

Cosmo Damião Santiago

RELATÓRIO DE ATIVIDADES DE ESTÁGIO PÓS-DOCTORAL

**Método multigrid otimizado para resolver as
equações de Navier-Stokes 2D com volumes
finitos**

Curitiba/PR

Fev/2017

Cosmo Damião Santiago

RELATÓRIO DE ATIVIDADES DE ESTÁGIO PÓS-DOUTORAL

Método multigrid otimizado para resolver as equações de Navier-Stokes 2D com volumes finitos

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica na Área de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, Setor de Tecnologia.

Universidade Federal do Paraná – UFPR
Supervisor: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

Curitiba/PR

Fev/2017

Resumo

O presente relatório de atividades de estágio pós-doutoral apresenta os resultados alcançados em consonância com os objetivos elencados no projeto de pesquisa submetido como condição de aceitação para a realização de pós-doutorado junto ao PG-Mec. O método Full Multigrid geométrico com o esquema FAS é implementado para resolver a equação de Poisson e as equações de Navier-Stokes nas formulações função de corrente e vorticidade e variáveis primitivas. O método de volumes finitos é adotado para discretizar as equações diferenciais em malhas co-localizadas. Os solvers Gauss-Seidel, SOR, MSI e SIP são usados para resolver os sistemas de equações. Alguns parâmetros do método multigrid são investigados. As propriedades teóricas do método multigrid para as equações de Navier-Stokes em variáveis primitivas foram confirmadas nos resultados. Soluções numéricas em malhas super-refinadas com $Re \leq 5000$ foram obtidas, além de excelentes valores de speed-up para altos números de Reynolds.

Palavras-chaves: Volumes Finitos. Multigrid. MSI. SIP. Speed-up.

Lista de ilustrações

Figura 1	– 1a Perfis da solução analítica e numérica da equação de Poisson no centro do domínio ao longo das linhas horizontal e vertical; 1b Isolinhas da solução numérica e; 1c Isolinhas da solução analítica, na malha com 512^2 volumes.	18
Figura 2	– Linhas de contornos da função de corrente. Formulação $\mathbf{v} - p$ 2a, 2b, 2c e 2d; formulação $\psi - \omega$ 2e e 2f.	20
Figura 3	– Perfis de u e v no centro da cavidade ao longo das linhas horizontal e vertical, para vários Reynolds com a formulação $\mathbf{v} - p$ e comparação com Santiago (2010).	21
Figura 4	– Perfis de u e v no centro da cavidade ao longo das linhas horizontal e vertical, para vários Reynolds, com a formulação $\psi - \omega$ e comparação com Santiago (2010).	22
Figura 5	– Análise do número de níveis L . Equação de Poisson 5a; formulação $\mathbf{v} - p$ 5b e 5c.	23
Figura 6	– Tempo de CPU (s) versus tamanho do problema N para a equação de Poisson 6a; formulação $\psi - \omega$ 6b; formulação $\mathbf{v} - p$ - MSI 6c e SIP 6d.	24
Figura 7	– Tempo de CPU (s) versus tamanho do problema N para o método multigrid com o número de Reynolds variando. 7a formulação $\mathbf{v} - p$ e 7b formulação $\psi - \omega$	28

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid com o solver MSI e o fator speed-up (S) para a formulação $\mathbf{v} - p$	25
Tabela 2	–	Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid com o solver SIP e o fator speed-up (S) para a formulação $\mathbf{v} - p$	25
Tabela 3	–	Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid e o fator speed-up (S) para a formulação $\psi - \omega$	26
Tabela 4	–	Comparação do fator speed-up S usando o solver SIP com a literatura (YAN; THIELE; XUE, 2007; FERZIGER; PERIĆ, 2001)	26
Tabela 5	–	Expoente p da Eq. 4.2 para Poisson e formulações $\mathbf{v} - p$ e $\psi - \omega$	27

Lista de abreviaturas e siglas

CS	Esquema de Correção (Correction Scheme)
FAS	Esquema de Aproximação Completa (Full Approximation Scheme)
MVF	Método dos Volumes Finitos
MDF	Método de Diferenças Finitas
MSI	Modified Strongly Implicit
PG-Mec	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
SIP	Strong Implicit Procedure
SOR	Successive over-relaxation
UFPR	Universidade Federal do Paraná
UTFPR	Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Lista de símbolos

B	Termo fonte na Eq. (2.3)
E_m	Erro na iteração m
l_1	Norma média do erro na iteração (m)
L	Número de níveis
$L_{ótimo}$	Número ótimo de níveis de malhas
$L_{máximo}$	Número máximo de níveis de malhas
N	Tamanho do problema
p	Pressão estática (Pa)
Re	Número de Reynolds
S	Fator de aceleração ou fator speed-up
t_{MG}	Tempo de CPU do método multigrid (s)
t_{SG}	Tempo de CPU do método singlegrid (s)
u	Componente da velocidade na direção x (m/s)
v	Componente da velocidade na direção y (m/s)
\mathbf{v}	Vetor velocidade
x e y	Coordenadas espaciais nas direções horizontal e vertical (m)

Símbolos Gregos

ε	Tolerância do método iterativo
$\phi_{m \rightarrow \infty}$	Solução exata do sistema de equações (sem erros de iteração)
ϕ_m	Solução na iteração (m)
ρ	Massa específica do fluido (kg/m^3)
ψ	Função de corrente
ω	Vorticidade

Sumário

1	Introdução	8
1.1	Considerações gerais	8
2	Equações governantes	12
2.1	Equação de Poisson	12
2.2	Equações de Burgers	12
2.3	Equações de Navier-Stokes: formulação em variáveis primitivas: $\mathbf{v} - p$.	13
2.4	Equações de Navier-Stokes: formulação função de Corrente e Vorticidade $\psi - \omega$	13
3	Modelo numérico	15
4	Resultados	17
4.1	Verificação das soluções	17
4.2	Número de níveis - L	19
4.3	Tamanho do problema - N e fator speed-up - S	23
4.4	Esforço computacional	27
5	Conclusão	29
5.1	Considerações finais	31
	Referências	33

1 Introdução

No presente texto apresenta-se de maneira sucinta as principais atividades desenvolvidas no estágio pós-doutoral, durante o período de 03 de agosto de 2015 a 28 de fevereiro de 2017, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-Mec) na Área de Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos da Universidade Federal do Paraná (UFPR).

A pesquisa intitulada “Método multigrid otimizado para resolver as equações de Navier-Stokes 2D com volumes finitos” foi desenvolvida sob a supervisão do Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi, do Departamento de Engenharia Mecânica da UFPR e docente permanente do PG-Mec.

O projeto de pesquisa protocolado e aprovado no colegiado do PG-Mec, em 2015, propôs como objetivo principal implementar o método multigrid geométrico com ciclo V e FMG/V (Full Approximation Scheme) (TROTTEBERG; OOSTERLEE; SCHULLER, 2001), ambos com o esquema FAS em modelos matemáticos 2D não lineares com equações acopladas, usando aproximações numéricas do tipo UDS-1 (Upwind Differencing Scheme) e CDS-2 (Central Differencing Scheme) nas equações de Navier-Stokes (BOTELLA; PEYRET, 1998) e Método dos Volumes Finitos (MVF) (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007) para discretizar as equações diferenciais. Uma vez implementado, propôs-se também analisar alguns parâmetros para obter o melhor desempenho possível do multigrid, que teoricamente tem custo computacional proporcional ao número de pontos (ou volumes) da malha computacional. Basicamente, os parâmetros que se propôs otimizar são o número de iterações internas dos solvers, números de níveis de malha que resultam no menor tempo de CPU, análises de solvers e esforço computacional com o aumento do número de volumes da malha. Para alcançar o objetivo principal, foi proposto implementar o método multigrid para resolver outros modelos matemáticos, que são menos complexos e com mais possibilidades de obter informações na literatura. Os modelos propostos foram: (a) equação de Poisson com solução analítica conhecida; (b) equações de Burgers com solução analítica conhecida; (c) equações de Navier-Stokes na formulação função de corrente e vorticidade, $\psi - \omega$, e; (d) equações de Navier-Stokes na formulação em variáveis primitivas, $\mathbf{v} - p$.

1.1 Considerações gerais

O método multigrid para a equação de Poisson foi implementado sem dificuldades e os resultados são coerentes com a literatura. Um código para as equações de Burgers foi gentilmente cedido pela professora Simone de Fátima Tomazzoni Gonçalves, do Departa-

mento de Engenharia Mecânica (DEMEC/UFPR), para ser usado como ponto de partida na implementação dos modelos relacionados às equações de Navier-Stokes e também para comparação.

Inicialmente, para uma geometria simples, propôs-se aplicar a metodologia dos volumes fictícios nos contornos (MALISKA, 2004). Entretanto, várias dificuldades surgiram durante as implementações na aplicação desta metodologia nas equações de Navier-Stokes com volumes finitos e multigrid.

A formulação $\psi - \omega$ possui uma variável, ω , cujas condições de contorno são dinâmicas e devem convergir junto com a solução numérica do problema. A especificação destas condições de contorno é extremamente importante, pois afeta diretamente a estabilidade e a precisão da solução no singlegrid e mais fortemente no multigrid. No entanto, nem a vorticidade nem suas derivadas nos contornos são normalmente conhecidas com antecedência. Portanto, um conjunto de condições de contorno deve ser construído durante o processo iterativo levando em consideração a hierarquia de malhas do multigrid, associado ao procedimento iterativo.

Usando condições de contornos com volumes fictícios, diversas tentativas foram feitas com o multigrid para obter resultados coerentes em termos de tempo de CPU e número de iterações externas, quando comparado com o método singlegrid, especificamente para a formulação $\psi - \omega$. Várias versões de códigos foram escritos alternando entre metodologias de cálculos, principalmente no contorno da vorticidade. Tentou-se prolongar as informações da correção da solução nos contornos, restringir os resíduos dos contornos para atualizar o termo fonte, e também aplicar os contornos somente na malha mais fina, mas os resultados foram desanimadores. Em alguns casos o solver Gauss-Seidel/SOR divergiu e em outros os resultados foram semelhantes entre as tentativas, independente do número de Reynolds testados ou dos parâmetros do solver. Em todos os casos os algoritmos FMG com ciclo V, esquemas CS (Correction Scheme) e FAS (Full Approximation Scheme) foram usados. Milhares de simulações numéricas foram realizadas com variação de alguns parâmetros e diversos números de Reynolds para tentar obter resultados minimamente coerentes. Entretanto, muitas dúvidas continuam em relação à aplicação destas condições de contorno para este problema. Dificuldades relacionadas a esta formulação também são relatadas na literatura, como pode ser visto em Ferziger e Perić (2001). Durante a pesquisa bibliográfica também não foi encontrado nenhum estudo do método multigrid para esta formulação com volumes finitos ou relatos de possíveis soluções para este caso específico.

