Multiextrapolação de Richardson com interpolação aplicada às equações de Navier-Stokes 2D

Márcio A. Martins
Departamento de Matemática, Universidade Estadual do Centro Oeste (UNICENTRO-PR)
85040-080, Guarapuava, PR; E-mail: mandre@unicentro.br

Carlos H. Marchi
Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Paraná (UFPR), Curitiba, PR
E-mail: marchi@ufpr.br

Resumo: *Analisa-se o desempenho de Multiextrapolação de Richardson (MER) com o objetivo de reduzir e estimar o erro de discretização (Eh) em Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). Sobre a redução de Eh, propõe-se um conjunto de procedimentos numéricos envolvendo o uso de interpolação polinomial e, em alguns casos, também o emprego de técnicas de otimização. Com relação ao exercício de estimativas para o erro numérico, são analisados dois estimadores que apresentaram resultados acurados, possibilitando assim a determinação de um critério para identificação do desempenho efetivo de MER. Como problema-teste considera-se o trabalho de Shih et al. (1989) sobre o escoamento recirculante de fluido incompressível com propriedades constantes, em domínio bidimensional, cujo modelo matemático é dado pelas equações de conservação de massa e de Navier-Stokes (2D). O modelo numérico adotado envolve aproximações de primeira e segunda ordens com o método de Volumes Finitos. Os resultados obtidos indicam que a metodologia proposta é promissora inclusive nos casos em que MER é considerada ineficiente na literatura.*

Palavras-chave: verificação numérica, Multiextrapolação de Richardson, CFD, problema da cavidade, equações de Navier-Stokes.

1 Introdução

Atualmente a computação científica desempenha um papel crescente na predição do comportamento de sistemas naturais e artificiais. Muitas vezes, ela é baseada em modelos matemáticos representados por equações diferenciais, como é o caso de CFD. Entretanto, a credibilidade que vem sendo atribuída à CFD é justificada pelo emprego de rigorosos processos de verificação numérica [4].

A verificação numérica tem como objeto de estudo o erro numérico e suas fontes, dentre as quais *Eh* é a mais significativa [12]. As alternativas para reduzir *Eh* são: refinamento de malha, cuja desvantagem é o aumento de memória e tempo computacionais; emprego de métodos de alta ordem, cuja desvantagem é o aumento da complexidade do modelo numérico; e por último, mas não menos importante, a utilização de técnicas de extrapolação das quais a extrapolação de Richardson (ER) é bastante conhecida. Ao se considerar a aplicação da ER de forma recursiva, é possível potencializar a sua eficácia e, denomina-se Multiextrapolação de Richardson (MER) ou em inglês *Repeated Richardson Extrapolation* (RRE) [7].

Contudo, constam na literatura ([2], [6] e [10]) relatos sobre dificuldades inerentes ao emprego de MER em algumas variáveis de interesse. Nesse sentido, o texto [8] traz contribuições significativas. Outro desafio a ser considerado diz respeito ao emprego de MER em situações realísticas, ou seja, em modelos matemáticos cujas soluções analíticas são desconhecidas. Nessa perspectiva, o emprego de estimadores para o erro numérico é recomendado. Com essa finalidade, em [9] é realizado um estudo envolvendo a resolução numérica das equações de Poisson, Advecção-difusão e Burgers (2D), no qual são indicadas alternativas.

O presente trabalho consiste em uma extensão a essas propostas ([8] e [9]), ou seja, no emprego de metodologia para redução e estimativa de *Eh* inerente ao cálculo de diversas variáveis de interesse, incluindo casos em que MER era considerada ineficiente. Nesse encalço, considera-se o texto [14] (problema da cavidade quadrada com tampa móvel), cuja utilização é frequente na obtenção de resultados numéricos de referência (*benchmarks*). Como problema-teste adota-se, então, o emprego do método de Volumes Finitos na resolução das equações de conservação de massa e de Navier-Stokes (2D), de acordo com a descrição apresentada na sequência.

2 Problema-teste

Modelo matemático

O modelo matemático adotado envolve as leis de conservação de massa e quantidade de movimento linear (equações de Navier-Stokes) no contexto do problema clássico do escoamento recirculante em uma cavidade quadrada com tampa móvel. As simplificações consideradas são: estado permanente, escoamento laminar bidimensional nas direções *x* e *y*, fluido incompressível, ρ (densidade) e μ (viscosidade) constantes, e sendo desconsiderados outros efeitos. Assim,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0\,, \tag{1}$$

$$\rho\frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \rho\frac{\partial(uv)}{\partial y} = \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) - \frac{\partial p}{\partial x}\,, \tag{2}$$

