ISSN 1984-820X
Anais do CNMAC v.3
PUBLICAÇÃO DA SBMAC
CNMAC2010
XXXIII CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL

Fronteiras imersas em diferenças finitas: imposição aproximada de contornos

Cassio M. Oishi
Departamento de Ciências e Tecnologia, UNIFESP
12231-280, São José dos Campos, SP
E-mail: cassiooishi@gmail.com

Fabricio S. Sousa, **Larissa A. Petri**, **Gustavo C. Buscaglia**
Depto de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP,
13599-590, São Carlos, SP
E-mail: {fsimeoni,petri,gustavo.buscaglia}@icmc.usp.br

Resumo: *O presente trabalho apresenta um método de fronteiras imersas em diferenças finitas para a imposição aproximada de condições de contorno. O método é baseado no trabalho de Codina & Baiges [12] desenvolvido originalmente no contexto de elementos finitos no qual a imposição das condições de contorno é feita utilizando aproximações por mínimos quadrados. São apresentados resultados para uma equação escalar que valida o método, e demonstra ordem de convergência quadrática. Finalmente, o método é aplicado para a solução numérica das equações de Navier-Stokes em um problema clássico de escoamento incompressível em uma cavidade impulsionada.*

Palavras-chave: *Fronteiras imersas, método de diferenças finitas, mínimos quadrados, equações de Navier-Stokes.*

1 Introdução

O campo de estudo do método de fronteiras imersas concentra-se principalmente em escoamentos com fronteiras móveis e ao redor de geometrias complexas [1, 2, 3]. O desenvolvimento de métodos computacionais robustos como alternativa para as técnicas que utilizam malhas elásticas, ou seja, malhas que se adaptam ao contorno do sólido que serve como obstáculo ao escoamento, é o principal objetivo da comunidade científica que estuda esse método.

O principal objetivo dos métodos de fronteira imersa é a imposição de condições de contorno em situações onde a geometria do domínio não coincide com a malha computacional. O efeito de certas condições de contorno pode ser modelado pela aplicação de uma força externa. Com isso, pode-se simular um escoamento que passa por um objeto utilizando um domínio simples, com uma malha regular, e impondo forças para caracterizar a fronteira do objeto. Pode-se utilizar uma função da forma

$$f(x_s, t) = \alpha \int_0^t \boldsymbol{u}(x_s, t')dt' + \beta \boldsymbol{u}(x_s, t), \tag{1}$$

em que x_s são pontos na superfície do objeto, $\boldsymbol{u}$ é a velocidade, t é o tempo e α e β são constantes negativas [4]. Esta função representa a informação vinda do campo de velocidades, onde o primeiro termo é responsável pela criação da força que irá diminuir a velocidade do escoamento na superfície rígida (até que ela seja nula) e o segundo termo representa a força criada pelo arrasto de um obstáculo localizado no ponto x_s. A utilização dessa função nos pontos do contorno pode ser vista como a aplicação de forças que 'aprendem' a simular a condição de contorno desejada.

Uma alternativa ao método de fronteiras imersas clássico é o método de interfaces imersas, que evita o uso da distribuição delta de Dirac para definir os termos forçantes, obtendo maior ordem de precisão [5, 6, 7]. Outra opção já explorada é a de impor a condição de contorno por meio de multiplicadores de Lagrange, como no método de domínios fictícios [8, 9, 10]. Neste caso, a dificuldade é transferida para a construção do espaço de multiplicadores.

Lew & Buscaglia [11] apresentaram um método de imposição direta baseado em uma formulação de Galerkin descontínuo, que evita o tratamento caso-a-caso simplesmente trocando a interpolação nas células interceptadas pelo contorno por uma interpolação descontínua, evitando assim o fenômeno de bloqueio (*locking*). Embora consiga impor fortemente as condições de contorno e obter precisão ótima, o método necessita de graus de liberdade adicionais.

Nos últimos anos vem crescendo as pesquisas no intuito de aumentar a ordem de convergência dos métodos de fronteira imersa, já que, na prática, a maioria deles consegue apenas convergência de primeira ordem. Neste contexto, podem ser citados os métodos propostos em [12] e [13], nos quais as condições de contorno, em especial as de Dirichlet, são impostas de forma a minimizar a distância entre as condições de contorno exata e aproximada no sentido de mínimos quadrados.

Neste trabalho, pretende-se estender a ideia básica por trás destes métodos, isto é, aproximar as condições de contorno no sentido de mínimos quadrados, aplicando-a no contexto de diferenças finitas.