Apesar da aparente simplicidade do modelo matemático, e de fato não é tão complexo a resolução com o método singlegrid, os resultados para esta formulação deixam a desejar em termos do desempenho do método multigrid. No presente relatório apresenta-se alguns resultados para $Re = 100, 400$ e 1000 , em que os contornos foram atualizados somente na malha mais fina.

No caso das equações de Navier-Stokes na formulação $\mathbf{v} - p$, o primeiro passo foi uma tentativa de implementar o método multigrid a partir do código singlegrid `Stokes_1p5` disponibilizado pelo Prof. Marchi. Neste código as equações governantes em variáveis primitivas foram discretizadas com o método dos volumes finitos em malhas co-localizadas e os contornos aplicados com volumes fictícios. Para o tratamento do acoplamento entre as velocidades e pressão foi usado o algoritmo SIMPLEC (MALISKA, 2004) e, o passo de tempo usado para avanço do processo iterativo.

Assim, foi escrito um código multigrid com ciclo V seguindo o algoritmo padrão do esquema FAS, que pode ser encontrado com detalhes em Briggs, Henson e McCormick (2000). Diversas tentativas alternando entre chamadas de subrotinas e formas de cálculos, incluindo também formas de transferências de informações nas faces dos volumes, contornos, transferências de fluxos de massa, resíduos das velocidades e correção da pressão, correção das velocidades e pressão, atualização das variáveis nas malhas grossas para o avanço no tempo, cálculo das velocidades nas faces também nas malhas grossas, ... etc. O esquema CS também foi implementado. Além disso, códigos com multigrid somente em uma das variáveis também foi experimentado (multigrid só em u , só em v , ou só em u e v). Para os códigos resultantes milhares de simulações foram realizadas com os solvers MSI e Gauss-Seidel, variando os parâmetros do solver, o passo de tempo e número de Reynolds. Infelizmente este código apresentou efeito multigrid irrelevante.

Em outras tentativas considerou-se o termo fonte da pressão nulo nas malhas grossas; também tentou-se a restrição do termo fonte da correção da pressão ($b_{p'}$), ou seja, o balanço de massa da correção. Nestes casos o resíduo da pressão não foi transferido entre as malhas. Na prolongação considerou-se como chute inicial a solução da pressão do nível anterior com apenas uma iteração no ciclo da massa. Para os códigos resultantes destas duas tentativas, alguns resultados mostraram-se interessantes para esta formulação ($\mathbf{v} - p$). Centenas de simulações foram realizadas usando os solvers MSI e Gauss-Seidel variando os parâmetros e tamanho de malhas. Os valores de speed-up obtidos, em torno de 5 e 6 dependendo do número de Reynolds e da malha, também não foram atrativos porque são muito inferiores aos conhecidos da literatura para este problema.

A partir destes resultados, desanimadores, propôs-se implementar o solver SIP e alterar o tipo de condições de contorno e o método de acoplamento pressão-velocidade. A ideia surgiu para tentar usar um modelo numérico o mais próximo possível do modelo usado por Yan, Thiele e Xue (2007), que usaram condições de contorno baseado no balanço de massa e o algoritmo SIMPLE para o acoplamento (PATANKAR, 1980).

A implementação do solver SIP foi feita exatamente como descrito em Ferziger e Perić (2001, p. 101). Foi muito trabalhoso para obter os primeiros resultados. Neste método surge um parâmetro α que pode influenciar na convergência e estabilidade. Yan, Thiele e Xue (2007) usaram $\alpha = 0,7$ para as velocidades e $\alpha = 0,3$ para a pressão. O passo

de tempo também é muito sensível, em que uma pequena alteração (se é que consegue encontrar) pode causar divergência no solver. Não foi possível detectar uma tendência ou um comportamento para o passo de tempo com a variação do tamanho da malha e Reynolds. Em relação às iterações internas, os menores tempos de CPU foram obtidos em torno de 2 ou 3 nos testes realizados. Após centenas de simulações, infelizmente os resultados com o solver SIP também não apresentaram vantagens em relação ao MSI e, além disso, foi difícil encontrar o passo de tempo que convirja para altos Reynolds. Um relatório com os resultados das simulações com o SIP e comparações com o MSI foi apresentado em separado em jun/2016.

Diante das dificuldades e insucessos, o foco da próxima tentativa foi especificamente no estudo do método multigrid e metodologia de resolução das equações de Navier-Stokes descrito no livro de Ferziger e Perić (2001). Neste caso, as equações governantes foram discretizadas com o método dos volumes finitos em malhas co-localizadas usando o algoritmo SIMPLE e balanço de massa nos contornos. Após a implementação do algoritmo, que exigiu tempo e dedicação, centenas de simulações foram realizadas com os solvers MSI, SIP e Gauss-Seidel, variando o número de Reynolds, o tamanho do problema e outros parâmetros, em que o objetivo foi verificar a consistência do código computacional. Felizmente obteve-se um código robusto que apresentou soluções com tempo de CPU extraordinariamente baixo no multigrid e fatores speed-up como esperado.

Deve ser ressaltado aqui que as tentativas de obter soluções com o método multigrid com tempo de CPU coerentes, especificamente para as equações de Navier-Stokes, envolveram aproximadamente 70 versões de códigos computacionais e milhares de simulações numéricas. Todos estes estudos, dedicação aos códigos e experimentos, demandaram um tempo demasiadamente alto.

O sucesso na implementação do algoritmo multigrid para a formulação $\mathbf{v} - p$ no problema da cavidade quadrada, mesmo não sendo como proposto inicialmente, que incluía condições de contorno com volumes fictícios e algoritmo SIMPLEC, traz um alento para o grupo de pesquisas em CFD, porque prover resultados ainda não obtidos por integrantes do grupo para este problema.

O restante deste relatório está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 são apresentados de forma resumida os modelos matemáticos e algumas informações sobre as condições de contornos. No capítulo 3 são apresentadas algumas informações sobre o modelo numérico, tais como, método multigrid usado, domínio de cálculo e método de discretização das equações. No capítulo 4 são apresentados os principais resultados desta pesquisa, que inclui a verificação das soluções numéricas, a análise de alguns parâmetros e fator speed-up.

2 Equações governantes

Os modelos matemáticos são escritos no sistema de coordenadas cartesianas em regime estacionário. As variáveis x e y são as coordenadas espaciais em qualquer modelo apresentado a seguir.

2.1 Equação de Poisson

A equação de Poisson é um modelo linear e tem inúmeras aplicações em engenharia mecânica e física teórica. No presente trabalho este modelo é usado apenas para obter uma referência para o desempenho do método multigrid. A equação de Poisson 2D pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad (2.1)$$

onde u é a propriedade física e $f(x, y)$ é um termo fonte. Este modelo é usado neste trabalho com a solução analítica dada por $u = e^{xy}$. As condições de contorno são prescritas e aplicadas a partir da solução analítica.

2.2 Equações de Burgers

As equações de Burgers têm solução analítica dada por Shih, Tan e Hwang (1989), dessa forma, eliminam-se as dificuldades relacionadas ao cálculo da pressão. O modelo considerado é dado em regime estacionário, na forma não conservativa e possui propriedades constantes com o número de Reynolds unitário ($Re = 1$). As equações são dadas por

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - B, \quad (2.3)$$

onde p é a pressão, u e v são as componentes da velocidade nas direções x e y , respectivamente, e B é um termo fonte que surge devido à utilização do método de soluções fabricadas. As condições de contorno são prescritas e aplicadas a partir da solução analítica.

As equações de Burgers são apresentadas no presente relatório por mera formalidade, uma vez que o código multigrid desenvolvido para este modelo foi cedido por outra pesquisadora. Apenas alguns comentários e comparações serão citados ao longo deste texto.

2.3 Equações de Navier-Stokes: formulação em variáveis primitivas:

$\mathbf{v} - p$

As equações de Navier-Stokes escritas em termos das variáveis primitivas, velocidade-pressão $\mathbf{v} - p$, em regime estacionário, são representadas na forma não conservativa e adimensionalizadas como (FOX; MCDONALD, 1995),

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.4)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (2.5)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \quad (2.6)$$

onde u e v são as velocidade nas direções x e y , respectivamente, p é a pressão e Re é o número de Reynolds. Para as velocidades aplicam-se as condições de contornos clássicas, isto é, no contorno deslizante $u = 1$ e $v = 0$, e nos demais $u = v = 0$. No caso da pressão pode ser aplicada a condição de contorno de Neumann.

2.4 Equações de Navier-Stokes: formulação função de Corrente e Vorticidade $\psi - \omega$

A formulação $\psi - \omega$ é obtida a partir da aplicação de algumas hipóteses e por manipulações algébricas nas Eqs. (2.4)-(2.6). As equações resultantes são acopladas através do aparecimento das componentes da velocidade na equação da vorticidade ω e da vorticidade na equação da função de corrente ψ , que atua como termo fonte na equação de Poisson para ψ .

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} = \frac{1}{Re} \left(u \frac{\partial \omega}{\partial x} + v \frac{\partial \omega}{\partial y} \right). \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega, \quad (2.8)$$

onde as velocidades são definidas como

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad (2.9)$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (2.10)$$

Nota-se nas Eqs. (2.7) e (2.8) que a pressão não aparece como variável dependente. As condições de contorno para a vorticidade são aplicadas com aproximações numéricas das Eqs. (2.9) e (2.10) (fórmula de Jensen) como mostrado em Santiago (2010) e $\psi = 0$ nos contornos. Para as velocidades aplicam-se as mesmas condições de contornos da formulação $\mathbf{v} - p$, Eqs. (2.4)-(2.6).

Neste modelo, aparentemente simples, é possível obter a solução numérica das equações de Navier-Stokes resolvendo apenas duas equações diferenciais parciais do tipo Poisson. Se for necessário pode-se obter a solução numérica para a pressão no pós-processamento resolvendo uma equação de Poisson para a pressão, que tem no lado direito as velocidades ou a função de corrente. A redução do número de equações e variáveis dependentes é o principal atrativo desta formulação no caso bidimensional (FERZIGER; PERIĆ, 2001).

