Paulo Celso Vieira Paino

***ANÁLISE DE DESEMPENHO DE UM MÉTODO
DE INTERFACES IMERSAS DE ALTA ORDEM***

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia
de São Carlos, da Universidade de São Paulo,
como parte dos requisitos para obtenção do tí-
tulo de Mestre em Engenharia Mecânica. Área
de concentração: Aeronaves.

Orientador: Prof. Dr. Marcello Augusto Faraco de Medeiros

ESTE EXEMPLAR TRATA-SE
DA VERSÃO CORRIGIDA.
A VERSÃO ORIGINAL
ENCONTRA-SE DISPONÍVEL
JUNTO AO DEPARTAMENTO DE
ENGENHARIA MECÂNICA DA
EESC-USP

São Carlos, SP

2011

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES
TRABALHOS, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

P147a

Paino, Paulo Celso Vieira
Análise de desempenho de um método de interfaces
imersas de alta ordem / Paulo Celso Vieira Paino ;
orientador Marcello Augusto Faraco de Medeiros. -- São
Carlos, 2011.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Aeronaves)
-- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de
São Paulo, 2011.

1. Aerodinâmica. 2. Esquemas de alta ordem. 3. Métodos
de fronteiras imersas. 4. Métodos de interfaces imersas.
5. CFD. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato(a): Engenheiro PAULO CELSO VIEIRA PAINO.

Dissertação defendida e julgada em 15/04/2011 perante a Comissão Julgadora:

Prof. Associado **MARCELLO AUGUSTO FARACO DE MEDEIROS** - (Orientador)
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

APROVADO

Prof. Dr. **HOMERO GHIOTI DA SILVA**
(Universidade Federal de Uberlândia/UFU)

APROVADO

Prof. Dr. **LUIZ EDUARDO BITTENCOURT SAMPAIO**
(Universidade Federal Fluminense/UFF)

APROVADO

Prof. Associado **MARCELO AREIAS TRINDADE**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica

Prof. Associado **PAULO CÉSAR LIMA SEGANTINE**
Presidente da Comissão da Pós-Graduação da EESC

*A todas as pessoas que contribuíram de alguma forma
para com esta caminhada.*

AGRADECIMENTOS

Em especial, ao caro Prof. Dr. Marcello, pela paciência com que conduziu sua orientação e pelos inestimáveis conselhos e direcionamentos sobre variados aspectos da vida.

Ao Prof. Dr. Márcio Mendonça, pelo apoio e disposição em auxiliar para com a conclusão deste trabalho.

Aos caros amigos do LAE, Carlos, Elmer, Hernan, Ricardo e Vinícius pelos igualmente inestimáveis momentos de companheirismo.

Aos meus familiares e amigos, pelo apoio emocional, sem o qual nada disso seria possível.

À Escola de Engenharia de São Carlos, pelo acolhimento e suporte em mais esta etapa.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, pelo fomento a este trabalho sob a forma de Bolsa de Mestrado.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	ix
Resumo	xi
Abstract	xiii
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	5
2.1 Métodos de Simulação de Corpos Imersos em Domínios Numéricos para Algoritmos de Solução Baseados em Malhas Cartesianas	5
2.1.1 Histórico dos Métodos	5
2.1.2 Métodos de Alta Ordem	7
3 Metodologia Numérica	11
3.1 Discretização Espacial	11
3.1.1 Descrição do Método de Interfaces Imersas de Alta Ordem Utilizado	11
3.1.1.1 Correção para o esquema baseado no ramo de função à montante da interface imersa	13
3.1.1.2 Correção para o esquema baseado no ramo de função à jusante da interface imersa	19

3.1.2	Diferenças Finitas Compactas	21
3.1.2.1	Primeira Derivada	21
3.1.2.2	Segunda Derivada	22
3.1.2.3	Diretrizes para a Análise de Eficiência de Solução das Dis- cretizações Espaciais Empregadas	23
3.1.3	Teste de Refinamento de Malha	25
4	Resultados	27
4.1	Solução da Equação de Calor Unidimensional	27
4.1.1	Teste de Refinamento de Malha	30
4.2	Análise Fragmentada do Método	33
4.2.1	Verificação da Implementação dos Cálculos dos Termos de Salto . .	33
4.2.1.1	Estimativa das derivadas no ponto x_{α_1} - Séries de Taylor adiantadas	34
4.2.2	Cálculo das Derivadas da Função Tangente Hiperbólica	41
4.2.3	Cálculo das Derivadas da Função Seno	45
4.2.4	Restrição ao Uso do Método em Termos de Refinamento de Malha .	48
5	Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	51
	Referências	53

LISTA DE FIGURAS

1	Esquema Iterativo para o Cálculo de Pontos Fictícios	9
2	Exemplo de descontinuidade do tipo salto no ponto x_α	11
3	Domínio com 21 pontos	29
4	Domínio com 321 pontos	29
5	Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $100dt$ (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	30
6	Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $1000dt$ (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	32
7	Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $10000dt$ (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	32
8	Perfil escolhido para a Função Tangente Hiperbólica - Descontinuidade Localizada no Ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$	41
9	Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	42
10	Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	42
11	Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	43
12	Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	43

13	Perfil Escolhido para a Função Seno - Descontinuidades Localizadas nos Pontos $x_{\alpha_1} = 1.989375$ e $x_{\alpha_2} = 8.01125$	45
14	Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	46
15	Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	46
16	Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	47
17	Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	47
18	Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos - Domínios de 21 a 5121 pontos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	49
19	Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos - Domínios de 21 a 5121 pontos (Espaçamento de Malha <i>versus</i> Erro)	49

RESUMO

Paino, P. C. V. (2011). Análise de Desempenho de um Método de Interfaces Imersas de Alta Ordem. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

No contexto de Dinâmica de Fluidos Computacional, métodos de simulação de objetos imersos em Malhas Cartesianas têm se mostrado vantajosos tanto em termos de Custo Computacional quanto em termos de precisão numérica. Entretanto, a representação física de objetos imersos nesses domínios computacionais impõe a perda de validade dos esquemas de Diferenças Finitas empregados, na região das superfícies introduzidas. Este trabalho analisa um Método de Interfaces Imersas quanto ao desempenho em aplicações a esquemas de solução numérica de Alta Ordem de precisão. Através de Testes de Refinamento de Malha, é feita a apreciação da ordem de decaimento dos erros das soluções numéricas em comparação com as soluções analíticas para 2 problemas unidimensionais. O primeiro envolve a solução da Equação de Calor unidimensional sujeita a uma Condição Inicial Unitária, e o segundo relaciona-se ao cálculo das duas primeiras derivadas espaciais das funções analíticas Seno e Tangente Hiperbólica. Também é promovida uma análise de forma fragmentária do método, a fim de individualizar a contribuição dos elementos envolvidos no comportamento das soluções geradas. Os resultados obtidos indicam eventuais alterações na ordem de precisão dos esquemas de Diferenças Finitas originalmente aplicados. Esse comportamento é visto como uma dependência que o método escolhido apresenta em relação à função discretizada. Por fim, são elaboradas considerações sobre restrições de aplicabilidade do método escolhido.

Palavras chave: Esquemas de Alta Ordem. Métodos de Fronteiras Imersas. Métodos de Interfaces Imersas. CFD.

ABSTRACT

Paino, P. C. V. (2011). Performance Analysis of a High Order Immersed Interface Method. Dissertation (Master's Degree) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

In the Computational Fluid Dynamics context, methods for simulating immersed objects in Cartesian Grids have shown advantages regarding both Computational Cost and numerical precision. Nevertheless, the physical representation of immersed objects within these computational domains leads to the loss of validity of the employed Finite Difference Schemes near the immersed surfaces. This work analyzes a Immersed Interface Method regarding its performance in High Order Schemes applications. The error decay order for numerical solutions of two 1D problems is observed. The first problem relates to the solution of the Heat Equation subjected to the unitary initial condition. The second relates to the computation of the first two derivatives of analytical functions Sin and Hyperbolic Tangent. It's also conducted a fragmentary analysis, which is intended to identify the contribution of each element of this method to the character of the generated solution. The results indicate some eventual changes in the Order of the Finite Differences Schemes employed. This behaviour is regarded as a dependency of this method to the nature of the discretized function. Finally, some remarks regarding restrictions to this method's applicability are made.

Keywords: High Order Schemes. Immersed Interface Method. Immersed Boundaries Method. CFD.

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho tem por objetivo investigar o desempenho, principalmente quanto à ordem de precisão, apresentado por uma versão do Método de Interfaces Imersas. O termo *Immersed Interface Method* apareceu pela primeira vez denominando o método apresentado em (LEVEQUE; LI, 1994), e seu acrônimo, *IIM*, será referenciado no decorrer do texto que segue. As aplicações dos Métodos descritos como IIM em Engenharia vão desde a simulação numérica da interação fluido-estrutura à interação entre fluidos imiscíveis, no contexto de fluxos multifásicos. Além disso, são métodos especial e exclusivamente destinados ao uso em esquemas de solução baseados em Malhas Cartesianas. A versão aqui investigada é a proposta por (LINNICK; FASEL, 2005), e o contexto dessa aplicação é aquele dos esquemas de *Alta Ordem*, com a observação de que, por *Alta Ordem*, entendem-se os esquemas que envolvem uma Ordem de Precisão igual a ou maior que 4^a .

A busca por esquemas que atendam esse requisito em termos de ordem de precisão reflete uma necessidade inerente de qualquer método numérico para simulação de Dinâmica de Fluidos, aquela de eficiência em relação ao custo computacional. No contexto do grupo de pesquisa no qual este trabalho está inserido, há um histórico interesse pela melhoria da relação Precisão *versus* Custo Computacional.