2 Descrição do método

A idéia básica do método de Codina & Baiges [12] é decompor os espaços de elementos finitos para aproximação do campo de velocidades em uma soma direta de dois espaços: um de funções que são diferentes de zero somente no interior do domínio de interesse, e um de funções que são diferentes de zero somente nos nós exteriores a esse domínio. Os graus de liberdade localizados na parte externa ao domínio são utilizados como auxiliares para imposição da condição de contorno sobre a fronteira imersa, utilizando uma estratégia de imposição aproximada através do método de mínimos quadrados.

A aplicação do método de fronteiras imersas em problemas de escoamentos de fluidos discretizados pelo método de diferenças finitas em malhas estruturadas, traz claras vantagens na representação de domínios complexos, mantendo-se ao mesmo tempo a simplicidade de tal formulação. O objetivo deste trabalho então é adaptar a idéia de Codina & Baiges no contexto de diferenças finitas, construindo uma formulação que combine precisão e eficiência.

Considere Γ como sendo o nível zero de uma função ϕ definida no domínio Ω, o qual divide este domínio em uma parte interna Ω_{in}, onde $\phi > 0$, e uma parte externa Ω_{out}, onde $\phi < 0$. Para simplificar a descrição do método, será considerado um problema escalar

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u &= f \qquad \text{em} \quad \Omega_{in} \\ u &= \bar{u} \qquad \text{em} \quad \Gamma \ . \end{aligned} \tag{2}$$

Para aproximar o valor de u no contorno Γ, pode-se definir um funcional dado por

$$J(u) = \|u - \bar{u}\|_2^2 = (u - \bar{u})^2 \tag{3}$$

que será utilizado no contexto de mínimos quadrados para fazer com que a distância entre a velocidade aproximada u e a velocidade exata $\bar{u}$ no contorno seja mínima. Como não há graus de liberdade de u no contorno Γ, pode-se utilizar uma interpolação envolvendo os graus de liberdade nos vértices.

Por exemplo, considera-se um elemento do domínio, que é interceptado pelo contorno, como mostrado na figura 1. A, B e C são os vértices da célula, nos quais os valores da velocidade e da função implícita são conhecidos, e x e y são os pontos onde Γ intercepta as faces da célula, ou seja, onde $\phi = 0$.

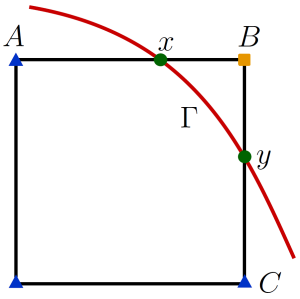


Figura 1: Elemento do domínio cortado pelo contorno, em que A, B e C são os vértices do elemento e x e y são os pontos onde o contorno Γ corta as arestas do elemento.

Para a aresta AB, onde A é um ponto interno ($\phi_A > 0$) e B é um ponto externo ($\phi_B < 0$). Dados os valores da velocidade e da função implícita nos pontos A e B, pode-se definir a seguinte interpolação

$$u = \frac{u_B\phi_A - u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B}, \tag{4}$$

em que u_A e u_B são os valores nos pontos A e B, respectivamente, ϕ_A e ϕ_B são os valores da função implícita ϕ nos pontos A e B, respectivamente. Desta forma

$$J(u) = (u - \bar{u})^2 = \left(\frac{u_B\phi_A - u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} - \bar{u}\right)^2 .$$

Note que para o valor u_A, há uma equação que vem da discretização da problema. O objetivo então é encontrar uma equação adicional para u_B de forma a garantir que $J(u)$ seja mínimo, ou seja,

$$\frac{\partial J(u)}{\partial u_B} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial J(u)}{\partial u_B} = 2\left(\frac{u_B\phi_A - u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} - \bar{u}\right)\left(\frac{\phi_A}{\phi_A - \phi_B}\right) = 0. \tag{5}$$

Finalmente, chega-se a

$$\frac{u_B\phi_A}{\phi_A - \phi_B} - \frac{u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} - \bar{u} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_B = \left(\frac{u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} + \bar{u}\right)\left(\frac{\phi_A - \phi_B}{\phi_A}\right).$$

De maneira geral, em que mais de uma aresta é cortada por Γ, considera-se o funcional como sendo a soma das parcelas equivalentes à contribuição de cada aresta. Para exemplificar, toma-se as arestas AB e BC do elemento mostrado na figura 1. Supondo que C seja um nó interno, assim como A, teremos também uma interpolação para definir u no ponto y, onde o contorno corta a aresta BC, tal que $\phi(y) = 0$, da forma