3 Modelo numérico

Os modelos matemáticos são considerados em um domínio bidimensional unitário. O domínio de cálculo é subdividido em um número finito de pequenos volumes de controle uniformes nas duas direções com arranjo co-localizado de variáveis. Ao contrário do método de diferenças finitas, define-se volumes de controle nos contornos, e não nós computacionais. No método multigrid considera-se desde a malha mais grossa (quatro volumes) até a mais fina possível no limite dos computadores disponíveis no laboratório de experimentação numérica (LENA).

As equações governantes são discretizadas com o método dos volumes finitos (MVF), acurácia de segunda ordem nos termos difusivos e correção adiada nos termos advectivos. Na formulação $\mathbf{v} - p$ adota-se os algoritmos SIMPLEC e SIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade. Os solvers Gauss-Seidel, SOR, MSI e SIP são usados para resolver os sistemas de equações algébricas.

Para maior confiabilidade na acurácia da solução numérica, o critério de parada do método iterativo baseou-se na solução exata¹, do problema. A metodologia para obter a solução exata de um sistema de equações requer que o solver seja executado com um número de iterações suficiente para que a solução numérica esteja no limite da precisão da máquina. Em todos os casos foram obtidas soluções exatas, exceto no caso da equação de Poisson que considerou-se a solução analítica. O critério de parada é dado pela norma euclidiana média, com tolerância $\varepsilon < 10^{-6}$, isto é,

$$\bar{l}_1[E_m(\phi)]_m = \sum_{k=1}^{\pi} \left[\frac{\sum_{i=1}^N |(\phi_{m \rightarrow \infty} - \phi_m)_i|}{N} \right]_k < \varepsilon, \quad (3.1)$$

onde π é o número de equações do modelo, $\phi_{m \rightarrow \infty}$ é a solução exata do sistema de equações (sem erros de iteração) para cada variável, ϕ_m é a solução na iteração m , N é o número total de volumes da malha, E_m é o erro na iteração m , \bar{l}_1 denota a norma l_1 média do erro na iteração m e i denota o índice do volume na malha.

O critério de parada dado pela metodologia da Eq. (3.1) é o mais adequado quando o propósito é comparar métodos que envolvem modelos matemáticos complexos. Assim, garante-se a mesma acurácia na solução numérica independente da malha e número de Reynolds.

Para o escoamento incompressível adotou-se o problema clássico da cavidade quadrada com a tampa em movimento (SHANKAR; DESHPANDE, 2000). Este é um dos mais conhecidos problemas teste na literatura da dinâmica de fluidos computacional (CFD),

¹ Aqui, considera-se que a solução é exata quando não possui erro de iteração.

devido aos seus desafios peculiares sob a forma de singularidades, apesar de sua geometria simples. Além disso, a disponibilidade de soluções analíticas e resultados experimentais para o escoamento na cavidade permite aos pesquisadores testar seus métodos computacionais.

Nos métodos iterativos geralmente usa-se estimativa inicial nula, que pode estar longe da solução convergida. Portanto, faz sentido resolver o problema primeiro na malha mais grossa até a convergência, que naturalmente é mais barato, e usar essa solução convergida como uma estimativa inicial para a próxima malha mais fina. Quando atinge a malha mais fina, a estimativa inicial está tão melhorada que diminui o número de iterações externas nesta malha e conseqüentemente o custo computacional. Esta metodologia é chamada de método Full Multigrid (FMG). De acordo com Ferziger e Perić (2001) o custo de obtenção da estimativa inicial para a malha mais fina é geralmente compensado pelas economias em iterações de malhas intermediárias. Assim, o método multigrid geométrico com ciclo V, na versão FMG, com o Esquema de aproximação Completa (FAS) é adotado nesta pesquisa. A descrição detalhada do método FMG/V usado aqui, bem como a discretização das equações de Navier-Stokes com o método dos volumes finitos e algoritmo SIMPLE, pode ser encontrada com detalhes no livro de Ferziger e Perić (2001).

4 Resultados

A análise de alguns parâmetros do método multigrid é apresentada nesta seção. Milhares de simulações foram realizadas, embora os resultados apresentados sejam apenas aqueles de maior relevância. O objetivo aqui é, principalmente, investigar a influência sobre o tempo de CPU causado pelo número de níveis (L), número de volumes (N) da malha computacional, efeito do número de Reynolds e verificar a eficiência do multigrid em relação ao singlegrid (fator speed-up, S).

Todos os códigos utilizados neste trabalho foram desenvolvidos na linguagem Fortran/2013 incorporado ao Microsoft Visual Studio 2008. Para cada problema, foi escrito um código computacional e compilado na versão release. As simulações foram realizadas em um microcomputador do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA) da UFPR, com processador Core 2 Duo, 2.66 GHz e 8 GB de RAM, usando aritmética de dupla precisão em sistema operacional Windows XP de 64 bits. Sem perigo de interferir nas comparações e análises, algumas simulações também foram realizadas em um computador pessoal com processador Core i7, 2.8 GHz e 8 GB de RAM. As simulações foram realizadas sem a necessidade do uso de memória virtual. O tempo de CPU foi medido usando-se a função `timef()` do Fortran e corresponde ao tempo para gerar malhas, atribuir estimativa inicial, calcular coeficientes e termos fonte, resolver os sistemas de equações e verificar o critério de convergência. O tempo necessário para o armazenamento da solução exata na memória não foi considerado.

4.1 Verificação das soluções

Nesta seção verifica-se a coerência das soluções numéricas com soluções disponíveis na literatura.

A equação de Poisson tem solução analítica, que é usado para comparação gráfica. A Fig. 1 mostra o perfil no centro do domínio e as isolinhas das soluções numéricas e analítica para uma malha com 512^2 volumes. A Fig. 1a foi construída com duplo eixo y , por conveniência, apenas para mostrar os perfis analítico e numérico em um mesmo sistema de coordenadas. O ponto vazado mostra a solução numérica e, a linha contínua a solução analítica. As Figs. 1b e 1c mostram as isolinhas. Analisando o padrão das curvas (perfis e isolinhas), percebe-se nitidamente uma ótima correspondência entre as soluções numérica e analítica.

Para as equações de Navier-Stokes considera-se um domínio quadrado de comprimento unitário, com $0 \leq x, y \leq 1$, onde a tampa (limite superior) em $y = 1$, move-se com

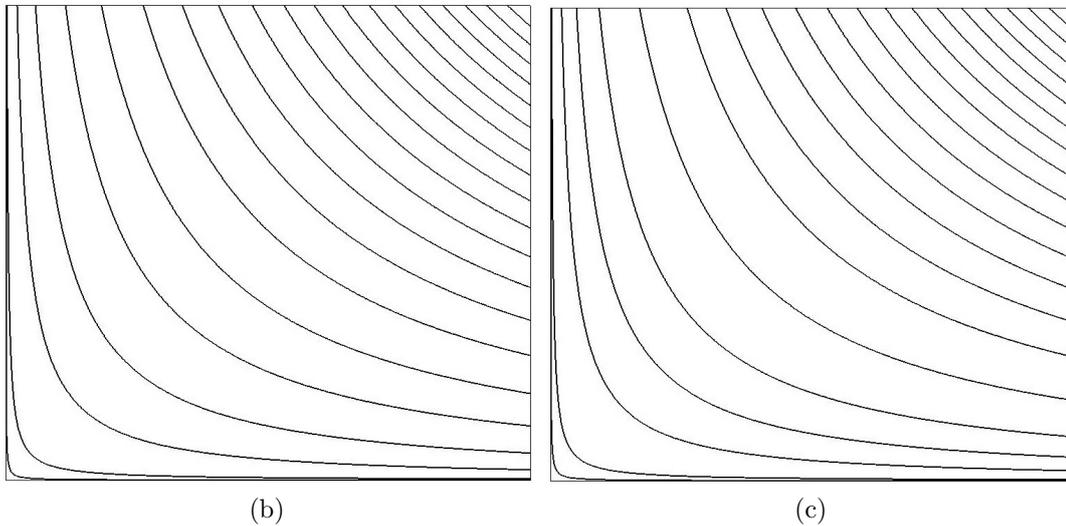
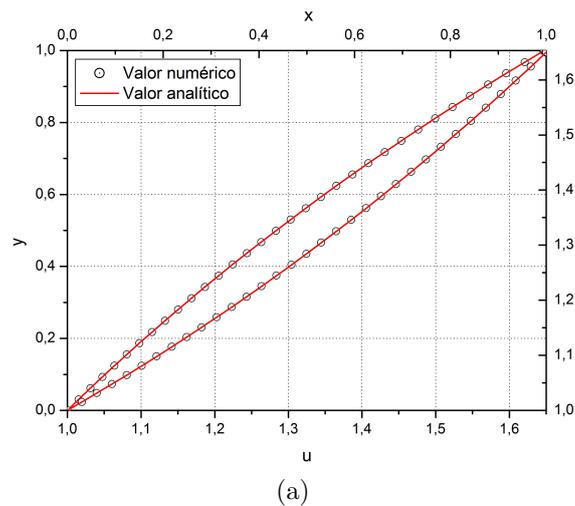


Figura 1 – 1a Perfis da solução analítica e numérica da equação de Poisson no centro do domínio ao longo das linhas horizontal e vertical; 1b Isolinhas da solução numérica e; 1c Isolinhas da solução analítica, na malha com 512^2 volumes.

uma velocidade constante $u = 1$. A massa específica é constante, $\rho = 1\text{kg}/\text{m}^3$. O número de Reynolds varia de acordo com a simulação numérica desejada.

Nas equações de Navier-Stokes, cujas soluções analíticas não são conhecidas, procurou-se confrontar os perfis de velocidade ao longo das linhas que passam pelos centros geométricos da cavidade e também com linhas de contornos da função de corrente.

Todas as soluções numéricas usadas para comparação foram obtidas com o método multigrid. De acordo com Marchi (2001), o objetivo da verificação é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente através de um método numérico. Aqui, a verificação é feita graficamente e mostra a coerência entre as soluções. As figuras usadas para verificar a coerência das soluções gráficas foram obtidas em simulações com $Re = 100, 400, 1000$ e 5000 . Para estes números de Reynolds existe material farto na literatura de CFD que pode ser usado para comparação. A proposta da presente pesquisa é

apresentar resultados sobre a performance do multigrid e fazer comparações com Santiago (2010) e com a literatura.