Os testes de apreciação da Ordem de Precisão dos esquemas utilizados na solução das equações de Mecânica dos Fluidos envolvem Testes de Refinamento de Malha, a partir dos quais é feita a análise do comportamento dos erros da solução numérica à medida que a malha empregada se torna mais fina. Ainda que a tendência desses erros não seja um indicativo absoluto de precisão, a escolha e aplicação de métodos de Alta Ordem

tem encontrado respaldo em trabalhos recentes. (SOUZA; MENDONÇA; MEDEIROS, 2005), por exemplo, evidencia a vantagem do uso de Esquemas Compactos de Alta Ordem para simulações de fenômenos de transição tanto em termos de exatidão numérica quanto de custo computacional. Além disso, a atual tendência no cenários dos métodos de interação fluido-estrutura para esquemas em Malhas Cartesianas também tem demonstrado um crescente interesse pela manutenção da precisão para esquemas de alta ordem, cuja discussão será mais aprofundada na Seção (2.1.2).

A intenção primária do presente trabalho, forjada nos moldes das considerações anteriores, foi não só a de encontrar um método com as referidas características, mas também o de testá-lo a contento, de forma a garantir seu posterior uso em variadas aplicações dentro do grupo de pesquisa em questão.

A seqüência cronológica das etapas que compreenderam o respectivo período de pesquisa refletem, de certa forma, a ordem dos capítulos que fazem parte dessa Dissertação. No Capítulo 2, apresenta-se a Revisão Bibliográfica sobre métodos para simulação de superfícies imersas em domínios computacionais baseados em Malhas Cartesianas. Divido em duas seções, esse capítulo trata primeiramente do histórico desses métodos, enquanto que a segunda parte trata do contexto dos métodos de Alta Ordem. Há também, nesta segunda parte, as considerações acerca da escolha do método que foi o objeto de estudo do presente trabalho. No Capítulo 3, faz-se a descrição detalhada do método escolhido, dentro da seção de Discretização Espacial, que compreende uma das duas seções em que se divide este capítulo, sendo a outra referente ao método de Discretização Temporal empregado. No Capítulo 4, estão elencados os testes realizados através da aplicação do método. Este Capítulo encontra-se também subdividido em duas seções. A respeito deste Capítulo, em específico, faz-se a necessidade de frisar a metodologia dos testes conduzidos. A primeira seção trata da aplicação do método à solução da Equação do Calor unidimensional sujeita à condição inicial unitária. Esses resultados fazem parte deste trabalho para apreciação do comportamento não-usual das soluções inicialmente obtidas pela aplicação do método, fato que será explorado em mais detalhes no Capítulo 5. Tanto

esses quanto os resultados da Segunda Seção deste Capítulo, (4.2), foram tomados a partir de domínios unidimensionais. Apesar disso, os testes conduzidos na Seção (4.2) mostram um ineditismo em relação aos testes anteriores, tanto em relação ao que foi apresentado em (LINNICK; FASEL, 2005) quanto ao que havia sido descrito nos demais trabalhos da Área. Os testes aqui documentados refletem uma análise mais detalhada e rigorosa das limitações em termos de precisão e de refinamento de malha que o método impõe, e foram executados de maneira propícia à melhor compreensão do comportamento obtido na aplicação da Seção anterior. Adicionalmente, ainda na Seção (4.2), é feita a comparação dos erros de soluções numéricas com e sem Interfaces Imersas. Por fim, no último Capítulo, após a discussão dos resultados, são elaboradas algumas considerações em termos de restritividade de aplicação deste método, em relação à questão do custo computacional.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Métodos de Simulação de Corpos Imersos em Domínios Numéricos para Algoritmos de Solução Baseados em Malhas Cartesianas

2.1.1 Histórico dos Métodos

Métodos para simulação da interação fluido-estrutura em Malhas Cartesianas têm sido utilizados há mais de três décadas, tendo como acreditado precursor o trabalho de (PESKIN, 1972), sobre o fluxo sangüíneo no interior do coração. Neste trabalho, a configuração do problema envolveu o fluxo bidimensional, em regime incompressível, sobre uma membrana elástica (regida pela Lei de Hooke) e considerada como *sem massa*. No método que ficou conhecido como Método de Fronteiras Imersas, a presença física da fronteira é representada por um campo de forças, conforme a seguinte equação:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \sum_{i,j \in R} h^2 D_{ij}(\mathbf{x}_k) \varphi_{i,j} = \int \varphi(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) da \quad (2.1)$$

, na qual D_{ij} representa a função do campo de força, h representa o espacamento da malha, δ representa a função *Delta de Dirac* e φ representa uma função de teste. O acoplamento do Campo de Forças às equações do fluido se dá, neste método, por meio de espalhamento do termo forçante por alguns nós vizinhos à fronteira imersa. Essa característica visou, originalmente, atender ao requisito de continuidade da função D_{ij} , mas, ao mesmo tempo, reflete a exigência de uma grande resolução de malha perto da fronteira imersa. À época, o método ainda mostrava-se embrionário no sentido da ordem atingida, apenas 1^a .

A relativa popular aceitação do método junto à comunidade científica deu-se, em grande parte, à redução de custo computacional proporcionado. Um dos motivos desta redução reside propriamente na natureza dos esquemas baseados em Malhas Cartesianas. (VERZICCO et al., 1998) conclui que algoritmos de solução baseados em Malhas Cartesianas são mais eficientes que métodos baseados em Malhas Ajustadas ao Objeto (*body fitted*). Além disso, esses métodos baseados em Malhas Cartesianas também são enormemente vantajosos quando aplicados à interação de fases em fluxos multifásicos, a qual seria extremamente difícil conformar uma malha do tipo *body fitted*.

(GOLDSTEIN; HANDLER; SIROVICH, 1993) propôs tratar do fluxo através de superfícies rígidas por meio de uma primeira versão do método, usando um mecanismo de controle por realimentação. Entretanto, dada a natural dependência desta realimentação em relação às condições dinâmicas do sistema, esta versão do método apresentou-se restritiva, em termos da condição CFL, à aplicação a funções com alta frequência, o caso de fluxos turbulentos e transicionais. Para contornar esse entrave, (MOHD-YUSOF, 1997) introduziu uma nova versão, na qual o termo forçante foi modelado independentemente das condições dinâmicas do sistema. Essa versão ficou conhecida como Método de Fronteiras Imersas com Forçamento Direto (*Direct Forcing IBM*).

Em um dos poucos trabalhos a tratar o problema em um contexto de Escoamentos Compressíveis, (TULLIO et al., 2007), utilizando (FADLUN et al., 2000) e (IACCARINO; VERZICCO, 2003), propõe a aplicação desta última versão para fluxos em regime compressível, através da solução da equação de Navier-Stokes com média de Reynolds (RANS) e com modelo de turbulência $k-\omega$. O Forçamento Direto impõe as condições de contorno na superfície imersa e é levado a cabo através da interpolação dos valores das funções em células de fluido vizinhas à fronteira imersa. Neste trabalho é também aplicado um Refinamento Local de Malha especializado para algoritmos de solução da equação RANS. A ordem do método foi verificada, neste caso, para o fluxo compressível e estacionário ao redor de um perfil NACA-0012, com condições $M = 0.8$, $Re = 20$ e ângulo de ataque de 10° . A solução exata considerada foi obtida através do processo de extrapolação de Richardson, a partir

da solução das duas malhas mais finas, e também a partir da consideração de que a solução para malhas suficientemente finas é de Segunda Ordem. Usando estas considerações e hipóteses para a solução exata, a aplicação do método proposto acusa um comportamento de Segunda Ordem para o decaimento dos erros da solução.

Para pontos da geometria não-coincidentes com pontos da malha, (PELLER et al., 2006), apresenta métodos de interpolação envolvendo Mínimos Quadrados como forma de elevar a ordem do procedimento de Forçamento Direto. Entretanto, a ordem atingida nas aplicações tratadas ainda não passa de Segunda-ordem.

2.1.2 Métodos de Alta Ordem

Os esquemas de Diferenças Finitas empregados na discretização espacial das variáveis do escoamento baseiam-se na hipótese de continuidade das funções envolvidas, e contabilizam os valores das funções em diferentes pontos da malha.

Dado que a presença física do corpo imerso é traduzida através da imposição, às funções e suas derivadas, de Condições de Salto, e considerando que a localização das superfícies imersas nas quais esses saltos são introduzidos é, em geral, em pontos não-coincidentes com pontos da malha, essa introdução também acarreta a perda da validade dessas equações; um resultado que reflete um inconveniente dos métodos baseados em Malhas Cartesianas.

No contexto dos Métodos de Interfaces Imersas, algumas das versões mais recentes têm focado especial atenção na derivação de Condições de Salto por meio de técnicas que garantam a manutenção da ordem para esquemas de Alta Ordem empregados.