$$\rho\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \rho\frac{\partial(v)^2}{\partial y} = \mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S\,,\ (x,y)\in[0,1], \tag{3}$$

em que *p* representa a pressão e *S* o termo fonte dado em [14] no problema com solução analítica fabricada, com condições de contorno do tipo Dirichlet. As variáveis de interesse para esse problema envolvem as variáveis primitivas *u* e *v*, bem como a integral dessas. Mais especificamente, considera-se: $uc = u(1/2,1/2)$; $\psi\min =$ valor mínimo da função de corrente para $(x,y)\in[0,1]$ e sua ordenada *y*; $u\min =$ valor mínimo do perfil de *u* em $x = 1/2$ e sua respectiva coordenada *y*; $v\max =$ valor máximo do perfil de *v* em $y = 1/2$ e sua respectiva coordenada *x*.

Modelo numérico

A resolução numérica do modelo matemático descrito pelas Eqs. (1) a (3) é obtida com os seguintes parâmetros: (1) método de Volumes Finitos [3]; (2) aproximação por diferença central (CDS) [3] para os termos difusivos e de pressão; (3) aproximação CDS com correção adiada [3] sobre a aproximação com diferença atrasada (UDS) para os termos advectivos; (4) a partir disso, as Eqs. (1) a (3) são resolvidas com os métodos MSI (*Modified Strongly Implicit*) [13] e SIMPLEC (*Semi IMPlicit Linked Equations Consistent*) [15] para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade; (5) malha uniforme; (6) condições de contorno implementadas com a técnica de volumes fictícios [3]; (7) as Eqs. (1) a (3) são escritas em regime transiente, visando o uso do tempo somente como um parâmetro de relaxação no processo de solução iterativa do modelo matemático discretizado. Esse modelo numérico não requer o emprego de condições de contorno para a pressão [6] e as expressões para os nós internos são estendidas para os contornos.

3 Metodologia

O erro numérico (*E*) pode ser definido como a diferença entre a solução analítica (Φ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica (ϕ). Entretanto ao se considerar o emprego de um método de discretização em um domínio de cálculo Ω, *Eh* pode ser considerado a principal fonte de *E* [11], e com essa perspectiva segue a sua representação [7]

$$E = \Phi - \phi \cong Eh = k_0 h^{p0} + k_1 h^{p1} + k_2 h^{p2} + k_3 h^{p3} + \dots, \tag{4}$$

em que os coeficientes k_j, j = 0, 1, 2, 3, ... são números reais obtidos em função da variável dependente (do problema) e de suas derivadas, mas independem de h (espaçamento entre os pontos nodais da malha Ω^h).

Considerando-se a obtenção de solução numérica para determinada variável de interesse (ϕ), em G malhas distintas $\Omega^{h_1}, \Omega^{h_2}, \dots, \Omega^{h_g}, \dots, \Omega^{h_G}$, geradas com razão de refino $r = h_{g-1} / h_g \quad (g = 2,\dots,G)$, o emprego de MER com m níveis de extrapolação é dado por [8]:

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}; \; g = 2,\dots, G; \; m = 1,\dots, g-1. \tag{5}$$

No presente estudo são considerados diferentes tipos de ϕ, de acordo com a sua localização em malhas distintas, conforme detalhado em [8]. Com esse enfoque, e seguindo a definição apresentada na Eq. (4) considera-se

$$Em = \Phi - \phi_{g,m}, \tag{6}$$

ou seja, *Em* representa o *E* resultante da metodologia investigada neste trabalho.

Com relação às estimativas para *Eh* e *Em*, são adotados, respectivamente, os estimadores multicoeficiente (U_{mc}) e psi corrigido $(U_{\psi*})$ [9]. A concepção de U_{mc} admite que a estimativa para *Eh* é composta por $m = g-1$ termos, com base na Eq. (4). Propõe, então: para $g = 2$ $Eh(\phi_2) \approx \phi_{2,1} - \phi_2 = k_0 h_2{}^{p0}$ (estimativa monocoeficiente); para $g = 3$ $Eh(\phi_3) \approx \phi_{3,2} - \phi_3$ $= k_0 h_3{}^{p0} + k_1 h_3{}^{p1}$ (estimativa bicoeficiente); e assim por diante,

$$U_{mc}(\phi_g) = \phi_{g,m} - \phi_g; \; g = 2,\dots,G; m = g-1. \tag{7}$$

Considerando-se a série de Richardson (R_∞) [5], em que $\psi \in \Re$ corresponde à razão de convergência, em [9] propõe-se

$$U_{\psi*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi* - 1}, g = 2,\dots,G; \tag{8}$$