A Fig. 2 mostra as linhas de contorno da função de corrente para as malhas 128^2 e 512^2 volumes e $Re = 1000$. Para a formulação $\mathbf{v} - p$ mostra-se também com $Re = 5000$.

Vale destacar que, dependendo do número de Reynolds, o padrão do escoamento apresenta uma recirculação primária próximo ao centro da cavidade e entre uma e três recirculações secundárias em três cantos, como pode ser observado nas Figs. 2a e 2b.

Qualitativamente, a qualidade das soluções apresentadas neste relatório exhibe as características conhecidas da cavidade quadrada, incluindo o vórtice primário na parte central e os vórtices secundários nos cantos, comparativamente com os trabalhos de Erturk (2009), Ghia, Ghia e Shin (1982) e Kumar, Kumar e Das (2009). Além disso, as observações feitas por Santiago (2010), que fez comparações com vários autores, em relação à coerência nas linhas de contorno da função de corrente, também são válidas aqui.

Para comparar a qualidade dos perfis de velocidade no interior da cavidade, Figs. 3 e 4, adotou-se duas malhas, 128^2 e 512^2 volumes. As comparações foram realizadas com os resultados de Santiago (2010) que apresentou resultados em malhas de diferenças finitas e fez diversas comparações com os resultados de Marchi, Suero e Araki (2009) e Ghia, Ghia e Shin (1982) e outros autores. Ele mostrou que suas soluções são tão acuradas quanto as deles. Para confrontar com as soluções de referência, todos os valores dos perfis de u e v do presente trabalho foram plotados, o que resulta em uma curva contínua, como pode ser observado nas Figs. 3 e 4.

Como pode ser verificado nas Figs. 3 e 4, as curvas indicam que existe uma excelente concordância com os resultados de Santiago (2010), tanto na componente u quanto em v , e com todos os números de Reynolds testados, tanto na malha 128^2 quanto na malha 512^2 . Próximos aos contornos, que normalmente os métodos numéricos apresentam oscilações numéricas no problema da cavidade, as curvas mostram também uma excelente coerência.

Assim, com as análises feitas nesta seção, mostrou-se que as soluções numéricas obtidas para a equação de Poisson e as equações de Navier-Stokes na cavidade quadrada estão coerentes com soluções numéricas já conhecidas na literatura. Nas seções seguintes analisa-se a performance do método multigrid.

4.2 Número de níveis - L

Para cada malha, as simulações foram realizadas com um número de níveis de malha L tal que $1 \leq L \leq L_{\text{máximo}}$, em que $L = 1$ tem-se o singlegrid, e $L = L_{\text{máximo}}$ tem-se o método multigrid percorrendo todas as malhas possíveis do ciclo V. O parâmetro $L_{\text{máximo}}$ representa o número máximo possível de níveis de malhas que se pode usar para

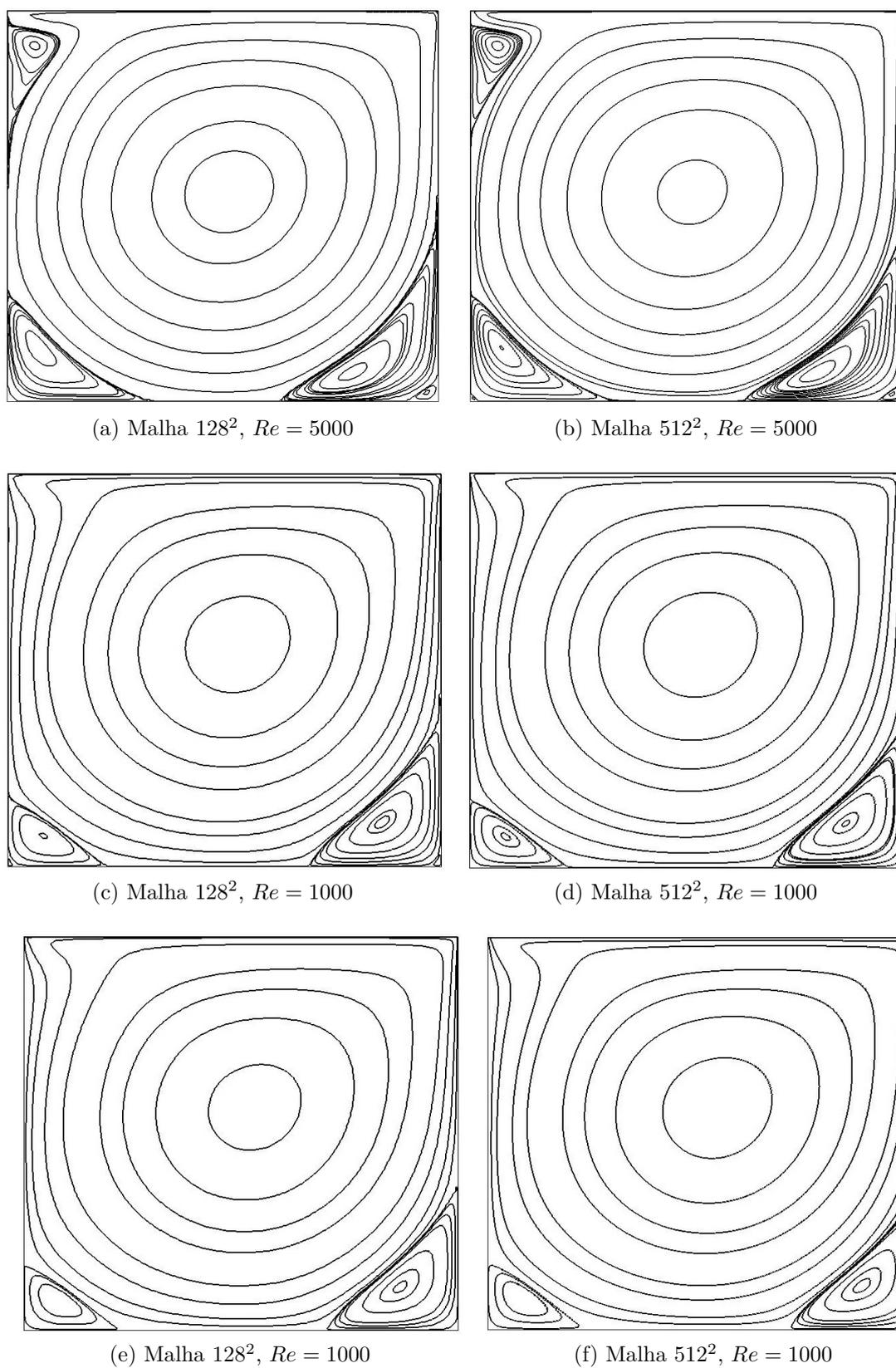


Figura 2 – Linhas de contornos da função de corrente. Formulação $\mathbf{v} - p$ 2a, 2b, 2c e 2d; formulação $\psi - \omega$ 2e e 2f.

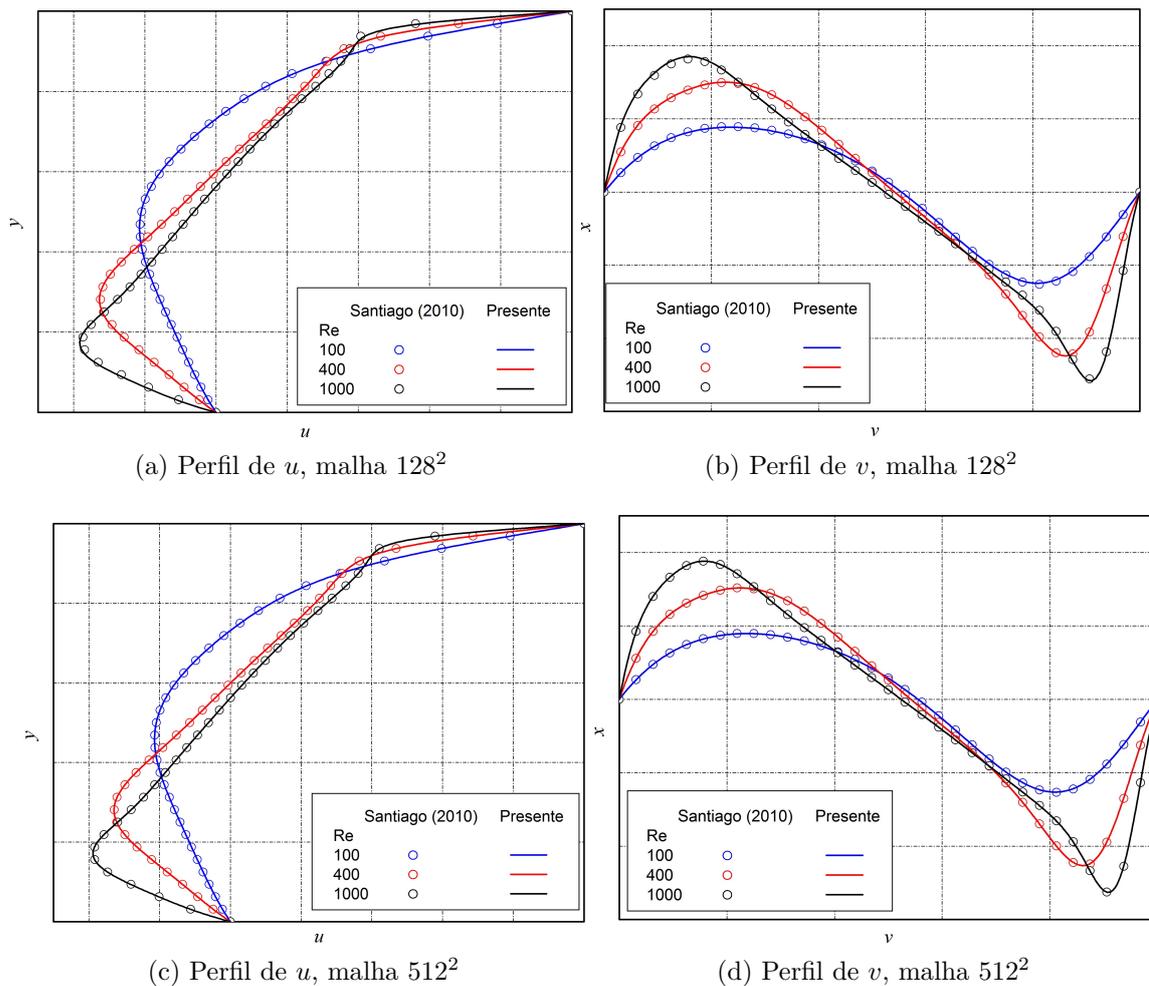


Figura 3 – Perfis de u e v no centro da cavidade ao longo das linhas horizontal e vertical, para vários Reynolds com a formulação $\mathbf{v} - p$ e comparação com Santiago (2010).

uma dada malha, com apenas quatro volumes na malha mais grossa. Por exemplo, sem considerar os contornos, se $N = 512^2$ volumes, o método multigrid com todos os níveis percorre as malhas 512^2 , 256^2 , 128^2 , 64^2 , 32^2 , 16^2 , 8^2 , 4^2 e 2^2 volumes; neste caso específico $L_{máximo} = 9$.