Dentre esses trabalhos (ZHOU et al., 2006) apresenta uma nova versão do IBM, chamada de Método de Interface e Fronteira Combinadas (MIB - *Matched Interface and Boundary Method*). Ao invés de propor uma correção do esquema através de um cálculo atrelado aos seus próprios coeficientes, este método contabiliza novos valores da função em *Pontos Fictícios*, FP, através de um processo iterativo de balanceamento de parâmetros por

Polinômios de Lagrange (devido a (FORNBERG, 1998)). Esses *Pontos Fictícios* coincidem com os pontos irregulares do domínio. *Pontos Irregulares* são os pontos do domínio que, ao mesmo tempo:

- Pertencem a estêncils que atravessem a fronteira imersa;
- Não pertencem ao subdomínio do pivô do estêncil

Dessa forma, através desta versão, promove-se a dissociação entre a imposição das Condições de Salto na fronteira da geometria imersa e o esquema de discretização das EDP's envolvidas. O autor acusa, para geometrias curvilíneas gerais, manutenção da ordem para esquemas de até 6ª ordem, e o cômputo dos *Pontos Fictícios* segue o modelo da equação abaixo:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L w_{0,i}^- g_i + w_{0,L+1}^- f_2 &= w_{0,1}^+ f_1 + \sum_{i=2}^{L+1} w_{0,i}^+ g_{L+i-1} - [u], \\ \beta^- \left(\sum_{i=1}^L w_{1,i}^- g_i + w_{1,L+1}^- f_2 \right) &= \beta^+ \left(w_{1,1}^+ f_1 + \sum_{i=2}^{L+1} w_{1,i}^+ g_{L+i-1} \right) - [\beta u_x] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Com um par de incógnitas, f_1 e f_2 . Esta equação é resolvida par a par, partindo dos pontos mais interiores em direção aos pontos mais inferiores (em relação à geometria imersa), até que se calcule o número suficiente de pontos fictícios necessários à segundo o esquema representado na figura (1).

Um aprofundamento deste método segue em (YU; ZHOU; WEI, 2007), no qual é feita uma adaptação para o uso de interfaces com superfícies agudas e com descontinuidades geométricas.

(ZHONG, 2007) propõe uma variação do IIM com uma nova proposta para derivação das Condições de Salto. Ao invés de impor as Condições de Salto para o valor da função e todas as suas derivadas, definindo os valores assumidos em ambos os lados das interfaces imersas, este método só o faz para os valores da função e da sua primeira derivada, sendo as Condições de Salto para todas as outras derivadas feitas mediante derivação por

esquemas de Diferenças Finitas Explícitas, naturalmente unilaterais, tomadas a partir dos pontos irregulares sucessivamente vizinhos à interface imersa. Essas diferenciações numéricas levam em conta, além dos valores da função em diferentes pontos da malha, os valores impostos para as condições de menor ordem (o valor da função e da primeira derivada) impostas anteriormente. Usando esquemas com estêncils maiores, o autor cita a possibilidade da derivação de ordem arbitrariamente elevada e independente do problema e da superfície tratada, uma vez que ela trataria apenas do ajuste polinomial da função nos pontos considerados. Uma das desvantagens deste método está no uso de estêncils consideravelmente mais longos à medida que se eleva a ordem dessas derivações, quando comparados com os métodos de menor ordem, aumentando o custo computacional.

Figura 1: Esquema Iterativo para o Cálculo de Pontos Fictícios

(WIEGMANN; BUBE, 2000) estabelece uma outra versão do IIM, conhecida como *Método de Interfaces Imersas com Saltos Explícitos*, no qual são apresentados os meios através dos quais as correções dos esquemas empregados se relacionam às discontinuidades do tipo

salto introduzidas pela presença física da interface. (LINNICK; FASEL, 2005), utilizando-se deste método, propõe uma sistemática obtenção dos saltos de forma numérica, a partir dos valores da função na vizinhança da superfície imersa, aplicando o método a uma série de problemas bidimensionais baseados na formulação *função de corrente-vorticidade* da equação de it Navier-Stokes. Através de uma série de testes, os autores acusam que o método é capaz de manter a ordem de precisão de um esquema de Diferenças Finitas Compactas de 4^a Ordem.

Este último foi o trabalho escolhido para ser testado no período de pesquisa que culminou nessa Dissertação, tendo em vista a condição de similaridade com o contexto de pesquisa do grupo do qual este trabalho faz parte, tanto em termos de metodologia numérica empregada, relativa, em específico, aos esquemas de Diferenças Finitas Compactas e ao rigor dos testes de verificação do código, quanto dos problemas tratados, como, por exemplo, a apreciação da evolução de ondas Tollmien-Schlichting sobre placas planas. Para além dessas vantagens, o método também mostrava uma natural liberdade quanto à migração para uso em esquemas de ordem mais elevada, sendo limitado, em teoria, pela ordem da discretização espacial empregada.

3 *METODOLOGIA NUMÉRICA*

3.1 Discretização Espacial

3.1.1 Descrição do Método de Interfaces Imersas de Alta Ordem Utilizado

Normalmente, os esquemas compactos utilizados nas equações de Dinâmica dos Fluidos são baseados em combinações de séries de Taylor, calculadas a partir de diferentes pontos da malha. Como essas expansões não prevêem, originalmente, funções descontínuas, fica claro que sua validade fica comprometida na presença de interfaces que imponham tais condições ao escoamento, como na figura abaixo:

Figura 2: Exemplo de descontinuidade do tipo salto no ponto x_α

O Método de Interfaces Imersas proposto por (LINNICK; FASEL, 2005) parte da idéia de que, através de correções apropriadas, é possível reestabelecer a validade dos esquemas empregados, quando da presença de interfaces imersas na malha computacional.

A necessidade da correção fica evidenciada no seguinte exemplo de cálculo de primeira derivada espacial. Considere o esquema de Diferenças Finitas abaixo:

$$\begin{aligned} L_{1,i-1}f'(x(i-1)) + L_{1,i}f'(x(i)) + L_{1,i+1}f'(x(i+1)) = \\ = R_{1,i-1}f(x(i-1)) + R_{1,i}f(x(i)) + R_{1,i+1}f(x(i+1)) \end{aligned} \quad (3.1)$$

A presença da interface imersa pode resultar em duas situações distintas, segundo a posição do ponto do estêncil que intercepta o interior da geometria.

Assumindo que o ponto i é sempre o pivô do esquema centrado, o ponto em questão pode ser tanto $i+1$ quanto $i-1$. Para denotar a primeira situação, o sobrescrito $^{\ominus}$ será utilizado como índice de f^n , $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, com o sobrescrito 0 referindo-se ao valor da função em si. Para a segunda situação, será utilizado o sobrescrito $^{\oplus}$. Cabe aqui a explicação quanto a essas definições: o sinal negativo denota o esquema baseado no ramo à montante da interface imersa, enquanto que o sinal positivo refere-se ao ramo à sua jusante. Portanto, no que segue:

- $f^{0\ominus}(x(i+m)) \equiv$ Valor de $f(x(i+m))$ baseado no ramo de função à montante da interface imersa; ou, simplesmente, ramo negativo;
- $f^{0\oplus}(x(i+m)) \equiv$ Valor de $f(x(i+m))$ baseado no ramo de função à jusante da interface imersa; ou, simplesmente, ramo positivo;
- $f^{n\ominus}(x(i+m)) \equiv$ Valor da n -ésima derivada de $f(x(i+m))$ baseado no ramo de função à montante da interface imersa; ou, simplesmente, ramo negativo;
- $f^{n\oplus}(x(i+m)) \equiv$ Valor da n -ésima derivada de $f(x(i+m))$ baseado no ramo de função à jusante da interface imersa; ou, simplesmente, ramo positivo.

3.1.1.1 Correção para o esquema baseado no ramo de função à montante da interface imersa

Usando as seguintes simplificações:

$$\begin{aligned} f^{\ominus,\oplus}(x(i+1)) &= f_{i+1}^{\ominus,\oplus} \\ f'^{\ominus,\oplus}(x(i+1)) &= f'_{i+1}^{\ominus,\oplus} \end{aligned} \quad (3.2)$$

A equação (3.1) fica:

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}{}^{\ominus} + L_{1,i}f'_i{}^{\ominus} + L_{1,i+1}f'_{i+1}{}^{\ominus} = R_{1,i-1}f_{i-1}{}^{\ominus} + R_{1,i}f_i{}^{\ominus} + R_{1,i+1}f_{i+1}{}^{\ominus} \quad (3.3)$$

Na qual:

- $L, R_{1,i-m} \equiv$ Coeficiente do lado esquerdo/direito do esquema de cálculo de primeira derivada, para o ponto $i - m$

Essa equação é válida, conforme descrito anteriormente, dado que o ramo da função seja contínuo na região dos pontos considerados. Com a introdução da interface imersa na região $x(i) < x_\alpha < x(i+1)$, apresenta-se a necessidade de efetuar uma correção ao esquema no ponto $x(i+1)$ para que a equação continue válida. Explica-se: após aplicadas as condições de contorno e de interior na geometria, os valores que são efetivamente contabilizados pelo algoritmo no ponto $i+1$ são os relativos ao ramo positivo, que passa a vigorar na região da geometria. Dessa forma, após a inclusão da fronteira imersa, a equação que de fato é contabilizada pelo algoritmo passa a ser:

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}{}^{\ominus} + L_{1,i}f'_i{}^{\ominus} + L_{1,i+1}f'_{i+1}{}^{\oplus} = R_{1,i-1}f_{i-1}{}^{\ominus} + R_{1,i}f_i{}^{\ominus} + R_{1,i+1}f_{i+1}{}^{\oplus} \quad (3.4)$$

Este empecilho é contornado pela introdução, na equação do esquema, de Termos de Correção de Salto, cuja definição encontra-se a seguir. Originalmente em (LINNICK; FASEL, 2005), a este termo refere-se o símbolo $J_{\alpha,i+m}^n$, que corresponde à correção do valor f_{i+m}^n , com descontinuidade no ponto x_α . Aqui estende-se a definição para incluir os

sobrescritos $^{\ominus}$ e $^{\oplus}$, conforme convenções a seguir:

- $J_{\alpha, i+m}^{n\ominus} \equiv$ Termo de Correção de Salto do esquema compacto baseado no ramo negativo, relativo à correção do valor da n -ésima derivada no ponto $i + m$;
- $J_{\alpha, i+m}^{n\oplus} \equiv$ Termo de Correção de Salto do esquema compacto baseado no ramo positivo, relativo à correção do valor da n -ésima derivada no ponto $i + m$.

