

## VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS 1D OBTIDAS COM DIFERENÇAS FINITAS E MALHAS UNIFORMES

**Carlos Henrique Marchi**

*marchi@ufpr.br*

Universidade Federal do Paraná (UFPR)  
Departamento de Engenharia Mecânica  
Curitiba, PR, Brasil

**Arleide Cristina Alves**

*aalves@up.edu.br*

Núcleo de Ciências Exatas e Tecnológicas  
Universidade Positivo  
Curitiba, PR, Brasil

**Resumo.** *O objetivo principal deste trabalho é comprovar, através de experimentos numéricos, a ordem assintótica do erro de discretização de alguns problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos unidimensionais (1D) modelados pelas equações de Fourier, advecção-difusão e Burgers. O valor correto desta ordem é importante para o uso adequado dos estimadores do erro de discretização, baseados na extrapolação de Richardson. Os problemas são resolvidos considerando: método de diferenças finitas; variáveis de interesse primárias e secundárias, locais e globais; aproximações no espaço de 1<sup>a</sup> e 2<sup>a</sup> ordens de acurácia, com e sem mistura (esquema híbrido) através de correção adiada; aproximações no tempo do tipo totalmente implícita e Crank-Nicolson; efeito do número de Peclet; malhas uniformes; e efeito do termo fonte na equação de Fourier. Os modelos matemáticos e numéricos usados no trabalho foram escolhidos para abordar algumas questões abertas e controvertidas da literatura. Verificou-se que: (1) todas as previsões da ordem assintótica feitas a priori, neste trabalho, foram comprovadas através dos experimentos numéricos realizados; (2) para esquemas híbridos, a acurácia é igual a do esquema puro de menor ordem; e (3) quando existe um termo fonte não-nulo na equação de Fourier, a ordem de acurácia da formulação Crank-Nicolson degenera para a unidade.*

**Palavras-chave:** *erro de discretização, ordem de erro, CFD, Fourier, advecção-difusão, Burgers.*

## 1. INTRODUÇÃO

As duas principais metas em dinâmica dos fluidos computacional são obter soluções numéricas acuradas e confiáveis (Shyy *et al.*, 2002). Ambas dependem da estimativa do erro numérico. O erro numérico ( $E$ ) é a diferença entre a solução analítica exata ( $\Phi$ ) de uma variável de interesse e a sua solução numérica ( $\phi$ ), isto é,

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (1)$$

onde  $E$  é causado por quatro fontes de erro (Marchi e Silva, 2002): truncamento, iteração, arredondamento e programação. Quando as outras fontes são inexistentes ou muito pequenas em relação aos erros de truncamento,  $E$  também pode ser denominado de erro de discretização.

Em situações práticas, uma solução numérica é obtida porque a solução analítica é desconhecida. Por conseqüência, o valor verdadeiro do erro numérico também é desconhecido. Portanto, o erro numérico tem que ser estimado. Há dois estimadores para o erro de discretização muito usados com os métodos de diferenças finitas e volumes finitos. Ambos são baseados na extrapolação de Richardson. Um deles é o *GCI* (*Grid Convergence Index*), dado por (Roache, 1994)

$$GCI(\phi_1) = F_s \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{(r^{p_L} - 1)} \quad (2)$$

onde  $\phi_1$  e  $\phi_2$  = soluções numéricas obtidas respectivamente com malhas fina ( $h_1$ ) e grossa ( $h_2$ ),  $h$  = tamanho dos elementos da malha (neste trabalho,  $h = 1/N$ ),  $N$  = número de elementos da malha,  $r = h_2/h_1$  = razão de refino de malha,  $F_s$  = fator de segurança (geralmente, três),  $p_L$  = ordem assintótica (Roache, 1998) do erro prevista para cada variável de interesse através de análises com série de Taylor (Tannehill *et al.*, 1997).

Uma forma de verificar na prática, isto é, por meio de experimentos numéricos, se o valor deduzido para  $p_L$  está correto, é usar o conceito de ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro verdadeiro, definida por (Marchi, 2001)

$$p_E(h_1) = \frac{\log \left[ \frac{E(\phi_2)}{E(\phi_1)} \right]}{\log(r)} \quad (3)$$

Conforme a Eq. (3), a ordem efetiva ( $p_E$ ) é função do erro verdadeiro da variável de interesse. Assim, para os problemas cuja solução analítica é conhecida, ela pode ser usada para verificar *a posteriori* se, à medida que  $h \rightarrow 0$ , obtém-se a ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização, que é um resultado teórico obtido *a priori*.

Neste trabalho são resolvidos três problemas unidimensionais (1D) através do método de diferenças finitas, com malhas uniformes. São usadas aproximações numéricas de 1ª ou 2ª ordem de acurácia no espaço e no tempo, e mistura de ambas (esquema híbrido). Os objetivos deste trabalho são: (1) com base em experimentos numéricos, verificar (Roache, 1998) o valor verdadeiro do erro de discretização ( $E$ ), em função do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha, para quatro variáveis de interesse ( $\phi$ ) em cada problema; (2) deduzir o valor da ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização de cada  $\phi$ ; (3) também com base em experimentos numéricos, verificar se o valor da ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro de discretização tende a  $p_L$

quando  $h \rightarrow 0$ ; e (4) sobre o erro de discretização e sua ordem, mostrar o efeito causado pelo número de Peclet, pela aproximação numérica usada, pelo fator de mistura de esquemas híbridos, e pelo termo fonte. Também pretende-se esclarecer afirmações inconsistentes existentes na literatura. Por exemplo, Celik e Zhang (1995) afirmam que a ordem assintótica de um esquema híbrido é variável. Já Roache (1994) sugere usar a menor ordem entre os dois esquemas puros. Mesmo em problemas unidimensionais, para Roy (2001), o erro se reduz de forma não-monotônica quando se usa pelo menos dois esquemas com ordens assintóticas diferentes. É comum encontrar na literatura (Versteeg e Malalasekera, 2007) a afirmação de que o esquema de Crank-Nicolson é de 2ª ordem; será mostrado neste trabalho que isso ocorre só em um caso particular.

A importância deste trabalho é comprovar o valor correto da ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização para algumas aproximações numéricas muito comuns no método de diferenças finitas. E, assim, permitir que o estimador de Richardson e suas variantes sejam usados corretamente, já que eles dependem diretamente do valor de  $p_L$ , como se pode ver na Eq. (2). Outra contribuição é mostrar qual é o comportamento do erro com o esquema de correção adiada (Khosla e Rubin, 1974; Ferziger e Peric, 1999). Além disso, pretende-se esclarecer as questões da literatura apontadas acima.