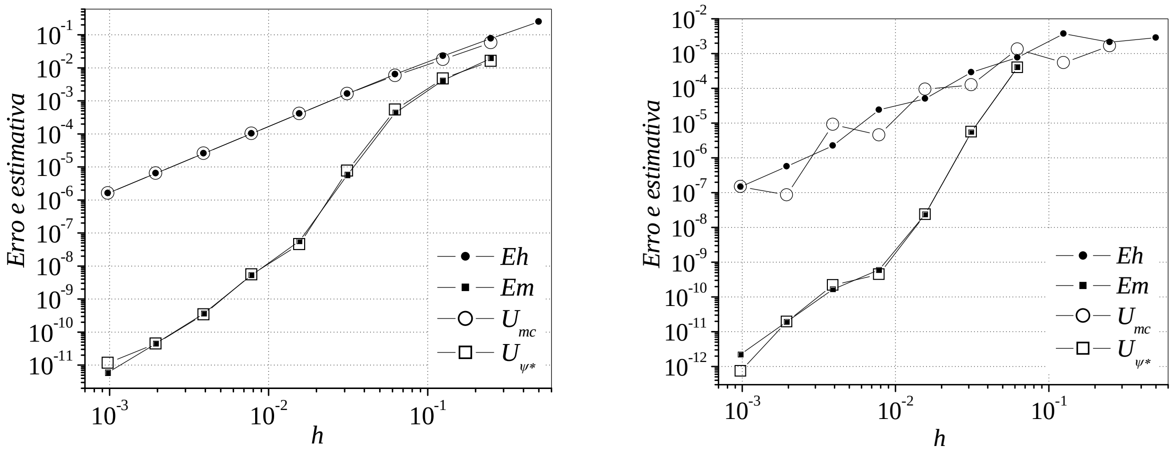
sendo que o seu cálculo envolve a determinação do parâmetro $\psi*$ (Eq. (9)) que,

$$\psi* = \begin{cases} \dfrac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}}, \; g = 2,3,\dots G-1; \\ \\ \dfrac{(\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2})^2}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, \; g = G. \end{cases} \tag{9}$$

por sua vez, indica se MER é eficaz na redução de *E*, isto é, deve satisfazer a condição $|\psi*| > 1$.

4 Resultados e Conclusão

Analisou-se a metodologia proposta sobre diversas variáveis, conforme descrito na seção (2). As Figuras 1 (a) e 1 (b) representam, respectivamente, os resultados obtidos, em variável que possui localização fixa e nodal (*uc*) em todas as malhas adotadas, e variável que possui alteração de coordenada em malhas distintas ($\psi \min$) (ponto extremo). No segundo caso, para determinação de $\phi_{g,m}$ (com MER) considera-se, também, o emprego de interpolação polinomial (2D) de sexto grau e do método do Gradiente Conjugado com a busca linear de Armijo [1].



(a) ϕ com localização nodal (fixa), *uc* (b) ϕ com localização não nodal (móvel), $\psi \min$

Figura 1: Eh (sem MER), Em (com MER) e suas respectivas estimativas.

Observa-se na Figura 1 (a) que: *Em* possui magnitude significativamente menor do que *Eh*; os estimadores U_{mc} e $U_{\psi*}$ mostraram-se acurados, uma vez que apresentam correlação direta com os resultados obtidos para *Eh* e *Em*, respectivamente.

Na Figura 1 (b), nota-se primeiramente que *Eh* não possui um comportamento assintótico (desejável). Tal comportamento está relacionado com a mudança de coordenada de ϕ em malhas distintas, ou seja, com o processo de refinamento de malha a obtenção de $\phi = \psi \min$ (valor extremo) acarreta em localização distinta. Com isso, U_{mc} torna-se inacurado porém sua ordem de magnitude é compatível com a de *Eh*. Essa situação é mencionada na literatura como um caso de anomalia em que MER não é capaz de reduzir *Eh*. No entanto, ao se empregar interpolação polinomial sobre os dados nodais obtidos e a partir da função polinomial resultante determinar o seu ponto extremo ($\phi = \psi \min$), o comportamento assintótico de *Eh* é alcançado. Dessa forma, MER pode ser empregada e resulta em um comportamento semelhante ao descrito anteriormente. Além disso, $U_{\psi*}$ retrata com uma acurácia expressiva o comportamento do *Em* atingido.

Para as demais variáveis de interesse é possível observar na Tabela 1 os resultados obtidos para *Eh* e *Em*, assim como para U_{mc} e $U_{\psi*}$, na malha com espaçamento h = 1,9531 × 10^{-3} entre os pontos nodais.