Nesse ponto, a pergunta que se faz é a seguinte: em que medida convém denominar estes termos como termos de correção de saltos? Precisamente, quais são esses saltos? Analisando a figura (2), vemos que há dois valores possíveis para $f(x(i+1))$. São os valores baseados em cada um dos ramos, negativo e positivo, partindo da suposição de que cada um desses ramos seja contínuo até este ponto. Expandindo esses valores, denominados agora $f_{i+1}^{\ominus}$ e $f_{i+1}^{\oplus}$, através de séries de Taylor em torno de x_{α} , temos:

$$f_{i+1}^{\oplus} = f_{\alpha}^{\oplus} + f_{\alpha}^{1\oplus} dx_{\alpha}^{+} + \frac{f_{\alpha}^{2\oplus} (dx_{\alpha}^{+})^2}{2!} + \dots + \frac{f_{\alpha}^{n\oplus} (dx_{\alpha}^{+})^n}{n!} \quad (3.5)$$

$$f_{i+1}^{\ominus} = f_{\alpha}^{\ominus} + f_{\alpha}^{1\ominus} dx_{\alpha}^{+} + \frac{f_{\alpha}^{2\ominus} (dx_{\alpha}^{+})^2}{2!} + \dots + \frac{f_{\alpha}^{n\ominus} (dx_{\alpha}^{+})^n}{n!} \quad (3.6)$$

Com:

$$\begin{aligned} dx_{\alpha}^{+} &= x(i+1) - x^{\alpha} \\ f_{\alpha}^{n\oplus, \ominus} &= \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{+, -}} f^n(x) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Criando um termo que relacione $f_{i+1}^{\oplus}$ a $f_{i+1}^{\ominus}$, e a este dando o nome de $J_{\alpha, i+m}^{0\ominus}$:

$$J_{\alpha, i+1}^{0\ominus} = f_{i+1}^{\oplus} - f_{i+1}^{\ominus} \quad (3.8)$$

Após subtração das equações e cancelamento dos termos comuns, fazemos, então, surgir a seguinte expressão:

$$J_{\alpha, i+1}^{0\ominus} = [f_{\alpha}^0] + [f_{\alpha}^1] dx_{\alpha}^{+} + [f_{\alpha}^2] \frac{(dx_{\alpha}^{+})^2}{2!} + \dots + [f_{\alpha}^n] \frac{(dx_{\alpha}^{+})^n}{n!} \quad (3.9)$$

Na qual:

$$[f_{\alpha}^n] = \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{+}} f^n(x) - \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{-}} f^n(x)$$

A análise dessa equação revela a presença explícita, termo a termo, dos saltos impostos aos valores $f^n(x)$ pela descontinuidade decorrente da introdução da interface imersa no ponto x_α . Ficam claros, assim, tanto o propósito da denominação do termo $J_{\alpha,i+m}^{0\ominus}$ quanto o papel dos saltos acarretados à função $f(x)$ no referido ponto x_α .

Procedendo analogamente, obtemos o seguinte resultado para o termo $J_{\alpha,i+m}^{1\ominus}$:

$$J_{\alpha,i+1}^{1\ominus} = [f_\alpha^1] + [f_\alpha^2]dx_\alpha^+ + [f_\alpha^3]\frac{(dx_\alpha^+)^2}{2!} + \cdots + [f_\alpha^n]\frac{(dx_\alpha^+)^{n-1}}{n-1!} \quad (3.10)$$

Na qual:

- $[f_\alpha^n] \equiv$ Termo de Salto, em relação a n -ésima derivada, ou em relação à própria função, quando $n = 0$

Esse desenvolvimento permite, então, que se faça a apropriada correção ao esquema centrado em x_i . Seguem abaixo, para comparação:

- A equação contabilizada pelo algoritmo, invalidamente, após a introdução da interface imersa:

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}{}^\ominus + L_{1,i}f'_i{}^\ominus + L_{1,i+1}f'_{i+1}{}^\oplus = R_{1,i-1}f_{i-1}{}^\ominus + R_{1,i}f_i{}^\ominus + R_{1,i+1}f_{i+1}{}^\oplus \quad (3.11)$$

- A equação que seria válida se o ramo negativo fosse contínuo em todo o estêncil, incluindo o ponto x_{i+1} :

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}{}^\ominus + L_{1,i}f'_i{}^\ominus + L_{1,i+1}f'_{i+1}{}^\ominus = R_{1,i-1}f_{i-1}{}^\ominus + R_{1,i}f_i{}^\ominus + R_{1,i+1}f_{i+1}{}^\ominus \quad (3.12)$$

- A equação resultante da substituição dos termos $f_{i+1}^{n\ominus}$, da equação válida, pelos termos $f_{i+1}^{n\oplus}$ conjuntamente com os Termos de Correção de Saltos, com validade retomada:

$$\begin{aligned} L_{1,i-1}f'_{i-1}{}^\ominus + L_{1,i}f'_i{}^\ominus + L_{1,i+1}f'_{i+1}{}^\oplus = \\ = R_{1,i-1}f_{i-1}{}^\ominus + R_{1,i}f_i{}^\ominus + R_{1,i+1}f_{i+1}{}^\oplus - (R_{1,i+1}J_{\alpha,i+1}^{0\ominus} + L_{1,i+1}J_{\alpha,i+1}^{1\ominus}) \end{aligned} \quad (3.13)$$

O requisito da ordem a ser alcançada determina o número n nas equações acima. Nos esquemas para o cálculo da primeira derivada, por exemplo, o termo R_{i+1} é proporcional a $\frac{1}{dx}$, ou seja, de ordem -1 . Dessa forma, para garantirmos que o termo combinado, $R_{i+1}J_{\alpha,i+1}^{0\ominus}$, seja da ordem do esquema, é preciso que o Termo de Correção de Saltos, $J_{\alpha,i+1}^{0\ominus}$, seja, então, calculado com uma ordem de grandeza imediatamente acima. Nessas condições, as Séries de Taylor precisam ser truncadas também após seus n -ésimos termos, garantindo uma ordem $n + 1$ para o termo $J_{\alpha,i+1}^{0\ominus}$. Isso equivale a dizer que cada termo constante de sua fórmula precisa ser igualmente garantido com essa mesma ordem. Analisando a equação (3.9), percebe-se que seus termos são combinações de dois outros termos, $[f_\alpha^n]$ e $\frac{(dx_\alpha^+)^n}{n!}$. Devido ao fato de que, em paridade de ordem do termo $[f_\alpha^n]$, cada avanço do índice n permite que o elemento dx_α^+ eleve a ordem do termo $[f_\alpha^n]\frac{(dx_\alpha^+)^n}{n!}$ também em uma ordem, para que se mantenha a ordem de cada um desses termos em um valor fixo, esse avanço de n permite que se calculem os elementos $[f_\alpha^n]$ com ordem gradualmente menor. Portanto, se o esquema é de quarta ordem, o cálculo da primeira derivada espacial requer o cálculo dos Termos de Salto com quinta ordem. Similarmente, para o cálculo da segunda derivada, o requisito é de que as aproximações destes termos seja de sexta ordem.

Passe-se, então, para a análise da ordem de grandeza do termo $J_{\alpha,i+1}^{1\ominus}$. No termo combinado, $L_{i+1}J_{\alpha,i+1}^{1\ominus}$, ele aparece multiplicando um termo de ordem 0, L_{i+1} . Isso implica que sua ordem seja da mesma ordem do esquema compacto, ou seja, de ordem n , com as séries de Taylos sendo truncadas após seu $(n - 1)$ -ésimo termo. Adicionalmente, constata-se que o cálculo dos termos $[f_\alpha^n]$, efetuados com a ordem de precisão requerida pela etapa anterior, já atende a necessidade imposta para esta etapa. Isso é facilmente comprovado, dado que, conforme frisado anteriormente, os termos $[f_\alpha^n]$ têm a necessidade de serem calculados com precisão gradualmente menor conforme se avança o índice n . Assim, o termo $[f_\alpha^0]$, que, para atender a necessidade do termo $J_{\alpha,i+1}^{0\ominus}$, é calculado com ordem $n + 1$, permite que se calcule o termo $[f_\alpha^1]$ com ordem n , atendendo igualmente ao requisito anterior, referente ao cálculo do termo $J_{\alpha,i+1}^{1\ominus}$, de acordo com a equação (3.10).

Contudo, ainda há uma questão a ser respondida. Mesmo que a imposição das condições de contorno defina os valores da função ou de alguma de suas derivadas na superfície imersa, nem todos os valores necessários para o cálculo dos Termos de Salto são conhecidos a cada iteração temporal. Como conseguir, então, as aproximações para essas valores? A solução proposta por (LINNICK; FASEL, 2005) é aproximá-los pelos valores da própria função na vizinhança do ponto imerso, que são sempre conhecidos a cada iteração.