Deve-se destacar aqui que esta análise foi realizada para a equação de Poisson e a formulação $\mathbf{v} - p$. Do ponto de vista do multigrid, a formulação $\psi - \omega$ não apresentou desempenho coerente com a teoria por isso esta análise não foi feita.

A investigação deste parâmetro foi realizado considerando dois tamanhos de malha fina $N = 256^2$ e 512^2 , que podem ser consideradas malhas intermediárias, ou seja, nem muito finas e nem muito grossas. No caso das equações de Navier-Stokes com o singlegrid, soluções em malhas muito finas demandam tempo de CPU demasiadamente alto. Para a equação de Poisson foi possível realizar simulações com o singlegrid até a malha 1024^2 , cujo tempo de CPU para atingir a convergência foi de ≈ 15 horas, enquanto que no multigrid

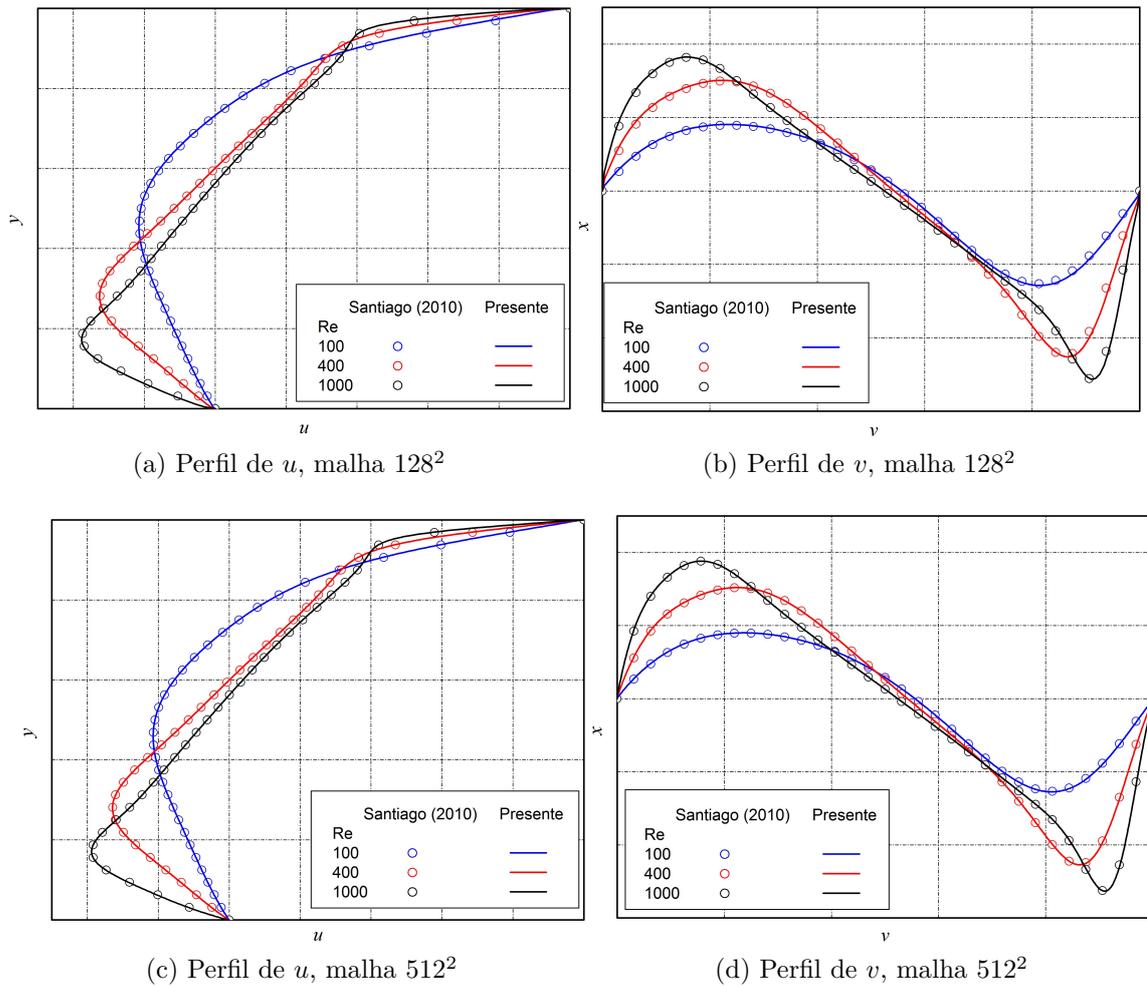


Figura 4 – Perfis de u e v no centro da cavidade ao longo das linhas horizontal e vertical, para vários Reynolds, com a formulação $\psi - \omega$ e comparação com Santiago (2010).

foi 4 segundos. A Fig. 5 mostra o comportamento do multigrid com a variação do número de níveis para os dois problemas.

As Figs. 5a, 5b e 5c ilustram o efeito do número de níveis (L) sobre o tempo de CPU para $Re = 100, 400$ e 1000 , respectivamente. O símbolo “estrela” indica o L que resultou no menor tempo de CPU em cada curva, ou seja, o $L_{\text{ótimo}}$. Para a equação de Poisson, Fig. 5a, é vantagem percorrer todos os níveis de malha. Os valores ótimos estão em torno do número máximo de níveis. Para as equações de Navier-Stokes, independente do número de Reynolds, os valores ótimos também estão em torno de $L_{\text{máximo}}$. Quando $L < L_{\text{máximo}} - 4$ o tempo de CPU apresenta um aumento significativo. Em todos os casos as curvas exibem um padrão coerente com a literatura em estudos feitos com outros problemas, independente de N , veja por exemplo os resultados obtidos para as equações de Burgers e termoelasticidade em Santiago, Marchi e Souza (2015), Santiago e Marchi (2007), Santiago (2010), Gonçalves (2013).

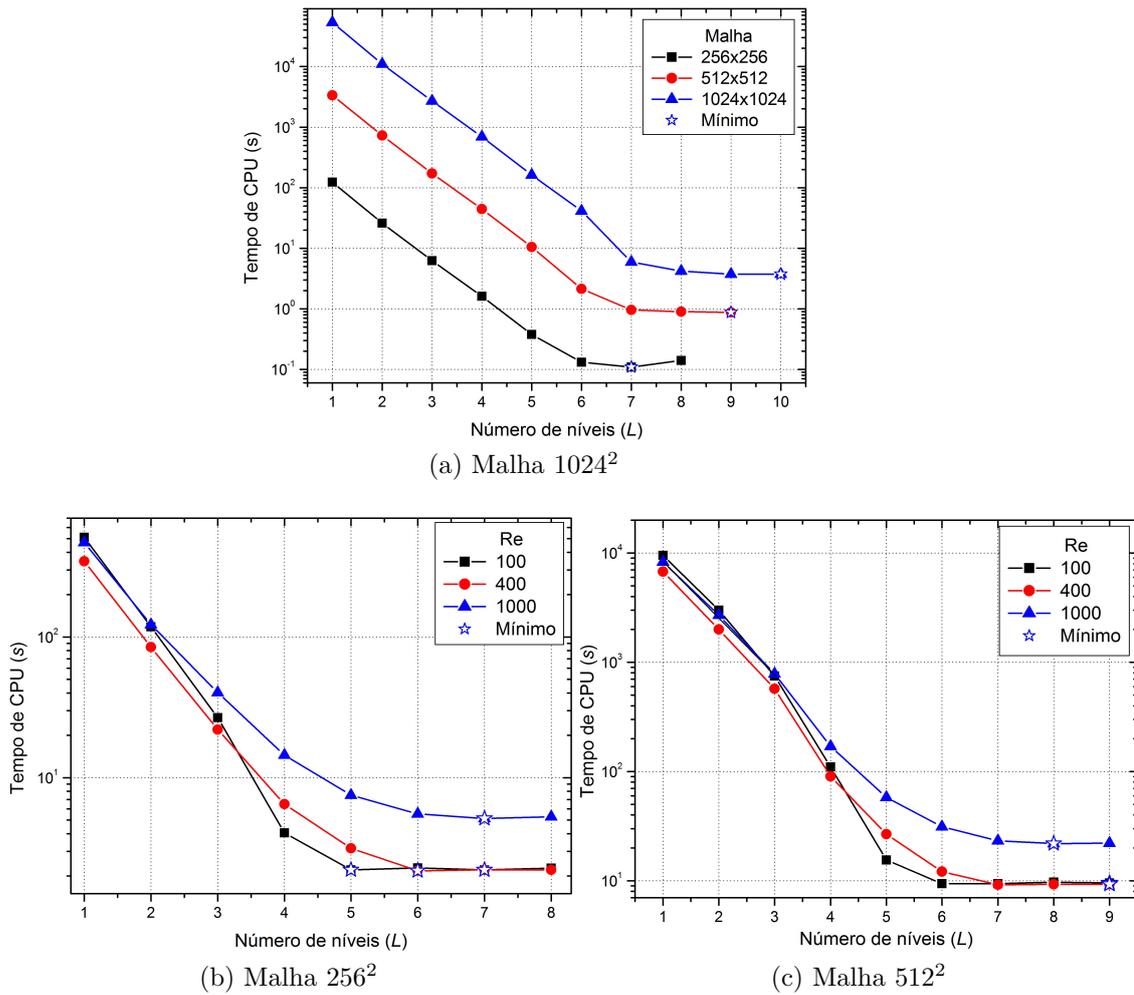


Figura 5 – Análise do número de níveis L . Equação de Poisson 5a; formulação $\mathbf{v} - p$ 5b e 5c.