São usados problemas 1D neste trabalho pelos seguintes motivos: (1) possibilidade de se usar malhas muito refinadas em uma direção, até a ordem de milhões de nós, permitindo verificar comportamentos assintóticos; (2) devido à rapidez na obtenção de cada solução, pode-se realizar uma grande quantidade de testes, facilitando realizar estudos sistemáticos de diversos parâmetros; e (3) presume-se que os resultados unidimensionais sejam aplicáveis a duas e três dimensões.

O trabalho está assim dividido: nas seções 2 e 3 são abordados dois problemas unidimensionais em regime permanente, as equações de advecção-difusão e de Burgers; na seção 4, aborda-se um problema de condução de calor unidimensional em regime transiente, modelado pela equação de Fourier; e na seção 5, a conclusão do trabalho.

## 2. EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

### 2.1 Modelo matemático

A partir da equação de conservação da energia térmica, considerando-se escoamento 1D permanente, fluido incompressível, sem geração de calor e dissipação viscosa, e que as propriedades e velocidades são constantes em meio contínuo, obtém-se a equação de advecção-difusão:

$$Pe \frac{du}{dx} = \frac{d^2u}{dx^2} \quad (4)$$

onde  $Pe$  = número de Peclet,  $x$  = direção coordenada,  $u$  = temperatura. As condições de contorno são do tipo Dirichlet:

$$u(0) = 0 \quad \therefore \quad u(1) = 1 \quad (5)$$

As variáveis de interesse, isto é, as variáveis para as quais é obtida a solução numérica e verificado o seu erro de discretização e a sua ordem efetiva são:

(a) Temperatura ( $u$ ) em  $x = 1/2$ : variável principal do problema que é obtida a partir da solução da Eq. (4). Sua solução analítica é

$$u(x) = \frac{(e^{xPe} - 1)}{(e^{Pe} - 1)} \quad (6)$$

(b) Temperatura média ( $U$ ): variável global, obtida a partir da seguinte definição

$$U = \int_0^1 u(x) dx \quad (7)$$

Sua solução analítica é

$$U = \frac{e^{Pe} - Pe - 1}{Pe(e^{Pe} - 1)} \quad (8)$$

(c) Inclinação ( $I$ ): variável local, obtida a partir da seguinte definição

$$I = \left( \frac{du}{dx} \right)_{x=1} \quad (9)$$

Sua solução analítica é

$$I = \frac{e^{Pe} Pe}{(e^{Pe} - 1)} \quad (10)$$

(d) A média da norma  $l_1$  do erro de discretização ( $L$ ), definida matematicamente por

$$L = \frac{\sum_{i=1}^N |u_i^{\text{analítico}} - u_i^{\text{numérico}}|}{N} \quad (11)$$

onde  $i$  representa cada um dos  $N$  nós da malha. Sua solução analítica tem o valor nulo.

## 2.2 Modelo numérico

O modelo numérico é caracterizado pelo uso do método de diferenças finitas (Tannehill *et al.*, 1997), malhas uniformes e o método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*) para resolver o sistema de equações. A linguagem de programação usada é a Fortran 95 com precisão quádrupla. O termo difusivo (derivada de 2ª ordem) da Eq. (4) foi aproximado com o esquema de diferença central (CDS). No caso do termo advectivo (derivada de 1ª ordem), três aproximações foram empregadas: (1) CDS, (2) esquema de diferença a montante (UDS) de 1ª ordem e (3) esquema  $\beta$ , que é um esquema híbrido entre o UDS e o CDS por meio do método de correção adiada de Khosla e Rubin (1974) (Ferziger e Peric, 1999), isto é,

$$\Phi \approx \phi_{UDS} + \beta(\phi_{CDS}^* - \phi_{UDS}^*) \quad (12)$$

onde  $\Phi$  = valor exato do termo advectivo,  $\phi$  = aproximação numérica na iteração atual,  $\phi^*$  = aproximação numérica na iteração anterior,  $\beta$  = fator de mistura cujo valor varia entre 0 (UDS) e 1 (CDS). No esquema de correção adiada, todos os termos que envolvem  $\beta$  são considerados como termos fontes, ficando no termo independente do sistema de equações. Os

coeficientes do sistema de equações são iguais aos do esquema UDS puro. A matriz de coeficientes é do tipo tridiagonal. Para os esquemas UDS e CDS, o TDMA resolve o sistema de forma direta. No caso do esquema  $\beta$ , devido ao segundo termo da Eq. (12), a solução é iterativa; neste caso, a estimativa inicial é igual à solução analítica. Detalhes sobre o modelo numérico acima, e os das próximas seções, podem ser vistos em Ferziger e Peric (1999) e Tannehill *et al.* (1997).

A variável temperatura média ( $U$ ) foi obtida através da regra do trapézio (Kreyszig, 1999). E a variável inclinação ( $I$ ) foi obtida com o esquema UDS-2, isto é, o UDS de 2ª ordem (Tannehill *et al.*, 1997).

### 2.3 Estimativa da ordem assintótica ( $p_L$ )

Com base na série de Taylor, seguindo o procedimento de Tannehill *et al.* (1997), o erro de truncamento ( $\varepsilon$ ) da equação diferencial discretizada (EDD), em cada nó  $i$  da malha, é

$$\varepsilon(EDD)_i = (1-\beta)Pe \left( \frac{d^2u}{dx^2} \right)_i \frac{h}{2} + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d^4u}{dx^4} \right)_i - Pe \left( \frac{d^3u}{dx^3} \right)_i \right] \frac{h^2}{6} + \dots \quad (13)$$

Por definição, a ordem assintótica ( $p_L$ ) é o menor expoente do erro, cujo termo prevalece quando  $h \rightarrow 0$ . Para malhas uniformes, sabe-se (Roache, 1998) que  $p_L$  do erro de discretização da incógnita da equação diferencial,  $E(u)$ , é igual ao  $p_L$  do  $\varepsilon(EDD)$ . Portanto, para  $u$ , tem-se

$$p_L = \begin{cases} 1 & \text{se } 0(UDS) \leq \beta < 1 \\ 2 & \text{se } \beta = 1(CDS) \end{cases} \quad (14)$$

Para  $U$ , obtido através da regra do trapézio tem-se (Kreyszig, 1999)  $p_L = 2$ . Esse é o mesmo resultado para  $I$ , obtido com o esquema UDS-2 (Tannehill *et al.*, 1997). Mas estes valores são válidos para a situação em que  $u_i$  não tem erro, ou seja, utilizando-se a solução analítica em cada nó. No caso de variáveis secundárias ( $\phi$ ), isto é, variáveis que dependem da variável primária, ou seja, a incógnita na equação diferencial, devido à propagação de erros, tem-se

$$p_L[E(\phi)] = \text{Min} \{ p_L[\varepsilon(EDD)]; p_L[\varepsilon(\phi)] \} \quad (15)$$