O cálculo dessas aproximações é iniciado com a representação, por expansões em Séries de Taylor, dos valores da função em pontos sucessivos e vizinhos ao ponto de descontinuidade. Também conforme (LINNICK; FASEL, 2005), o primeiro ponto da vizinhança do ponto imerso é desconsiderado. O desenvolvimento segue abaixo:

Lembrando que para o cálculo de primeira derivada as aproximações em questão devem ser de ordem $n + 1$, o sistema procurado tem a forma ($n + 1$ equações):

$$\begin{aligned}
 f(x_\alpha) &= c_{\alpha,1}f(x_\alpha) + c_{i-1,1}f(x_{i-1}) + c_{i-2,1}f(x_{i-2}) + \dots + c_{i-n,1}f(x_{i-n}) \\
 f^1(x_\alpha) &= c_{\alpha,2}f(x_\alpha) + c_{i-1,2}f(x_{i-1}) + c_{i-2,2}f(x_{i-2}) + \dots + c_{i-n,2}f(x_{i-n}) \\
 \vdots(x_\alpha) &= \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \\
 f^n(x_\alpha) &= c_{\alpha,n}f(x_\alpha) + c_{i-1,n}f(x_{i-1}) + c_{i-2,n}f(x_{i-2}) + \dots + c_{i-n,n}f(x_{i-n})
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Como exemplo, para a segunda derivada, com esquema de ordem n , o sistema respectivo é ($n + 2$ equações):

$$\begin{aligned}
 f(x_\alpha) &= c_{\alpha,1}f(x_\alpha) + c_{i-1,1}f(x_{i-1}) + \dots + c_{[i-(n+1)],1}f(x_{[i-(n+1)]}) \\
 f^1(x_\alpha) &= c_{\alpha,2}f(x_\alpha) + c_{i-1,2}f(x_{i-1}) + \dots + c_{[i-(n+1)],2}f(x_{[i-(n+1)]}) \\
 \vdots(x_\alpha) &= \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \quad + \quad \quad \quad \vdots \\
 f^{(n+1)}(x_\alpha) &= c_{\alpha,(n+1)}f(x_\alpha) + c_{i-1,(n+1)}f(x_{i-1}) + \dots + c_{[i-(n+1)],(n+1)}f(x_{[i-(n+1)]})
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Voltando ao sistema (3.14), representando-o matricialmente, com $f^n(x_\alpha) = f_\alpha^n$, $f(x_{i-m}) = f_{i-m}^0$, obtem-se:

$$\begin{pmatrix} f_\alpha^0 \\ f'_\alpha \\ \vdots \\ f_\alpha^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_{\alpha,2} & c_{i-1,2} & c_{i-2,2} & \dots & c_{i-n,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{\alpha,n} & c_{i-1,n} & c_{i-2,n} & \dots & c_{i-n,n} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_\alpha^0 \\ f_{i-1}^0 \\ \vdots \\ f_{i-n}^0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Por sua vez, o sistema de equações originado pelas Séries de Taylor é da forma:

$$\begin{pmatrix} f_\alpha^0 \\ f_{i+1}^0 \\ \vdots \\ f_{i+n}^0 \end{pmatrix} = [M_\alpha^-]_{(n+1) \times (n+1)} \times \begin{pmatrix} f_\alpha^0 \\ f'_\alpha \\ \vdots \\ f_\alpha^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

com:

$$[M_\alpha^-] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -(dx_\alpha^- + d_x) & \frac{(dx_\alpha^- + d_x)^2}{2!} & \dots & (-1)^n \frac{(dx_\alpha^- + d_x)^n}{n!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & -(dx_\alpha^- + nd_x) & \frac{(dx_\alpha^- + nd_x)^2}{2!} & \dots & (-1)^n \frac{(dx_\alpha^- + nd_x)^n}{n!} \end{pmatrix}$$

Atentando para o fato de que, neste caso, as expansões em Séries de Taylor são atrasadas, com $dx_\alpha^- = x_\alpha - x_i$.

Chamando:

$$[C] = C_{n,n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_{\alpha,2} & c_{i-1,2} & c_{i-2,2} & \dots & c_{i-n,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{\alpha,n} & c_{i-1,n} & c_{i-2,n} & \dots & c_{i-n,n} \end{pmatrix}$$

E:

$$[D] = [M_\alpha^-]$$

Podemos passar de um sistema a outro:

$$(f) = [D](f_\alpha^n) \quad (3.18)$$

$$[D]^{-1}(f) = [D]^{-1}[D](f_\alpha^n) \quad (3.19)$$

E, portanto, dado que $[D]$ seja matriz inversível (o que de fato ocorre, uma vez que suas colunas formam vetores L.I), temos que:

$$[C] = [D]^{-1} \quad (3.20)$$

Dessa forma, são obtidos os coeficientes das aproximações dos valores da função $f(x)$ e de suas derivadas $f^n(x)$ para o ponto α .

Computacionalmente, a inversão foi implementada através de uma rotina de decomposição LU da matriz $[D]$.

3.1.1.2 Correção para o esquema baseado no ramo de função à jusante da interface imersa

O desenvolvimento, nesse caso, segue o padrão anterior. A equação do esquema de cálculo da primeira derivada, sem interface imersa:

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}^\oplus + L_{1,i}f'_i^\oplus + L_{1,i+1}f'_{i+1}^\oplus = R_{1,i-1}f_{i-1}^\oplus + R_{1,i}f_i^\oplus + R_{1,i+1}f_{i+1}^\oplus \quad (3.21)$$

Com a introdução da interface imersa, a equação efetivamente computada passa a ser:

$$L_{1,i-1}f'_{i-1}^\ominus + L_{1,i}f'_i^\oplus + L_{1,i+1}f'_{i+1}^\oplus = R_{1,i-1}f_{i-1}^\ominus + R_{1,i}f_i^\oplus + R_{1,i+1}f_{i+1}^\oplus \quad (3.22)$$

Expandindo os valores do ponto interceptado pela geometria em séries de Taylor, dessa vez atrasadas, ao redor de x_α :

- Aproximação dos valores da função:

$$f_{i-1}^{\oplus} = f_{\alpha}^{\oplus} + f_{\alpha}^{1\oplus} dx_{\alpha}^{-} + \frac{f_{\alpha}^{2\oplus} (dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n-1)}] \frac{f_{\alpha}^{n\oplus} (dx_{\alpha}^{-})^{(n-1)}}{(n-1)!} \quad (3.23)$$

$$f_{i-1}^{\ominus} = f_{\alpha}^{\ominus} + f_{\alpha}^{1\ominus} dx_{\alpha}^{-} + \frac{f_{\alpha}^{2\ominus} (dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n-1)}] \frac{f_{\alpha}^{n\ominus} (dx_{\alpha}^{-})^{(n-1)}}{(n-1)!} \quad (3.24)$$

- Aproximação dos valores da primeira derivada:

$$f_{i-1}^{1\oplus} = f_{\alpha}^{1\oplus} - f_{\alpha}^{2\oplus} dx_{\alpha}^{-} + \frac{f_{\alpha}^{3\oplus} (dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n-1)}] \frac{f_{\alpha}^{n\oplus} (dx_{\alpha}^{-})^{(n-1)}}{(n-1)!} \quad (3.25)$$

$$f_{i-1}^{1\ominus} = f_{\alpha}^{1\ominus} - f_{\alpha}^{2\ominus} dx_{\alpha}^{-} + \frac{f_{\alpha}^{3\ominus} (dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n-1)}] \frac{f_{\alpha}^{n\ominus} (dx_{\alpha}^{-})^{(n-1)}}{(n-1)!} \quad (3.26)$$

Com:

$$\begin{aligned} dx_{\alpha}^{-} &= x_{\alpha} - x(i-1) \\ f_{\alpha}^{n\oplus, \ominus} &= \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{+, -}} f^n(x) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Com as definições:

$$\begin{aligned} J_{\alpha, i-1}^{0\oplus} &= f_{i-1}^{\ominus} - f_{i-1}^{\oplus} \\ J_{\alpha, i-1}^{1\oplus} &= f_{i-1}^{\ominus} - f_{i-1}^{\oplus} \end{aligned}$$

Os Termos de Correção de Saltos são expressos, portanto, por:

$$J_{\alpha, i-1}^{0\oplus} = -[f_{\alpha}^0] + [f_{\alpha}^1] dx_{\alpha}^{-} - [f_{\alpha}^2] \frac{(dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n+1)}] [f_{\alpha}^n] \frac{(dx_{\alpha}^{-})^n}{n!} \quad (3.28)$$

$$J_{\alpha, i-1}^{1\oplus} = -[f_{\alpha}^1] + [f_{\alpha}^2] dx_{\alpha}^{-} - [f_{\alpha}^3] \frac{(dx_{\alpha}^{-})^2}{2!} + \dots + [-1^{(n)}] [f_{\alpha}^n] \frac{(dx_{\alpha}^{-})^{(n-1)}}{(n-1)!} \quad (3.29)$$

Na qual:

$$[f_{\alpha}^n] = \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{+}} f^n(x) - \lim_{x \rightarrow x_{\alpha}^{-}} f^n(x)$$

Por fim, o esquema corrigido:

$$\begin{aligned} L_{1, i-1} f_{i-1}'^{\ominus} + L_{1, i} f_i'^{\oplus} + L_{1, i+1} f_{i+1}'^{\oplus} &= \\ &= R_{1, i-1} f_{i-1}^{\ominus} + R_{1, i} f_i^{\oplus} + R_{1, i+1} f_{i+1}^{\oplus} - (R_{1, i-1} J_{\alpha, i-1}^{0\oplus} + L_{1, i-1} J_{\alpha, i-1}^{1\oplus}) \end{aligned} \quad (3.30)$$

3.1.2 Diferenças Finitas Compactas

Os esquemas usados para a Discretização das Derivadas Espaciais foram esquemas de Diferenças Finitas Compactas com Resolução Espectral, conforme apresentados em (LELE, 1992).

São esquemas que formam um sistema matricial tridiagonal de equações, cuja resolução é feita implicitamente por algoritmos de solução tais quais o Algoritmo de Thomas. Por essa característica de resolução implícita do conjunto de equações, o valor que a função assume em um ponto tem influência direta sobre o resultado da derivação não somente em si próprio, mas também sobre todos os demais pontos do sistema.

