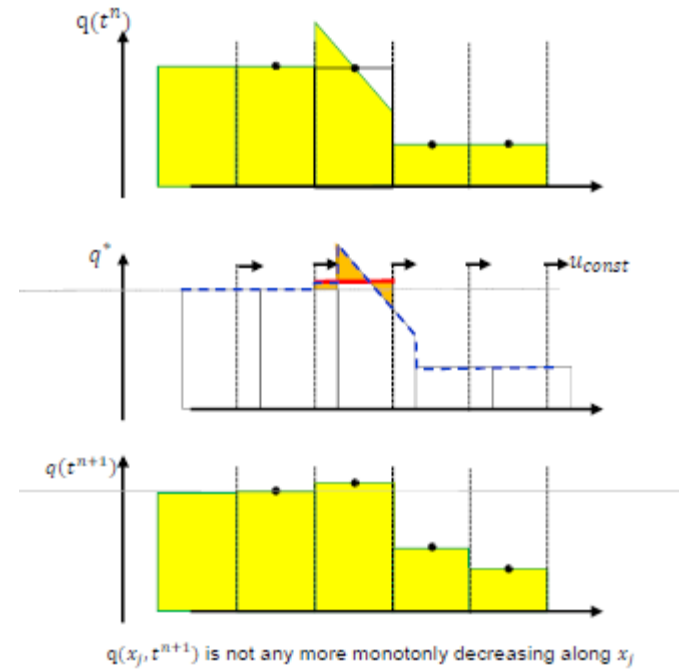
Ilustração para a perda da monotonicidade pela reconstrução de 2ª ordem durante uma única etapa de avanço do tempo para uma equação de advecção linear.

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



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

Reconstrução com Piecewise-linear (2st ordem no espaço): overshoot” numérico

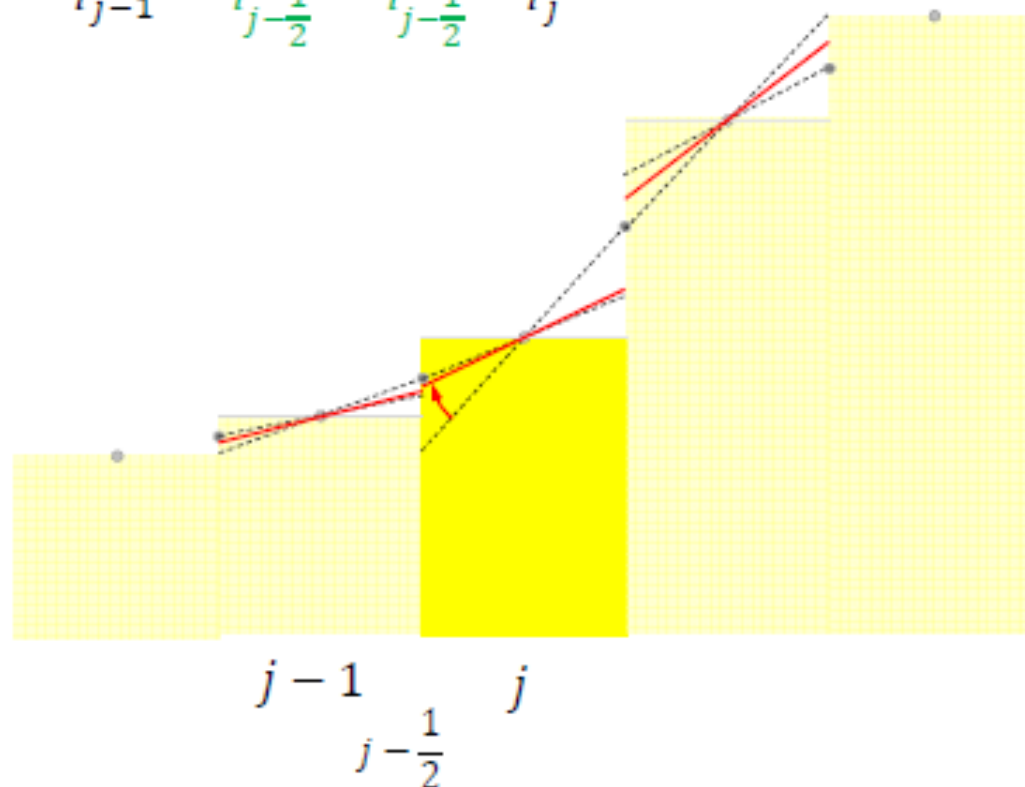


Esquema de alta Ordem

Queremos remover o excesso indesejado do esquema MUSCL.

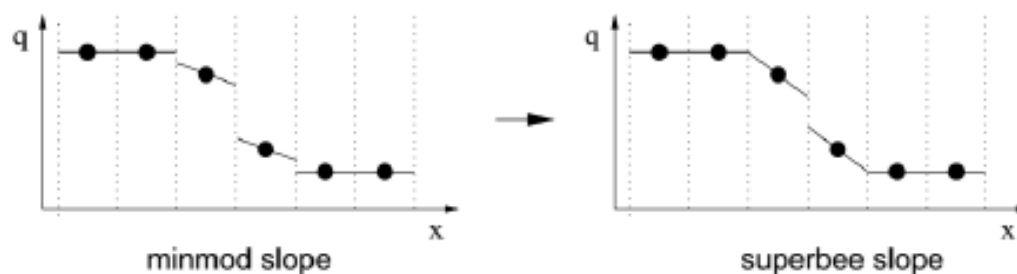
Um ideal: limitar a inclinação da variável reconstruída

$$\bar{q}_{j-1} \leq q_{j-\frac{1}{2}}^l \leq q_{j-\frac{1}{2}}^r \leq \bar{q}_j$$



Esquema de alta Ordem

Dois diferentes limitadores de inclinação σ



applied to 2nd order
"center" reconstruction

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

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

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

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

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

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

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

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

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



Dinâmica 27/09/2021 a 27/09/2021

O problema de Riemann

Esquema de alta Ordem

Algumas questões teóricas

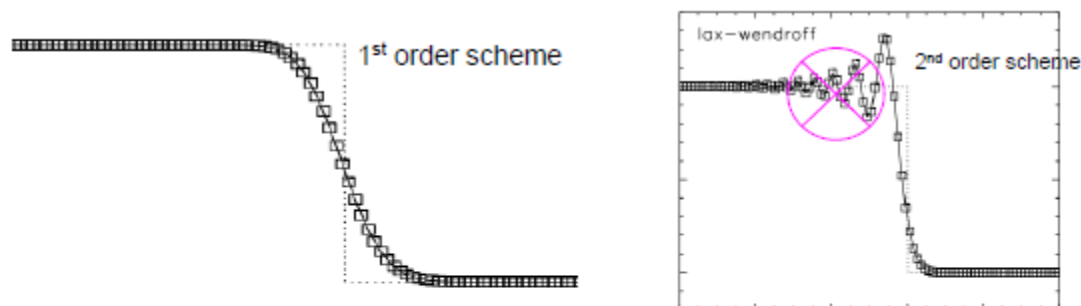
- Oscilações numéricas "atormentadas" com os esquemas de alta ordem
 - Conceito de esquema de preservação da monotonicidade
 - Conceito de esquema TVD

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



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

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

Vamos escrever uma expressão geral (linearizar) do esquema

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