Tais resultados ilustram a eficácia da metodologia estudada, no presente trabalho, no sentido em que: (1) o modelo matemático analisado é representativo no âmbito de CFD por contemplar aspectos de não linearidade e de acoplamento de variáveis; (2) alcançou-se uma redução expressiva do erro numérico, com o emprego de MER, mesmo em situações desencorajadas na literatura; (3) as propostas de estimativas para o erro numérico apresentaram acurácia significativa e ilustram alternativas a serem utilizadas em situações realísticas, ou seja, em modelos matemáticos cuja solução analítica não seja conhecida.

Variável	*Eh*	*Em*	U_{mc}	$U_{\psi*}$

uc	-6,457257E-06	4,491869E-11	-6,457302E-06	4,441644E-11
$\psi\min$	-5,682980E-07	-1,940962E-11	-8,478479E-08	-1,944004E-11
$y(\psi\min)$	7,553119E-05	3,425862E-12	1,280862E-04	3,539677E-12
$u\min$	-3,821675E-06	1,447587E-11	-4,428316E-07	1,433716E-11
$y(u\min)$	-9,313970E-04	-1,124376E-10	5,018021E-04	-1,115581E-10
$v\max$	4,925976E-06	1,159134E-10	6,401623E-06	1,158047E-10
$x(v\max)$	-5,891971E-04	-5,580941E-11	-3,777327E-04	1,158047E-10

Tabela 1: Resultados para o erro numérico obtido em malha 512×512, com e sem MER, bem como suas respectivas estimativas.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), AEB (Agência Espacial Brasileira) através do Programa Uniespaço, Fundação Araucária (Paraná) e CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior). O primeiro autor agradece à Universidade Estadual do Centro-Oeste (UNICENTRO). O segundo autor é bolsista do CNPq.

Referências

[1] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali, C. M. Shetty, “Nonlinear programming: theory and algorithms”, Wiley & Sons, New York, 2006.

[2] C. Burg, T. Erwin, Application of Richardson extrapolation to the numerical solution of partial differencial equations, Num. Meth. Part. Diff. Eq., vol. 25, pp. 810-832, (2009).

[3] J. H. Ferziger, M. Peric, “Computational methods for fluid dynamics”, Springer, New York, 2002.

[4] M. Karimi, G. Akdogan, K. H. Dellimore, S. M. Bradshaw, Quantification of Numerical Uncertainty in Computational Fluid Dynamics Modelling of Hydrocyclones. Comp. and Chem. Eng., vol. 42, pp. 3671-3694, (2012).

[5] C. H. Marchi, A. F. C. Silva, Multidimensional discretization error estimation for convergent apparent order. J. Braz. Soc. Mech. Sc. Eng., vol. 27, pp. 432-439, (2005).

[6] C. H. Marchi, R. Suero, L. K. Araki, The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024 x 1024 grid, J. Braz. Soc. of Mech. Sc. and Eng., vol. 31, pp. 186-198, (2009).

[7] C. H. Marchi, L. K. Araki, L. A. Novak, C. D. Santiago, A. P. S. Vargas, Highly accurate numerical solutions with repeated Richardson extrapolation for 2D Laplace equation, Appl. Math. Mod., vol. 37, pp. 7386-7397, (2013).

[8] M. A. Martins, C. H. Marchi, L. A. Novak, M. A. V. Pinto, L. K. Araki, S. F. T. Gonçalves, Multiextrapolação de Richardson com interpolação para reduzir o erro de discretização em CFD, I CMAC-SE, Bauru, Brasil, 2013.

[9] M. A. Martins, C. H. Marchi, M, A. V. Pinto, L. K. Araki, Estimativa para o erro de discretização com o emprego de Multiextrapolação de Richardson em CFD, I CMAC-Sul, Curitiba, Brasil, 2014.

[10] X. Nicolas, M. Medale, S. Glockner, S. Gounand, Benchmark solution for a three-dimensional mixed-convection flow, part 1: reference solutions, Num. Heat Transf., Part B, vol. 60, pp. 325-345, (2011).

[11] J. C. Roy, Review of code and solution verification procedures for computational simulation, J. Comp. Phys, vol. 205, pp. 131-156, (2005).

[12] J. C. Roy, W. L. Oberkampf, A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing, Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng., vol. 200, pp. 2131-2144, (2011).

[13] G. E. Schneider, M. Zedan, A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems, Nume. Heat Transf., vol. 4, pp. 1-19, (1981).

[14] T. M. Shih, C. H. Tan, B. C. Hwang, Effects of grid staggering on numerical scheme, Int. J. Num. Meth. Fld., vol. 9, pp. 193-212, (1989).
[15] J. P. Van Doormaal, G. D. Raithby, Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow, Num. Heat Transf., vol. 7, pp. 147-163 (1984).