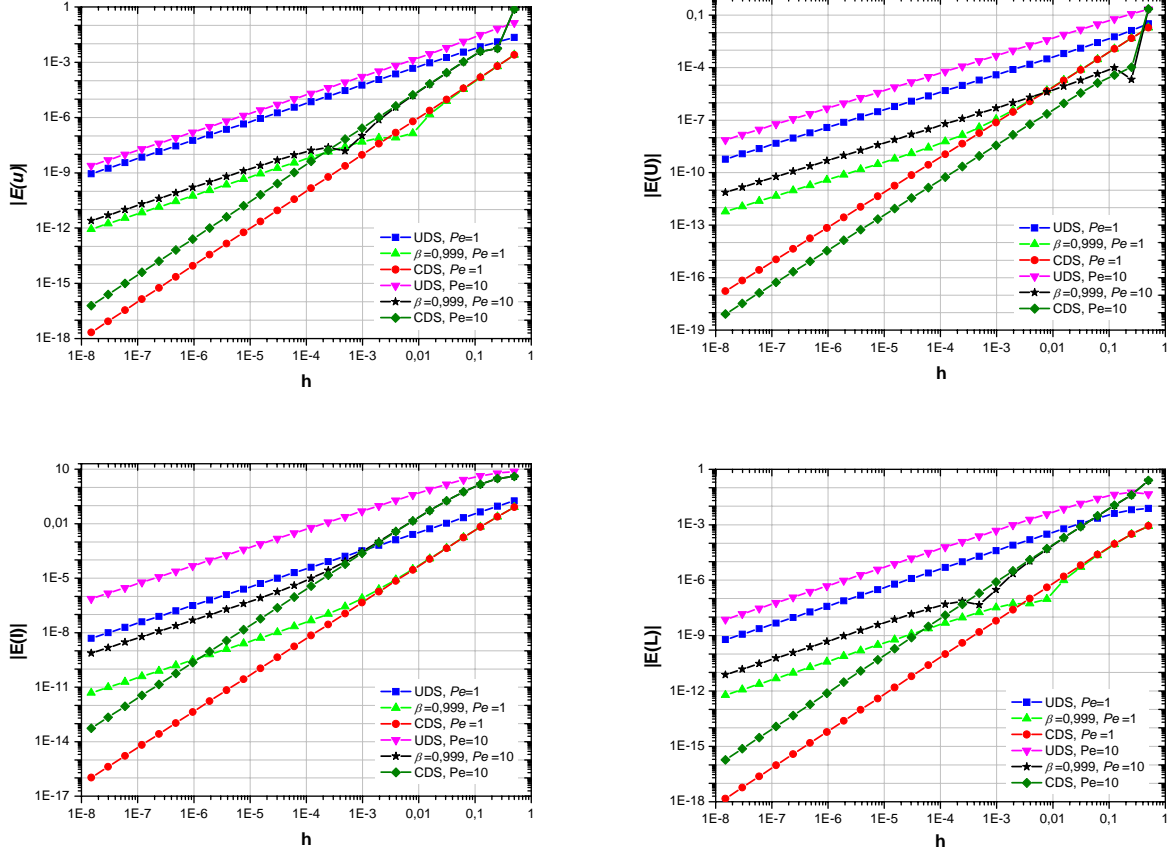
onde  $\text{Min}$  = valor mínimo entre os dois argumentos,  $\varepsilon(\phi)$  = erro de truncamento de uma aproximação numérica  $\phi$ . Portanto, o resultado da Eq. (14) também vale para  $U$ ,  $I$  e  $L$ .

### 2.4 Resultados numéricos

A solução numérica das quatro variáveis de interesse foi obtida com malhas de 2, 4, ... até 67.108.864 elementos, que correspondem a  $h = 1/2, 1/4, \dots$  até  $\approx 1,49 \times 10^{-8}$  m. Na solução da Eq. (4), foram empregados os esquemas UDS, CDS e  $\beta = 0,999$  para  $Pe = 1$  e 10. Foi implementado um programa computacional em linguagem Fortran 95, versão 9.1 da Intel, usando precisão quádrupla (Real\*16). As simulações foram realizadas em um microcomputador com processador Intel (Xeon Quad Core X5355 2,66 GHz), 16 GB RAM e sistema operacional Windows xp 64 bits. O tempo de CPU máximo foi de 9 min, para o

esquema  $\beta$  com oito iterações, número suficiente para atingir o erro de arredondamento de máquina.

A Fig. 1 mostra o módulo do erro de discretização ( $E$ ) das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Considerando-se o módulo de  $E$ , pode-se perceber que para  $h$  relativamente grande, em geral  $E(\text{CDS}) \approx E(\beta) < E(\text{UDS})$ . E para  $h \rightarrow 0$ ,  $E(\text{CDS}) < E(\beta) < E(\text{UDS})$ .



**Figura 1. Equação de advecção-difusão: módulo do erro ( $E$ ).**

A Fig. 2 mostra a ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Todos os resultados de  $p_E$  apresentados neste trabalho foram obtidos com a Eq. (3) e razão de refino ( $r$ ) igual a 2. Pode-se notar nesta figura que:

- 1) Nas malhas mais grossas, como era esperado (Marchi, 2001), os valores da ordem efetiva ( $p_E$ ) podem ser significativamente diferentes da ordem assintótica ( $p_L$ ), apresentando valores negativos ou sendo até indefinidos.
- 2) Para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L$  de acordo com o previsto pela Eq. (14) para os três esquemas (UDS, CDS e  $\beta$ ) e as quatro variáveis de interesse, mesmo para o esquema  $\beta$  com seu valor igual a 0,999.
- 3) Para a temperatura, no caso do esquema  $\beta$ ,  $p_E \approx p_L(\text{CDS})$  nas malhas mais grossas. Ao se reduzir  $h$ , há um intervalo em que  $p_E$  é indefinido. E finalmente, para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L(\text{UDS})$ .
- 4) Para a inclinação, no caso do esquema  $\beta$ ,  $p_E \approx p_L(\text{CDS})$  nas malhas mais grossas. Ao se reduzir  $h$ , há um intervalo em que  $p_E$  varia monotonicamente até que para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L(\text{UDS})$ .
- 5) Para a temperatura média, no caso do esquema  $\beta$ ,  $p_E \approx p_L(\text{UDS})$  em quase todas as malhas, exceto nas mais grossas.