4.3 Tamanho do problema - N e fator speed-up - S

A presente análise tem o foco na influência do tamanho do problema sobre o tempo de CPU. Considera-se o número máximo de níveis de malha, conforme mostrado nos resultados da seção anterior. Simulações numéricas em malhas grosseiras com altos Reynolds produzem soluções não realísticas. As simulações foram realizadas considerando malhas a partir de $N = 8^2$. No caso do singlegrid nas equações de Navier-Stokes, malhas muito refinadas demandam muito tempo de CPU. Apenas para a equação de Poisson foi realizado simulação para $N = 1024^2$.

De acordo com Ferziger e Perić (2001), quanto mais refinada a malha maior é a vantagem do método multigrid em relação ao método singlegrid. Esta propriedade pode ser observada nas curvas das Fig. 6a, 6c e 6d, ou seja, na medida em que aumenta o número de volumes da malha, aumenta também a vantagem do multigrid em relação ao singlegrid. Entretanto, para $Re > 100$ essa vantagem é um pouco menor. Pode-se notar também que as curvas são muito semelhantes para os solvers MSI (Fig. 6c) e SIP (6d).

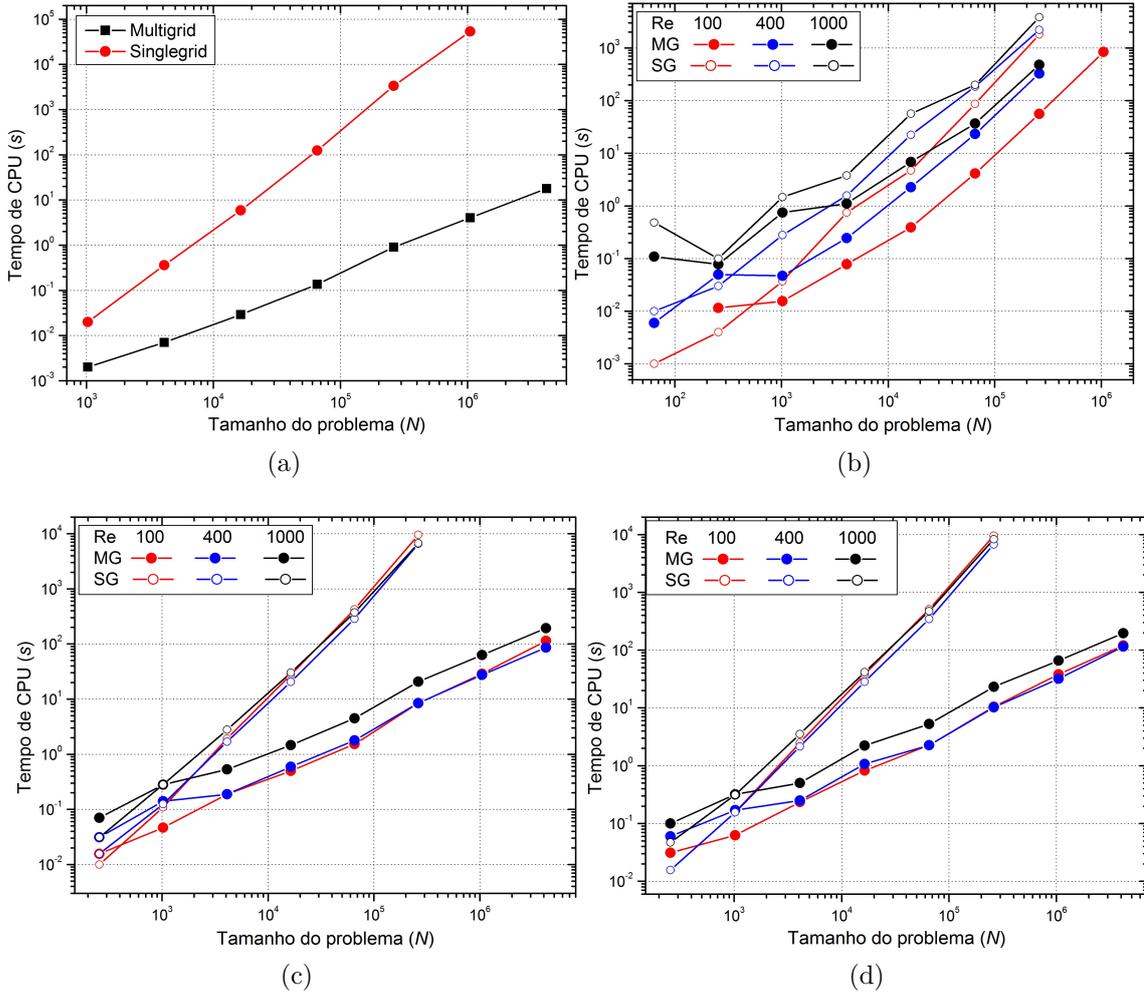


Figura 6 – Tempo de CPU (s) versus tamanho do problema N para a equação de Poisson 6a; formulação $\psi - \omega$ 6b; formulação $\mathbf{v} - p$ - MSI 6c e SIP 6d.

No caso da formulação $\psi - \omega$ (Fig. 6b) a vantagem é pequena e é aparentemente a mesma independente de N . Todas as curvas da Fig. 6 seguem um padrão idêntico ao mostrado por Santiago (2010) e Gonçalves (2013) para as equações de Burgers e termoelasticidade. Estes resultados mostram a eficiência do método multigrid implementado para as equações de Navier-Stokes na formulação $\mathbf{v} - p$ durante a execução da pesquisa de pós-doutorado.

A análise do desempenho do método multigrid, em relação o singlegrid, é geralmente medido também por um indicador S chamado de fator de aceleração (ou fator speed-up) (FERZIGER; PERIĆ, 2001) definido por

$$S = \frac{t_{SG}}{t_{MG}} \quad (4.1)$$

onde t_{SG} é o tempo de CPU gasto para encontrar a convergência no método singlegrid e t_{MG} é o tempo de CPU gasto para encontrar a convergência no método multigrid. O fator

de aceleração S , na Eq. (4.1), mede quantas vezes o método multigrid é mais rápido na obtenção da solução de um problema do que sem ele.

Tabela 1 – Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid com o solver MSI e o fator speed-up (S) para a formulação $\mathbf{v} - p$.

Malha	100			400			1000		
	MG	SG	S	MG	SG	S	MG	SG	S
16^2	0,02	0,00	0,01	0,03	0,02	0,50	0,07	0,03	0,45
32^2	0,05	0,11	2,33	0,14	0,12	0,89	0,28	0,28	1,00
64^2	0,19	1,92	10,25	0,19	1,68	9,00	0,53	2,79	5,27
128^2	0,50	27,85	55,78	0,59	20,59	34,74	1,46	30,02	20,56
256^2	1,53	424,72	277,81	1,78	284,90	160,20	4,50	371,19	82,47
512^2	8,43	9540,23	1132,24	8,46	6597,17	780,25	20,80	6723,38	323,27
1024^2	28,69	-	-	27,57	-	-	63,29	-	-
2048^2	113,90	-	-	86,05	-	-	192,73	-	-

Tabela 2 – Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid com o solver SIP e o fator speed-up (S) para a formulação $\mathbf{v} - p$.

Malha	100			400			1000		
	MG	SG	S	MG	SG	S	MG	SG	S
16^2	0,03	0,02	0,50	0,06	0,02	0,26	0,10	0,05	0,47
32^2	0,06	0,16	2,50	0,17	0,16	0,92	0,32	0,31	0,98
64^2	0,23	2,48	10,60	0,25	2,15	8,61	0,50	3,53	7,05
128^2	0,83	38,14	46,13	1,07	28,22	26,37	2,22	41,41	18,65
256^2	2,26	511,95	226,33	2,26	345,77	153,00	5,29	470,39	88,99
512^2	10,50	9504,27	905,27	10,19	6753,55	662,83	23,25	8296,13	356,81
1024^2	38,08	-	-	32,05	-	-	65,87	-	-
2048^2	120,73	-	-	115,39	-	-	195,56	-	-

As Tabs. (1)-(3) mostram o tempo de CPU gasto para obter a solução convergida no método multigrid e singlegrid aplicado nas Navier-Stokes nas formulações $\mathbf{v} - p$ e $\psi - \omega$, e o respectivo fator speed-up para $Re = 100, 400$ e 1000 . Por considerar desnecessário não será apresentado na referida tabela o valor speed-up do multigrid para a equação de Poisson. Destaca-se, porém, que $S = 202,5$ e $13205,3$ nas malhas 128^2 e 1024^2 , respectivamente.

Pode-se notar nas Tabs. (1) e (2) que o fator speed-up do solver MSI é um pouco melhor que do SIP quando $Re = 100$ e 400 . Por outro lado o fator S é melhor no solver SIP quando $Re > 400$. Além disso, quando $Re > 1000$ o solver MSI começa a ficar instável e conseqüentemente o fator S se deteriora, mesmo com a variação dos parâmetros do solver. O mesmo acontece com o método Gauss-Seidel, cujos resultados não foram apresentados aqui por serem menos atraentes que os resultados do MSI e SIP. Nota-se também que o tempo de CPU na malha 2048^2 com $Re = 1000$ obtido pelo SIP é 1,4% maior que do MSI,

mas é uma diferença muito pequena e não é possível dizer que o MSI é mais rápido nesta malha.

Tabela 3 – Tempo de CPU (s) do multigrid e singlegrid e o fator speed-up (S) para a formulação $\psi - \omega$.