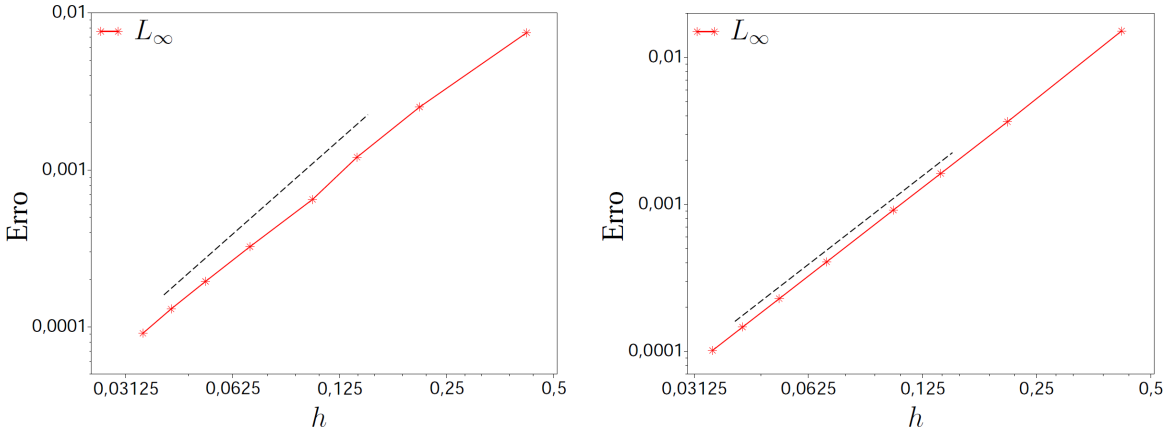
$$u = \frac{u_B\phi_C - u_C\phi_B}{\phi_C - \phi_B}.$$

Note que não há uma equação que define unicamente as velocidades no contorno. Porém, redefinindo o funcional J como

$$J(u) = \left(\frac{u_B\phi_A - u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} - \bar{u}\right)^2 + \left(\frac{u_B\phi_C - u_C\phi_B}{\phi_C - \phi_B} - \bar{u}\right)^2$$

e calculando seu mínimo, ou seja, determinando u_B, tal que $\dfrac{\partial J(u)}{\partial u_B} = 0$,

$$\frac{\partial J(u)}{\partial u_B} = 2\left(\frac{u_B\phi_A - u_A\phi_B}{\phi_A - \phi_B} - \bar{u}\right)\left(\frac{\phi_A}{\phi_A - \phi_B}\right) + 2\left(\frac{u_B\phi_C - u_C\phi_B}{\phi_C - \phi_B} - \bar{u}\right)\left(\frac{\phi_C}{\phi_C - \phi_B}\right) = 0,$$



(a) (b)

Figura 2: Decaimento do erro com a redução do tamanho h, em escala log × log, para **a)** o círculo e **b)** o quadrado.

é possível escrever u_B da seguinte forma

$$u_B = \left(\frac{u_A \phi_A \phi_B}{(\phi_A - \phi_B)^2} + \frac{\bar{u}\phi_A}{\phi_A - \phi_B} + \frac{u_C \phi_B \phi_C}{(\phi_C - \phi_B)^2} + \frac{\bar{u}\phi_C}{\phi_C - \phi_B} \right) \frac{1}{\frac{\phi_A^2}{(\phi_A - \phi_B)^2} + \frac{\phi_C^2}{(\phi_C - \phi_B)^2}}.$$

Dessa maneira, tem-se um único valor para u_B, que consiste na aproximação da velocidade no contorno no sentido de mínimos quadrados. Isto torna o problema bem definido, fazendo com que u esteja o mais próximo possível de $\bar{u}$. Há assim, uma equação para cada elemento cortado por Γ, representando a imposição das condições de contorno.

3 Verificação

A seguir, o método proposto é verificado resolvendo-se a equação (2) com condição $\bar{u} = 0$ em Γ. Para este teste são considerados dois problemas:

(a) um círculo de raio $r = \pi/2$ e centro na origem, com termo fonte

$$f(x, y) = \frac{\sin(\sqrt{x^2 + y^2})}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \cos(\sqrt{x^2 + y^2}),$$

cuja solução exata é

$$U(x, y) = \cos(\sqrt{x^2 + y^2}).$$

(b) um quadrado $\left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) \times \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ com termo fonte