6) Embora para o esquema  $\beta$ ,  $p_E \rightarrow p_L(\text{UDS})$  para  $h \rightarrow 0$ , seu erro pode ser significativamente menor do que o do UDS.

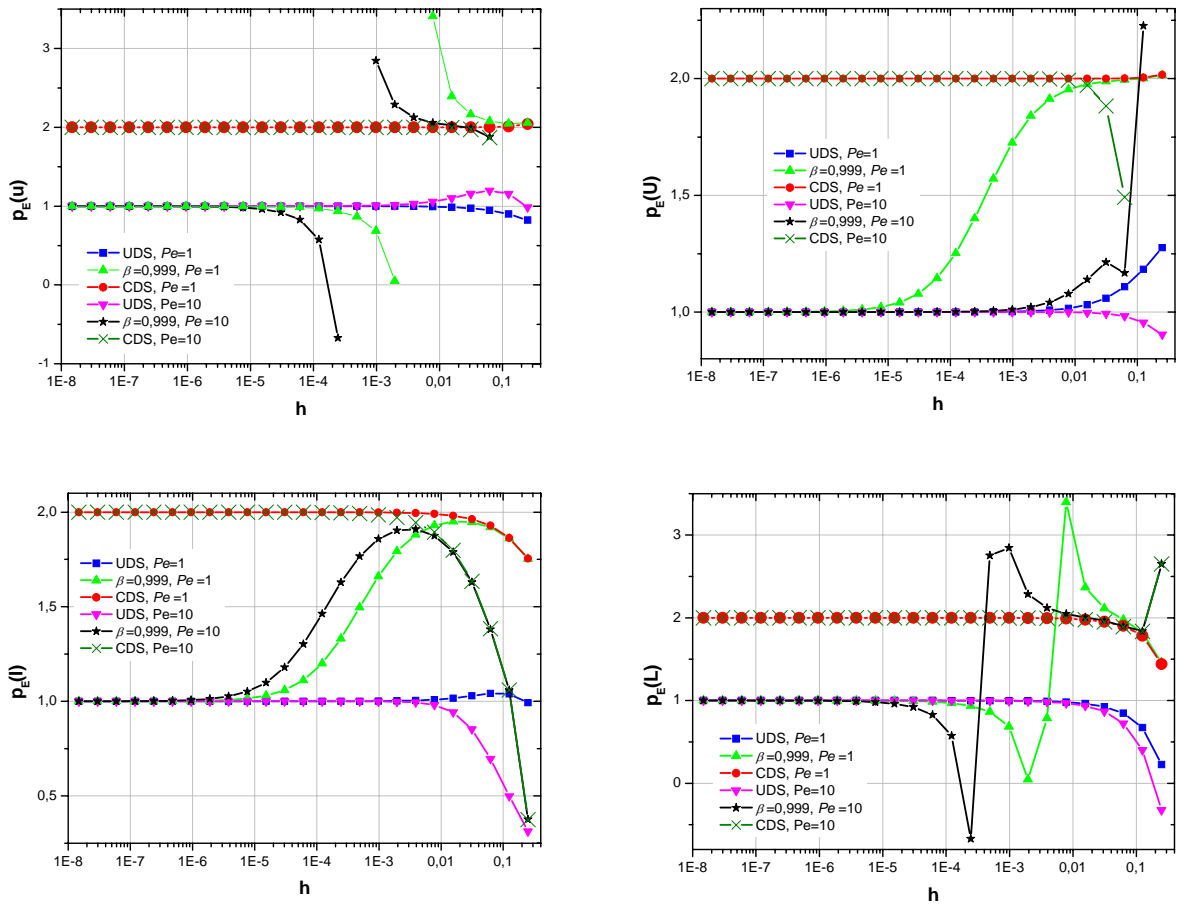


Figura 2. Equação de advecção-difusão: ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro.

### 3. EQUAÇÃO DE BURGERS

#### 3.1 Modelo matemático

A partir da equação de conservação da quantidade de movimento linear, considerando-se meio contínuo, fluido incompressível, propriedades constantes e escoamento laminar 1D permanente, obtém-se a equação de Burgers com um termo fonte, dada por

$$u Re \frac{du}{dx} = \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{e^x}{(e-1)^2} [Re(e^x - 1) - e + 1] \quad (16)$$

onde  $Re$  = número de Reynolds,  $x$  = direção coordenada,  $u$  = velocidade. As condições de contorno são do tipo Dirichlet, dadas pela Eq. (5).

As variáveis de interesse, isto é, as variáveis para as quais é obtida a solução numérica e verificado seu erro de discretização e sua ordem efetiva são:

- Velocidade ( $u$ ) em  $x = 1/2$ : obtida a partir da solução da Eq. (16). Sua solução analítica é dada pela Eq. (6) com  $Pe = 1$ .
- Velocidade média ( $U$ ): definida pela Eq. (7). Sua solução analítica é dada pela Eq. (8) com  $Pe = 1$ .

- (c) Inclinação ( $I$ ): definida pela Eq. (9). Sua solução analítica é dada pela Eq. (10) com  $Pe = 1$ .
- (d) A média da norma  $l_1$  do erro de discretização ( $L$ ), definida pela Eq. (11). Sua solução analítica tem o valor nulo.

### 3.2 Modelo numérico

O modelo numérico é o mesmo adotado para a equação de advecção-difusão. A única diferença é que  $u$  que multiplica o termo advectivo é incorporado aos coeficientes do sistema de equações, para linearizar a equação diferencial não-linear. Neste caso, a solução do sistema de equações é iterativa com o TDMA para todos os três esquemas usados no termo advectivo: UDS, CDS e  $\beta$ .

### 3.3 Estimativa da ordem assintótica ( $p_L$ )

Com base na série de Taylor, seguindo o procedimento de Tannehill *et al.* (1997), o erro de truncamento ( $\varepsilon$ ) da equação diferencial discretizada ( $EDD$ ), em cada nó  $i$  da malha, é

$$\varepsilon(EDD)_i = (1 - \beta)Re \left( \frac{d^2 u}{dx^2} \right)_i u_i \frac{h}{2} + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d^4 u}{dx^4} \right)_i - Re \left( \frac{d^3 u}{dx^3} \right)_i \right] \frac{h^2}{6} + \dots \quad (17)$$

Portanto, para  $u$ ,  $U$ ,  $I$  e  $L$  vale o mesmo resultado da Eq. (14).