Os esquemas empregados seguem os esquemas abaixo, em acordo com a nomenclatura introduzida na seção anterior:

3.1.2.1 Primeira Derivada

Para a Primeira Derivada, são utilizados dois esquemas, sendo um descentrado, de 3ª Ordem, para os pontos da fronteira do domínio ($i = 1$ e $i = i_{max}$), e outro centrado, de 4ª Ordem, para os demais pontos do interior do domínio ($1 < i < i_{max}$), como segue:

para $i = 1$:

$$L_{1,1}f'_1 + L_{1,2}f'_2 = R_{1,1}f_1 + R_{1,2}f_2 + R_{1,3}f_3 + R_{1,4}f_4 \quad (3.31)$$

Na qual:

$L_{1,1}$	$L_{1,2}$	$R_{1,1}$	$R_{1,2}$	$R_{1,3}$	$R_{1,4}$
1	3	$-17a_1$	$9a_1$	$9a_1$	$-1a_1$
$a_1 = \frac{1}{6dx}$					

para $1 < i < i_{max}$:

$$L_{1,(i-1)}f'_{(i-1)} + L_{1,i}f'_i + L_{1,(i+1)}f'_{(i+1)} = R_{1,(i-1)}f_{(i-1)} + R_{1,i}f_i + R_{1,(i+1)}f_{(i+1)} \quad (3.32)$$

Na qual:

$L_{1,(i-1)}$	$L_{1,i}$	$L_{1,(i+1)}$	$R_{1,(i-1)}$	$R_{1,i}$	$R_{1,(i+1)}$
1	4	1	$-3b_1$	0	$3b_1$
$b_1 = \frac{1}{dx}$					

para $i = i_{max}$:

$$\begin{aligned} L_{1,(i_{max}-1)}f'_{(i_{max}-1)} + L_{1,i_{max}}f'_{i_{max}} &= \\ &= R_{1,(i_{max}-3)}f_{i_{max}-3} + R_{1,(i_{max}-2)}f_{i_{max}-2} + R_{1,(i_{max}-1)}f_{i_{max}-1} + R_{1,i_{max}}f_{i_{max}} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Na qual:

$L_{1,i_{max}}$	$L_{1,(i_{max}-1)}$	$R_{1,i_{max}}$	$R_{1,(i_{max}-1)}$	$R_{1,(i_{max}-2)}$	$R_{1,(i_{max}-3)}$
1	3	$17a_1$	$-9a_1$	$-9a_1$	$1a_1$
$a_1 = \frac{1}{6dx}$					

3.1.2.2 Segunda Derivada

As considerações seguem os moldes daquelas da seção anterior:

para $i = 1$:

$$L_{2,1}f''_1 + L_{2,2}f''_2 = R_{2,1}f_1 + R_{2,2}f_2 + R_{2,3}f_3 + R_{2,4}f_4 \quad (3.34)$$

Na qual:

$L_{2,1}$	$L_{2,2}$	$R_{2,1}$	$R_{2,2}$	$R_{2,3}$	$R_{2,4}$
1	11	$39a_2$	$-81a_2$	$45a_2$	$-3a_2$
$a_2 = \frac{1}{3dx^2}$					

para $1 < i < i_{max}$:

$$L_{2,(i-1)}f''_{(i-1)} + L_{2,i}f''_i + L_{2,(i+1)}f''_{(i+1)} = R_{2,(i-1)}f_{(i-1)} + R_{2,i}f_i + R_{2,(i+1)}f_{(i+1)} \quad (3.35)$$

Na qual:

$L_{2,(i-1)}$	$L_{2,i}$	$L_{2,(i+1)}$	$R_{2,(i-1)}$	$R_{2,i}$	$R_{2,(i+1)}$
1	10	1	$1b_2$	$-2b_2$	$1b_2$
$b_2 = \frac{12}{dx^2}$					

para $i = i_{max}$:

$$\begin{aligned} L_{2,(i_{max}-1)}f''_{(i_{max}-1)} + L_{2,i_{max}}f''_{i_{max}} &= \\ &= R_{2,(i_{max}-3)}f_{i_{max}-3} + R_{2,(i_{max}-2)}f_{i_{max}-2} + R_{2,(i_{max}-1)}f_{i_{max}-1} + R_{2,i_{max}}f_{i_{max}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Na qual:

$L_{2,i_{max}}$	$L_{2,(i_{max}-1)}$	$R_{2,i_{max}}$	$R_{2,(i_{max}-1)}$	$R_{2,(i_{max}-2)}$	$R_{2,(i_{max}-3)}$
1	11	$39a_2$	$-81a_2$	$45a_2$	$-3a_2$
$a_2 = \frac{1}{3dx^2}$					

3.1.2.3 Diretrizes para a Análise de Eficiência de Solução das Discretizações Espaciais Empregadas

(LELE, 1992) apresenta gráficos referentes à eficiência de solução (*resolving efficiency*) das discretizações espaciais propostas, e de cujo trabalho foram extraídos os Esquemas

Compactos aqui empregados. Esses gráficos possibilitam, dada uma certa exigência de precisão, saber o número mínimo de *Pontos por Período* necessário para cada esquema utilizado.

Tomando, por exemplo, dados para esquemas centrados de primeira e segunda derivadas com ordem de precisão formal igual à dos esquemas aqui empregados, obtém-se os seguintes dados de referência:

ε	10^{-2}	10^{-3}
$e_1(\varepsilon)$	0, 23	0, 13
$e_2(\varepsilon)$	0, 31	0, 17

Tabela 1: Eficiência de Solução para dois Esquemas Compactos de Referência

Essas eficiências e_1 e e_2 são funções do erro ε e levam ao cálculo de duas variáveis, w_f e w_s , que designam os maiores comprimentos de onda capazes de manter a precisão absoluta desejada, respectivamente para primeira e segunda derivadas. Esses comprimentos de onda relacionam-se ao número de Pontos por Período através de uma simples relação, $w_{f,s} = \frac{2\pi}{N}$, na qual N é o número de pontos do domínio. Os valores de N relativos aos dados de referência anteriores estão localizados na tabela (2). Como $w_{f,s}$ e N são grandezas inversamente proporcionais, um valor de maior comprimento de onda permitido estabelece um correspondente valor mínimo de Pontos por Período necessários para a manutenção de uma certa eficiência de solução, diretamente relacionada com a precisão absoluta.

N para $\varepsilon = 10^{-2}$	N para $\varepsilon = 10^{-3}$
1ª Derivada	
9 pontos/ 2π	16 pontos/ 2π
2ª Derivada	
7 pontos/ 2π	11 pontos/ 2π

Tabela 2: Pontos por Período Mínimos para dois Esquemas Compactos de Referência em Relação a Eficiências de Solução 10^{-2} e 10^{-3}

3.1.3 Teste de Refinamento de Malha

A metodologia dos testes para análise da Ordem de Precisão do IIM adotado envolve a análise dos erros segundo as duas normas abaixo:

$$L_1 = \left[\sum_{n=1}^j |f_{ex}(n) - f_{calc}(n)| \right] / j \quad (3.37)$$

$$L_\infty = \max |f_{ex}(n) - f_{calc}(n)| \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, j \quad (3.38)$$

Nas quais o índice n representa o número de nós da malha, $f_{ex}(n)$ o valor de referência e $f_{calc}(n)$ o valor numérico, respectivamente no ponto n .

Cada teste envolve a simulação em domínios computacionais com espaçamentos progressivamente menores. A diminuição foi feita com fator 2, ou seja, o espaçamento da malha, a cada novo teste, era a metade do espaçamento da malha anterior.

4 *RESULTADOS*

4.1 Solução da Equação de Calor Unidimensional

O primeiro teste de implementação do método foi feito para a solução da Equação de Calor Unidimensional sujeita à condição física inicial unitária, $f(x, 0) = 1$.

O sistema é representado pela seguinte equação:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

Sujeito a condições de contorno e inicial:

$$\begin{cases} f(x_{\alpha 1}, t) = 0 \\ f(x_{\alpha 2}, t) = 0 \\ f(x, 0) = 1 \end{cases} \quad (4.2)$$

Sob essas condições, esse sistema apresenta solução analítica igual a:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4}{\pi} \left(\frac{e^{-\lambda kt}}{2n+1} \right) \text{sen} \left[(2n+1)\pi \left(\frac{x - x_{\alpha 1}}{x_{\alpha 2} - x_{\alpha 1}} \right) \right] \quad (4.3)$$

Em que:

$$\lambda = \left[\frac{(2n+1)\pi}{x_{\alpha 2} - x_{\alpha 1}} \right] \quad (4.4)$$

Essa solução analítica, nos testes subseqüentes, foi truncada após $n = 10000$.

O domínio computacional simulado teve comprimento 10, com $dt = 10^{-3}$ e $\nu = 10^{-1}$, e

os pontos das descontinuidades (não coincidentes com pontos de malha) foram localizados em:

$$\begin{aligned}x_{\alpha 1} &= 1.1555 \\x_{\alpha 2} &= 8.4455\end{aligned}\tag{4.5}$$

Conjuntamente com o esquema espacial de 4ª ordem adotado, a integração temporal foi feita através de discretização por um método de Runge-Kutta, igualmente de 4ª ordem. Cada uma das seguintes equações representa um sub-passo deste processo, já adaptado ao problema em questão:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(x, t_n) = f(x, t_n) + \left(\frac{dt}{2}\right) \nu f_{xx}(x) \\ f_2(x, t_n) = f(x, t_n) + \left(\frac{dt}{2}\right) \nu f_{1,xx}(x) \\ f_3(x, t_n) = f(x, t_n) + (dt) \nu f_{2,xx}(x) \\ f(x, t_{n+1}) = f(x, t_n) + \left(\frac{dt}{6}\right) [\nu f_{xx}(x) + 2(\nu f_{1,xx}(x) + \nu f_{2,xx}(x)) + \nu f_{3,xx}(x)] \end{array} \right. \tag{4.6}$$

Ao final de cada sub-passo, novos valores de derivadas espaciais são calculados. Esses valores são contabilizados pelo sub-passo seguinte, iterativamente, até que o sub-passo final retorne os valores do passo completo no tempo, representado por dt .