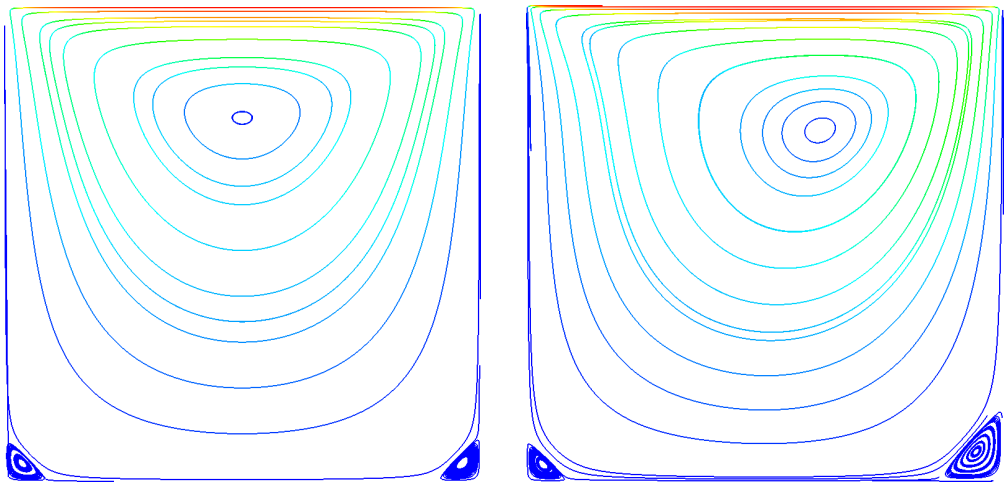
$$f(x, y) = 2\cos(x)\cos(y),$$

cuja solução exata é

$$U(x, y) = \cos(x)\cos(y).$$

Para os dois casos foram consideradas as seguintes malhas: 11×11, 21×21, 31×31, 41×41, 61×61, 81×81, 101×101 e 121×121. O programa foi executado, utilizando as diferentes malhas, e a solução obtida foi comparada com as soluções exatas.

Da figura 2, pode-se observar que o método proposto conseguiu obter convergência de ordem h^2 (onde h é o espaçamento de cada malha), para os dois domínios considerados. Estes resultados mostram que foi possível melhorar a ordem da aproximação, podendo até atingir precisão de ordem 2. Este fato serviu de inspiração para estender o método para aplicações envolvendo as equações de Navier-Stokes.



(a) (b)

Figura 3: Linhas de corrente coloridas segundo a magnitude da velocidade para a cavidade com tampa deslizante para $Re = 100$ (a) condição inicial e (b) solução no estado estacionário.

4 Aplicação em escoamentos incompressíveis

Considere as equações de Navier-Stokes na forma adimensional para escoamentos incompressíveis, dadas por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re}\nabla^2 \mathbf{u}, \tag{6}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{7}$$

onde $\mathbf{u}$ denota o campo de velocidades e p o campo de pressões. Ainda, $Re = LV/\nu$ é o número de Reynolds, L e V são os parâmetros de escala de comprimento e velocidade, respectivamente, e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Tais equações são válidas em um domínio $\Omega_{in} \in \mathbb{R}^2$, limitado por uma fronteira imersa $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$. O problema considerado neste exemplo é o da cavidade impulsionada, um *benchmark* clássico na literatura de dinâmica dos fluidos computacional. Para este exemplo, considera-se Γ um quadrado $[0,1] \times [0,1]$, onde Γ_1 é a tampa superior ($y = 1$), e Γ_2 define as paredes laterais e inferior, sendo impostas as condições

$$\mathbf{u} = (u, v) = (1, 0), \quad \text{em } \Gamma_1 \tag{8}$$

$$\mathbf{u} = (u, v) = (0, 0), \quad \text{em } \Gamma_2 \ . \tag{9}$$

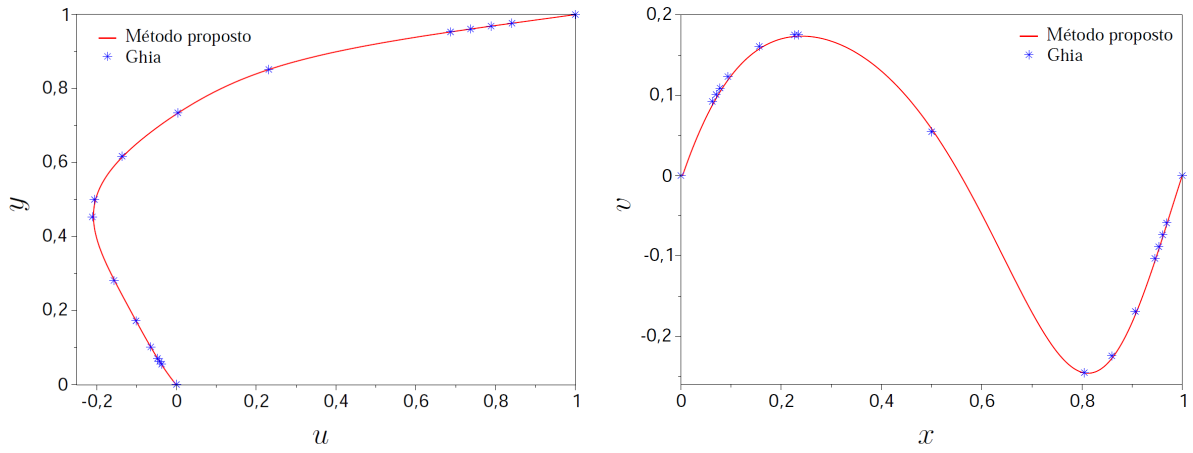
Tais equações são discretizadas no tempo como