### 3.4 Resultados numéricos

A solução numérica das quatro variáveis de interesse foi obtida com malhas de 2, 4, ... até 33.554.432 elementos, que correspondem a  $h = 1/2, 1/4, \dots$  até  $\approx 2,98 \times 10^{-8}$  m. Na solução da Eq. (16), foram empregados os esquemas UDS, CDS e  $\beta = 0,99$  para  $Re = 5$ . O tempo de CPU foi no máximo de 1 h 12 min, para o esquema  $\beta$  com 100 iterações, número suficiente para atingir o erro de arredondamento de máquina.

A Fig. 3 mostra o módulo do erro de discretização ( $E$ ) das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Considerando-se o módulo de  $E$ , pode-se perceber que para  $h$  relativamente grande,  $E(\text{CDS}) \approx E(\beta) < E(\text{UDS})$ . E para  $h \rightarrow 0$ ,  $E(\text{CDS}) < E(\beta) < E(\text{UDS})$ .

A Fig. 4 mostra a ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Pode-se notar nesta figura que:

- 1) Nas malhas mais grossas, como era esperado (Marchi, 2001), os valores da ordem efetiva ( $p_E$ ) podem ser significativamente diferentes da ordem assintótica ( $p_L$ ), podendo até serem indefinidos.
- 2) Para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L$  de acordo com o previsto pela Eq. (14) para os três esquemas (UDS, CDS e  $\beta$ ) e as quatro variáveis de interesse, mesmo para o esquema  $\beta$  com seu valor igual a 0,99.
- 3) Para a velocidade, no caso do esquema  $\beta$ ,  $p_E \approx p_L(\text{CDS})$  nas malhas mais grossas. Ao se reduzir  $h$ , há um intervalo em que  $p_E$  é indefinido. E finalmente, para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L(\text{UDS})$ .
- 4) Para a velocidade média e a inclinação, no caso do esquema  $\beta$ ,  $p_E \approx p_L(\text{CDS})$  nas malhas mais grossas. Ao se reduzir  $h$ , há um intervalo em que  $p_E$  varia monotonicamente até que para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L(\text{UDS})$ .



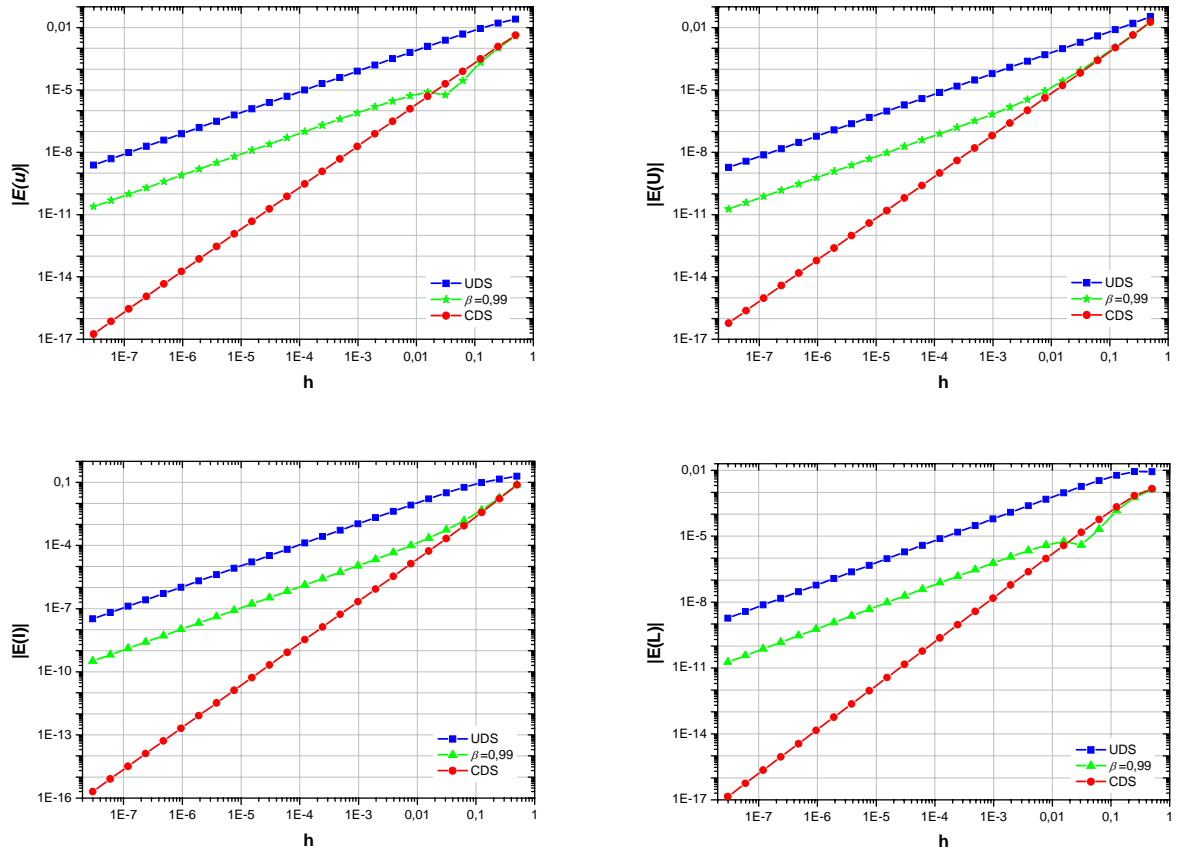


Figura 3. Equação de Burgers: módulo do erro ( $E$ ).

## 4. EQUAÇÃO DE FOURIER

### 4.1 Modelo matemático

A partir da equação de conservação da energia térmica, para um meio contínuo e sólido, sem geração de calor e dissipação viscosa, considerando-se propriedades constantes e condução de calor transiente, obtém-se a equação de Fourier:

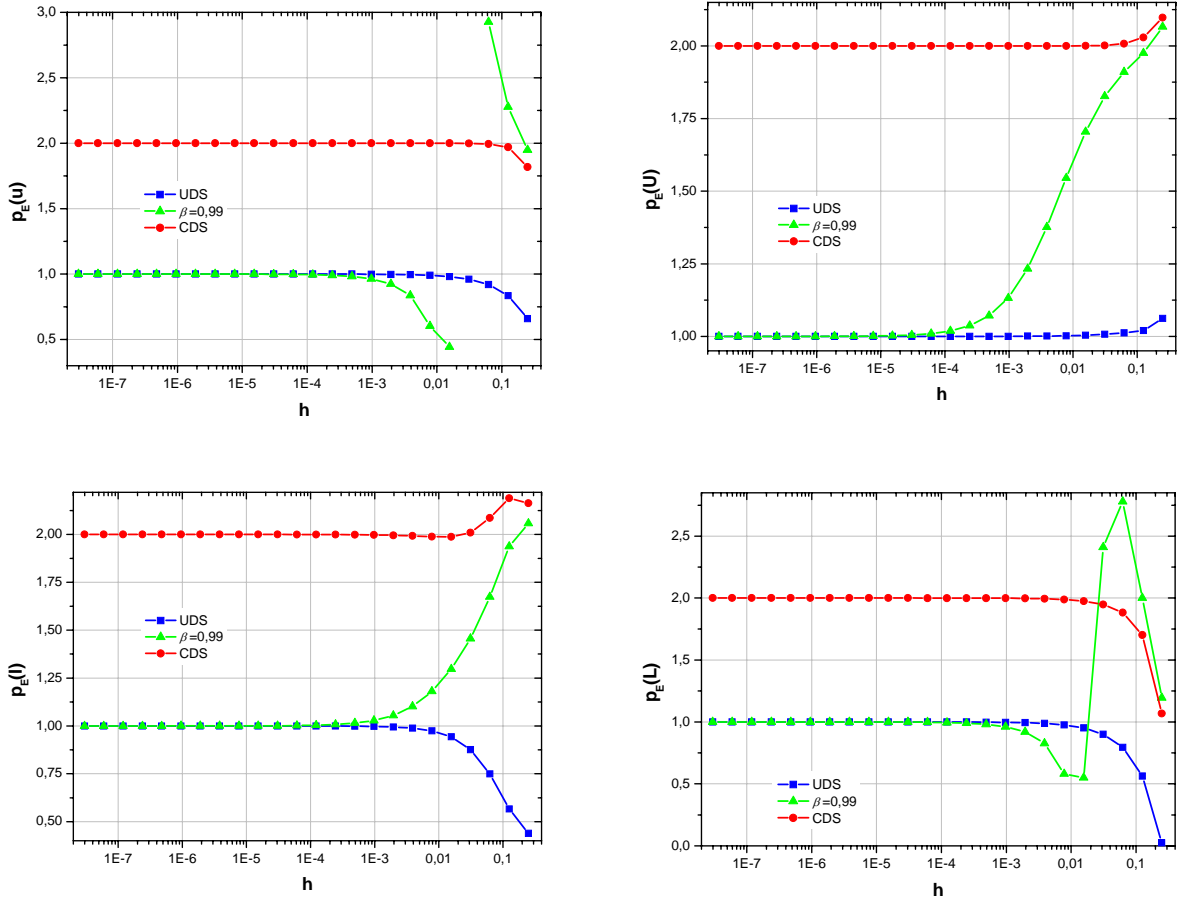
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S \quad (18)$$

onde  $S = 0$  ou

$$S(x, t) = (\pi^2 - 1)e^{-t} \text{sen}(\pi x) \quad (19)$$

e  $x$  = direção coordenada,  $u$  = temperatura,  $t$  = tempo. As condições de contorno são do tipo Dirichlet e fixas no tempo. Elas e a condição inicial são dadas respectivamente por

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad u(x, 0) = \text{sen}(\pi x) \quad (20)$$



**Figura 4. Equação de Burgers: ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro.**

As variáveis de interesse são:

- (a) Temperatura ( $u$ ) em  $x = \frac{1}{2}$  e tempo  $t = T$ : obtida a partir da solução da Eq. (18). Sua solução analítica é

$$u(x, t) = e^{-ct} \text{sen}(\pi x) \quad (21)$$

onde  $c = 1$  para  $S \neq 0$ , e  $c = \pi^2$  para  $S = 0$ .

- (b) Temperatura média ( $U$ ) no tempo  $t = T$ : definida pela Eq. (7). Sua solução analítica é

$$U(t) = \frac{2}{\pi} e^{-ct} \quad (22)$$

- (c) Inclinação ( $I$ ) no tempo  $t = T$ : definida pela Eq. (9). Sua solução analítica é

$$I(t) = -\pi e^{-ct} \quad (23)$$

- (d) A média da norma  $l_1$  do erro de discretização ( $L$ ) no tempo  $t = T$ , definida pela Eq. (11). Sua solução analítica tem o valor nulo.

## 4.2 Modelo numérico

O modelo numérico é o mesmo adotado para a equação de advecção-difusão exceto com relação ao termo advectivo, que não existe na Eq. (18). Além disso, para o termo transiente, adotou-se a chamada formulação  $\theta$  (Maliska, 2004); dois valores específicos são abordados neste trabalho: (a)  $\theta = 1$ , que representa a formulação totalmente implícita; e (b)  $\theta = 1/2$ , que representa a formulação Crank-Nicolson.

## 4.3 Estimativa da ordem assintótica ( $p_L$ )

Com base na série de Taylor, seguindo o procedimento de Tannehill *et al.* (1997), o erro de truncamento ( $\varepsilon$ ) da equação diferencial discretizada (EDD), em cada nó  $i,j$  da malha no espaço e no tempo, é

$$\varepsilon(EDD) = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial t} - (1-\theta) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right] k + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} h^2 + \dots \quad (24)$$

onde  $k$  é o avanço no tempo entre dois instantes de tempo consecutivos. Para esta equação, na qual existem duas dimensões ( $x,t$ ), qualquer que seja  $\theta$ , com o refino da malha só em  $x$ , a ordem assintótica é  $p_{L,x} = 2$ . Com o refino só em  $t$ , a ordem assintótica é  $p_{L,t} = 1$ . E com o refino simultâneo (Marchi e Silva, 2005) em  $x$  e  $t$ , com a mesma razão de refino em  $x$  e  $t$ , a ordem assintótica é  $p_L = 1$ .