A condição inicial da solução numérica foi a solução analítica para o tempo $t = 99dt$ do Problema de Valor Inicial descrito acima, e a seguir seguem os perfis das soluções para as malhas mais e menos refinada, respectivamente. Nestes gráficos:

- As linhas referem-se às curvas das soluções aproximadas para os três tempos simulados, com interpolação entre pontos feitas em MATLAB;

- Os sinais de círculo vermelhos representam a solução calculada;
- As linhas e os pontos azuis representam a solução analítica;

Figura 3: Domínio com 21 pontos

Figura 4: Domínio com 321 pontos

4.1.1 Teste de Refinamento de Malha

A seguir, seguem os gráficos referentes à evolução dos erros para refinamentos progressivos de malha, em cada um dos três tempos simulados. O conjunto dessas malhas está listado na tabela (3):

Malha	Nº de Pontos
1	21
2	41
3	81
4	161
5	321

Tabela 3: Conjunto de Malhas Testadas para a Solução da Equação do Calor Unidimensional

Figura 5: Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $100dt$ (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

A solução do sistema apresenta uma característica trigonométrica, conferida pela expressão $\sin[(2n + 1)\pi(\frac{x-x_{\alpha 1}}{x_{\alpha 2}-x_{\alpha 1}})]$. O argumento da função $\sin$ nesta expressão depende exclusivamente do valor de $(\frac{x-x_{\alpha 1}}{x_{\alpha 2}-x_{\alpha 1}})$, e vai de 0 a π para x variando de $x_{\alpha 1}$ a $x_{\alpha 2}$. Dessa forma, o intervalo compreendido entre os referidos pontos de descontinuidade determina o número de pontos por período presentes para cada malha testada. Em termos de pontos por período mínimos necessários para manutenção da ordem do esquema de discretiza-

ção espacial empregado, a malha mais crítica é a malha de 21 pontos. Para esta malha, constata-se que o número de pontos por período, com $x_{\alpha 1} = 1.1555$ e $x_{\alpha 2} = 8.4455$, é cerca de 30. Conforme (LELE, 1992), este número de pontos por período já é suficiente para garantir a referida manutenção de ordem do esquema.

Desta forma, esperava-se que o decaimento dos erros em todos os gráficos evoluísse progressivamente conforme malhas mais refinadas fossem testadas. O gráfico (5), referente ao tempo $100dt$, demonstra que há uma contradição a esta expectativa logo entre as malhas menos refinadas, de 21 e de 41 pontos. Nesta região, o erro, que deveria decair, aumenta.

Além disso, entre as demais malhas, a ordem do decaimento do erro, que deveria ter a mesma ordem do esquema, só aparenta 4ª ordem na mudança da malha com 41 para a malha com 81 pontos, sendo a ordem do decaimento entre as malhas restantes em torno de 3ª.

Os gráficos referentes aos tempos $1000dt$ e $10000dt$, respectivamente figuras (6) e (7), também apresentam uma mudança de tendência de decaimento, atingindo ordens de decaimento que variam de 3ª a até mesmo ordem maior que 4ª.

Esse comportamento justificou o emprego de uma metodologia que verificasse mais a fundo a influência do Método de Interfaces Imersas adotado na eficiência de solução do esquema de discretização empregado. Essa metodologia é apresentada a seguir.

Figura 6: Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $1000dt$ (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 7: Solução da Equação do Calor Unidimensional: Erros Para o Tempo $10000dt$ (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

4.2 Análise Fragmentada do Método

A metodologia de testes a seguir visou individualizar as etapas que compõe o IIM adotado. Essa individualização proporcionaria identificar os possíveis responsáveis pelos comportamentos obtidos na aplicação da seção anterior.

A aplicação constante desta seção resume-se ao cálculo das duas primeiras derivadas de duas funções analíticas, no caso, $\text{sen}(x)$ e $\text{tanh}(x)$. Essa aplicação forneceu meios para que se efetuasse o cálculo dos Termos de Salto não somente pela via numérica proposta pelo IIM adotado, mas também de maneira analítica. Esse fato foi essencialmente útil em termos de análise de deficiências na formulação matemática do método. Além disso, caso o comportamento de decaimento dos erros decorrentes da aplicação dos Termos de Salto analíticos fosse semelhante ao comportamento do decaimento dos erros para a solução sem a aplicação do IIM, saber-se-ia que o problema estaria ligado não à natureza da Correção de Saltos empregada, mas sim à capacidade do cálculo numérico dos próprios Termos de Salto que a compõe, o que é feito através de ajustes polinomiais. Ainda assim, neste último caso, a deficiência poderia ser tanto do esquema adotado para estes ajustes polinomiais quanto por decorrência de erros de implementação.

4.2.1 Verificação da Implementação dos Cálculos dos Termos de Salto

Com o intuito de verificar possíveis erros de implementação, o parâmetro de comparação do método empregado para a derivação numérica dos Termos de Salto foi o software comercial Wolfram Mathematica 7.0, que desempenhou o mesmo papel de estimar o valor das derivadas em pontos de descontinuidade a partir dos valores da própria função em alguns de seus pontos adjacentes. Os resultados obtidos estão organizados nas tabelas a seguir. Estas incluem, nos espaços numéricos, tanto o valor analítico da respectiva derivada no ponto de descontinuidade x_α em questão, quanto o valor calculado pelo algoritmo empregado. Os resultados obtidos pelo software Wolfram Mathematica são as curvas apre-

sentadas abaixo dos dados numéricos. Uma das curvas indica a curva analítica, enquanto que a outra indica a curva ajustada. Fazem parte desta seção os resultados do cálculo das 5 primeiras derivadas da função Seno, necessárias, por exemplo, para o cálculo do Termo de Correção de Saltos de um esquema de cálculo de 2ª derivada com ordem 4. Estão listados os dados para as malhas menos e mais refinada; respectivamente, as malhas com 21 e 641 pontos.

As informações sobre o perfil adotado da função *seno* segue as informações da seção (4.2.3), e o ponto da descontinuidade para o qual os dados encontram-se listados é $x_{\alpha_1} = 1.989375$.

4.2.1.1 Estimativa das derivadas no ponto x_{α_1} - Séries de Taylor adiantadas

As séries de Taylor que originam as aproximações para os Termos de Salto, neste caso, são:

$$\begin{pmatrix} f_{\alpha_1}^0 \\ f_{i+1}^0 \\ \vdots \\ f_{i+(n-1)}^0 \end{pmatrix} = [M_{\alpha_1}] \times \begin{pmatrix} f_{\alpha_1}^0 \\ f'_{\alpha_1} \\ \vdots \\ f_{\alpha_1}^{(n-1)} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Com:

$$[M_{\alpha_1}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & (d_{\alpha_1}^+ + d_x) & \frac{(d_{\alpha_1}^+ + d_x)^2}{2!} & \dots & \frac{(d_{\alpha_1}^+ + d_x)^{(n-1)}}{(n-1)!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & [d_{\alpha_1}^+ + (n-1)d_x] & \frac{[d_{\alpha_1}^+ + (n-1)d_x]^2}{2!} & \dots & \frac{[d_{\alpha_1}^+ + (n-1)d_x]^{(n-1)}}{(n-1)!} \end{pmatrix}$$

Tabela 4: Gráfico da Primeira Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 21 pontos

Tabela 5: Gráfico da Segunda Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 21 pontos

Tabela 6: Gráfico da Terceira Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 21 pontos

Tabela 7: Gráfico da Quarta Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 21 pontos

Tabela 8: Gráfico da Quinta Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 21 pontos

Tabela 9: Gráfico da Primeira Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 641 pontos

Tabela 10: Gráfico da Segunda Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 641 pontos

Tabela 11: Gráfico da Terceira Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 641 pontos

Tabela 12: Gráfico da Quarta Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 641 pontos

Tabela 13: Gráfico da Quinta Derivada no ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$ para a malha com 641 pontos

Em todas as comparações, percebe-se bastante proximidade entre os resultados obtidos pelo ajuste polinomial implementado no algoritmo do IIM adotado e os resultados do

software Wolfram Mathematica.

Além disso, a análise das curvas ajustadas pelo Mathematica explica a degradação dos valores calculados no ponto de descontinuidade. Calcular uma derivada com uma ordem acima significa derivar uma vez o polinômio ajustado. Se o polinômio inicial tem grau 5, a curva da quinta derivada é uma reta, cujo valor constante define, no ponto de descontinuidade, o mesmo valor dos demais pontos do domínio.

Assim, fica evidenciada, preliminarmente, uma deficiência do IIM em questão, inerente ao ajuste polinomial proposto por (LINNICK; FASEL, 2005).

As próximas duas seções tratam dos Testes de Refinamento de Malha para o cálculos das duas primeiras derivadas das funções *seno* e *tanh*. Uma vez que a deficiência do ajuste polinomial proposto por (LINNICK; FASEL, 2005) já foi identificada, resta ainda a apreciação da influência do Termo de Correção de Saltos sobre o ordem de decaimento dos erros.

Usando os valores analíticos das derivadas das referidas funções (que possuem infinitas derivadas) no cômputo dos Termos de Salto, é possível calcular esse Termo de Correção de Saltos com precisão máxima. Comparando estes com os resultados referentes ao emprego dos Termos de Salto numericamente calculados, pode-se, então, apreciar a eficiência da formulação matemática do método como descrito em (LINNICK; FASEL, 2005), sendo o parâmetro de comparação de ambas soluções, a aplicação para o caso de fronteiras reais; ou, em outras palavras, sem o uso do IIM (função contínua sobre todo o domínio computacional).