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^{n+1} = -\nabla p^{n+1} + \frac{1}{Re}\nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \tag{10}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \ , \tag{11}$$

e no espaço pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada. As equações (10)-(11), uma vez discretizadas, levam a um sistema algébrico não linear, que é resolvido de forma acoplada, através do método de Newton, sendo o sistema linear resultante resolvido pelo método iterativo GMRES. Detalhes desta formulação podem ser encontrados em [14].

O teste foi efetuado com uma malha de 301×301 pontos, com $Re = 100$, $\delta t = 0.01$, CFL $= 3$. Para a comparação dos resultados foram considerados os perfis de velocidade nas linhas horizontal e vertical que passam pelo centro da cavidade, e os resultados de Ghia [15]. A figura 3 mostra as linhas de corrente da solução inicial e do estado estacionário. Na figura 4, pode-se ver o perfil da velocidade u ao longo da linha vertical que passa pelo centro do domínio (4.a) e o perfil da velocidade v ao longo da linha horizontal que passa pelo centro do domínio (4.b). Os resultados estão em concordância com o resultado de referência.



(a) (b)

Figura 4: **a)** Perfil da velocidade u ao longo da linha vertical que passa pelo centro do domínio e **b)** perfil da velocidade v ao longo da linha horizontal que passa pelo centro do domínio, comparadas com os resultados obtidos por [15].

5 Conclusões

O presente trabalho apresenta um método de imposição de condições de contorno para fronteiras imersas, baseado em discretizações por diferenças finitas em malhas estruturadas. O método foi baseado no trabalho de Codina & Baiges [12] para elementos finitos. No contexto de diferenças finitas, o método é simples e eficiente, apresentando ordem de convergência quadrática para problemas escalares.

O método foi estendido e aplicado para o problema clássico de escoamento de fluido em uma cavidade impulsionada, mostrando concordância com a solução de referência utilizada.

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP (proc. 2009/15892-9), CNPq (proc. 477858/2009-0). Este trabalho foi realizado no âmbito do INCT-MACC (Medicina Assistida por Computação Científica).

Referências

[1] C. Peskin. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10:252–271, 1972.

[2] C. Peskin. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11:479–517, 2002.

[3] M.-C. Lai and C. Peskin. An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. *Journal of Computational Physics*, 160:705–719, 2000.

[4] D. Goldstein, R. Handler, and L. Sirovich. Modeling a no-slip flow boundary with an external force field. *Journal of Computational Physics*, 105(2):354–366, 1993.

[5] R. Leveque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31:1019–1044, 1994.

[6] L. Lee and R. Leveque. An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25:832–856, 2003.

[7] Sheng Xu and Z. Jane Wang. An immersed interface method for simulating the interaction of a fluid with moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 216:454–493, 2006.

[8] V. Girault and R. Glowinski. Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 12:487–514, 1995.

[9] R. Glowinski, T.-W. Pan, and J. Periaux. A fictitious domain method for Dirichlet problems and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 111:283–303, 1994.

[10] R. Glowinski, T.-W. Pan, T. Hesla, and D. Joseph. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25:755–794, 1999.

[11] A. Lew and G. Buscaglia. A discontinuous-Galerkin-based immersed boundary method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 76:427–454, 2008.

[12] R Codina and J. Baiges. Approximate imposition of boundary conditions in immersed boundary methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 80:1379–1405, 2009.

[13] S. Z. Husain and J. M. Floryan. Immersed boundary conditions method for unsteady flow problems described by the Laplace operator. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56:1765–1786, 2008.

[14] L. A. Petri, C. M. Oishi, F. S. Sousa, and G. C. Buscaglia. Sobre a escolha de métodos para escoamentos incompressíveis em microescala. In *Proceedings of XXX Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*, volume 1, pages 1–13, 2009.

[15] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48:387–411, 1982.