Dois casos especiais merecem destaque. Primeiro, quando  $S = 0$  e  $\theta = 1/2$  (formulação Crank-Nicolson), com a Eq. (18) em (24), chega-se à conclusão que (Tannehill *et al.*, 1997)  $p_L = 2$ . Segundo, quando  $S \neq 0$  e  $\theta = 1/2$ , obtém-se  $p_L = 1$ . Isto é, quando existe um termo fonte não-nulo na equação de Fourier, a ordem de acurácia da formulação Crank-Nicolson degenera para a unidade. Em resumo, para  $u$ ,  $U$ ,  $I$  e  $L$ , tem-se

$$p_L = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq \theta \leq 1 \text{ e } S \neq 0 \text{ ou } \theta \neq 1/2 \text{ e } S = 0 \\ 2 & \text{se } \theta = 1/2 \text{ e } S = 0 \end{cases} \quad (25)$$

## 4.4 Resultados numéricos

A solução numérica das quatro variáveis de interesse foi obtida com malhas de  $2 \times 1$ ,  $4 \times 2$ , ... até  $131.072 \times 65.536$  elementos no espaço *versus* avanços no tempo, respectivamente, que correspondem a  $h = 1/2, 1/4, \dots$  até  $\approx 7,63 \times 10^{-6}$  m e  $k = 0,2, 0,1, \dots$  até  $\approx 3,051 \times 10^{-6}$  s. As soluções foram obtidas para o instante de tempo final  $T = 1/5$  s e para os seguintes casos: (a)  $S = 0$  e  $\theta = 1$ ; (b)  $S = 0$  e  $\theta = 1/2$ ; e (c)  $S \neq 0$  e  $\theta = 1/2$ . O tempo de CPU foi no máximo de 3 h 33 min, para  $S \neq 0$  e  $\theta = 1/2$ .

A Fig. 5 mostra o módulo do erro de discretização ( $E$ ) das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Considerando-se o módulo de  $E$ , pode-se perceber que em geral e para  $h \rightarrow 0$ ,  $E(S=0; \theta=1/2) < E(S \neq 0; \theta=1/2) < E(S=0; \theta=1)$ .

A Fig. 6 mostra a ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro verdadeiro das quatro variáveis em função da malha  $h$  usada. Pode-se notar nesta figura que:

- 1) Nas malhas mais grossas, como era esperado (Marchi, 2001), os valores da ordem efetiva ( $p_E$ ) podem ser significativamente diferentes da ordem assintótica ( $p_L$ ), apresentando valores negativos ou sendo até indefinidos.

2) Para  $h \rightarrow 0$ ,  $p_E \rightarrow p_L$  de acordo com o previsto pela Eq. (25) para os três casos e quatro variáveis de interesse.

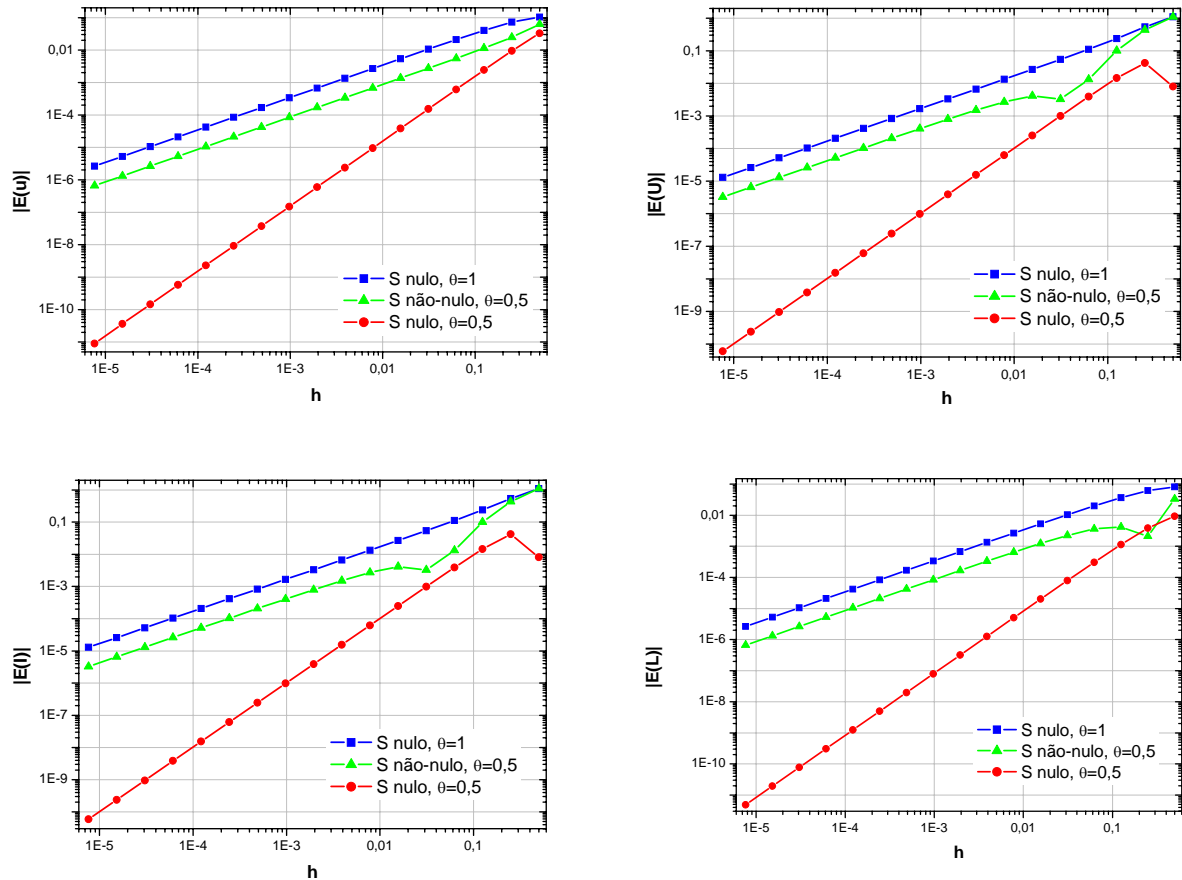


Figura 5. Equação de Fourier: módulo do erro ( $E$ ).