Malha	100			400			1000		
	MG	SG	S	MG	SG	S	MG	SG	S
8^2	0,00	0,00	-	0,01	0,01	1,67	0,11	0,48	4,43
16^2	0,01	0,00	0,34	0,05	0,03	0,60	0,08	0,10	1,28
32^2	0,02	0,04	2,37	0,05	0,28	5,96	0,75	1,47	1,96
64^2	0,08	0,75	9,62	0,25	1,58	6,43	1,11	3,80	3,43
128^2	0,39	4,71	12,07	2,27	22,32	9,85	6,86	56,48	8,24
256^2	4,13	87,00	21,04	23,22	185,14	7,98	36,86	199,40	5,41
512^2	46,21	1813,38	39,24	325,71	-	-	436,38	3850,40	8,82
1024^2	844,92	-	-	-	-	-	-	-	-

Na Tab. (4) pode ser comparado o fator speed-up do multigrid com os de mais dois autores para a formulação $\mathbf{v} - p$. Yan, Thiele e Xue (2007) resolveram o problema da cavidade quadrada com o método FMG/FAS usando dois tipos de aproximações para o termos advectivos (QUICK e MUSCL) e solver SIP. Na comparação com os resultados deles, mesmo tendo uma pequena redução no valor de S com o aumento do número de Reynolds, os resultados obtidos aqui são melhores apenas para $Re = 100$. Variações pequenas de S podem ser desconsideradas. Eles apresentaram resultados somente até $N = 256^2$. Na comparação com os resultados de Ferziger e Perić (2001) os valores de S obtidos aqui são melhores para $Re = 100$ e 1000. Eles não apresentaram fatores S para $Re = 400$.

Tabela 4 – Comparação do fator speed-up S usando o solver SIP com a literatura (YAN; THIELE; XUE, 2007; FERZIGER; PERIĆ, 2001)

Malha	Presente			Yan e Thiele			Pèric	
	100	400	1000	100	400	1000	100	1000
16^2	0,5	0,3	0,5	1,0	1,0	1,0	0,6	0,8
32^2	2,5	0,9	1,0	2,8	2,1	1,6	1,8	1,0
64^2	10,6	8,6	7,1	11,1	8,9	6,6	7,1	2,5
128^2	46,1	26,4	18,7	49,1	49,6	40,9	32,2	15,0
256^2	226,3	153,0	89,0	180,0	187,4	169,0	-	-
512^2	905,3	662,8	356,8	-	-	-	-	-

Apesar de os valores de S mostrados nas Tabs. (1),(2) e (4), em geral, menores que os valores apresentados por Yan, Thiele e Xue (2007), deve-se destacar que os valores obtidos nesta pesquisa são muito bons e são os melhores obtidos para as equações de Navier-Stokes no grupo de pesquisas em CFD. Apenas para ter uma ideia da eficiência do

algoritmo multigrid implementado, o tempo de CPU em uma simulação com $Re = 5000$, e malha com 1024^2 , isto é, 1.048.576 volumes de controle, foi de 5,6 minutos para atingir a convergência com tolerância de 10^{-6} .

4.4 Esforço computacional

Para determinar a ordem de convergência do solver associado ao método multigrid e o comportamento da curva em função do tempo de CPU, Fig. 6, realizou-se um ajuste geométrico de mínimos quadrados, cuja função considerada é dada por

$$t_{CPU}(N) = cN^p, \quad (4.2)$$

aqui, p representa a ordem do solver associado ao método empregado, ou a inclinação de cada curva da Fig. 6, e c é uma constante que depende do método e do solver. Quanto mais próximo da unidade estiver o valor de p , melhor é o desempenho do algoritmo usado. Teoricamente, o método multigrid ideal tem $p = 1$, o que significa que o tempo de CPU cresce proporcionalmente com o aumento do tamanho da malha (N).

A Tab. 5 mostra o coeficiente c e o expoente p obtidos por ajuste geométrico de mínimos quadrados, dado pela Eq. (4.2), para as duas formulações e equação de Poisson, com $N \geq 8^2$. Os resultados confirmam que o tempo de CPU do método multigrid e solvers SIP e MSI cresce linearmente com o aumento de N , inclusive com alguns valores menores que 1 na formulação $\mathbf{v} - p$. O valor de p não é afetado pelo número de equações e sua complexidade se comparado com a equação de Poisson e os resultados de Santiago (2010) e Gonçalves (2013). O efeito relevante é o uso ou não de multigrid. Os valores de p próximos a dois para o método singlegrid com o método MSI e SIP também concordam com os valores teóricos (BURDEN; FAIRES, 2003).

Tabela 5 – Expoente p da Eq. 4.2 para Poisson e formulações $\mathbf{v} - p$ e $\psi - \omega$

Re	$\mathbf{v} - p$ - MSI				$\psi - \omega$			
	MG		SG		MG		SG	
	c	p	c	p	c	p	c	p
100	8E-05	0,9	9E-10	2,5	1E-06	1,4	3E-07	1,8
400	3E-04	0,8	4E-07	1,9	2E-05	1,3	5E-06	1,6
1000	7E-04	0,8	1E-06	1,8	5E-04	1,0	6E-04	1,2
$\mathbf{v} - p$ - SIP					Poisson			
100	2E-04	0,9	3E-07	1,9	7E-07	1,1	1E-07	1,8
400	6E-04	0,8	4E-07	1,9				
1000	1E-03	0,8	2E-06	1,7				

No caso da formulação $\psi - \omega$, que foi usado o solver SOR, não se observa um comportamento padrão do valor de p . Para Reynolds maiores aparentemente há uma diminuição no custo computacional, apesar de que, em termos absolutos, o tempo de CPU nesta formulação é significativamente maior que na formulação $\mathbf{v} - p$. Curiosamente no caso do singlegrid o valor de p também tende a 1 quando $Re = 1000$. Para a equação de Poisson o valor obtido é o esperado, com uma pequena variação.

Os resultados obtidos para as equações de Navier-Stokes com o multigrid e formulação $\mathbf{v} - p$ são, sem dúvidas, muito bons em relação ao que se conhece da literatura. Uma simulação na malha 1024^2 , que é considerada uma malha superfina para este problema, com $Re = 1000$, o tempo de CPU gasto é de aproximadamente um minuto, com tolerância de 10^{-6} e critério de parada baseado na solução exata, ver Eq.(3.1). Outra propriedade que está em conformidade com a teoria é que o tempo de CPU é multiplicado por quatro quando se dobra o tamanho do problema. Essa propriedade foi verificada para todos o Reynolds testados, $Re \leq 5000$.

A Fig. 7 mostra o esforço computacional com a variação do número de Reynolds. Nas Figs. 7a e 7b nota-se que o aumento do tempo de CPU é significativo com a variação do número de Reynolds, sendo mais evidente para $Re = 3200$ na formulação $\mathbf{v} - p$. A variação dos parâmetros do solver ou do multigrid não é relevante para a redução do tempo de CPU quando aumenta o número de Reynolds ou o tamanho do problema. Estes resultados estão coerentes com os de Ferziger e Perić (2001), Tab. (4). Na formulação $\psi - \omega$ deve-se diminuir o parâmetro de relaxação do solver para valores altos de Reynolds.

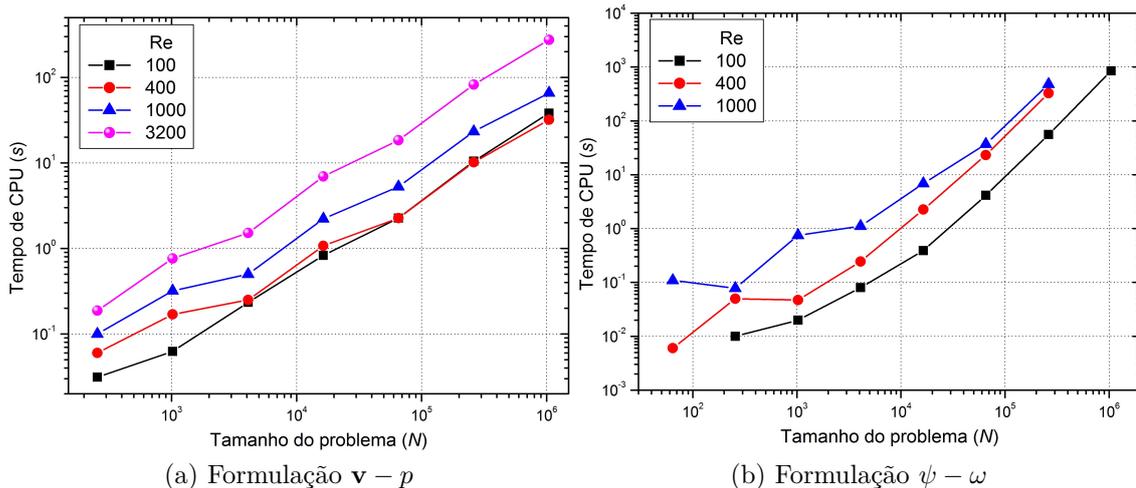


Figura 7 – Tempo de CPU (s) versus tamanho do problema N para o método multigrid com o número de Reynolds variando. 7a formulação $\mathbf{v} - p$ e 7b formulação $\psi - \omega$.

5 Conclusão

O objetivo da pesquisa foi o estudo e implementação do método multigrid geométrico com ciclo V, visando a resolução de sistemas de equações bidimensionais acoplados. Alguns parâmetros do multigrid também foram investigados para três modelos matemáticos bidimensionais. O foco principal foi resolver o problema de escoamento de fluidos incompressível modelados pelas equações de Navier-Stokes visando a redução do tempo de CPU. O método dos volumes finitos em malhas co-localizadas foi empregado para discretizar as equações diferenciais. Os solvers Gauss-Seidel, SOR, MSI e SIP foram usados para resolver os sistemas de equações. Foi escrito um código para a equação de Poisson, um modelo simples, que serviu de aprendizado no desenvolvimento dos códigos para as equações de Navier-Stokes. Os principais resultados são:

- As soluções numéricas, verificadas na seção 4.1 apresentaram boa concordância com aquelas disponíveis na literatura, inclusive com as mais acuradas;
- O código escrito para a equação de Poisson apresentou resultados coerentes com a literatura. O valor de p da Eq. (4.2) mostrou que está de acordo com a eficiência teórica do multigrid;
- Para as equações de Poisson e Navier-Stokes na formulação $\mathbf{v} - p$, nas malhas investigadas, o valor ótimo do número de malhas é aproximadamente $L_{máximo}$. Em termos de tempo de CPU é indiferente usar $L_{máximo}$ ou $L_{máximo} - (1 \text{ ou } 3)$;
- O código escrito para as equações de Navier-Stokes na formulação $\mathbf{v} - p$ apresentou resultados coerentes com Yan, Thiele e Xue (2007) e Ferziger e Perić (2001). O valor de p da Eq. (4.2) também mostrou que está de acordo com a eficiência teórica do multigrid;
- O fator speed-up S obtido para a formulação $\mathbf{v} - p$ é muito bom em relação ao que se conhece da literatura e principalmente se comparado com os valores de Ferziger e Perić (2001, p. 303). O fator speed-up aumenta quando aumenta o número de volumes N , mas diminui com o aumento de Re , conforme mostrado nas Tabs. (1)-(3);
- O ótimo desempenho do método multigrid verificado para a formulação $\mathbf{v} - p$ não foi confirmado para a formulação $\psi - \omega$. Além disso os valores de p na Eq. (4.2) não seguem o mesmo padrão, isto é, $\cong 1$. Estes resultados demonstram que é necessário estudar um pouco mais e re-programar o algoritmo multigrid para a formulação $\psi - \omega$;

- Os resultados desta pesquisa mostram que o desempenho do método multigrid não é afetado pela complexidade das equações de Navier-Stokes, não confirmando, portanto, a suposição de Santiago, Marchi e Souza (2015);
- Para as equações de Navier-Stokes na formulação $\mathbf{v} - p$, o solver MSI foi mais eficiente que o SIP apenas para $Re \leq 1000$. Para $Re > 1000$ o MSI tornou-se instável e até divergiu. O solver SIP mostrou-se estável para qualquer N e Re sem a necessidade de variação de parâmetros. Diversas simulações numéricas foram realizadas com o solver Gauss-Seidel mas este solver é muito sensível ao número de Reynolds, iterações internas e ao tamanho do problema. Resultados compatíveis com o MSI ou SIP foram obtidos somente com $Re = 100$.