4.2.2 Cálculo das Derivadas da Função Tangente Hiperbólica

O perfil simulado foi:

Figura 8: Perfil escolhido para a Função Tangente Hiperbólica - Descontinuidade Localizada no Ponto $x_{\alpha_1} = 1.989375$

As malhas envolvidas no Teste de Refinamento de Malha correspondem à tabela abaixo:

Malha	Nº de Pontos
1	21
2	41
3	81
4	161
5	321
6	641

Os Termos de Salto numéricos resultam em:

Figura 9: Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 10: Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Calculando os Termos de Salto analiticamente:

Figura 11: Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 12: Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Tanh para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Já neste primeiro caso percebe-se a influência da aproximação polinomial para os Termos de Salto sobre a degradação das derivadas calculadas. Enquanto que a solução com representação analítica dos Termos de Salto apresenta comportamento quase coincidente quando comparado com a função contínua (sem a aplicação do IIM), a solução com Termos de Salto calculados numericamente apresenta uma degradação mais acentuada nas regiões de refinamento de malha menos refinado.

4.2.3 Cálculo das Derivadas da Função Seno

O perfil escolhido para a função $\text{sen}(x)$ foi:

Figura 13: Perfil Escolhido para a Função Seno - Descontinuidades Localizadas nos Pontos

$x_{\alpha_1} = 1.989375$ e $x_{\alpha_2} = 8.01125$

As malhas envolvidas no Teste de Refinamento de Malha correspondem à tabela abaixo:

Malha	Nº de Pontos
1	21
2	41
3	81
4	161
5	321
6	641

Os Termos de Salto numéricos resultam em:

Figura 14: Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 15: Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Por sua vez, o cálculo analítico dos Termos de Salto leva aos resultados abaixo:

Figura 16: Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 17: Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Analíticos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

4.2.4 Restrição ao Uso do Método em Termos de Refinamento de Malha

Os gráficos da seção anterior indicam que o responsável pela variação da tendência da curva dos erros é, de fato, o ajuste polinomial empregado para o cálculo numérico dos Termos de Salto.

Efetuada uma segunda análise dos gráficos da função seno, é possível antever uma possível restrição ao uso deste método em termos de Refinamento de Malha.

Seguindo as diretrizes da seção (3.1.2.3), e considerando que o domínio, neste caso, possui $10/2\pi = 1.5915$ período, temos uma relação direta entre os pontos por domínio testados e os respectivos pontos por período, organizados na tabela (14).

Pontos da Malha	Pontos por Período
21	13
41	26
81	51

Tabela 14: Pontos das Malhas Simuladas e Respectivos Pontos por Período

Retomado o gráfico para a primeira derivada, desta vez até um domínio com 5121 pontos (conforme figura (18)), percebe-se uma degradação significativa da solução numérica na região compreendida pelas malhas de 21 e 81 pontos. Tomando em consideração a tabela acima, constata-se que, enquanto a solução numérica sem Interfaces Imersas requer ainda menos que os 16 pontos por período, com cerca de 7 pontos para manter a ordem absoluta da solução na casa de 10^{-3} em um período, o uso do IIM apresentado requer cerca de 19 (30 pontos no domínio).

Situação pior é a apresentada pelo comportamento do cálculo da Segunda Derivada, figura (19). Neste gráfico, enquanto que a exigência para a manutenção de um erro absoluto de 10^{-3} mostra-se em cerca de 7 pontos por período em relação ao esquema sem Interfaces Imersas, o uso do IIM acarreta uma exigência de cerca de 4 vezes mais, na casa dos 31 pontos por período (50 pontos no domínio), diferença que se mantém por todas as malhas testadas.

Figura 18: Erros do cálculo da Primeira Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos - Domínios de 21 a 5121 pontos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

Figura 19: Erros do cálculo da Segunda Derivada da Função Seno para os Termos de Salto Numéricos - Domínios de 21 a 5121 pontos (Espaçamento de Malha *versus* Erro)

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os resultados aqui obtidos mostram que as aproximações dos Termos de Salto pelo modo como são apresentadas em (LINNICK; FASEL, 2005) são responsáveis por resultados inesperados no que toca à manutenção da precisão do esquema empregado. Por exemplo, percebe-se que, em certas regiões dos gráficos de decaimento dos erros numéricos, a ordem do esquema com o IIM chega até mesmo a superar a ordem do esquema sem o Método.

Ao mesmo tempo, e apesar disso, em termos de comparação dos erros para uma mesma malha, a apreciação dos mesmos gráficos mostra que o uso do método pode acarretar uma deterioração da solução numérica em até duas ordens de grandeza, seja na comparação com a solução sem Interfaces Imersas, seja em relação à solução com Interfaces Imersas calculada a partir dos Termos de Salto analíticos, com a observação de que esta última apresenta concordância praticamente exata para com a solução numérica sem as Interfaces Imersas.

Conforme explicado em detalhes na seção (3.1.1), a eficácia das aproximações polinomiais é melhor compreendida quando se analisam os Sistemas de Equações que as originam, no caso, equações da forma (4.7).

Esses Sistemas envolvem conjuntos formados por um número fixo de pontos, cujo tamanho depende apenas da ordem da derivada que se deseja calcular e da ordem do esquema empregado. Para um esquema de cálculo da Primeira Derivada Espacial de 4ª

ordem, por exemplo, o sistema envolve 5 equações. Por sua vez, para a Segunda Derivada Espacial, o sistema envolve 6 equações. Tendo isso em vista, e também considerando que esses pontos são contíguos aos pontos das Interfaces Imersas, constata-se que esse conjunto fica mais próximo, dimensionalmente, à medida que refina-se a malha simulada. Com isso, a porção de função que se aproxima fica cada vez mais propensa ao ajuste polinomial empregado.

Ainda, não obstante alguns casos sugerirem um certo comportamento de convergência à medida que malhas mais refinadas são testadas, a análise baseada nos dados disponíveis em (LELE, 1992), conduzida na seção anterior, permite concluir que, em termos de necessidade de pontos por período para uma dada precisão absoluta, o uso do presente Método de Interfaces Imersas de Alta Ordem requer um refinamento de malha maior que o esquema sem Interfaces Imersas. A ressalva envolvendo a expressão “quando existem” fica para os casos em que essa região não chega nem mesmo a se concretizar, como no caso do cálculo da Segunda Derivada da função Seno.

Em prática, isso sugere uma aplicação quase que compulsória, em conjunção com este método, de recursos como estiramento da malha nas proximidades da região da Superfície Imersa.

Como sugestões para trabalhos futuros que podem se beneficiar dos resultados aqui obtidos, podem se listar:

- Analisar a aplicação deste método à solução da equação de Navier-Stokes em 2 e em 3 Dimensões, em aplicações envolvendo escoamentos compressíveis;
- Repetir a metodologia de testes aqui conduzidos para os demais Métodos de Interfaces Imersas de Alta Ordem;

REFERÊNCIAS

- FADLUN, E. A. et al. Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *Journal of Computational Physics*, v. 161, p. 35, 2000.
- FORNBERG, B. Calculation of weights in finite difference formulas. *SIAM Rev.*, v. 40, p. 685–691, 1998.
- GOLDSTEIN, D.; HANDLER, R.; SIROVICH, L. Modeling a no-slip boundary with an external force field. *Journal of Computational Physics*, v. 105, p. 354–366, 1993.
- IACCARINO, G.; VERZICCO, R. Immersed boundary technique for turbulent flow simulations. *Applied Mechanics Reviews*, v. 56, p. 331, 2003.
- LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, v. 103, p. 1–42, 1992.
- LEVEQUE, R. J.; LI, Z. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, v. 31, n. 4, p. 1019–1044, 1994.
- LINNICK, M. K.; FASEL, H. F. A high-order immersed interface method for simulating unsteady incompressible flows on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, v. 204, p. 157–192, 2005.
- MOHD-YUSOF, J. Combined immersed-boundary/b-spline methods for simulations of flow in complex geometries. *Annual Research Briefs*, p. 317–327, 1997.
- PELLER, N. et al. High-order stable interpolations for immersed boundary methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 52, p. 1175–1193, 2006.
- PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computational Physics*, v. 10, p. 252–271, 1972.
- SOUZA, L. F.; MENDONÇA, M. T.; MEDEIROS, M. A. F. The advantages of using high-order finite differences schemes in laminar-turbulent transition studies. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 48, p. 565–582, 2005.
- TULLIO, M. D. D. et al. An immersed boundary method for compressible flows using local grid refinement. *Journal of Computational Physics*, v. 225, p. 2098–2117, 2007.
- VERZICCO, R. et al. Les in complex geometries using boundary body forces. *Proceedings of the Summer Program, Center for Turbulence Research*, p. 171–186, 1998.

WIEGMANN, A.; BUBE, K. P. The explicit-jump immersed interface method: Finite difference methods for pdes with piecewise smooth solutions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 37, n. 3, p. 827–862, 2000.

YU, S. N.; ZHOU, Y. C.; WEI, G. W. Matched interface and boundary (mib) method for elliptic problems with sharp-edged interfaces. *Journal of Computational Physics*, v. 224, p. 729–756, 2007.

ZHONG, X. A new high-order immersed interface method for solving elliptic equations with imbedded interface of discontinuity. *Journal of Computational Physics*, v. 225, p. 1066–1099, 2007.

ZHOU, Y. C. et al. High order matched interface and boundary method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *Journal of Computational Physics*, v. 213, p. 1–30, 2006.