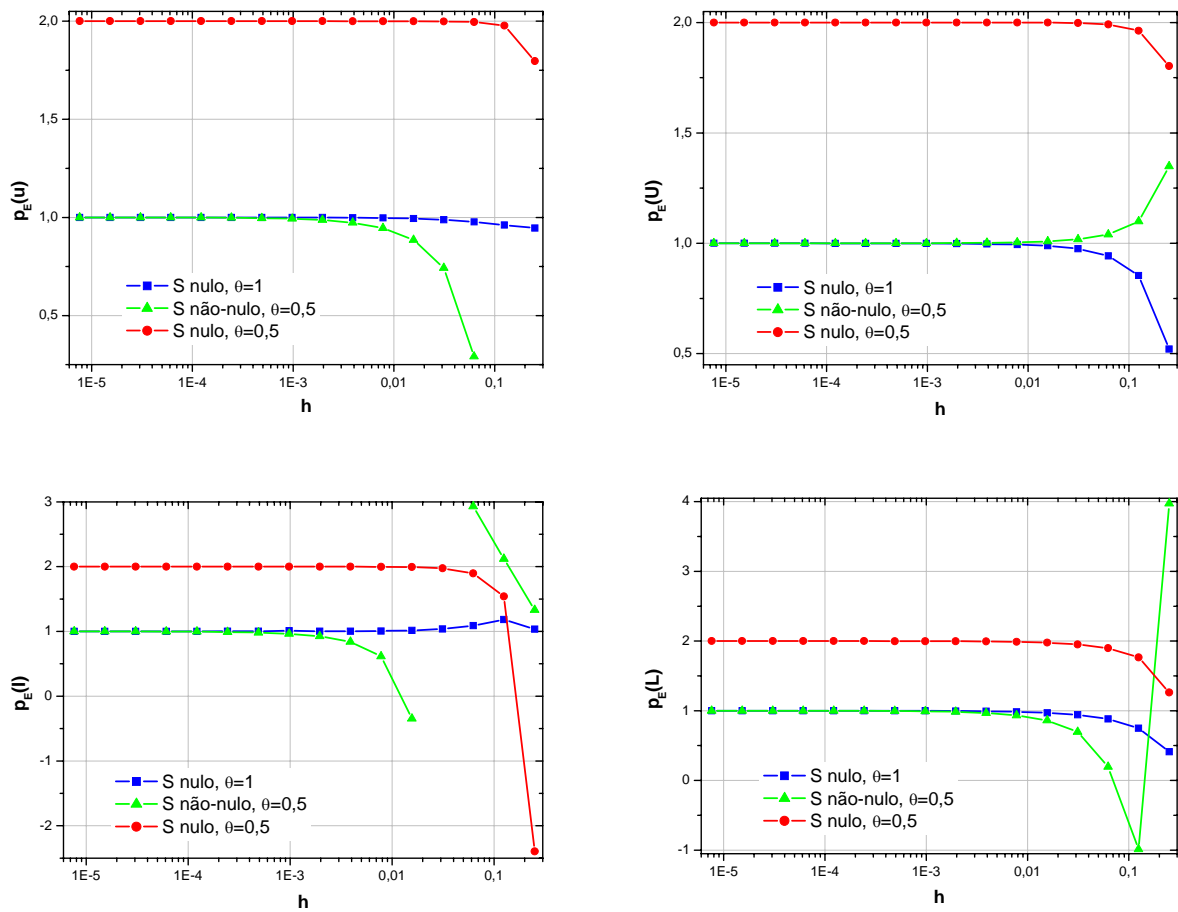
## 5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foram resolvidos três problemas unidimensionais através do método de diferenças finitas, com malhas uniformes, modelados pelas equações de advecção-difusão, Burgers e Fourier. Foram usadas aproximações numéricas de 1ª e 2ª ordem de acurácia, no espaço e no tempo, e mistura de ambas (esquemas híbridos). Para as quatro variáveis de interesse ( $u$ ,  $U$ ,  $I$  e  $L$ ) foi: (a) mostrado o valor verdadeiro do erro de discretização ( $E$ ), em função do tamanho ( $h$ ) dos elementos da malha; (b) deduzido *a priori* o valor teórico da ordem assintótica ( $p_L$ ) do erro de discretização; e (c) mostrado, através de experimentos numéricos (*a posteriori*), o valor da ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro de discretização em função de  $h$ .

Com a realização deste trabalho, verificou-se principalmente que:

- 1) Para  $h \rightarrow 0$ , em todos os casos,  $p_E \rightarrow p_L$  de acordo com as previsões apresentadas pelas Eqs. (14) e (25), e de forma monotônica para  $h$  suficientemente pequeno.
- 2) O  $p_L$  de um esquema híbrido é igual ao  $p_L$  do esquema puro de menor ordem.
- 3) Para esquemas híbridos, o valor do módulo do erro fica entre os dos esquemas puros, exceto em malhas muito grossas. A proximidade do valor do módulo do erro entre o esquema híbrido e o esquema de maior ordem depende do valor usado para o fator  $\beta$  ou  $\theta$ .

- 4) Quando existe um termo fonte não-nulo na equação de Fourier, a ordem de acurácia da formulação Crank-Nicolson degenera para a unidade.
- 5) O valor dos parâmetros  $Pe$ ,  $\beta$  e  $\theta$  pode afetar significativamente o valor do erro.



**Figura 6. Equação de Fourier: ordem efetiva ( $p_E$ ) do erro.**

### *Agradecimentos*

Os autores agradecem o apoio financeiro do Programa UNIESPAÇO da AEB (Agência Espacial Brasileira). O primeiro autor é bolsista do CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, do Brasil).

### **REFERÊNCIAS**

Celik, I., Zhang, W. M., 1995, "Calculation of numerical uncertainty using Richardson extrapolation: application to some simple turbulent flow calculations", ASME Journal of Fluids Engineering, v. 117, p. 439-445.

Ferziger, J. H., Peric, M., 1999, "Computational methods for fluid dynamics", Springer-Verlag.

- Khosla, P. K., Rubin, S. G., 1974, "A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme", *Computers & Fluids*, vol. 2, pp. 207-209.
- Kreyszig, E., 1999, "Advanced Engineering Mathematics", 8.ed., New York: Wiley.
- Maliska, C. R., 2004, "Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional", 2. ed., Rio de Janeiro: LTC.
- Marchi, C. H., 2001, "Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluidos", Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina. Tese de doutorado em Engenharia Mecânica.
- Marchi, C. H., Silva, A. F. C., 2002, "Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 42, pp. 167-188.
- Marchi, C. H., Silva, A. F. C., 2005, "Multi-dimensional discretization error estimation for convergent apparent order", *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. XXVII, p. 432-439.
- Roache, P. J., 1994, "Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies", *ASME Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, pp. 405-413.
- Roache, P. J., 1998, "Verification and validation in computational science and engineering", Hermosa.
- Roy, C.J., 2001, "Grid convergence error analysis for mixed-order numerical schemes", AIAA paper 2001-2606.
- Schneider, F. A., Marchi, C.H., 2004, "Sobre a definição da razão de refino de malhas unidimensionais não-uniformes", *Anais do XXV Congresso Ibero Lation-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia*, Recife. Paper CIL18-024.
- Shyy, W., Garbey, M., Appukuttan, A., Wu, J., 2002, "Evaluation of Richardson extrapolation in computational fluid dynamics", *Numerical Heat transfer, Part B*, vol. 41, pp. 139-164.
- Tannehill, J. C.; Anderson, D. A.; Pletcher, R. H., 1997, "Computational fluid mechanics and heat transfer. 2. ed. Washington: Taylor & Francis.
- Versteeg, H. K.; Malalasekera, W., 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method*. 2 ed. Pearson.