Principais contribuições:

- Nesta pesquisa foi desenvolvido um código multigrid robusto, que confirma as características teóricas do multigrid, para as equações de Navier-Stokes em variáveis primitivas. Soluções em malhas super-refinadas, $N = 2048^2$, foram obtidas com $Re \leq 5000$. Soluções em malhas ainda mais refinadas também poderão ser obtidas. Para o grupo de pesquisa em CFD da UFPR, a performance e robustez deste código é inédito;
- O presente código multigrid será usado para obter soluções de alta ordem de acurácia com a aplicação de Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER), usando altos números de Reynolds, com a orientação do prof. Marchi, líder do grupo.
- Esta é a primeira vez que um integrante do grupo de pesquisa em CFD da UFPR consegue disponibilizar um código multigrid para resolver as equações de Navier-Stokes na formulação em variáveis primitivas $\mathbf{v} - p$ com volumes finitos.
- O executor desta pesquisa teve contatos sólidos com a metodologia do método dos volumes finitos, aplicou em problemas de escoamentos de fluidos com o método multigrid e obteve bons resultados. Com isso, adquiriu *Know-how* para possivelmente avançar em pesquisas na área de CFD e aprimorar metodologias de resolução de sistemas, ou mesmo contribuir para o desenvolvimento de novos algoritmos.
- Um artigo científico com os principais resultados desta pesquisa está em fase inicial de desenvolvimento.
- Um artigo está em desenvolvimento em que as Múltiplas Extrapolações de Richardson estão sendo aplicadas nas soluções numéricas da formulação $\mathbf{v} - p$ em malhas até 16384^2 volumes com $Re \leq 5000$. O foco principal é reduzir o erro de discretização e obter soluções de alta ordem de acurácia em malhas super-refinadas com altos

Reynolds. Este artigo está sob a responsabilidade do aluno de doutorado Diego Moro, orientado pelo prof. Carlos H. Marchi.

5.1 Considerações finais

Durante a pesquisa de estágio pós-doutoral foi realizado um acompanhamento constante na literatura para tentar obter as últimas novidades que pudessem ser relevantes para esta pesquisa. Diversos códigos singlegrid encontrados na internet foram analisados, alguns testados. Como comentado na introdução deste relatório, muitas dificuldades surgiram com a implementação do método multigrid geométrico usando o método dos volumes finitos para discretizar as equações. A implementação do multigrid para a formulação $\psi - \omega$ com o algoritmo padrão FAS mostrou-se ineficiente. Possivelmente por dificuldades relacionadas às condições de contorno da vorticidade não foi possível desenvolver um algoritmo que proporcionasse resultados coerentes com a literatura do multigrid, infelizmente. As principais dificuldades encontradas durante a execução desta pesquisa estão bem relatadas na seção 1.1.

O sucesso na implementação do algoritmo multigrid para a formulação $\mathbf{v} - p$ no problema da cavidade quadrada (mesmo não sendo como proposto inicialmente, que incluía condições de contorno com volumes fictícios e algoritmo SIMPLEC) foi graças às contribuições relevantes dadas no livro Ferziger e Perić (2001). Eles mostraram todos os detalhes da discretização e os pormenores das aproximações numéricas dos termos advectivos, difusivos e fluxos de massa. O método Full Multigrid também é descrito com riqueza nos detalhes. Além disso, também disponibilizaram alguns códigos computacionais que podem servir como um ponto de partida para quem tem interesse em ingressar neste esplendoroso campo de CFD.

Além dos códigos desenvolvidos nesta pesquisa, conforme proposta inicial, também foram desenvolvidos/adaptados dois códigos computacionais para a resolução das equações de Navier-Stokes, na formulação $\psi - \omega$, com o método multigrid usando diferenças finitas. Estes códigos foram solicitados para atender uma demanda do grupo de pesquisa em CFD. Com a metodologia de soluções fabricadas, propôs-se um código com solução analítica exponencial e outro polinomial. Estes códigos foram adaptados a partir dos códigos de diferenças finitas desenvolvidos pelo executor desta pesquisa durante o seu doutoramento. O desempenho teórico do método multigrid foi confirmado para ambos. O objetivo é aplicar a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) nas equações de Navier-Stokes com solução analítica, visando atingir a sexta ordem de acurácia na solução numérica com a redução do erro de discretização. As soluções analíticas são utilizadas para medir o erro e validar as soluções numéricas.

Agradecimentos

Em primeiro lugar agradeço à Deus, por tudo.

Agradeço ao Prof. Dr. Carlos H. Marchi, meu supervisor, que acompanhou e fez os encaminhamentos necessários ao desenvolvimento deste trabalho e por ter oferecido bolsa de estudos PNPd.

Agradeço ao Prof. Milovan Perić pela disponibilidade de códigos que foram o ponto de partida para o desenvolvimento de alguns códigos desta pesquisa.

Agradeço à minha esposa Sueli e à minha filha Carol pela paciência e compreensão e por aceitarem a minha ausência nos períodos que permaneci em Curitiba, e também quando estava em casa, sempre desenvolvendo as atividades de pesquisa. Agradeço à minha sogra, dona Helena, que me acolheu de braços abertos nos períodos que estive em Curitiba.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-Mec) da Universidade Federal do Paraná (UFPR) pela oportunidade de realizar o estágio pós-doutoral com bolsa PNPd; à Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR, especialmente os colegas do Departamento de Matemática pelo apoio na minha liberação. Agradeço ao Márcio, secretário do PG-Mec, pelo pronto atendimento. Agradeço aos colegas do Laboratório pela amizade e pela ajuda técnica que alguns forneceram. Agradeço ao Programa Nacional de Pós-Doutorado - **PNPD/CAPES** pelo suporte financeiro.

Referências

- BOTELLA, O.; PEYRET, R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. *Computers and Fluids*, v. 27, p. 421–433, 1998. Citado na página 8.
- BRIGGS, W.; HENSON, V.; MCCORMICK, S. *A Multigrid Tutorial*. 2^a. ed. [S.l.]: SIAM, 2000. Citado na página 10.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Análise Numérica*. 2^a. ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003. Citado na página 27.
- ERTURK, E. Discussions on driven cavity flow. *International Journal Numerical Methods in Fluids*, v. 60, p. 275–294, 2009. Citado na página 19.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational Methods for Fluids Dynamics*. 3^a. ed. [S.l.]: Springer, 2001. Citado 12 vezes nas páginas 4, 9, 10, 11, 14, 16, 23, 24, 26, 28, 29 e 31.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. [S.l.]: Guanabara Koogan, 1995. Citado na página 13.
- GHIA, U.; GHIA, N.; SHIN, C. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, v. 48, p. 387–411, 1982. Citado na página 19.
- GONÇALVES, S. de F. T. *Estudo de parâmetros do método multigrid geométrico para equações 2D em CFD e volumes finitos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, Pr, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 22, 24 e 27.
- KUMAR, D.; KUMAR, K.; DAS, M. A fine grid solution for a lid-driven cavity flow using multigrid method. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, v. 3, p. 336–354, 2009. Citado na página 19.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2^a. ed. [S.l.]: LTC, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 10.
- MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos*. Florianópolis, SC, Brasil: Universidade Federal de Santa Catarina - Tese de Doutorado, 2001. Citado na página 18.
- MARCHI, C. H.; SUERO, R.; ARAKI, K. L. The lid-driven square cavity flow: Numerical solution with a 1024x1024 grid. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 31, n. 3, p. 186–198, 2009. Citado na página 19.
- PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. [S.l.]: Taylor and Francis, 1980. Citado na página 10.
- SANTIAGO, C. D. *Estudo de parâmetros do método multigrid para sistemas de equações 2D em CFD*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba, Pr, 2010. Citado 7 vezes nas páginas 3, 14, 19, 21, 22, 24 e 27.

- SANTIAGO, C. D.; MARCHI, C. H. Optimum parameters of a geometric multigrid for a two-dimensional problem of two-equations. *Proceedings of COBEM 2007*, 2007. Citado na página 22.
- SANTIAGO, C. D.; MARCHI, C. H.; SOUZA, L. F. Performance of geometric multigrid method for coupled two-dimensional systems in CFD. *Applied Mathematical Modelling*, v. 39, p. 2602–2616, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 30.
- SHANKAR, O. N.; DESHPANDE, M. D. Fluid mechanics in the driven cavity. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 32, p. 93–136, 2000. Citado na página 15.
- SHIH, T. M.; TAN, C. H.; HWANG, B. C. Effects of grid staggering on numerical scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 9, p. 193–212, 1989. Citado na página 12.
- TROTTEBERG, U.; OOSTERLEE, C. W.; SCHULLER, A. *Multigrid*. [S.l.: s.n.], 2001. Citado na página 8.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. 2^a. ed. [S.l.]: Harlow, England: Prentice Hall, 2007. Citado na página 8.
- YAN, J.; THIELE, F.; XUE, L. A modified full multigrid algorithm for the Navier-Stokes equations. *Computers & Fluids*, v. 36, p. 445–454, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 4, 10, 26 e 29.